量子力学习题精选与剖析

（第三版）

钱伯初　曾谨言　著

科学出版社

北京

内 容 简 介

本书是作者在北京大学和兰州大学长期讲授量子力学课程基础上，精选内容新颖、难度较大的习题汇集而成. 习题大部分选自国内外研究生试题和资格考试题，全部题目都给出了详细的分析和解答，有些解法是作者首创的. 本次再版对第二版内容精选和重编，反映了近年来量子力学的最新进展. 全书分为十八章，共 360 题，内容包括 Schrödinger 方程、一维运动、δ 势场中粒子的运动、谐振子、力学量的算符表示及算符运算、中心力场、角动量、磁场中粒子的运动、Hellmann 定理、动量表象、能量表象与 Heisenberg 图象、定态微扰论、变分法、量子跃迁、弹性散射、对称性、准经典近似、二次量子化、相对论量子力学等方面.

本书可以作为量子力学课程的教学参考书，同时也可供物理学工作者参考.

图书在版编目(CIP)数据

量子力学习题精选与剖析(第三版)/钱伯初，曾谨言著. —3 版. 北京：科学出版社，2008

ISBN 978-7-03-021630-4

Ⅰ. 量… Ⅱ. ①钱… ②曾… Ⅲ. 量子力学-高等学校-解题
Ⅳ. O413. 1-44

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2008)第 050646 号

责任编辑：贾 杨 / 责任校对：桂伟利
责任印制：张克忠 / 封面设计：耕者设计工作室

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

*

1998 年 4 月第 一 版 开本：B5(720×1000)
2008 年 6 月第 三 版 印张：35 1/4
2008 年 6 月第一次印刷 字数：680 000

印数：1—4 000

定价：50.00 元

(如有印装质量问题，我社负责调换〈长虹〉)

第三版序言

本书自 1988 年出版以来，受到广大师生的热诚欢迎. 不少读者来信反映，本书有助于初学者确切掌握量子力学的基本概念和原理，有助于初学者运用量子力学理论去分析处理具体问题，并掌握各种计算方法. 对于学习后继课程和进行科研工作，本书都很有用. 物理类专业及有关专业的许多有志深造的学生（包括考研者，研究生，出国留学人员）几乎人手一册. 本书及其在台湾省出版的繁体字版本，20 年来在台、港、澳以及海外华裔读者中广泛流传，影响很广. 很多出国留学生反映，研读本书，能加深对于量子力学的领悟，顺利通过研究生资格考试，并与以后的研究工作顺利接轨.

本书第一版问世 10 年后，发行了增订第二版，分上、下册出版. 至今又过去了 10 年. 本书问世以来的 20 年中，量子力学的一些前沿领域的研究取得了令人瞩目的进展. 国内各高校的量子力学教学情况也有许多变化. 为了适应新局面，我们对全书再次做了修改增删，以新版与读者见面. 为了方便阅读与使用，第三版不再分上、下册，但分章较细，全书共分为十八章. 题目总数略有减少，但有助于考研的题目增加了不少. 全书共 360 题.

本书许多题目的巧妙剖析与解法，均为作者首创. 有关的概念、思路、计算技巧等等，在作者编著的教科书中，叙述得更加全面、详细. 读者阅读本书时，如能适当参考这些教材，既能加深理解基本原理，也能更好地掌握解题方法. 有关的教材是：

钱伯初，《量子力学》，高等教育出版社（2006 年）；

曾谨言，《量子力学教程》，科学出版社（第二版，2008 年）；

曾谨言，《量子力学》卷Ⅰ、Ⅱ，科学出版社（第四版，2007 年）.

希望本书新版的问世，能为提高国内外量子力学的教学水平，继续作出贡献. 我们二人虽然都已经是古稀之年，仍将同全国广大师生一起，在科学道路上继续探索前进.

作　者

2008 年 4 月

第一版序言

物理学的各门基础理论课，如果脱离了在具体问题中的应用，初学者就很难深入理解和掌握其基本概念和原理的实质. 对于量子力学，尤其是这样. 凡是有一些教学和科研实践经验的人，对此都会有同感. 做习题就是一种初步地运用基本概念和原理来处理一些简单的或理想化了的问题的训练. 在教学中我们发现，有相当一部分学生，他们可以将教科书中讲述的原理原封不动地复述出来，但是不会做题，更不会应用基本原理去处理具体问题. 更有甚者，不少人在学过《高等量子力学》课程之后，仍对某些很简单的量子力学问题束手无策. 这种“知识多，能力差”的通病应该引起我们深思. 我们认为，通过基础课的教学，不仅要向学生传授知识，更重要的是培养思考和解决问题的能力.

从近年来国外许多大学的量子力学新教材、习题、试题以及研究生资格考试题来看，其特点是难度高，灵活性大，反映量子力学在各前沿研究领域中应用的内容较多. 特别是，国外许多大学的研究生资格考试题有相当大一部分是从科研前沿课题中直接提取出来的. 国内的学生碰到这些问题时，往往感到无从下手. 近年来，由于教学的需要，我们接触了大量的这类题. 为了满足国内广大师生的要求，我们精选了 370 道有代表性的习题，作了较深入和新颖的剖析，整理成本书. 书中习题的解答，绝大多数都是我们自己给出的，即原始的(original)而不是转抄的. 解法力求简明，直截了当. 有些题，给出了多种解法，以便读者对照比较，有利于深入了解各种解法之间的内在联系. 我们希望读者能够以研究的态度阅读本书，这样才能较好地领会并掌握各种方法的精神实质，做到举一反三. 我们相信，凡是认真钻研了这本书的读者，对于量子力学基本概念和原理的理解程度，以及应用量子力学处理具体问题的能力，一定会有较大的提高.

希望本书的出版，对于进一步提高我国的量子力学教学水平有所裨益. 不妥当和不正确之处，在所难免，诚恳希望广大读者提出批评指正.

作　者

1988 年

目　　录

第三版序言

第一版序言

第一章　Schrödinger 方程　一维运动 …… 1

第二章　δ 势场中粒子的运动 …… 29

第三章　谐振子 …… 46

第四章　力学量的算符表示及算符运算 …… 76

第五章　中心力场 …… 100

第六章　角动量 …… 133

第七章　磁场中粒子的运动 …… 231

第八章　Hellmann 定理 …… 243

第九章　动量表象 …… 259

第十章　能量表象与 Heisenberg 图象 …… 272

第十一章　定态微扰论 …… 289

第十二章　变分法 …… 346

第十三章　量子跃迁 …… 378

第十四章　弹性散射 …… 402

第十五章　对称性 …… 437

第十六章　准经典近似 …… 486

第十七章　二次量子化 …… 499

第十八章　相对论量子力学 …… 521

第一章　Schrödinger 方程　一维运动

1.1　设 $\psi_1(\boldsymbol{r},t)$ 和 $\psi_2(\boldsymbol{r},t)$ 是 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V(\boldsymbol{r})\psi$$

的两个解，证明 $\int\psi_1^*\,\psi_2\,\mathrm{d}^3x$ 与时间无关.

证　ψ_1 和 ψ_2 分别满足 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_1=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_1+V\psi_1 \tag{1}$$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_2=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_2+V\psi_2 \tag{2}$$

以 ψ_1^* 左乘式(2)，ψ_2 左乘式(1)之共轭方程，再相减，即得

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

$$=\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\cdot(\psi_2\,\nabla\psi_1^*-\psi_1^*\,\nabla\psi_2)$$

再对全空间积分，得到

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int\psi_1^*\,\psi_2\,\mathrm{d}^3x=\frac{\hbar^2}{2m}\int\nabla\cdot(\psi_2\,\nabla\psi_1^*-\psi_1^*\,\nabla\psi_2)\,\mathrm{d}^3x$$

$$=\frac{\hbar^2}{2m}\oint(\psi_2\,\nabla\psi_1^*-\psi_1^*\,\nabla\psi_2)\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{s} \tag{3}$$

其中 $\mathrm{d}\boldsymbol{s}$ 为面元，按照波函数在无穷远处迅速趋于零的条件，式(3)右端之面积分为零，故得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int\psi_1^*\,\psi_2\,\mathrm{d}^3x=0$$

亦即 $\int\psi_1^*\,\psi_2\,\mathrm{d}^3x$ 与时间无关.

1.2　粒子在一维势场 $V(x)$ 中运动，试证明：属于不同能级的束缚态波函数互相正交.

证　设 ψ_1、ψ_2 分别为属于能级 E_1、E_2 的束缚态波函数. 由于是一维束缚态，

ψ_1、ψ_2 都可以取为实函数,故只需证明

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1(x)\psi_2(x)\mathrm{d}x=0$$

ψ_1 和 ψ_2 均应满足定态 Schrödinger 方程,即

$$\psi_1''=\frac{2m}{\hbar^2}[V(x)-E_1]\psi_1 \tag{1}$$

$$\psi_2''=\frac{2m}{\hbar^2}[V(x)-E_2]\psi_2 \tag{2}$$

以 ψ_2 左乘式(1),ψ_1 左乘式(2),再相减,即得

$$\frac{2m}{\hbar^2}(E_2-E_1)\psi_1\psi_2=\psi_2\psi_1''-\psi_1\psi_2''=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(\psi_2\psi_1'-\psi_1\psi_2')$$

对全空间积分,得到(束缚态波函数在无穷远处必须趋于 0)

$$\frac{2m}{\hbar^2}(E_2-E_1)\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1\psi_2\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(\psi_2\psi_1'-\psi_1\psi_2')\mathrm{d}x$$

$$=(\psi_2\psi_1'-\psi_1\psi_2')\Big|_{-\infty}^{+\infty}=0$$

因此,当 $E_2\neq E_1$,就有

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1\psi_2\mathrm{d}x=0 \tag{3}$$

亦即 ψ_1 与 ψ_2 正交.

1.3 证明从单粒子 Schrödinger 方程得出的粒子速度场是非旋的,即求证

$$\nabla\times\boldsymbol{v}=0$$

其中,$\boldsymbol{v}=\boldsymbol{j}/\rho$,$\rho$ 为概率密度,$\boldsymbol{j}$ 为概率流密度.

证 概率密度和概率流密度的表达式为

$$\rho=\psi^*\psi$$

$$\boldsymbol{j}=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)$$

因此速度场为

$$\boldsymbol{v}=\frac{\boldsymbol{j}}{\rho}=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(\frac{\nabla\psi}{\psi}-\frac{\nabla\psi^*}{\psi^*}\right)=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}(\nabla\ln\psi-\nabla\ln\psi^*)=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\nabla\left(\ln\frac{\psi}{\psi^*}\right)$$

其旋度为

$$\nabla\times\boldsymbol{v}=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\nabla\times\nabla\left(\ln\frac{\psi}{\psi^*}\right)=0$$

1.4　粒子在深度为 V_0，宽度为 a 的方势阱（如图 1.4）中运动，求

（a）阱口刚好出现一个束缚态能级（即 $E\approx V_0$）的条件；

（b）束缚态能级总数. 并和无限深势阱作比较.

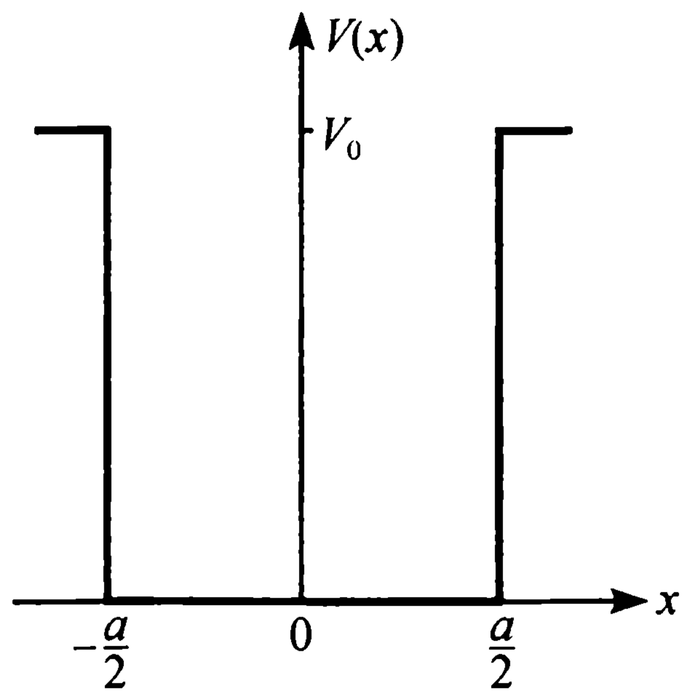


图 1.4

解　粒子能量 E 小于 V_0 时为束缚态，E 大于 V_0 时为游离态. 能量本征方程为

$$\psi''+\frac{2m}{\hbar^2}[E-V(x)]\psi=0 \qquad (1)$$

令

$$\sqrt{2mV_0}/\hbar=k_0,\quad \sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar=\beta \qquad (2)$$

式(1)可以写成

$$\begin{cases}\psi''+\dfrac{2mE}{\hbar^2}\psi=0, & |x|\leqslant a/2 \quad (\text{阱内}) \qquad (3)\\ \psi''-\beta^2\psi=0, & |x|\geqslant a/2 \quad (\text{阱外}) \qquad (4)\end{cases}$$

无限远处束缚态波函数应趋于 0，因此式(4)的解应取为

$$\psi(x)=Ce^{-\beta|x|},\quad |x|\geqslant a/2 \qquad (5)$$

当阱口刚好出现束缚态能级时，$E\approx V_0$，$\beta\approx 0$，因此

$$\psi'(x)=\pm\beta Ce^{-\beta|x|}\approx 0,\quad |x|\geqslant a/2 \qquad (6)$$

阱内波函数可由式(3)解出，当 $E\approx V_0$，解为

$$\begin{aligned}&\text{偶宇称}\quad \psi(x)=\cos k_0x,\\ &\text{奇宇称}\quad \psi(x)=\sin k_0x,\end{aligned}\quad |x|\leqslant a/2 \qquad (7)$$

阱内、外 ψ 和 ψ' 应该连续，而由式(6)可知，$x=a/2$ 处，$\psi'=0$，将这条件用于式(7)，即得

$$\begin{aligned}&\text{偶宇称}\quad \sin\frac{k_0a}{2}=0,\quad k_0a=2\pi,4\pi,6\pi,\cdots\\ &\text{奇宇称}\quad \cos\frac{k_0a}{2}=0,\quad k_0a=\pi,3\pi,5\pi,\cdots\end{aligned} \qquad (8)$$

亦即阱口刚好出现束缚能级的条件为

$$k_0a=n\pi,\quad n=1,2,3,\cdots \qquad (9)$$

即

$$\boxed{2mV_0a^2/\hbar^2=n^2\pi^2} \qquad (10)$$

这种类型的一维势阱至少有一个束缚能级. 因此,如 $2mV_0a^2/\hbar^2<\pi^2$,只存在一个束缚态,偶宇称(基态). 如 $2mV_0a^2/\hbar^2=\pi^2$,除基态外,阱口将再出现一个能级(奇宇称态),共二个能级. 如 $2mV_0a^2/\hbar^2=(2\pi)^2$,阱口将出现第三个能级(偶宇称). 依此类推. 由此可知,对于任何 V_0a^2 值,束缚态能级总数为

$$N=1+\left[\frac{a}{\hbar\pi}\sqrt{2mV_0}\right] \tag{11}$$

其中符号[A]表示不超过 A 的最大整数.

当粒子在宽度为 a 的无限深方势阱中运动时,能级为

$$E_n=\frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2,\quad n=1,2,3,\cdots$$

则 $E\leqslant V_0$ 的能级数为

$$n=\left[\frac{a}{\pi\hbar}\sqrt{2mV_0}\right]=N-1 \tag{12}$$

也就是说,如果只计算 $E\leqslant V_0$ 的能级数,则有限深(V_0)势阱的能级数比无限深势阱的能级数多一个. 注意,后者的每一个能级均一一对应地高于前者的相应能级(参看题 8.5).

1.5 对于方势阱(深 V_0,宽 a)的第 n 个束缚态 ψ_n、E_n,在 $V_0\gg E_n$ 条件下,计算

(a) 粒子在阱外出现的概率;

(b) $V(x)$和 $V^2(x)$的平均值,并和 E_n 比较.

解 以偶宇称态为例. 能量本征方程[见题 1.4,式(3)、(4)]可以写成

$$\begin{cases}\psi''+k^2\psi=0, & |x|\leqslant a/2 \quad (\text{阱内})\\ \psi''-\beta^2\psi=0, & |x|\geqslant a/2 \quad (\text{阱外})\end{cases} \tag{1}$$

其中

$$k=\sqrt{2mE}/\hbar,\quad \beta=\sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar \tag{2}$$

注意在 $V_0\gg E$ 条件下,$\beta\gg k$.

式(1)的偶宇称解为

$$\begin{aligned}\psi&=\cos kx, & |x|&\leqslant a/2\\ \psi&=Ce^{-\beta|x|}, & |x|&\geqslant a/2\end{aligned} \tag{3}$$

$x=a/2$ 处 ψ 应连续,由此得出

$$C=e^{\beta a/2}\cos\frac{ka}{2} \tag{4}$$

$x=a/2$ 处 ψ' 也应连续，由此得出

$$C=\frac{k}{\beta}e^{\beta a/2}\sin\frac{ka}{2}$$

和式(4)相除，即得能级公式

$$\tan\frac{ka}{2}=\frac{\beta}{k} \tag{5}$$

在 $\beta\gg k$ 条件下，式(5)的解为

$$ka\approx n\pi,\quad n=1,3,5,\cdots \tag{6}$$

代入式(2)，即得能级为

$$E_n=\frac{\hbar^2k^2}{2m}\approx\frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2 \tag{7}$$

这正是无限深势阱的能级公式.

现在计算粒子在阱内、外出现的概率. 由式(3)、(4)容易求出

$$\int_{\text{阱外}}|\psi|^2\mathrm{d}x=2C^2\int_{a/2}^{\infty}e^{-2\beta x}\mathrm{d}x=\frac{C^2}{\beta}e^{-\beta a}=\frac{1}{\beta}\cos^2\frac{ka}{2} \tag{8}$$

$$\int_{\text{阱内}}|\psi|^2\mathrm{d}x=2\int_0^{a/2}\cos^2kx\,\mathrm{d}x=\frac{a}{2}\left(1+\frac{\sin ka}{ka}\right) \tag{9}$$

考虑到 $ka\approx n\pi(n=1,3,5,\cdots)$，$\sin ka$ 和 $\cos(ka/2)$ 均接近于零，可知粒子出现在阱外概率远小于阱内概率. 而且

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi|^2\mathrm{d}x\approx\int_{\text{阱内}}|\psi|^2\mathrm{d}x\approx\frac{a}{2}$$

$$\text{阱外概率}=\frac{\int_{\text{阱外}}|\psi|^2\mathrm{d}x}{\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi|^2\mathrm{d}x}\approx\frac{2}{\beta a}\cos^2\frac{ka}{2} \tag{10}$$

利用能级公式(5)，易得

$$1+\tan^2\frac{ka}{2}=\frac{k^2+\beta^2}{k^2}=\frac{V_0}{E}$$

$$\boxed{\cos^2\frac{ka}{2}=\frac{E}{V_0}} \tag{11}$$

代入式(10)，即得

$$\text{阱外概率}=\frac{2E}{a\beta V_0}\approx\frac{2\hbar}{a\sqrt{2mV_0}}\frac{E}{V_0} \tag{12}$$

考虑到 $V_0\gg E$ 和能级公式(7)，易见

$$\sqrt{2mV_0} \gg n\pi\hbar/a \tag{13}$$

因此,

$$\text{阱外概率} \ll \frac{2E}{n\pi V_0} \tag{14}$$

最后计算 $V(x)$和 $V^2(x)$平均值. 利用式(12),

$$\overline{V(x)} = (\text{阱外概率})V_0 \approx \frac{2\hbar E}{a\sqrt{2mV_0}} \tag{15}$$

$$\overline{V^2} = (\text{阱外概率})V_0^2 \approx \frac{\hbar E}{ma}\sqrt{2mV_0} \tag{16}$$

再利用式(13),即可和 E_n(即 E)作出比较,

$$\boxed{\overline{V(x)} \ll \frac{2E_n}{n\pi}, \quad \overline{V^2} \gg \frac{n\pi\hbar^2 E}{ma^2} \approx \frac{2}{n\pi}E_n^2} \tag{17}$$

1.6 粒子在无限深方势阱(宽度为 a)中运动,处于第 n 个束缚态 ψ_n,求粒子对于每一侧阱壁的平均作用力.

解 无限深方势阱可以视为有限深(深度为 V_0)势阱当 $V_0 \to \infty$的极限情形,即

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| < a/2 \\ V_0, & |x| \geqslant a/2 \quad (V_0 \to \infty) \end{cases} \tag{1}$$

粒子所受作用力为 $-\mathrm{d}V/\mathrm{d}x$,粒子对阱壁的作用力为

$$F(x) = \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x} = V_0\delta\left(x - \frac{a}{2}\right) - V_0\delta\left(x + \frac{a}{2}\right) \tag{2}$$

其中第一项作用于阱壁右侧($x = a/2$),第二项作用于阱壁左侧($x = -a/2$). 第一项的平均值为

$$\langle F_{右} \rangle = \frac{\int |\psi|^2 V_0\delta\left(x - \frac{a}{2}\right)\mathrm{d}x}{\int |\psi|^2 \mathrm{d}x} = \frac{V_0\left|\psi\left(\frac{a}{2}\right)\right|^2}{\int |\psi|^2 \mathrm{d}x} \tag{3}$$

其中积分均为全空间积分. 利用题 1.5 的计算结果,容易算出

$$\langle F_{右} \rangle \approx \frac{2V_0}{a}\cos^2\frac{ka}{2} = \frac{2E_n}{a} \tag{4}$$

V_0/E 越大,式(4)越准确.

由对称性,显然有

$$\langle F_{左}\rangle = -\langle F_{右}\rangle \tag{5}$$

式(4)可作如下解释：设固定阱壁左侧而令右侧徐缓向外移动距离 Δa，则粒子对外做功 $\langle F_{右}\rangle \Delta a$，结果导致能级降低，根据能量守恒定律，应有

$$\langle F_{右}\rangle = -\frac{\partial E_n}{\partial a} = -\frac{\partial}{\partial a}\left(\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\right) = \frac{2}{a}E_n$$

此即式(4).

1.7　粒子在图示之势场

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & |x| \leqslant a \\ 0, & a < |x| < L \\ \infty & |x| \geqslant L \end{cases}$$

中运动，求能级公式，并讨论如下极限情况：

$$a \to 0, \quad V_0 \to \infty, \quad 2aV_0 \to U_0(\text{有限值})$$

解　由于 $V(x) \geqslant 0$，所以 $E > 0$. 由于 $V(-x) = V(x)$，所以能量本征态有确定宇称. 在 $V(x) \to \infty$ 处，波函数应该趋于 0，所以边界条件为

$$\psi(x) = 0, \quad |x| \geqslant L \tag{1}$$

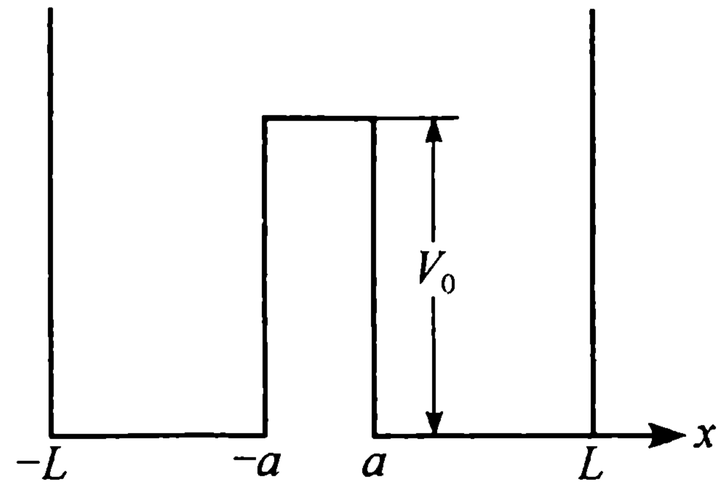


图 1.7

(a) 偶宇称态

1°　$E < V_0$，令

$$k = \sqrt{2mE}/\hbar$$
$$\xi = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar \tag{2}$$

能量本征方程可以写成

$$\psi'' - \xi^2\psi = 0, \quad |x| < a$$
$$\psi'' + k^2\psi = 0, \quad a < |x| < L \tag{3}$$

满足边界条件(1)的解为

$$\psi = \mathrm{ch}\xi x = \frac{1}{2}(\mathrm{e}^{\xi x} + \mathrm{e}^{-\xi x}), \quad |x| < a$$
$$\psi = A\sin k(L - x). \qquad a < x < L \tag{4}$$

($-L < x < -a$ 区间的 ψ，可以按偶函数条件写出，从略.)由 $x = a$ 处 ψ'/ψ 的连续条件，即可得出能级方程

$$k\cot k(L - a) = -\xi\mathrm{th}\xi a \tag{5}$$

其中

$$\mathrm{th}x=\frac{\mathrm{e}^{x}-\mathrm{e}^{-x}}{\mathrm{e}^{x}+\mathrm{e}^{-x}}$$

2° $E>V_0$,令

$$\eta=\sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar \tag{6}$$

能量本征方程可以写为

$$\begin{aligned}&\psi''+\eta^2\psi=0, \quad |x|<a\\&\psi''+k^2\psi=0, \quad a<|x|<L\end{aligned} \tag{7}$$

满足边界条件(1)的解为

$$\begin{aligned}&\psi=\cos\eta x, \qquad |x|<a\\&\psi=B\sin k(L-x). \quad a<x<L\end{aligned} \tag{8}$$

($-L<x<-a$ 区间的 ψ,按偶函数条件写出,从略.)由 $x=a$ 处 ψ'/ψ 的连续条件,即可得出能级方程

$$k\cot k(L-a)=\eta\tan\eta a \tag{9}$$

(b) 奇宇称态

1° $E<V_0$,定态方程仍为式(3),满足边界条件式(1)的解为

$$\begin{aligned}&\psi=\mathrm{sh}\xi x=\frac{1}{2}(\mathrm{e}^{\xi x}-\mathrm{e}^{-\xi x}), \quad |x|<a\\&\psi=C\sin k(L-x), \qquad a<x<L\end{aligned} \tag{10}$$

($-L<x<-a$ 区间的 ψ,按奇函数条件写出,从略.)能级方程为

$$k\cot k(L-a)=-\xi\coth\xi a \tag{11}$$

其中

$$\coth x=1/\mathrm{th}x=(\mathrm{e}^{x}+\mathrm{e}^{-x})/(\mathrm{e}^{x}-\mathrm{e}^{-x})$$

2° $E>V_0$,定态方程仍为式(7),满足边界条件(1)的解为

$$\begin{aligned}&\psi=\sin\eta x, \qquad |x|<a\\&\psi=D\sin k(L-x), \quad a<x<L\end{aligned} \tag{12}$$

($-L<x<-a$ 区间的 ψ,按奇函数条件写出,从略.)能级方程为

$$k\cot k(L-a)=-\eta\cot\eta a \tag{13}$$

讨论 如 $a\to 0, V_0\to\infty$,但 $2aV_0\to U_0$,则

$$\int_{-a}^{a}V(x)\mathrm{d}x=2aV_0=U_0$$

相当于在 $x=0$ 处存在一个 δ 势垒

$$V(x)=U_0\delta(x),\quad |x|<L \tag{14}$$

只需考虑 $E<V_0$ 的情形.

(a) 偶宇称态

这时,可取下列近似:

$$\xi^2 a\approx 2mV_0 a/\hbar^2 = mU_0/\hbar^2$$

$$\xi a\ll 1,\quad \mathrm{th}\xi a\approx \xi a,\quad \xi\mathrm{th}\xi a\approx mU_0/\hbar^2$$

式(5)变成

$$k\cot kL = -mU_0/\hbar^2 \tag{5'}$$

这和后面题 2.7 所得的结果一致.

(b) 奇宇称态

取上述近似后,式(11)变成

$$\tan kL = -ka\to 0 \tag{11'}$$

解为

$$k=\frac{n\pi}{L},\quad E=\frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{L}\right)^2,\quad n=1,2,3,\cdots$$

这结果等价于平底无限深势阱,因为奇宇称态 $\psi(0)=0$,中央的 δ 势垒不起作用(参看题 2.4).

1.8　上题中,设

$$\frac{a}{L}\ll 1,\quad \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}\gg 1$$

(a) 计算最低的两个能级之差,并画出相应的本征态波形;(b) 以这两个能量本征函数构成一个初始波包 $\psi(x,0)$,使粒子刚好出现在势阱的左半边($x<0$),讨论这个波包的运动,特别要求出粒子穿透到势阱的右半边所需时间.

解　上题中,如保持 a 有限,而令 $V_0\to\infty$,则中央的势垒变成完全不透明的,整个势阱被分隔成两个不相通的无限深势阱. 这时能级为

$$E_n\to\frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{L-a}\right)^2,\quad n=1,2,3,\cdots \tag{1}$$

V_0 有限时,能级应比式(1)稍低. 题设条件相当于

$$V_0a^2\gg E_1L^2/\pi^2 \tag{2}$$

最低的一些能级仍可以式(1)作为粗略近似,偶宇称态和奇宇称态的最低能级均为

$$E_1\sim\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2} \tag{3}$$

式(2)成立时,1.7 题中

$$\xi^2 a^2 \approx 2mV_0 a^2/\hbar^2 \gg 1 \tag{4}$$

$$\begin{aligned} \text{th}\xi a &\approx 1-2\text{e}^{-2\xi a} \\ \text{coth}\xi a &\approx 1+2\text{e}^{-2\xi a} \end{aligned} \tag{5}$$

如以 E_1、E_2 分别表示偶宇称态和奇宇称态的最低能级,相应的 k 记为 k_1、k_2,则能级方程[见 1.7 题式(5),(11)]可以写成

$$\tan k_1(L-a) = -\frac{k_1}{\xi}\text{coth}\xi a \approx -\frac{k_1}{\xi}(1+2\text{e}^{-2\xi a}) \tag{6}$$

$$\tan k_2(L-a) = -\frac{k_2}{\xi}\text{th}\xi a \approx -\frac{k_2}{\xi}(1-2\text{e}^{-2\xi a}) \tag{7}$$

由于 k_1、$k_2 \ll \xi$,式(6)和式(7)右端为小量,由公式

$$\tan(\pi-\theta) = -\tan\theta \approx -\theta, \quad |\theta| \ll 1$$

可知式(6)、(7)之解为

$$k_1(L-a) \approx \pi - \frac{k_1}{\xi}(1+2\text{e}^{-2\xi a}) \tag{8}$$

$$k_2(L-a) \approx \pi - \frac{k_2}{\xi}(1-2\text{e}^{-2\xi a}) \tag{9}$$

即

$$k_1 \approx \frac{\pi}{L-a+\dfrac{1}{\xi}+\dfrac{2}{\xi}\text{e}^{-2\xi a}} \approx \frac{\pi}{L-a+\dfrac{1}{\xi}}\left(1-\frac{2}{\xi L}\text{e}^{-2\xi a}\right) \tag{8'}$$

$$k_2 \approx \frac{\pi}{L-a+\dfrac{1}{\xi}-\dfrac{2}{\xi}\text{e}^{-2\xi a}} \approx \frac{\pi}{L-a+\dfrac{1}{\xi}}\left(1+\frac{2}{\xi L}\text{e}^{-2\xi a}\right) \tag{9'}$$

两式相加、减,即得

$$\begin{aligned} k_2+k_1 &\approx \frac{2\pi}{L-a+\dfrac{1}{\xi}} \\ k_2-k_1 &\approx \frac{4\pi}{\xi L\left(L-a-\dfrac{1}{\xi}\right)}\text{e}^{-2\xi a} \end{aligned} \tag{10}$$

能级差为

$$E_2-E_1 = \frac{\hbar^2}{2m}(k_2^2-k_1^2) \approx \frac{4\pi^2\hbar^2}{m\xi L^3}\text{e}^{-2\xi a} \tag{11}$$

如略去这个差别,取粗略近似,则得

$$k_1 \sim k_2 \sim \frac{\pi}{L-a+\frac{1}{\xi}} \sim \frac{\pi}{L}$$

$$E_1 \sim E_2 \sim \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} \sim \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

这就是式(3). 相应的本征函数如图 1.8 所示.

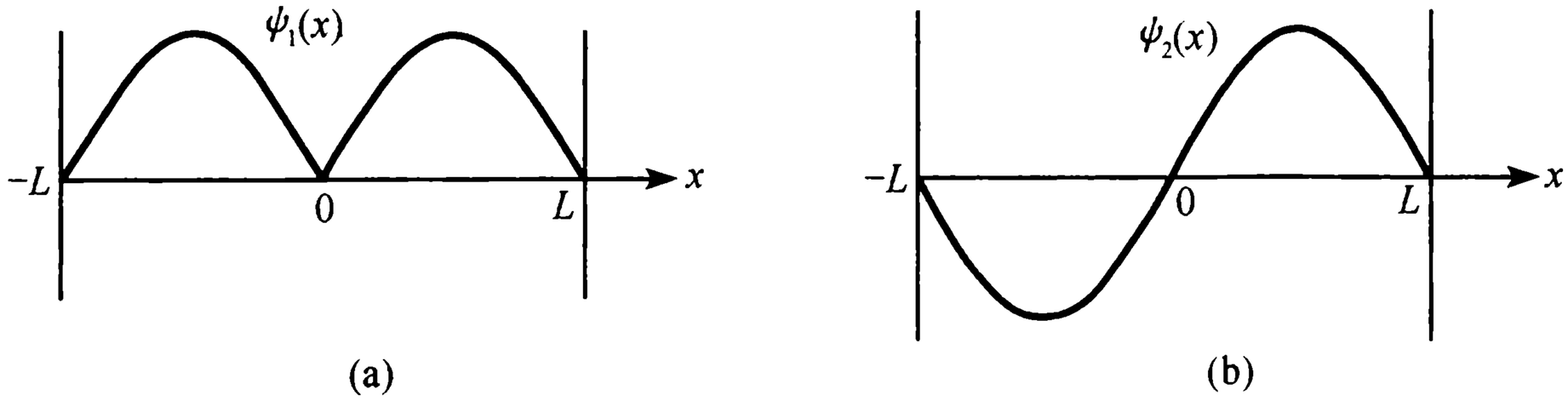


图 1.8　(a) 偶宇称态;(b) 奇宇称态

如取初始波函数

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(x) - \psi_2(x)] \tag{12}$$

则在 $x>0$ 处 $\psi(x,0)\sim 0$,粒子主要出现在势阱的左半区,ψ 随时间的变化为

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_1 t/h} - \psi_2(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_2 t/h}] \tag{13}$$

当

$$t = n\pi\hbar/(E_2 - E_1), \quad n = 1,3,5,\cdots \tag{14}$$

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(x) + \psi_2(x)]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_1 t/h}$$

这时,在 $x<0$ 处 $\psi\sim 0$,粒子出现在右半区. 当

$$t = n\pi\hbar/(E_2 - E_1), \quad n = 2,4,6,\cdots \tag{15}$$

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(x) - \psi_2(x)]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_1 t/h}$$

粒子又回到左半区. 粒子穿透中央的势垒所需时间

$$\Delta t = \pi\hbar/(E_2 - E_1) \approx \frac{m\xi L^3}{4\pi\hbar}\mathrm{e}^{2\xi a} \tag{16}$$

这个结果大体上可以按势垒穿透现象来理解. 当 $E \ll V_0$,而且穿透概率很小时,粒子向势垒(高为 V_0,宽为 $2a$)每碰撞一次,透射波振幅和入射波振幅之比为

$$|S| \sim 4\sqrt{\frac{E}{V_0}}\mathrm{e}^{-2\xi a} \sim \frac{4k}{\xi}\mathrm{e}^{-2\xi a} \sim \frac{4\pi}{\xi L}\mathrm{e}^{-2\xi a}$$

当透射波振幅累积接近于入射波振幅时,可以认为粒子已基本透过势垒.所需碰撞次数为

$$N \sim \frac{1}{|S|} \sim \frac{\xi L}{4\pi} e^{2\xi a}$$

粒子对势垒的碰撞频率为

$$\nu \sim \frac{v}{2L} \sim \frac{\hbar k}{2mL} \sim \frac{\pi \hbar}{2mL^2}$$

所需时间为

$$\Delta t \sim N/\nu \sim \frac{m\xi L^3}{2\pi^2 \hbar} e^{2\xi a}$$

按数量级说,这个结果和式(16)一致.

1.9 粒子作自由运动,已知 $t=0$ 时初始波函数为

$$\psi(x,0) = (2\pi a^2)^{-1/4} \exp\left[ik_0(x-x_0) - \left(\frac{x-x_0}{2a}\right)^2\right], \quad a>0$$

(a) 求 $t=0$ 时波包宽度 Δx,动量涨落 Δp 及 p 表象中的波函数 $\varphi(p)$;(b) 求 $t>0$ 时波函数 $\psi(x,t)$以及 $\bar{x}(t)$,Δx;(c) 讨论此波包的运动特征.

解 为了简化,计算过程中将取 $\hbar=1$,在最后结果中再添上.先讨论 $t=0$ 时波包的形状

$$|\psi(x,0)|^2 = (2\pi a^2)^{-1/2} e^{-(x-x_0)^2/2a^2} \tag{1}$$

为 Gauss 型分布.按照平均值公式

$$\overline{f(x)} = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 f(x)\mathrm{d}x$$

容易算出 $t=0$ 时

$$\begin{aligned} &\bar{x} = x_0, \quad \bar{x}^2 = a^2 + x_0^2 \\ &\Delta x = (\bar{x}^2 - \bar{x}^2)^{1/2} = a \end{aligned} \tag{2}$$

即 $t=0$ 时波包中心在 x_0 处,波包宽度为 a.令

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(k) e^{ikx}\mathrm{d}k \tag{3}$$

$\varphi(k)$即动量表象中的初始波函数.根据 Fourier 变换公式

$$\varphi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x,0) e^{-ikx}\mathrm{d}x$$

$$= \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{3/4} \frac{1}{\sqrt{a}} e^{-ikx_0} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\left[-\left(\frac{x-x_0}{2a}\right)^2 - i(k-k_0)(x-x_0)\right]$$

$$= \left(\frac{2a^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \exp[-ikx_0 - a^2(k-k_0)^2] \tag{4}$$

计算中利用了积分公式(A)(见本题末附注). 由式(4)

$$|\varphi(k)|^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi}} a e^{-2a^2(k-k_0)^2} \tag{5}$$

即动量的概率分布也呈 Gauss 型分布. 由平均值公式

$$\overline{f(k)} = \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(k)|^2 f(k) dk$$

容易算出

$$\bar{k} = k_0, \quad \overline{k^2} = k_0^2 + \frac{1}{4a^2} \tag{6}$$

由于 $p=\hbar k$,因此

$$\bar{p} = \hbar k_0, \quad \overline{p^2} = \hbar^2 k_0^2 + \frac{\hbar^2}{4a^2} \tag{7}$$

$$\Delta p = (\overline{p^2} - \bar{p}^2)^{1/2} = \hbar/2a$$

这是 $t=0$ 时的动量分布特征. 由于是自由粒子,动量守恒,动量概率分布也守恒,因此式(7)也是任意时刻的动量分布特征. 由式(2)及式(7),可得

$$\Delta x \cdot \Delta p = \hbar/2 \quad (t=0 \text{ 时}) \tag{8}$$

在式(3)中,令

$$e^{ikx} \to e^{i(kx-\omega t)}, \quad \omega = \frac{\hbar k^2}{2m} = \frac{k^2}{2m} \quad (\hbar = 1)$$

即得 $t>0$ 时波函数 $\psi(x,t)$,即

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(k) \exp\left(ikx - \frac{ik^2 t}{2m}\right) dk \tag{9}$$

将式(4)代入上式,并利用积分公式(B)(见本题末附注),即得

$$\psi(x,t) = \frac{\exp[ik_0(x-x_0) - itk_0^2/2m]}{(2\pi)^{1/4}(a+it/2ma)^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{4}\left(x-x_0-\frac{k_0 t}{m}\right)^2 \frac{1-it/2ma^2}{a^2+(t/2ma)^2}\right] \tag{10}$$

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\left[a^2+\left(\frac{t}{2ma}\right)^2\right]^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(x-x_0-\frac{k_0 t}{m}\right)^2 \frac{1}{a^2+(t/2ma)^2}\right] \tag{11}$$

比较$|\psi(x,0)|^2$和$|\psi(x,t)|^2$的结构式,容易看出如下对应关系:

$$|\psi(x,0)|^2 \text{——} x_0, \quad a^2$$

$$|\psi(x,t)|^2 \text{——} x_0+\frac{k_0 t}{m}, \quad a^2+\left(\frac{t}{2ma}\right)^2$$

据此,对于$\psi(x,t)$,容易求出

$$\boxed{\bar{x}(t)=x_0+\frac{\hbar k_0 t}{m}} \tag{12}$$

$$\boxed{\Delta x=\left[a^2+\left(\frac{\hbar t}{2ma}\right)^2\right]^{1/2}} \tag{13}$$

(已按量纲关系将$\hbar$添回公式中.)由式(12)表示的$\bar{x}(t)$就是时刻t的波包中心,式(11)表明波包中心处$|\psi|^2$为极大.波包中心的前进速度(即群速度)为

$$v_g=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\bar{x}(t)=\frac{\hbar k_0}{m} \tag{14}$$

随着时间的增加,波包逐渐扩散,主要表现在两个方面:波包宽度Δx增大,波包中心强度减弱.由式(11)容易看出,波包中心处($x=\bar{x}$)

$$|\psi|^2=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta x}$$

而波包宽度Δx的变化规律[见式(13)]是,当$\hbar t\ll 2ma^2$时,$\Delta x\sim a$,波包扩散缓慢;当$\hbar t\gg 2ma^2$时,$\Delta x\sim\frac{\hbar t}{2ma}\gg a$.$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\Delta x$常称为波包扩散速度,在$\hbar t\gg 2ma^2$时,

$$\text{扩散速度}\sim\hbar/(2ma)=\Delta p/m \tag{15}$$

可见波包扩散的原因是动量的涨落Δp,Δp越大,扩散越快.在$\hbar t\ll 2ma^2$时,波包扩散不明显,波包的运动类似于一个以群速度$\hbar k_0/m$运动的经典粒子.

附注 积分公式

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2\pm 2\mathrm{i}\beta x}\mathrm{d}x=\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}\mathrm{e}^{-\beta^2/\alpha^2} \tag{A}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}k\exp[-(\alpha^2k^2+\mathrm{i}\beta k+\mathrm{i}\gamma k^2)]=\left(\frac{\pi}{\alpha^2+\mathrm{i}\gamma}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left[-\frac{\beta^2(\alpha^2-\mathrm{i}\gamma)}{4(\alpha^4+\gamma^2)}\right] \tag{B}$$

其中α、β、γ为实数,$\alpha>0$.

1.10 粒子作一维自由运动,设$t=0$时初始波函数为

$$\psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{d}k$$

其中 $\varphi(k)$ 为任意给定的函数. 试证明：在足够长时间以后，波函数取下列极限形式：

$$\psi(x,t)\approx\left(\frac{m}{\hbar t}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\pi}{4}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}mx^2}{2\hbar t}}\varphi\left(\frac{mx}{\hbar t}\right)$$

并对 $|\psi(x,t)|^2$ 的极限形式作出合理解释.

解　根据平面波的时间变化规律

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

任意时刻的波函数为

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

当时间足够长后（$t\to\infty$），上式被积函数中的指数函数具有 δ 函数的性质. 利用公式（其证明见本题末附注）

$$\lim_{\alpha\to\infty}\sqrt{\alpha}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha u^2}=\sqrt{\pi}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\pi}{4}}\delta(u)\tag{2}$$

并取

$$\alpha=\frac{\hbar t}{2m},\quad u=k-\frac{mx}{\hbar t}$$

即得

$$\begin{aligned}\psi(x,t)&\approx\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}mx^2}{2\hbar t}}\sqrt{\frac{2\pi m}{\hbar t}}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\pi}{4}}\int\varphi(k)\delta\left(k-\frac{mx}{\hbar t}\right)\mathrm{d}k\\&=\sqrt{\frac{m}{\hbar t}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{4}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}mx^2}{2\hbar t}}\varphi\left(\frac{mx}{\hbar t}\right)\end{aligned}\tag{3}$$

这正是所要证明的公式. 上式取绝对值平方，即得

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

其物理意义为：在足够长时间后，各不同 k 值的分波已经互相分离，波群在 x 处的主要成分为 $k=mx/\hbar t$，即 $x=\hbar kt/m$，强度正比于 $|\varphi(k)|^2$. 因子 $m/\hbar t$ 描述整个波包的扩散，波包强度 $|\psi|^2$ 和 t 成反比（参看题 1.9 的讨论）.

设整个波包中最强的动量成分为 $\hbar k_0$，即 $k=k_0$ 时 $|\varphi(k)|^2$ 最大. 由式（4）可见，当 t 足够大以后，$|\psi|^2$ 的最大值出现在 $mx/\hbar t=k_0$ 处，即 $x=\hbar k_0t/m$ 处，这表明波包中心处波群的主要成分为 k_0，这和题 1.9 的结论是一致的.

如用本题式(4)去处理题 1.9 中的 Gauss 型波包,应有

$$|\psi(x,t)|^2 \approx \sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{ma}{\hbar t}\exp\left[-2\alpha^2\left(\frac{mx}{\hbar t}-k_0\right)^2\right]$$

和严格解[题 1.9 式(11)]相比,相当于作了下列近似:

$$x-x_0 \sim x, \quad \alpha^2+\left(\frac{\hbar t}{2ma}\right)^2 \sim \left(\frac{\hbar t}{2ma}\right)^2$$

对于很大的 t 和 x,作这样的近似处理当然是允许的.

附注 公式(2)的证明如下:

对于任意平方可积的连续函数 $f(u)$,考虑定积分

$$I=\lim_{\alpha\to\infty}\sqrt{\alpha}\int_{-\infty}^{+\infty}f(u)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha u^2}\,\mathrm{d}u$$

在 $u\neq 0$ 处,由于函数 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha u^2}$ 迅速振荡,对积分无贡献,因此,I 的值主要来自 $u\sim 0$ 附近,这里 $f(u)$ 可用 $f(0)$ 代替,因而

$$\begin{aligned}
I&=f(0)\lim_{\alpha\to\infty}\sqrt{\alpha}\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha u^2}\,\mathrm{d}u \quad (\epsilon\text{ 为小正数})\\
&=f(0)\lim_{\alpha\to\infty}\int_{-\epsilon\sqrt{\alpha}}^{+\epsilon\sqrt{\alpha}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}v^2}\,\mathrm{d}v \quad (v=\sqrt{\alpha}u)\\
&=f(0)\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}v^2}\,\mathrm{d}v\\
&=f(0)\int_{-\infty}^{+\infty}(\cos v^2-\mathrm{i}\sin v^2)\,\mathrm{d}v\\
&=f(0)(1-\mathrm{i})\sqrt{\frac{\pi}{2}}\\
&=\sqrt{\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}f(0)
\end{aligned}$$

根据 δ 函数的积分性质

$$\int_{-\infty}^{+\infty}f(u)\delta(u)\mathrm{d}u=f(0)$$

即得

$$\lim_{\alpha\to\infty}\sqrt{\alpha}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha u^2}=\sqrt{\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}\delta(u) \tag{2}$$

1.11 质量为 m 的粒子作一维自由运动,波函数 $\psi(x,t)$. 以各时刻位置 x 的涨落 Δx 作为波包的有效半宽,$\bar{x}$ 作为波包中心. 已知 $t=0$ 时 $\bar{x}=x_0$,$\Delta x=a$,$\bar{p}=p_0$,$\Delta p=mu$,并设 $t=0$ 时波包宽度为各时刻的最小值. 求 $t>0$ 时波包中心 $\bar{x}(t)$ 及有效半宽 Δx.

解　根据涨落的定义，

$$(\Delta x)^2=\overline{x^2}-\bar{x}^2,\quad (\Delta p)^2=\overline{p^2}-\bar{p}^2 \tag{1}$$

由于是自由运动，总能量算符为

$$H=\frac{1}{2m}p^2 \tag{2}$$

动量 p 为守恒量，$\bar{p}$ 及 $\overline{p^2}$ 均不随 t 而变. 因此在 $t>0$ 时恒有

$$\begin{aligned}&\bar{p}=p_0,\quad \Delta p=mu\\&\overline{p^2}=\bar{p}^2+(\Delta p)^2=p_0^2+m^2u^2\end{aligned} \tag{3}$$

下面计算 $\bar{x}(t)$ 及 $\overline{x^2}(t)$. 首先，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\bar{x}(t)=\frac{1}{m}\bar{p}=\frac{1}{m}p_0 \tag{4}$$

利用初始条件 $\bar{x}(0)=x_0$，容易求出上式的解为

$$\bar{x}(t)=x_0+\frac{p_0}{m}t \tag{5}$$

这结果表明波包中心以恒速 p_0/m 向前移动. 其次，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}x^2=\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}x+x\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{m}(px+xp) \tag{6}$$

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

由于是自由运动，动量守恒，$\mathrm{d}p/\mathrm{d}t=0$，所以

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}x^2=\frac{1}{m}\left(p\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}+\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}p\right)=\frac{2}{m^2}p^2 \tag{7}$$

取平均值，即得

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\overline{x^2}=\frac{2}{m^2}\overline{p^2}=2\left(\frac{p_0^2}{m^2}+u^2\right) \tag{8}$$

利用式(1)及(5)，可得

$$\overline{x^2}=(\Delta x)^2+\left(x_0+\frac{p_0}{m}t\right)^2$$

代入式(8)，得到 Δx 满足的微分方程

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}(\Delta x)^2=2u^2 \tag{9}$$

解为

$$(\Delta x)^2 = u^2 t^2 + C_1 t + C_2 \tag{10}$$

其中 C_1、C_2 为积分常数,由初始条件确定.根据题意,初始条件为

$$t = 0 \text{ 时}, \quad \Delta x = a, \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\Delta x = 0 \quad \text{(极小条件)} \tag{11}$$

而由式(10),可得

$$t = 0 \text{ 时}, \quad (\Delta x)^2 = C_2, \quad 2\Delta x \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\Delta x = C_1 \tag{11'}$$

比较式(11)和(11′),即得

$$C_1 = 0, \quad C_2 = a^2 \tag{12}$$

代入式(10),即得

$$\Delta x = \sqrt{a^2 + u^2 t^2} \tag{13}$$

此即 $t>0$ 时,波包的有效半宽.由上式易见

当 $t \ll a/u$,$\Delta x \sim a$,波包扩散不明显.

当 $t \gg a/u$,$\Delta x \sim ut$,波包宽度和 u 及 t 成正比,可以认为 $u=\Delta p/m$ 就是波包扩散速度.

请将本题结果和题 1.9 对照一下.

1.12 考虑图 1.12(a)所示一维散射问题,

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

设 $E<V_0$.(a)设入射波为单色平面波 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)}$,$\omega = E/\hbar = \hbar k^2/2m$,求反射波.特别注意相位变化.(b)入射波改成波包

$$\psi_i(x,t) = \int_0^\infty \mathrm{d}k A(k) \mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)}$$

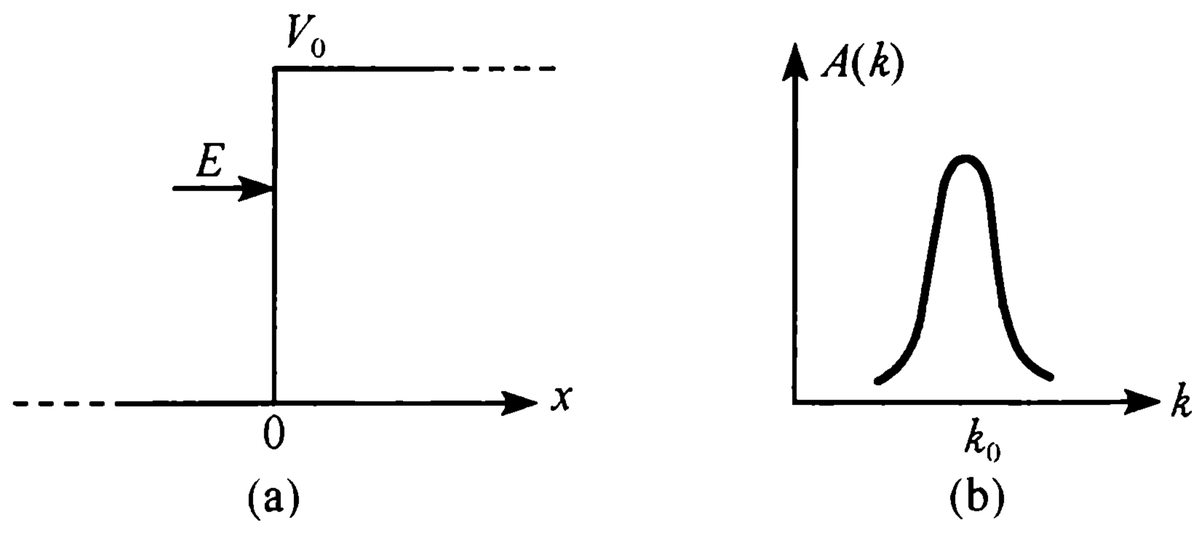


图 1.12

其中 $A(k)$是以 k_0 为对称中心的分布很窄的函数，如图 1.12(b)所示. 并设 ψ_i 是空间宽度(Δx)很窄的波包. 求反射波波函数，写出反射波包中心的运动方程，并求反射弛豫时间.

解　(a) 入射波为单色平面波时，总的波函数可以写成

$$\psi(x,t) = \psi(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \tag{1}$$

$\psi(x)$满足能量本征方程

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar}[E - V(x)]\psi = 0 \tag{2}$$

解为

$$\psi(x) = \begin{cases} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + R\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}, & x < 0 \\ D\mathrm{e}^{-\xi x}, & x > 0 \end{cases} \tag{3}$$

其中

$$k = \sqrt{2mE}/\hbar, \quad \xi = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar \tag{4}$$

R 项为反射波，D 项为衰减波. 利用 $x=0$ 处 ψ 和 ψ'的连续条件，容易求得

$$R = \frac{k - \mathrm{i}\xi}{k + \mathrm{i}\xi}, \quad D = \frac{2k}{k + \mathrm{i}\xi} \tag{5}$$

注意$|R|=1$，这表明反射波和入射波振幅相等，仅相位有所变化. 为了突出相位关系，将 R 写成

$$R = \frac{k - \mathrm{i}\xi}{k + \mathrm{i}\xi} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta(k)} \tag{5'}$$

(b) 入射波改为波包

$$\psi_{\mathrm{i}}(x,t) = \int_0^\infty \mathrm{d}kA(k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)} \tag{6}$$

反射波显然是

$$\psi_R(x,t) = \int_0^\infty \mathrm{d}kA(k)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}[kx+\omega t+\theta(k)]} \tag{7}$$

其中

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m} \tag{8}$$

对于入射波波包，为了使波包宽度 Δx 小，在 $k \sim k_0$ 附近各 $A(k)$应该同相，均取正实数，而且取极大值，即

$$\left.\frac{\partial A(k)}{\partial k}\right|_{k=k_0} = 0 \tag{9}$$

因此,入射波波包的中心位置由下式决定:

$$\frac{\partial}{\partial k}(kx-\omega t)\Big|_{k=k_0}=0 \tag{10}$$

其意义为:在 $k\sim k_0$ 附近,各种成分波的相位一致,得以形成极大. 式(10)的解为

$$x-\hbar k_0 t/m=0 \tag{11}$$

这就是入射波波包中心的运动方程.

仿此,反射波的波包中心位置由下式决定:

$$\frac{\partial}{\partial k}[kx+\omega t+\theta(k)]\Big|_{k=k_0}=0 \tag{12}$$

其中 $\partial\theta/\partial k$ 可以利用式(5′)求出,步骤如下:

先将式(5′)写成

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta(k)}=\frac{k-\mathrm{i}\xi}{k+\mathrm{i}\xi}=\frac{(k-\mathrm{i}\xi)^2}{k^2+\xi^2}=\frac{\hbar^2}{2mV_0}(k-\mathrm{i}\xi)^2$$

对 k 求导,得到

$$-\mathrm{i}\frac{\partial\theta}{\partial k}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta(k)}=\frac{\hbar^2}{2mV_0}2(k-\mathrm{i}\xi)\left(1-\mathrm{i}\frac{\partial\xi}{\partial k}\right) \tag{13}$$

但因

$$k^2+\xi^2=2mV_0/\hbar^2 \tag{14}$$

所以

$$\partial\xi/\partial k=-k/\xi$$

代入式(13)即得

$$\frac{\partial\theta(k)}{\partial k}=-\frac{2}{\xi} \tag{15}$$

上式代入式(12),即得反射波波包中心的运动方程

$$x+\frac{\hbar k_0}{m}t-\frac{2}{\xi_0}=0 \tag{16}$$

其中

$$\xi_0=\sqrt{2m(V_0-E_0)}/\hbar,\quad E_0=\hbar^2k_0^2/2m \tag{4′}$$

式(16)中令 $x=0$,即得反射弛豫时间

$$t_R=\frac{2m}{\hbar k_0\xi_0}=\frac{\hbar}{\sqrt{E_0(V_0-E_0)}} \tag{17}$$

弛豫时间可作如下定性解释:入射波能够进入势垒的有效深度约为 $1/\xi_0$,粒子

往返这段距离所需时间约为

$$t_R \sim \frac{2/\xi_0}{\hbar k_0/m} = \frac{2m}{\hbar k_0 \xi_0}$$

此即式(17).

1.13　能量为 E 的平行粒子束以入射角 θ 射向平面 $x=0$,如图 1.13 所示. 在区域 $x<0, V=0$;在区域 $x>0, V=-V_0$. 试分析粒子束的反射和折射规律,将结果用入射角 θ 和折射率 $n=(1+V_0/E)^{1/2}$ 表示.

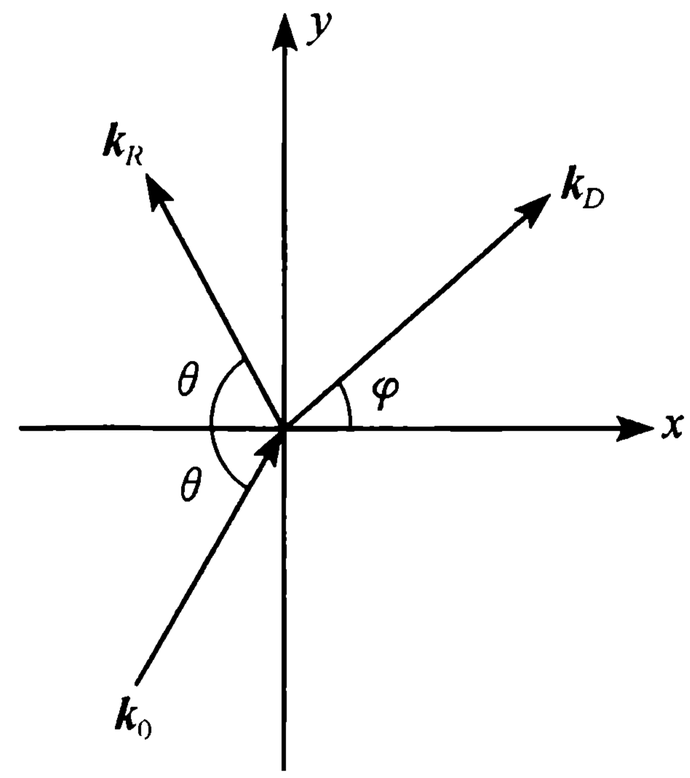


图 1.13

解　显然,入射、反射、折射粒子束均可用平面波表示. 取入射面为 x-y 平面,入射波可以表示成

$$\psi_0 = e^{ik_0 \cdot r}, \quad \boldsymbol{k}_0 = (k_1, k_2, 0) \tag{1}$$

入射动量为 $\hbar \boldsymbol{k}_0$,入射能量和入射角为

$$E = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}(k_1^2 + k_2^2) \tag{2}$$

$$\theta = \arctan \frac{k_2}{k_1} = \arcsin \frac{k_2}{k_0} \tag{3}$$

由于 $\partial V/\partial y = \partial V/\partial z = 0$,反射和折射时粒子动量的 y 分量和 z 分量不变. 以 $\boldsymbol{k}_R$ 表示反射波波矢量,由于反射波出现于 $x<0$ 区域,$V=0$,所以 $|\boldsymbol{k}_R|$ 必须等于 $|\boldsymbol{k}_0|$,因此

$$\boldsymbol{k}_R = (-k_1, k_2, 0) \tag{4}$$

所以反射角必然等于入射角. 这就是反射定律.

折射波出现于 $x>0$ 区域,设波矢量为 $\boldsymbol{k}_D$,即折射粒子动量为 $\hbar \boldsymbol{k}_D$. $\boldsymbol{k}_D$ 应满足能量关系

$$\hbar^2 k_D^2/2m = E + V_0 \tag{5}$$

$\boldsymbol{k}_D$ 的直角坐标分量可以写成

$$\boldsymbol{k}_D = (k, k_2, 0) \tag{6}$$

由式(2)、(5)、(6)易见,k 和 k_1 间有下列关系:

$$k^2 - k_1^2 = 2mV_0/\hbar^2 \tag{7}$$

设折射角为 φ,由图易见

$$\sin\theta = k_2/k_0, \quad \sin\varphi = k_2/k_D$$

$$\boxed{\frac{\sin\theta}{\sin\varphi} = \frac{k_D}{k_0} = \left(1 + \frac{V_0}{E}\right)^{1/2} = n} \tag{8}$$

式(8)相当于光学中的折射定律.

下面求入射、反射、折射波的振幅及相位关系.

$$\begin{aligned}
&\text{入射波}\quad \psi_0 = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{r}} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_1x+k_2y)}\\
&\text{反射波}\quad \psi_R = R\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_R\cdot\boldsymbol{r}} = R\mathrm{e}^{\mathrm{i}(-k_1x+k_2y)}\\
&\text{折射波}\quad \psi_D = D\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_D\cdot\boldsymbol{r}} = D\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx+k_2y)}
\end{aligned} \tag{9}$$

系数 R、D 待定. 在分界面两侧,ψ 及 $\partial\psi/\partial x$ 应该连续,即

$$\begin{aligned}
&(\psi_0+\psi_R)\,|_{x=0} = \psi_D\,|_{x=0}\\
&\left(\frac{\partial\psi_0}{\partial x}+\frac{\partial\psi_R}{\partial x}\right)\Bigg|_{x=0} = \frac{\partial\psi_D}{\partial x}\Bigg|_{x=0}
\end{aligned} \tag{10}$$

将式(9)代入式(10),即得

$$\begin{aligned}
&1+R = D\\
&(1-R)k_1 = Dk
\end{aligned} \tag{11}$$

容易解出

$$R=\frac{k_1-k}{k_1+k},\quad D=\frac{2k_1}{k_1+k} \tag{12}$$

由于 $k_1<k$,所以 R 是负实数,D 是正实数. 亦即折射波和入射波同相,反射波和入射波反相. 由于

$$\begin{aligned}
k_1 &= k_0\cos\theta = k_0\sqrt{1-\sin^2\theta}\\
k &= k_D\cos\varphi = k_0\sqrt{n^2-\sin^2\theta}
\end{aligned} \tag{13}$$

式(12)可以写成

$$R=\frac{\cos\theta-\sqrt{n^2-\sin^2\theta}}{\cos\theta+\sqrt{n^2-\sin^2\theta}},\quad D=\frac{2\cos\theta}{\cos\theta+\sqrt{n^2-\sin^2\theta}} \tag{12'}$$

根据公式

$$j_x = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(\psi^*\frac{\partial}{\partial x}\psi-\psi\frac{\partial}{\partial x}\psi^*\right)$$

容易得出入射粒子流量为 $\hbar k_1/m$,反射粒子流量为 $\hbar k_1|R|^2/m$,折射粒子流量为 $\hbar k|D|^2/m$. 所以

$$\begin{aligned}
\frac{\text{反射流量}}{\text{入射流量}} &= |R|^2 = \left(\frac{\cos\theta-\sqrt{n^2-\sin^2\theta}}{\cos\theta+\sqrt{n^2-\sin^2\theta}}\right)^2 = \left(\frac{k_1-k}{k_1+k}\right)^2\\
\frac{\text{折射流量}}{\text{入射流量}} &= \frac{k}{k_1}|D|^2 = \frac{4kk_1}{(k_1+k)^2}
\end{aligned} \tag{14}$$

正入射时，$\theta=\varphi=0$，$k_0=k_1$，$k_D=k$，$k/k_1=n$，

$$\frac{\text{反射流量}}{\text{入射流量}}=\left(\frac{n-1}{n+1}\right)^2,\quad \frac{\text{折射流量}}{\text{入射流量}}=\frac{4n}{(n+1)^2} \tag{15}$$

本题结果和电磁波的反射、折射规律相似①.

1.14　质量为 m 的粒子在势场 $V(x)$ 中作一维运动. 试证明，对于能量本征态(限于束缚态) ψ_n(能级 E_n)，以下平均值公式成立：

$$\langle T\rangle_n=\left\langle\frac{p^2}{2m}\right\rangle_n=\frac{1}{2}\left\langle x\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right\rangle_n,\quad \left\langle\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right\rangle_n=0$$

证　一维束缚态波函数可取为实函数，并满足归一化条件，即

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^2\mathrm{d}x=1 \tag{1}$$

ψ_n^2 可积，所以 $x\to\pm\infty$ 处，$\psi_n\to0$. ψ_n 满足定态 Schrödinger 方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_n''+V(x)\psi_n=E_n\psi_n \tag{2}$$

以 ψ_n 乘上式，并对全空间积分，同时计及归一化条件(1)式，即得

$$\begin{aligned}E_n&=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\right)\psi_n\mathrm{d}x+\int_{-\infty}^{\infty}\psi_nV\psi_n\mathrm{d}x\\&=\langle T\rangle_n+\langle V\rangle_n\end{aligned} \tag{3}$$

其中动能平均值 $\langle T\rangle_n$ 还可以表示成

$$\begin{aligned}\langle T\rangle_n&=-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n\psi_n''\mathrm{d}x=-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n\mathrm{d}(\psi_n')\\&=-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\psi_n\psi_n'\Big|_{-\infty}^{\infty}-\int_{-\infty}^{\infty}(\psi_n')^2\mathrm{d}x\right\}=\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}(\psi_n')^2\mathrm{d}x\end{aligned} \tag{4}$$

计算中利用了 $x\to\pm\infty$ 处 $\psi_n\to0$ 这个边界条件.

因为 $\langle T\rangle_n$ 必为有限值，故 $(\psi_n')^2$ 可积，所以 $x\to\pm\infty$ 处 $\psi_n'\to0$. 式(3)中势能平均值公式可作如下变化：

$$\begin{aligned}\langle V\rangle_n&=\int_{-\infty}^{\infty}V\psi_n^2\mathrm{d}x=V\psi_n^2x\Big|_{-\infty}^{\infty}-\int_{-\infty}^{\infty}x\mathrm{d}(V\psi_n^2)\\&=-\int_{-\infty}^{\infty}x\psi_n^2\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x-2\int_{-\infty}^{\infty}xV\psi_n\psi_n'\mathrm{d}x\\&=-\left\langle x\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right\rangle_n-2\int_{-\infty}^{\infty}xV\psi_n\psi_n'\mathrm{d}x\end{aligned} \tag{5}$$

---

① 参考 J. D. Jackson. 经典电动力学. 北京：高等教育出版社，1978. §7.3.

另外,以 $2x\psi_n'$ 乘式(2),积分,得到

$$2\int_{-\infty}^{\infty} xV\psi_n\psi_n' \mathrm{d}x = 2E_n\int_{-\infty}^{\infty} x\psi_n\psi_n' \mathrm{d}x + \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} 2x\psi_n'\psi_n'' \mathrm{d}x \tag{6}$$

利用 $x\to\pm\infty$ 处 $\psi_n\to 0, \psi_n'\to 0$ 等条件,可以算出

$$2\int_{-\infty}^{\infty} x\psi_n\psi_n' \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} 2x\psi_n \mathrm{d}\psi_n = \int_{-\infty}^{\infty} x\mathrm{d}(\psi_n^2)$$

$$= x\psi_n^2\Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^2 \mathrm{d}x = -1$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} 2x\psi_n'\psi_n'' \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} x\mathrm{d}(\psi_n')^2$$

$$= x(\psi_n')^2\Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} (\psi_n')^2 \mathrm{d}x = -\frac{2m}{\hbar^2}\langle T\rangle_n$$

一起代入式(6),得到

$$2\int_{-\infty}^{\infty} xV\psi_n\psi_n' \mathrm{d}x = -E_n - \langle T\rangle_n \tag{6'}$$

再代入式(5),并利用式(3),即得

$$\boxed{\langle T\rangle_n = \left\langle \frac{p^2}{2m}\right\rangle_n = \frac{1}{2}\left\langle x\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right\rangle_n} \tag{7}$$

此即一维“位力定理”.

以 ψ_n' 乘式(2),再对全空间积分,其中

$$E_n\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n'\psi_n \mathrm{d}x = E_n\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n \mathrm{d}\psi_n = \frac{1}{2}E_n\psi_n^2\Big|_{-\infty}^{\infty} = 0$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n'\psi_n'' \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n \mathrm{d}\psi_n' = \frac{1}{2}(\psi_n')^2\Big|_{-\infty}^{\infty} = 0$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n' V\psi_n \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} V\mathrm{d}\left(\frac{1}{2}\psi_n^2\right) = \frac{1}{2}V\psi_n^2\Big|_{-\infty}^{\infty} - \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^2\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x$$

$$= -\frac{1}{2}\left\langle \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right\rangle_n$$

合起来,就有

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right\rangle_n = 0 \tag{8}$$

由于 $-\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x} = f$,为粒子所受作用力,所以式(8)的意义是:对于束缚态,外力平均值必为零.

例如谐振子,$V = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$. 式(7)和式(8)分别给出

$$\langle T\rangle_n = \langle V\rangle_n = \frac{1}{2}E_n, \quad \langle x\rangle_n = 0$$

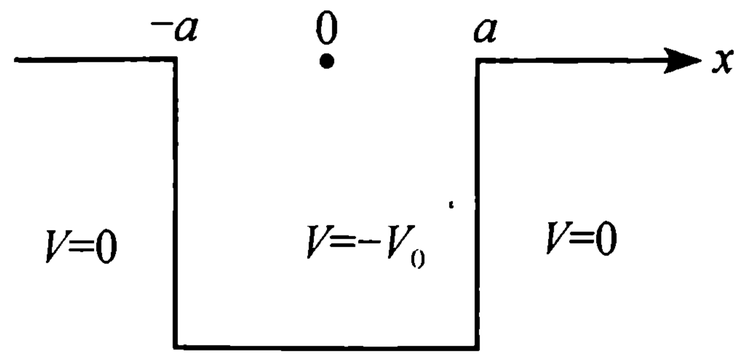


图 1.14

又如对称方势阱，

$$\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x} = V_0\delta(x-a) - V_0\delta(x+a)$$

式(8)给出

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x} \right\rangle_n = V_0\{\psi_n^2(a) - \psi_n^2(-a)\} = 0$$

即

$$\psi_n^2(a) = \psi_n^2(-a)$$

由于 $V(x)$为偶函数，ψ_n 必有明确宇称(或偶或奇)，故必有上式. 这里可参看题 1.6，本题式(8)可视为对题 1.6 的理论补充.

1.15　作一维自由运动的二粒子体系，粒子质量 $m_1 = m_2 = m$，粒子间无相互作用，也无外力作用. 以 x_1、x_2 表示粒子 1、2 的坐标，X、x 表示质心坐标和相对坐标，

$$X = \frac{1}{2}(x_1 + x_2), \quad x = x_1 - x_2 \tag{1}$$

以 p_1、p_2 表示粒子 1、2 的动量算符，P、p 表示总动量与相对动量算符，

$$p_1 = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x_1}, \quad p_2 = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x_2} \tag{2}$$

$$P = p_1 + p_2 = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial X}, \quad p = \frac{1}{2}(p_1 - p_2) = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x} \tag{3}$$

体系的 Hamilton 量为

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} = \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2\mu} \tag{4}$$

其中

$$M = 2m, \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = \frac{m}{2} \tag{5}$$

为总质量与折合质量. 式(2)是 p_1、p_2 在(x_1, x_2)表象中的表示，式(3)是 P、p 在(X, x)表象中的表示.

体系的力学量完全集由一组对易算符构成，可以选(x_1, x_2)、(X, x)、(p_1, p_2)、(P, p)、(x, P)、(X, p)等等.

(a) 求力学量完全集(x, P)的共同本征态 $\Psi_{a,b}$ 在(x_1, x_2)表象中的波函数

$\Psi_{a,b}(x_1,x_2)$,其中 a、b 是 x、P 的本征值($x=a$,$P=b$). 以下的计算均取$(x_1;x_2)$表象.

(b) 将 $\Psi_{a,b}(x_1,x_2)$表示成(p_1,p_2)共同本征函数的线性叠加,并作扼要讨论.

(c) 设初始时刻($t=0$)体系处于($x=a$,$P=0$)本征态,写出波函数 $\Psi(x_1,x_2,t=0)$,求 $t>0$ 时波函数 $\Psi(x_1,x_2,t)$,并作简要讨论.

解 (a) $x=a$ 的本征函数是

$$\psi_{x=a}(x)=\delta(x-a)=\delta(x_1-x_2-a) \tag{6}$$

$P=b$ 的总动量本征函数是

$$\psi_{P=b}(X)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ibX/\hbar}=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left[\frac{ib(x_1+x_2)}{2\hbar}\right] \tag{7}$$

合起来,即得

$$\Psi_{a,b}(x_1,x_2)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left[\frac{ib(x_1+x_2)}{2\hbar}\right]\delta(x_1-x_2-a) \tag{8}$$

这是两个自由粒子的一种纠缠态.

(b) 尽管动量算符 p_1、p_2、P 互相对易,但 p_1、p_2 与 x 不对易,故式(8)并非(p_1,p_2)共同本征态. 以 p_1'、p_2'表示 p_1、p_2 的本征值,相应的本征函数为

$$u_{p_1'}(x_1)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ip_1'x_1/\hbar},\quad v_{p_2'}(x_2)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ip_2'x_2/\hbar} \tag{9}$$

式(8)中 δ 函数可以表示成

$$\begin{aligned}\delta(x_1-x_2-a)&=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}e^{ik(x_1-x_2-a)}dk\quad(\text{令 } p'=\hbar k)\\&=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-ip'a/\hbar}e^{ip'(x_1-x_2)/\hbar}dp'\end{aligned} \tag{10}$$

代入式(8),即得

$$\Psi_{a,b}(x_1,x_2)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}dp'e^{-ip'a/\hbar}u_{p'+\frac{b}{2}}(x_1)v_{-p'+\frac{b}{2}}(x_2) \tag{11}$$

$\Psi_{a,b}$已经表示成 p_1、p_2 共同本征函数的线性叠加,其中

$$\begin{aligned}u_{p'+b/2}(x_1)&=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{i(p'+b/2)x_1/\hbar}\\v_{-p'+b/2}(x_2)&=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{i(-p'+b/2)x_2/\hbar}\end{aligned} \tag{9'}$$

式(11)表明,如对 $\Psi_{a,b}$态同时测量粒子 1,2 的动量,由于总动量 P 守恒,必有 $p_1'+p_2'=P=b$. 如测得粒子 1 的动量 $p_1'=p'+\frac{b}{2}$,则必然同时测得粒子 2 的动量为

$p_2'=\frac{b}{2}-p'$，两个测量结果有确切关联. 注意：对于(x,P)的共同本征函数(8)，两个粒子相距 $x=a$ 可以很大$(a\to\infty)$，即使在此情况下，测量两个粒子的动量 p_1 和 p_2 的结果，仍有上述确切的关联. 这就是量子力学中的非定域性(non-locality).

(c) 对于这个二自由粒子体系，p_1、p_2、p、P 是守恒量，但 x_1、x_2、x、X 均非守恒量. $\Psi_{a,b}$既然为 $x=a$ 的本征态，就不能是定态，$t>0$ 时必有波包扩散.

如 $t=0$ 时体系处于$(x=a,P=0)$本征态，则波函数为

$$\Psi(x_1,x_2,t=0)=\delta(x-a)=\delta(x_1-x_2-a) \tag{12}$$

由于总动量 P 守恒，$t>0$ 时仍有 $P=0$. Ψ 的质心坐标(X)部分将永远为常数. 将 $\delta(x-a)$表示成相对动量 p 的本征函数的线性叠加式(10)，即

$$\Psi(t=0)=\delta(x-a)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}\,\mathrm{d}k$$

其中 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}p'x/\hbar}$是 $p=p'$的本征函数，相应的动能为

$$\frac{p^2}{2\mu}=\frac{p'^2}{2\mu}=\frac{p'^2}{m}=\frac{\hbar^2k^2}{m}$$

在 $t>0$ 时，$\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$将按照定态波函数随 t 变化，即

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\to\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hbar k^2t/m}$$

因此

$$\Psi(x_1,x_2,t)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}k\exp\left[\mathrm{i}k(x-a)-\mathrm{i}\frac{\hbar tk^2}{m}\right] \tag{13}$$

其中

$$k(x-a)-\frac{\hbar tk^2}{m}=-\frac{\hbar t}{m}\left[k-\frac{m(x-a)}{2\hbar t}\right]^2+\frac{m(x-a)^2}{4\hbar t}$$

$$=-\frac{\hbar t}{m}K^2+\frac{m(x-a)^2}{4\hbar t},\quad K=k-\frac{m(x-a)}{2\hbar t}$$

代入式(13)，$(\mathrm{d}k\to\mathrm{d}K)$并利用 1.10 题证明的公式

$$\int_{-\infty}^{\infty}\sqrt{\alpha}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha u^2}\,\mathrm{d}u=\sqrt{\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}$$

即可最终算出

$$\Psi(x_1,x_2,t)=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{m}{\pi\hbar t}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}\exp\left[\frac{\mathrm{i}m(x_1-x_2-a)^2}{4\hbar t}\right] \tag{14}$$

因而

$$|\Psi(x_1,x_2,t)|^2=\frac{m}{4\pi\hbar t}\quad(t>0) \tag{15}$$

意义为:虽然 $t=0$ 时规定了体系波函数为 $\delta(x_1-x_2-a)$,粒子 1、2 的空间位置相距 $a(x_1-x_2=a)$,但式(12)中粒子 1、2 有概率分布均匀的各种动量成分,波包扩散速度极快(无穷大),在任何 $t>0$ 时刻 $|\Psi|^2$ 与 x_1、x_2 已经无关,波包已经均匀扩散到全空间,粒子 1、2 间相对距离 $x=(x_1-x_2)$ 可以取任意值.

[注] 两个一维自由粒子(x,P)的共同本征函数式(8)在 $x=a,P=0$ 情况下,就是 A. Einstein, B. Podolsky & N. Rosen. *Phys. Rev.*, 1935, **47**: 777 一文中的式(9)(除了一个不关紧要的常数因子外),它是二粒子的一种纠缠态. 按上述分析,这种 δ 波包将瞬即扩散到全空间,并不适合用以在实验上检验定域实在论(local realism)是否成立. 在实际的实验中,只能去制备两个粒子相对距离 x 有一个较窄的分布的波包. 参阅: A. V. Rau, J. A. Dunningham, K. Burnett. *Science*, 2003, **301**: 1081.

第二章　δ势场中粒子的运动

2.1　粒子在δ势阱

$$V(x)=-V_0\delta(x),\quad V_0>0$$

中运动，求束缚态能级和波函数(图 2.1).

解　定态 Schrödinger 方程为

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}[E+V_0\delta(x)]\psi=0 \tag{1}$$

$x\neq0$ 处，$V(x)=0$，所以 $E>0$ 为游离态，$E<0$ 为束缚态. 由于 $V(x)$是偶函数，束缚定态波函数必有确定的宇称. 下面将分别就偶宇称态和奇宇称态进行讨论.

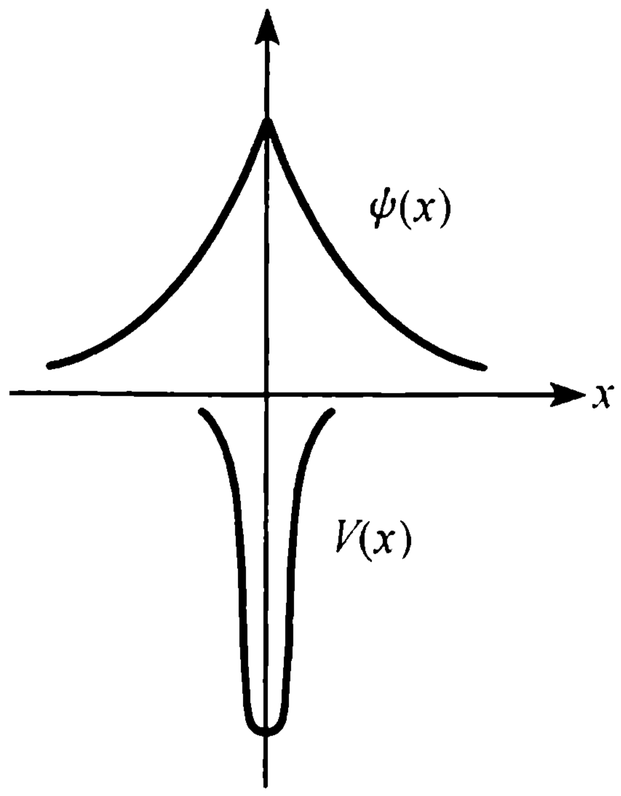


图 2.1

将式(1)在 $x\sim0$ 附近积分，上下限取为 $\pm\epsilon$，ϵ 为很小的正数，

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}\mathrm{d}x=\psi'(\epsilon)-\psi'(-\epsilon)$$

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\psi\mathrm{d}x=\psi(0)2\epsilon$$

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\delta(x)\psi(x)\mathrm{d}x=\psi(0)$$

令 $\epsilon\to0^+$(即保持 $\epsilon>0$，而又趋于 0)，即得

$$\boxed{\psi'(0^+)-\psi'(0^-)=-\frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi(0)} \tag{2}$$

这是在 $x=0$(存在 δ 势阱处)两侧 ψ' 的跃变公式，它对于能级的确定起关键作用.

在 $x=0$ 两侧 ψ' 虽有跃变，但变化量是有限的(因 $\psi(0)$有限)，所以 $\psi(x)$在 $x=0$ 两侧是连续的.

令

$$k=\sqrt{-2mE}/\hbar \tag{3}$$

在 $x\neq0$ 处，式(1)可以写成

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

$x\to\pm\infty$处 $\psi\to0$(这是束缚态波函数必须满足的条件)的解为

$$\psi \sim \mathrm{e}^{-k|x|}$$

(a) 偶宇称态

$$\psi(x) = \begin{cases} C\mathrm{e}^{-kx}, & x > 0 \\ C\mathrm{e}^{kx}, & x < 0 \end{cases} \tag{5}$$

C 为归一化常数. 上式在 $x=0$ 两侧的微商分别为

$$\psi'(0^+) = -Ck, \quad \psi'(0^-) = Ck$$

按照式(2),应有

$$-2Ck = -2mV_0C/\hbar^2$$

因此

$$k = mV_0/\hbar^2 \tag{6}$$

$$\boxed{E = -\frac{\hbar^2k^2}{2m} = -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}} \tag{7}$$

这是唯一的束缚态能级. 由归一化条件

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 \mathrm{d}x = 1$$

容易求出归一化常数 $C=\sqrt{k}$. $\psi(x)$ 的图形见图 2.1.

在这个唯一的束缚态中,势能和动能的平均值分别为

$$\langle V\rangle = -V_0\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2\delta(x)\mathrm{d}x$$

$$= -V_0|\psi(0)|^2 = -mV_0^2/\hbar^2 = 2E \tag{8}$$

$$\langle T\rangle = E - \langle V\rangle = -E = -\frac{1}{2}\langle V\rangle \tag{9}$$

$\langle T\rangle$、$\langle V\rangle$、E 之间的关系和 Coulomb 场的束缚态类似. 其根源在于本题和 Coulomb 场均具有下列性质:

$$V(\lambda x) = \frac{1}{\lambda}V(x), \quad \lambda > 0$$

于是,根据位力定理必然有式(8)和(9)的结果. 本题的特征长度为

$$x_0 = \frac{1}{k} = \frac{\hbar^2}{mV_0} \tag{10}$$

粒子在 $|x|>x_0$ 处出现的概率为

$$2\int_{x_0}^{\infty} |\psi|^2\mathrm{d}x = 2k\int_{1/k}^{\infty} \mathrm{e}^{-2kx}\mathrm{d}x = \mathrm{e}^{-2} = 0.1353$$

(b) 奇宇称态

$$\psi(x)=\begin{cases}Ae^{-kx}, & x>0\\ -Ae^{kx}, & x<0\end{cases}$$

由波函数的连续条件可知，奇宇称态 $\psi(0)=0$，这就要求 $A=0$. 因此奇宇称态没有束缚态. 这个结论也可结合式(2)来理解. 式(2)中，由于奇宇称态 $\psi(0)=0$，所以

$$\psi'(0^+)=\psi'(0^-)$$

即 ψ' 是连续的. 这和式(2)中 $V_0\to 0$ 的结果相同，即 $x=0$ 处 δ 势阱的存在对奇宇称态并无作用，粒子的运动仍和自由粒子相同，因此 $E>0$，不存在束缚态.

2.2　利用上题求得的波函数

$$\psi(x)=\sqrt{k}e^{-k|x|}$$

计算 Δx 和 Δp，验证不确定度关系.

解　归一化波函数和能级为

$$\psi(x)=\sqrt{k}e^{-k|x|},\quad k=mV_0/\hbar^2 \tag{1}$$

$$E=-\hbar^2k^2/2m=-mV_0^2/2\hbar^2 \tag{2}$$

注意 $\psi(x)$ 为偶宇称实函数. x 和 x^2 平均值以及 Δx 分别为

$$\bar{x}=\int_{-\infty}^{+\infty}x\psi^2\,dx=0$$

$$\overline{x^2}=\int_{-\infty}^{+\infty}x^2\psi^2\,dx=2k\int_0^{\infty}x^2e^{-2kx}\,dx=\frac{1}{2k^2}$$

$$\Delta x=(\overline{x^2}-\bar{x}^2)^{1/2}=\frac{1}{\sqrt{2}k}$$

p 和 p^2 平均值分别为

$$\bar{p}=-i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\psi'\,dx=0\quad(\psi^*\psi'\text{ 为奇函数})$$

$$\overline{p^2}=(-i\hbar)^2\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\psi''\,dx=-\hbar^2\int_{-\infty}^{+\infty}\psi\psi''\,dx$$

利用能量本征方程

$$\psi''+\frac{2m}{\hbar^2}[E+V_0\delta(x)]\psi=0$$

即得

$$\overline{p^2}=2m\int_{-\infty}^{+\infty}[E+V_0\delta(x)]\psi^2\,dx$$

$$=2m[E+V_0\psi^2(0)]=2m(E+V_0k)=\hbar^2k^2$$

计算 p^2 平均值也可利用公式

$$\overline{p^2}=\int|\hat{p}\psi|^2\mathrm{d}x=\hbar^2\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi'|^2\mathrm{d}x \tag{3}$$

由式(1)易见$|\psi'|=k\psi$,因此

$$\overline{p^2}=\hbar^2\int k^2\psi^2\mathrm{d}x=\hbar^2k^2$$

$$\Delta p=(\overline{p^2}-\overline{p}^2)^{1/2}=\hbar k$$

因此有

$$\Delta x\cdot\Delta p=\hbar/\sqrt{2}$$

2.3 求动能为 E 的粒子对 δ 势垒

$$V(x)=V_0\delta(x)$$

的透射系数.

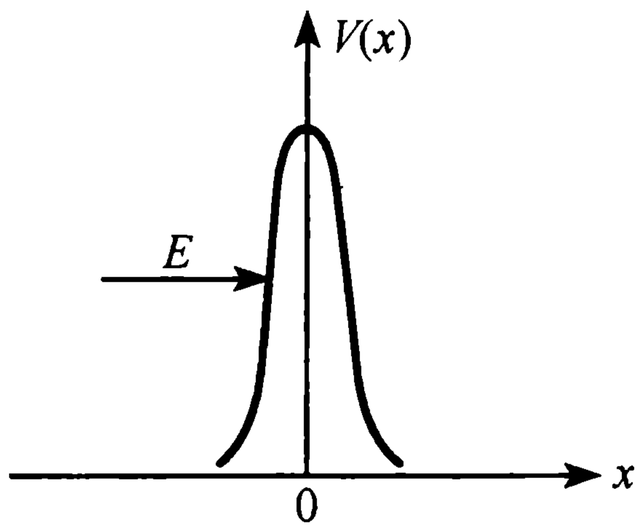


图 2.3

解 粒子的定态波函数可以写成

$$\psi(x,t)=\psi(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar} \tag{1}$$

其中 $\psi(x)$满足定态 Schrödinger 方程

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}[E-V_0\delta(x)]\psi=0 \tag{2}$$

与题 2.1 相似,在 $x=0$ 处 ψ 连续,ψ'则有跃变,

$$\psi'(0^+)-\psi'(0^-)=\frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi(0) \tag{3}$$

在 $x\neq0$ 处,式(2)可以表示成

$$\psi''+k^2\psi=0,\quad k=\sqrt{2mE}/\hbar \tag{4}$$

其特解为

$$\psi=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx},\quad \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$$

前者向$+x$ 轴方向运动,后者向$-x$ 轴方向运动.

设粒子从左方入射,入射波取为 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx-\mathrm{i}Et/\hbar}$,则总波函数[式(4)之解]可以表示为

$$\psi(x)=\begin{cases}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+R\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}, & x<0\\ S\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}, & x>0\end{cases} \tag{5}$$

其中 R 项为反射波,S 项为透射波. 由 $x=0$ 处 ψ 的连续条件得到

$$1+R=S \tag{6}$$

由式(3)得到

$$ik(S+R-1)=\frac{2mV_0}{\hbar^2}S \tag{7}$$

由式(6)、(7)容易解出

$$S=1\Big/\left(1+\frac{imV_0}{k\hbar^2}\right),\quad R=-\frac{imV_0}{k\hbar^2}\Big/\left(1+\frac{imV_0}{k\hbar^2}\right) \tag{8}$$

所以

$$\text{透射系数}=|S|^2=1\Big/\left(1+\frac{m^2V_0^2}{\hbar^4k^2}\right)=1\Big/\left(1+\frac{mV_0^2}{2E\hbar^2}\right) \tag{9}$$

$$\text{反射系数}=|R|^2=\frac{mV_0^2}{2E\hbar^2}\Big/\left(1+\frac{mV_0^2}{2E\hbar^2}\right) \tag{10}$$

注意，$|S|^2+|R|^2=1$，这是粒子数守恒的具体体现. 由式(9)、(10)可见，如将δ势垒改成δ势阱，即 $V_0\to -V_0$，反射系数及透射系数不变.

δ势阱的束缚态能级(见题 2.1)

$$\varepsilon=-mV_0^2/2\hbar^2 \tag{11}$$

可以作为本题中衡量入射能量大小的标准. 因为式(9)可以写成

$$|S|^2=1\Big/\left(1+\frac{|\varepsilon|}{E}\right)=\frac{E}{E+|\varepsilon|} \tag{9'}$$

当 $E\ll|\varepsilon|$，透射系数 $|S|^2\sim 0$；当 $E\gg|\varepsilon|$，$|S|^2\sim 1$，即当入射能量足够大时，δ势垒(阱)可以认为是“透明”的.

2.4　粒子在双δ势阱

$$V(x)=-V_0[\delta(x+a)+\delta(x-a)]$$

中运动，求束缚态能级公式，并和单δ势阱的结果作比较.(本题可以作为氢分子离子 H_2^+ 的一种近似一维模型.)

解　定态 Schrödinger 方程为

$$\psi''+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi+\frac{2mV_0}{\hbar^2}[\delta(x+a)+\delta(x-a)]\psi=0 \tag{1}$$

$E>0$ 为游离态，$E<0$ 为束缚态. $V(x)$为偶函数，因此束缚定态有确定的宇称. 和题 2.1 同样的理由，在 $x=\pm a$ 处 ψ 应连续，ψ'的跃变条件为

$$\psi'(a-0)-\psi'(a+0)=\frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi(a)=\frac{2}{b}\psi(a) \tag{2}$$

$$\psi'(-a-0)-\psi'(-a+0)=\frac{2}{b}\psi(-a) \tag{2'}$$

其中 $b=\hbar^2/mV_0$ 是反映δ势阱性质的一个特征长度，另一个特征长度为 $2a$. 令

$$k=\sqrt{-2mE}/\hbar \tag{3}$$

除了 $x=-a$、a 两个奇异点外,式(1)可以写成

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

其特解为 $e^{\pm kx}$,式(1)在各个空间区域的解都可以由这两个特解叠加而成.

(a) 偶宇称态

$$\psi(-x)=\psi(x)$$

$x\to\pm\infty$处 $\psi\to0$(束缚态条件)的解为

$$\psi(x)=\begin{cases}Ae^{kx}, & x<-a\\ \mathrm{ch}kx=\dfrac{1}{2}(e^{kx}+e^{-kx}), & -a<x<a\\ Ae^{-kx}, & x>a\end{cases} \tag{5}$$

利用 $x=a$ 处 ψ 的连续条件和 ψ' 的跃变条件(2),容易求得

$$\frac{2}{kb}-1=\frac{e^{ka}-e^{-ka}}{e^{ka}+e^{-ka}}$$

[由于 ψ 有确定的宇称,$x=-a$ 处 ψ 的连续条件和 ψ' 跃变条件(2′)给出同样的结果.]这个方程和下式等价:

$$kb=1+e^{-2ka} \tag{6}$$

这就是能级方程. 给定 a、b 后,不难用数值解法求出 k 的值,再由式(3)即可求出能量本征值 E. 我们先作定性讨论. 图 2.4(b)中直线和曲线的交点所对应的 k 值,就

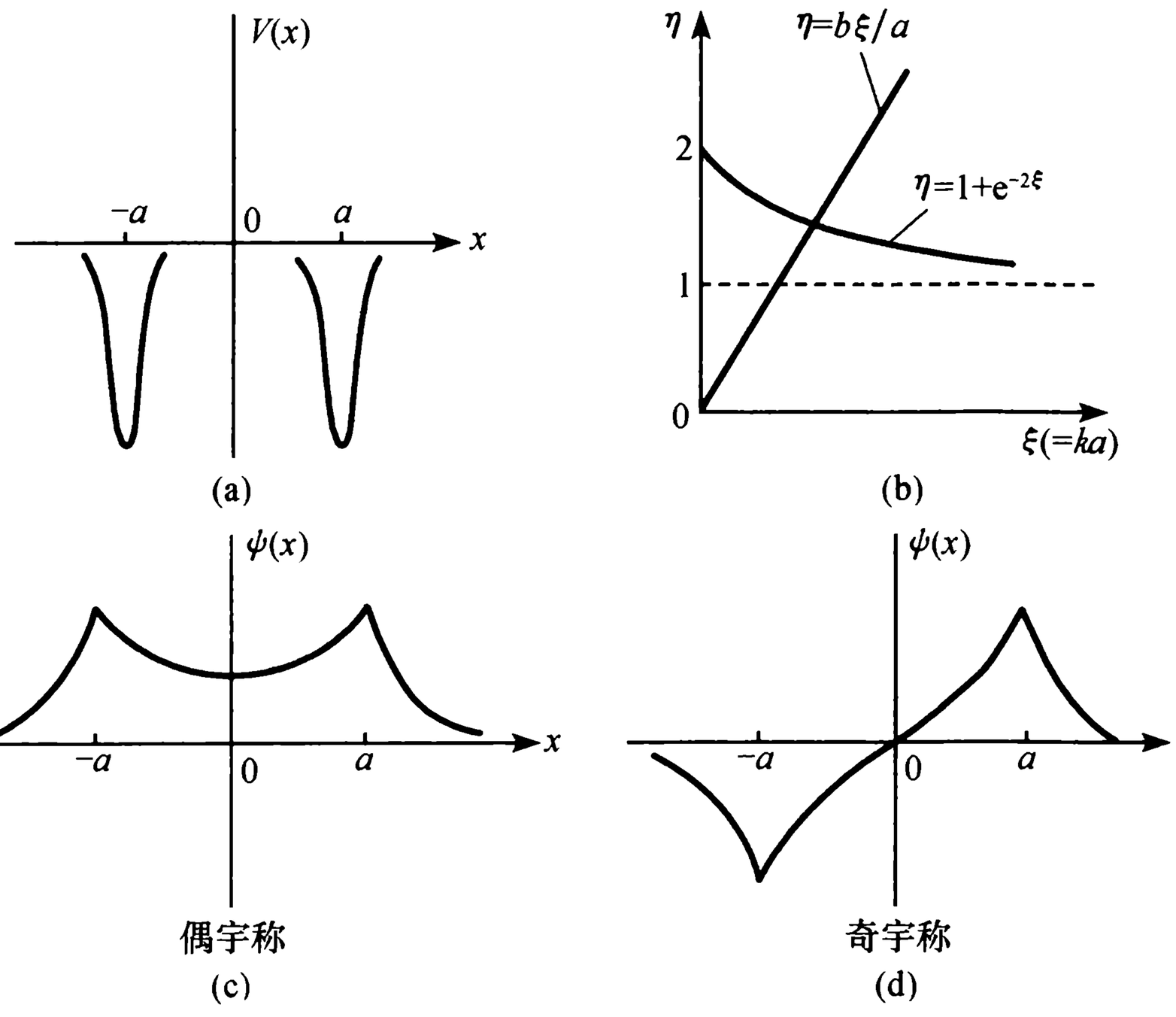


图 2.4

是所求的解. 由图可见，不论 a、b 取什么值，总有而且只有一个解，亦即偶宇称态总有而且只有一个束缚能级. k 的可能取值范围为

$$\frac{1}{b}<k<\frac{2}{b} \tag{7}$$

因此 E 的可能取值范围为

$$-\frac{2mV_0^2}{\hbar^2}<E<-\frac{mV_0^2}{2\hbar^2} \tag{8}$$

当 $a\gg b$，E 取上限，接近于单 δ 势阱的能级；当 $a\ll b$，E 取下限，相当于两个 δ 势阱重合(强度加倍!)时所相应的能级.

为了和单 δ 势阱能级(见题 2.1)比较，令

$$kb=\varepsilon \tag{9}$$

则

$$E=-\frac{\hbar^2k^2}{2m}=-\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}\varepsilon^2 \tag{10}$$

ε 之值可根据 a/b 之值由式(6)求出，式(6)即

$$\varepsilon=1+\mathrm{e}^{-2a\varepsilon/b} \tag{6'}$$

数值结果如下：

$\frac{a}{b}$	0	0.1	0.2	0.3	0.5	0.7	1	2	3	5
ε	2	1.710	1.540	1.425	1.278	1.189	1.109	1.017	1.002	1.000

(b) 奇宇称态

$$\psi(-x)=-\psi(x)$$

$x\to\pm\infty$处 $\psi\to0$ 的解为

$$\psi(x)=\begin{cases}-B\mathrm{e}^{kx}, & x<-a\\ \mathrm{sh}kx=\dfrac{1}{2}(\mathrm{e}^{kx}-\mathrm{e}^{-kx}), & -a<x<a\\ B\mathrm{e}^{-kx}, & x>a\end{cases} \tag{11}$$

利用 $x=a$ 处 ψ 的连续条件和 ψ' 跃变条件式(2)，容易求出能级方程为

$$kb=1-\mathrm{e}^{-2ka} \tag{12}$$

由于上式右端总是小于 $2ka$，因此上式有解的条件可表为

$$b<2a,\quad \text{即 } \hbar^2<2mV_0a \tag{13}$$

在此条件下，k 的取值范围显然是

$$0 < k < 1/b \tag{14}$$

E 的可能取值范围是

$$-\frac{mV_0^2}{2\hbar^2} < E < 0 \tag{15}$$

如仍令 $kb=\varepsilon$,则能级 E 仍可表示成式(10),能级方程(12)则可以写成

$$\varepsilon = 1 - \mathrm{e}^{-2a\varepsilon/b} \tag{12'}$$

在满足式(13)的条件下,式(12′)必有而且只有一个解.[用类似于图 2.4(b)的图解法容易证明这一点.]

当 $2a \gg b$,E 取式(15)的下限,即趋于单 δ 势阱的能级;当 $2a \to b$,E 取上限,即 $E \to 0^-$;当 $2a < b$,无解.ε 和 a/b 的数值关系可由式(12′)求得如下:

$\frac{a}{b}$	0.5	0.6	0.7	0.8	1	1.2	1.5	2	3
ε	0	0.314	0.511	0.642	0.797	0.879	0.941	0.980	0.998

两种束缚态的波形如图 2.4(c)、(d)所示.

2.5 粒子在双 δ 势垒

$$V(x) = V_0[\delta(x+a) + \delta(x-a)]$$

作用下运动,求共振态能级.

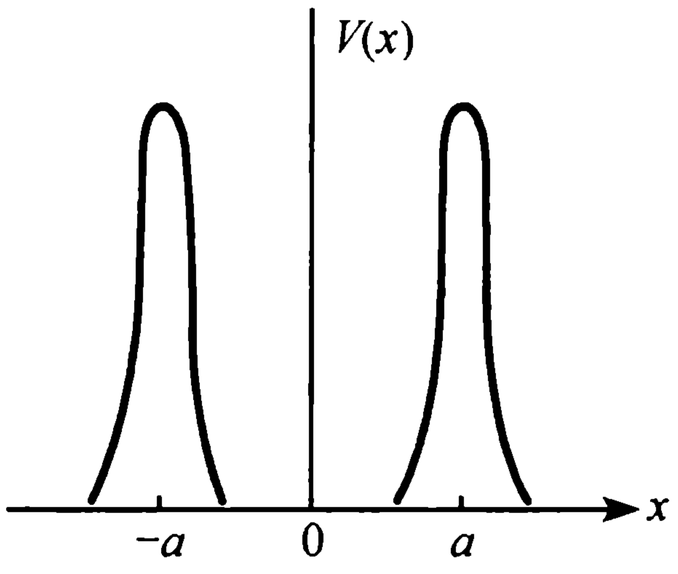


图 2.5

解 能量本征方程为

$$\psi'' + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi - \frac{2mV_0}{\hbar^2}[\delta(x+a) + \delta(x-a)]\psi = 0 \tag{1}$$

由于 $V(x) \geqslant 0$,所以 $E > 0$.令

$$k = \sqrt{2mE}/\hbar \tag{2}$$

在 $x \neq \pm a$ 处,式(1)可以写成

$$\psi'' + k^2\psi = 0 \tag{3}$$

解为 $\psi = \cos kx$、$\sin kx$,在 $x \to \pm\infty$ 处 ψ 并不趋于 0,而呈周期性变化.因此,本题没有严格的束缚态解和分立能级.所谓共振态是指 ψ 在垒间区域($|x| < a$)的值远大于垒外区域($|x| > a$)的值.与此相应的能量就称为共振态能级.

在 $x = a$ 处 ψ 应该连续,ψ' 的跃变条件为

$$\psi'(a+0) - \psi'(a-0) = \frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi(a) \tag{4}$$

在 $x=-a$ 处也有类似公式.

(a) 偶宇称态

$$\psi(-x)=\psi(x)$$

我们只写出 $x>-a$ 区域的 ψ，$x<-a$ 区域的 ψ 可按偶函数条件写出. 由式(3)，有

$$\psi(x)=\begin{cases}\cos kx, & -a<x<a\\ A\cos kx+B\sin kx=C\sin(kx+\theta), & x>a\end{cases}\tag{5}$$

由 $x=a$ 处 ψ 的连续条件，应该有如下关系：

$$\cos ka=C\sin(ka+\theta)\tag{6}$$

由 ψ' 的跃变条件(4)，应该有如下关系：

$$C\cos(ka+\theta)+\sin ka=\frac{2mV_0}{k\hbar^2}\cos ka\tag{7}$$

作为共振态，要求 $C\sim 0$，由式(6)可得

$$|\cos ka|\ll 1\tag{8}$$

因此可令

$$ka=\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi-\varepsilon$$

$$n=0,1,2,\cdots,\quad |\varepsilon|\ll\pi/2\tag{9}$$

代入式(7)，并略去其中较小的 C 项，即得

$$\frac{k\hbar^2}{2mV_0}\approx\cot ka=\cot\left(n\pi+\frac{\pi}{2}-\varepsilon\right)=\tan\varepsilon\approx\varepsilon$$

即

$$\varepsilon\approx k/U_0\approx\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi/aU_0\tag{10}$$

其中

$$U_0=2mV_0/\hbar^2\tag{11}$$

代入式(9)，即得

$$k\approx\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{a}\left(1-\frac{1}{aU_0}\right)\tag{12}$$

再代入式(2)，即得共振态能级公式

$$E\approx\frac{\pi^2\left(n+\frac{1}{2}\right)^2\hbar^2}{2ma^2}\left(1-\frac{2}{aU_0}\right),\quad n=0,1,2,\cdots\tag{13}$$

(b) 奇宇称态

$$\psi(-x)=-\psi(x)$$

在区域 $x>-a$,波函数为

$$\psi(x)=\begin{cases}\sin kx, & -a<x<a\\ D\sin(kx+\varphi), & x>a\end{cases} \tag{14}$$

类似地可以求得

$$k\approx\frac{n\pi}{a}\left(1-\frac{1}{aU_0}\right),\quad n=1,2,3,\cdots \tag{15}$$

$$E\approx\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\left(1-\frac{2}{aU_0}\right) \tag{16}$$

式(13)和(16)可以统一写成

$$\boxed{E_n\approx\frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{2a}\right)^2\left(1-\frac{2}{aU_0}\right),\quad n=1,2,3,\cdots} \tag{17}$$

偶宇称态 n 取奇数,奇宇称态 n 取偶数.

共振态出现的必要条件为

$$\varepsilon\approx k/U_0\ll\pi/2 \tag{18}$$

亦即

$$U_0a=\frac{2mV_0a}{\hbar^2}\gg n,\quad n=1,2,3,\cdots \tag{19}$$

在这个条件下,对于能量 E_n 来说,δ 势垒可以近似地认为是“不透明”的,双 δ 势垒的作用近似于宽度为 $2a$ 的无限深势阱. 式(17)中当 $aU_0\to\infty$,即得

$$E_n=\frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{2a}\right)^2,\quad n=1,2,3,\cdots$$

这正是无限深势阱的能级公式.

2.6 粒子以动能 E 入射,受到如下双 δ 势垒作用:

$$V(x)=V_0[\delta(x)+\delta(x-a)]$$

求反射概率和透射概率,以及发生完全透射的条件.

解 令

$$k=\sqrt{2mE}/\hbar,\quad C=2maV_0/\hbar^2 \tag{1}$$

能量本征方程可以写成

$$\psi''+k^2\psi-\frac{C}{a}[\delta(x)+\delta(x-a)]\psi=0 \tag{2}$$

在 $x=0$ 附近积分，可得 ψ' 跃变条件

$$\psi'(0^+)-\psi'(0^-)=\frac{C}{a}\psi(0) \tag{3}$$

类似地，$x=a$ 处 ψ' 跃变条件为

$$\psi'(a+0)-\psi'(a-0)=\frac{C}{a}\psi(a) \tag{4}$$

$\psi(x)$ 则应该是全空间的连续函数.

除了 $x=0,a$ 两个奇点外，式(2)化为

$$\psi''+k^2\psi=0 \tag{5}$$

特解为 $\psi=\mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}kx}$. 如取入射波为 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$，则总波函数可以表示成

$$\psi(x)=\begin{cases}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+R\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}, & x<0\\ A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}, & 0<x<a\\ D\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}, & x>a\end{cases} \tag{6}$$

其中 R 项为反射波，D 项为透射波. $|R|^2$ 即反射概率，$|D|^2$ 即透射概率.

为了求出 R 和 D，可以利用 ψ 的连续条件和 ψ' 跃变条件. 由 $\psi(0)$ 连续以及式(3)，得到关系

$$1+R=A+B$$

$$\mathrm{i}k(A-B-1+R)=\frac{C}{a}(A+B) \tag{7}$$

由 $\psi(a)$ 连续以及式(4)，得到关系

$$A\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}=D\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}$$

$$\mathrm{i}k(D-A)\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}+\mathrm{i}kB\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}=\frac{C}{a}D\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} \tag{8}$$

式(7)和(8)共 4 个方程，恰好可以解出 R、D、A、B.

由式(7)得到

$$B=(\mathrm{i}\theta-1)A-\mathrm{i}\theta \tag{9}$$

$$R=\mathrm{i}\theta A-(1+\mathrm{i}\theta) \tag{10}$$

其中

$$\theta=\frac{2ak}{C}=\frac{k\hbar^2}{mV_0} \tag{11}$$

注意 C 和 θ 均为无量纲参数. 由式(8)得到

$$D=\frac{\theta}{\theta+\mathrm{i}}A=\mathrm{i}\theta B\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}ak} \tag{12}$$

将式(9)代入式(12),即可解出 A、B、D,再利用式(10),即可求出 R. 结果如下:

$$A=\frac{\theta^2+\mathrm{i}\theta}{(\theta+\mathrm{i})^2+\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ak}},\qquad B=\frac{-\mathrm{i}\theta\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ak}}{(\theta+\mathrm{i})^2+\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ak}}$$
$$R=\frac{1-\mathrm{i}\theta-(1+\mathrm{i}\theta)\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ak}}{(\theta+\mathrm{i})^2+\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ak}},\quad D=\frac{\theta^2}{(\theta+\mathrm{i})^2+\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ak}} \tag{13}$$

容易验证 $|R|^2+|D|^2=1$,这是概率守恒的具体体现.

完全透射条件为 $R=0$,即

$$\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ak}=\frac{1-\mathrm{i}\theta}{1+\mathrm{i}\theta}=\frac{C-2\mathrm{i}ak}{C+2\mathrm{i}ak} \tag{14}$$

这时透射波振幅 D 可以表示成

$$D=\frac{\theta-\mathrm{i}}{\theta+\mathrm{i}} \tag{15}$$

讨论 **1°** 如保持 V_0 不变,而 $a\to 0$,即两个 δ 势垒合而为一,$V(x)\to 2V_0\delta(x)$,这时透射概率为

$$|D|^2=\frac{1}{\left|1+\dfrac{2\mathrm{i}}{\theta}\right|^2}=\frac{1}{1+\dfrac{4m^2V_0^2}{\hbar^4k^2}} \tag{16}$$

这正是粒子对于单 δ 势垒的透射概率(参看题 2.3).

2° 如果粒子的入射能量很小,$ak\ll 1$,这时完全透射条件(14)的解为

$$C=-2\quad(\text{即}\ \theta=-ak) \tag{17}$$

只有双 δ 势阱($V_0<0$)散射才可能出现这种情况.

3° 如果 $|C|$ 很小,而 $|\theta|\gg 1$,这时完全透射条件(14)的解为

$$k\approx\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{a}+\frac{1}{a\theta}$$
$$\approx\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{a}\left[1+\frac{C}{2\pi^2\left(n+\frac{1}{2}\right)^2}\right],\quad n=0,1,2,\cdots \tag{18}$$

如果 $|C|\gg 2n\pi$,而 $|\theta|\ll 1$,这时式(14)的解为

$$k\approx\frac{n\pi}{a}-\frac{\theta}{a}\approx\frac{n\pi}{a}\left(1-\frac{2}{C}\right),\quad n=1,2,\cdots \tag{19}$$

相应的能量为 $E=\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}$.

2.7　粒子在势场

$$V(x)=\begin{cases}V_0\delta(x), & |x|<a\\ \infty, & |x|\geqslant a\end{cases}$$

(即无限深势阱的中央有一个δ势垒)中运动,求能级公式,并讨论 V_0 很大和很小的极限情况.

解　在 $V(x)\to\infty$ 处 $\psi\to 0$,所以边界条件为

$$|x|\geqslant a,\quad \psi(x)=0 \tag{1}$$

在阱内($|x|<a$),能量本征方程为

$$\psi''+\frac{2m}{\hbar^2}[E-V_0\delta(x)]\psi=0 \tag{2}$$

和题 2.1 类似,$x=0$ 处 ψ' 的跃变条件为

$$\psi'(0^+)-\psi'(0^-)=\frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi(0) \tag{3}$$

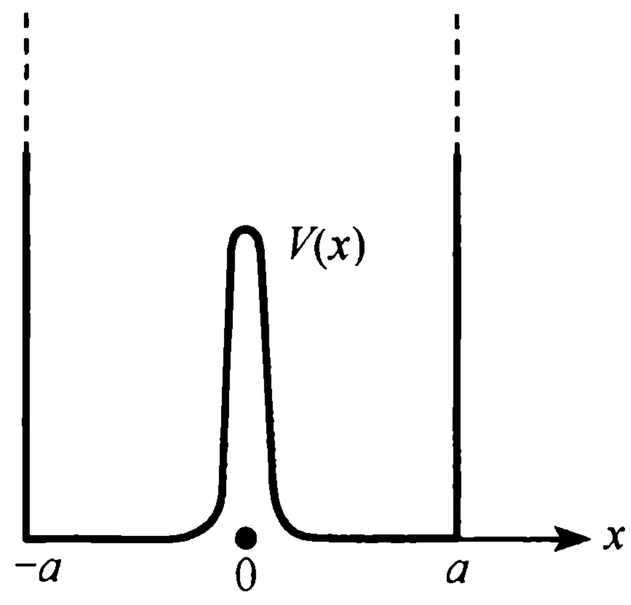


图 2.7

ψ 则是连续的.$V(x)$ 为偶函数,所以各能量本征态均有确定的宇称.令

$$k=\sqrt{2mE}/\hbar \tag{4}$$

在 $x\neq 0$ 处,式(2)可以写成

$$\psi''+k^2\psi=0,\quad -a<x<0,\quad 0<x<\alpha \tag{5}$$

特解为

$$\psi=\sin kx,\quad \cos kx$$

在 $x>0$ 和 $x<0$ 两个区域,$\psi(x)$ 均可表示成 $\sin kx$ 和 $\cos kx$ 的线性叠加,同时还要满足边界条件(1)和 ψ' 跃变条件(3).

先讨论奇宇称态,由于 $\psi(-x)=-\psi(x)$,当 $x\to 0$,必有 $\psi(0)=0$,则由式(3)就有 $\psi'(0^+)=\psi'(0^-)$,即 ψ' 在 $x=0$ 处是连续的.由此可见,δ势垒的存在对奇宇称态并无影响,波函数和能级应和无限深势阱的相同,波函数为

$$\psi(x)=C\sin kx,\quad -a<x<a$$

由边界条件(1),得到

$$k=n\pi/a,\quad n=1,2,3,\cdots \tag{6}$$

因此,能级为

$$E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}=\frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2,\quad n=1,2,3,\cdots \tag{7}$$

归一化的能量本征函数为

$$\psi_n(x)=\frac{1}{\sqrt{a}}\sin\frac{n\pi x}{a},\quad n=1,2,3,\cdots \tag{8}$$

偶宇称态,$\psi(-x)=\psi(x)$,在阱内区域满足式(5)的解为

$$\psi(x)=\begin{cases}A\cos kx+B\sin kx, & 0<x<a\\ A\cos kx-B\sin kx, & -a<x<0\end{cases} \tag{9}$$

由边界条件(1),得到

$$A\cos ka+B\sin ka=0 \tag{10}$$

由 ψ' 跃变条件(3),得到

$$Bk=mV_0A/\hbar^2 \tag{11}$$

式(11)给出

$$\frac{A}{B}=\frac{\hbar^2k}{mV_0} \tag{11'}$$

代入式(10)即得能级方程

$$\boxed{\tan ka=-\frac{\hbar^2}{mV_0a}ka=-\frac{b}{a}ka} \tag{12}$$

其中 $b=\hbar^2/mV_0$ 是 δ 势垒的特征长度,给定 a,b 后,可用图解法或数值解法求出 k 的特征值,从而求出能级 E.

当 $a\gg bn\pi$,即 $V_0\gg n\pi\hbar^2/ma$,式(12)的近似解为

$$\tan ka\approx 0,\quad ka\approx n\pi,\quad n=1,2,3,\cdots \tag{13}$$

能级为

$$E\approx\frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2,\quad n=1,2,3,\cdots \tag{14}$$

这种情况下 δ 势垒近似于“不透明”的,它将原来的无限深势阱分隔成两个宽为 a 的无限深势阱,式(14)即其能级公式.

当 $a\ll b$,即 $V_0\ll\hbar^2/ma$,式(12)的近似解为

$$\cot ka\approx 0,\quad ka\approx\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi,\quad n=0,1,2,\cdots \tag{15}$$

能级为

$$E=\frac{1}{2m}\left[\frac{(2n+1)\pi\hbar}{2a}\right]^2,\quad n=0,1,2,\cdots \tag{16}$$

式(15)和(16)相当于完全略去 δ 势垒的作用,式(16)正是无限深势阱中偶宇称态的能级公式. 式(7)和(16)可以统一写成

$$E_n = \frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{2a}\right)^2, \quad n = 1,2,3,\cdots \tag{17}$$

偶宇称态 n 取奇数，奇宇称态 n 取偶数.

现在来求在条件 $V_0 \ll \hbar^2/ma$ 下偶宇称态稍为精确一些的能级表达式. 代替式(15)，令

$$ka = \left(n+\frac{1}{2}\right)\pi + \theta, \quad \theta \ll \pi/2 \tag{18}$$

则

$$\tan ka = -\cot\theta \approx -1/\theta$$

代入能级方程(12)，即得

$$\theta \approx \frac{a}{bka} \approx a\Big/\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi b = mV_0 a\Big/\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi\hbar^2 \tag{19}$$

能级公式为

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\left[\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi + \theta\right]^2$$

略去 θ^2 项(即 V_0^2 项)，即得

$$E \approx \frac{1}{2m}\left[\frac{(2n+1)\pi\hbar}{2a}\right]^2 + \frac{V_0}{a}, \quad n = 0,1,2,\cdots \tag{20}$$

这个结果相当于将 δ 势垒视为微扰时能级的微扰论一级近似.

2.8　质量为 m 的粒子束以动量 $p = \hbar k$ 从 $x = -\infty$ 处入射，受到周期性 δ 势垒

$$V(x) = V_0 \sum_{n=0}^{\infty} \delta(x - na), \quad a > 0$$

的作用，求能够出现完全反射的动量值.

解　在 x 表象中直接计算，以便更加形象地分析在各个 δ 势垒处波的反射和透射情况. 为了便于讨论，先设 δ 势垒总数为 N，最后再令 $N \to \infty$. 各势垒位置为

$$x = 0, a, 2a, \cdots, (N-1)a$$

它们将空间分隔成 $(N+1)$ 个区域，我们将称区域 $(n-1)a < x < na$ 为第 n 区. [$x<0$ 为第 0 区，$x > (N-1)a$ 为第 N 区.]波函数 $\psi(x)$ 满足能量本征方程

$$\psi'' + k^2\psi - \frac{2mV_0}{\hbar^2}\sum_n \delta(x - na)\psi(x) = 0 \tag{1}$$

在各个区域中，式(1)的解只能取 $e^{\pm ikx}$ 的形式. 设第 n 区中波函数为

$$\psi_n(x) = D_n e^{ikx} + R_n e^{-ikx} \tag{2}$$

在 $x=na$ 处,ψ 的连续条件要求

$$\psi_n(na)=\psi_{n+1}(na),\quad n=0,1,\cdots,(N-1) \tag{3}$$

$x=na$ 处 ψ' 的跃变条件为

$$\psi'_{n+1}(na)-\psi'_n(na)=\frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi_n(na) \tag{4}$$

在波函数取式(2)的情况下,式(3)、(4)给出

$$R_{n+1}-R_n=(D_n-D_{n+1})\mathrm{e}^{2ina k} \tag{5}$$

$$R_{n+1}-R_n=\mathrm{i}\alpha(R_n+D_n\mathrm{e}^{2ina k}) \tag{6}$$

其中

$$\alpha=\frac{mV_0}{k\hbar^2} \tag{7}$$

各系数 D_n、R_n 原则上可由式(5)、(6)解出.但如动量 $\hbar k$ 是任意给定的,结果较复杂,这里不讨论.下面只讨论下式成立时有何结论:

$$\mathrm{e}^{2ina k}=1,\quad n=0,1,2,\cdots$$

这时式(5)给出

$$\begin{aligned}
&D_0-D_1=R_1-R_0\\
&D_1-D_2=R_2-R_1\\
&\cdots\cdots\\
&D_n-D_{n+1}=R_{n+1}-R_n\\
&\cdots\cdots\\
&D_{N-1}-D_N=-R_{N-1}
\end{aligned} \tag{8}$$

(最后一个区域中只有透射波,$R_N=0$.)以上各式相加,即得

$$D_0+R_0=D_N \tag{9}$$

其中 D_0 为入射波振幅,R_0 为反射波振幅,D_N 为最后的透射波振幅,因此

$$\text{反射概率}=|R_0/D_0|^2,\quad \text{透射概率}=|D_N/D_0|^2 \tag{10}$$

概率守恒要求

$$|D_0|^2=|R_0|^2+|D_N|^2 \tag{11}$$

式(9)、(11)表明,D_0、R_0、D_N 作为复数,应该在复平面上构成直角三角形的三边,如图 2.8 所示.

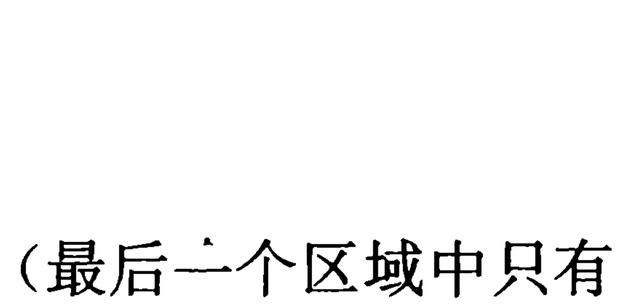


图 2.8

式(8)给出

$$R_n+D_n=R_{n+1}+D_{n+1}=\cdots=D_n \tag{12}$$

式(6)给出

$$R_{n+1}-R_n=\mathrm{i}\alpha(R_n+D_n)=\mathrm{i}\alpha D_N,\quad n=0,1,2,\cdots \tag{13}$$

即

$$R_1-R_0=R_2-R_1=\cdots=-R_{N-1}=\mathrm{i}\alpha D_N$$

容易解出

$$-R_0=iN\alpha D_N,\quad -R_1=\mathrm{i}(N-1)\alpha D_N,\cdots \tag{14}$$

给定入射波 $D_0\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$ 后，由于 $|R_0|\leqslant|D_0|$，当 δ 势垒总数 N 趋于∞时，必有 $D_N\to0$，则式(9)给出

$$R_0\to -D_0\quad (N\to\infty)$$

亦即透射概率为 0，反射概率为 1. 由式(14)还可看出，各 $R_n(n=0,1,2,\cdots)$ 是“同相”的，其数值则按等差数列逐级递减. 各 D_N 也按同样的规律变化.

第三章　谐　振　子

3.1　一维谐振子的 Hamilton 算符为

$$\boxed{H=\frac{1}{2m}p^2+\frac{1}{2}m\omega^2x^2} \tag{1}$$

x 与 p 满足基本对易式

$$[x,p]=xp-px=\mathrm{i}\hbar \tag{2}$$

引入无量纲算符

$$Q=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x,\quad P=\frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}p \tag{3}$$

$$\boxed{a=\frac{1}{\sqrt{2}}(Q+\mathrm{i}P),\quad a^+=\frac{1}{\sqrt{2}}(Q-\mathrm{i}P)} \tag{4}$$

(a) 计算$[Q,P]$,$[a,a^+]$,$[a,a^+a]$,$[a^+,a^+a]$;

(b) 将 H 用a、a^+表示,并求出全部能级;

(c) 在能量表象中,计算 a、a^+、Q、P、x、p 的矩阵元.

解　(a) 利用基本对易式(2),容易算出

$$[Q,P]=\frac{1}{\hbar}[x,p]=\mathrm{i} \tag{5}$$

$$[a,a^+]=\frac{1}{2}[Q+\mathrm{i}P,Q-\mathrm{i}P]=-\mathrm{i}[Q,P]=1 \tag{6}$$

利用式(6),可以进一步求出

$$[a,a^+a]=[a,a^+]a=a \tag{7}$$

$$[a^+,a^+a]=a^+[a^+,a]=-a^+ \tag{8}$$

(b) 根据定义式(4),可得

$$\begin{aligned}a^+a&=\frac{1}{2}(Q-\mathrm{i}P)(Q+\mathrm{i}P)\\&=\frac{1}{2}(Q^2+P^2)+\frac{\mathrm{i}}{2}(QP-PQ)\\&=\frac{1}{2}(Q^2+P^2-1)\end{aligned} \tag{9}$$

因此，Hamilton 算符可以写成

$$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2=\frac{1}{2}\hbar\omega(P^2+Q^2)=\hbar\omega\left(a^+a+\frac{1}{2}\right) \tag{10}$$

对于任何态矢量$|\psi\rangle$，均有

$$\langle\psi|a^+a|\psi\rangle=|a|\psi\rangle|^2\geqslant 0 \tag{11}$$

因此

$$\langle H\rangle=\langle\psi|H|\psi\rangle\geqslant\frac{1}{2}\hbar\omega$$

如ψ为能量本征态，则$\langle H\rangle=E$(能量本征值)，上式即

$$E\geqslant\frac{1}{2}\hbar\omega \tag{12}$$

此式规定了能级的下限.

由式(7)及(10)，可得

$$[a,H]=[a,a^+a]\hbar\omega=a\hbar\omega$$

亦即

$$a(H-\hbar\omega)=Ha \tag{13}$$

将算符关系(13)作用于任何一个能量本征态矢量$|E'\rangle$(E'为相应的能量本征值)，得到

$$Ha|E'\rangle=a(H-\hbar\omega)|E'\rangle=(E'-\hbar\omega)a|E'\rangle \tag{14}$$

这结果表明，如$a|E'\rangle\neq 0$，它就是H的另一个本征态矢量，本征值为$(E'-\hbar\omega)$. 重复这个推理过程，易知

$$E',E'-\hbar\omega,E'-2\hbar\omega,\cdots$$

都是能量本征值. 但是，由于$E\geqslant\hbar\omega/2$，这个数列必须终止于某个最小值E_0，即$(E_0-\hbar\omega)$不再是能量本征值. 其条件为

$$a|E_0\rangle=0 \tag{15}$$

因此，利用式(10)即得

$$H|E_0\rangle=\hbar\omega\left(a^+a+\frac{1}{2}\right)\left|E_0\right\rangle=\frac{\hbar\omega}{2}\left|E_0\right\rangle$$

亦即

$$E_0=\hbar\omega/2 \tag{16}$$

这就是基态能量.

类似地,由式(8)及(10),可得

$$Ha^+ = a^+(H+\hbar\omega) \tag{17}$$

因此

$$Ha^+|E'\rangle = (E'+\hbar\omega)a^+|E'\rangle \tag{18}$$

即 $a^+|E'\rangle$ 也是 H 的本征态矢量,本征值为 $(E'+\hbar\omega)$. 重复这个推理过程,可知

$$E', E'+\hbar\omega, E'+2\hbar\omega, \cdots \tag{19}$$

都是能量本征值. 利用式(6),H 可以写成

$$H = \hbar\omega\left(aa^+ - \frac{1}{2}\right)$$

将此式作用于 $|E'\rangle$,由于 $E' \geqslant \hbar\omega/2$,因此 $a^+|E\rangle$ 不可能等于 0. 由此可知数列(19)没有上限.

综合以上分析,可知全部能级为

$$\boxed{E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0,1,2,\cdots} \tag{20}$$

相应的本征态矢量记为 $|n\rangle$,在 x 表象中波函数记为 $\psi_n(x)$,并规定它们都是归一化的. 一维束缚态是不简并的,各本征态矢量互相正交,正交归一化条件可以表示成

$$\langle n' \mid n\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_{n'}(x)\psi_n(x)\mathrm{d}x = \delta_{n'n} \tag{21}$$

各 $\psi_n(x)$ 为实函数,$\psi_n = \psi_n^*$.

由本征方程

$$H \mid n\rangle = E_n \mid n\rangle = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \mid n\rangle$$

以及 H 的表示式(10),即得

$$\boxed{a^+ a \mid n\rangle = n \mid n\rangle} \tag{22}$$

因此,常称 a^+a 为量子数算符,并记为

$$a^+ a = \hat{n} \tag{23}$$

在二次量子化理论中,$\hat{n} = a^+a$ 也称粒子数算符.

(c) 上述推导能级的过程中,已经证明算符 a、a^+ 对于能量本征态的作用结果是

$$\begin{aligned} a \mid n\rangle &= \lambda(n) \mid n-1\rangle \\ a^+ \mid n\rangle &= \nu(n) \mid n+1\rangle \end{aligned} \tag{24}$$

λ、ν 为待定系数. 上式的共轭方程是

$$\begin{aligned}\langle n \mid a^{+} &= \lambda^{*}(n)\langle n-1 \mid \\ \langle n \mid a &= \nu^{*}(n)\langle n+1 \mid\end{aligned} \tag{24'}$$

式(24′)和(24)相乘(取内积),并利用式(22)以及式(6),即得

$$\lambda^{*}\lambda = \langle n \mid a^{+}a \mid n\rangle = n$$

$$\nu^{*}\nu = \langle n \mid aa^{+} \mid n\rangle = \langle n \mid (a^{+}a+1) \mid n\rangle = n+1$$

适当选择态矢量$|n\rangle$的相因子($e^{i\alpha}$),总可使各 λ 和 ν 为非负实数,因此

$$\lambda(n) = \sqrt{n}, \quad \nu(n) = \sqrt{n+1} \tag{25}$$

即

$$\boxed{a \mid n\rangle = \sqrt{n} \mid n-1\rangle, \quad a^{+} \mid n\rangle = \sqrt{n+1} \mid n+1\rangle} \tag{26}$$

由此可知,在能量表象中,a 和 a^{+} 唯一不等于 0 的矩阵元是

$$\begin{aligned}a_{n-1,n} &= \langle n-1 \mid a \mid n\rangle = \sqrt{n} \\ a^{+}_{n+1,n} &= \langle n+1 \mid a^{+} \mid n\rangle = \sqrt{n+1}\end{aligned} \tag{27}$$

亦即

$$\begin{aligned}a_{n'n} &= \langle n' \mid a \mid n\rangle = \sqrt{n}\,\delta_{n',n-1} \\ a^{+}_{nn'} &= \langle n \mid a^{+} \mid n'\rangle = a_{n'n} = \sqrt{n}\,\delta_{n,n'+1}\end{aligned} \tag{28}$$

利用式(4),可将 Q、P 表示成 a、a^{+},

$$Q = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^{+}+a), \quad P = \frac{i}{\sqrt{2}}(a^{+}-a) \tag{29}$$

由式(26),易得

$$Q \mid n\rangle = \sqrt{\frac{n+1}{2}} \mid n+1\rangle + \sqrt{\frac{n}{2}} \mid n-1\rangle \tag{30}$$

$$P \mid n\rangle = i\sqrt{\frac{n+1}{2}} \mid n+1\rangle - i\sqrt{\frac{n}{2}} \mid n-1\rangle \tag{31}$$

不等于 0 的矩阵元为

$$\begin{aligned}Q_{n+1,n} &= Q_{n,n+1} = \sqrt{\frac{n+1}{2}} \\ P_{n+1,n} &= -P_{n,n+1} = i\sqrt{\frac{n+1}{2}}\end{aligned} \tag{32}$$

类似地,x、p 也可表示成 a、a^{+},

$$x=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}Q=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a^{+}+a)$$
$$p=\sqrt{m\omega\hbar}P=\mathrm{i}\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(a^{+}-a) \tag{33}$$

由式(26),得到

$$x\mid n\rangle=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{n+1}\mid n+1\rangle+\sqrt{n}\mid n-1\rangle) \tag{34}$$

$$p\mid n\rangle=\mathrm{i}\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\sqrt{n+1}\mid n+1\rangle-\sqrt{n}\mid n-1\rangle) \tag{35}$$

将它们写成波函数的形式,就是

$$x\psi_n(x)=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}[\sqrt{n+1}\psi_{n+1}(x)+\sqrt{n}\psi_{n-1}(x)] \tag{34'}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_n(x)=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}[\sqrt{n}\psi_{n-1}(x)-\sqrt{n+1}\psi_{n+1}(x)] \tag{35'}$$

x、p 的不等于 0 的矩阵元为

$$x_{n+1,n}=x_{n,n+1}=\left(\frac{n+1}{2}\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2}$$
$$p_{n+1,n}=-p_{n,n+1}=\mathrm{i}\left(\frac{n+1}{2}m\omega\hbar\right)^{1/2} \tag{36}$$

注意

$$p_{n+1,n}=\mathrm{i}m\omega x_{n+1,n}$$
$$p_{n,n+1}=-\mathrm{i}m\omega x_{n,n+1} \tag{37}$$

式(26)反映了算符 a^{+} 和 a 的主要性质,因此常将 a^{+} 和 a 分别称为量子数升、降算符. 在二次量子化理论中,则将 a^{+} 和 a 分别称为产生、消灭算符.

3.2 利用升、降算符 a^{+}、a,求谐振子的能量本征函数(x 表象),并扼要讨论其数学性质.

解 从基态波函数 $\psi_0(x)$ 开始. 根据题 3.1 式(26),

$$a\mid 0\rangle=0 \tag{1}$$

在 x 表象中写出来,就是

$$(\mathrm{i}\hat{p}+m\omega x)\psi_0(x)=\left(\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}+m\omega x\right)\psi_0(x)=0 \tag{2}$$

令 $\alpha=\sqrt{m\omega/\hbar}$,上式可以写成

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_0 + \alpha^2 x\psi_0 = 0 \tag{2'}$$

容易解出

$$\boxed{\psi_0(x) = N_0 \mathrm{e}^{-\alpha^2 x^2/2}} \tag{3}$$

式中 N_0 为归一化常数. 由归一化条件

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n(x)|^2 \mathrm{d}x = 1 \tag{4}$$

求出(取为实数)

$$N_0 = \sqrt{\alpha}/\pi^{1/4} \tag{5}$$

其次,题 3.1 式(26)中令 $n=0$,可得

$$a^+ |0\rangle = |1\rangle$$

即

$$\psi_1(x) = a^+\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha x - \frac{1}{\alpha}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\psi_0(x) \tag{6}$$

将式(3)及(5)代入式(6),容易求出

$$\psi_1 = \sqrt{2}\alpha x\psi_0 = \frac{\sqrt{2\alpha}}{\pi^{1/4}}\alpha x \mathrm{e}^{-\alpha^2 x^2/2} \tag{7}$$

普遍地,由题 3.1 式(26)可得

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n}}a^+\psi_{n-1} = \frac{1}{\sqrt{2n}}\left(\alpha x - \frac{1}{\alpha}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\psi_{n-1} \tag{8}$$

引入无量纲变量

$$\xi = \alpha x \tag{9}$$

(ξ 即题 3.1 中的 Q.)可将式(8)写成

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{2n}}\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)\psi_{n-1} \tag{10}$$

依次递推,可得

$$\psi_n = \left(\frac{1}{2^n n!}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^n\psi_0 = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^n \mathrm{e}^{-\xi^2/2} = N_n H_n(\xi)\mathrm{e}^{-\xi^2/2} \tag{11}$$

其中

$$N_n = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{12}$$

为归一化常数. 注意

$$N_n = N_{n-1}/\sqrt{2n} \tag{13}$$

式(11)中,

$$H_n(\xi) = \mathrm{e}^{\xi^2/2}\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^n \mathrm{e}^{-\xi^2/2} \tag{14}$$

易见 $H_n(\xi)$是 ξ 的 n 次多项式,称为 Hermite 多项式.

下面扼要讨论 $H_n(\xi)$的数学性质.

1° 宇称

由式(14)显而易见

$$H_n(-\xi) = (-1)^n H_n(\xi) \tag{15}$$

当 n 为偶数时,$H_n(\xi)$为偶宇称;n 为奇数时,$H_n(\xi)$为奇宇称.

2° 递推关系

由题 3.1 的式(26),

$$a\psi_n = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)\psi_n = \sqrt{n}\psi_{n-1}$$

将式(11)代入上式,并利用式(13)消去归一化常数,即得

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}H_n(\xi) = 2nH_{n-1}(\xi)} \tag{16}$$

另外,题 3.1 的式(30)即

$$\xi\psi_n = \sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1} + \sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}$$

将式(11),(13)代入此式,即得

$$\boxed{2\xi H_n(\xi) = H_{n+1}(\xi) + 2nH_{n-1}(\xi)} \tag{17}$$

3° 微分方程

将式(16),(17)合并,消去 H_{n-1},再微分一次,并利用式(16)再消去 $\mathrm{d}H_{n+1}/\mathrm{d}\xi$,即得 H_n 满足如下微分方程:

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}H_n(\xi) - 2\xi\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}H_n(\xi) + 2nH_n(\xi) = 0 \tag{18}$$

此方程称为 Hermite 方程. 式(14)是这个方程唯一的多项式解.

4°　微分表达式

式(14)和下式等价：

$$H_n(\xi) = (-1)^n \mathrm{e}^{\xi^2} \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^n \mathrm{e}^{-\xi^2} \tag{14'}$$

可用数学归纳法证明如下. 首先，当 $n=0,1$ 时，式(14)和(14′)均给出

$$H_0(\xi) = 1, \quad H_1(\xi) = 2\xi$$

设 $n=k$ 时命题成立，即设

$$\mathrm{e}^{\xi^2} \left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^k \mathrm{e}^{-\xi^2} = \mathrm{e}^{\xi^2/2} \left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^k \mathrm{e}^{-\xi^2/2} = H_k(\xi)$$

则

$$\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^{k+1} \mathrm{e}^{-\xi^2} = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}(\mathrm{e}^{-\xi^2} H_k) = (2\xi H_k - H_k')\mathrm{e}^{-\xi^2}$$

$$\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^{k+1} \mathrm{e}^{-\xi^2/2} = \left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)(\mathrm{e}^{-\xi^2/2} H_k) = (2\xi H_k - H_k')\mathrm{e}^{-\xi^2/2}$$

因此

$$\mathrm{e}^{\xi^2} \left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^{k+1} \mathrm{e}^{-\xi^2} = 2\xi H_k - H_k' = \mathrm{e}^{\xi^2/2} \left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^{k+1} \mathrm{e}^{-\xi^2/2}$$

即 $n=k+1$ 时命题成立. 证明完毕.

5°　$H_n(0)$和 $\psi_n(0)$

当 $n=2k+1$(奇数)，由式(15)，有

$$H_{2k+1}(-\xi) = -H_{2k+1}(\xi)$$

令 $\xi \to 0$，即得

$$H_{2k+1}(0) = 0, \quad k = 1,2,3,\cdots \tag{19}$$

当 $n=2k$(偶数)，在式(17)中令 $\xi \to 0$，并将 n 换成$(n-1)$，即得

$$H_{2k}(0) = -2(2k-1)H_{2k-2}(0)$$

反复利用此式，并注意 $H_0=1$，即得

$$H_{2k}(0) = (-1)^k 2^k (2k-1)!! = (-1)^k (2k)!/k! \tag{20}$$

再利用式(11)、(12)，即得

$$\psi_{2k+1}(0) = 0 \tag{21}$$

$$\psi_{2k}(0) = (-1)^k \frac{\sqrt{\alpha}}{\pi^{1/4}} \frac{\sqrt{(2k)!}}{(2k)!!} \tag{22}$$

$$[\psi_{2k}(0)]^2 = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \frac{(2k)!}{[(2k)!!]^2} = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \frac{(2k-1)!!}{(2k)!!} \tag{23}$$

3.3 对于谐振子的能量本征态$|n\rangle$,计算x、p、x^2、p^2的平均值及Δx、Δp.

解 由题3.1式(34)、(35),$x|n\rangle$及$p|n\rangle$均可表示成$|n+1\rangle$和$|n-1\rangle$的线性叠加.由正交归一化条件

$$\langle n \mid n' \rangle = \delta_{nn'} \tag{1}$$

可知

$$\begin{aligned} \overline{x} &= \langle n \mid x \mid n \rangle = 0 \\ \overline{p} &= \langle n \mid p \mid n \rangle = 0 \end{aligned} \tag{2}$$

这个结论也可以利用波函数$\psi_n(x)$的宇称性而得出.

由题3.1的式(33),有

$$x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}(a^+ + a)^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}(a^2 + a^{+2} + 2\hat{n} + 1) \tag{3}$$

$$p^2 = -\frac{m\omega\hbar}{2}(a^+ - a)^2 = \frac{m\omega\hbar}{2}(2\hat{n} + 1 - a^2 - a^{+2}) \tag{4}$$

由于

$$\begin{aligned} a^2 \mid n\rangle &= \sqrt{n(n-1)} \mid n-2\rangle \\ a^{+2} \mid n\rangle &= \sqrt{(n+1)(n+2)} \mid n+2\rangle \end{aligned}$$

根据正交条件(1),即得

$$\langle n \mid a^2 \mid n\rangle = 0, \quad \langle n \mid a^{+2} \mid n\rangle = 0$$

因此

$$\overline{x^2} = \langle n \mid x^2 \mid n\rangle = \frac{\hbar}{m\omega}\left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{5}$$

$$\overline{p^2} = \langle n \mid p^2 \mid n\rangle = m\omega\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{6}$$

$$\Delta x = (\overline{x^2} - \overline{x}^2)^{\frac{1}{2}} = \left[\frac{\hbar}{m\omega}\left(n + \frac{1}{2}\right)\right]^{\frac{1}{2}} \tag{7}$$

$$\Delta p = (\overline{p^2} - \overline{p}^2)^{\frac{1}{2}} = \left[m\omega\hbar\left(n + \frac{1}{2}\right)\right]^{\frac{1}{2}} \tag{8}$$

$$\boxed{\Delta x \cdot \Delta p = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar} \tag{9}$$

对于基态,$n=0$,$\Delta x \cdot \Delta p = \hbar/2$,刚好是不确定度关系所规定的下限.

3.4　电荷为 q 的谐振子，能量算符为

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \tag{1}$$

能量本征函数记为 $\psi_n(x)$，能级记为 $E_n^{(0)}$. 如外加均匀电场 $\mathscr{E}$，使振子额外受力 $f = q\mathscr{E}$，从而总能量算符变成

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - q\mathscr{E}x \tag{2}$$

新的能级记为 E_n，本征函数记为 $\varphi_n(x)$. 求 E_n 和 φ_n，并将 φ_n 用 ψ_n 表示出来.

解一　H_0 和 H 中，p 是动量算符，

$$p = -\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$$

式(2)中势能项可以写成

$$\frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - q\mathscr{E}x = \frac{1}{2}m\omega^2[(x - x_0)^2 - x_0^2]$$

其中

$$x_0 = \frac{q\mathscr{E}}{m\omega^2} \tag{3}$$

如作坐标平移，令

$$x' = x - x_0 \tag{4}$$

由于

$$p = -\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} = -\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x'} = p' \tag{5}$$

H 可以表示成

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

比较式(1)和(6)，易见 H 和 H_0 的差别在于变量由 x 换成 x'，并添加了常数项 $\left(-\frac{1}{2}m\omega^2 x_0^2\right)$. 由此可知

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

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

如所周知，自由振子的能级为

$$E_n^{(0)} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0,1,2,\cdots \tag{9}$$

因此

$$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{1}{2}m\omega^2 x_0^2$$
$$= \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{q^2\mathscr{E}^2}{2m\omega^2} \tag{10}$$

如引入坐标平移算符

$$D_x(x_0) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}x_0 p/\hbar} = \mathrm{e}^{-x_0\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}} \tag{11}$$

它对波函数的作用是

$$D_x(x_0)\psi(x) = \psi(x-x_0) \tag{11'}$$

则 H 和 H_0 的本征函数可用平移算符联系起来：

$$\boxed{\varphi_n(x) = \psi_n(x-x_0) = D_x(x_0)\psi_n(x)} \tag{12}$$

反之，

$$\psi_n(x) = \varphi_n(x+x_0) = D_x(-x_0)\varphi_n(x) \tag{12'}$$

解二 利用谐振子的升、降算符

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x+\frac{\mathrm{i}}{m\omega}p\right), \quad a^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x-\frac{\mathrm{i}}{m\omega}p\right) \tag{13}$$

将 H_0 及 H 表示成

$$H_0 = \left(a^+ a+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{14}$$

$$H = \left(a^+ a+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega - q\mathscr{E}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a+a^+) \tag{15}$$

引入

$$x_0 = q\mathscr{E}/m\omega^2 \tag{3}$$

则

$$H = \hbar\omega\left[a^+ a+\frac{1}{2} - x_0\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(a+a^+)\right]$$
$$= \hbar\omega\left[\left(a^+ - x_0\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\right)\left(a - x_0\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\right)+\frac{1}{2} - \frac{m\omega x_0^2}{2\hbar}\right]$$
$$= \hbar\omega\left[(a^+-\alpha_0)(a-\alpha_0)+\frac{1}{2}\right] - \frac{1}{2}m\omega^2 x_0^2 \tag{16}$$

其中

$$\alpha_0 = x_0 \sqrt{m\omega/2\hbar} \tag{17}$$

比较式(14)、(16)，H 和 H_0 的差别在于 $a \to a-\alpha_0$，$a^+ \to a^+ - \alpha_0$，以及添加了常数项$\left(-\frac{1}{2}m\omega^2 x_0^2\right)$.

在题 3.1 中，从基本对易式

$$[a, a^+] = 1 \tag{18}$$

出发，证明了能级公式(9)以及本征态之间的递推关系

$$a\psi_n = \sqrt{n}\psi_{n-1}, \quad a^- \psi_n = \sqrt{n+1}\psi_{n+1} \tag{19}$$

并得出了基态波函数满足的方程

$$a\psi_0 = 0 \tag{20}$$

由于

$$[a-\alpha_0, a^+-\alpha_0] = [a, a^+] = 1$$

所以用同样的逻辑推理也可得出 H 的本征值和本征函数的类似结论，只需在整个推导过程中用$(a-\alpha_0)$代替 a，用$(a^+-\alpha_0)$代替 a^+. H 的本征值显然就是式(10). 本征函数的递推关系及基态方程则是

$$(a-\alpha_0)\varphi_n(x) = \sqrt{n}\varphi_{n-1}(x) \tag{21}$$

$$(a^+-\alpha_0)\varphi_n(x) = \sqrt{n+1}\varphi_{n+1}(x)$$

$$(a-\alpha_0)\varphi_0(x) = 0 \tag{22}$$

$a \to (a-\alpha_0)$(以及 $a^+ \to a^+ - \alpha_0$)等价于 $x \to (x-x_0)$，因此将 $\psi_n(x)$中 x 换成$(x-x_0)$，即得

$$\varphi_n(x) = \psi_n(x-x_0) = D_x(x_0)\psi_n(x) \tag{12}$$

φ_n 和 φ_0 可以通过算符$(a^+-\alpha_0)$联系起来：

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+-\alpha_0)^n\varphi_0(x) \tag{23}$$

3.5　质量为 m 之粒子处于一维谐振子势场

$$V_1(x) = \frac{1}{2}kx^2, \quad k>0 \tag{1}$$

的基态. (a)如弹性系数 k 突然变为 $2k$，即势场变成

$$V_2(x) = kx^2 \tag{2}$$

随即测量粒子的能量，求发现粒子处于新势场 V_2 的基态的概率；(b)势场突然由

V_1 变成 V_2 后,不进行测量,经过一段时间 τ 后,势场又恢复成 V_1. 问 τ 取什么值时粒子仍恢复到原来 V_1 场的基态(概率 100%)?

解 (a) 粒子的波函数 $\psi(x,t)$ 随时间的变化应满足 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi+V\psi \tag{3}$$

当 V 发生突变(由 $V_1\to V_2$)但变化量有限时,ψ 仍是 t 的连续函数,亦即 V 突变时 ψ 不变.

如以 $\psi_0(x)$ 和 $\phi_0(x)$ 分别表示 V_1 场和 V_2 场的基态波函数,当势场突然由 V_1 变成 V_2 后,粒子的波函数仍为 ψ_0,测得粒子处于 ϕ_0 态的概率为 $|\langle\psi_0|\phi_0\rangle|^2$.

将 V_1 和 V_2 写成标准形式:

$$V_1(x)=\frac{1}{2}kx^2=\frac{1}{2}m\omega_1^2x^2 \tag{1'}$$

$$V_2(x)=kx^2=\frac{1}{2}m\omega_2^2x^2 \tag{2'}$$

易见

$$\omega_2=\sqrt{2}\omega_1 \tag{4}$$

ψ_0 和 ϕ_0 可以按照题 3.2 的式(3)和(5)写出,即

$$\psi_0(x)=\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2/2},\quad \alpha^2=m\omega_1/\hbar \tag{5}$$

$$\phi_0(x)=\left(\frac{\beta}{\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-\beta^2x^2/2},\quad \beta^2=m\omega_2/\hbar \tag{6}$$

其中

$$\beta^2/\alpha^2=\omega_2/\omega_1=\sqrt{2} \tag{7}$$

因此

$$\langle\psi_0\mid\phi_0\rangle=\sqrt{\frac{\alpha\beta}{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}(\alpha^2+\beta^2)x^2}\,\mathrm{d}x=\left(\frac{2\alpha\beta}{\alpha^2+\beta^2}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$|\langle\psi_0\mid\phi_0\rangle|^2=\frac{2\alpha\beta}{\alpha^2+\beta^2}=\frac{2\beta/\alpha}{1+\beta^2/\alpha^2}=\frac{2^{5/4}}{1+\sqrt{2}}=0.9852 \tag{8}$$

此即所求概率.

(b) 取势场第一次发生突变($V_1\to V_2$)的时刻为 $t=0$,这时波函数为

$$\psi(x,0)=\psi_0(x) \tag{9}$$

以 $\phi_n(x)$ 表示 V_2 场的能量本征态,相应于能级

$$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_2$$

将 ψ_0 展开成 ϕ_n 的线性叠加，

$$\psi_0(x) = \sum_n C_n\phi_n(x), \quad (n\text{ 只能取偶数}) \tag{10}$$

当 $0<t<\tau$，Schrödinger 方程(3)中 $V=V_2(x)$，其解为

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \sum_n C_n\phi_n(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt/\hbar}\\ &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_2t/2}\sum_n C_n\phi_n(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\omega_2t}\end{aligned} \tag{11}$$

如要求 $\psi(x,\tau)=A\psi_0(x)$，必须

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\omega_2\tau} = 1, \quad n = 0,2,4,\cdots \tag{12}$$

亦即

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_2\tau} = \pm 1 \tag{12'}$$

满足这条件的 τ 值为

$$\tau = l\pi/\omega_2 = l\pi\sqrt{\frac{m}{2k}}, \quad l = 1,2,3,\cdots \tag{13}$$

当 $t=\tau$，势场又由 V_2 变成 V_1 后，粒子即永远处于 ψ_0 态，能量 $E=\hbar\omega_1/2$.

3.6　电荷为 q 的谐振子，$t<0$ 和 $t>\tau$ 时处于自由振动状态，总能量算符为

$$H_0 = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \tag{1}$$

能量本征态记为 ψ_n，能级 $E_n^{(0)} = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$. 当 $0\leqslant t\leqslant\tau$，外加均匀电场 $\mathscr{E}$，总能量算符变成

$$H = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 - q\mathscr{E}x \tag{2}$$

H 的本征态记为 φ_n，本征值为 E_n.

设 $t\leqslant 0$ 时该谐振子处于基态 ψ_0，求 $t>\tau$ 时的波函数 $\psi(x,t)$，以及 $\psi(x,t)$ 中各能量本征态 ψ_n 的成分.

解　$t>\tau$ 时，外电场已经消失，波函数满足 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = H_0\psi(x,t) \tag{3}$$

通解为

$$\psi(x,t)=\sum_n f_n\psi_n(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n^{(0)}(t-\tau)/\hbar} \tag{4}$$

其中 ψ_n 态成分为

$$|\langle\psi_n|\psi\rangle|^2=|f_n|^2 \tag{5}$$

各系数 f_n 取决于 $t=\tau$ 时的波函数

$$\psi(x,\tau)=\sum_n f_n\psi_n(x) \tag{6}$$

所以关键是求出 $\psi(x,\tau)$.

在 $0\leqslant t\leqslant\tau$,Schrödinger 方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=H\psi(x,t) \tag{7}$$

解为

$$\psi(x,t)=\sum_n C_n\varphi_n(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt/\hbar} \tag{8}$$

其中 C_n 取决于初始波函数

$$\psi(x,0)=\psi_0(x)=\sum_n C_n\varphi_n(x) \tag{9}$$

在题 3.4 中已经证明

$$\psi_0(x)=\varphi_0(x+x_0)=D_x(-x_0)\varphi_0(x) \tag{10}$$

其中 $x_0=q\mathscr{E}/m\omega^2$. 如将位移算符 $D_x(-x_0)$表示成升降算符,

$$D_x(-x_0)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}x_0p/\hbar}=\mathrm{e}^{-a_0(a^+-a)} \tag{11}$$

再利用 Glauber 公式

$$\mathrm{e}^{A+B}=\mathrm{e}^A\mathrm{e}^B\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}[A,B]}$$

即得

$$D_x(-x_0)=\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha_0^2}\mathrm{e}^{-\alpha_0a^+}\mathrm{e}^{\alpha_0a}$$

$$=\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha_0^2}\mathrm{e}^{-\alpha_0(a^+-\alpha_0)}\mathrm{e}^{\alpha_0(a-\alpha_0)} \tag{11′}$$

其中 $\alpha_0=x_0\sqrt{m\omega/2\hbar}$. 将式(11′)代入式(10),得到

$$\psi_0(x)=\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha_0^2}\mathrm{e}^{-\alpha_0(a^+-\alpha_0)}\mathrm{e}^{\alpha_0(a-\alpha_0)}\varphi_0(x) \tag{12}$$

在题 3.4 中已经证明

$$(a-\alpha_0)\varphi_0=0 \tag{13}$$

$$(a^+-\alpha_0)^n\varphi_0=\sqrt{n!}\varphi_n \tag{14}$$

所以

$$e^{\alpha_0(a-\alpha_0)}\varphi_0 = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha_0^n}{n!}(a-\alpha_0)^n\varphi_0 = \varphi_0 \tag{12'}$$

$$\psi_0(x) = e^{-\frac{1}{2}\alpha_0^2}e^{-\alpha_0(a^+-\alpha_0)}\varphi_0$$

$$= e^{-\frac{1}{2}\alpha_0^2}\sum_n\frac{(-\alpha_0)^n}{n!}(a^+-\alpha_0)^n\varphi_0$$

$$= e^{-\frac{1}{2}\alpha_0^2}\sum_n\frac{(-\alpha_0)^n}{\sqrt{n!}}\varphi_n(x) \tag{15}$$

即 $\psi_0(x)$是以各 φ_n 为基矢组成的相干态波函数. 比较式(9)和(15),即得

$$C_n = \frac{(-\alpha_0)^n}{\sqrt{n!}}e^{-\frac{1}{2}\alpha_0^2} \tag{16}$$

将式(16)代入式(8),并利用题 3.4 求得的能级公式

$$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{1}{2}m\omega^2x_0^2$$

即得

$$\psi(x,\tau) = e^{i\delta}e^{-\frac{1}{2}\alpha_0^2}\sum_n\frac{[-\alpha(\tau)]^n}{\sqrt{n!}}\varphi_n(x) \tag{17}$$

其中

$$\alpha(\tau) = \alpha_0 e^{-i\omega\tau} \tag{18}$$

$$\delta = \frac{m\omega^2x_0^2\tau}{2\hbar} - \frac{\omega\tau}{2} \tag{19}$$

$\psi(x,\tau)$也是各 φ_n 态组成的相干态波函数.

利用式(14),可以将式(17)表示成

$$\psi(x,\tau) = e^{i\delta}e^{-\frac{1}{2}\alpha_0^2}e^{-\alpha(\tau)(a^+-\alpha_0)}\varphi_0(x) \tag{20}$$

而由式(12′),则得

$$e^{-\frac{1}{2}\alpha_0^2}\varphi_0 = e^{\alpha_0(a^+-\alpha_0)}\psi_0$$

代入式(20),即得

$$\psi(x,\tau) = e^{i\delta}e^{[\alpha_0-\alpha(\tau)](a^+-a_0)}\psi_0 = e^{i\delta}e^{-\alpha_0^2+\alpha_0\alpha(\tau)}e^{[\alpha_0-\alpha(\tau)]a^+}\psi_0 \tag{21}$$

为了将 $\psi(x,\tau)$表示成各 ψ_n 的线性叠加,可以利用公式

$$(a^+)^n\psi_0 = \sqrt{n!}\psi_n \tag{22}$$

即得

$$\psi(x,\tau) = e^{i\delta}e^{\alpha_0\alpha(\tau)-\alpha_0^2}\sum_n\frac{[\alpha_0-\alpha(\tau)]^n}{\sqrt{n!}}\psi_n(x) \tag{23}$$

其中 ψ_n 态所占成分为

$$|\langle\psi_n \mid \psi(x,\tau)\rangle|^2 = |\,e^{\alpha_0\alpha(\tau)-\alpha_0^2}\,|^2\,\frac{|\,\alpha_0-\alpha(\tau)\,|^{2n}}{n!}$$

$$=\frac{1}{n!}\left(2\alpha_0\sin\frac{\omega\tau}{2}\right)^{2n}e^{-\left(2\alpha_0\sin\frac{\omega\tau}{2}\right)^2} \tag{24}$$

容易验证

$$\sum_n |\langle\psi_n \mid \psi(x,\tau)\rangle|^2 = 1 \tag{25}$$

这是总概率守恒的具体体现.

如改变外电场作用时间 τ,则每当

$$\tau = k2\pi/\omega,\quad k=1,2,3,\cdots$$

在 $\psi(x,\tau)$中,各激发态($n\geqslant 1$)成分为 0,基态(ψ_0)成分为 1. 每当

$$\tau=(2k+1)\pi/\omega,\quad k=0,1,2,\cdots$$

$\psi(x,\tau)$中基态成分取最小值 $e^{-4\alpha_0^2}$,ψ_n 态成分为

$$|f_n|^2=\frac{(4\alpha_0^2)^n}{n!}e^{-4\alpha_0^2}$$

3.7 束缚在晶格中的原子核发生无反冲 γ 辐射,是产生 Mössbauer 效应的必要条件. 晶格中原子核所受作用势可以近似为谐振子势

$$V(x)=\frac{1}{2}M\omega^2x^2$$

M 为原子核的质量,x 为原子核质心的坐标,ω 为振动频率. 设开始时原子核的质心运动(谐振动)处于基态,$t=0$ 时,由于核内能级跃迁,沿 x 轴方向发射出一个光子,能量 E_γ,动量 E_γ/c. 由于 γ 辐射是突然发生的,可以认为原子核的质心运动受到的唯一影响是动量本征值由 p 变成($p-E_\gamma/c$). 求发射光子后原子核质心运动仍然留在基态的概率. 例如,对于 ^{57}Fe 核,$E_\gamma=18\text{keV}$,$\omega=10^{12}\,\text{Hz}$,求上述"无反冲辐射"(即没有能量传给原子)概率之值.

解 由于受到谐振子势场的作用,核的质心运动为谐振动,$t<0$ 时处于基态 $\psi_0(x)$,如将 $\psi_0(x)$按动量本征函数展开:

$$\psi_0(x)=(2\pi\hbar)^{-1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p)e^{ipx/\hbar}dp \tag{1}$$

由于发射 γ 光子,动量发生改变(总动量守恒!)由 p 变成 $p-p_0$,($p_0=E_\gamma/c$)亦即 p 表象中的波函数 $\varphi(p)$发生下列变化:

$$\varphi(p)\to\varphi(p+p_0) \tag{2}$$

因此发生 γ 辐射后，核的质心运动波函数为

$$\begin{aligned}\psi(x) &= (2\pi\hbar)^{-1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p+p_0)\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}p \\ &= (2\pi\hbar)^{-1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p')\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p'-p_0)x/\hbar}\mathrm{d}p' \\ &= \psi_0(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p_0x/\hbar}\end{aligned} \tag{3}$$

其中指数因子表示核的质心动量减少 p_0.

发射光子后，核的质心振动仍留在基态的概率为

$$P = |\langle\psi_0 \mid \psi\rangle|^2 = \left|\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_0^2(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p_0x/\hbar}\mathrm{d}x\right|^2 \tag{4}$$

利用基态波函数 ψ_0 的具体函数形式

$$\psi_0(x) = \frac{\sqrt{\alpha}}{\pi^{1/4}}\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2/2}, \quad \alpha = \sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}} \tag{5}$$

容易算出

$$\begin{aligned}\langle\psi_0 \mid \psi\rangle &= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2-\mathrm{i}p_0x/\hbar}\mathrm{d}x \\ &= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\cos\left(\frac{p_0x}{\hbar}\right)\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2}\,\mathrm{d}x \\ &= \exp\left(-\frac{p_0^2}{4\hbar^2\alpha^2}\right) = \exp\left(-\frac{E_\gamma^2}{4\hbar\omega Mc^2}\right)\end{aligned} \tag{6}$$

代入式(4)，即得所求概率，为

$$P = |\langle\psi_0 \mid \psi\rangle|^2 = \exp\left(-\frac{E_\gamma^2}{2\hbar\omega Mc^2}\right) \tag{7}$$

具体数值如下：

$$^{57}\mathrm{Fe}\text{ 核}, Mc^2 \approx 57m_pc^2 \approx 57\times 938\mathrm{MeV} = 5.35\times10^{10}\mathrm{eV}$$

$$E_\gamma = 18\mathrm{keV} = 1.8\times10^4\mathrm{eV}$$

$$\hbar\omega = \hbar c\cdot\frac{\omega}{c} \approx 1.97\times10^{-5}\mathrm{eV}\cdot\mathrm{cm}\times\frac{2\pi\times10^{12}}{3\times10^{10}}\mathrm{cm}^{-1}$$

$$= 4.13\times10^{-3}\mathrm{eV}$$

$$P = \exp\left[-\frac{(1.8\times10^4)^2}{2\times4.13\times10^{-3}\times5.35\times10^{10}}\right]$$

$$= \mathrm{e}^{-0.733} = 0.48$$

3.8　同上题，计算 γ 辐射后核的质心振动处于各能量本征态的概率.

解　上题已经求出，γ 辐射后核的质心运动波函数为

$$\psi(x) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}p_0 x/\hbar}\psi_0(x), \quad p_0 = E_\gamma/c \tag{1}$$

则处于第n个振动激发态$\psi_n(x)$的概率为

$$P_n = |\langle\psi_n|\psi\rangle|^2 = |\langle\psi_n|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p_0 x/\hbar}\psi_0\rangle|^2 \tag{2}$$

令$\lambda = -p_0/\hbar$,下面计算$\langle\psi_n|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda x}\psi_0\rangle$,式中$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda x}$可以视为算符,将它用升、降算符表示,有下列关系:

$$\mathrm{i}\lambda x = \alpha a^+ - \alpha^* a, \quad \alpha = \mathrm{i}\lambda\sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}} \tag{3}$$

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda x} = \mathrm{e}^{\alpha a^+ - \alpha^* a} = \mathrm{e}^{\alpha a^+}\mathrm{e}^{-\alpha^* a}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \tag{4}$$

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda x}|\psi_0\rangle = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}\mathrm{e}^{\alpha a^+}\mathrm{e}^{-\alpha^* a}|\psi_0\rangle = |\psi_\alpha\rangle$$

$$= \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}\sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|\psi_n\rangle \tag{5}$$

(参看题 3.11)其中ψ_α为谐振子相干态. 利用式(5),即得

$$\langle\psi_n|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda x}\psi_0\rangle = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \tag{6}$$

$$P_n = \frac{|\alpha|^{2n}}{n!}\mathrm{e}^{-|\alpha|^2} = \frac{1}{n!}\left(\frac{\lambda^2\hbar}{2M\omega}\right)^n \mathrm{e}^{-\frac{\lambda^2\hbar}{2M\omega}}$$

$$= \frac{1}{n!}\left(\frac{E_\gamma^2}{2\hbar\omega Mc^2}\right)^n \exp\left(-\frac{E_\gamma^2}{2\hbar\omega Mc^2}\right) \tag{7}$$

容易验证$\sum_n P_n = 1$.

对于上题$^{57}\mathrm{Fe}$核的实例,前几个概率值为

$$P_0 = 0.48, \quad P_1 = 0.35, \quad P_2 = 0.13$$

3.9 对于一维谐振子,求消灭算符a的本征态,将其表示成各能量本征态$|n\rangle$的线性叠加.

解 消灭算符a对于能量本征态$|n\rangle$的作用结果为(参看题 3.1 式(26))

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \tag{1}$$

除$n=0$以外,一般$|n\rangle$不是算符a的本征态(根源于$\hat{n}$和a不对易),而且,上式表明a的本征态不可能由有限个$|n\rangle$叠加而成,必须包含所有$|n\rangle$. 设

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_n(\alpha)|n\rangle \tag{2}$$

满足本征方程

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \tag{3}$$

α 为本征值，利用式(1)，即得

$$\alpha \mid \alpha\rangle = \alpha\sum_n C_n \mid n\rangle = a\sum_n C_n \mid n\rangle = \sum_n C_n\sqrt{n} \mid n-1\rangle$$

以$\langle n-1\mid$左乘上式，并利用正交归一条件

$$\langle n' \mid n\rangle = \delta_{n'n}$$

即得

$$C_n = \frac{\alpha}{\sqrt{n}}C_{n-1} \tag{4}$$

依次递推，即得

$$C_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}C_0 \tag{5}$$

C_0 为归一化常数. 归一化条件为

$$\langle\alpha \mid \alpha\rangle = \sum_n \mid C_n \mid^2 = \mid C_0 \mid^2 \sum_n \frac{\mid \alpha^2 \mid^n}{n!} = 1$$

由于

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\mid \alpha \mid^{2n}}{n!} = \mathrm{e}^{|\alpha|^2}$$

所以，

$$C_0 = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}, \quad \delta \text{ 为实数} \tag{6}$$

通常，可取 C_0 为正实数，即取 $\delta=0$. 这时

$$\boxed{\mid \alpha\rangle = \sum_n C_n \mid n\rangle = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \mid n\rangle} \tag{7}$$

这就是算符 a 的本征态. 由于 a 并非厄米算符，所以本征值 α 原则上可取任意复数. 上式中$\mid n\rangle$态的成分为

$$\mid \langle n \mid \alpha\rangle \mid^2 = \mid C_n \mid^2 = \frac{\mid \alpha \mid^{2n}}{n!}\mathrm{e}^{-|\alpha|^2} \tag{8}$$

呈 Poisson 分布. 式(7)称为谐振子的相干态(coherent state).

3.10　在相干态$\mid\alpha\rangle$中，计算 $\hat{n}$、H、x、p 等主要物理量的平均值及涨落.

解　相干态$\mid\alpha\rangle$满足本征方程

$$a \mid \alpha\rangle = \alpha \mid \alpha\rangle \tag{1}$$

其共轭方程为

$$\langle\alpha \mid a^{+}=\alpha^{*}\langle\alpha \mid \tag{1'}$$

能量算符为

$$H=\left(\hat{n}+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega=\left(a^{+}a+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{2}$$

在$|\alpha\rangle$态下求平均,取得

$$\bar{n}=\langle\alpha \mid a^{+}a \mid \alpha\rangle=\alpha^{*}\alpha\langle\alpha \mid \alpha\rangle=|\alpha|^{2} \tag{3}$$

$$\bar{H}=\left(\bar{n}+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega=\left(|\alpha|^{2}+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega=\bar{E} \tag{4}$$

用产生、消灭算符来表示$\hat{n}^{2}$和H^{2},有

$$\hat{n}^{2}=a^{+}aa^{+}a=a^{+}(a^{+}a+1)a=(a^{+})^{2}a^{2}+\hat{n} \tag{5}$$

$$H^{2}=\left(\hat{n}^{2}+\hat{n}+\frac{1}{4}\right)\hbar^{2}\omega^{2} \tag{6}$$

利用式(1),(1′),即得

$$\overline{n^{2}}=(\alpha^{*})^{2}\alpha^{2}+\alpha^{*}\alpha=|\alpha|^{4}+|\alpha|^{2}=\bar{n}^{2}+\bar{n} \tag{7}$$

$$\overline{H^{2}}=\left(\bar{n}^{2}+2\bar{n}+\frac{1}{4}\right)\hbar\omega \tag{8}$$

统计涨落为

$$\Delta n=(\overline{n^{2}}-\bar{n}^{2})^{1/2}=\sqrt{\bar{n}} \tag{9}$$

$$\Delta E=(\overline{H^{2}}-\bar{H}^{2})^{1/2}=\sqrt{\bar{n}}\hbar\omega \tag{10}$$

相对涨落为

$$\Delta n/\bar{n}=1/\sqrt{\bar{n}} \tag{11}$$

$$\Delta E/\bar{E}=\sqrt{\bar{n}}\Big/\left(\bar{n}+\frac{1}{2}\right) \tag{12}$$

$|\alpha|$越大,$\bar{n}$越大,相对涨落越小.

x、x^{2}、p、p^{2}用a和a^{+}的表示式为

$$\begin{aligned}
x&=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a^{+}+a)\\
x^{2}&=\frac{\hbar}{2m\omega}[(a^{+})^{2}+a^{2}+2a^{+}a+1]\\
p&=\mathrm{i}\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(a^{+}-a)\\
p^{2}&=\frac{1}{2}m\omega\hbar(2a^{+}a+1-a^{2}-a^{+2})
\end{aligned} \tag{13}$$

平均值为

$$\bar{x}=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\alpha^*+\alpha)=\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\mathrm{Re}(\alpha) \tag{14}$$

$$\overline{x^2}=\frac{\hbar}{2m\omega}[(\alpha^*)^2+\alpha^2+2\alpha^*\alpha+1]$$

$$=\frac{\hbar}{2m\omega}[1+(\alpha+\alpha^*)^2] \tag{15}$$

$$\bar{p}=\mathrm{i}\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\alpha^*-\alpha)=\sqrt{2m\omega\hbar}\,\mathrm{Im}(\alpha) \tag{16}$$

$$\overline{p^2}=\frac{1}{2}m\omega\hbar[2\alpha^*\alpha+1-\alpha^2-(\alpha^*)^2]$$

$$=\frac{1}{2}m\omega\hbar[1-(\alpha-\alpha^*)^2] \tag{17}$$

统计涨落为

$$\Delta x=(\overline{x^2}-\bar{x}^2)^{1/2}=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \tag{18}$$

$$\Delta p=(\overline{p^2}-\bar{p}^2)^{1/2}=\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} \tag{19}$$

$$\Delta x\cdot\Delta p=\hbar/2 \tag{20}$$

注意，Δx、Δp 均为常量，和 α 及 $\bar{n}$ 无关.

如 α 是实数，则 $\alpha+\alpha^*=2\alpha$，$\alpha-\alpha^*=0$，这时

$$\bar{n}=\alpha^2,\qquad \bar{E}=\left(\alpha^2+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

$$\bar{x}=\alpha\sqrt{2\hbar/m\omega}=\sqrt{2\bar{n}\hbar/m\omega}$$

$$\overline{x^2}=\left(\alpha^2+\frac{1}{4}\right)\frac{2\hbar}{m\omega}=\left(\bar{n}+\frac{1}{4}\right)\frac{2\hbar}{m\omega}$$

$$\bar{p}=0,\qquad \overline{p^2}=\frac{1}{2}m\omega\hbar$$

动能和势能平均值为

$$\frac{1}{2m}\overline{p^2}=\frac{1}{4}\hbar\omega \tag{21}$$

$$\frac{1}{2}m\omega^2\,\overline{x^2}=\left(\bar{n}+\frac{1}{4}\right)\hbar\omega=\bar{E}-\frac{1}{4}\hbar\omega \tag{22}$$

如 $\bar{n}\gg1$，平均动能就显得微不足道. 而对于能量本征态 $|n\rangle$，平均动能等于平均势能，并且等于总能之半.

如 α 为纯虚数,$\alpha+\alpha^*=0$,$\alpha-\alpha^*=2\alpha$,这时情况刚好相反,有下列结果:

$$\overline{x}=0 \tag{23}$$

$$\frac{1}{2}m\omega^2\overline{x^2}=\frac{1}{4}\hbar\omega$$

$$\overline{p}=\sqrt{2m\omega\hbar}\mid\alpha\mid=\sqrt{2\bar{n}m\omega\hbar}$$

$$\frac{1}{2m}\overline{p^2}=\left(\mid\alpha\mid^2+\frac{1}{4}\right)\hbar\omega=\left(\bar{n}+\frac{1}{4}\right)\hbar\omega=\overline{E}-\frac{1}{4}\hbar\omega \tag{24}$$

如 $\bar{n}\gg1$,平均势能显得微不足道,平均动能近似等于总能.

3.11 证明谐振子相干态可以表示成

$$\mid\alpha\rangle=\mathrm{e}^{\alpha a^+-\alpha^* a}\mid0\rangle \tag{1}$$

并求出$|\alpha\rangle$在 x 表象中的表示式$\langle x|\alpha\rangle$(即波函数).

解 利用产生、消灭算符的基本对易式

$$[a,a^+]=aa^+-a^+a=1 \tag{2}$$

即得

$$[a,\alpha a^+-\alpha^* a]=\alpha[a,a^+]=\alpha \tag{3}$$

反复利用式(3),可得

$$[a,(\alpha a^+-\alpha^* a)^n]=n\alpha(\alpha a^+-\alpha^* a)^{n-1} \tag{4}$$

因此,

$$[a,\mathrm{e}^{\alpha a^+-\alpha^* a}]=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}[a,(\alpha a^+-\alpha^* a)^n]$$

$$=\sum_{n=1}^{\infty}\alpha\frac{(\alpha a^+-\alpha^* a)^{n-1}}{(n-1)!}=\alpha\mathrm{e}^{\alpha a^+-\alpha^* a} \tag{5}$$

亦即,对于任何$|\psi\rangle$,均有

$$a\mathrm{e}^{\alpha a^+-\alpha^* a}\mid\psi\rangle=\mathrm{e}^{\alpha a^+-\alpha^* a}(a+\alpha)\mid\psi\rangle \tag{5'}$$

但是,对于谐振子的基态$|0\rangle$,

$$a\mid0\rangle=0 \tag{6}$$

因此

$$a\mathrm{e}^{\alpha a^+-\alpha^* a}\mid0\rangle=\alpha\mathrm{e}^{\alpha a^+-\alpha^* a}\mid0\rangle \tag{7}$$

亦即 $\mathrm{e}^{\alpha a^+-\alpha^* a}|0\rangle$是算符 a 的本征态,本征值为 α. 因此这就是相干态$|\alpha\rangle$.

利用 Glauber 公式(参看题 4.20)

$$\mathrm{e}^{A+B}=\mathrm{e}^A\mathrm{e}^B\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}[A,B]} \tag{8}$$

可得

$$e^{\alpha a^+ - \alpha^* a} = e^{\alpha a^+} e^{-\alpha^* a} e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \tag{9}$$

代入式(1),即得

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} e^{\alpha a^+} e^{-\alpha^* a} |0\rangle$$

其中

$$e^{-\alpha^* a}|0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\alpha^*)^n}{n!} a^n |0\rangle = |0\rangle$$

因此

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} e^{\alpha a^+}|0\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_n \frac{\alpha^n}{n!}(a^+)^n |0\rangle$$

利用公式

$$a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \tag{10}$$

即得

$$(a^+)^n|0\rangle = \sqrt{n!}\,|n\rangle \tag{11}$$

因此

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \tag{12}$$

写成 x 表象中波函数,就是

$$\psi_\alpha(x) = \langle x|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \psi_n(x) \tag{13}$$

下面给出相干态波函数的另一种表示式.

先将式(1)中算符写成如下形式:

$$e^{\alpha a^+ - \alpha^* a} = \exp\left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(\alpha - \alpha^*)x - i\frac{\alpha+\alpha^*}{\sqrt{2m\omega\hbar}}p\right] \tag{14}$$

再利用公式(8),即得

$$e^{\alpha a^+ - \alpha^* a} = \exp\left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(\alpha - \alpha^*)x\right]\exp\left(-i\frac{\alpha+\alpha^*}{\sqrt{2m\omega\hbar}}p\right)\exp\left[\frac{1}{4}(\alpha^{*2} - \alpha^2)\right] \tag{15}$$

式(1)的 x 表象为

$$\psi_\alpha(x) = \langle x|\alpha\rangle = e^{\alpha a^+ - \alpha^* a}\psi_0(x) \tag{1'}$$

将式(11)代入式(1′),并取

$$p = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

即得

$$\psi_\alpha(x) = \langle x \mid \alpha\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\bar{p}x/\hbar}\mathrm{e}^{-\bar{x}\frac{\partial}{\partial x}}\psi_0(x) \tag{16}$$

其中

$$\mathrm{i}\theta = \frac{1}{4}(\alpha^{*2} - \alpha^2) \tag{17}$$

$$\bar{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\alpha + \alpha^*) \tag{18}$$

$$\bar{p} = \mathrm{i}\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\alpha^* - \alpha) \tag{19}$$

(参看题 3.10)式(16)中 $\mathrm{e}^{-\bar{x}\frac{\partial}{\partial x}}$ 即平移算符,它对波函数的作用是

$$\mathrm{e}^{-\bar{x}\frac{\partial}{\partial x}}\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\bar{x})^n}{n!}\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^n\psi(x) = \psi(x-\bar{x}) \tag{20}$$

代入式(16),即得相干态波函数的具体函数形式:

$$\boxed{\psi_\alpha(x) = \langle x \mid \alpha\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\bar{p}x/\hbar}\psi_0(x-\bar{x})} \tag{21}$$

其中 $\psi_0(x)$ 是谐振子基态波函数.

如 α 是实数,则 $\theta=0$,$\bar{p}=0$,上式变成

$$\psi_\alpha(x) = \psi_0(x-\bar{x}) \tag{22}$$

其意义为:将基态作空间平移,即得相干态,平移的距离等于相干态中 x 的平均值. 式(22)的波形如图 3.11 所示.

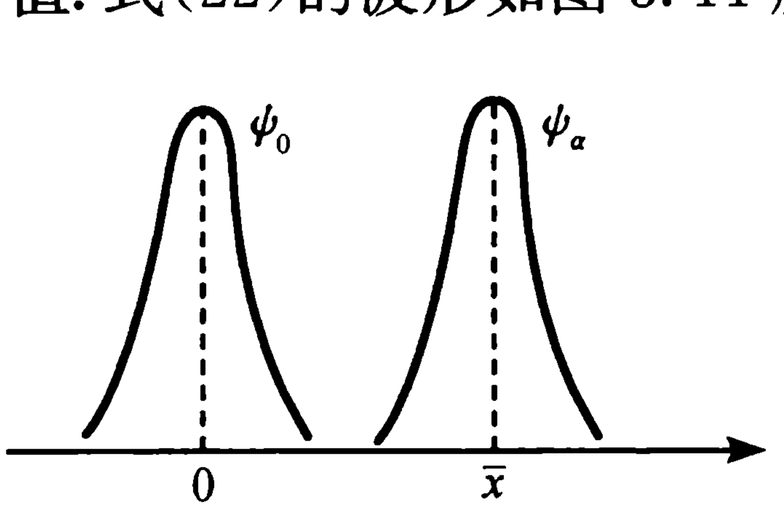


图 3.11

由于 $\psi_0(x)$ 和 $\psi_\alpha(x)$ 的波形相同,所以 Δx 及 Δp 均为

$$\Delta x = \sqrt{\hbar/(2m\omega)}$$

$$\Delta p = \sqrt{m\omega\hbar/2}$$

乘积为

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

刚好等于不确定度关系所规定的下限(参看题 3.10).

3.12 一维谐振子,$t=0$ 时给定初始波函数

$$\psi(x,0)=\psi_0(x-x_0)=N_0\mathrm{e}^{-m\omega(x-x_0)^2/2\hbar}$$

求 $\psi(x,t)$，并描述其主要运动特征.

解　将 $\psi(x,0)$展开成能量本征函数 ψ_n 的叠加：

$$\psi(x,0)=\sum_n C_n\psi_n(x) \tag{1}$$

则

$$\psi(x,t)=\sum_n C_n\psi_n(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt/\hbar} \tag{2}$$

其中

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\quad n=0,1,2,\cdots \tag{3}$$

在 $t=0$ 时，显然

$$\bar{x}(t=0)=x_0 \tag{4}$$

令

$$\alpha_0=x_0\sqrt{m\omega/2\hbar} \tag{5}$$

根据上题，$\psi_0(x-x_0)$就是相干态波函数 $\psi_{\alpha_0}(x)$，因此，由上题式(12)，

$$\psi(x,0)=\langle x\mid\alpha_0\rangle=\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha_0^2}\sum_n\frac{\alpha_0^n}{\sqrt{n!}}\psi_n(x) \tag{6}$$

和式(1)比较，即得

$$C_n=\frac{\alpha_0^n}{\sqrt{n!}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha_0^2} \tag{7}$$

代入式(2)，即得

$$\psi(x,t)=\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha_0^2}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\mathrm{i}\omega t}\sum_n\frac{1}{\sqrt{n!}}[\alpha(t)]^n\psi_n(x) \tag{8}$$

其中

$$\boxed{\alpha(t)=\alpha_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}} \tag{9}$$

除相因子 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t/2}$外，式(8)正是相干态波函数$\langle x|\alpha(t)\rangle$. 由上题式(21)可知

$$\psi(x,t)=\langle x\mid\alpha(t)\rangle=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\bar{p}x/\hbar}\psi_0(x-\bar{x}) \tag{10}$$

其中

$$\mathrm{i}\theta=\frac{1}{4}\{[\alpha^*(t)]^2-[\alpha(t)]^2\}=\frac{\mathrm{i}}{2}\alpha_0^2\sin2\omega t \tag{11}$$

$$\bar{x}=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}[\alpha(t)+\alpha^{*}(t)]=x_0\cos\omega t \tag{12}$$

$$\bar{p}=\mathrm{i}\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}[\alpha^{*}(t)-\alpha(t)]=-m\omega x_0\sin\omega t \tag{13}$$

因此,

$$\psi(x,t)=\psi_0(x-x_0\cos\omega t)\exp\left[\mathrm{i}\left(\frac{m\omega x_0^2}{4\hbar}\sin 2\omega t-\frac{\omega t}{2}-\frac{m\omega x_0 x}{\hbar}\sin\omega t\right)\right] \tag{10'}$$

这是一个随时间振荡的波包,每当

$$t=2\pi/\omega,\quad 4\pi/\omega,\quad 6\pi/\omega,\cdots$$

时,$\alpha(t)$恢复成初始值 α_0,$\psi(x,t)=\pm\psi(x,0)$,即波包又恢复到初始状态. 由于

$$|\psi(x,t)|^2=|\psi_0(x-x_0\cos\omega t)|^2 \tag{14}$$

在振荡过程中波包不扩散,波形不变,只是波包中心($\bar{x}$)随时间作周期性振荡.

注意,在任何时刻,$\psi(x,t)$都是一个相干态波函数,其 Δx,Δp 均保持不变,$\Delta x\cdot\Delta p=\hbar/2$.

至于 $\bar{x}$、$\bar{p}$ 的振荡规律[式(12),(13)],这并非相干态特有的性质,而是任何谐振子波包的特点. 可由 Heisenberg 运动方程直接导出式(12),(13). 但是,一般的谐振子波包,在振荡过程中波形将随时间变化,作周期性扩张和收缩. 波形不变的只有相干态振荡波包.

3.13 从谐振子升、降算符的基本对易关系

$$[a,a^{+}]=1 \tag{1}$$

出发,证明

$$\mathrm{e}^{\lambda a^{+}a}a\,\mathrm{e}^{-\lambda a^{+}a}=\mathrm{e}^{-\lambda}a \tag{2}$$

(λ 为参数)对于 $\lambda>0$,计算

$$T(\lambda)=\mathrm{Tr}\mathrm{e}^{-\lambda a^{+}a}$$

进而讨论算符 $a^{+}a$ 的本征值谱.

解 将式(2)左端记为 $f(\lambda)$,显然

$$f(0)=a \tag{3}$$

视 λ 为参变量,将 $f(\lambda)$对 λ 求导数,可得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}f(\lambda)=\mathrm{e}^{\lambda a^{+}a}(a^{+}a^{2}-aa^{+}a)\mathrm{e}^{-\lambda a^{+}a}$$

利用式(1),即得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}f(\lambda) = -f(\lambda) \tag{4}$$

其解为

$$f(\lambda) = f(0)\mathrm{e}^{-\lambda} = a\mathrm{e}^{-\lambda}$$

此即式(2).

算符 a^+a 在任意状态$|\psi\rangle$下的平均值为

$$\langle\psi \mid a^+ a \mid \psi\rangle = |\, a \mid \psi\rangle\,|^2 \geqslant 0$$

因此 a^+a 的本征值为非负实数,(注意 a^+a 为厄米算符!)记为 $k_0, k_1, k_2, \cdots, k_n, \cdots$,则

$$T(\lambda) = \mathrm{Tr}\mathrm{e}^{-\lambda a^+ a} = \sum_n \mathrm{e}^{-\lambda k_n} \tag{5}$$

另一方面,视 λ 为参变量,有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}T(\lambda) = \mathrm{Tr}(-a^+ a\mathrm{e}^{-\lambda a^+ a})$$

利用式(2),即得

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}T(\lambda) &= -\mathrm{Tr}(a^+ \mathrm{e}^{-\lambda a^+ a} a)\mathrm{e}^{-\lambda} \\ &= -\mathrm{e}^{-\lambda}\mathrm{Tr}(aa^+ \mathrm{e}^{-\lambda a^+ a}) \\ &= -\mathrm{e}^{-\lambda}\mathrm{Tr}[(1 + a^+ a)\mathrm{e}^{-\lambda a^+ a}] \\ &= \mathrm{e}^{-\lambda}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}T(\lambda) - T(\lambda)\right]\end{aligned}$$

即

$$(1 - \mathrm{e}^{-\lambda})\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}T(\lambda) = -\mathrm{e}^{-\lambda}T(\lambda)$$

即

$$\frac{\mathrm{d}T(\lambda)}{T(\lambda)} = -\frac{\mathrm{e}^{-\lambda}}{1 - \mathrm{e}^{-\lambda}}\mathrm{d}\lambda \tag{6}$$

积分,得

$$\ln T(\lambda) = -\ln(1 - \mathrm{e}^{-\lambda}) + C'$$

$$T(\lambda) = \frac{C}{1 - \mathrm{e}^{-\lambda}} \tag{7}$$

其中 $C = \mathrm{e}^{C'}$ 为积分常数,待定.

式(7)中令 $\lambda \to \infty$,得到 $T(\infty) = C$,和式(5)比较,可知 a^+a 的最小本征值为

$k_0=0$[否则式(5)给出 $T(\infty)=0$],因此

$$T(\infty)=1,\quad C=1 \tag{8}$$

代入式(7),即得

$$T(\lambda)=\frac{1}{1-\mathrm{e}^{-\lambda}}=1+\mathrm{e}^{-\lambda}+\mathrm{e}^{-2\lambda}+\mathrm{e}^{-3\lambda}+\cdots \tag{9}$$

当 $\lambda\to\infty$,$\mathrm{e}^{-\lambda}\to 0^+$,将式(5)和(9)从 $\mathrm{e}^{-\lambda}$ 的最低次幂开始逐项比较,可知

$$k_n=n \tag{10}$$

亦即 a^+a 的本征值谱为

$$0,1,2,3,\cdots,n,\cdots \tag{11}$$

这和题 3.1 结论一致,可谓殊途同归.

3.14 考虑谐振子升、降算符 a^+、a 的线性变换

$$b=\lambda a+\nu a^+,\quad b^+=\nu a+\lambda a^+ \tag{1}$$

λ、ν 为实数,并满足关系 $\lambda^2-\nu^2=1$. 试证明:对于算符 b 的任何一个本征态,$\Delta x\cdot\Delta p=\hbar/2$.

证 利用 a 与 a^+ 的基本对易式$[a,a^+]=1$,可得

$$[b,b^+]=(\lambda^2-\nu^2)[a,a^+]=\lambda^2-\nu^2=1 \tag{2}$$

式(1)的逆变换为

$$a=\lambda b-\nu b^+,\quad a^+=-\nu b+\lambda b^+ \tag{3}$$

根据题 3.1 所建立的关系

$$x=\sqrt{\hbar/m\omega}Q,\quad p=\sqrt{m\omega\hbar}P \tag{4}$$

$$Q=\frac{1}{\sqrt{2}}(a^++a),\quad P=\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(a^+-a) \tag{5}$$

容易将 Q、P 表示成 b 和 b^+:

$$\begin{aligned}Q&=\frac{1}{\sqrt{2}}(\lambda-\nu)(b^++b)\\ P&=\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(\lambda+\nu)(b^+-b)\end{aligned} \tag{6}$$

$$\begin{aligned}Q^2&=\frac{1}{2}(\lambda-\nu)^2(b^{+2}+b^2+2b^+b+1)\\ P^2&=-\frac{1}{2}(\lambda+\nu)^2(b^{+2}+b^2-2b^+b-1)\end{aligned} \tag{7}$$

设$|\beta\rangle$为算符 b 的本征态,满足本征方程

$$b\,|\,\beta\rangle = \beta\,|\,\beta\rangle \tag{8}$$

取共轭，即得

$$\langle\beta\,|\,b^{+} = \beta^{*}\langle\beta\,| \tag{8'}$$

在$|\beta\rangle$态中计算 Q、Q^2、P、P^2 平均值，即得

$$\begin{aligned}
\bar{Q} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\lambda-\nu)(\beta^{*}+\beta)\\
\bar{P} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\lambda+\nu)(\beta^{*}-\beta)\\
\overline{Q^2} &= \frac{1}{2}(\lambda-\nu)^2(\beta^{*2}+\beta^2+2\beta^{*}\beta+1)\\
&= \frac{1}{2}(\lambda-\nu)^2[1+(\beta^{*}+\beta)^2]\\
\overline{P^2} &= -\frac{1}{2}(\lambda+\nu)^2(\beta^{*2}+\beta^2-2\beta^{*}\beta-1)\\
&= \frac{1}{2}(\lambda+\nu)^2[1-(\beta^{*}-\beta)^2]
\end{aligned} \tag{9}$$

Q、P 的统计涨落为

$$\begin{aligned}
\Delta Q &= (\overline{Q^2}-\bar{Q}^2)^{1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}}\,|\,\lambda-\nu\,|\\
\Delta P &= (\overline{P^2}-\bar{P}^2)^{1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}}\,|\,\lambda+\nu\,|
\end{aligned} \tag{10}$$

由式(4)即得

$$\begin{aligned}
\Delta x &= \sqrt{\hbar/m\omega}\,\Delta Q = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,|\,\lambda-\nu\,|\\
\Delta p &= \sqrt{m\omega\hbar}\,\Delta P = \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\,|\,\lambda+\nu\,|
\end{aligned} \tag{11}$$

$$\Delta x\cdot\Delta p = \frac{\hbar}{2}\,|\,\lambda^2-\nu^2\,| = \frac{\hbar}{2} \tag{12}$$

证明完毕.

注意，Δx 和 Δp 虽与 β 之值无关，但与 λ、ν 的取值有关. 在条件 $\lambda^2-\nu^2=1$ 下调节 λ、ν 的取值，可以使 Δx 任意缩小(Δp 则相应增大). 这一点和算符 a 的本征态不同，后者 Δx 和 Δp 均为常数(参看题 3.10). 当然，$|\beta\rangle$ 也可表示成谐振子能量本征态的线性叠加，称为相干压缩态.

第四章　力学量的算符表示及算符运算

4.1　量子力学中矢量算符定义成

$$\boldsymbol{A}=A_x\boldsymbol{e}_x+A_y\boldsymbol{e}_y+A_z\boldsymbol{e}_z=A_\alpha\boldsymbol{e}_\alpha$$

其中 $\boldsymbol{e}_x,\boldsymbol{e}_y,\boldsymbol{e}_z$ 为 x,y,z 轴方向单位矢量，A_x 等为算符或常量. α 代表 x,y,z 分量之一. 一项中下标重复出现时，要对它求和(遍及 x,y,z). 设 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C}$ 为矢量算符，试验证下列各式：

$$\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}=A_\alpha B_\alpha=A_xB_x+A_yB_y+A_zB_z \tag{1}$$

$$\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\alpha B_\beta\boldsymbol{e}_\gamma=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\boldsymbol{e}_\alpha A_\beta B_\gamma \tag{2}$$

$$\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})=(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\cdot\boldsymbol{C}=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\alpha B_\beta C_\gamma \tag{3}$$

$$[\boldsymbol{A}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})]_\alpha=\boldsymbol{A}\cdot(B_\alpha\boldsymbol{C})-(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})C_\alpha \tag{4}$$

$$[(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\times\boldsymbol{C}]_\alpha=\boldsymbol{A}\cdot(B_\alpha\boldsymbol{C})-A_\alpha(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{C}) \tag{5}$$

其中 $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$ 为 Levi-Civita 符号，即

$$\begin{aligned}\varepsilon_{xyz}&=\varepsilon_{yzx}=\varepsilon_{zxy}=1\\ \varepsilon_{xzy}&=\varepsilon_{yxz}=\varepsilon_{zyx}=-1\\ \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}&=0,\quad \alpha,\beta,\gamma\text{ 中有相同者}\end{aligned} \tag{6}$$

证　基矢 $\boldsymbol{e}_x,\boldsymbol{e}_y,\boldsymbol{e}_z$ 常记为 $\boldsymbol{i},\boldsymbol{j},\boldsymbol{k}$，它们间的点乘(内积)与叉乘(矢积)定义成

$$\boxed{\boldsymbol{e}_\alpha\cdot\boldsymbol{e}_\beta=\delta_{\alpha\beta},\quad \boldsymbol{e}_\alpha\times\boldsymbol{e}_\beta=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\boldsymbol{e}_\gamma} \tag{7}$$

易得

$$\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}=A_\alpha\boldsymbol{e}_\alpha\cdot B_\beta\boldsymbol{e}_\beta=A_\alpha B_\beta\delta_{\alpha\beta}=A_\alpha B_\alpha$$

此即(1)式. 类似地可证(2)式与(3)式：

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

$$(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\cdot\boldsymbol{C}=A_\alpha B_\beta\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\boldsymbol{e}_\gamma\cdot\boldsymbol{e}_\eta C_\eta=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\delta_{\gamma\eta}A_\alpha B_\beta C_\eta=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\alpha B_\beta C_\gamma$$

验证式(4)，以 x 分量为例，左端为

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{A}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})]_x&=A_y(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})_z-A_z(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})_y\\ &=A_y(B_xC_y-B_yC_x)-A_z(B_zC_x-B_xC_z)\\ &=A_yB_xC_y+A_zB_xC_z-(A_yB_y+A_zB_z)C_x\end{aligned} \tag{8}$$

而式(4)右端 x 分量为

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{B}_x\boldsymbol{C})-(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})C_x\\=&A_xB_xC_x+A_yB_xC_y+A_zB_xC_z-(A_xB_x+A_yB_y+A_zB_z)C_x\\=&A_yB_xC_y+A_zB_xC_z-(A_yB_y+A_zB_z)C_x\end{aligned}$$

和式(8)相等,故式(4)成立.

同样可以验证式(5).式(4)和(5)有时写成下列矢量形式:

$$\boldsymbol{A}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})=\overbrace{\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{BC})}-(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})\boldsymbol{C}\tag{4'}$$

$$(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\times\boldsymbol{C}=\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{BC})-\boldsymbol{A}(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{C})\tag{5'}$$

$\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{C}$ 间联线表示 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{C}$ 取标积.(但是 $\boldsymbol{B}$ 的位置在 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{C}$ 之间.)如果 $\boldsymbol{B}$、$\boldsymbol{C}$ 互相对易,上二式就可写成

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})&=(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{C})\boldsymbol{B}-(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})\boldsymbol{C}\\(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\times\boldsymbol{C}&=(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{C})\boldsymbol{B}-\boldsymbol{A}(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{C})\end{aligned}\tag{9}$$

这正是经典物理中的三重矢积公式.

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

$$[F,\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}]=[F,\boldsymbol{A}]\cdot\boldsymbol{B}+\boldsymbol{A}\cdot[F,\boldsymbol{B}]\tag{1}$$

$$[F,\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}]=[F,\boldsymbol{A}]\times\boldsymbol{B}+\boldsymbol{A}\times[F,\boldsymbol{B}]\tag{2}$$

证　式(1)右端等于

$$(F\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}F)\cdot\boldsymbol{B}+\boldsymbol{A}\cdot(F\boldsymbol{B}-\boldsymbol{B}F)=F\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}-\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}F=[F,\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}]$$

这正是式(1)左端,故式(1)成立.

同样可以证明式(2).

4.3　以 $\boldsymbol{r}$、$\hat{\boldsymbol{p}}$ 表示位置和动量算符,$\boldsymbol{l}=\boldsymbol{r}\times\hat{\boldsymbol{p}}$ 为轨道角动量算符,$\hat{F}=F(\boldsymbol{r},\hat{\boldsymbol{p}})$为由 $\boldsymbol{r}$、$\hat{\boldsymbol{p}}$ 构成的标量算符.证明

$$[F,\boldsymbol{l}]=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}\times\frac{\partial F}{\partial\boldsymbol{r}}-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial F}{\partial\boldsymbol{p}}\times F\tag{1}$$

证　利用对易式

$$[\boldsymbol{r},F]=\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial F}{\partial p_x},\frac{\partial F}{\partial p_y},\frac{\partial F}{\partial p_z}\right)\equiv\mathrm{i}\hbar\frac{\partial F}{\partial\boldsymbol{p}}\tag{2}$$

$$[\boldsymbol{p},F]=-\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial F}{\partial x},\frac{\partial F}{\partial y},\frac{\partial F}{\partial z}\right)\equiv-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial F}{\partial\boldsymbol{r}}\tag{3}$$

以及题 4.2 式(2),即得

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

此即式(1).

4.4 计算$\left[\boldsymbol{p},\frac{1}{r}\right]$、$[\boldsymbol{p}^2,r^2]$、$\left[\boldsymbol{p}^2,\frac{1}{r}\right]$、$\left[\boldsymbol{p}^2,\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right]$.

解 利用对易式

$$[\boldsymbol{p},F(\boldsymbol{r})]=-\mathrm{i}\hbar\nabla F \tag{1}$$

即得

$$\left[\boldsymbol{p},\frac{1}{r}\right]=-\mathrm{i}\hbar\left(\nabla\frac{1}{r}\right)=\mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{r}}{r^3} \tag{2}$$

再利用公式(见题 4.2)

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

即得

$$\left[\boldsymbol{p}^2,\frac{1}{r}\right]=\left[\boldsymbol{p},\frac{1}{r}\right]\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\cdot\left[\boldsymbol{p},\frac{1}{r}\right]=\mathrm{i}\hbar\left(\frac{1}{r^3}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}\right)$$
$$=2\mathrm{i}\hbar\frac{1}{r^3}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}+\hbar^2\left(\nabla\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}\right)$$

但因

$$\nabla\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}=\frac{1}{r^3}\nabla\cdot\boldsymbol{r}+\boldsymbol{r}\cdot\left(\nabla\frac{1}{r^3}\right)=\frac{3}{r^3}-\boldsymbol{r}\cdot\frac{3\boldsymbol{r}}{r^5}=0$$

所以

$$\left[\boldsymbol{p}^2,\frac{1}{r}\right]=2\mathrm{i}\hbar\frac{1}{r^3}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}=2\hbar^2\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} \tag{3}$$

其次,利用式(1)可得

$$[\boldsymbol{p},r^2]=-\mathrm{i}\hbar\nabla(r^2)=-2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r} \tag{4}$$
$$[\boldsymbol{p}^2,r^2]=[\boldsymbol{p},r^2]\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\cdot[\boldsymbol{p},r^2]=-2\mathrm{i}\hbar(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})$$
$$=-4\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}-2\hbar^2\nabla\cdot\boldsymbol{r}=-4\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}-6\hbar^2$$
$$=-4\hbar^2 r\frac{\partial}{\partial r}-6\hbar^2 \tag{5}$$

最后,利用对易式

$$[\boldsymbol{p}^2,\boldsymbol{r}]=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial p^2}{\partial\boldsymbol{p}}=-2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p} \tag{6}$$

以及式(3),即得

$$\left[\boldsymbol{p}^2,\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right]=[\boldsymbol{p}^2,\boldsymbol{r}]\frac{1}{r}+\boldsymbol{r}\left[\boldsymbol{p}^2,\frac{1}{r}\right]$$

$$=-2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}\frac{1}{r}+2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}\frac{1}{r^3}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})$$

$$=-2\mathrm{i}\hbar\left[\frac{1}{r}\boldsymbol{p}-\mathrm{i}\hbar\left(\nabla\frac{1}{r}\right)\right]+2\mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})$$

$$=2\hbar^2\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}+2\mathrm{i}\hbar\left[\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})-\frac{1}{r}\boldsymbol{p}\right]$$

$$=2\hbar^2\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}+\boldsymbol{r}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{1}{r}\nabla\right)\tag{7}$$

4.5　定义径向动量算符

$$p_r=\frac{1}{2}\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)\tag{1}$$

试求其球坐标表达式，并求 p_r^2 及$[r,p_r]$.

解　在经典力学中，径向动量就是动量的径向投影，定义为

$$p_r=\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p}\text{ 或 }\boldsymbol{p}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\tag{2}$$

过渡到量子力学，动量算符为

$$\boldsymbol{p}=-\mathrm{i}\hbar\nabla\tag{3}$$

由于 $\boldsymbol{p}$ 和 $\boldsymbol{r}/r$ 不对易，为了保证径向动量算符是厄米算符，应取

$$p_r=\frac{1}{2}\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)$$

此即式(1). 利用式(3)，易得

$$p_r=\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p}-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\left(\nabla\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)=-\mathrm{i}\hbar\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\cdot\nabla-\frac{\mathrm{i}\hbar}{r}$$

$$=-\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)\tag{4}$$

此即 p_r 的球坐标表达式.

利用式(4)，容易算出

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

$$=-\hbar^2\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}\tag{5}$$

$$[r,p_r]=-\mathrm{i}\hbar\left[r,\frac{\partial}{\partial r}\right]=\mathrm{i}\hbar\tag{6}$$

4.6 证明

$$\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}+\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}$$

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

证
$$(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}+\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})_x=p_yl_z-p_zl_y+l_yp_z-l_zp_y$$
$$=[p_y,l_z]+[l_y,p_z]$$

利用基本对易式

$$[l_\alpha,p_\beta]=[p_\alpha,l_\beta]=\mathrm{i}\hbar\epsilon_{\alpha\beta\gamma}p_\gamma$$

即得

$$(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}+\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})_x=2\mathrm{i}\hbar p_x$$

因此

$$\boxed{\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}+\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}} \tag{1}$$

其次,由于 p_x 和 l_x 对易,所以

$$[\boldsymbol{l}^2,p_x]=[l_y^2,p_x]+[l_z^2,p_x]$$
$$=[l_y,p_x]l_y+l_y[l_y,p_x]+[l_z,p_x]l_z+l_z[l_z,p_x]$$
$$=\mathrm{i}\hbar(p_yl_z+l_zp_y-p_zl_y-l_yp_z)$$
$$=\mathrm{i}\hbar(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}-\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})_x$$

因此

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

4.7 证明

$$\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{l}=\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{r}=0,\quad \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{l}=\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{p}=0$$

计算$(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})$或$(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})$和 $\boldsymbol{p}$ 及 $\boldsymbol{l}$ 的标积.

证 利用题 4.1 证明过的三重积公式

$$\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})=(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\cdot\boldsymbol{C} \tag{1}$$

以及

$$\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{r}=0,\quad \boldsymbol{p}\times\boldsymbol{p}=0 \tag{2}$$

$$\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{l}=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{l} \tag{3}$$

等基本对易式,即得

$$\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{l}=\boldsymbol{r}\cdot(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})=(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{p}=0 \tag{4}$$

当 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$ 为厄米算符,即

$$\boldsymbol{A}^+=\boldsymbol{A},\quad \boldsymbol{B}^+=\boldsymbol{B}$$

容易验证

$$(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})^{+}=\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{A},\quad (\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})^{+}=-\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{A} \tag{5}$$

因此，式(4)取共轭，即得

$$\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{r}=0 \tag{4'}$$

类似地，可证

$$\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{p}=(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{p}=\boldsymbol{r}\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{p})=0 \tag{6}$$

取共轭即得

$$\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{l}=0 \tag{6'}$$

类似地，可得

$$(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{p}=\boldsymbol{l}\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{p})=0 \tag{7}$$

再利用题 4.6 式(1)，可得

$$(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})\cdot\boldsymbol{p}=(2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}-\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{p}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}^{2} \tag{8}$$

上两式分别取共轭，即得

$$\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})=0 \tag{7'}$$

$$\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}^{2} \tag{8'}$$

利用式(3)及(6′)，可得

$$(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})\cdot\boldsymbol{l}=\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{l})=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{l}=0 \tag{9}$$

$$(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{l}=(2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})\cdot\boldsymbol{l}=0 \tag{10}$$

上两式分别取共轭，即得

$$\boldsymbol{l}\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=0,\quad \boldsymbol{l}\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})=0 \tag{11}$$

式(9)至(11)的另外一种证法是，利用题 4.6 式(2)，并和 $\boldsymbol{l}$ 取标积，即得

$$\mathrm{i}\hbar(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}-\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{l}=(\boldsymbol{l}^{2}\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}\boldsymbol{l}^{2})\cdot\boldsymbol{l}=0$$

这里利用了 $\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{l}=0$ 以及$[\boldsymbol{l}^{2},\boldsymbol{l}]=0$. 再利用题 4.6 式(1)，即得式(9)和(10). 再取共轭，即得式(11).

4.8　证明 $\boldsymbol{l}^{2}=r^{2}\boldsymbol{p}^{2}-(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})^{2}+\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}$，进而再证明

$$\boldsymbol{p}^{2}=\frac{1}{r^{2}}\boldsymbol{l}^{2}-\hbar^{2}\frac{1}{r^{2}}\frac{\partial}{\partial r}r^{2}\frac{\partial}{\partial r}=\frac{1}{r^{2}}\boldsymbol{l}^{2}+p_{r}^{2}$$

证　利用题 4.1 式(3)和(5′)，可得

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

其中

$$\boldsymbol{p}r^2 = r^2\boldsymbol{p} - \mathrm{i}\hbar(\nabla r^2) = r^2\boldsymbol{p} - 2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}$$

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

因此

$$\boldsymbol{l}^2 = r^2\boldsymbol{p}^2 - (\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})^2 + \mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p} \tag{1}$$

此即要证明的第一个公式,其中

$$\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p} = -\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}\cdot\nabla = -\mathrm{i}\hbar r\frac{\partial}{\partial r} \tag{2}$$

因而

$$\boldsymbol{l}^2 = r^2\boldsymbol{p}^2 + \hbar^2\left(r\frac{\partial}{\partial r}r\frac{\partial}{\partial r}\right) + \hbar^2 r\frac{\partial}{\partial r} = r^2\boldsymbol{p}^2 + \hbar^2\left(r^2\frac{\partial^2}{\partial r^2} + 2r\frac{\partial}{\partial r}\right) \tag{3}$$

以 r^{-2} 左乘上式各项,即得

$$\boldsymbol{p}^2 = \frac{1}{r^2}\boldsymbol{l}^2 - \hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) = \frac{1}{r^2}\boldsymbol{l}^2 - \hbar^2\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} \tag{4}$$

根据题 4.5 式(5),上式亦即

$$\boldsymbol{p}^2 = \frac{1}{r^2}\boldsymbol{l}^2 + p_r^2 \tag{4'}$$

经典力学中也有类似的公式.

4.9 化简 $(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}$ 和 $\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})$.

解 利用公式

$$(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\cdot\boldsymbol{C} = \boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})$$

即得

$$(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r} = \boldsymbol{l}\cdot\left(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{r}\frac{1}{r}\right) = -\boldsymbol{l}\cdot\left(\boldsymbol{l}\frac{1}{r}\right) = -\frac{\boldsymbol{l}^2}{r} \tag{1}$$

再利用公式(题 4.6)

$$\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l} + \boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p} = 2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p} \tag{2}$$

可得

$$\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p}) = \frac{1}{r}\boldsymbol{r}\cdot(2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})$$

$$= 2\mathrm{i}\hbar\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p} - \frac{1}{r}\boldsymbol{r}\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})$$

$$= 2\mathrm{i}\hbar\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p} - \frac{1}{r}(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{l}$$

$$= 2\mathrm{i}\hbar\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}-\frac{1}{r}\boldsymbol{l}^2$$

$$= 2\hbar^2\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\boldsymbol{l}^2}{r} \tag{3}$$

4.10　证明 $\boldsymbol{p}\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=-(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times\boldsymbol{p}=\boldsymbol{l}p^2$.

证　利用题 4.1 式(5′),即得

$$-(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times\boldsymbol{p}=\boldsymbol{l}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p})-(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{p})\boldsymbol{p}=\boldsymbol{l}p^2 \tag{1}$$

注意 $\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{p}=0$. 利用题 4.1 式(4′)及上题式(2),可得

$$\begin{aligned}\boldsymbol{p}\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})&=\boldsymbol{p}\times(2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})=-\boldsymbol{p}\times(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})\\&=(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p})\boldsymbol{l}-\boldsymbol{p}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{l})=p^2\boldsymbol{l}=\boldsymbol{l}p^2\end{aligned} \tag{2}$$

注意 p^2 和 $\boldsymbol{l}$ 对易,$\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{l}=0$. 类似地还可以证明

$$(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})\times\boldsymbol{p}=-\boldsymbol{p}\times(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})=\boldsymbol{l}p^2 \tag{3}$$

4.11　证明 $\frac{\boldsymbol{r}}{r}\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})+(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times\frac{\boldsymbol{r}}{r}=2\mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{l}}{r}$.

证　利用公式(见题 4.6)

$$\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p} \tag{1}$$

即得

$$\boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{l}-\boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}) \tag{2}$$

由题 4.1 式(4),

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})]_x&=\boldsymbol{r}p_x\cdot\boldsymbol{l}-(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})l_x\\&=\left(p_x\boldsymbol{r}+\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\boldsymbol{r}}{\partial x}\right)\cdot\boldsymbol{l}-(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})l_x\\&=p_x\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{l}+\mathrm{i}\hbar l_x-(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})l_x\\&=(\mathrm{i}\hbar-\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})l_x\end{aligned}$$

亦即

$$\boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})=(\mathrm{i}\hbar-\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})\boldsymbol{l} \tag{3}$$

代入式(2),即得

$$\boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{l}+(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})\boldsymbol{l} \tag{4}$$

$$\frac{\boldsymbol{r}}{r}\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=\mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{l}}{r}+\frac{1}{r}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})\boldsymbol{l} \tag{5}$$

类似地,可得

$$(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times\frac{\boldsymbol{r}}{r}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{r}\frac{1}{r}-(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})\times\frac{\boldsymbol{r}}{r}$$

$$=-2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{l}\frac{1}{r}-(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})\times\frac{\boldsymbol{r}}{r} \tag{6}$$

而式(5)取共轭,则得

$$(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})\times\frac{\boldsymbol{r}}{r}=-\mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{l}}{r}+\boldsymbol{l}\left(\boldsymbol{p}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)=-\mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{l}}{r}+\boldsymbol{l}\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p}-2\mathrm{i}\hbar\frac{1}{r}\right)$$

$$=\boldsymbol{l}\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p}\right)-3\mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{l}}{r}=\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p}\right)\boldsymbol{l}-3\mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{l}}{r} \tag{7}$$

注意,$\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p}=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial r}$,和 $\boldsymbol{l}$ 对易. 式(7)代入式(6),得到

$$(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times\frac{\boldsymbol{r}}{r}=\mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{l}}{r}-\frac{1}{r}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})\boldsymbol{l} \tag{8}$$

式(5)加式(8),即得

$$\frac{\boldsymbol{r}}{r}\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})+(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times\frac{\boldsymbol{r}}{r}=2\mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{l}}{r} \tag{9}$$

4.12 证明

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

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

证 首先,利用公式[见题 4.7 式(7)]

$$(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{p}=\boldsymbol{l}\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{p})=0 \tag{1}$$

再利用题 4.1 式(3),和题 4.10 式(1),即得

$$-(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})=-[(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times\boldsymbol{p}]\cdot\boldsymbol{l}$$

$$=(\boldsymbol{l}\boldsymbol{p}^2)\cdot\boldsymbol{l}=\boldsymbol{l}^2\boldsymbol{p}^2 \tag{2}$$

注意 $\boldsymbol{l}$ 和 $\boldsymbol{p}^2$ 对易. 类似地,可得

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

$$=(\boldsymbol{l}\boldsymbol{p}^2)\cdot\boldsymbol{l}=\boldsymbol{l}^2\boldsymbol{p}^2 \tag{3}$$

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

$$=\boldsymbol{l}\cdot(\boldsymbol{l}\boldsymbol{p}^2)=\boldsymbol{l}^2\boldsymbol{p}^2 \tag{4}$$

最后,利用公式(见题 4.6)

$$\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}+\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}$$

即得

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

$$= (\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})^2 - 2\mathrm{i}\hbar(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})\cdot\boldsymbol{p}$$
$$= \boldsymbol{l}^2\boldsymbol{p}^2 - 2\mathrm{i}\hbar(2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p} - \boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{p}$$
$$= \boldsymbol{l}^2\boldsymbol{p}^2 + 4\hbar^2\boldsymbol{p}^2 \tag{5}$$

这里再次利用了式(1).

4.13　证明$(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p}) = -\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{l}\boldsymbol{p}^2$.

证　就此式的一个分量加以证明. 由题 4.1 式(4),

$$[(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})]_x = (\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot(l_x\boldsymbol{p}) - [(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{l}]p_x$$

其中

$$l_x\boldsymbol{p} = \boldsymbol{p}l_x + \mathrm{i}\hbar(p_z\boldsymbol{e}_y - p_y\boldsymbol{e}_z)$$

$\boldsymbol{e}_y, \boldsymbol{e}_z$ 为 y 轴和 z 轴方向的单位矢量. 因此

$$[(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})]_x = (\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{p}l_x + \mathrm{i}\hbar[(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times\boldsymbol{p}]_x - [(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{l}]p_x \tag{1}$$

而题 4.7 已经证明

$$(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{p} = 0, \quad (\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{l} = 0$$

题 4.10 已经证明

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

代入式(1),即得

$$[(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})]_x = -\mathrm{i}\hbar l_x\boldsymbol{p}^2 \tag{2}$$

类似地,可导出相应的 y 分量和 z 分量的公式.

4.14　设 $\hat{A}$ 为无量纲算符,ξ、η 为参变量,定义

$$\mathrm{e}^{\xi\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\xi^n}{n!}\hat{A}^n = 1 + \xi\hat{A} + \frac{1}{2!}\xi^2\hat{A}^2 + \cdots$$

试证明

$$\mathrm{e}^{(\xi+\eta)\hat{A}} = \mathrm{e}^{\xi\hat{A}}\,\mathrm{e}^{\eta\hat{A}}$$
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\mathrm{e}^{\xi\hat{A}} = \hat{A}\mathrm{e}^{\xi\hat{A}} = \mathrm{e}^{\xi\hat{A}}\hat{A}$$

证　按照定义,

$$\mathrm{e}^{\xi\hat{A}}\,\mathrm{e}^{\eta\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{\xi^n\eta^m}{n!m!}\hat{A}^{n+m} \tag{1}$$
$$\mathrm{e}^{(\xi+\eta)\hat{A}} = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}(\xi+\eta)^k\hat{A}^k$$

其中

$$(\xi+\eta)^k=\sum_{n=0}^{k}\frac{k!}{n!(k-n)!}\xi^n\eta^{k-n}$$

所以

$$e^{(\xi+\eta)\hat{A}}=\sum_{k=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{k}\frac{\xi^n\eta^{k-n}}{n!(k-n)!}\hat{A}^k \tag{2}$$

令 $m=k-n$,即可看出式(2)右端即是式(1)右端,故已证

$$e^{(\xi+\eta)\hat{A}}=e^{\xi\hat{A}}e^{\eta\hat{A}} \tag{3}$$

一般地,如 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 对易,即 $\hat{A}\hat{B}=\hat{B}\hat{A}$,就有

$$e^{\hat{A}+\hat{B}}=e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}=e^{\hat{B}}e^{\hat{A}} \tag{4}$$

$e^{\xi\hat{A}}$ 对 ξ 逐项微分,即得

$$\frac{d}{d\xi}e^{\xi\hat{A}}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{d}{d\xi}\left(\frac{1}{n!}\xi^n\hat{A}^n\right)=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(n-1)!}\xi^{n-1}\hat{A}^n$$

$$=\sum_{m=0}^{\infty}\frac{1}{m!}\xi^m\hat{A}^{m+1}\quad(m=n-1)$$

故得

$$\frac{d}{d\xi}e^{\xi\hat{A}}=\hat{A}e^{\xi\hat{A}}=e^{\xi\hat{A}}\hat{A} \tag{5}$$

证明完毕.

4.15 对于一维问题,定义平移算符 $D_x(a)$,它对波函数的作用是

$$D_x(a)\psi(x)=\psi(x-a) \tag{1}$$

a 为实数. 设 $\psi(x)$ 各阶导数存在,试证明

$$D_x(a)=e^{ap/i\hbar}=e^{-a\frac{d}{dx}} \tag{2}$$

证 按照指数算符的定义,

$$e^{ap/i\hbar}=e^{-a\frac{d}{dx}}=1+\sum_{n=1}^{\infty}(-a)^n\frac{1}{n!}\left(\frac{d}{dx}\right)^n$$

因此

$$e^{ap/i\hbar}\psi(x)=\psi(x)+\sum_{n=1}^{\infty}(-a)^n\frac{1}{n!}\frac{d^n}{dx^n}\psi(x)=\psi(x-a)$$

所以 $e^{ap/i\hbar}$ 就是平移算符 $D_x(a)$.

4.16　若算符 $\hat{f}(x)$ 与 $\hat{D}_x(a)$ 对易，求 $\hat{f}(x)$ 的通解.

解　根据题意，$[\hat{f}(x),\hat{D}_x(a)]=0$，因此对于任意波函数 $\psi(x)$，有

$$\begin{aligned}\hat{f}(x)\hat{D}_x(a)\psi(x)&=\hat{f}(x)\psi(x-a)=\hat{D}_x(a)\hat{f}(x)\psi(x)\\&=\hat{f}(x-a)\psi(x-a)\end{aligned}$$

因此，$\hat{f}(x)$ 具有性质

$$\hat{f}(x)=\hat{f}(x-a)$$

即 $f(x)$ 为 x 的周期函数，周期为 a.

4.17　如算符 $\hat{A}(\xi)$ 是参变数 ξ 的函数，定义 $\hat{A}$ 对 ξ 的导数为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\hat{A}(\xi)=\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{\varepsilon}[\hat{A}(\xi+\varepsilon)-\hat{A}(\xi)]$$

(a) 证明

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

(b) 如 $\hat{A}^{-1}$ 存在，证明

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\hat{A}^{-1}(\xi)=-\hat{A}^{-1}\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}\xi}\hat{A}^{-1}\tag{2}$$

证　(a) 根据定义，当 $\varepsilon\to 0$，有

$$\hat{A}(\xi+\varepsilon)=\hat{A}(\xi)+\varepsilon\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\hat{A}(\xi)\tag{3}$$

$B(\xi)$ 也有类似关系. 因此

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\{\hat{A}(\xi)\hat{B}(\xi)\}&=\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{\varepsilon}[\hat{A}(\xi+\varepsilon)\hat{B}(\xi+\varepsilon)-\hat{A}(\xi)\hat{B}(\xi)]\\&=\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{\varepsilon}\left[\left(\hat{A}(\xi)+\varepsilon\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}\xi}\right)\left(\hat{B}(\xi)+\varepsilon\frac{\mathrm{d}\hat{B}}{\mathrm{d}\xi}\right)-\hat{A}(\xi)\hat{B}(\xi)\right]\\&=\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}\xi}\hat{B}+\hat{A}\frac{\mathrm{d}\hat{B}}{\mathrm{d}\xi}+\lim_{\varepsilon\to 0}\varepsilon\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}\xi}\frac{\mathrm{d}\hat{B}}{\mathrm{d}\xi}=\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}\xi}\hat{B}+\hat{A}\frac{\mathrm{d}\hat{B}}{\mathrm{d}\xi}\end{aligned}$$

此即式(1).

(b) 如果 $\hat{A}^{-1}(\xi)$ 存在，就有

$$\hat{A}(\xi)\hat{A}^{-1}(\xi)=\hat{A}^{-1}(\xi)\hat{A}(\xi)=1\tag{4}$$

对 ξ 求导，即得

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

以 $\hat{A}^{-1}$ 左乘上式，并利用式(4)，即得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\hat{A}^{-1}(\xi) = -\hat{A}^{-1}(\xi)\frac{\mathrm{d}A(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\hat{A}^{-1}(\xi) \tag{2}$$

4.18 给定算符 $\hat{A}$、$\hat{B}$,令

$$\hat{C}_0 = \hat{B}$$
$$\hat{C}_1 = [\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$
$$\hat{C}_2 = [\hat{A},\hat{C}_1] = [\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]$$
$$\cdots\cdots$$

证明

$$\mathrm{e}^{\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{-\hat{A}} = \hat{C}_0 + \hat{C}_1 + \frac{1}{2!}\hat{C}_2 + \frac{1}{3!}\hat{C}_3 + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\hat{C}_n}{n!}$$

证 引入参变数 ξ,作

$$f(\xi) = \mathrm{e}^{\xi\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{-\xi\hat{A}} \tag{1}$$

则

$$f(0) = \hat{B}, \quad f(1) = \mathrm{e}^{\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{-\hat{A}} \tag{2}$$

对 ξ 求导,即得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}f(\xi) = \mathrm{e}^{\xi\hat{A}}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\mathrm{e}^{-\xi\hat{A}} = \mathrm{e}^{\xi\hat{A}}C_1\mathrm{e}^{-\xi\hat{A}}$$
$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^2 f(\xi) = \mathrm{e}^{\xi\hat{A}}(\hat{A}\hat{C}_1 - \hat{C}_1\hat{A})\mathrm{e}^{-\xi\hat{A}} = \mathrm{e}^{\xi\hat{A}}\hat{C}_2\mathrm{e}^{-\xi\hat{A}}$$
$$\cdots$$
$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^n f(\xi) = \mathrm{e}^{\xi\hat{A}}\hat{C}_n\mathrm{e}^{-\xi\hat{A}} \tag{3}$$

根据 Taylor 公式,

$$f(1) = f(0) + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}\left[\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}\xi^n}f(\xi)\right]_{\xi=0} \tag{4}$$

而由式(3),令 $\xi\to 0$ 即得

$$\left[\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}\xi^n}f(\xi)\right]_{\xi=0} = \hat{C}_n \tag{5}$$

代入式(4),并顾及式(2),即得

$$\mathrm{e}^{\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{-\hat{A}} = \hat{C}_0 + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}\hat{C}_n = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\hat{C}_n \tag{6}$$

亦即

$$\mathrm{e}^{\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A},\hat{B}] + \frac{1}{2!}[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]] + \frac{1}{3!}[\hat{A},[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]] + \cdots \tag{6'}$$

4.19　设算符 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 不对易，$[\hat{A},\hat{B}]=\hat{C}$，但是 $\hat{C}$ 与 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 对易，即 $[\hat{A},\hat{C}]=0$，$[\hat{B},\hat{C}]=0$，试计算

$$[\hat{A},\hat{B}^n],\quad [\hat{A},\mathrm{e}^{\hat{B}}],\quad [\hat{A},\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}],\quad [\hat{A},f(\hat{B})]$$

其中 n 为正整数，λ 为参变数，f 为任何可以展开成正幂级数的函数.

解　在以下的计算中，略去算符上面的记号“^”，

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

将 n 换成 $(n-1)$，就有

$$[A,B^{n-1}]=CB^{n-2}+B[A,B^{n-2}]$$

代入前式，即得

$$[A,B^n]=2CB^{n-1}+B^2[A,B^{n-2}]$$

重复这种递推过程，即得

$$[A,B^n]=nCB^{n-1} \tag{1}$$

根据定义，

$$\mathrm{e}^B=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{B^n}{n!}$$

因此

$$[A,\mathrm{e}^B]=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}[A,B^n]=C\sum_{n=1}^{\infty}\frac{B^{n-1}}{(n-1)!}$$

令 $(n-1)=m$，即得

$$[A,\mathrm{e}^B]=C\sum_{m=0}^{\infty}\frac{B^m}{m!}=C\mathrm{e}^B \tag{2}$$

如令 $B\to\lambda B$，则 $C\to[A,\lambda B]=\lambda C$，式(2)中作此置换，即得

$$[A,\mathrm{e}^{\lambda B}]=\lambda C\mathrm{e}^{\lambda B} \tag{3}$$

设

$$f(B)=\sum_n f_n B^n$$

利用式(1)，即得

$$[A,f(B)]=\sum_n f_n nCB^{n-1}=Cf'(B) \tag{4}$$

其中

$$f'(B)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}B}f(B) \tag{5}$$

式(2)和(3)均可视为式(4)的特例,也可利用题 4.18 结果直接得出,即取题 4.18 中 $C_1=C, C_2=C_3=\cdots=0$.

4.20 设算符 A 与 B 不对易,$[A,B]=C$,但是 C 与 A 及 B 对易,即 $[A,C]=0, [B,C]=0$. 试证明 Glauber 公式:

$$\boxed{\mathrm{e}^{A+B}=\mathrm{e}^{A}\mathrm{e}^{B}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}C}=\mathrm{e}^{B}\mathrm{e}^{A}\mathrm{e}^{\frac{1}{2}C}}$$

证 引入参变数 λ,作

$$f(\lambda)=\mathrm{e}^{\lambda A}\mathrm{e}^{\lambda B} \tag{1}$$

注意 $f(0)=1, f(1)=\mathrm{e}^{A}\mathrm{e}^{B}$. 上式对 λ 求导,得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}f(\lambda)=\mathrm{e}^{\lambda A}(A+B)\mathrm{e}^{\lambda B} \tag{2}$$

而根据题 4.19 式(3),

$$A\mathrm{e}^{\lambda B}=\mathrm{e}^{\lambda B}(A+\lambda C) \tag{3}$$

代入式(2),即得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}f(\lambda)=\mathrm{e}^{\lambda A}\mathrm{e}^{\lambda B}(A+B+\lambda C)=f(\lambda)(A+B+\lambda C) \tag{4}$$

以 $f^{-1}(\lambda)$乘之,得到

$$\frac{1}{f(\lambda)}\frac{\mathrm{d}f(\lambda)}{\mathrm{d}\lambda}=A+B\cdot+C\lambda \tag{4'}$$

积分,即得

$$\ln f(\lambda)=\ln f(0)+(A+B)\lambda+\frac{1}{2}C\lambda^{2}$$

因此

$$f(\lambda)=f(0)\mathrm{e}^{(A+B)\lambda+\frac{1}{2}C\lambda^{2}}$$

由于 $f(0)=1$,故得

$$f(\lambda)=\mathrm{e}^{(A+B)\lambda+\frac{1}{2}C\lambda^{2}} \tag{5}$$

以 $\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}C\lambda^{2}}$ 右乘上式,即得

$$\boxed{\mathrm{e}^{\lambda(A+B)}=\mathrm{e}^{\lambda A}\mathrm{e}^{\lambda B}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\lambda^{2}C}} \tag{6}$$

如令 $A\to B, B\to A$,则 $C\to[B,A]=-C$,上式变成

$$\mathrm{e}^{\lambda(A+B)}=\mathrm{e}^{\lambda B}\mathrm{e}^{\lambda A}\mathrm{e}^{\frac{1}{2}\lambda^{2}C} \tag{6'}$$

式(6)和(6′)中取 $\lambda=1$，即得

$$\boxed{e^{A+B}=e^{A}e^{B}e^{-\frac{1}{2}C}=e^{B}e^{A}e^{\frac{1}{2}C}} \tag{7}$$

如 A、B 对易，则 $C=0$，上式即还原成题 4.14 式(4).

4.21　设 $\hat{U}$ 为幺正算符，证明 $\hat{U}$ 必可分解成 $\hat{U}=\hat{A}+i\hat{B}$，$\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 为厄米算符，并满足 $\hat{A}^2+\hat{B}^2=1$，$[\hat{A},\hat{B}]=0$. 试找出 $\hat{A}$、$\hat{B}$. 进而再证明 $\hat{U}$ 可以表示成 $\hat{U}=e^{i\hat{H}}$，$\hat{H}$ 为厄米算符.

解　如存在厄米算符 $\hat{A}$、$\hat{B}$，使

$$\hat{U}=\hat{A}+i\hat{B} \tag{1}$$

则

$$\hat{U}^{+}=\hat{A}-i\hat{B} \tag{1'}$$

容易解出

$$\hat{A}=\frac{1}{2}(\hat{U}+\hat{U}^{+}),\quad \hat{B}=\frac{i}{2}(\hat{U}^{+}-\hat{U}) \tag{2}$$

显然，这样确定的 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 都是厄米算符.

$\hat{U}$ 作为幺正算符，满足

$$\hat{U}\hat{U}^{+}=\hat{U}^{+}\hat{U}=1 \tag{3}$$

以式(1)和(1′)代入式(3)，即得

$$\hat{U}\hat{U}^{+}=(\hat{A}+i\hat{B})(\hat{A}-i\hat{B})=\hat{A}^2+\hat{B}^2-i[\hat{A},\hat{B}]=1$$
$$\hat{U}^{+}\hat{U}=(\hat{A}-i\hat{B})(\hat{A}+i\hat{B})=\hat{A}^2+\hat{B}^2+i[\hat{A},\hat{B}]=1$$

因此必有

$$\hat{A}^2+\hat{B}^2=1,\quad [\hat{A},\hat{B}]=0 \tag{4}$$

容易验证由式(2)确定的 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 确实满足式(4).

由于 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 是对易的厄米算符，故存在共同本征态 $|n\rangle$，满足本征方程

$$\hat{A}\,|\,n\rangle=A_n\,|\,n\rangle,\quad \hat{B}\,|\,n\rangle=B_n\,|\,n\rangle \tag{5}$$

由于 $\hat{A}^2+\hat{B}^2=1$，易见

$$A_n^2+B_n^2=1 \tag{6}$$

因此，对于每组本征值 (A_n,B_n)，在 $(0,2\pi)$ 区间必然存在实数 H_n，使

$$A_n=\cos H_n,\quad B_n=\sin H_n \tag{7}$$

从而

$$\hat{U}\,|\,n\rangle=(\hat{A}+i\hat{B})\,|\,n\rangle=e^{iH_n}\,|\,n\rangle \tag{8}$$

如在全体$|n\rangle$所张态矢量空间中定义厄米算符$\hat{H}$,使

$$\hat{H}\,|\,n\rangle = H_n\,|\,n\rangle$$

则

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}}\,|\,n\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_n}\,|\,n\rangle \tag{8'}$$

而且

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}})^{+} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}} = 1$$

即$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}}$为幺正算符.由此可见

$$\hat{U} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}} \tag{9}$$

4.22 (a) 设$\hat{U}(t)$为幺正算符,对t可导,证明$\hat{U}(t)$满足方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t} = \hat{H}\hat{U} \tag{1}$$

其中$\hat{H}(t)$为厄米算符.

(b) 设$\hat{H}(t)$为厄米算符,而$\hat{U}(t)$满足式(1),证明$\hat{U}\hat{U}^{+}$必满足方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\hat{U}\hat{U}^{+}) = [\hat{H},\hat{U}\hat{U}^{+}] \tag{2}$$

进而再证明:如$t=t_0$时,$\hat{U}(t_0)$为幺正算符,则$\hat{U}(t)$也总是幺正算符.

证 (a) 因为$\hat{U}(t)$是幺正的,所以

$$\hat{U}(t)\hat{U}^{+}(t) = \hat{U}^{+}(t)\hat{U}(t) = 1 \tag{3}$$

对t求导,即得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\hat{U}\hat{U}^{+}) = \frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t}\hat{U}^{+} + \hat{U}\frac{\mathrm{d}\hat{U}^{+}}{\mathrm{d}t} = 0$$

即

$$\frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t}\hat{U}^{+} = -\hat{U}\frac{\mathrm{d}\hat{U}^{+}}{\mathrm{d}t} \tag{4}$$

以$\mathrm{i}\hbar\hat{U}$右乘式(4)两边,并令

$$\hat{H} = -\mathrm{i}\hbar\hat{U}\frac{\mathrm{d}\hat{U}^{+}}{\mathrm{d}t} = \mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t}\hat{U}^{+} \tag{5}$$

即得

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t} = \hat{H}\hat{U} \tag{1}$$

容易验证

$$\hat{H}^{+}=\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t}\hat{U}^{+}\right)^{+}=-\mathrm{i}\hbar\hat{U}\frac{\mathrm{d}\hat{U}^{+}}{\mathrm{d}t}=\hat{H}$$

即 $\hat{H}$ 为厄米算符.

(b) 如 $\hat{U}(t)$满足式(1),而且 $\hat{H}(t)=\hat{H}^{+}(t)$,则式(1)的共轭方程为

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{U}^{+}}{\mathrm{d}t}=\hat{U}^{+}\hat{H}\tag{1'}$$

因此

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\hat{U}\hat{U}^{+})&=\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t}\hat{U}^{+}+\mathrm{i}\hbar\hat{U}\frac{\mathrm{d}\hat{U}^{+}}{\mathrm{d}t}\\&=\hat{H}\hat{U}\hat{U}^{+}-\hat{U}\hat{U}^{+}\hat{H}=[\hat{H},\hat{U}\hat{U}^{+}]\end{aligned}$$

此即式(2).

另外,利用公式(参看题 4.17)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{U}^{-1}=-\hat{U}^{-1}\frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t}\hat{U}^{-1}\tag{6}$$

可得

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{U}^{-1}}{\mathrm{d}t}=\mathrm{i}\hbar\hat{U}^{-1}\frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t}\hat{U}^{-1}=\hat{U}^{-1}H\hat{U}\hat{U}^{-1}=\hat{U}^{-1}H\tag{7}$$

和式(1′)比较,可见 $\hat{U}^{-1}$和 $\hat{U}^{+}$满足同样的方程.但是这并不表示 $\hat{U}^{+}$就是 $\hat{U}^{-1}$,因为对于任意常数 λ,$\lambda\hat{U}^{+}$也满足同样方程.但是,如在时刻 t_0,$\hat{U}(t_0)\hat{U}^{+}(t_0)=1$,即 $\hat{U}(t_0)$为幺正算符,则 $\hat{U}^{+}(t_0)=\hat{U}^{-1}(t_0)$.有此初始条件,就可得出结论:$\hat{U}^{+}(t)=\hat{U}^{-1}(t)$,即对任何 t 值,$\hat{U}(t)$为幺正算符.当然,这时就有$[\hat{H},\hat{U}\hat{U}^{+}]=0$.

4.23　证明积分方程

$$\hat{B}(t)=\hat{B}_0+\mathrm{i}\left[\hat{A},\int_0^t\hat{B}(\tau)\mathrm{d}\tau\right]\tag{1}$$

的解为

$$\hat{B}(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{A}t}\hat{B}_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{A}t}\tag{2}$$

证　令

$$\hat{f}(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{A}t}\hat{B}_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{A}t}\tag{3}$$

则 $\hat{f}(0)=\hat{B}_0$.式(3)对 t 求导,得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{f}(t)=\mathrm{i}\hat{A}\hat{f}(t)-\hat{f}(t)\mathrm{i}\hat{A}=\mathrm{i}[\hat{A},\hat{f}(t)]\tag{4}$$

而由积分方程(1),也得到

$$\hat{B}(0)=\hat{B}_0+\mathrm{i}[\hat{A},0]=\hat{B}_0\tag{5}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{B}(t)=\mathrm{i}[\hat{A},\hat{B}(t)]\tag{6}$$

$B(t)$和 $\hat{f}(t)$满足同样的一阶微分方程和初始条件,故知

$$\hat{B}(t) = \hat{f}(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{A}t}\hat{B}_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{A}t} \tag{2}$$

4.24 设力学量算符 $\hat{A}$ 满足的最简单的代数方程为

$$f(\hat{A}) = \hat{A}^n + C_1\hat{A}^{n-1} + C_2\hat{A}^{n-2} + \cdots + C_n = 0 \tag{1}$$

$C_1, C_2, \cdots$为常数. 试证明 $\hat{A}$ 有 n 个本征值,它们都是方程 $f(x)=0$ 的根.

证 将式(1)作用于任意状态的波函数 ψ,应有

$$f(\hat{A})\psi = 0 \tag{2}$$

如 ψ 是 $\hat{A}$ 的本征函数,应有

$$\hat{A}\psi = a\psi \tag{3}$$

a 为本征值,将式(3)代入式(2),即得

$$f(a)\psi = (a^n + C_1a^{n-1} + \cdots + C_n)\psi = 0 \tag{4}$$

因此

$$f(a) = a^n + C_1a^{n-1} + \cdots + C_n = 0 \tag{5}$$

已经假定式(1)是最简单的代数方程,故式(5)应有 n 个根,即 $\hat{A}$ 有 n 个本征值.

反之,如已知力学量算符 $\hat{A}$ 的本征值为 $a_1, a_2, \cdots, a_n$,则 $\hat{A}$ 的任何一个本征函数显然满足方程

$$(\hat{A} - a_1)(\hat{A} - a_2)\cdots(\hat{A} - a_n)\psi = 0 \tag{6}$$

任何波函数总可以表示成 $\hat{A}$ 的本征函数的线性叠加,所以式(6)对于任何波函数成立,因此 $\hat{A}$ 满足方程

$$(\hat{A} - a_1)(\hat{A} - a_2)\cdots(\hat{A} - a_n) = 0 \tag{7}$$

它和式(1)应该等价.①

4.25 设 A 为厄米或幺正矩阵(这些矩阵都是可以"对角化"的),证明:在任何表象中,

$$\det(\mathrm{e}^A) = \mathrm{e}^{\mathrm{Tr}A}$$

证 令 $B=\mathrm{e}^A$,矩阵(算符)B 既为 A 的函数,则 A 与 B 可以同时对角化. 在 A 表象中,A 表现为对角矩阵,对角矩阵元 $A_{nn}=A_n$ 为 A 的本征值. 因此,A 的迹为

$$\mathrm{Tr}A = \sum_n A_{nn} = \sum_n A_n \tag{1}$$

---

① 参看 P. A. M. Dirac. 量子力学原理. 北京:科学出版社,1979. § 9.

而 B 的本征值为 e^{A_n}，即

$$B_n = B_{nn} = e^{A_n} \tag{2}$$

因此

$$\det B = \prod_n B_{nn} = \prod_n e^{A_n} = e^{\sum_n A_n} = e^{\mathrm{Tr}A} \tag{3}$$

考虑到矩阵的行列式和迹均与表象之选择无关，式(3)适用于任何表象.

4.26　设$|u\rangle$、$|v\rangle$为态矢量，$\langle u|u\rangle$及$\langle v|v\rangle$有限，证明

$$\mathrm{Tr}\,|u\rangle\langle v| = \langle v|u\rangle, \quad \mathrm{Tr}\,|u\rangle\langle u| = \langle u|u\rangle$$

证　$|u\rangle\langle v|$的性质是算符(矩阵)，其迹可以在任何表象中计算，其值与表象无关. 设某表象的基矢为$|n\rangle$，$n=1,2,\cdots$，利用公式

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1 \tag{1}$$

即得

$$\langle v|u\rangle = \sum_n \langle v|n\rangle\langle n|u\rangle = \sum_n \langle n|u\rangle\langle v|n\rangle$$

$$= \sum_n (|u\rangle\langle v|)_{nn} = \mathrm{Tr}\,|u\rangle\langle v| \tag{2}$$

取$|v\rangle = |u\rangle$，即得

$$\mathrm{Tr}\,|u\rangle\langle u| = \langle u|u\rangle \tag{3}$$

4.27　对于任何两个代表不同状态的态矢量$|\psi\rangle$及$|\varphi\rangle$(未归一化)，试证明下列 Schwarz 不等式：

$$|\langle\psi|\varphi\rangle|^2 < \langle\psi|\psi\rangle\langle\varphi|\varphi\rangle$$

证一　令$\langle\psi|\psi\rangle = a(>0)$，$\langle\varphi|\varphi\rangle = b(>0)$，$\langle\psi|\varphi\rangle = c$，并令

$$|\chi\rangle = |\varphi\rangle - \frac{c}{a}|\psi\rangle \tag{1}$$

由于ψ、φ代表不同状态，所以$|\chi\rangle \neq 0$，$\langle\chi|\chi\rangle > 0$. 即

$$\langle\chi|\chi\rangle = \left(\langle\varphi| - \frac{c^*}{a}\langle\psi|\right)\left(|\varphi\rangle - \frac{c}{a}|\psi\rangle\right)$$

$$= b - \frac{1}{a}c^* c > 0$$

所以

$$c^* c < ab \tag{2}$$

亦即

$$|\langle\psi|\varphi\rangle|^2 < \langle\psi|\psi\rangle\langle\varphi|\varphi\rangle \tag{3}$$

证二 对于任何复数 λ,显然有

$$\langle\psi-\lambda\varphi|\psi-\lambda\varphi\rangle > 0 \tag{4}$$

但因

$$\langle\psi-\lambda\varphi| = \langle\psi| - \lambda^*\langle\varphi|$$

代入上式,即得

$$\langle\psi|\psi\rangle + \lambda^*\lambda\langle\varphi|\varphi\rangle - \lambda\langle\psi|\varphi\rangle - \lambda^*\langle\varphi|\psi\rangle > 0 \tag{5}$$

令

$$\lambda = \frac{\langle\varphi|\psi\rangle}{\langle\varphi|\varphi\rangle}, \quad \lambda^* = \frac{\langle\psi|\varphi\rangle}{\langle\varphi|\varphi\rangle} \tag{6}$$

代入式(5),并以$\langle\varphi|\varphi\rangle$乘各项(注意$\langle\varphi|\varphi\rangle>0$),即得

$$\langle\psi|\psi\rangle\langle\varphi|\varphi\rangle - \langle\psi|\varphi\rangle\langle\varphi|\psi\rangle > 0$$

此即式(3).

4.28 利用 Schwarz 不等式证明不确定度关系式.

证 对于任何归一化的态矢量$|\psi\rangle$和厄米算符 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 及实参数 ξ,作

$$|\varphi\rangle = (\hat{A} + i\xi\hat{B})|\psi\rangle \tag{1}$$

则

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \langle\psi|(\hat{A} + i\xi\hat{B})|\psi\rangle = \overline{A} + i\xi\overline{B} \tag{2}$$

$$|\langle\psi|\varphi\rangle|^2 = \overline{A}^2 + \xi^2\overline{B}^2 \tag{3}$$

$$\begin{aligned}\langle\varphi|\varphi\rangle &= \langle\psi|(\hat{A} - i\xi\hat{B})(\hat{A} + i\xi\hat{B})|\psi\rangle \\ &= \overline{A^2} + \xi^2\overline{B^2} + i\xi(\overline{AB - BA})\end{aligned} \tag{4}$$

其中平均值都是对 ψ 态而言. 注意 $\overline{A}$、$\overline{B}$ 均为实数.

根据上题证明的 Schwarz 不等式,应有

$$\langle\psi|\psi\rangle\langle\varphi|\varphi\rangle \geqslant |\langle\psi|\varphi\rangle|^2 \tag{5}$$

等号成立的条件为 φ、ψ 代表同一个状态,即

$$|\varphi\rangle = (\hat{A} + i\xi\hat{B})|\psi\rangle = C|\psi\rangle \tag{6}$$

由式(3)、(4)、(5)以及$\langle\psi|\psi\rangle=1$,即得

$$(\Delta A)^2 + \xi^2(\Delta B)^2 + i\xi(\overline{AB - BA}) \geqslant 0 \tag{7}$$

其中

$$\Delta A = (\overline{A^2} - \overline{A}^2)^{\frac{1}{2}}, \quad \Delta B = (\overline{B^2} - \overline{B}^2)^{\frac{1}{2}} \tag{8}$$

由于 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 为厄米算符,$i\overline{(AB-BA)}$为实数. 在式(7)中,取

$$\xi = \pm \Delta A / \Delta B \tag{9}$$

如 $\mathrm{i}\overline{(AB-BA)}>0$，$\xi$ 取负值；如 $\mathrm{i}\overline{(AB-BA)}<0$，$\xi$ 取正值. 以式(9)代入式(7)，即得不确定度关系式：

$$\boxed{\Delta A \cdot \Delta B \geqslant \frac{1}{2} \left| \overline{(AB-BA)} \right|} \tag{10}$$

等号成立的条件为式(6)，即 ψ 为 $(\hat{A}+\mathrm{i}\xi\hat{B})$ 的本征态.

4.29　设 $\hat{H}$ 为正定的厄米算符，$|\psi\rangle$、$|\varphi\rangle$ 为任意态矢量，证明 $|\langle\psi|\hat{H}|\varphi\rangle|^2 \leqslant \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle\langle\varphi|\hat{H}|\varphi\rangle$.

证　　$$|\langle\psi|\hat{H}|\varphi\rangle|^2 = \langle\psi|\hat{H}|\varphi\rangle\langle\varphi|\hat{H}|\psi\rangle \tag{1}$$

如 $\hat{H}|\psi\rangle=0$；或 $\hat{H}|\varphi\rangle=0$，命题显然成立. 以下只讨论 $\hat{H}|\psi\rangle$ 及 $\hat{H}|\varphi\rangle$ 均不为 0 的情形. 由于 $\hat{H}$ 是正定的，必有

$$\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle > 0, \quad \langle\varphi|\hat{H}|\varphi\rangle > 0 \tag{2}$$

对于任何复数 λ，作

$$|\chi\rangle = |\psi\rangle - \lambda|\varphi\rangle \tag{3}$$

则

$$\langle\chi| = \langle\psi| - \lambda^*\langle\varphi| \tag{3'}$$

由于 $\hat{H}$ 是正定的，应有 $\langle\chi|\hat{H}|\chi\rangle \geqslant 0$，即

$$\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle + \lambda^*\lambda\langle\varphi|\hat{H}|\varphi\rangle - \lambda\langle\psi|\hat{H}|\varphi\rangle - \lambda^*\langle\varphi|\hat{H}|\psi\rangle \geqslant 0$$

取

$$\lambda = \frac{\langle\varphi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\varphi|\hat{H}|\varphi\rangle}, \quad \lambda^* = \frac{\langle\psi|\hat{H}|\varphi\rangle}{\langle\varphi|\hat{H}|\varphi\rangle} \tag{4}$$

代入上式，并以 $\langle\varphi|\hat{H}|\varphi\rangle$ 乘各项，即得

$$\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle\langle\varphi|\hat{H}|\varphi\rangle \geqslant |\langle\psi|\hat{H}|\varphi\rangle|^2 \tag{5}$$

这正是所要证明的. 等号成立的条件为

$$\begin{aligned} &\hat{H}|\psi\rangle = 0 \quad \text{或} \quad \hat{H}|\varphi\rangle = 0 \\ \text{或} \quad &\hat{H}|\chi\rangle = 0, \quad \text{即} \quad \hat{H}|\psi\rangle = \lambda\hat{H}|\varphi\rangle \end{aligned} \tag{6}$$

例如 $|\varphi\rangle = C|\psi\rangle$（$C$ 为常数）就属于这种特例.

如 $\hat{H}$ 的本征值谱中不包含 0，则式(5)中等号能够成立的条件是 $|\chi\rangle=0$，即 $|\psi\rangle=\lambda|\varphi\rangle$.

4.30 设 ψ 为归一化的波函数,$\hat{F}$ 为算符,试证明在 ψ 态下,$\overline{F^+F}\geqslant 0$,并求等号成立的条件.

证 根据平均值公式

$$\overline{A}=\int\psi^*\hat{A}\psi\mathrm{d}^3x$$

(其中积分范围为全空间)即得 $\hat{F}^+\hat{F}$ 的平均值为

$$\overline{F^+F}=\int\psi^*\hat{F}^+\hat{F}\psi\mathrm{d}^3x \tag{1}$$

令 $\hat{F}\psi=\varphi$,按照共轭算符的定义,

$$\int\psi^*\hat{F}^+\varphi\mathrm{d}^3x=\int(\hat{F}\psi)^*\varphi\mathrm{d}^3x$$

因此

$$\boxed{\overline{F^+F}=\int(\hat{F}\psi)^*(\hat{F}\psi)\mathrm{d}^3x=\int|\hat{F}\psi|^2\mathrm{d}^3x\geqslant 0} \tag{2}$$

如要等号成立,必须

$$\hat{F}\psi=0 \tag{3}$$

即 ψ 为算符 $\hat{F}$ 的本征函数.相应于本征值 0.

如 $\hat{F}$ 为厄米算符,即 $\hat{F}^+=\hat{F}$,则式(2)化为

$$\boxed{\overline{F^2}=\int|\hat{F}\psi|^2\mathrm{d}^3x\geqslant 0} \tag{4}$$

如 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 为矢量厄米算符,分别令 $\hat{F}=\hat{A}_x$、$\hat{A}_y$、$\hat{A}_z$,即得

$$\overline{\hat{\boldsymbol{A}}^2}=\int(|\boldsymbol{A}\psi|^2\mathrm{d}^3x)=\int(|\hat{A}_x\psi|^2+|\hat{A}_y\psi|^2+|\hat{A}_z\psi|^2)\mathrm{d}^3x \tag{5}$$

例如

$$\hat{\boldsymbol{p}}=-\mathrm{i}\hbar\nabla$$

$$\overline{\boldsymbol{p}^2}=\int|\hat{\boldsymbol{p}}\psi|^2\mathrm{d}^3x=\hbar^2\int|\nabla\psi|^2\mathrm{d}^3x \tag{6}$$

如用球坐标(r,θ,φ),而 $\psi=\psi(r)$,与 θ、φ 无关,则

$$\nabla\psi=\frac{\boldsymbol{r}}{r}\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}r},\quad |\nabla\psi|^2=\left|\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}r}\right|^2$$

这时

$$\overline{\boldsymbol{p}^2}=\hbar^2\int\left|\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}r}\right|^2\mathrm{d}^3x=4\pi\hbar^2\int_0^\infty\left|\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}r}\right|^2r^2\mathrm{d}r \tag{6'}$$

4.31　设算符 $\hat{H}$ 具有连续本征值 ω，其本征函数 $u_\omega(\boldsymbol{x})$ 构成正交完备系，即

$$\hat{H}u_\omega(\boldsymbol{x}) = \omega u_\omega(\boldsymbol{x}) \tag{1}$$

$$\int u_{\omega'}^*(\boldsymbol{x})u_\omega(\boldsymbol{x})\mathrm{d}^3x = \delta(\omega-\omega') \tag{2}$$

$$\int u_\omega^*(\boldsymbol{x}')u_\omega(\boldsymbol{x})\mathrm{d}\omega = \delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \tag{3}$$

求方程

$$(\hat{H}-\omega_0)u(\boldsymbol{x}) = F(\boldsymbol{x}) \tag{4}$$

的解，其中 $F(\boldsymbol{x})$ 为已知函数，ω_0 为 $\hat{H}$ 的某个特定本征值.

解　由于 $u_\omega(\boldsymbol{x})$ 是完备系，式(4)的解总可以表示成

$$u(\boldsymbol{x}) = \int C_\omega u_\omega(\boldsymbol{x})\mathrm{d}\omega \tag{5}$$

代入式(4)，即得

$$\int(\omega-\omega_0)C_\omega u_\omega(\boldsymbol{x})\mathrm{d}\omega = F(\boldsymbol{x}) \tag{6}$$

将 $F(\boldsymbol{x})$ 展开为

$$\begin{aligned} F(\boldsymbol{x}) &= \int F(\boldsymbol{x}')\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\mathrm{d}^3x' \\ &= \iint F(\boldsymbol{x}')u_\omega^*(\boldsymbol{x}')u_\omega(\boldsymbol{x})\mathrm{d}^3x'\mathrm{d}\omega \\ &= \int F_\omega u_\omega(\boldsymbol{x})\mathrm{d}\omega \end{aligned} \tag{7}$$

其中

$$F_\omega = \int F(\boldsymbol{x}')u_\omega^*(\boldsymbol{x}')\mathrm{d}^3x' = \int F(\boldsymbol{x})u_\omega^*(\boldsymbol{x})\mathrm{d}^3x \tag{8}$$

将式(7)代入式(6)，即得

$$C_\omega = F_\omega/(\omega-\omega_0) \tag{9}$$

再代入式(5)，即得方程(4)的解为

$$u(\boldsymbol{x}) = \int \frac{F_\omega}{\omega-\omega_0}u_\omega(\boldsymbol{x})\mathrm{d}\omega \tag{10}$$

第五章　中心力场

5.1[①]　质量为 μ 的粒子在中心力场

$$V(r)=-\frac{\alpha}{r^s},\quad \alpha>0 \tag{1}$$

中运动，证明存在束缚态的条件为 $0<s<2$，再进一步证明在 $E\sim 0^-$ 附近存在无限多个束缚态能级.

证　当势能取式(1)时，根据位力定理，在任何束缚定态中，有下列平均值关系：

$$\langle T\rangle=\frac{1}{2\mu}\langle \boldsymbol{P}^2\rangle=-\frac{s}{2}\langle V\rangle \tag{2}$$

所以

$$E=\langle T+V\rangle=\left(1-\frac{2}{s}\right)\langle T\rangle \tag{3}$$

由于 $\langle T\rangle>0$，而束缚态 $E<0$，所以存在束缚态的条件为

$$0<s<2 \tag{4}$$

在这条件下，式(3)还可以写成

$$E=\langle T+V\rangle=\left(1-\frac{s}{2}\right)\langle V\rangle=-\alpha\left(1-\frac{s}{2}\right)\left(\frac{1}{r^s}\right) \tag{5}$$

如能构造一个波包，其径向分布概率集中在 r_0 附近的 Δr 范围内，而且 $\Delta r\ll r_0$，则

$$E=-\alpha\left(1-\frac{s}{2}\right)\left\langle\frac{1}{r^s}\right\rangle\approx-\alpha\left(1-\frac{s}{2}\right)\frac{1}{r_0^s} \tag{6}$$

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

另外，波包的构成必须受不确定度关系的制约.

$$\Delta r\cdot\Delta p\gtrsim\hbar \tag{7}$$

由于束缚定态 $\langle\boldsymbol{P}\rangle=0$，所以

$$\langle \boldsymbol{P}^2\rangle=(\Delta p)^2\gtrsim\hbar^2/(\Delta r)^2 \tag{8}$$

---

① 参看 Landau 等. 量子力学. 北京：高等教育出版社，1980. §18.

$$E=\langle T+V\rangle \gtrsim \frac{\hbar^2}{2\mu(\Delta r)^2}-\frac{\alpha}{r_0^s} \tag{9}$$

由于 Δr 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，式(9)中第二项起主要作用，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.

5.2[①]　试将三维各向同性谐振子的径向方程和 Coulomb 场中束缚态的径向方程联系起来，并利用后者的本征解得出前者的本征解.

解　谐振子势场为

$$V(r)=\lambda r^2,\quad \lambda>0 \tag{1}$$

(H,l^2,l_z)的共同本征函数可以表示成

$$\psi=R(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{1}{r}\chi(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) \tag{2}$$

$\chi(r)$满足径向方程

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}r^2}+\left[E-\lambda r^2-l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\right]\chi=0 \tag{3}$$

Coulomb 吸引场为

$$V'(r)=\lambda'/r,\quad \lambda'<0 \tag{4}$$

(H,l^2,l_z)的共同本征函数表示成

$$\psi=\frac{1}{r}u(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) \tag{5}$$

$u(r)$满足径向方程

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2}+\left[E'-\frac{\lambda'}{r}-l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u=0 \tag{6}$$

如对式(3)作变换

$$r^2=\rho,\quad \chi(r)=\rho^{-1/4}v(\rho) \tag{7}$$

可得 $v(\rho)$满足的方程为

$$\frac{\hbar}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2v}{\mathrm{d}\rho^2}+\left[E''-\frac{\lambda''}{\rho}-l'(l'+1)\frac{\hbar^2}{2\mu\rho^2}\right]v=0 \tag{8}$$

其中

---

① 题 5.2 至 5.6，参看 C. Quigg & J. L. Rosner. *Physics Reports*, 1979, **56**: 167～235.

$$\boxed{E''=-\lambda/4<0,\quad \lambda''=-E/4<0} \tag{9}$$

$$l'(l'+1)=\frac{1}{4}l(l+1)-\frac{3}{16} \tag{10}$$

式(10)亦即

$$\boxed{l'=\frac{l}{2}-\frac{1}{4}} \tag{10'}$$

式(8)和(6)构造相同,其间对应关系为

$$u-v,\quad r-\rho,\quad l-l',\quad E'-E'',\quad \lambda'-\lambda''$$

如所周知,式(6)的本征解(束缚态,$E'<0$)为①

$$E'=-\frac{\mu}{2\hbar^2}(\lambda')^2(n_r+l+1)^{-2},\quad n_r=0,1,2,\cdots \tag{11}$$

$$u(r)=r^{l+1}F\left(-n_r,2l+2,\frac{2\mu\mid\lambda'\mid r}{(n_r+l+1)\hbar^2}\right)\exp\left[\frac{-\mu\mid\lambda'\mid r}{(n_r+l+1)\hbar^2}\right] \tag{12}$$

因此,式(8)的本征解为

$$E''=-\frac{\mu}{2\hbar^2}(\lambda')^2(n_r+l'+1)^{-2},\quad n_r=0,1,2,\cdots \tag{13}$$

$$v(\rho)=\rho^{l'+1}F\left(-n_r,2l'+2,\frac{2\mu\mid\lambda''\mid\rho}{(n_r+l'+1)\hbar^2}\right)\exp\left[\frac{-\mu\mid\lambda''\mid\rho}{(n_r+l'+1)\hbar^2}\right] \tag{14}$$

式(12)、(14)中 $F(\alpha,\gamma,z)$是合流超几何级数.

将式(9)及(10′)代入式(13),即可得到三维各向同性谐振子的能级公式:

$$E=\left(\frac{2\hbar^2\lambda}{\mu}\right)^{\frac{1}{2}}\left(l+2n_r+\frac{3}{2}\right).\quad n_r=0,1,2,\cdots \tag{15}$$

通常,将谐振子势场写成

$$V(r)=\lambda r^2=\frac{1}{2}\mu\omega^2r^2 \tag{1'}$$

即 $\lambda=\frac{1}{2}\mu\omega^2$. 如再令

$$N=l+2n_r \tag{16}$$

则式(15)可以写成

$$\boxed{E=\left(N+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega,\quad N=0,1,2,\cdots} \tag{15'}$$

---

① 参看曾谨言. 量子力学卷Ⅰ. 北京:科学出版社,1997. §6.3. 谐振子解见同书§6.4.

将式(14)代入式(7),则得谐振子径向波函数为(未归一化)

$$R(r)=\frac{\chi(r)}{r}=r^{l}F\left(-n_r,l+\frac{3}{2},\frac{\mu\omega}{\hbar}r^2\right)\mathrm{e}^{\frac{-\mu\omega r^2}{2\hbar}} \tag{17}$$

如令 $\alpha=\sqrt{\mu\omega/\hbar}$,上式即

$$R(r)=r^{l}F\left(-n_r,l+\frac{3}{2},\alpha^2r^2\right)\mathrm{e}^{-\alpha^2r^2/2} \tag{17'}$$

这个结果也可以直接解式(3)而得出.

5.3　对于幂函数型中心势场

$$V(r)=\lambda r^{\nu},\quad -2<\nu<\infty \tag{1}$$

试找一个变换,将 $\nu>0$ 和 $\nu<0$ 的径向方程联系起来,并加以讨论.

解　(H,l^2,l_z)的共同本征函数表示成

$$\psi=R(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{1}{r}u(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) \tag{2}$$

径向方程为

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2}+\left[E-\lambda r^{\nu}-l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u=0 \tag{3}$$

仿照上题,作变换

$$\rho=r^{\alpha},\quad u(r)=\rho^{\beta}v(\rho) \tag{4}$$

α、β 待定. 利用公式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}=\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}=\alpha\rho^{1-\frac{1}{\alpha}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho} \tag{5}$$

容易算出

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2}=\alpha^2\rho^{2+\beta-\frac{2}{\alpha}}v''+\alpha^2\left(2\beta+1-\frac{1}{\alpha}\right)\rho^{1+\beta-\frac{2}{\alpha}}v'+\alpha^2\beta\left(\beta-\frac{1}{\alpha}\right)\rho^{\beta-\frac{2}{\alpha}}v$$

取 $\beta=\frac{1}{2}\left(\frac{1}{\alpha}-1\right)$,就可以使 v' 项消失. 为此目的,可令

$$\alpha=-\nu/\nu',\quad \beta=-\frac{1}{2}\left(1+\frac{\nu'}{\nu}\right) \tag{6}$$

代入式(4),再代入式(3),即得

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\rho^{2+\nu'+2\nu'/\nu}v''+\left\{-\lambda\left(\frac{\nu'}{\nu}\right)^2+E\left(\frac{\nu'}{\nu}\right)^2\rho^{\nu'}\right\}v$$
$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\rho^{-2}\left[l(l+1)\left(\frac{\nu'}{\nu}\right)^2+\frac{1}{4}\left(\frac{\nu'}{\nu}\right)^2-\frac{1}{4}\right]\rho^{2+\nu'+2\nu'/\nu}v=0$$

如取

$$2+\nu'+2\nu'/\nu=0,\quad \text{即}\boxed{\nu'=-\frac{2\nu}{2+\nu}} \tag{7}$$

则上式成为

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}v''+\left[E'-\lambda'\rho^{\nu'}-l'(l'+1)\frac{\hbar^2}{2\mu\rho^2}\right]v=0 \tag{8}$$

其中

$$\boxed{\begin{aligned}&E'=-\lambda\left(\frac{\nu'}{\nu}\right)^2,\quad \lambda'=-E\left(\frac{\nu'}{\nu}\right)^2 &(9)\\&l'=-\left(l+\frac{1}{2}\right)\frac{\nu'}{\nu}-\frac{1}{2}=\frac{2l+1}{2+\nu}-\frac{1}{2} &(10)\end{aligned}}$$

式(8)和(3)构造相似,只是ν'、λ'、E'的正负性质分别与ν、λ、E相反,例如

$$\nu,\lambda,E>0,\quad \nu',\lambda',E'<0$$

反之亦然.由此可知,ν、$\lambda>0$时式(3)的本征解,可由式(8)中ν'、$\lambda'<0$的本征解得出.ν、$\lambda>0$时显然有无限多个束缚态能级($0<E<\infty$),因此,$-2<\nu<0$时也有无限多个能级($E<0$).题5.2就是一个具体实例,而且是能量本征方程可以解析求解的唯一情形.

根据式(4)、(6)、(7),有

$$\boxed{\rho=r^{1+\nu/2}} \tag{11}$$

当$-2<\nu<\infty$,必有$1+\nu/2>0$,因此

$$r\to 0\text{ 即 }\rho\to 0,\quad r\to\infty\text{ 即 }\rho\to\infty$$

由式(8)可知

$$\rho\to 0\text{ 处},\quad v(\rho)\to\rho^{l'+1}=\rho^{\frac{2l+1}{2+\nu}+\frac{1}{2}} \tag{12}$$

则由式(4)就有

$$r\to 0\text{ 处},\quad u(r)\to\rho^{\frac{2l+2}{2+\nu}}=r^{l+1} \tag{13}$$

这个结果可以直接从式(3)得出.

5.4 质量为μ的粒子在中心势场

$$V(r)=\lambda r^{\nu},\quad -2<\nu<\infty \tag{1}$$

中运动.只讨论能够出现束缚态的情形,即$\lambda\nu>0$的情形.(a)找出特征长度的量纲构造式,将径向方程无量纲化;(b)视$\hbar$、μ、λ为参量,确定能级构造和它们的关系;

(c)分别就 $\nu=2、1、-1$ 三种特例作具体讨论.

解　束缚态波函数(H,l^2,l_z 的共同本征函数)可以写成

$$\psi = R(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{u(r)}{r}\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) \tag{2}$$

径向方程为

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2}+\left[E-\lambda r^{\nu}-l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u=0 \tag{3}$$

方程中各项量纲相同,故特征长度的量纲构造式为

$$r\sim\left(\frac{\hbar^2}{\mu\mid\lambda\mid}\right)^{\frac{1}{2+\nu}} \tag{4}$$

特征能量的量纲构造式为

$$E\sim\frac{\hbar^2}{\mu r^2}\sim\left(\frac{\hbar^2}{\mu}\right)^{\frac{\nu}{2+\nu}}\mid\lambda\mid^{\frac{2}{2+\nu}} \tag{5}$$

据此,引入无量纲的径向距离 ρ 及能量 ε,定义为

$$\rho = r\left(\frac{2\mu\mid\lambda\mid}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2+\nu}} \tag{6}$$

$$\varepsilon = E\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(\frac{\hbar^2}{2\mu\mid\lambda\mid}\right)^{\frac{2}{2+\nu}} \tag{7}$$

并令

$$u(r)=w(\rho) \tag{8}$$

则径向方程(3)变成

$$\frac{\mathrm{d}^2w}{\mathrm{d}\rho^2}+\left[\varepsilon-\frac{\lambda}{\mid\lambda\mid}\rho^{\nu}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]w=0 \tag{9}$$

现在径向方程已经和 $\hbar$、μ、λ 的数值无关,ε 作为式(9)的特征值,当然与 $\hbar$、μ、λ 的值无关. 由式(7)易知,任何两个能级之差 ΔE 必然和式(5)具有相同的量纲构造,即

$$\boxed{\Delta E\propto\left(\frac{\hbar^2}{2\mu}\right)^{\frac{\nu}{2+\nu}}\mid\lambda\mid^{\frac{2}{2+\nu}}} \tag{5'}$$

由此可见:

1°　不论 ν 取什么值($\nu>-2$),如作用强度 $|\lambda|$ 增大,ΔE 亦随之增大.

2°　粒子质量 μ 和能级差 ΔE 的依赖关系为

$\nu>0$,　μ 增大时 ΔE 减少

$$\nu<0,\quad \mu \text{ 增大时 } \Delta E \text{ 增大}$$

具体说来,$\nu=-1,2,1$ 三种特例的规律如下:

1° Coulomb 势($\nu=-1,\lambda<0$)

$$V(r)=\lambda/r,\quad \Delta E\propto \mu\lambda^2/\hbar^2 \tag{10}$$

事实上,能级公式为

$$E_n=-\frac{\mu\lambda^2}{2n^2\hbar^2},\quad n=1,2,3,\cdots \tag{11}$$

2° 谐振子势($\nu=2,\lambda>0$)

$$V(r)=\lambda r^2,\quad \Delta E\propto \hbar\left(\frac{\lambda}{\mu}\right)^{1/2} \tag{12}$$

事实上,能级公式为

$$E_N=\left(N+\frac{3}{2}\right)\left(\frac{2\lambda\hbar^2}{\mu}\right)^{1/2},\quad N=0,1,2,\cdots \tag{13}$$

3° 线性中心势($\nu=1,\lambda>0$)

$$V(r)=\lambda r,\quad \Delta E\propto (\hbar^2\lambda^2/\mu)^{1/3} \tag{14}$$

能级公式没有简单表达式. s 态($l=0$)能级的 WKB 近似为

$$E_n\approx\left[\frac{3}{2}\pi\left(n+\frac{3}{4}\right)\right]^{\frac{2}{3}}\left(\frac{\hbar^2\lambda^2}{2\mu}\right)^{\frac{1}{3}},\quad n=0,1,2,\cdots \tag{15}$$

5.5 粒子在中心力场中运动,处于束缚态

$$\psi=R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{u(r)}{r}Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{1}$$

径向波函数的归一化条件为

$$\int_0^\infty R^2r^2\,\mathrm{d}r=\int_0^\infty u^2\,\mathrm{d}r=1 \tag{2}$$

如以原点为球心以给定的半径 a 画一球面,则粒子在球内出现概率为

$$P(a)=\int_0^a R^2r^2\,\mathrm{d}r=\int_0^a u^2\,\mathrm{d}r \tag{3}$$

如势能为幂函数型:

$$V(r)=\lambda r^\nu,\quad -2<\nu<\infty \tag{4}$$

试证明:当粒子质量 μ 或作用强度 $|\lambda|$ 增大时,概率 $P(a)$ 只能增大,不会减小.

证 以 $P(a)$ 和 μ 的关系为例. 令

$$G(a)=\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial\mu}P(a)=\int_0^a u(r)\frac{\partial u(r)}{\partial\mu}\mathrm{d}r \tag{5}$$

需要证明 $G(a)\geqslant 0$.

式(1)中 $u(r)$满足径向方程

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2}+\left[E-\lambda r^\nu-l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u=0 \tag{6}$$

按照题 5.4 分析,令

$$\rho=r\left(\frac{2\mu|\lambda|}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2+\nu}} \tag{7}$$

$$u(r)=Cw(\rho)$$

$$\varepsilon=E\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(\frac{\hbar^2}{2\mu|\lambda|}\right)^{\frac{2}{2+\nu}} \tag{8}$$

则式(6)就可以无量纲化,变成

$$\frac{\mathrm{d}^2w}{\mathrm{d}\rho^2}+\left[\varepsilon-\frac{\lambda}{|\lambda|}\rho^\nu-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]w=0 \tag{9}$$

$w(\rho)$作为方程(9)的特征解,和 μ,$|\lambda|$之值没有直接关系. 如令 $w(\rho)$满足归一化条件

$$\int_\theta^\infty w^2\mathrm{d}\rho=1 \tag{10}$$

则利用 $u(r)$的归一化条件(2)容易确定式(7)中的归一化常数 C,显然

$$C=\left(\frac{\rho}{r}\right)^{1/2}=\left(\frac{2\mu|\lambda|}{\hbar^2}\right)^{1/2(2+\nu)} \tag{11}$$

现在只需计算 $\partial u(r)/\partial\mu$,然后代入式(5)即可证明 $G(a)\geqslant 0$.

$$\begin{aligned}\frac{\partial u(r)}{\partial\mu}&=\frac{\partial C}{\partial\mu}w(\rho)+C\frac{\partial\rho}{\partial\mu}\frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}\rho}\\&=\frac{C}{2(2+\nu)\mu}w(\rho)+\frac{C}{(2+\nu)\mu}\rho\frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}\rho}\\&=\frac{1}{2(2+\nu)\mu}\left[u(r)+2r\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}r}\right]\\&=\frac{1}{2(2+\nu)\mu}\frac{1}{u(r)}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}[ru^2(r)]\end{aligned} \tag{12}$$

代入式(5),即得

$$G(a)=\frac{1}{2(2+\nu)\mu}ru^2\Big|_{r=0}^{r=a}$$

$$= \frac{1}{2(2+\nu)\mu} a u^2(a) \tag{13}$$

由上式易见

$$G(a) \geqslant 0 \tag{14}$$

这正是所要证明的. 等号仅出现于 $u(a)=0$ 的情形,即 $r=a$ 恰好是 $u(r)$的节点.

在 ρ-r 关系式(7)中,μ 和$|\lambda|$地位相同,所以 $P(a)$对$|\lambda|$的依赖关系可以仿照以上步骤进行推导、分析、结果为

$$\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial|\lambda|}P(a) = \int_0^a u(r)\frac{\partial u(r)}{\partial|\lambda|}\mathrm{d}r = \frac{1}{2(2+\nu)|\lambda|}au^2(a) \geqslant 0 \tag{15}$$

即作用强度增大时,概率 $P(a)$只能增大,不会减小.

式(13)中,如 $\nu\to\infty$,则 $G(a)\to 0$,这时 $P(a)$与 μ 无关. 这正好反映如下事实:无限深势阱中的粒子,波函数与粒子质量无关,因此粒子的空间概率分布与质量无关.

本题证明的结论可以从量纲的角度给以简单解释如下:特征长度 r_0 和 μ、$|\lambda|$的关系(参看题 5.4)为

$$r_0 = \left(\frac{\hbar^2}{\mu|\lambda|}\right)^{\frac{1}{2+\nu}} \tag{16}$$

当 μ 或$|\lambda|$变化时,如 a/r_0 保持不变,则概率 $P(a)$也不变. 本题的条件是 a 给定不变,因此 μ 或$|\lambda|$增大时,r_0 变小,a/r_0 增大,亦即,如距离以特征长度 r_0 为单位,则 μ 或$|\lambda|$增大时,球面半径(a/r_0)增大,故粒子在球内出现概率增大.

5.6 粒子在中心势场 $V(r)$中运动,处于能量本征态

$$\psi = R(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{u(r)}{r}\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) \tag{1}$$

如 ψ 已经归一化,则势能平均值等于

$$\langle V\rangle = \int V\psi^*\,\psi\mathrm{d}^3x = \int_0^\infty V(r)u^2(r)\mathrm{d}r \tag{2}$$

试证明:如 $V(r)$为单调上升函数,即 $\mathrm{d}V/\mathrm{d}r>0$,则对于任意给定的距离 a,均有

$$\int_0^a (V-\langle V\rangle)u^2\mathrm{d}r < 0 \tag{3}$$

证 由于 $V(r)$是单调上升的,显然对于粒子的任何状态,总可以找到某个 r_0,使

$$V(r_0) = \langle V\rangle \tag{4}$$

而且，当 $r<r_0$ 时，$V(r)<\langle V\rangle$；当 $r>r_0$ 时，$V(r)>\langle V\rangle$. 因此，如 $a<r_0$，式(3)显然成立. 如 $a\geqslant r_0$，则

$$\int_0^\infty (V-\langle V\rangle)u^2\mathrm{d}r>0$$

但因

$$\int_0^\infty (V-\langle V\rangle)u^2\mathrm{d}r=\langle V\rangle-\langle V\rangle=0 \tag{5}$$

所以仍得

$$\int_0^a (V-\langle V\rangle)u^2\mathrm{d}r<0 \tag{3}$$

5.7　对于中心力场 $V(r)$ 的任何一个束缚态，证明

$$\left\langle\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right\rangle-\left\langle\frac{\boldsymbol{l}^2}{\mu r^3}\right\rangle=\frac{2\pi\hbar^2}{\mu}\mid\psi(0)\mid^2 \tag{1}$$

并解释其经典力学含义.

证　Hamilton 算符为

$$H=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(r)=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\boldsymbol{l}^2}{2\mu r^2}+V(r) \tag{2}$$

计算算符 $\frac{\partial}{\partial r}$ 和 H 的对易式，容易得到

$$\left[\frac{\partial}{\partial r},H\right]=\frac{\hbar^2}{\mu r^2}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\boldsymbol{l}^2}{\mu r^3}+\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \tag{3}$$

在任何一个束傅态下计算上式的平均值，左端贡献为 0，所以

$$\left\langle\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right\rangle-\left\langle\frac{\boldsymbol{l}^2}{\mu r^3}\right\rangle=-\frac{\hbar^2}{\mu}\left\langle\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\right\rangle=-\frac{\hbar^2}{\mu}\int\psi^*\ \frac{1}{r^2}\frac{\partial\psi}{\partial r}r^2\mathrm{d}r\mathrm{d}\Omega$$

$$=-\frac{\hbar^2}{\mu}\int\mathrm{d}\Omega\int_0^\infty\psi^*\ \frac{\partial\psi}{\partial r}\mathrm{d}r \tag{4}$$

上式左端之平均值为实数，则右端亦为实数，因此，

$$\int_0^\infty\psi^*\ \frac{\partial\psi}{\partial r}\mathrm{d}r=\int_0^\infty\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial r}\mathrm{d}r=\frac{1}{2}\int_0^\infty\frac{\partial}{\partial r}(\psi^*\psi)\mathrm{d}r$$

$$=\frac{1}{2}\psi^*\psi\Big|_{r=0}^{r\to\infty}=-\frac{1}{2}\mid\psi(0)\mid^2 \tag{5}$$

代入式(4)，并计及 $\int\mathrm{d}\Omega=4\pi$，即得式(1).

在多数场合下,束缚态波函数 ψ 是$(H,\boldsymbol{l}^2,l_2)$的共同本征函数,即

$$\psi = R(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) \tag{6}$$

这时式(1)中 $\boldsymbol{l}^2$ 可以用本征值 $l(l+1)\hbar^2$ 代替. 由于只有 s 态$(l=0)\psi(0)$才不等于0,因此式(1)等价于

(a)
$$\boxed{\left\langle \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right\rangle = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu} \mid \psi(0) \mid^2, \quad l=0} \tag{7a}$$

(b)
$$\boxed{\left\langle \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right\rangle = \left\langle \frac{\boldsymbol{l}^2}{\mu r^3} \right\rangle = l(l+1)\frac{\hbar^2}{\mu}\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle, \quad l\neq 0} \tag{7b}$$

讨论:式(7a)显含 $\hbar$,所以是量子效应,没有经典对应. 式(7b)则有经典对应. 经典力学中,粒子在中心力场中运动时,对于任何周期性轨道,均有

$$E=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}+V(r)=\frac{\mu}{2}\left(\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\right)^2+\frac{\boldsymbol{l}^2}{2\mu r^2}+V(r)$$

由于 $\boldsymbol{l}$ 守恒,上式对 r 求导,得到

$$\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}-\frac{\boldsymbol{l}^2}{\mu r^3}=-\frac{\mu}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\right)^2=-\mu\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\right)$$

上式求周期平均值,即得

$$\left(\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right)_{\text{平均}}-\frac{\boldsymbol{l}^2}{\mu}\left(\frac{1}{r^3}\right)_{\text{平均}}=-\frac{\mu}{\oint \mathrm{d}t}\oint \mathrm{d}t\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\right)=-\mu\oint \mathrm{d}\left(\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\right)\Big/\oint \mathrm{d}t=0$$

其意义为:外力的周期平均值等于向心力的周期平均值. 式(7b)是上式的量子力学推广.

5.8 类氢离子(核电荷 Ze)中电子处于束缚态 ψ_{nlm},计算$\langle r^\lambda\rangle$,$\lambda=-1,-2,-3$.

解 已知类氢离子的能级为

$$E_{nlm}=E_n=-\frac{Z^2e^2}{2n^2a_0},\quad n=n_r+l+1 \tag{1}$$

其中 $a_0=\hbar^2/\mu e^2$ 为 Bohr 半径. 根据位力定理,

$$\left\langle \frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu} \right\rangle_{nlm}=\left\langle \frac{r}{2}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right\rangle_{nlm}=\frac{Ze^2}{2}\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nlm}=-\frac{1}{2}\langle V\rangle_{nlm} \tag{2}$$

所以

$$E_n=\frac{1}{2}\langle V\rangle_{nlm}=-\frac{Ze^2}{2}\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nlm}$$

$$\boxed{\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nlm} = -\frac{2E_n}{Ze^2} = \frac{Z}{n^2 a_0}. \quad n = 1,2,3,\cdots} \tag{3}$$

其次，ψ_{nlm} 的球坐标表示式为

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) \tag{4}$$

它是 (H, l^2, l_z) 的共同本征函数，满足能量本征方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r\psi_{nlm} + \left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{r}\right]\psi_{nlm} = E_n\psi_{nlm} \tag{5}$$

总能量算符等价于

$$H \to -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{r} \tag{6}$$

视 l 为参变量，式(6)对 l 求导，利用 Hellmann 定理(参阅第八章)，即得

$$\frac{\partial E_n}{\partial l} = \left\langle \frac{\partial H}{\partial l} \right\rangle_{nlm} = \left(l + \frac{1}{2}\right)\frac{\hbar^2}{\mu}\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{nlm} \tag{7}$$

由于 $n = n_r + l + 1$，所以

$$\frac{\partial E_n}{\partial l} = \frac{\partial E_n}{\partial n} = \frac{Z^2 e^2}{n^3 a_0} \tag{8}$$

代入式(7)，并利用 $a_0 = \hbar^2/\mu e^2$，即得

$$\boxed{\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{nlm} = \frac{1}{\left(l + \frac{1}{2}\right)n^3}\frac{Z^2}{a_0^2}} \tag{9}$$

最后，计算 $\langle r^{-3} \rangle$.

对于 s 态 $(l=0)$，$r \to 0$ 处 $\psi \to C$(常数)，所以

$$\langle r^{-3} \rangle_{n00} \to \infty \tag{10}$$

当 $l \neq 0$，利用题(5.7)式(7b)，即得

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nlm} = \frac{Z}{l(l+1)a_0}\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{nlm} \tag{11}$$

因此

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nlm} = \frac{1}{n^3 l\left(l + \frac{1}{2}\right)(l+1)}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 \tag{12}$$

当 $l \to 0$，上式右端 $\to \infty$，所以上式实际上适用于一切 l 值.

讨论　由于总能量算符及径向方程均与磁量子数 m 无关，所以 $\langle r^\lambda \rangle$ 与 m 无关. 但 $\langle r^{-1} \rangle$ 与角量子数 l 也无关，仅取决于主量子数 n. $\langle r^{-2} \rangle$ 及 $\langle r^{-3} \rangle$ 则与 n、l 均

有关,亦即对于能级相同但"轨道形状"不同(l 不同)的各状态,$\langle r^{-2}\rangle$或$\langle r^{-3}\rangle$具有不同的数值.

利用式(9),易得 ψ_{nlm} 态下离心势能的平均值为

$$\left\langle \frac{\boldsymbol{l}^2}{2\mu r^2} \right\rangle_{nlm} = \frac{l(l+1)Z^2e^2}{(2l+1)n^3a_0} = -\frac{l(l+1)}{\left(l+\frac{1}{2}\right)n}E_n \tag{13}$$

由于$(-E_n)$为动能平均值,所以在动能中离心势能所占比例为 $l(l+1)\Big/\left(l+\frac{1}{2}\right)n$,当 n 确定后,l 越大,这个比例越大. 当 l 取最大值($l=n-1$),这个比例为$(n-1)\Big/\left(n-\frac{1}{2}\right)$,这时径向动能仅占动能的 $1/(2n-1)$. 所以,如 $n\gg1$,$(n,n-1,m)$态中径向动能就很小,这种状态相当于 Bohr 量子论中的圆形轨道.

5.9 对于类氢离子(核电荷 Ze)的$(H,\boldsymbol{l}^2,l_z)$共同本征态 ψ_{nlm},证明各$\langle r^\lambda\rangle$之间有递推关系(Kramers 公式)

$$\frac{\lambda+1}{n^2}\langle r^\lambda\rangle-(2\lambda+1)\frac{a_0}{Z}\langle r^{\lambda-1}\rangle+\frac{\lambda}{4}[(2l+1)^2-\lambda^2]\frac{a_0^2}{Z^2}\langle r^{\lambda-2}\rangle=0 \tag{1}$$

求出这公式成立的条件. 并用来计算$\langle r\rangle$及$\langle r^2\rangle$.

解 ψ_{nlm} 的球坐标表示式为

$$\psi_{nlm}=R_{nl}(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{1}{r}u_{nl}(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) \tag{2}$$

r^λ 的平均值为

$$\langle r^\lambda\rangle_{nlm}=\int r^\lambda\mid\psi_{nlm}\mid^2\mathrm{d}^3x=\int_0^\infty r^\lambda(u_{nl})^2\mathrm{d}r \tag{3}$$

u_{nl} 满足径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}u''+\left[l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}-\frac{Ze^2}{r}\right]u=E_nu \tag{4}$$

由于

$$E_n=-\frac{Z^2e^2}{2n^2a_0},\quad a_0=\frac{\hbar^2}{\mu e^2} \tag{5}$$

式(4)可以写成

$$u''+\left[\frac{2Z}{a_0r}-\frac{l(l+1)}{r^2}-\left(\frac{Z}{na_0}\right)^2\right]u=0 \tag{4'}$$

用 $r^\lambda u$ 乘式(4′)各项,并积分$\int_0^\infty\cdots\mathrm{d}r$,后三项显然给出 $r^{\lambda-1}$、$r^{\lambda-2}$及 r^λ 的平均值,而

第一项给出

$$\int_0^\infty r^\lambda uu''\mathrm{d}r = r^\lambda uu'\Big|_0^\infty - \int_0^\infty (r^\lambda u' + \lambda r^{\lambda-1}u)u'\mathrm{d}r$$

$$= \left(r^\lambda uu' - \frac{\lambda}{2}r^{\lambda-1}u^2\right)\Big|_0^\infty + \frac{\lambda(\lambda-1)}{2}\langle r^{\lambda-2}\rangle - \int_0^\infty r^\lambda (u')^2\mathrm{d}r \tag{6}$$

如果 λ 的取值能够保证

$$r^\lambda uu'\Big|_0^\infty = 0, \quad r^{\lambda-1}u^2\Big|_0^\infty = 0 \tag{7}$$

我们就有下列初步结果：

$$\left[\frac{\lambda(\lambda-1)}{2} - l(l+1)\right]\langle r^{\lambda-2}\rangle + \frac{2Z}{a_0}\langle r^{\lambda-1}\rangle - \left(\frac{Z}{na_0}\right)^2\langle r^\lambda\rangle = \int_0^\infty r^\lambda (u')^2\mathrm{d}r \tag{8}$$

再用 $2r^{\lambda+1}u'$ 乘式(4′)各项，并积分，依次得到

$$\int_0^\infty 2r^{\lambda+1}u'u''\mathrm{d}r = r^{\lambda+1}(u')^2\Big|_0^\infty - \int_0^\infty (\lambda+1)r^\lambda (u')^2\mathrm{d}r$$

$$\int_0^\infty 2r^{\lambda+1}u'u\mathrm{d}r = r^{\lambda+1}u^2\Big|_0^\infty - (\lambda+1)\langle r^\lambda\rangle$$

$$\int_0^\infty 2r^{\lambda+1}u'\frac{u}{r}\mathrm{d}r = r^\lambda u^2\Big|_0^\infty - \lambda\langle r^{\lambda-1}\rangle$$

$$\int_0^\infty 2r^{\lambda+1}u'\frac{u}{r^2}\mathrm{d}r = r^{\lambda-1}u^2\Big|_0^\infty - (\lambda-1)\langle r^{\lambda-2}\rangle$$

在式(7)得到保证的条件下，以上各式中第一项均为 0，故得

$$(\lambda-1)l(l+1)\langle r^{\lambda-2}\rangle - 2\lambda\frac{Z}{a_0}\langle r^{\lambda-1}\rangle + (\lambda+1)\left(\frac{Z}{na_0}\right)^2\langle r^\lambda\rangle = (\lambda+1)\int_0^\infty r^\lambda (u')^2\mathrm{d}r \tag{9}$$

将式(8)、(9)合并，消去右端的积分，即得式(1). 式(1)成立的条件即式(7). 由于[①]

$$r\to 0, \quad u\sim r^{l+1}$$

$$r\to\infty, \quad u\sim r^n\mathrm{e}^{-Zr/na_0} \tag{10}$$

易见，为了保证式(7)成立，充分而且必要条件为

$$\boxed{\lambda > -(2l+1)} \tag{11}$$

在式(1)中，如取 $\lambda=0$，并注意到 $\langle r^0\rangle=1$，立即得到

$$\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle_{nlm} = \frac{Z}{n^2a_0} \tag{12}$$

① 参看曾谨言. 量子力学卷Ⅰ. 北京：科学出版社，1997. §6.3.

上题中已经用位力定理得到这个结果.

依次再取 $\lambda=1,2$,就得到

$$\langle r\rangle_{nlm}=\frac{1}{2}[3n^2-l(l+1)]\frac{a_0}{Z} \tag{13}$$

$$\langle r^2\rangle_{nlm}=\frac{n^2}{2}[1+5n^2-3l(l+1)]\left(\frac{a_0}{Z}\right)^2 \tag{14}$$

例如

$$\begin{aligned}&\text{1s 态(基态)},\quad \langle r\rangle_{100}=\frac{3}{2},\langle r^2\rangle_{100}=3\\ &\text{2s 态},\quad \langle r\rangle_{200}=6,\langle r^2\rangle_{200}=42\\ &\text{2p 态},\quad \langle r\rangle_{21m}=5,\langle r^2\rangle_{21m}=30\end{aligned} \tag{15}$$

式(15)中,$\langle r\rangle$以 a_0/Z 为单位,$\langle r^2\rangle$以 a_0^2/Z^2 为单位.

注意,如限于本题式(1),不能计算$\langle r^{-2}\rangle$,但如利用上题关于$\langle r^{-2}\rangle$的计算结果,则只要在式(1)中取 $\lambda=-1$,就可算出$\langle r^{-3}\rangle$,结果和上题相同. 如再取 $\lambda=-2(l\geqslant 1)$,就可算出

$$\langle r^{-4}\rangle=\left(\frac{Z}{a_0}\right)^4\frac{3n^2-l(l+1)}{2n^5\left(l-\frac{1}{2}\right)l\left(l+\frac{1}{2}\right)(l+1)\left(l+\frac{3}{2}\right)} \tag{16}$$

计算其他$\langle r^\lambda\rangle$可以依此类推①.

5.10 三维各向同性谐振子,总能量算符为

$$H=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega^2r^2=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+\frac{1}{2}\mu\omega^2r^2 \tag{1}$$

对于$(H,\boldsymbol{l}^2,l_z)$的共同本征态

$$\psi_{n_rlm}=R_{n_rl}(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{1}{r}u_{n_rl}(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) \tag{2}$$

计算$\langle r^{-2}\rangle$,进而计算离心势能和径向动能平均值.

解 三维各向同性谐振子的能级为

$$E_{n_rlm}=E_N=\left(N+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega,\quad N=l+2n_r. \tag{3}$$

对于 ψ_{n_rlm},H 等价于

---

① 参看 H. A. Kramers. Quantum Mechanics. Amsterdam: North-Holland, 1958. § 59.

$$H \to -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 \tag{4}$$

根据 Hellmann 定理，应有

$$\frac{\partial E_{n_r lm}}{\partial l} = \left\langle \frac{\partial H}{\partial l} \right\rangle_{n_r lm} = \left(l+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar^2}{\mu}\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{n_r lm} \tag{5}$$

由式(3)易见

$$\frac{\partial E_{n_r lm}}{\partial l} = \frac{\partial E_N}{\partial N} = \hbar\omega \tag{6}$$

代入式(5)，即得

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{n_r lm} = \frac{1}{l+\frac{1}{2}}\frac{\mu\omega}{\hbar} = \frac{\alpha^2}{l+\frac{1}{2}}, \quad \alpha = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}} \tag{7}$$

离心势能平均值为

$$\left\langle \frac{\boldsymbol{l}^2}{2\mu r^2} \right\rangle_{n_r lm} = \frac{l(l+1)}{2l+1}\hbar\omega \tag{8}$$

注意，离心势能平均值直接由角量子数 l 决定，而与主量子数 N 无关(这一点和氢原子不同，请参看题 5.8). 同属能级 E_N 的各态中，以 $l=N$ 态的离心势能为最高.

$$\left\langle \frac{\boldsymbol{l}^2}{2\mu r^2} \right\rangle_{l=N} = \frac{N(N+1)}{2N+1}\hbar\omega \tag{9}$$

相应的径向动能仅为

$$\begin{aligned}\left\langle \frac{p_r^2}{2\mu} \right\rangle_{l=N} &= \left\langle \frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu} - \frac{\boldsymbol{l}^2}{2\mu r^2} \right\rangle_{l=N} = \frac{E_N}{2} - \frac{N(N+1)}{2N+1}\hbar\omega \\ &= \left(1+\frac{1}{4N+2}\right)\frac{\hbar\omega}{2}\end{aligned} \tag{10}$$

当 $N \gg 1$，就有

$$\left\langle \frac{p_r^2}{2\mu} \right\rangle_{l=N} \approx \frac{1}{2}\hbar\omega \tag{10'}$$

这种情况相当于 Bohr 量子论中的圆形轨道.

径向动能平均值的一般公式为

$$\left\langle \frac{p_r^2}{2\mu} \right\rangle_{n_r lm} = \frac{E_N}{2} - \left\langle \frac{\boldsymbol{l}^2}{2\mu r^2} \right\rangle_{n_r lm} = \left[N + \frac{3}{2} - \frac{l(l+1)}{l+1/2}\right]\frac{\hbar\omega}{2} \tag{11}$$

如 n_r、$l \gg 1$(准经典情形)，可以作如下近似处理：

$$\frac{l(l+1)}{l+\frac{1}{2}} \approx l+\frac{1}{2}$$

式(8)和(11)成为

$$\left\langle \frac{\boldsymbol{l}^2}{2\mu r^2} \right\rangle_{n_r lm} \approx \left(l+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar\omega}{2} = \left(\frac{l}{2}+\frac{1}{4}\right)\hbar\omega \tag{8'}$$

$$\left\langle \frac{p_r^2}{2\mu} \right\rangle_{n_r lm} \approx (N+1-l)\,\frac{\hbar\omega}{2} = \left(n_r+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{11'}$$

5.11 对于三维各向同性谐振子,(H, l^2, l_z)的共同本征态为 $\psi_{n_r lm}$,求各$\langle r^\lambda\rangle$的递推关系,并用以计算$\langle r^2\rangle$及$\langle r^4\rangle$.

解 $\psi_{n_r lm}$可以表示成①

$$\psi_{n_r lm} = R_{n_r l}(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{1}{r}u_{n_r l}(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) \tag{1}$$

$u_{n_r l}$满足径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}u'' + \left[\frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 + l(l+1)\,\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u = E_N u \tag{2}$$

利用能级公式

$$E_N = \left(N+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega \tag{3}$$

可将式(2)改写成

$$u'' + \left[(2N+3)\alpha^2 - \alpha^4 r^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]u = 0 \tag{2'}$$

其中 $\alpha^2 = \mu\omega/\hbar$. $u_{n_r l}$的渐近行为是

$$r\to 0, \quad u \sim r^{l+1}$$

$$r\to \infty, \quad u \sim r^{N+1}\mathrm{e}^{-a^2 r^2/2} \tag{4}$$

完全仿照题 5.9 的方法,即分别以 $r^\lambda u$ 和 $2r^{\lambda+1}u'$乘式(2'),再积分,相消,可得$\langle r^\lambda\rangle$的递推关系:

$$(\lambda+2)\alpha^4\langle r^{\lambda+2}\rangle - (\lambda+1)(2N+3)\alpha^2\langle r^\lambda\rangle + \frac{\lambda}{4}[(2l+1)^2-\lambda^2]\langle r^{\lambda-2}\rangle = 0 \tag{5}$$

适用条件仍为

---

① 参看曾谨言. 量子力学卷Ⅰ. 北京:科学出版社,1997. §6.4.

$$\lambda > -(2l+1) \tag{6}$$

式(5)中取 $\lambda=0$，立即得到

$$\langle r^2 \rangle_{n_r lm} = \left(N+\frac{3}{2}\right)\alpha^{-2} = \left(N+\frac{3}{2}\right)\frac{\hbar}{\mu\omega} \tag{7}$$

这个结果很容易由位力定理导出.

式(5)中取 $\lambda=2$，并利用式(7)，可得

$$\langle r^4 \rangle_{n_r lm} = \frac{1}{8}[3(2N+3)^2 - (2l+3)(2l-1)]\alpha^{-4} \tag{8}$$

例如，$N=0$(基态，$l=n_r=0$)，

$$\langle r^2 \rangle = \frac{3}{2}\alpha^{-2}, \quad \langle r^4 \rangle = \frac{15}{4}\alpha^{-4} \tag{9}$$

$N=1$(第一激发能级，$l=1, n_r=0$)，

$$\langle r^2 \rangle = \frac{5}{2}\alpha^{-2}, \quad \langle r^4 \rangle = \frac{35}{4}\alpha^{-4} \tag{10}$$

这些结果不难用直接积分的办法加以验证.

对于给定的能级 E_N，l 可取 $N, N-2, \cdots$(1 或 0). 式(7)表明 $\langle r^2 \rangle$ 只与 N 直接有关，与 l 无关. 式(8)则表明 $\langle r^4 \rangle$ 与 N, l 都有关，N 给定后，l 越大，$\langle r^4 \rangle$ 越小.

5.12　用不确定度关系估算氦原子的基态能量.

解　氦原子中共有两个电子，电荷各为 $-e$，核电荷 $2e$，总能量算符为

$$H = \frac{1}{2m}(\boldsymbol{p}_1^2 + \boldsymbol{p}_2^2) - 2e^2\left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right)+\frac{e^2}{r_{12}} \tag{1}$$

设原子的最概然半径为 $r\sim R$，则在式(1)的基态平均值中可取

$$\left\langle \frac{1}{r_1} \right\rangle = \left\langle \frac{1}{r_2} \right\rangle \approx \frac{1}{R}$$

$$\left\langle \frac{1}{r_{12}} \right\rangle \approx \frac{1}{2R} \tag{2}$$

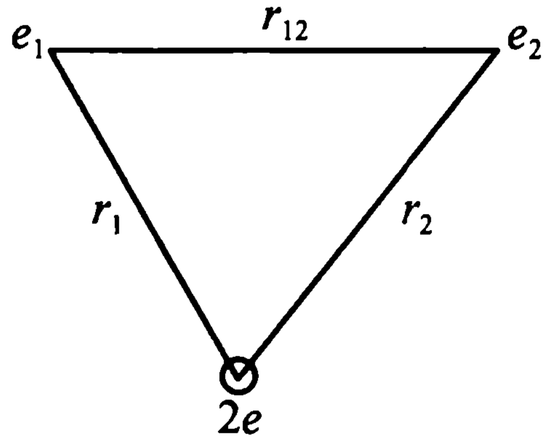


图 5.12

根据不确定度关系，可取

$$\langle \boldsymbol{p}_1^2 \rangle = \langle \boldsymbol{p}_2^2 \rangle \approx \hbar^2/R^2 \tag{3}$$

因此，基态能量约为

$$E = \langle H \rangle \approx \frac{\hbar^2}{mR^2} - \left(4-\frac{1}{2}\right)\frac{e^2}{R} \tag{4}$$

R 的取值应使 E 为极小. 由极值条件

$$\partial E/\partial R = 0$$

求得

$$R = \frac{1}{2-\frac{1}{4}}\frac{\hbar^2}{m_e e^2} = \frac{4}{7}a_0 \tag{5}$$

其中 $a_0 = \hbar^2/m_e e^2$ 为 Bohr 半径. 将式(5)代入式(4),即得

$$E \approx -\left(\frac{7}{4}\right)^2 \frac{e^2}{a_0} = -3.06\frac{e^2}{a_0} \tag{6}$$

氦原子基态能量的实验值为 $-2.9035e^2/a_0$.

5.13 按照核力的介子理论,核力的较长程部分是通过核子间吞吐 π 介子而传递的. 已知 π 介子质量 $m_\pi \sim 270m_e$,试据此估算核力力程.

解一 实验表明,核力与电荷无关. 因此在力程 r_0 的结构式中,除介子质量 m_π 外,只能出现普适常数. 由于问题涉及到介子的生、灭,有关的普适常数中应包含光速 c(代表相对论效应)和 Planck 常量 $\hbar$(代表量子效应). 从量纲结构看,由 m_π、$\hbar$ 和 c 只能构造出一种特征长度,即 Compton 波长,因此,核力的较长程部分的力程大致是

$$r_0 \approx \frac{\hbar}{m_\pi c} = \frac{\hbar c}{m_\pi c^2} = \frac{197\ \text{MeV}\cdot\text{fm}}{270\times 0.511\ \text{MeV}} = 1.4\ \text{fm}$$

解二 利用不确定度关系. 问题涉及的能量不定值约为

$$\Delta E \sim m_\pi c^2$$

动量不定值约为

$$\Delta p \sim \Delta E/c \sim m_\pi c$$

位置不定值约为

$$\Delta x \sim \hbar/\Delta p \sim \hbar/m_\pi c$$

Δx(按数量级说)应该就是核力力程 r_0,所以

$$r_0 \approx \hbar/m_\pi c = 1.4\ \text{fm}$$

5.14 对于氢原子的基态,求 Δx、Δp_x,验证不确定度关系.

解 氢原子基态波函数为

$$\psi_{100} = \left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right)^{\frac{1}{2}} \mathrm{e}^{-r/a_0} \tag{1}$$

宇称为偶. 由于 x、p_x 均为奇宇称算符，所以

$$\langle x\rangle = 0, \quad \langle p_x\rangle = 0 \tag{2}$$

由于 ψ_{100} 各向同性，呈球对称分布，显然有

$$\begin{aligned}\langle x^2\rangle &= \langle y^2\rangle = \langle z^2\rangle = \frac{1}{3}\langle r^2\rangle \\ \langle p_x^2\rangle &= \langle p_y^2\rangle = \langle p_z^2\rangle = \frac{1}{3}\langle \boldsymbol{p}^2\rangle\end{aligned} \tag{3}$$

容易算出

$$\langle r^2\rangle = \int r^2(\psi_{100})^2 \mathrm{d}^3x = 3a_0^2 \tag{4}$$

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{p}^2\rangle &= \int |\, \boldsymbol{p}\psi_{100}\,|^2 \mathrm{d}^3x = \hbar^2\int |\,\nabla\psi_{100}\,|^2 \mathrm{d}^3x \\ &= \hbar^2\int\left(\frac{\partial}{\partial r}\psi_{100}\right)^2 \mathrm{d}^3x = \hbar^2/a_0^2\end{aligned} \tag{5}$$

因此

$$\langle x^2\rangle = a_0^2, \quad \Delta x = [\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2]^{\frac{1}{2}} = a_0 \tag{6}$$

$$\langle p_x^2\rangle = \hbar^2/3a_0^2, \quad \Delta p_x = [\langle p_x^2\rangle - \langle p_x\rangle^2]^{\frac{1}{2}} = \hbar/\sqrt{3}a_0 \tag{7}$$

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = \hbar/\sqrt{3} \tag{8}$$

不确定度关系的普遍结论是

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geqslant \hbar/2 \tag{9}$$

显然式(8)和(9)是一致的，而且 $\hbar/\sqrt{3}$ 很接近式(9)规定的下限 $\hbar/2$.

5.15　对于类氢离子(核电荷 Ze)的 $l=n-1(n_r=0)$ 状态，计算(a)最概然半径 $r_{概}$；(b)平均半径 $\langle r\rangle$；(c)涨落 Δr，并和 $\langle r\rangle$ 比较.

解　类氢离子中电子波函数 ψ_{nlm} 可以表示成

$$\psi_{nlm} = R_{n_r l}(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{1}{r}u_{n_r l}(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) \tag{1}$$

(a) 最概然半径由径向概率分布的极值条件

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}u_{n_r l}(r) = 0 \tag{2}$$

决定. $l=n-1$ 时，$n_r=0$，

$$u_{0,n-1}(r) = Cr^n \mathrm{e}^{-Zr/na_0} \tag{3}$$

利用极值条件(2)，容易求得

$$r_{概} = n^2 a_0 / Z \tag{4}$$

这结果和 Bohr 量子论中圆轨道的半径公式一致.

(b) r 的平均值已在题 5.9 中普遍算出,对于本题,

$$\langle r \rangle_{n,n-1,m} = \left(n^2 + \frac{n}{2}\right) a_0 / Z \tag{5}$$

(c) r^2 的平均值也已在题 5.9 中算出.对于本题,

$$\begin{aligned} \langle r^2 \rangle_{n,n-1,m} &= \left(n^4 + \frac{3}{2}n^3 + \frac{1}{2}n^2\right)\left(\frac{a_0}{Z}\right)^2 \\ &= n^2\left(n + \frac{1}{2}\right)(n+1)\left(\frac{a_0}{Z}\right)^2 \end{aligned} \tag{6}$$

因此,r 的涨落为

$$\Delta r = \left[\langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2\right]^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{n^3}{2} + \frac{n^2}{4}\right)^{\frac{1}{2}} a_0 / Z \tag{7}$$

$$\Delta r / \langle r \rangle = \sqrt{\frac{n}{2}} \Big/ \sqrt{n^2 + \frac{n}{2}} = 1/\sqrt{2n+1} \tag{8}$$

可见,n 越大,$\Delta r/\langle r \rangle$越小,量子力学的结果和 Bohr 量子化轨道的图像越加接近.

5.16 对于氢原子的"圆轨道"$(n, n-1, m)$态,求电子在经典禁区($V > E$ 的区域)出现的概率.

解 能级 E_n 给定后,经典允许区和禁区以球面 r_n 为分界,球外为禁区. r_n 由下式决定:

$$V(r_n) = -\frac{e^2}{r_n} = E_n = \frac{-e^2}{2n^2 a_0} \tag{1}$$

求得

$$r_n = 2n^2 a_0 \tag{2}$$

它是最概然半径的 2 倍. $(n, n-1, m)$态波函数为

$$\psi_{n,n-1,m} = C r^{n-1} \mathrm{e}^{-r/na_0} \mathrm{Y}_{n-1,m}(\theta, \varphi) \tag{3}$$

其中 C 为归一化常数. 容易求得

$$C^2 = \frac{1}{(2n)!}\left(\frac{2}{na_0}\right)^{2n+1} \tag{4}$$

电子在经典禁区出现的概率为

$$w = \int_{r_n}^{\infty} (R_{n,n-1})^2 r^2 \mathrm{d}r = C^2 \left(\frac{na_0}{2}\right)^{2n+1} \int_{4n}^{\infty} x^{2n} \mathrm{e}^{-x} \mathrm{d}x$$

这个积分可以用分部积分法算出，结果为

$$w=\left[1+4n+\frac{(4n)^2}{2!}+\frac{(4n)^3}{3!}+\cdots+\frac{(4n)^{2n}}{(2n)!}\right]\mathrm{e}^{-4n} \tag{5}$$

例如，

$$\begin{aligned}
&n=1(\text{基态}), \quad w=13\times\mathrm{e}^{-4}=0.2381\\
&n=2, \qquad\quad w=297\times\mathrm{e}^{-8}=0.0996\\
&n=3, \qquad\quad w=7457.8\times\mathrm{e}^{-12}=0.0458\\
&n=4, \qquad\quad w=195381\times\mathrm{e}^{-16}=0.0220\\
&n=5, \qquad\quad w=5244270\times\mathrm{e}^{-20}=0.0108\\
&n=10, \qquad\quad w=8.669\times10^{13}\times\mathrm{e}^{-40}=0.000368
\end{aligned}$$

可见，n 很大时，量子力学结果和经典力学结果趋于一致. 这正是对应原理的具体体现.

5.17　对于氢原子的各 s 态($nlm=n00$)，计算 Δx、Δp_x，并讨论 $n\gg1$ 的情形.

解　由于 s 态各向同性，所以

$$\langle x\rangle=0, \quad \langle p_x\rangle=0$$

$$\langle x^2\rangle=\frac{1}{3}\langle r^2\rangle, \quad \langle p_x^2\rangle=\frac{1}{3}\langle \boldsymbol{p}^2\rangle \tag{1}$$

r^2 平均值已在题 5.9 中算出，对于 s 态，为

$$\langle r^2\rangle_{n00}=\frac{n^2}{2}(1+5n^2)a_0^2 \tag{2}$$

因此

$$\Delta x=\sqrt{\langle x^2\rangle}=\sqrt{\langle r^2\rangle}/\sqrt{3}=\frac{n}{\sqrt{6}}\sqrt{1+5n^2}\,a_0 \tag{3}$$

$$\text{当 } n\gg1, \quad \Delta x\approx\sqrt{\frac{5}{6}}n^2a_0 \tag{3'}$$

$\boldsymbol{p}^2$ 平均值可以利用位力定理和能级公式求出.

$$\frac{1}{2\mu}\langle \boldsymbol{p}^2\rangle_{n00}=|\,E_n\,|=\frac{e^2}{2n^2a_0} \tag{4}$$

$$\langle \boldsymbol{p}^2\rangle_{n00}=\frac{\mu e^2}{n^2a_0}=\frac{\hbar^2}{n^2a_0^2} \tag{5}$$

因此

$$\Delta p_x=\sqrt{\langle p_x^2\rangle}=\sqrt{\langle \boldsymbol{p}^2\rangle}/\sqrt{3}=\hbar/\sqrt{3}na_0 \tag{6}$$

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = \sqrt{\frac{1+5n^2}{18}}\hbar \tag{7}$$

当 $n \gg 1$,

$$\Delta x \Delta p_x \approx \sqrt{\frac{5}{18}} n\hbar = 0.527 n\hbar \tag{7'}$$

差不多是不确定度关系规定的下限 $\hbar/2$ 的 n 倍.

5.18 单价原子中价电子(最外层电子)所受原子实(原子核及内层电子)的作用势可以近似表示成

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} - \lambda \frac{e^2 a_0}{r^2}, \quad 0 < \lambda \ll 1 \tag{1}$$

a_0 为 Bohr 半径. 求价电子的能级,并与氢原子能级作比较.

解 取守恒量完全集为 (H, l^2, l_z),其共同本征函数为

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{u(r)}{r}\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) \tag{2}$$

$u(r)$满足径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}u'' + \left[l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r} - \lambda\frac{e^2 a_0}{r^2}\right]u = Eu \tag{3}$$

令

$$l(l+1) - 2\lambda = l'(l'+1) \tag{4}$$

式(3)就可以化成

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

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

$$E_n = -\frac{e^2}{2n^2 a_0}, \quad n = n_r + l + 1, \quad n_r = 0,1,2,\cdots \tag{5}$$

将 l 换成 l',即得价电子的能级:

$$E_{nl} = -\frac{e^2}{2(n')^2 a_0}, \quad n' = n_r + l' + 1 \tag{6}$$

通常令

$$l' = l + \Delta_l \tag{7}$$

$$n' = n_r + l + \Delta_l + 1 = n + \Delta_l \tag{8}$$

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

$$\begin{aligned} l(l+1) - 2\lambda &= l'(l'+1) = (l+\Delta_l)(l+\Delta_l+1) \\ &= l(l+1) + (2l+1)\Delta_l + (\Delta_l)^2 \end{aligned}$$

略去 $(\Delta_l)^2$，即得

$$\Delta_l \approx -\lambda \Big/ \left(l + \frac{1}{2}\right) \tag{9}$$

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

式(4)的精确解为

$$l' = -\frac{1}{2} + \left(l + \frac{1}{2}\right)\left[1 - \frac{8\lambda}{(2l+1)^2}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{10}$$

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

5.19　中心力问题中，常称 $V(r)$ 和离心势之和为等效势能，记作

$$V_l(r) = V(r) + l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}$$

如 V_l 存在极小值，相应的距离 r_l 称为“平衡距离”，对于类氢离子(核电荷 Ze)，$l \gg 1$ 的情形，试按下列步骤处理径向方程：

(a) 求 V_l 的极小值及平衡距离 r_l；

(b) 将 V_l 在 r_l 附近作 Taylor 展开，保留 $(r-r_l)^2$ 项；

(c) 视电子的径向运动为 $r \sim r_l$ 附近的小振动，对于确定的 $l(l \gg 1)$，求最低能级和激发能级，并和精确解比较.

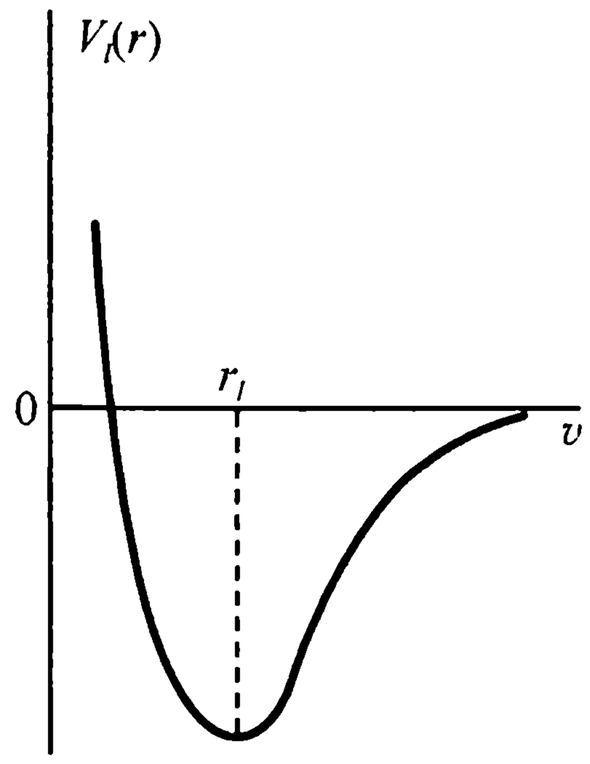


图 5.19

解　(a) 类氢离子的势能和等效势能为

$$V(r) = -Ze/^2 r \tag{1}$$

$$V_l(r) = l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{r} \tag{2}$$

由极值条件

$$\partial V_l / \partial r = 0 \tag{3}$$

求出

$$r_l = l(l+1)a_0/Z \tag{4}$$

$$V_l(r_l) = -Z^2e^2/2l(l+1)a_0 = -Ze^2/2r_l \tag{5}$$

(b) 令 $r=r_l+\xi$,将 $V_l(r)$在 r_l 附近作 Taylor 展开,

$$V_l(r)=V_l(r_l+\xi)=V_l(r_l)+V_l''(r_l)\frac{\xi^2}{2!}+\cdots$$

$$=V_l(r_l)+\frac{1}{2}\mu\omega_l^2\xi^2+\cdots \tag{6}$$

其中

$$\mu\omega_l^2=V_l''(r_l)=3l(l+1)\frac{\hbar^2}{\mu r_l^4}-\frac{2Ze^2}{r_l^3}=\frac{Ze^2}{r_l^3}$$

$$\omega_l^2=\frac{Ze^2}{\mu r_l^3}=\frac{(Ze)^4}{l^3(l+1)^3\hbar^2a_0^2} \tag{7}$$

(c) (H,l^2,l_z)的共同本征函数可以表示成

$$\psi=R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{u(r)}{r}Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{8}$$

$u(r)$满足径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2u}{dr^2}+V_l(r)u=Eu \tag{9}$$

将 V_l 的展开式(6)代入上式,即得

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2u}{d\xi^2}+\frac{1}{2}\mu\omega_l^2\xi^2u=[E-V_l(r_l)]u=E'u \tag{10}$$

式(10)在形式上正是一维谐振子的能量本征方程,本征值为

$$E-V_l(r_l)=E'=\left(n_r+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_l,\quad n_r=0,1,2,\cdots \tag{11}$$

以式(7)代入上式,即得本题所求能级公式:

$$E=V_l(r_l)+\left(n_r+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_l$$

$$=-\frac{Z^2e^2}{2a_0}\left[\frac{1}{l(l+1)}-\frac{1+2n_r}{l^{3/2}(l+1)^{3/2}}\right]=E_{n_rl} \tag{12}$$

由于利用了近似展开式(6),所以上式只适用于 n_r 较小的情形,即“小振动”. 式(12)的特点是,能级间距是均匀的. 可以按 $n_r=0$、1、2、…,将它们依次记为 E_{0l}、E_{1l}、E_{2l}、….

类氢离子能级的精确解为

$$E_n=-\frac{Z^2e^2}{2n^2a_0},\quad n=l+n_r+1 \tag{13}$$

现在将式(12),(13)在 $l\gg1, n_r\ll l$ 条件下加以比较. 对于给定的 l,精确解式(13)中最低能级($n_r=0$)为

$$E_n(n_r=0)=E_{l+1}=-\frac{Z^2e^2}{2(l+1)^2a_0} \tag{14}$$

低激发($n_r\ll l$)能级为

$$E_n=E_{l+1+n_r}=-\frac{Z^2e^2}{2a_0(l+1+n_r)^2}$$

$$=E_{l+1}\left(1+\frac{n_r}{l+1}\right)^{-2}\approx E_{l+1}\left(1-\frac{2}{l+1}n_r\right) \tag{15}$$

能级间距也是近似均匀的,相邻能级之差为

$$\Delta E\approx\frac{2}{l+1}\mid E_{l+1}\mid=\frac{Z^2e^2}{(l+1)^3a_0} \tag{16}$$

式(12)的最低能级为

$$E_{0l}=-\frac{Z^2e^2}{2a_0}\left[\frac{1}{l(l+1)}-\frac{1}{l^{3/2}(l+1)^{3/2}}\right]$$

$$=-\frac{Z^2e^2}{2a_0(l+1)^2}\left[\frac{l+1}{l}-\frac{\sqrt{l+1}}{l^{3/2}}\right]$$

由于 $l\gg1$,可取近似

$$\frac{l+1}{l}-\frac{\sqrt{l+1}}{l^{3/2}}=1+\frac{1}{l}-\frac{1}{l}\sqrt{1+\frac{1}{l}}\approx1-\frac{1}{2l^2}$$

因此

$$E_{0l}\approx E_{l+1}\left(1-\frac{1}{2l^2}\right) \tag{17}$$

和式(14)很接近,式(12)的能级间距为

$$\hbar\omega_l=\frac{Z^2e^2}{a_0[l(l+1)]^{3/2}}=\frac{Z^2e^2}{a_0(l+1)^3}\left(\frac{l+1}{l}\right)^{3/2}$$

$$\approx\frac{Z^2e^2}{a_0(l+1)^3}\left(1+\frac{3}{2l}\right) \tag{18}$$

和式(16)也很接近.

5.20　双原子分子中两原子间的作用可以用 Morse 势

$$V(r)=V_0[1-\mathrm{e}^{-(r-R)/a}]^2-V_0 \tag{1}$$

来描写[①]对于分子内部运动(相对运动)的 s 态($l=0$),试设法解出径向方程,确定

① 参看 P. M. Morse. *Phys. Rev.*, 1929, 34: 57.

能级公式(束缚态).

解 s态波函数可以写成

$$\psi(r)=u(r)/r \tag{2}$$

$u(r)$满足径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2}+V(r)u=Eu,\quad -V_0<E<0 \tag{3}$$

μ为约化质量,r为两原子核间距离.

由式(1)可知,$r=R$时$V(r)$取极小值$-V_0$,故R相当于分子的键长.根据实验测定,$R>a$(数量级相同),所以将$V(r)$在$r\sim R$附近作Taylor展开的办法对于本题并不适用.试作变换

$$\xi=\mathrm{e}^{-(r-R)/a} \tag{4}$$

则

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}=\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}=-\frac{\xi}{a}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}$$

式(3)变成

$$\xi^2\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\xi^2}+\xi\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\xi}+(2\alpha^2\xi-\alpha^2\xi^2-\beta^2)u=0 \tag{5}$$

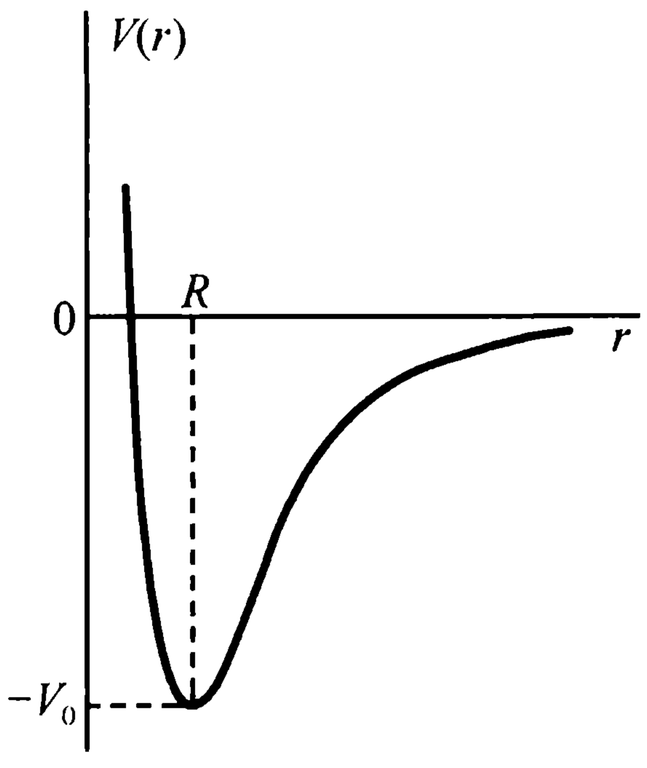


图 5.20

其中

$$\alpha=\frac{a}{\hbar}\sqrt{2\mu V_0},\quad \beta=\frac{a}{\hbar}\sqrt{-2\mu E} \tag{6}$$

由定义式(4)易见

$$r\to\infty,\quad \xi\to 0$$
$$r\to R,\quad \xi\to 1$$
$$r\to 0,\quad \xi\to \mathrm{e}^{R/a}\gg 1$$

近似地可以认为$r\to 0$相当于$\xi\to\infty$.根据$\xi\to 0,\infty$处式(5)的渐近性质,令

$$u=\xi^\beta\mathrm{e}^{-\alpha\xi}F(\xi) \tag{7}$$

代入式(5),得到$F(\xi)$满足的方程

$$\xi\frac{\mathrm{d}^2F}{\mathrm{d}\xi^2}+(2\beta+1-2\alpha\xi)\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}\xi}-(\alpha+2\alpha\beta-2\alpha^2)F=0 \tag{8}$$

再令$\eta=2\alpha\xi$,上式就变成合流超几何方程

$$\eta\frac{\mathrm{d}^2F}{\mathrm{d}\eta^2}+(2\beta+1-\eta)\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}\eta}-\left(\beta+\frac{1}{2}-\alpha\right)F=0 \tag{9}$$

式(9)当 $\eta\to 0(\xi\to 0, r\to\infty)$能使 $u\to 0$ 的解为

$$F=F\left(\beta+\frac{1}{2}-\alpha, 2\beta+1, 2\alpha\xi\right) \tag{10}$$

为了保证 $\xi\to\infty$处 $u\to 0$，合流超几何级数[式(10)]必须中断成 ν 次多项式，其条件为

$$\beta+\frac{1}{2}-\alpha=-\nu,\quad \nu=0,1,2,\cdots \tag{11}$$

即

$$\beta=\alpha-\left(\nu+\frac{1}{2}\right)$$

代入式(6)，即得能级公式

$$\begin{aligned} E_\nu &=-\beta^2\frac{\hbar^2}{2\mu a^2}=-\frac{\hbar^2}{2\mu a^2}\left[\alpha-\left(\nu+\frac{1}{2}\right)\right]^2 \\ &=\left(\nu+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar}{a}\sqrt{\frac{2V_0}{\mu}}-V_0-\left(\nu+\frac{1}{2}\right)^2\frac{\hbar^2}{2\mu a^2} \\ &=\left(\nu+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega-V_0-\left(\nu+\frac{1}{2}\right)^2\frac{\hbar^2}{2\mu a^2} \end{aligned} \tag{12}$$

其中 $\omega=\sqrt{2V_0/\mu a^2}$. 上式中第一项相当于谐振动能级，第三项为 $V(r)$中的非谐成分引起的能级修正. 式(12)仅当 ν 不太大时才成立，而且必须 $V_0a^2>\hbar^2/32\mu$，以保证 $E_\nu>-V_0$.

5.21　质量为 μ 的粒子在“球方势阱”中运动，

$$V(r)=\begin{cases}0, & r<a\\ V_0>0, & r\geqslant a\end{cases} \tag{1}$$

只考虑束缚态($0<E<V_0$). 设 V_0 由小到大逐渐变化，

(a) 求出现第一个束缚态时 V_0a^2 之值；

(b) 对角量子数 l 的每一个值($l=0,1,2,\cdots$)，求出现一个新的束缚态(相应能级 $E_{nl}\approx V_0-0$)的条件；

(c) 求各能级出现的先后次序；

(d) 对于很大的 V_0 值，估算束缚态总数.

解　作为中心力问题，可以取束缚态波函数为(H, l^2, l_z)的共同本征函数，写成

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

径向方程为

$$R''+\frac{2}{r}R'+\left[\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-V)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R=0 \tag{3}$$

当 V_0 由小到大逐渐变化,出现新束缚态时 $E\approx V_0$,上式成为

$$R''+\frac{2}{r}R'+\left[\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R=0,\quad r<a(\text{阱内}) \tag{4a}$$

$$R''+\frac{2}{r}R'-\frac{l(l+1)}{r^2}R=0,\quad r>a(\text{阱外}) \tag{4b}$$

阱内方程(4a)正是球 Bessel 方程,物理上允许的解为球 Bessel 函数

$$R(r)=j_l(k_0r),\quad k_0=\sqrt{2\mu V_0}/\hbar \tag{5a}$$

阱外方程(4b)的解为

$$R(r)=C/r^{l+1} \tag{5b}$$

(另一解 r^l 不符合"$r\to\infty$ 处 $R\to0$"的束缚态边界条件,舍去.)对于阱外波函数(5b),显然有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}[r^{l+1}R(r)]=0,\quad r\geqslant a \tag{6}$$

在 $r=a$ 处,R 及 R' 均应连续,因此对于阱内波函数(5a),当 $r\to a$,也应满足条件(6),即

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}[r^{l+1}j_l(k_0r)]_{r=a}=0 \tag{6'}$$

利用公式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}[x^{l+1}j_l(x)]=x^{l+1}j_{l-1}(x)$$

式(6')可以化成

$$\boxed{j_{l-1}(k_0a)=0} \tag{7}$$

这就是出现一个新束缚态(角量子数 l,能级 $E_{nl}\approx V_0$)的条件.

第一个束缚态 $l=0$,考虑到

$$j_{-1}(k_0a)=\frac{\cos k_0a}{k_0a}$$

故出现一条 s 态($l=0$)新能级($E\approx V_0$)的条件为

$$\cos k_0a=0,\quad k_0a=\frac{\pi}{2},\frac{3\pi}{2},\frac{5\pi}{2},\cdots \tag{8}$$

出现第一个束缚态时，$k_0 a=\pi/2$，即

$$\boxed{V_0 a^2=\frac{\pi^2\hbar^2}{8\mu}} \tag{9}$$

当 V_0 逐渐增大，每当满足式(7)，就出现一条新能级 $E_{nl}\approx V_0$，根据球 Bessel 函数 $j_l(x)$的零点数值，可以确定各能级的出现次序为

1s,1p,1d,2s,1f,2p,1g,2d,3s,1h,2f,1i,3p,2g,1k,3d,4s,…

各光谱符号代表之 l 值为

l	0	1	2	3	4	5	6	7
字母	s	p	d	f	g	h	i	j

V_0 很大时，可按“相空间中每 h^3 范围有一个束缚态”来估算束缚态总数. 处于束缚态的粒子，在阱内的最大动量为

$$p_0=\hbar k_0=\sqrt{2\mu V_0} \tag{10}$$

因此，束缚态所占相空间总范围为

$$\frac{4\pi}{3}a^3\cdot\frac{4\pi}{3}p_0^3=\frac{16}{9}\pi^2(a\hbar k_0)^3=\Omega$$

束缚态总数为

$$N\approx\Omega/(2\pi\hbar)^3=\frac{2\pi^2}{9}\left(\frac{ak_0}{\pi}\right)^3$$

$$=\frac{2\pi^2}{9}\left(\frac{a}{\pi\hbar}\right)^3(2\mu V_0)^{3/2} \tag{11}$$

例如，当 $ak_0=7\pi/2$，最高能级为 4s，由能级序列具体数出由 1s 至 4s 的全部状态数(注意能级 E_{nl} 的简并度为 $2l+1$)为 99，而由式(11)则得 $N\approx 94$，二者确很接近①.

5.22　氚核由质子和中子结合而成，是质子-中子体系唯一的束缚态. 根据实验测定，结合能为 2.23MeV. 如 n-p 作用势近似地用球方势阱表示：

$$V(r)=\begin{cases}-V_0, & r<a\\ 0, & r\geqslant a\end{cases} \tag{1}$$

求力程 a 和作用强度 V_0 的数值关系.

解　n-p 体系既然只有唯一的束缚态，应该就是基态，$l=0$. 也就是说，$V_0 a^2$ 的

① 本题参看 Landau 等. 量子力学. 北京：高等教育出版社，1980. § 33.

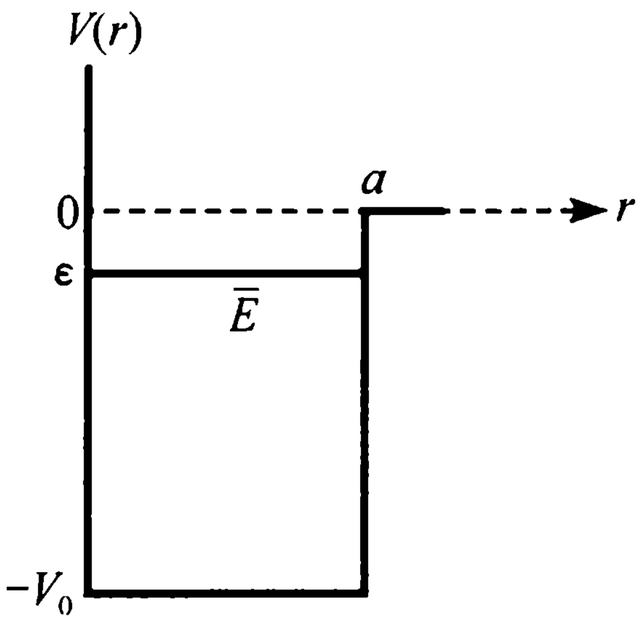


图 5.22

值,仅能形成一个 s 态能级,而不足以形成 p 态能级. 根据上题讨论,可知 V_0a^2 比 $\pi^2\hbar^2/8\mu$ 稍大. 作为粗略估算,可即取

$$a^2 \approx \pi^2\hbar^2/8\mu V_0 = \pi^2(\hbar c)^2/8\mu c^2 V_0 \tag{2}$$

其中

$$\mu = \frac{m_n m_p}{m_n + m_p}, \quad 2\mu c^2 = 939\ \text{MeV}$$

$$\hbar c = 197\ \text{MeV} \cdot \text{fm}$$

由式(2)给出的 $V_0 - a$ 数值关系如下表:

V_0(MeV)	30	25	20
a(fm)	1.84	2.02	2.26

下面作比较精确的计算. n-p 体系相对运动的 s 态波函数可以表示成

$$\psi(r) = u(r)/r \tag{3}$$

$u(r)$满足径向方程

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}[E - V(r)]u = 0, \quad -V_0 < E < 0 \tag{4}$$

以式(1)代入式(4),即得

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2} + \alpha^2 u = 0, \quad r < a \tag{5a}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2} - \beta^2 u = 0, \quad r \geqslant a \tag{5b}$$

其中

$$\alpha = \sqrt{2\mu(V_0 + E)}/\hbar, \quad \beta = \sqrt{-2\mu E}/\hbar \tag{6}$$

边界条件为

$$\text{当 } r \to 0 \text{ 时}, \quad u \to 0; \quad \text{当 } r \to \infty \text{ 时}, \quad u \to 0 \tag{7}$$

满足边界条件(7)的式(5)的解为

$$u = A\sin\alpha r, \quad r < a \tag{8a}$$

$$u = B\mathrm{e}^{-\beta r}, \quad r \geqslant a \tag{8b}$$

利用 $r=a$ 处 u'/u 的连续条件,容易求得能级方程

$$\cot\alpha a = -\beta/\alpha \tag{9}$$

式(9)和下式等价:

$$\sin^2\alpha a = \frac{\alpha^2}{\alpha^2+\beta^2} = 1+\frac{E}{V_0} \tag{9'}$$

本题能级值已由实验给出，$E=-2.23\text{MeV}$，则指定一个 V_0 值，由式(6)就可以算出 α，再由式(9′)算出 αa，就可求出相应的 a 值. 数值结果如下表(注意，$\pi/2<\alpha a<\pi$)

V_0(MeV)	30	25	20
a(fm)	2.26	2.53	2.92

5.23　有一种关于基本粒子的非常简单的“袋”模型，将介子描述成限制在弹性口袋中的夸克-反夸克态，袋为球形，半径(可变)R，表面张力系数 $\sigma=50\text{MeV}/(\text{fm})^2$. 夸克和反夸克均作为非相对论粒子处理，静质量取为 $200\text{MeV}/c^2$，不考虑相互作用. (a)当 R 固定，估算夸克-反夸克体系基态能量(不包括静止质量)；(b)允许 R 变化，计算基态的“袋”半径，并和公认的介子大小作比较.

解　当 R 固定时，夸克和反夸克(质量均为 m)可以认为是在无限深球形势阱中运动，基态($l=0$)能级为

$$E_1 = \pi^2\hbar^2/(2mR^2) \tag{1}$$

因此体系的基态能量为

$$E_0(R) = 2E_1 = \pi^2\hbar^2/(mR^2) \tag{2}$$

当 R 可变，还应该考虑弹性袋的表面能

$$E_\sigma(R) = 4\pi R^2\sigma \tag{3}$$

R 的取值应使 $E_0(R)+E_\sigma(R)$ 为极小. 由极值条件

$$\frac{\partial}{\partial R}(E_0+E_\sigma) = 0 \tag{4}$$

求得

$$R=\left(\frac{\pi\hbar^2}{4m\sigma}\right)^{1/4} = \left(\frac{\pi\hbar^2c^2}{4mc^2\sigma}\right)^{1/4} = \left[\frac{\pi}{4}\times\frac{(197\ \text{MeV}\cdot\text{fm})^2}{200\ \text{MeV}\times 50\ \text{MeV}/(\text{fm})^2}\right]^{1/4}$$

$$\approx 1.3\ \text{fm}$$

公认的基本粒子的线度正是这个数量级.

5.24　质量为 μ 的粒子在球壳 δ 势阱

$$V(r) = -V_0\delta(r-a),\quad V_0>0, a>0 \tag{1}$$

中运动，求存在束缚态所需的最小 V_0 值.

解　基态为 s 态($l=0$)，波函数可以写成

$$\psi(r) = u(r)/r \tag{2}$$

$u(r)$ 满足径向方程

$$u''+\frac{2\mu E}{\hbar^2}u+\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}\delta(r-a)u=0 \tag{3}$$

由于 $r\to\infty$ 处 $V(r)\to 0$,所以束缚态 $E<0$. 令

$$\beta=\sqrt{-2\mu E}/\hbar \tag{4}$$

式(3)可以改写成

$$u''-\beta^2 u+\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}\delta(r-a)u=0 \tag{3'}$$

边界条件为

$$r\to 0,\infty \text{ 处},\quad u\to 0$$

在 $r\sim a$ 附近对式(3′)积分,可得 u' 的跃变条件(参看题 2.1)

$$u'(a+0)-u'(a-0)=-\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}u(a) \tag{5}$$

亦即

$$\frac{u'}{u}\Big|_{r=a-0}^{r=a+0}=-\frac{2\mu V_0}{\hbar^2} \tag{5'}$$

在 $r\neq a$ 处,式(3′)即

$$u''-\beta^2 u=0 \tag{3''}$$

在 $r>a$ 区域,满足无限远处边界条件的解为

$$u=Ce^{-\beta r},\quad r>a \tag{6}$$

因此

$$\left(\frac{u'}{u}\right)_{r=a+0}=-\beta \tag{7}$$

如 V_0 之值刚够形成第一个束缚态,能级必为 $E=0^-$,这时 $\beta=0$,式(3″)成为

$$u''=0\quad (E\to 0^-) \tag{8}$$

式(7)成为

$$\left(\frac{u'}{u}\right)_{r=a+0}=0\quad (E\to 0^-) \tag{7'}$$

$E\to 0^-$ 时,式(8)[满足边界条件 $u(0)=0$ 的]在 $r<a$ 区域的解为

$$u=Ar,\quad r<a\quad (E\to 0^-) \tag{9}$$

因此

$$\left(\frac{u'}{u}\right)_{r=a-0}=\frac{1}{a}\quad (E\to 0^-) \tag{10}$$

将式(7′)、(10)代入式(5′)即得

$$V_0=\hbar^2/2\mu a \tag{11}$$

此即存在束缚态所需要最小 V_0 值,相应能级为 $E=0^-$.

第六章　角　动　量

6.1　以 $\boldsymbol{l}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ 表示轨道角动量. 证明:在 l_z 的任何一个本征态下,l_x 和 l_y 的平均值为 0.

证　设 ψ_m 为 l_z 的本征态,属于本征值 $m\hbar$,则

$$l_z\mid\psi_m\rangle=m\hbar\mid\psi_m\rangle,\quad\langle\psi_m\mid l_z=m\hbar\langle\psi_m\mid \tag{1}$$

利用基本对易式

$$l_yl_z-l_zl_y=\mathrm{i}\hbar l_x \tag{2}$$

在 ψ_m 态下求平均值,即得

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\langle l_x\rangle&=\langle\psi_m\mid l_yl_z\mid\psi_m\rangle-\langle\psi_m\mid l_zl_y\mid\psi_m\rangle\\&=m\hbar\langle\psi_m\mid l_y\mid\psi_m\rangle-m\hbar\langle\psi_m\mid l_y\mid\psi_m\rangle=0\end{aligned} \tag{3}$$

类似地,将对易式

$$l_zl_x-l_xl_z=\mathrm{i}\hbar l_y$$

在 ψ_m 态下求平均值,可证 $\langle l_y\rangle=0$.

注意,在证明中只利用了角动量的基本对易式,并未用到算符和波函数的具体构造式. 因此,所得结论适用于任何一种角动量,即:在角动量 $\boldsymbol{J}$ 的任何一个直角坐标分量(J_z)的本征态下,$\boldsymbol{J}$ 的另外两个分量(J_x,J_y)的平均值均为 0.

6.2　对于($\boldsymbol{l}^2$,l_z)的共同本征态 $\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$,计算 $\boldsymbol{l}_x^2$ 和 $\boldsymbol{l}_y^2$ 的平均值,以及 Δl_x、Δl_y,并验证不确定度关系.

解　本征态 Y_{lm} 的态矢量记为 $\mid lm\rangle$,满足本征方程

$$\boldsymbol{l}^2\mid lm\rangle=l(l+1)\hbar^2\mid lm\rangle \tag{1}$$

$$l_z\mid lm\rangle=m\hbar\mid lm\rangle,\quad\langle lm\mid l_z=m\hbar\langle lm\mid \tag{2}$$

利用基本对易式

$$\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{l}=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{l} \tag{3}$$

可得算符关系

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar l_x^2&=(l_yl_z-l_zl_y)l_x=l_y(l_xl_z+\mathrm{i}\hbar l_y)-l_zl_yl_x\\&=\mathrm{i}\hbar l_y^2+l_yl_xl_z-l_zl_yl_x\end{aligned} \tag{4}$$

将上式在 $\mid lm\rangle$ 态下求平均,因 l_z 作用于 $\mid lm\rangle$ 或 $\langle lm\mid$ 后变成本征值 $m\hbar$,后二项对

平均值的贡献互相抵消,因此

$$\langle l_x^2\rangle = \langle l_y^2\rangle \tag{5}$$

由于

$$\langle l_x^2 + l_y^2\rangle = \langle \boldsymbol{l}^2 - l_z^2\rangle = [l(l+1) - m^2]\hbar^2$$

所以

$$\boxed{\langle l_x^2\rangle = \langle l_y^2\rangle = \frac{1}{2}[l(l+1) - m^2]\hbar^2} \tag{6}$$

上题已证$\langle l_x\rangle = \langle l_y\rangle = 0$,因此 l_x, l_y 的涨落为

$$\Delta l_x = \Delta l_y = \langle l_x^2\rangle^{1/2} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\sqrt{l(l+1) - m^2} \tag{7}$$

$$\Delta l_x \cdot \Delta l_y = \frac{1}{2}[l(l+1) - m^2]\hbar^2 \tag{8}$$

而不确定度关系给出

$$\Delta l_x \cdot \Delta l_y \geqslant \frac{1}{2}\,|\,\langle [l_x, l_y]\rangle\,| = \frac{1}{2}\,|\,m\,|\,\hbar^2 \tag{9}$$

由于 $l \geqslant |m|$,式(8)和(9)是一致的. 当$|m| = l$,式(9)中的等号成立.

6.3 对于 $\boldsymbol{l}^2, l_z$ 的共同本征态$|lm\rangle$,计算下列各项平均值:$l_x l_y, l_y l_x, l_n, l_n^2$. 其中 $l_n = \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{l}$,$\boldsymbol{n}$ 为任意方向单位矢量,$\boldsymbol{n}$ 与 x, y, z 轴夹角分别为 α, β, γ.

解 利用基本对易式 $\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{l} = \mathrm{i}\hbar\boldsymbol{l}$,可得

$$\mathrm{i}\hbar l_x l_y = (l_y l_z - l_z l_y) l_y = l_y l_z l_y - l_z l_y^2$$

$$\mathrm{i}\hbar l_y l_x = l_y (l_y l_z - l_z l_y) = l_y^2 l_z - l_y l_z l_y$$

在$|lm\rangle$态下求平均值,由于

$$\overline{l_z l_y^2} = \overline{l_y^2 l_z} = m\hbar\,\overline{l_y^2}$$

所以

$$\overline{l_y l_x} = -\overline{l_x l_y}$$

于是

$$\overline{l_x l_y} - \overline{l_y l_x} = 2\,\overline{l_x l_y} = \mathrm{i}\hbar\,\overline{l_z} = \mathrm{i}\hbar^2 m$$

$$\overline{l_x l_y} = \mathrm{i}\hbar^2 m/2, \quad \overline{l_y l_x} = -\mathrm{i}\hbar^2 m/2 \tag{1}$$

$\boldsymbol{l}$ 在 $\boldsymbol{n}$ 方向的投影算符为

$$l_n = \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{l} = l_x\cos\alpha + l_y\cos\beta + l_z\cos\gamma$$

对于$|lm\rangle$态，由于$\overline{l_x}=0$，$\overline{l_y}=0$，所以

$$\overline{l_n}=m\hbar\cos\gamma \tag{2}$$

$$l_n^2=l_x^2\cos^2\alpha+l_y^2\cos^2\beta+l_z^2\cos^2\gamma$$
$$+(l_xl_y+l_yl_x)\cos\alpha\cos\beta+\cdots(\text{类似的二项轮换式})$$

在$|lm\rangle$态下求平均值，由于

$$\overline{l_xl_y}+\overline{l_yl_x}=0,\quad \overline{l_yl_z}+\overline{l_zl_y}=2m\hbar\,\overline{l_y}=0,\cdots$$

$$\overline{l_x^2}=\overline{l_y^2}=\frac{1}{2}(\overline{l^2}-\overline{l_z^2})=\frac{\hbar^2}{2}\{l(l+1)-m^2\} \tag{3}$$

所以

$$\overline{l_n^2}=m^2\hbar^2\cos^2\gamma+\frac{\hbar^2}{2}\{l(l+1)-m^2\}(\cos^2\alpha+\cos^2\beta)$$
$$=m^2\hbar^2\cos^2\gamma+\frac{\hbar^2}{2}\{l(l+1)-m^2\}(1-\cos^2\gamma)$$
$$=\frac{\hbar^2}{2}\{l(l+1)(1-\cos^2\gamma)+m^2(3\cos^2\gamma-1)\} \tag{4}$$

如 $\boldsymbol{n}$ 与 z 轴正交，即 $\cos\gamma=0$，则$\overline{l_n^2}=\overline{l_x^2}=\overline{l_y^2}$，$\overline{l_n}=0$.

6.4　在 $l=1(l^2=2\hbar^2)$的情形下，证明：$l_z=0$ 的本征态，$l_x=0$ 的本征态以及 $l_y=0$ 的本征态互相正交.

证　$l=1$ 时，$l_z=0$ 的状态即$|lm\rangle=|1\ 0\rangle$，根据题 6.2 的计算，在这态下 l_x^2 的平均值为

$$\langle 1\ 0\,|\,l_x^2\,|\,1\ 0\rangle=\frac{1}{2}[l(l+1)-m^2]\hbar^2=\hbar^2 \tag{1}$$

由于 $l=1$ 时 l_x 的本征值只能是 $\hbar$、0、$-\hbar$，故知$|1\ 0\rangle$中只包含 $l_x=\pm\hbar$ 这两种本征态，而没有 $l_x=0$ 的本征态成分，所以

$$\langle l=1,l_z=0\,|\,l=1,l_x=0\rangle=0 \tag{2}$$

同理可证

$$\langle l=1,l_z=0\,|\,l=1,l_y=0\rangle=0$$

由 x、y、z 的轮换对称性，可知

$$\langle l=1,l_x=0\,|\,l=1,l_y=0\rangle=0$$

6.5　(l^2,l_z)的共同本征函数习惯上记为 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$. 本题中(l^2,l_x)的共同本征函数记为 Z_{lm}，(l^2,l_y)的共同本征函数记为 X_{lm}. 本题只讨论 $l=1$ 的情形.

(a) 直接写出 Y_{11}、Y_{10}、Y_{1-1}的具体函数形式,并将它们用直角坐标(x,y,z)表示出来,验证升降算符$(l_x \pm il_y)$对它们的作用结果.

(b) 用 x,y,z 轮换的方法得出 Z_{11}、Z_{10}、Z_{1-1}及 X_{11}、X_{10}、X_{1-1},将它们表示成 Y_{lm}的线性叠加.

解 (a) $l=1$ 时,各 Y_{1m}是

$$Y_{11}=-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{i\varphi}=-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{1}{r}(x+iy) \tag{1a}$$

$$Y_{10}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{z}{r} \tag{1b}$$

$$Y_{1-1}=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{-i\varphi}=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{1}{r}(x-iy) \tag{1c}$$

其中

$$r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$$

利用公式

$$\frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{r}=-\frac{x}{r^3},\quad \frac{\partial}{\partial y}\frac{1}{r}=-\frac{y}{r^3},\quad \frac{\partial}{\partial z}\frac{1}{r}=-\frac{z}{r^3}$$

$$\boldsymbol{l}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}=-i\hbar\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\nabla}\text{,以下取 }\hbar=1$$

$$l_x \pm il_y=(\mp x-iy)\frac{\partial}{\partial z}+z\left(\pm\frac{\partial}{\partial x}+i\frac{\partial}{\partial y}\right)$$

容易验证

$$(l_x+il_y)\begin{cases}Y_{11}\\Y_{10}\\Y_{1-1}\end{cases}=\begin{cases}0\\\sqrt{2}Y_{11}\\\sqrt{2}Y_{10}\end{cases} \tag{2a}$$

$$(l_x-il_y)\begin{cases}Y_{11}\\Y_{10}\\Y_{1-1}\end{cases}=\begin{cases}\sqrt{2}Y_{10}\\\sqrt{2}Y_{1-1}\\0\end{cases} \tag{2b}$$

(b) 作轮换 $x\to y,y\to z,z\to x$,则

$$l_x\to l_y,\quad l_y\to l_z,\quad l_z\to l_x,\quad l^2,r\text{ 不变}$$

由轮换对称性,在 Y_{lm}中作轮换 $x\to y,y\to z,z\to x$,所得函数就是 Z_{lm}. 具体结果为

$$Z_{11}=-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{1}{r}(y+iz)=-\frac{i}{2}(Y_{11}+\sqrt{2}Y_{10}+Y_{1-1}) \tag{3a}$$

$$Z_{10}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{x}{r}=-\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{11}-Y_{1-1}) \tag{3b}$$

$$Z_{1-1}=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{1}{r}(y-iz)=\frac{i}{2}(Y_{11}-\sqrt{2}Y_{10}+Y_{1-1}) \tag{3c}$$

类似地，在 Y_{lm} 中作逆序轮换

$$x\to z,\quad y\to x,\quad z\to y$$

所得函数就是 X_{lm}. 具体结果为

$$X_{11}=-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{1}{r}(z+ix)=\frac{i}{2}(Y_{11}+\sqrt{2}iY_{10}-Y_{1-1}) \tag{4a}$$

$$X_{10}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{y}{r}=\frac{i}{\sqrt{2}}(Y_{11}+Y_{1-1}) \tag{4b}$$

$$X_{1-1}=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{1}{r}(z-ix)=\frac{i}{2}(Y_{11}-\sqrt{2}iY_{10}-Y_{1-1}) \tag{4c}$$

容易验证

$$(l_y+il_z)\begin{cases}Z_{11}\\Z_{10}\\Z_{1-1}\end{cases}=\begin{cases}0\\\sqrt{2}Z_{11}\\\sqrt{2}Z_{10}\end{cases} \tag{5}$$

等等. 式(3)、(4)中各波函数中的整体相因子(i，−1 等)对于轮换对称性有重要作用，例如

$$\langle Y_{11}\mid Z_{11}\rangle=\langle Z_{11}\mid X_{11}\rangle=\langle X_{11}\mid Y_{11}\rangle=-\frac{i}{2} \tag{6a}$$

$$\langle Y_{10}\mid Z_{11}\rangle=\langle Z_{10}\mid X_{11}\rangle=\langle X_{10}\mid Y_{11}\rangle=-\frac{i}{\sqrt{2}} \tag{6b}$$

等等.

6.6　对于 (l^2,l_z) 的共同本征态 Y_{10}，求 l_x 的可能测值及相应概率.

解一　l_x 的可能测量值即本征值 $\hbar$、0、$-\hbar$. 设相应概率 w_1、w_0、w_{-1}. 计算这三个概率，可以设法找三个方程. 首先，总概率为 1，因此已有

$$w_1+w_0+w_{-1}=1 \tag{1}$$

其次，题 6.1 已经证明，l_z 的本征态下 l_x 平均值为 0，因此

$$\langle l_x\rangle=w_1\hbar+w_{-1}(-\hbar)=(w_1-w_{-1})\hbar=0 \tag{2}$$

即

$$w_1 = w_{-1} \tag{2'}$$

还有,根据题 6.2,应有

$$\langle l_x^2 \rangle_{10} = \frac{1}{2}(2-0)\hbar^2 = \hbar^2 \tag{3}$$

因此

$$\langle l_x^2 \rangle = w_1\hbar^2 + w_{-1}(-\hbar)^2 = (w_1 + w_{-1})\hbar^2 = \hbar^2$$

即

$$w_1 + w_{-1} = 1 \tag{3'}$$

由式(1)、(2′)、(3′)容易解出

$$w_1 = w_{-1} = \frac{1}{2}, \quad w_0 = 0 \tag{4}$$

结论:在 Y_{10} 态下,l_x 的可能测值为 $\pm\hbar$,概率各为 1/2.

解二 利用上题结果,可以将 Y_{10} 展开为

$$Y_{10} = \frac{i}{\sqrt{2}}(Z_{11} + Z_{1-1}) \tag{5}$$

各项系数的绝对值平方,即 l_x 取相应本征值的概率,因此结论仍为:$l_x = \pm\hbar$,概率均为 1/2.

6.7 粒子处于状态

$$\psi = C(x + y + 2z)e^{-\alpha r}, \quad \alpha > 0 \tag{1}$$

C 为归一化常数,求(a)l^2 的取值;(b)l_z 的平均值;(c)$l_z = \hbar$ 的概率;(d)l_x 的可能取值及相应概率.

解一 由球谐函数 $Y_{1m}(m=1,0,-1)$ 的具体函数形式可知,ψ 可以展开为

$$\psi = re^{-\alpha r}(C_1 Y_{11} + C_0 Y_{10} + C_{-1} Y_{1-1}) \tag{2}$$

其中 Y_{10} 项来自式(1)中 z 项,Y_{11} 和 $Y_{1,-1}$ 项来自 $(x+y)$ 项.

(a) 显然 ψ 是 l^2 的本征态,$l=1$,$l^2 = 2\hbar^2$.

(b) 由于 ψ 是实函数,所以

$$\langle l_z \rangle = -i\hbar\int \psi \frac{\partial}{\partial\varphi}\psi d^3x = \text{纯虚数}$$

但因 l_z 是厄米算符，其平均值应该是实数，由这“矛盾”可以推论出

$$\langle l_z \rangle = 0 \tag{3}$$

事实上，上式中对 φ 的积分可以立即积出，再利用 φ 的单值性条件，仍得同样的结论.

(c) 设 l_z 取本征值 $\hbar$、0、$-\hbar$ 的概率分别为 w_1、w_0、w_{-1}，易见 $w_1 = w_{-1}$.

式(2)中 Y_{10} 项即式(1)中 z 项. 式(1)中 x、y、z 项显然互相正交，三项的概率波幅比为 1∶1∶2，强度比为 1∶1∶4，即 z 项占 4/6，x 项和 y 项各占 1/6. 因此式(2)中 Y_{10} 项成分为 4/6，Y_{11} 和 $Y_{1,-1}$ 项成分各为 1/6，因此. $l_z = \hbar$ 的概率为 $w_1 = 1/6$.

(d) $l=1$ 时，l_x 的可能测值为 $\hbar$、0、$-\hbar$，由 x、y、z 及 l_x、l_y、l_z 的轮换关系及(c)的分析结果可知，ψ 中 x 项相当于 $l_x = 0$，其概率为 1/6. 由于 ψ 为实函数，$\langle l_x \rangle = 0$（$\langle l_y \rangle$ 也等于 0，利用 l_x 和 l_y 的直角坐标算符构造形式即可看出），因此 $l_x = \pm\hbar$ 的概率相等. 故结论为

$$l_x = 0,\quad \text{概率 } 1/6;\quad l_x = \hbar, -\hbar,\quad \text{概率各为 } 5/12.$$

解二　利用 Y_{1m} 的具体函数形式，不难将展开式(2)彻底求出，为

$$\begin{aligned}\psi &= C(x+y+2z)\mathrm{e}^{-\alpha r} \\ &= Cr\mathrm{e}^{-\alpha r}\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\left[\frac{\mathrm{i}-1}{\sqrt{2}}Y_{11} + 2Y_{10} + \frac{\mathrm{i}+1}{\sqrt{2}}Y_{1-1}\right]\end{aligned}$$

因此

$$|C_1|^2 : |C_0|^2 : |C_{-1}|^2 = 1:4:1$$

亦即

$$l_z = \hbar, 0, -\hbar,\quad \text{概率分别为 } 1/6、4/6、1/6,$$

$$\langle l_z \rangle = \frac{1}{6}\cdot\hbar + \frac{4}{6}\cdot 0 + \frac{1}{6}\cdot(-\hbar) = 0$$

式(2)中三项均属于 $l=1$，所以 $l^2 = l(l+1)\hbar^2 = 2\hbar^2$.

利用题 6.5 结果，可将 ψ 展开为

$$\psi = Cr\mathrm{e}^{-\alpha r}\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\left[\frac{2\mathrm{i}-1}{\sqrt{2}}Z_{11} + Z_{10} + \frac{1+2\mathrm{i}}{\sqrt{2}}Z_{1-1}\right] \tag{4}$$

所以 $l_x = \hbar$、0、$-\hbar$ 的概率之比为 $\frac{5}{2}:1:\frac{5}{2}$，亦即 $l_x = \hbar$、0、$-\hbar$ 的概率分别为 5/12，1/6，5/12.

6.8 将(l^2, l_z)的共同本征态Y_{lm}记为$|lm\rangle$,证明

$$\sum_m \left|\left\langle 0\ 0\left|\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right|1m\right\rangle\right|^2 = \sum_m \left|\int Y_{00}\frac{\boldsymbol{r}}{r}Y_{1m}(\theta,\varphi)\mathrm{d}\Omega\right|^2 = 1 \tag{1}$$

证 根据球谐函数的递推公式①,

$$\frac{\boldsymbol{r}}{r}Y_{00} \to Y_{1m}, \quad m = 1, 0, -1$$

因此,利用球谐函数的正交性,即得

$$\left\langle lm\left|\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right|0\ 0\right\rangle = 0, \quad l \neq 1 \tag{2}$$

利用公式

$$\sum_{l,m} |lm\rangle\langle lm| = 1 \tag{3}$$

即得

$$\begin{aligned} 1 = \langle 0\ 0 \mid 0\ 0\rangle &= \left\langle 0\ 0\left|\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right|0\ 0\right\rangle \\ &= \sum_{l,m}\left\langle 0\ 0\left|\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right|lm\right\rangle\cdot\left\langle lm\left|\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right|0\ 0\right\rangle \\ &= \sum_m \left\langle 0\ 0\left|\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right|1m\right\rangle\cdot\left\langle 1m\left|\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right|0\ 0\right\rangle \\ &= \sum_m \left|\left\langle 0\ 0\left|\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right|1m\right\rangle\right|^2 \end{aligned}$$

此即式(1).

读者不难利用Y_{1m}的具体函数形式,具体算出各矩阵元$\langle 0\ 0\left|\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right|1\ m\rangle$,从而验证式(1).

6.9 考虑$|lm\rangle$态矢空间的$l=1$子空间(取$\hbar\to 1$).

(a) 利用角动量升降算符的理论结果,求(l^2, l_z)表象中l_x和l_y的矩阵表示,并求其本征值、本征矢.

(b) 求由(l^2, l_z)表象→(l^2, l_x)表象的变换矩阵S,按照表象变换的标准公式,将(a)中各量变到(l^2, l_x)表象中去. 讨论结果中的轮换对称性.

解 (a) $l=1(l^2=2\hbar^2)$,$|lm\rangle$态矢空间如以$|11\rangle$,$|10\rangle$,$|1-1\rangle$作为基矢,就可以构成(l^2, l_z)表象. 基矢为

---

① 参看曾谨言. 量子力学卷Ⅰ. 北京:科学出版社,1997. p. 637,附录四.

$$|11\rangle \rightarrow \begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}, \quad |10\rangle \rightarrow \begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}, \quad |1-1\rangle \rightarrow \begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix} \tag{1}$$

按照角动量升降算符的标准理论，$l=1$ 时，$(\boldsymbol{l}^2, l_z)$表象中$(l_x \pm \mathrm{i}l_y)$的矩阵表示为

$$l_x + \mathrm{i}l_y \Rightarrow \begin{bmatrix}0 & \sqrt{2} & 0\\0 & 0 & \sqrt{2}\\0 & 0 & 0\end{bmatrix}, \quad l_x - \mathrm{i}l_y \Rightarrow \begin{bmatrix}0 & 0 & 0\\\sqrt{2} & 0 & 0\\0 & \sqrt{2} & 0\end{bmatrix} \tag{2}$$

因此

$$l_x \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0 & 1 & 0\\1 & 0 & 1\\0 & 1 & 0\end{bmatrix}, \quad l_y \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0 & -\mathrm{i} & 0\\\mathrm{i} & 0 & -\mathrm{i}\\0 & \mathrm{i} & 0\end{bmatrix} \tag{3}$$

在$(\boldsymbol{l}^2, l_z)$表象中，l_z 由对角化矩阵表示：

$$l_z \Rightarrow \begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\0 & 0 & 0\\0 & 0 & -1\end{bmatrix} \tag{4}$$

容易看出，(1)式中三个基矢都是(4)式的本征矢，本征值分别为 1，0，−1.

l_x 的本征矢及其矩阵表示设为

$$|\phi\rangle = C_1|11\rangle + C_0|10\rangle + C_{-1}|1-1\rangle \Rightarrow \begin{bmatrix}C_1\\C_0\\C_{-1}\end{bmatrix}$$

由本征方程

$$l_x\phi = \lambda\phi, \quad \text{即} \quad \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0 & 1 & 0\\1 & 0 & 1\\0 & 1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}C_1\\C_0\\C_{-1}\end{bmatrix} = \lambda\begin{bmatrix}C_1\\C_0\\C_{-1}\end{bmatrix}$$

容易解出如下结果：

$$l_x = \lambda = 1, \quad \phi_1 = \frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\\sqrt{2}\\1\end{bmatrix}. \quad \lambda = 0, \quad \phi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\0\\-1\end{bmatrix}. \quad \lambda = -1, \quad \phi_{-1} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\-\sqrt{2}\\1\end{bmatrix} \tag{5}$$

类似地，由 l_y 的本征方程

$$l_y\psi = \nu\psi, \quad \text{即} \quad \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0 & -\mathrm{i} & 0\\\mathrm{i} & 0 & -\mathrm{i}\\0 & \mathrm{i} & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_1\\a_0\\a_{-1}\end{bmatrix} = \nu\begin{bmatrix}a_1\\a_0\\a_{-1}\end{bmatrix}$$

可以解出

$$l_y=\nu=1,\quad \psi_1=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\ \sqrt{2}\mathrm{i}\\ -1\end{bmatrix};\quad \nu=0,\quad \psi_0=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ 0\\ 1\end{bmatrix},\quad \nu=-1,\psi_{-1}=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\ -\sqrt{2}\mathrm{i}\\ -1\end{bmatrix} \tag{6}$$

将(5)、(6)式与 6.5 题所得结果比较,容易发现,将(5)、(6)式中各个本征矢添上适当的相因子,它们就是 6.5 题中用 x、y、z 轮换法得到的结果.

(b) 如简单地即以(5)式作为 l_x 的本征矢,则(l^2,l_z)表象→(l^2,l_x)表象的变换矩阵为

$$S=\begin{bmatrix}\langle\phi_1\mid Y_{11}\rangle & \langle\phi_1\mid Y_{10}\rangle & \langle\phi_1\mid Y_{1-1}\rangle\\ \langle\phi_0\mid Y_{11}\rangle & \langle\phi_0\mid Y_{10}\rangle & \langle\phi_0\mid Y_{1-1}\rangle\\ \langle\phi_{-1}\mid Y_{11}\rangle & \langle\phi_{-1}\mid Y_{10}\rangle & \langle\phi_{-1}\mid Y_{1-1}\rangle\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}\frac{1}{2} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2}\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2}\end{bmatrix}=S^{+} \tag{7}$$

按照表象变换的公式,(a)中各量变到(l^2,l_x)表象,成为

$$\begin{cases}\phi_1'=S\phi_1=\begin{bmatrix}1\\ 0\\ 0\end{bmatrix}, & \text{相当于}(l^2、l_z)\text{ 表象中的 }Y_{11}(\mid 11\rangle)\\ \phi_0'=S\phi_0=\begin{bmatrix}0\\ 1\\ 0\end{bmatrix}, & \text{相当于}(l^2、l_z)\text{ 表象中的 }Y_{10}(\mid 10\rangle)\\ \phi_{-1}'=S\phi_{-1}=\begin{bmatrix}0\\ 0\\ 1\end{bmatrix}, & \text{相当于}(l^2、l_z)\text{ 表象中的 }Y_{1-1}(\mid 1-1\rangle)\end{cases} \tag{8}$$

$$\begin{cases}\psi_1'=S\psi_1=\frac{\mathrm{i}}{2}\begin{bmatrix}1\\ -\sqrt{2}\mathrm{i}\\ -1\end{bmatrix}, & \text{相当于}(l^2、l_z)\text{ 表象中的 }\mathrm{i}\psi_{-1}\\ \psi_0'=S\psi_0=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ 0\\ 1\end{bmatrix}, & \text{相当于}(l^2、l_z)\text{ 表象中的 }\psi_0\\ \psi_{-1}'=S\psi_{-1}=-\frac{\mathrm{i}}{2}\begin{bmatrix}1\\ \sqrt{2}\mathrm{i}\\ -1\end{bmatrix}, & \text{相当于}(l^2、l_z)\text{ 表象中的}(-\mathrm{i})\psi_1\end{cases} \tag{9}$$

$$\begin{cases} Y'_{11}=S\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\\sqrt{2}\\1\end{bmatrix}, & \text{相当于}(l^2、l_z)\text{表象中的}\phi_1 \\ Y'_{10}=S\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\0\\-1\end{bmatrix}, & \text{相当于}(l^2、l_z)\text{表象中的}\phi_0 \\ Y'_{1-1}=S\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\-\sqrt{2}\\1\end{bmatrix}, & \text{相当于}(l^2、l_z)\text{表象中的}\phi_{-1} \end{cases} \tag{10}$$

$$l'_x=Sl_xS^+=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{bmatrix}, \quad \text{相当于}(l^2、l_z)\text{表象中的}\ l_z \tag{11}$$

$$l'_y=Sl_yS^+=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0&\mathrm{i}&0\\-\mathrm{i}&0&\mathrm{i}\\0&-\mathrm{i}&0\end{bmatrix}, \quad \text{相当于}(l^2、l_z)\text{表象中的}-l_y \tag{12}$$

$$l'_z=Sl_zS^+=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{bmatrix}, \quad \text{相当于}(l^2、l_z)\text{表象中的}\ l_x \tag{13}$$

按照轮换对称性，式(8)、(11)是在意料之中的. 其他各式则轮换对称性体现得并不完美.

如果 l_x 的本征函数改用 6.5 题求得的结果，在$(l^2、l_z)$表象中，其矩阵表示是

$$Z_{11}=-\frac{\mathrm{i}}{2}\begin{bmatrix}1\\\sqrt{2}\\1\end{bmatrix}=-\mathrm{i}\phi_1, \quad Z_{10}=-\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\0\\-1\end{bmatrix}=-\phi_0$$

$$Z_{1-1}=\frac{\mathrm{i}}{2}\begin{bmatrix}1\\-\sqrt{2}\\1\end{bmatrix}=\mathrm{i}\phi_{-1} \tag{14}$$

l_y 的本征函数表示成

$$X_{11}=\frac{\mathrm{i}}{2}\begin{bmatrix}\mathrm{i}\\\sqrt{2}\mathrm{i}\\-1\end{bmatrix}=\mathrm{i}\psi_1, \quad X_{10}=\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\0\\1\end{bmatrix}=\mathrm{i}\psi_0$$

$$X_{1-1}=\frac{\mathrm{i}}{2}\begin{bmatrix}1\\-\sqrt{2}\mathrm{i}\\-1\end{bmatrix}=\mathrm{i}\psi_{-1} \tag{15}$$

$(l^2、l_z)$表象→$(l^2、l_x)$表象的变换矩阵改为

$$T=\begin{bmatrix}\langle Z_{11}\mid Y_{11}\rangle & \langle Z_{11}\mid Y_{10}\rangle & \langle Z_{11}\mid Y_{1-1}\rangle\\ \langle Z_{10}\mid Y_{11}\rangle & \langle Z_{10}\mid Y_{10}\rangle & \langle Z_{10}\mid Y_{1-1}\rangle\\ \langle Z_{1-1}\mid Y_{11}\rangle & \langle Z_{1-1}\mid Y_{10}\rangle & \langle Z_{1-1}\mid Y_{1-1}\rangle\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}\frac{i}{2} & \frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{i}{2}\\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ -\frac{i}{2} & \frac{i}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{2}\end{bmatrix},\quad T^{+}=\begin{bmatrix}-\frac{i}{2} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{i}{2}\\ -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{i}{\sqrt{2}}\\ -\frac{i}{2} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{i}{2}\end{bmatrix}\tag{16}$$

按照表象变换公式,将各波函数和算符变到$(l^2、l_x)$表象,成为

$$\begin{cases}Z'_{11}=TZ_{11}=\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}, & \text{相当于}(l^2、l_z)\text{ 表象中的 }Y_{11}\\ Z'_{10}=TZ_{10}=\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}, & \text{相当于}(l^2、l_z)\text{ 表象中的 }Y_{10}\\ Z'_{1-1}=TZ_{1-1}=\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}, & \text{相当于}(l^2,l_z)\text{ 表象中的 }Y_{1-1}\end{cases}\tag{17}$$

$$\begin{cases}X'_{11}=TX_{11}=-\frac{i}{2}\begin{bmatrix}1\\\sqrt{2}\\1\end{bmatrix}, & \text{相当于}(l^2、l_z)\text{ 表象中的 }Z_{11}\\ X'_{10}=TX_{10}=-\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\0\\-1\end{bmatrix}, & \text{相当于}(l^2、l_z)\text{ 表象中的 }Z_{10}\\ X'_{1-1}=TX_{1-1}=\frac{i}{2}\begin{bmatrix}1\\-\sqrt{2}\\1\end{bmatrix}, & \text{相当于}(l^2、l_z)\text{ 表象中的 }Z_{1-1}\end{cases}\tag{18}$$

$$\begin{cases}Y'_{11}=T\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}=\frac{i}{2}\begin{bmatrix}1\\\sqrt{2}i\\-1\end{bmatrix}; & \text{相当于}(l^2、l_z)\text{ 表象中的 }X_{11}\\ Y'_{10}=T\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}=\frac{i}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\0\\1\end{bmatrix}, & \text{相当于}(l^2、l_z)\text{ 表象中的 }X_{10}\\ Y'_{1-1}=T\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}=\frac{i}{2}\begin{bmatrix}1\\-\sqrt{2}i\\-1\end{bmatrix}, & \text{相当于}(l^2、l_z)\text{ 表象中的 }X_{1-1}\end{cases}\tag{19}$$

$$l'_x = Tl_xT^+ = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad \text{相当于}(\boldsymbol{l}^2、l_z)\text{表象中的}\ l_z \tag{20}$$

$$l'_y = Tl_yT^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \text{相当于}(\boldsymbol{l}^2、l_z)\text{表象中的}\ l_x \tag{21}$$

$$l'_z = Tl_zT^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & -\mathrm{i} & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & \mathrm{i} & 0 \end{bmatrix}, \quad \text{相当于}(\boldsymbol{l}^2、l_z)\text{表象中的}\ l_y \tag{22}$$

现在轮换对称性得到完美体现. 可见，波函数中的相因子并非总是可以任意取舍，有时它们会有重要意义. 类似地可以进行$(\boldsymbol{l}^2、l_z)$表象→$(\boldsymbol{l}^2、l_y)$表象，读者试自己完成之.

6.10　在$|lm\rangle$态矢量空间的$l=1$的子空间中，取$\hbar=1$.

(a) 证明$l_x^3=l_x$;

(b) 证明$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha l_x}=1+\mathrm{i}\sin\alpha\cdot l_x-(1-\cos\alpha)l_x^2$($\alpha$为实数).

证　(a) 在$l=1$子空间中，$\boldsymbol{l}^2=2, l_x=1,0,-1$. 如以$|\phi_{1m}\rangle$$(m=1,0,-1)$表示$(\boldsymbol{l}^2, l_x)$的共同本征态，即

$$\boldsymbol{l}^2\,|\,\phi_{1m}\rangle = 2\,|\,\phi_{1m}\rangle, \quad l_x\,|\,\phi_{1m}\rangle = m\,|\,\phi_{1m}\rangle, \quad m=1,0,-1$$

显然，对于任何一个态矢量

$$|\,\psi\rangle = C_1\,|\,\phi_{11}\rangle + C_0\,|\,\phi_{10}\rangle + C_{-1}\,|\,\phi_{1-1}\rangle$$

均有

$$(l_x-1)(l_x-0)(l_x+1)\,|\,\psi\rangle = 0 \tag{1}$$

亦即

$$(l_x^3-l_x)\,|\,\psi\rangle = 0 \tag{1'}$$

因$|\psi\rangle$是任意的，所以l_x必满足代数方程(参看题4.24)

$$l_x^3-l_x=0 \tag{2}$$

亦即$l_x^3=l_x$. 这个结论容易用上题求得的$(\boldsymbol{l}^2, l_z)$表象中l_x的具体矩阵表示加以验证. 利用式(2)可得

$$\left.\begin{aligned} l_x &= l_x^3 = l_x^5 = \cdots \\ l_x^2 &= l_x^4 = l_x^6 = \cdots \end{aligned}\right\} \tag{2'}$$

(b) 将$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha l_x}$展开成$l_x$的幂级数，再利用式(2′)，即得

$$e^{i\alpha l_x}=1+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(i\alpha)^n}{n!}l_x^n$$

$$=1+l_x\left[i\alpha+\frac{(i\alpha)^3}{3!}+\frac{(i\alpha)^5}{5!}+\cdots\right]+l_x^2\left[\frac{(i\alpha)^2}{2!}+\frac{(i\alpha)^4}{4!}+\frac{(i\alpha)^6}{6!}+\cdots\right]$$

$$=1+il_x\left[\alpha-\frac{\alpha^3}{3!}+\frac{\alpha^5}{5!}-\cdots\right]+l_x^2\left[-\frac{\alpha^2}{2!}+\frac{\alpha^4}{4!}-\frac{\alpha^6}{6!}+\cdots\right]$$

和 $\sin\alpha$ 及 $\cos\alpha$ 的级数展开式

$$\sin\alpha=\alpha-\frac{\alpha^3}{3!}+\frac{\alpha^5}{5!}-\cdots$$

$$\cos\alpha=1-\frac{\alpha^2}{2!}+\frac{\alpha^4}{4!}-\frac{\alpha^6}{6!}+\cdots$$

比较,即得

$$e^{i\alpha l_x}=1+(i\sin\alpha)l_x-(1-\cos\alpha)l_x^2 \tag{3}$$

由证明过程可知,上式中 l_x 可以换成 $\boldsymbol{l}$ 在任何方向 $\boldsymbol{n}$ 的投影 $\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{n}$,公式仍然成立.

6.11 设矢量算符 $\boldsymbol{\sigma}$ 在任何方向的投影的本征值只能取 ±1. 求 $\boldsymbol{\sigma}$ 各分量间的代数关系.

解 以 $\boldsymbol{n}$ 表示任意方向单位矢量,$\boldsymbol{\sigma}$ 在 $\boldsymbol{n}$ 方向的投影为

$$\sigma_n=\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}=\sigma_xn_x+\sigma_yn_y+\sigma_zn_z \tag{1}$$

它的本征态记为$|\pm,\boldsymbol{n}\rangle$,相应本征值为$\pm1$,即

$$\sigma_n\,|\pm,\boldsymbol{n}\rangle=\pm|\pm,\boldsymbol{n}\rangle \tag{2}$$

再以 σ_n 作用上式,即得

$$\sigma_n^2\,|\pm,\boldsymbol{n}\rangle=|\pm,\boldsymbol{n}\rangle \tag{3}$$

因为任何自旋态矢量总可展开成$|\pm,\boldsymbol{n}\rangle$的线性叠加,所以对任意状态$|\psi\rangle$,均有

$$(\sigma_n^2-1)\,|\,\psi\rangle=0$$

因此 σ_n 满足代数方程

$$\boxed{\sigma_n^2=1} \tag{4}$$

令 $\boldsymbol{n}$ 分别指向 x、y、z 轴,即得

$$\boxed{\sigma_x^2=1,\quad \sigma_y^2=1,\quad \sigma_z^2=1} \tag{5}$$

一般情况下,

$$\sigma_n^2=(\sigma_xn_x+\sigma_yn_y+\sigma_zn_z)^2$$

$$=(\sigma_x^2 n_x^2+\sigma_y^2 n_y^2+\sigma_z^2 n_z^2)+(\sigma_x\sigma_y+\sigma_y\sigma_x)n_x n_y$$
$$+(\sigma_y\sigma_z+\sigma_z\sigma_y)n_y n_z+(\sigma_z\sigma_x+\sigma_x\sigma_z)n_z n_x=1$$

根据式(5),上式中第一项等于1.因 $\boldsymbol{n}$ 是任意的,所以必有

$$\boxed{\sigma_x\sigma_y=-\sigma_y\sigma_x,\quad \sigma_y\sigma_z=-\sigma_z\sigma_y,\quad \sigma_z\sigma_x=-\sigma_x\sigma_z} \tag{6}$$

亦即 σ 各分量互相反对易.

σ 和1(单位算符)形成封闭代数系统(参见题6.14),因此可设

$$\sigma_x\sigma_y=a\sigma_x+b\sigma_y+c\sigma_z+d \tag{7}$$

以 σ_x 左乘上式,并利用 $\sigma_x^2=1$,得到

$$\sigma_y=a+d\sigma_x+b\sigma_x\sigma_y+c\sigma_x\sigma_z$$

以 σ_x 右乘式(7),并利用式(6),得到

$$-\sigma_y=a+d\sigma_x+b\sigma_y\sigma_x+c\sigma_z\sigma_x$$

两式相加,并再次利用式(6),即得

$$a+d\sigma_x=0$$

因为 σ_x 满足的最简单的代数方程为 $\sigma_x^2=1$,所以,为了上式成立,必须 $a=0$,$d=0$.

现在式(7)已经被限制成下列形式:

$$\sigma_x\sigma_y=b\sigma_y+c\sigma_z \tag{7'}$$

以 σ_z 分别左乘和右乘上式,得到

$$\sigma_x\sigma_y\sigma_z=c+b\sigma_y\sigma_z$$
$$\sigma_z\sigma_x\sigma_y=c+b\sigma_z\sigma_y$$

根据反对易关系式(6),可知

$$\sigma_z\sigma_x\sigma_y=-\sigma_x\sigma_z\sigma_y=\sigma_x\sigma_y\sigma_z$$

因此,将前两式相加,即得

$$\sigma_x\sigma_y\sigma_z=c \tag{8}$$

即 $b=0$.上式取平方,得到

$$c^2=\sigma_x\sigma_y\sigma_z\sigma_x\sigma_y\sigma_z$$

利用式(6)调换右端各算符次序,易得右端为(−1),因此

$$c^2=-1 \tag{9}$$

作为一种选择,可取

$$c=\sqrt{-1}=\mathrm{i} \tag{9'}$$

代入式(8),即得

$$\boxed{\sigma_x \sigma_y \sigma_z = \mathrm{i}} \tag{10}$$

分别以 σ_z、σ_x、σ_y 乘上式,并利用式(6),即得

$$\boxed{\sigma_x \sigma_y = \mathrm{i}\sigma_z, \quad \sigma_y \sigma_z = \mathrm{i}\sigma_x, \quad \sigma_z \sigma_x = \mathrm{i}\sigma_y} \tag{11}$$

式(5)和(11)可以统一起来,写成

$$\boxed{\sigma_\alpha \sigma_\beta = \mathrm{i}\sum_\gamma \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_\gamma + \delta_{\alpha\beta}} \tag{12}$$

联合式(11)和(6),就有

$$\sigma_x \sigma_y - \sigma_y \sigma_x = 2\mathrm{i}\sigma_z \tag{12'}$$

等等. 如令

$$\boldsymbol{s} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma} \tag{13}$$

就有对易关系

$$s_x s_y - s_y s_x = \mathrm{i}\hbar s_z \tag{14}$$

等等,即

$$\boxed{\boldsymbol{s} \times \boldsymbol{s} = \mathrm{i}\hbar \boldsymbol{s}} \tag{14'}$$

与一般角动量的对易式相同.

6.12 给定(θ,φ)方向单位矢量

$$\boldsymbol{n} = (n_x, n_y, n_z) = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$$

求 $\sigma_n = \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n}$ 的本征值和本征函数.(取 σ_z 表象)

解 在 σ_z 表象中,Pauli 算符 $\boldsymbol{\sigma}$ 的矩阵表示为

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{1}$$

因此,

$$\begin{aligned} \sigma_n &= \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n} = \sigma_x n_x + \sigma_y n_y + \sigma_z n_z \\ &= \begin{bmatrix} n_z & n_x - \mathrm{i}n_y \\ n_x + \mathrm{i}n_y & -n_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} \\ \sin\theta\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} & -\cos\theta \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{2}$$

设 σ_n 的本征函数表为 $\phi = \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \end{bmatrix}$,本征值 λ,则本征方程为

$$(\sigma_n-\lambda)\phi=0,\quad \text{即}\quad \begin{bmatrix}\cos\theta-\lambda & \sin\theta e^{-i\varphi}\\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta-\lambda\end{bmatrix}\begin{bmatrix}C_1\\ C_2\end{bmatrix}=0 \tag{3}$$

亦即

$$\begin{cases}(\cos\theta-\lambda)C_1+\sin\theta e^{-i\varphi}C_2=0\\ \sin\theta e^{i\varphi}C_1-(\cos\theta+\lambda)C_2=0\end{cases} \tag{3'}$$

存在非平庸解(即 C_1,C_2 不全为 0)的条件为

$$\det(\sigma_n-\lambda)=\begin{vmatrix}\cos\theta-\lambda & \sin\theta e^{-i\varphi}\\ \sin\theta e^{i\varphi} & -(\cos\theta+\lambda)\end{vmatrix}=0 \tag{4}$$

容易解出 $\lambda=\pm1$,即 σ_n 的本征值为±1.(这是基本实验事实!)

对于本征值 $\sigma_n=\lambda=1$,由式(3′)可得

$$\frac{C_1}{C_2}=\frac{1+\cos\theta}{\sin\theta}e^{-i\varphi}=\frac{\cos\frac{\theta}{2}}{\sin\frac{\theta}{2}}e^{-i\varphi}$$

$$=\frac{1+n_z}{n_x+in_y}=\frac{n_x-in_y}{1-n_z}$$

归一化本征函数用(θ,φ)表示,通常取为比较对称的形式:

$$\phi_1(\theta,\varphi)=\begin{bmatrix}\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}\\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi/2}\end{bmatrix} \tag{5}$$

如用 $\boldsymbol{n}$ 的直角坐标分量来表示,可以取为

$$\phi_1(\boldsymbol{n})=\frac{1}{\sqrt{2(1+n_z)}}\begin{bmatrix}1+n_z\\ n_x+in_y\end{bmatrix}$$

或

$$\frac{1}{\sqrt{2(1-n_z)}}\begin{bmatrix}n_x-in_y\\ 1-n_z\end{bmatrix} \tag{5'}$$

如 $n_z\neq\pm1$,二者等阶(仅有相因子的差别). 如 $\boldsymbol{n}=(0,0,1)$,应取前者;如 $\boldsymbol{n}=(0,0,-1)$,应取后者.

对于本征值 $\sigma_n=\lambda=-1$,类似地可以求得

$$\frac{C_1}{C_2}=-\frac{1-\cos\theta}{\sin\theta}e^{-i\varphi}=-\frac{\sin\frac{\theta}{2}}{\cos\frac{\theta}{2}}e^{-i\varphi}$$

$$=-\frac{1-n_z}{n_x+\mathrm{i}n_y}=-\frac{n_x-\mathrm{i}n_y}{1+n_z}$$

归一化本征函数为

$$\phi_{-1}(\theta,\varphi)=\begin{bmatrix}\sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi/2}\\ -\cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi/2}\end{bmatrix} \tag{6}$$

或

$$\phi_{-1}(\boldsymbol{n})=\frac{1}{\sqrt{2(1+n_z)}}\begin{bmatrix}n_x-\mathrm{i}n_y\\ -(1+n_z)\end{bmatrix}$$

或

$$\frac{1}{\sqrt{2(1-n_z)}}\begin{bmatrix}-(1-n_z)\\ n_x+\mathrm{i}n_y\end{bmatrix} \tag{6'}$$

如 $\boldsymbol{n}=(0,0,1)$,取 $\phi_{-1}=\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$;如 $\boldsymbol{n}=(0,0,-1)$,取 $\phi_{-1}=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$

6.13 (a) 对于电子的自旋态 $\chi_{\frac{1}{2}}(\sigma_z=1)$,求 σ_n 的可能测值及相应概率;(b)对于 $\sigma_n=1$ 的自旋态,求 σ 各分量的可能测值及相应概率,以及 σ 的平均值.

解一 利用上题求得的 σ_n 的本征函数,容易求出

(a) 自旋态 $\chi_{\frac{1}{2}}=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$ 中,

$\sigma_n=1$ 的概率为

$$|\langle\phi_1\mid\chi_{\frac{1}{2}}\rangle|^2=\cos^2\frac{\theta}{2}=\frac{1}{2}(1+n_z) \tag{1}$$

$\sigma_n=-1$ 的概率为

$$|\langle\phi_{-1}\mid\chi_{\frac{1}{2}}\rangle|^2=\sin^2\frac{\theta}{2}=\frac{1}{2}(1-n_z) \tag{2}$$

(b) 自旋态 $\phi_1(\sigma_n=1)$ 中,

$\sigma_z=1$ 的概率为

$$|\langle\chi_{\frac{1}{2}}\mid\phi_1\rangle|^2=\frac{1}{2}(1+n_z) \tag{3}$$

$\sigma_z=-1$ 的概率为

$$1-\frac{1}{2}(1+n_z)=\frac{1}{2}(1-n_z) \tag{4}$$

$$\langle\sigma_z\rangle=\frac{1}{2}(1+n_z)-\frac{1}{2}(1-n_z)=n_z \tag{5}$$

考虑到

$$\sigma_n=\sigma_x n_x+\sigma_y n_y+\sigma_z n_z$$

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

$$\sigma_x=\pm1\text{ 的概率为}\frac{1}{2}(1\pm n_x) \tag{6}$$

$$\langle\sigma_x\rangle=n_x \tag{7}$$

$$\sigma_y=\pm1\text{ 的概率为}\frac{1}{2}(1\pm n_y) \tag{8}$$

$$\langle\sigma_y\rangle=n_y \tag{9}$$

将式(5)、(7)、(9)合并写成矢量形式如下：

自旋态 $\phi_1(\sigma_n=1)$ 中，

$$\boxed{\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle=\boldsymbol{n}} \tag{10}$$

类似地，容易算出

自旋态 $\phi_{-1}(\sigma_n=-1)$ 中，

$$\boxed{\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle=-\boldsymbol{n}} \tag{11}$$

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

$$\langle\sigma_n\rangle=w_+\times1+w_-\times(-1)=w_+-w_- \tag{12}$$

由于

$$\sigma_n=\sigma_x n_x+\sigma_y n_y+\sigma_z n_z \tag{13}$$

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

$$\langle\sigma_n\rangle=\langle\sigma_z\rangle n_z=n_z=\cos\theta \tag{14}$$

由式(12)，(14)，并利用 $w_++w_-=1$，就可求出

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

这就是解一中的式(1)、(2).

(b) 在式(14)中，θ 是 z 轴和 $\boldsymbol{n}$ 的夹角. z 轴和 $\boldsymbol{n}$ 的选取是任意的，完全可以将原来的 z 轴作为新的 $\boldsymbol{n}$，而原来的 $\boldsymbol{n}$ 取作新的 z 轴. 由此可知：在 $\sigma_n=1$ 的自旋态

中,σ_z 的平均值仍为 $\cos\theta$,即 n_z. 再令 x、y、z 轮换,即得

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

在 ϕ_1 态下 $\boldsymbol{\sigma}$ 各分量的取值当然均为±1,其概率也可仿照(a)中计算而写出,即

$$\sigma_x = \pm 1 \text{ 的概率为} \frac{1}{2}(1 \pm n_x) \tag{6}$$

$$\sigma_y = \pm 1 \text{ 的概率为} \frac{1}{2}(1 \pm n_y) \tag{8}$$

$$\sigma_z = \pm 1 \text{ 的概率为} \frac{1}{2}(1 \pm n_z) \tag{3,4}$$

6.14 (a) 证明 Pauli 矩阵 σ_x、σ_y、σ_z 及 I(2×2 单位矩阵)构成 2×2 矩阵的完全集.(b) 将任意 2×2 矩阵表示成 σ_x、σ_y、σ_z 及 I 的线性叠加.

解 (a) 线性独立的 2×2 矩阵最多只有 4 个,因此只需证明 σ_x、σ_y、σ_z、I 是线性独立的.

用反证法. 设存在数 C_0、C_1、C_2、C_3,使

$$C_0 I + C_1\sigma_x + C_2\sigma_y + C_3\sigma_z = 0 \tag{1}$$

取上式之迹(对角元之和),因为

$$\mathrm{Tr}\boldsymbol{\sigma} = 0, \quad \mathrm{Tr}I = 2 \tag{2}$$

故得

$$\mathrm{Tr}(C_0 I) = 2C_0 = 0 \quad \text{即} \quad C_0 = 0$$

再以 σ_x 左乘式(1),得到

$$C_0\sigma_x + C_1 I + C_2 \mathrm{i}\sigma_z - C_3 \mathrm{i}\sigma_y = 0$$

再取其迹,即得

$$\mathrm{Tr}(C_1 I) = 2C_1 = 0 \quad \text{即} \quad C_1 = 0$$

同样可证 $C_2 = 0$,$C_3 = 0$. 因此使式(1)成立的 C_0、C_1、C_2、C_3 必须全为 0,亦即 σ_x、σ_y、σ_z、I 互相线性独立,它们构成 2×2 矩阵的完全集.

(b) 因此,给定 2×2 矩阵 M,必定可以表示成

$$M = M_0 I + M_1\sigma_x + M_2\sigma_y + M_3\sigma_z \tag{3}$$

今求系数 $M_0, \cdots, M_3$. 取式(3)之迹,有

$$\mathrm{Tr}M = \mathrm{Tr}(M_0 I) = 2M_0$$

所以

$$M_0 = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}M \tag{4}$$

以 σ_x 右乘式(3),得到

$$\dot{M}\sigma_x = M_0\sigma_x + M_1 I - \mathrm{i}M_2\sigma_z + \mathrm{i}M_3\sigma_y$$

再取其迹,就可求出

$$M_1 = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(M\sigma_x) \tag{5}$$

同理可得

$$M_2 = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(M\sigma_y), \quad M_3 = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(M\sigma_z) \tag{6}$$

因此,式(3)具体化为

$$\boxed{M = \frac{1}{2}[(\mathrm{Tr}M)I + \{\mathrm{Tr}(M\boldsymbol{\sigma})\}\cdot\boldsymbol{\sigma}]} \tag{7}$$

利用公式

$$\mathrm{Tr}(AB) = \mathrm{Tr}(BA)$$

式(7)也可写成

$$\boxed{M = \frac{1}{2}[(\mathrm{Tr}M)I + \{\mathrm{Tr}(\boldsymbol{\sigma}M)\}\cdot\boldsymbol{\sigma}]} \tag{7'}$$

6.15　证明:与 $\boldsymbol{\sigma}$ 的三个分量都对易的非零二维矩阵必为常数矩阵.

证　设二维矩阵 A 满足

$$A\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}A \tag{1}$$

根据题 6.14 的论证,A 必定可以表示成

$$A = C_0 I + C_1\sigma_x + C_2\sigma_y + C_3\sigma_z \tag{2}$$

以 σ_x 分别左乘和右乘上式,得到

$$\sigma_x A = C_0\sigma_x + C_1 + \mathrm{i}C_2\sigma_z - \mathrm{i}C_3\sigma_y \tag{3}$$

$$A\sigma_x = C_0\sigma_x + C_1 - \mathrm{i}C_2\sigma_z + \mathrm{i}C_3\sigma_y \tag{3'}$$

根据题设条件(1),式(3)和(3′)应相等,所以

$$C_2\sigma_z - C_3\sigma_y = C_3\sigma_y - C_2\sigma_z$$

因为 σ_y、σ_z 互相独立,因此必有

$$C_2 = 0, \quad C_3 = 0 \tag{4}$$

类似地,以 σ_y 分别左乘和右乘式(2),可证

$$C_1 = 0, \quad C_3 = 0 \tag{5}$$

因此

$$C_1 = C_2 = C_3 = 0 \tag{6}$$

$$A = C_0 I \tag{7}$$

即 A 为常数矩阵.

6.16 证明:不存在与 $\boldsymbol{\sigma}$ 的三个分量都反对易的非零二维矩阵.

证 设二维矩阵 A 和 $\boldsymbol{\sigma}$ 反对易,即满足

$$A\sigma_x = -\sigma_x A \tag{1}$$

$$A\sigma_y = -\sigma_y A \tag{2}$$

$$A\sigma_z = -\sigma_z A \tag{3}$$

今证 $A=0$. 以 σ_y 右乘式(1),得到

$$\mathrm{i}A\sigma_z = -\sigma_x A\sigma_y$$

利用式(2),(3)以改写上式两端,得到

$$-\mathrm{i}\sigma_z A = \sigma_x\sigma_y A = \mathrm{i}\sigma_z A$$

再以 $\mathrm{i}\sigma_z$ 左乘上式,即得

$$A = -A, \quad \text{即} \quad A = 0 \tag{4}$$

证明完毕.

6.17 满足条件

$$U^+U = UU^+ = 1, \quad \det U = 1$$

的 n 维矩阵 U,称为 SU_n 矩阵. 试求 SU_2 的一般表示式.

解 设

$$U = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}, \quad U^+ = \begin{bmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{bmatrix} \tag{1}$$

由条件 $U^+U=1$,得到

$$a^*a + c^*c = b^*b + d^*d = 1 \tag{2a}$$

$$a^*b + c^*d = ab^* + cd^* = 0 \tag{2b}$$

由条件 $UU^+=1$,得到

$$a^*a + b^*b = c^*c + d^*d = 1 \tag{3a}$$

$$ac^* + bd^* = a^*c + b^*d = 0 \tag{3b}$$

由条件 $\det U=1$,得到

$$ad-bc=1 \tag{4}$$

由式(2a)及(3a)易得

$$b^*b=c^*c,\quad a^*a=d^*d \tag{5}$$

$$a^*a+b^*b=1 \tag{6}$$

因此可令

$$\left.\begin{aligned} a&=\cos\omega\cdot e^{i\alpha},\quad b=\sin\omega\cdot e^{i\beta}\\ d&=\cos\omega\cdot e^{i\gamma},\quad c=\sin\omega\cdot e^{i\delta}\end{aligned}\right\} \tag{7}$$

ω、α、β、γ、δ 为实数. 将式(7)代入式(4),得到

$$\cos^2\omega\cdot e^{i(\alpha+\gamma)}-\sin^2\omega\cdot e^{i(\beta+\delta)}=1$$

为此,必须

$$e^{i(\alpha+\gamma)}=1,\quad e^{i(\beta+\delta)}=-1 \tag{8}$$

式(8)给出

$$\gamma=-\alpha,\quad e^{i\delta}=-e^{-i\beta} \tag{8'}$$

至此,矩阵 U 已经具体化为

$$U=\begin{bmatrix}\cos\omega\, e^{i\alpha} & \sin\omega\, e^{i\beta}\\ -\sin\omega\, e^{-i\beta} & \cos\omega\, e^{-i\alpha}\end{bmatrix} \tag{9}$$

容易验证,这个矩阵已经满足所有题设条件,所以它就是 SU_2 矩阵的普遍表示式. 可以看出,它含有 3 个独立的参量.

6.18　讨论下列算符是否存在. 如存在,将其表示成 I、σ_x、σ_y、σ_z 的线性叠加. (a) $(1+\sigma_x)^{1/2}$;(b) $(1+\sigma_x+i\sigma_y)^{1/2}$;(c) $(1+\sigma_x)^{-1}$.

解　(a) $(1+\sigma_x)^{1/2}$. σ_x 的本征值为 ±1,对每一个本征值,$(1+\sigma_x)^{1/2}$ 都给出明确的值(规定取正根),因此可以判断,$(1+\sigma_x)^{1/2}$ 存在,而且是 σ_x 的函数. 根据题 6.14 的论证,可令

$$(1+\sigma_x)^{1/2}=C_0+C_1\sigma_x \tag{1}$$

上式取平方,得到

$$1+\sigma_x=(C_0+C_1\sigma_x)^2=C_0^2+C_1^2+2C_0C_1\sigma_x$$

因此

$$C_0^2+C_1^2=1$$

$$2C_0C_1=1$$

两式相加、减,得到

$$(C_0+C_1)^2=2$$
$$(C_0-C_1)^2=0$$

如规定(C_0+C_1)取正值,就可解出

$$C_0=C_1=1/\sqrt{2}$$

代入式(1),即得

$$(1+\sigma_z)^{1/2}=\frac{1}{\sqrt{2}}(1+\sigma_x) \tag{2}$$

容易验证,对于σ_x的任何一个本征值(±1),上式确定成立.

(b) 试令

$$(1+\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y)^{1/2}=C_0+C_1\sigma_x+C_2\sigma_y+C_3\sigma_z \tag{3}$$

两端取平方,得到

$$1+\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y=C_0^2+C_1^2+C_2^2+C_3^2+2C_0(C_1\sigma_x+C_2\sigma_y+C_3\sigma_z)$$

因此

$$C_3=0$$
$$C_0^2+C_1^2+C_2^2=1$$
$$2C_0C_1=1$$
$$2C_0C_2=\mathrm{i}$$

将后两式代入第二式中,即得$C_0^2=1$,如规定C_0取正值,即得

$$C_0=1,\quad C_1=\frac{1}{2},\quad C_2=\frac{\mathrm{i}}{2},\quad C_3=0$$

代入式(3),即得

$$(1+\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y)^{1/2}=1+\frac{1}{2}(\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y) \tag{4}$$

(c) $(1+\sigma_x)^{-1}$不存在.因为当σ_x取本征值-1,$(1+\sigma_x)^{-1}$变成无限大.为了证实这个判断,不妨先试令

$$(1+\sigma_x)^{-1}=C_0+C_1\sigma_x+C_2\sigma_y+C_3\sigma_z$$

以$(1+\sigma_x)$左乘和右乘上式,再相加,得到

$$1=C_0+C_1+(C_0+C_1)\sigma_x+C_2\sigma_y+C_3\sigma_z$$

因此

$$C_2=0,\quad C_3=0$$

$$C_0 + C_1 = 1, \quad C_0 + C_1 = 0$$

后面两式矛盾，无解. 这表明$(1+\sigma_x)^{-1}$确实不存在.

6.19　设 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$ 是与 $\boldsymbol{\sigma}$ 对易的任何矢量算符，证明

$$\boxed{(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}) = \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B} + \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})} \tag{1}$$

证一　将左端展开成 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$、$\boldsymbol{\sigma}$ 的分量式，

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}) &= (\sigma_x A_x + \sigma_y A_y + \sigma_z A_z)\cdot(\sigma_x B_x + \sigma_y B_y + \sigma_z B_z)\\ &= (\sigma_x^2 A_x B_x + \sigma_y^2 A_y B_y + \sigma_z^2 A_z B_z)\\ &\quad + (\sigma_x\sigma_y A_x B_y + \sigma_y\sigma_x A_y B_x)\\ &\quad + (y、z\text{ 分量项}) + (z、x\text{ 分量项})\end{aligned}$$

利用

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1$$

$$\sigma_x\sigma_y = \mathrm{i}\sigma_z = -\sigma_y\sigma_x, \quad \cdots$$

即得

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}) &= \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B} + \mathrm{i}\sigma_z(A_xB_y - A_yB_x) + \cdots\\ &= \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B} + \mathrm{i}\sigma_z(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})_z + \cdots\\ &= \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B} + \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\end{aligned}$$

证明完毕. 由证明过程可以知道，只要 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{\sigma}$ 对易，$\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{\sigma}$ 对易，式(1)就可成立. $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$ 之间即使互不对易，也无妨.

证二　式(1)左端可以写成

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}) = \left(\sum_\alpha \sigma_\alpha A_\alpha\right)\left(\sum_\beta \sigma_\beta B_\beta\right) = \sum_{\alpha,\beta}\sigma_\alpha\sigma_\beta A_\alpha B_\beta$$

利用公式(见题 6.11)

$$\sigma_\alpha\sigma_\beta = \mathrm{i}\sum_\gamma \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_\gamma + \delta_{\alpha\beta}$$

即得

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}) &= \sum_{\alpha,\beta} A_\alpha B_\beta\delta_{\alpha\beta} + \mathrm{i}\sum_{\alpha,\beta,\gamma}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_\gamma A_\alpha B_\beta\\ &= \sum_\alpha A_\alpha B_\alpha + \mathrm{i}\sum_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\gamma\alpha\beta}\sigma_\gamma A_\alpha B_\beta\end{aligned}$$

根据题 4.1 式(7)，上式中第二项即是 $\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})$，而第一项显然就是 $\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}$，因此

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}) = \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B} + \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})$$

此即式(1).

以下讨论几个重要的特例.

如 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}$,而且 $\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{A}=0$,则式(1)简化成

$$\boxed{(\sigma\cdot\boldsymbol{A})^2=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}^2} \tag{2}$$

例如,取 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{n}$(单位矢量,$\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{n}=0$),即得

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})^2=\sigma_n^2=1 \tag{3}$$

又如,取 $\boldsymbol{A}$ 为 $\boldsymbol{r}$ 或 $\boldsymbol{p}$,即得

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})^2=\boldsymbol{r}^2 \tag{4}$$

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})^2=\boldsymbol{p}^2 \tag{5}$$

式(1)中,如取 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}=\boldsymbol{l}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$,利用基本对易式

$$\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{l}=\mathrm{i}\boldsymbol{l}\quad(\text{取 }\hbar=1)$$

即得

$$\boxed{(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l})^2=\boldsymbol{l}^2-\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}} \tag{6}$$

6.20 计算 $\mathrm{Tr}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})$,$\mathrm{Tr}[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})]$以及 $\mathrm{Tr}[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{C})]$,其中 $\boldsymbol{\sigma}$ 为 Pauli 矩阵,$\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$、$\boldsymbol{C}$ 为与 $\boldsymbol{\sigma}$ 对易的算符或常矢量.

解 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}=\sigma_xA_x+\sigma_yA_y+\sigma_zA_z$,由于

$$\mathrm{Tr}\sigma_x=\mathrm{Tr}\sigma_y=\mathrm{Tr}\sigma_z=0 \tag{1}$$

显然有

$$\boxed{\mathrm{Tr}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})=0} \tag{2}$$

其次,利用上题证明的公式

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}) \tag{3}$$

并利用式(2),即得

$$\boxed{\mathrm{Tr}[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})]=2\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}} \tag{4}$$

最后,利用式(3),可得

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{C})=(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{C})+\mathrm{i}[\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})](\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{C})$$

上式求迹,第一项是 $\boldsymbol{\sigma}$ 的线性项,迹为 0,因此

$$\mathrm{Tr}[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{C})]=\mathrm{i}\mathrm{Tr}\{[\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})](\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{C})\}$$

再利用式(4),即得

$$\boxed{\begin{aligned}&\mathrm{Tr}[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{C})]\\&=2\mathrm{i}(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\cdot\boldsymbol{C}=2\mathrm{i}\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})\end{aligned}} \tag{5}$$

在以上求迹的过程中,由于已经假定 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$、$\boldsymbol{C}$ 与 $\boldsymbol{\sigma}$ 对易,所以 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$、$\boldsymbol{C}$ 的任何组合均可当作常数矩阵处理,只是 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$、$\boldsymbol{C}$ 的次序不能随意调换.

6.21　设 $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{\sigma}$ 对易,证明

$$\boxed{\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})-\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}-(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\boldsymbol{\sigma}=\mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma}}$$

证一　引入任意常数矢量 $\boldsymbol{B}$,并利用公式

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}) \tag{1}$$

即得

$$[\boldsymbol{A}-(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\boldsymbol{\sigma}]\cdot\boldsymbol{B}=-\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})=-\mathrm{i}(\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{A})\cdot\boldsymbol{B}$$

因为 $\boldsymbol{B}$ 是任意的,所以

$$\boldsymbol{A}-(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\boldsymbol{\sigma}=-\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{A}=\mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma} \tag{2}$$

同理可得

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})-\boldsymbol{A}]\cdot\boldsymbol{B}&=\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{A})\\&=-\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})=-\mathrm{i}(\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{A})\cdot\boldsymbol{B}\end{aligned}$$

因为 $\boldsymbol{B}$ 是任意的,所以

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})-\boldsymbol{A}=-\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{A}=\mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma} \tag{3}$$

式(3)减式(2),即得

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})+(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\boldsymbol{\sigma}=2\boldsymbol{A} \tag{4}$$

式(3)加式(2),即得

$$\boxed{[\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}]=\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})-(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\boldsymbol{\sigma}=2\mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma}} \tag{5}$$

证二　以 $\boldsymbol{e}_\alpha(\alpha=x,y,z)$ 表示 x、y、z 方向单位矢量,则

$$\boldsymbol{\sigma}=\sum_\alpha\sigma_\alpha\boldsymbol{e}_\alpha,\quad \boldsymbol{A}=\sum_\alpha A_\alpha\boldsymbol{e}_\alpha$$

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}=\sum_\alpha\sigma_\alpha A_\alpha,\quad \boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma}=\sum_{\alpha\beta\gamma}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\alpha\sigma_\beta\boldsymbol{e}_\gamma$$

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})=\sum_\alpha\sigma_\alpha\boldsymbol{e}_\alpha\sum_\beta\sigma_\beta A_\beta=\sum_{\alpha,\beta}\sigma_\alpha\sigma_\beta A_\beta\boldsymbol{e}_\alpha$$

利用公式(见题 6.11)

$$\sigma_\alpha\sigma_\beta = \delta_{\alpha\beta} + \mathrm{i}\sum_\gamma \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_\gamma$$

即得

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}) &= \sum_{\alpha\beta}\delta_{\alpha\beta}A_\beta\boldsymbol{e}_\alpha + \mathrm{i}\sum_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_\gamma A_\beta\boldsymbol{e}_\alpha \\ &= \sum_\alpha A_\alpha\boldsymbol{e}_\alpha + \mathrm{i}\sum_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\beta\gamma\alpha}A_\beta\sigma_r\boldsymbol{e}_\alpha \\ &= \boldsymbol{A} + \mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma}\end{aligned}$$

此即式(3). 同样可证式(2). 将式(2)、(3)相减、相加,即得式(4)、(5).

6.22 设 λ 为常数,证明

$$\boxed{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z} = \cos\lambda + \mathrm{i}\sigma_z\sin\lambda} \tag{1}$$

证一 将 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}$ 展开成 σ_z 的级数,

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(\mathrm{i}\lambda\sigma_z)^n = \left(\sum_{n\text{偶}} + \sum_{n\text{奇}}\right)\frac{1}{n!}(\mathrm{i}\lambda)^n\sigma_z^n \tag{2}$$

由于 $\sigma_z^2=1$,所以

$$n\text{ 偶},\sigma_z^n = 1,\quad n\text{ 奇},\sigma_z^n = \sigma_z$$

代入式(2),即得.

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z} = \sum_{n\text{偶}}\frac{(\mathrm{i}\lambda)^n}{n!} + \sigma_z\sum_{n\text{奇}}\frac{(\mathrm{i}\lambda)^n}{n!} \tag{2'}$$

其中

$$\sum_{n\text{偶}}\frac{(\mathrm{i}\lambda)^n}{n!} = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(\mathrm{i}\lambda)^{2k}}{(2k)!} = \sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\frac{\lambda^{2k}}{(2k)!} = \cos\lambda$$

$$\sum_{n\text{奇}}\frac{(\mathrm{i}\lambda)^n}{n!} = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(\mathrm{i}\lambda)^{2k+1}}{(2k+1)!} = \mathrm{i}\sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\frac{\lambda^{2k+1}}{(2k+1)!} = \mathrm{i}\sin\lambda$$

故得

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z} = \cos\lambda + \mathrm{i}\sigma_z\sin\lambda \tag{1}$$

证二 由于 $\sigma_z^2=1$,σ_z 的任何正幂级数必定可以简化成$(a+b\sigma_z)$的形式. 因此可令

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z} = a + b\sigma_z \tag{3}$$

a、b 为待定常数. 将上式作用于 σ_z 的本征态$\chi_{\pm\frac{1}{2}}$,得到

$$\text{对于}\chi_{\frac{1}{2}},\quad \sigma_z=1,\quad \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda}=a+b$$

$$\text{对于}\chi_{-\frac{1}{2}},\quad \sigma_z=-1,\quad \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda}=a-b$$

容易解出

$$a=\cos\lambda,\quad b=\mathrm{i}\sin\lambda \tag{4}$$

代入式(3),即得式(1).

证三　$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}$是$\sigma_z$的函数,在$\sigma_z$表象中可以表示成对角化矩阵,对角元等于其本征值.$\sigma_z$的本征值为$\pm1$,$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}$的本征值为$\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\lambda}$.因此,在$\sigma_z$表象中$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}$的矩阵表示为

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}=\begin{bmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda} & 0\\ 0 & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\cos\lambda+\mathrm{i}\sin\lambda & 0\\ 0 & \cos\lambda-\mathrm{i}\sin\lambda\end{bmatrix} \tag{5}$$

由于

$$I=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix},\quad \sigma_z=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}$$

故得

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}=\cos\lambda+\mathrm{i}\sigma_z\sin\lambda \tag{1}$$

算符间的关系式与表象的选择无关,故上式可以脱离σ_z表象而普遍成立.

讨论　以上的证明过程,主要利用了σ_z的本征值以及$\sigma_z^2=1$.如将σ_z改成$\boldsymbol{\sigma}$在$\boldsymbol{n}$方向的投影σ_n,由于σ_n的本征值仍为±1,而且$\sigma_n^2=1$,因此显然仍可证明

$$\boxed{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_n}=\cos\lambda+\mathrm{i}\sigma_n\sin\lambda} \tag{6}$$

6.23　设$\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$为实常数矢量,试将$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\sigma\cdot\boldsymbol{A}}$和$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\sigma\cdot\boldsymbol{A}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\sigma\cdot\boldsymbol{B}}$表示成$I$及$\sigma_x$、$\sigma_y$、$\sigma_z$的线性叠加,并计算它们的迹.

解　将$\boldsymbol{A}$写成$A\boldsymbol{n}$,$\boldsymbol{n}$为$\boldsymbol{A}$方向单位矢量$\left(\boldsymbol{n}=\dfrac{\boldsymbol{A}}{A}\right)$,则

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\sigma\cdot\boldsymbol{A}}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}A\sigma_n},\quad A=|\boldsymbol{A}| \tag{1}$$

利用上题式(6),即得

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}}=\cos A+\mathrm{i}\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}}{A}\sin A \tag{2}$$

其中第一项应理解成$I\cos A$,I为单位矩阵.第二项为$\boldsymbol{\sigma}$的线性项,对迹无贡献.因此

$$\boxed{\mathrm{Tr}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\sigma\cdot\boldsymbol{A}}=2\cos A,\quad A=|\boldsymbol{A}|} \tag{3}$$

类似地可以写出 $e^{i\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}}$ 的表示式. 因此

$$\begin{aligned}e^{i\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}}e^{i\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}} &= \left(\cos A+\frac{\mathrm{i}}{A}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}\sin A\right)\left(\cos B+\frac{\mathrm{i}}{B}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}\sin B\right)\\ &=\cos A\cos B-(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})\frac{1}{AB}\sin A\sin B\\ &\quad+\mathrm{i}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\frac{1}{A}\sin A\cos B+\mathrm{i}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})\frac{1}{B}\cos A\sin B\\ &=\cos A\cos B-\frac{\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}}{AB}\sin A\sin B-\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\frac{1}{AB}\sin A\sin B\\ &\quad+\mathrm{i}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\frac{1}{A}\sin A\cos B+\mathrm{i}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})\frac{1}{B}\cos A\sin B\end{aligned}\tag{4}$$

上式中后三项为 $\boldsymbol{\sigma}$ 的线性项,迹为 0,所以

$$\boxed{\mathrm{Tr}(e^{i\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}}e^{i\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}})=2\cos A\cos B-2\frac{\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}}{AB}\sin A\sin B}\tag{5}$$

下面讨论几个特例.

1° $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{B}$ 互相平行,这时

$$\boldsymbol{A}=A\boldsymbol{n},\quad \boldsymbol{B}=B\boldsymbol{n},\quad \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}=AB,\quad \boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}=0$$

式(4)退化成

$$e^{i\sigma\cdot(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})}=e^{i(A+B)\sigma_n}=\cos(A+B)+\mathrm{i}\sigma_n\sin(A+B)$$

这实际上就是式(2),A 换成$(A+B)$而已.

2° $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{B}$ 垂直. 如以 $\boldsymbol{n}$、$\boldsymbol{m}$、$\boldsymbol{k}$ 分别表示 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$、$\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}$ 方向的单位矢量,则

$$\boldsymbol{A}=A\boldsymbol{n},\quad \boldsymbol{B}=B\boldsymbol{m},\quad \boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}=AB\boldsymbol{k},\quad \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}=0$$

式(4)成为

$$e^{iA\sigma_n}e^{iB\sigma_m}=\cos A\cos B+\mathrm{i}\sigma_n\sin A\cos B+\mathrm{i}\sigma_m\cos A\sin B-\mathrm{i}\sigma_k\sin A\sin B\tag{6}$$

如 $A=B=\lambda$,则上式进一步简化成

$$e^{i\lambda\sigma_n}e^{i\lambda\sigma_m}=\cos^2\lambda+\frac{\mathrm{i}}{2}(\sigma_n+\sigma_m)\sin 2\lambda-\mathrm{i}\sigma_k\sin^2\lambda\tag{7}$$

例如,当 $\boldsymbol{n}$、$\boldsymbol{m}$、$\boldsymbol{k}$ 分别代表 x、y、z 轴,就有

$$e^{i\lambda\sigma_x}e^{i\lambda\sigma_y}=\cos^2\lambda+\frac{\mathrm{i}}{2}(\sigma_x+\sigma_y)\sin 2\lambda-\mathrm{i}\sigma_z\sin^2\lambda\tag{8}$$

3° $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{B}$ 垂直时,式(5)简化成

$$\boxed{\mathrm{Tr}(e^{i\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}}e^{i\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}})=2\cos A\cos B}\tag{9}$$

6.24 化简 $e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_\alpha e^{-i\lambda\sigma_z}$,$\alpha=x$、$y$,$\lambda$ 为常数.

解一　利用题 6.22 证明的公式

$$e^{i\lambda\sigma_z} = \cos\lambda + i\sigma_z \sin\lambda \tag{1}$$

可得

$$e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_x e^{-i\lambda\sigma_z} = (\cos\lambda + i\sigma_z\sin\lambda)\sigma_x(\cos\lambda - i\sigma_z\sin\lambda)$$

再利用

$$\sigma_z^2 = 1, \quad \sigma_z\sigma_x = -\sigma_x\sigma_z = i\sigma_y \tag{2}$$

即得

$$e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_x e^{-i\lambda\sigma_z} = \sigma_x\cos 2\lambda - \sigma_y\sin 2\lambda \tag{3}$$

类似地，可得

$$e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_y e^{-i\lambda\sigma_z} = \sigma_x\sin 2\lambda + \sigma_y\cos 2\lambda \tag{4}$$

解二　根据题 6.14 的分析，可令

$$e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_x e^{-i\lambda\sigma_z} = C_0 I + C_1\sigma_x + C_2\sigma_y + C_3\sigma_z \tag{5}$$

将上式作用于 σ_z 的本征态 $\chi_{\frac{1}{2}}$，利用

$$\sigma_z\chi_{\frac{1}{2}} = \chi_{\frac{1}{2}}, \quad \sigma_x\chi_{\frac{1}{2}} = \chi_{-\frac{1}{2}}, \quad \sigma_y\chi_{\frac{1}{2}} = i\chi_{-\frac{1}{2}} \tag{6}$$

即得

$$e^{-2i\lambda}\chi_{-\frac{1}{2}} = (C_0 + C_3)\chi_{\frac{1}{2}} + (C_1 + iC_2)\chi_{-\frac{1}{2}}$$

由于 $\chi_{\frac{1}{2}}$ 和 $\chi_{-\frac{1}{2}}$ 是线性独立的，比较上式两端系数，即得

$$\begin{aligned} C_0 + C_3 &= 0 \\ C_1 + iC_2 &= e^{-2i\lambda} \end{aligned} \tag{7}$$

再将式(5)作用于 σ_z 的本征态 $\chi_{-\frac{1}{2}}$，利用

$$\sigma_z\chi_{-\frac{1}{2}} = -\chi_{-\frac{1}{2}}, \quad \sigma_x\chi_{-\frac{1}{2}} = \chi_{\frac{1}{2}}, \quad \sigma_y\chi_{-\frac{1}{2}} = -i\chi_{\frac{1}{2}} \tag{8}$$

即得

$$e^{2i\lambda}\chi_{\frac{1}{2}} = (C_1 - iC_2)\chi_{\frac{1}{2}} + (C_0 - C_3)\chi_{-\frac{1}{2}}$$

比较两端系数，得到

$$\begin{aligned} C_0 - C_3 &= 0 \\ C_1 - iC_2 &= e^{2i\lambda} \end{aligned} \tag{9}$$

由式(7)、(9)容易解出

$$C_0 = C_3 = 0, \quad C_1 = \cos 2\lambda, \quad C_2 = -\sin 2\lambda \tag{10}$$

代入式(5),即得

$$e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_x e^{-i\lambda\sigma_z} = \sigma_x\cos2\lambda - \sigma_y\sin2\lambda \tag{3}$$

类似地可以证明

$$e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_y e^{-i\lambda\sigma_z} = \sigma_x\sin2\lambda + \sigma_y\cos2\lambda \tag{4}$$

解三 视 λ 为参变数,令

$$f(\lambda) = e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_x e^{-i\lambda\sigma_z} \tag{11}$$

$$g(\lambda) = e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_y e^{-i\lambda\sigma_z} \tag{12}$$

注意

$$f(0) = \sigma_x, \quad g(0) = \sigma_y \tag{13}$$

式(11),(12)对 λ 求导,可得

$$\begin{aligned} f'(\lambda) &= e^{i\lambda\sigma_z}\,i(\sigma_z\sigma_x - \sigma_x\sigma_z)e^{-i\lambda\sigma_z} = -2g(\lambda) \\ g'(\lambda) &= e^{i\lambda\sigma_z}\,i(\sigma_z\sigma_y - \sigma_y\sigma_z)e^{-i\lambda\sigma_z} = 2f(\lambda) \end{aligned} \tag{14}$$

式(14)中第二式乘 i,和第一式相加,得到

$$\frac{d}{d\lambda}[f(\lambda) + ig(\lambda)] = 2i[f(\lambda) + ig(\lambda)] \tag{14'}$$

作为一阶微分方程,上式的解显然是

$$f(\lambda) + ig(\lambda) = [f(0) + ig(0)]e^{2i\lambda} = (\sigma_x + i\sigma_y)e^{2i\lambda} \tag{15}$$

式(14)中第二式乘(−i),和第一式相加,得到

$$\frac{d}{d\lambda}[f(\lambda) - ig(\lambda)] = -2i[f(\lambda) - ig(\lambda)] \tag{14''}$$

解为

$$f(\lambda) - ig(\lambda) = [f(0) - ig(0)]e^{-2i\lambda} = (\sigma_x - i\sigma_y)e^{-2i\lambda} \tag{16}$$

式(15)、(16)相加、减,即得

$$\begin{aligned} f(\lambda) &= \sigma_x\cos2\lambda - \sigma_y\sin2\lambda \\ g(\lambda) &= \sigma_x\sin2\lambda + \sigma_y\cos2\lambda \end{aligned} \tag{17}$$

此即式(3)和(4).

(注) 如 λ 为实数,则 $f(\lambda)$及 $g(\lambda)$均为厄米算符,这时式(16)为式(15)的共轭方程,而式(17)可直接由式(15)得出.

6.25 定义 $\sigma_+ = \sigma_x + i\sigma_y$, $\sigma_- = \sigma_x - i\sigma_y = (\sigma_+)^+$,

(a) 计算$[\sigma_+, \sigma_-]$,$[\sigma_z, \sigma_\pm]$,证明$(\sigma_+)^2 = (\sigma_-)^2 = 0$;

(b) 证明 $e^{\xi\sigma_z}\sigma_\pm = \sigma_\pm e^{\xi\sigma_z} e^{\pm 2\xi}$($\xi$为常数)；

(c) 化简 $e^{\xi\sigma_z}\sigma_x e^{-\xi\sigma_z}$ 和 $e^{\xi\sigma_z}\sigma_y e^{-\xi\sigma_z}$.

解　(a) 利用 $\boldsymbol{\sigma}$ 的基本公式

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1$$

$$\sigma_x\sigma_y = -\sigma_y\sigma_x = \mathrm{i}\sigma_z$$

等等，容易算出

$$(\sigma_+)^2 = (\sigma_x + \mathrm{i}\sigma_y)^2$$

$$= \sigma_x^2 - \sigma_y^2 + \mathrm{i}(\sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x) = 0 \tag{1}$$

再取共轭，即得

$$(\sigma_-)^2 = 0 \tag{2}$$

另外，

$$\sigma_+\sigma_- = (\sigma_x + \mathrm{i}\sigma_y)(\sigma_x - \mathrm{i}\sigma_y)$$

$$= \sigma_x^2 + \sigma_y^2 - \mathrm{i}\sigma_x\sigma_y + \mathrm{i}\sigma_y\sigma_x$$

$$= 2(1 + \sigma_z) \tag{3}$$

$$\sigma_-\sigma_+ = (\sigma_x - \mathrm{i}\sigma_y)(\sigma_x + \mathrm{i}\sigma_y) = 2(1 - \sigma_z) \tag{4}$$

所以

$$\boxed{[\sigma_+, \sigma_-] = 4\sigma_z} \tag{5}$$

另外，

$$[\sigma_z, \sigma_+] = [\sigma_z, \sigma_x] + \mathrm{i}[\sigma_z, \sigma_y]$$

$$= 2\mathrm{i}\sigma_y + \mathrm{i}(-2\mathrm{i}\sigma_x) = 2\sigma_+ \tag{6}$$

取共轭，可得

$$[\sigma_z, \sigma_-] = -2\sigma_- \tag{7}$$

(b) 将式(6)和(7)写成

$$\boxed{\sigma_z\sigma_\pm = \sigma_\pm(\sigma_z \pm 2)} \tag{8}$$

反复利用此式，显然可得

$$\sigma_z^n\sigma_\pm = \sigma_\pm(\sigma_z \pm 2)^n, \quad n = 0,1,2,\cdots \tag{9}$$

因此，对于可以表示成 σ_z 幂级数的任意函数 $f(\sigma_z)$，有

$$\boxed{f(\sigma_z)\sigma_\pm = \sigma_\pm f(\sigma_z \pm 2)} \tag{10}$$

特别是，当 f 是指数函数时，上式给出

$$\boxed{e^{\xi\sigma_z}\sigma_\pm = \sigma_\pm\, e^{\xi\sigma_z}\, e^{\pm 2\xi}} \tag{11}$$

以 $e^{-\xi\sigma_z}$ 右乘上式,则得

$$e^{\xi\sigma_z}\sigma_\pm\, e^{-\xi\sigma_z} = \sigma_\pm\, e^{\pm 2\xi} \tag{12}$$

(c) 按照 $\sigma_\pm$ 的定义,可将 σ_x、σ_y 表示成

$$\sigma_x = \frac{1}{2}(\sigma_+ + \sigma_-) \tag{13}$$

$$\sigma_y = \frac{1}{2\mathrm{i}}(\sigma_+ - \sigma_-)$$

再利用式(12),容易得到

$$\begin{aligned} e^{\xi\sigma_z}\sigma_x e^{-\xi\sigma_z} &= \frac{1}{2}(\sigma_+\, e^{2\xi} + \sigma_-\, e^{-2\xi}) \\ &= \frac{1}{2}\sigma_x(e^{2\xi} + e^{-2\xi}) + \frac{\mathrm{i}}{2}\sigma_y(e^{2\xi} - e^{-2\xi}) \\ &= \sigma_x \mathrm{ch}(2\xi) + \mathrm{i}\sigma_y \mathrm{sh}(2\xi) \end{aligned} \tag{14}$$

类似地,可得

$$e^{\xi\sigma_z}\sigma_y e^{-\xi\sigma_z} = \sigma_y \mathrm{ch}(2\xi) - \mathrm{i}\sigma_x \mathrm{sh}(2\xi) \tag{15}$$

其中 ch 和 sh 表示双曲余弦和双曲正弦函数.

如令 $\xi = \mathrm{i}\lambda$,则

$$\mathrm{ch}(2\mathrm{i}\lambda) = \frac{1}{2}(e^{2\mathrm{i}\lambda} + e^{-2\mathrm{i}\lambda}) = \cos 2\lambda$$

$$\mathrm{sh}(2\mathrm{i}\lambda) = \frac{1}{2}(e^{2\mathrm{i}\lambda} - e^{-2\mathrm{i}\lambda}) = \mathrm{i}\sin 2\lambda$$

式(14)、(15)成为

$$\boxed{e^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_x e^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z} = \sigma_x \cos 2\lambda - \sigma_y \sin 2\lambda} \tag{16}$$

$$\boxed{e^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_y e^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z} = \sigma_x \sin 2\lambda + \sigma_y \cos 2\lambda} \tag{17}$$

这正是上题得到的公式.

6.26 设 λ 为实数,$\boldsymbol{n}$ 为 (θ,φ) 方向单位矢量,证明

$$\boxed{e^{\mathrm{i}\lambda\sigma_n}\boldsymbol{\sigma}e^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_n} = \boldsymbol{n}\sigma_n + (\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n}\cos 2\lambda + \boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin 2\lambda} \tag{1}$$

证一 视 λ 为参变量(但 $\boldsymbol{n}$ 固定不变),令

$$U(\lambda) = e^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_n}, \quad U^+(\lambda) = e^{\mathrm{i}\lambda\sigma_n} \tag{2}$$

$$\boldsymbol{f}(\lambda) = U^+(\lambda)\boldsymbol{\sigma}U(\lambda) \tag{3}$$

注意

$$U(0)=U^{+}(0)=1,\quad \boldsymbol{f}(0)=\boldsymbol{\sigma} \tag{4}$$

对 λ 求导，可得

$$\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}\lambda}=-\mathrm{i}U\sigma_n,\quad \frac{\mathrm{d}U^{+}}{\mathrm{d}\lambda}=\mathrm{i}U^{+}\sigma_n \tag{5}$$

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{f}}{\mathrm{d}\lambda}=\mathrm{i}U^{+}[\sigma_n,\boldsymbol{\sigma}]U \tag{6}$$

利用公式[见题 6.21 式(5)]

$$[\sigma_n,\boldsymbol{\sigma}]=[\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n},\boldsymbol{\sigma}]=-2\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma} \tag{7}$$

即得

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{f}}{\mathrm{d}\lambda}=2\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f} \tag{6'}$$

由定义式(3)，易见

$$\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{f}(\lambda)=U^{+}\sigma_nU=\sigma_n \tag{8}$$

以 $\boldsymbol{n}\times$式(6′)，则得

$$\begin{aligned}\boldsymbol{n}\times\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{f}}{\mathrm{d}\lambda}&=2\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f})=2\boldsymbol{n}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{f})-2\boldsymbol{f}\\&=2\boldsymbol{n}\sigma_n-2\boldsymbol{f}\end{aligned} \tag{9}$$

式(6′)+i×式(9)，得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}(\boldsymbol{f}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f})=-2\mathrm{i}(\boldsymbol{f}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}-\boldsymbol{n}\sigma_n)$$

亦即

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}(\boldsymbol{f}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}-\boldsymbol{n}\sigma_n)=-2\mathrm{i}(\boldsymbol{f}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}-\boldsymbol{n}\sigma_n) \tag{10}$$

上式作为 λ 的一阶微分方程，其解显然是

$$\begin{aligned}\boldsymbol{f}(\lambda)+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(\lambda)-\boldsymbol{n}\sigma_n&=[\boldsymbol{f}(0)+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(0)-\boldsymbol{n}\sigma_n]\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\lambda}\\&=(\boldsymbol{\sigma}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{n}\sigma_n)\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\lambda}\end{aligned} \tag{11}$$

由于 σ_n，$\boldsymbol{f}(\lambda)$，$\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(\lambda)$均为厄米算符，上式取共轭，可得

$$\boldsymbol{f}(\lambda)-\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(\lambda)-\boldsymbol{n}\sigma_n=(\boldsymbol{\sigma}-\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{n}\sigma_n)\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\lambda} \tag{11'}$$

两式相加，即得

$$\boldsymbol{f}(\lambda)=\boldsymbol{\sigma}\cos2\lambda+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin2\lambda+\boldsymbol{n}\sigma_n(1-\cos2\lambda) \tag{12}$$

由于

$$(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n}=\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{n}\sigma_n \tag{13}$$

式(12)可以化成

$$\boldsymbol{f}(\lambda)=\boldsymbol{n}\sigma_n+(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n}\cos2\lambda+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin2\lambda \tag{12'}$$

此即所要证明的式(1).

证二 利用公式(见题 6.22)

$$U^+(\lambda)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_n}=\cos\lambda+\mathrm{i}\sigma_n\sin\lambda \tag{14}$$

以及式(7),可得

$$[U^+(\lambda),\boldsymbol{\sigma}]=\mathrm{i}\sin\lambda[\sigma_n,\boldsymbol{\sigma}]=2\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin\lambda \tag{15}$$

因此,

$$\begin{aligned}U^+(\lambda)\boldsymbol{\sigma}U(\lambda)&=(\boldsymbol{\sigma}U^++2\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin\lambda)U\\&=\boldsymbol{\sigma}+2(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})U(\lambda)\sin\lambda\end{aligned} \tag{16}$$

以

$$U(\lambda)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_n}=\cos\lambda-\mathrm{i}\sigma_n\sin\lambda \tag{14'}$$

代入式(16),得到

$$U^+\boldsymbol{\sigma}U=\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin2\lambda-2\mathrm{i}(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\sigma_n\sin^2\lambda \tag{17}$$

取共轭,得到

$$U^+\boldsymbol{\sigma}U=\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin2\lambda+2\mathrm{i}\sigma_n(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\sin^2\lambda \tag{17'}$$

两式相加,即得

$$\begin{aligned}U^+\boldsymbol{\sigma}U&=\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin2\lambda+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times[\sigma_n,\boldsymbol{\sigma}](\sin^2\lambda)\\&=\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin2\lambda+2\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\sin^2\lambda\\&=\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin2\lambda+(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n}(\cos2\lambda-1)\end{aligned} \tag{18}$$

再利用式(13),即得

$$U^+\boldsymbol{\sigma}U=\boldsymbol{n}\sigma_n+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin2\lambda+(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n}\cos2\lambda \tag{18'}$$

此即式(1).

讨论 如取 $\boldsymbol{n}$ 为 z 轴,即取 $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{e}_z$,则

$$\sigma_n=\sigma_z$$

$$\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}=\boldsymbol{e}_y\sigma_x-\boldsymbol{e}_x\sigma_y$$

$$(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n}=\boldsymbol{e}_x\sigma_x+\boldsymbol{e}_y\sigma_y$$

式(1)变成

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\boldsymbol{\sigma}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}=\boldsymbol{e}_z\sigma_z+\boldsymbol{e}_x(\sigma_x\cos2\lambda-\sigma_y\sin2\lambda)+\boldsymbol{e}_y(\sigma_x\sin2\lambda+\sigma_y\cos2\lambda) \tag{19}$$

此式等价于以下二式：

$$e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_x e^{-i\lambda\sigma_z} = \sigma_x\cos 2\lambda - \sigma_y\sin 2\lambda \tag{19a}$$

$$e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_y e^{-i\lambda\sigma_z} = \sigma_x\sin 2\lambda + \sigma_y\cos 2\lambda \tag{19b}$$

这正是题 6.24 所得到的公式.

6.27　有一个定域电子(作为近似模型,可以不考虑轨道运动)受到均匀磁场作用,磁场 B 指向正 x 方向. 磁作用势为

$$H = \frac{eB}{\mu c}s_x = \frac{e\hbar B}{2\mu c}\sigma_x \tag{1}$$

(μ 为电子质量.)设 $t=0$ 时电子的自旋"向上",即 $s_z=\frac{\hbar}{2}$,求 $t>0$ 时 $\boldsymbol{s}$ 的平均值.

解　先由 Schrödinger 方程解出自旋波函数$\chi(t)$,再计算 $\boldsymbol{s}$ 的平均值. 在 s_z 表象中,Hamilton 算符可以表示成

$$H = \frac{e\hbar B}{2\mu c}\sigma_x = \hbar\omega\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix},\quad \omega = \frac{eB}{2\mu c} \tag{1'}$$

令

$$\chi(t) = a(t)\chi_{\frac{1}{2}} + b(t)\chi_{-\frac{1}{2}} = \begin{bmatrix}a(t)\\ b(t)\end{bmatrix} \tag{2}$$

$\chi(t)$应满足 Schrödinger 方程

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\chi(t) = H\chi(t) \tag{3}$$

初始条件为

$$\chi(0) = \chi_{\frac{1}{2}} = \begin{bmatrix}1\\ 0\end{bmatrix},\quad 即\quad a(0)=1,\quad b(0)=0 \tag{4}$$

将式(1′)及(2)代入式(3),得到

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{bmatrix}a\\ b\end{bmatrix} = \hbar\omega\begin{bmatrix}b\\ a\end{bmatrix} \tag{5}$$

上式相当于方程组

$$\frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t} = -i\omega b$$

$$\frac{\mathrm{d}b}{\mathrm{d}t} = -i\omega a \tag{5'}$$

将两式相加、减,得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(a+b) = -\mathrm{i}\omega(a+b)$$
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(a-b) = \mathrm{i}\omega(a-b) \tag{6}$$

解为

$$a(t)+b(t) = [a(0)+b(0)]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$$
$$a(t)-b(t) = [a(0)-b(0)]\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} \tag{7}$$

由式(7)易得

$$a(t) = \cos\omega t, \quad b(t) = -\mathrm{i}\sin\omega t \tag{8}$$

代入式(2),即得

$$\chi(t) = \begin{bmatrix} \cos\omega t \\ -\mathrm{i}\sin\omega t \end{bmatrix} \tag{9}$$

$$\chi^{+}(t) = [\cos\omega t \quad \mathrm{i}\sin\omega t] \tag{9'}$$

s 的平均值为

$$\langle s_x\rangle = \frac{\hbar}{2}\chi^{+}\sigma_x\chi = \frac{\hbar}{2}\chi^{+}\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}\chi = 0$$

$$\langle s_y\rangle = \frac{\hbar}{2}\chi^{+}\sigma_y\chi = \frac{\hbar}{2}\chi^{+}\begin{bmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{bmatrix}\chi = -\frac{\hbar}{2}\sin 2\omega t \tag{10}$$

$$\langle s_z\rangle = \frac{\hbar}{2}\chi^{+}\sigma_z\chi = \frac{\hbar}{2}\chi^{+}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\chi = \frac{\hbar}{2}\cos 2\omega t$$

6.28 有一个自旋 $\hbar/2$ 的粒子,磁矩 $\boldsymbol{\mu}=\mu_0\boldsymbol{\sigma}$,置于均匀磁场 $\boldsymbol{B}$ 中,$\boldsymbol{B}$ 指向任意方向(θ,φ). 不考虑轨道运动. 设 $t=0$ 时粒子沿正 z 方向极化,即 $\sigma_z=1$,$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_{t=0}=\boldsymbol{e}_3$,求 $t>0$ 时粒子的极化方向,即求$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_t$.

解 先求出自旋波函数,再计算$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle$. 以 $\boldsymbol{n}$ 表示(θ,φ)方向单位矢量,$\boldsymbol{e}_1$、$\boldsymbol{e}_2$、$\boldsymbol{e}_3$ 表示 x、y、z 方向单位矢量,则

$$\boldsymbol{n} = n_1\boldsymbol{e}_1 + n_2\boldsymbol{e}_2 + n_3\boldsymbol{e}_3$$
$$= \sin\theta\cos\varphi\boldsymbol{e}_1 + \sin\theta\sin\varphi\boldsymbol{e}_2 + \cos\theta\boldsymbol{e}_3 \tag{1}$$

和自旋运动有关的 Hamilton 量为

$$H = -\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B} = -\mu_0 B\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n} = -\mu_0 B\sigma_n \tag{2}$$

在 σ_z 表象中,σ_n 的矩阵表示为

$$\sigma_n = \sigma_x n_1 + \sigma_y n_2 + \sigma_z n_3 = \begin{bmatrix} n_3 & n_1 - \mathrm{i}n_2 \\ n_1 + \mathrm{i}n_2 & -n_3 \end{bmatrix} \tag{3}$$

设粒子的自旋波函数为

$$\chi(t)=\begin{bmatrix}a(t)\\ b(t)\end{bmatrix} \tag{4}$$

$\chi(t)$满足 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\chi(t)=H\chi(t)=-\mu_0 B\sigma_n\chi(t) \tag{5}$$

σ_n 的本征值为±1，H 的本征值(即定态能级)为

$$E=\mp\mu_0 B=\mp\hbar\omega$$

$$\boxed{\omega=\mu_0 B/\hbar} \tag{6}$$

因 ω 和 μ_0 同号，如 $\mu_0<0$ 则 $\omega<0$. σ_n 和 H 的本征函数(参看题 6.12)为

$$\phi_1=\frac{1}{\sqrt{2(1+n_3)}}\begin{bmatrix}1+n_3\\ n_1+\mathrm{i}n_2\end{bmatrix}\quad(\sigma_n=1,E=-\hbar\omega)$$

$$\phi_{-1}=\frac{1}{\sqrt{2(1+n_3)}}\begin{bmatrix}n_1-\mathrm{i}n_2\\ -1-n_3\end{bmatrix}\quad(\sigma_n=-1,E=\hbar\omega) \tag{7}$$

式(5)的通解为

$$\chi(t)=C_1\phi_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}+C_{-1}\phi_{-1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \tag{8}$$

C_1、C_{-1}由初始条件决定：

$$C_1=\phi_1^{+}\chi(0),\quad C_{-1}=\phi_{-1}^{+}\chi(0) \tag{9}$$

本题初始波函数为 $\sigma_z=1$ 的本征函数，即

$$\chi(0)=\chi_{\frac{1}{2}}=\begin{bmatrix}1\\ 0\end{bmatrix} \tag{10}$$

因此

$$C_1=\sqrt{\frac{1+n_3}{2}},\quad C_{-1}=\frac{n_1+\mathrm{i}n_2}{\sqrt{2(1+n_3)}} \tag{11}$$

代入式(8)，即得

$$\chi(t)=\frac{1}{\sqrt{2(1+n_3)}}\begin{bmatrix}(1+n_3)C_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}+(n_1-\mathrm{i}n_2)C_{-1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\\ (n_1+\mathrm{i}n_2)C_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}-(1+n_3)C_{-1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}\cos\omega t+\mathrm{i}n_3\sin\omega t\\ (\mathrm{i}n_1-n_2)\sin\omega t\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}a(t)\\ b(t)\end{bmatrix} \tag{12}$$

在$\chi(t)$态下，$\boldsymbol{\sigma}$ 的平均值为

$$\langle\sigma_x\rangle=\chi^{+}\sigma_x\chi=[a^{*}\ b^{*}]\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a\\ b\end{bmatrix}=a^{*}b+b^{*}a$$

$$=n_1n_3(1-\cos2\omega t)-n_2\sin2\omega t \tag{13a}$$

$$\langle\sigma_y\rangle=\chi^{+}\sigma_y\chi=\mathrm{i}(b^{*}a-a^{*}b)$$

$$=n_2n_3(1-\cos2\omega t)+n_1\sin2\omega t \tag{13b}$$

$$\langle\sigma_z\rangle=\chi^{+}\sigma_z\chi=a^{*}a-b^{*}b$$

$$=n_3^2+(1-n_3^2)\cos2\omega t \tag{13c}$$

如磁场 $\boldsymbol{B}$ 指向正 x 方向,则

$$n_1=1,\quad n_2=n_3=0$$

这时式(13)变成

$$\langle\sigma_x\rangle=0,\quad \langle\sigma_y\rangle=\sin2\omega t,\quad \langle\sigma_z\rangle=\cos2\omega t$$

这正是上题得到的结果(注意上题中的 ω 相当于本题$-\omega$).

6.29 某个自旋 $\hbar/2$ 体系,磁矩 $\boldsymbol{\mu}=\mu_0\boldsymbol{\sigma}$. $t<0$ 时处于均匀磁场 $\boldsymbol{B}_0$ 中,$\boldsymbol{B}_0$ 指向正 z 方向. $t\geqslant0$ 时,再加上一个旋转磁场 $\boldsymbol{B}_1(t)$,其方向和 z 轴垂直,

$$\boldsymbol{B}_1(t)=B_1\cos2\omega_0t\boldsymbol{e}_1-B_1\sin2\omega_0t\boldsymbol{e}_2$$

其中 $\omega_0=\mu_0B_0/\hbar$. 已知 $t\leqslant0$ 时体系处于 $s_z=\hbar/2$ 的本征态 $\chi_{\frac{1}{2}}$,求 $t>0$ 时体系的自旋波函数以及自旋反向所需时间.

解 和体系的自旋运动有关的 Hamilton 量为

$$H=-\mu\cdot[\boldsymbol{B}_0+\boldsymbol{B}_1(t)],\quad t\geqslant0 \tag{1}$$

在 s_z 表象中,H 的矩阵表示为

$$H=-\mu_0B_1(\sigma_x\cos2\omega_0t-\sigma_y\sin2\omega_0t)-\mu_0B_0\sigma_z$$

$$=-\mu_0\begin{bmatrix}B_0 & B_1\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\omega_0t}\\ B_1\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\omega_0t} & -B_0\end{bmatrix} \tag{1'}$$

设 $t\geqslant0$ 时体系的自旋波函数为

$$\chi(t)=\begin{bmatrix}a(t)\\ b(t)\end{bmatrix} \tag{2}$$

代入 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\chi(t)=H\chi(t) \tag{3}$$

得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}a(t) = \mathrm{i}\omega_0 a(t) + \mathrm{i}\omega_1 b(t)\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\omega_0 t}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}b(t) = -\mathrm{i}\omega_0 b(t) + \mathrm{i}\omega_1 a(t)\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\omega_0 t} \tag{4}$$

其中

$$\omega_0 = \frac{\mu_0 B_0}{\hbar}, \quad \omega_1 = \frac{\mu_0 B_1}{\hbar} \tag{5}$$

令

$$a(t) = c_1(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t}, \quad b(t) = c_2(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t} \tag{6}$$

代入式(4)，即得 c_1、c_2 满足的方程组

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}c_1(t) = \mathrm{i}\omega_1 c_2(t)$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}c_2(t) = \mathrm{i}\omega_1 c_1(t) \tag{7}$$

初始条件为

$$\chi(0) = \begin{bmatrix} a(0) \\ b(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \chi_{\frac{1}{2}}, \quad \text{即} \quad \begin{cases} c_1(0) = 1 \\ c_2(0) = 0 \end{cases} \tag{8}$$

式(7)中两式相加、减，可得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(c_1 + c_2) = \mathrm{i}\omega_1(c_1 + c_2)$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(c_1 - c_2) = -\mathrm{i}\omega_1(c_1 - c_2) \tag{9}$$

解为

$$c_1(t) + c_2(t) = [c_1(0) + c_2(0)]\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_1 t} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_1 t}$$

$$c_1(t) - c_2(t) = [c_1(0) - c_2(0)]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_1 t} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_1 t} \tag{10}$$

两式相加、减，即得

$$c_1(t) = \cos\omega_1 t, \quad c_2(t) = \mathrm{i}\sin\omega_1 t \tag{11}$$

代入式(6)，得到

$$a(t) = \cos\omega_1 t\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t}, \quad b(t) = \mathrm{i}\sin\omega_1 t\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t} \tag{12}$$

再代入式(2)，即得

$$\chi(t) = \begin{bmatrix} \cos\omega_1 t\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t} \\ \mathrm{i}\sin\omega_1 t\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t} \end{bmatrix}$$

$$= \cos\omega_1 t e^{i\omega_0 t}\chi_{\frac{1}{2}} + i\sin\omega_1 t e^{-i\omega_0 t}\chi_{-\frac{1}{2}} \tag{13}$$

容易看出

$$t=0,\quad \chi=\chi_{\frac{1}{2}}=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix},$$

$$s_z=\frac{\hbar}{2},\quad \langle \boldsymbol{s}\rangle=\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{e}_3$$

$$t=\frac{\pi}{2\omega_1},\quad \chi=ie^{-i\omega_0 t}\chi_{-\frac{1}{2}}=ie^{-i\omega_0 t}\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$$

$$s_z=-\frac{\hbar}{2},\quad \langle \boldsymbol{s}\rangle=-\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{e}_3$$

$$t=\frac{\pi}{\omega_1},\quad \chi=-e^{i\omega_0 t}\chi_{\frac{1}{2}}=-e^{i\omega_0 t}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$$

$$s_z=\frac{\hbar}{2},\quad \langle \boldsymbol{s}\rangle=\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{e}_3$$

亦即,每经过 $\Delta t=\pi/2\omega_1=\pi\hbar/2\mu_0 B_1$,体系的自旋指向就改变一次方向. 体系的自旋态则在$\chi_{\frac{1}{2}}$和$\chi_{-\frac{1}{2}}$间作周期性振荡,周期为 $T=2\Delta t=\pi\hbar/\mu_0 B_1$.

本题内容就是磁共振的基本原理.

6.30 对于自旋 1/2 粒子,常称$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle$为极化矢量,记作 $\boldsymbol{P}$,它也就是自旋角动量的空间指向.

(a) 给定 $t=0$ 时初始自旋波函数(σ_z 表象)

$$\chi(0)=\begin{bmatrix}\cos\delta e^{-i\alpha}\\ \sin\delta e^{i\alpha}\end{bmatrix} \tag{1}$$

其中 δ、α 为正实数(或 0),$\delta\leqslant\pi/2$,$\alpha\leqslant\pi$,试确定初始极化矢量 $\boldsymbol{P}(t=0)$的空间方位角(θ_0,φ_0);

(b) 设粒子为定域的,并受到沿 z 方向但强度随时间变化的磁场$\boldsymbol{B}(t)$的作用,作用势为

$$H=-\mu_0\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}(t)=-\mu_0\sigma_z B(t) \tag{2}$$

求极化矢量随时间变化的规律,即求 $\boldsymbol{P}(t)=\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_t$.

解 (a) 任何确定的自旋态都是 $\boldsymbol{\sigma}$ 在某个方向(θ,φ)的投影 σ_n 的本征态(本征值为 1),而且

$$\boldsymbol{P}=\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle=\boldsymbol{n} \tag{3}$$

其中 $\boldsymbol{n}$ 为(θ,φ)方向的单位矢量(参看题 6.12、6.13),$\sigma_n=1$ 的本征函数为

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

比较式(1)和(4)，即得初始极化矢量 $\boldsymbol{P}(t=0)$ 的方位角

$$\theta_0=2\delta,\quad \varphi_0=2\alpha \tag{5}$$

(b) 设受磁场作用后自旋波函数为

$$\chi(t)=\begin{bmatrix}C_1(t)\\ C_2(t)\end{bmatrix} \tag{6}$$

代入 Schrödinger-Pauli 方程

$$i\hbar\frac{d}{dt}\chi(t)=H\chi(t) \tag{7}$$

得到

$$i\hbar\frac{d}{dt}\begin{bmatrix}C_1\\ C_2\end{bmatrix}=-\mu_0B(t)\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}C_1\\ C_2\end{bmatrix}=-\mu_0B(t)\begin{bmatrix}C_1\\ -C_2\end{bmatrix}$$

即

$$\begin{aligned}\frac{dC_1}{dt}&=i\frac{\mu_0}{\hbar}B(t)C_1\\ \frac{dC_2}{dt}&=-i\frac{\mu_0}{\hbar}B(t)C_2\end{aligned} \tag{8}$$

解为

$$\begin{aligned}C_1(t)&=C_1(0)\exp\left[i\frac{\mu_0}{\hbar}\int_0^tB(\tau)d\tau\right]\\ C_2(t)&=C_2(0)\exp\left[-i\frac{\mu_0}{\hbar}\int_0^tB(\tau)d\tau\right]\end{aligned} \tag{9}$$

初始条件(1)即为

$$\begin{aligned}C_1(0)&=\cos\delta e^{-i\alpha}\\ C_2(0)&=\sin\delta e^{i\alpha}\end{aligned} \tag{1'}$$

令

$$\boxed{\varphi(t)=2\alpha-\frac{2\mu_0}{\hbar}\int_0^tB(\tau)d\tau} \tag{10}$$

则任意时刻的波函数为

$$\chi(t)=\begin{bmatrix}C_1(t)\\C_2(t)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\cos\delta e^{-\frac{1}{2}\varphi(t)}\\\sin\delta e^{\frac{1}{2}\varphi(t)}\end{bmatrix} \tag{11}$$

和式(4)比较,可知极化矢量 $\boldsymbol{P}(t)$ 的方位角(θ,φ)为

$$\theta=\theta_0=2\delta,\quad \varphi=\varphi(t)=\varphi_0-\frac{2\mu_0}{\hbar}\int_0^t B(\tau)\mathrm{d}\tau \tag{12}$$

极化矢量为

$$\boldsymbol{P}(t)=\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_t=\boldsymbol{n}(t)=(\sin\theta\cos\varphi,\sin\theta\sin\varphi,\cos\theta) \tag{13}$$

即

$$\begin{aligned}\langle\sigma_x\rangle_t&=\sin\theta\cos\varphi=\sin2\delta\cos\left[2\alpha-\frac{2\mu_0}{\hbar}\int_0^t B(\tau)\mathrm{d}\tau\right]\\\langle\sigma_y\rangle_t&=\sin\theta\sin\varphi=\sin2\delta\sin\left[2\alpha-\frac{2\mu_0}{\hbar}\int_0^t B(\tau)\mathrm{d}\tau\right]\\\langle\sigma_z\rangle_t&=\cos\theta=\cos2\delta=\langle\sigma_z\rangle_{t=0}\end{aligned} \tag{14}$$

极化矢量 $\boldsymbol{P}(t)$ 和 z 轴(即磁场方向)保持固定的夹角 $\theta=2\delta$,同时绕 z 轴旋转,旋转角速度为

$$\boxed{\omega(t)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\varphi(t)=-\frac{2\mu_0}{\hbar}B(t)} \tag{15}$$

注意,σ_z 和 H 对易,为守恒量.

6.31 以 s、l、j 表示电子的自旋,轨道角动量及总角动量,取 $\hbar=1$. j 和 j^2 可以表示成

$$\boldsymbol{j}=\boldsymbol{s}+\boldsymbol{l}=\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{l} \tag{1}$$

$$\boldsymbol{j}^2=\boldsymbol{s}^2+\boldsymbol{l}^2+2\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{l}=\frac{3}{4}+\boldsymbol{l}^2+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l} \tag{2}$$

(a) 计算$[\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}]$,$[\boldsymbol{l},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}]$,$[\boldsymbol{j},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}]$,$[\boldsymbol{j},\boldsymbol{l}^2]$;

(b) 求 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}$ 和 $\boldsymbol{j}^2$ 的本征值.

解 (a) $\boldsymbol{s}=\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$,它和 $\boldsymbol{l}$ 属于不同自由度,彼此可对易. 根据题 6.21 的计算,

$$[\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}]=2\mathrm{i}\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{\sigma}=-2\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{l} \tag{3}$$

其次,利用 $\boldsymbol{l}$ 本身的对易式

$$\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{l}=\mathrm{i}\boldsymbol{l}\quad(\text{取}\ \hbar=1) \tag{4}$$

容易求出

$$[l_x,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}]=\sigma_y[l_x,l_y]+\sigma_z[l_x,l_z]$$
$$=\mathrm{i}(\sigma_y l_z-\sigma_z l_y)=\mathrm{i}(\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{l})_x$$

因此

$$[\boldsymbol{l},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}]=\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{l} \tag{5}$$

利用式(3)及(5),立即得到

$$[\boldsymbol{j},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}]=[\boldsymbol{l},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}]+\frac{1}{2}[\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}]=0 \tag{6}$$

另外

$$[\boldsymbol{j},\boldsymbol{l}^2]=[\boldsymbol{l},\boldsymbol{l}^2]+[\boldsymbol{s},\boldsymbol{l}^2]=0 \tag{7}$$
$$[\boldsymbol{l}^2,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}]=\boldsymbol{\sigma}\cdot[\boldsymbol{l}^2,\boldsymbol{l}]+[\boldsymbol{l}^2,\boldsymbol{\sigma}]\cdot\boldsymbol{l}=0 \tag{8}$$

因此,$\boldsymbol{j}$、$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}$、$\boldsymbol{l}^2$ 互相对易. 由式(2)可知,$\boldsymbol{j}^2$、$\boldsymbol{j}$、$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}$、$\boldsymbol{l}^2$ 互相对易. 通常选取($\boldsymbol{j}^2$,j_z,$\boldsymbol{l}^2$)作为力学量完全集.

(b) 利用公式

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}) \tag{9}$$

并取 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}=\boldsymbol{l}$,即得

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l})^2=\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{l}+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{l})=\boldsymbol{l}^2-\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l} \tag{10}$$

对于 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}$ 和 $\boldsymbol{l}^2$ 的共同本征态(即 $\boldsymbol{j}^2$ 和 $\boldsymbol{l}^2$ 的共同本征态),

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l})^2+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}-\boldsymbol{l}^2$$
$$=(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l})^2+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}-l(l+1)=0$$

即

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}-l)(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}+l+1)=0 \tag{11}$$

因此,$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}$ 的本征值为(参看题 4.24)

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}=l,\quad -(l+1) \tag{12}$$

将 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}$ 及 $\boldsymbol{l}^2$ 的本征值代入式(2),即得 $\boldsymbol{j}^2$ 的本征值:

$$\boxed{\begin{aligned}&\boldsymbol{j}^2=j(j+1),\quad j=l\pm\frac{1}{2}\\&\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}=l,\quad j=l+\frac{1}{2}\\&\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}=-(l+1),\quad j=l-\frac{1}{2}\end{aligned}} \tag{13}$$

注意,$l=0$ 时,$\boldsymbol{l}^2=0$;$\boldsymbol{l}=0$,因此 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}=0$,$j=\frac{1}{2}$. $j=l-\frac{1}{2}$的情况只能出现于 $l\neq0$ 的情况.

6.32 对于电子或其他自旋 1/2 粒子,$(\boldsymbol{l}^2,\boldsymbol{j}^2,j_z)$的共同本征函数记为 ϕ_{ljm_j},相应于本征值(取 $\hbar=1$)

$$\boldsymbol{l}^2=l(l+1),\quad l=0,1,2,\cdots$$

$$\boldsymbol{j}^2=j(j+1),\quad j=l+\frac{1}{2},l-\frac{1}{2}$$

$$j_z=m_j,\quad m_j=j,j-1,\cdots,(-j)$$

在属于同一个 l 值的态矢量子空间中,定义算符

$$\Lambda_l^+=\frac{1}{2l+1}(l+1+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l})$$

$$\Lambda_l^-=\frac{1}{2l+1}(l-\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}) \tag{1}$$

求这两个算符的主要代数关系以及它们对 ϕ_{ljm_j} 的作用规则.

解 由定义式(1)立即可以看出

$$\boxed{\Lambda_l^++\Lambda_l^-=1} \tag{2}$$

利用上题导出的公式

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l})^2+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}-l(l+1)=0 \tag{3}$$

容易证明

$$\boxed{(\Lambda_l^+)^2=\Lambda_l^+,\quad(\Lambda_l^-)^2=\Lambda_l^-} \tag{4}$$

$$\boxed{\Lambda_l^+\Lambda_l^-=\Lambda_l^-\Lambda_l^+=0} \tag{5}$$

根据上题计算,ϕ_{ljm_j} 也是 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}$ 的本征函数,本征值为

$$j=l+\frac{1}{2}\text{ 时},\quad\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}=l$$

$$j=l-\frac{1}{2}\text{ 时},\quad\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}=-(l+1) \tag{6}$$

因此

$$\boxed{\begin{aligned}&\Lambda_l^+\phi_{l,l+\frac{1}{2},m_j}=\phi_{l,l+\frac{1}{2},m_j},\quad\Lambda_l^+\phi_{l,l-\frac{1}{2},m_j}=0\\&\Lambda_l^-\phi_{l,l-\frac{1}{2},m_j}=\phi_{l,l-\frac{1}{2},m_j},\quad A_l^-\phi_{l,l+\frac{1}{2},m_j}=0\end{aligned}} \tag{7}$$

由此可知,Λ_l^+ 是 $j=l+\frac{1}{2}$态的投影算符,Λ_l^- 是 $j=l-\frac{1}{2}$态的投影算符.

6.33　对于自旋 1/2 粒子，求算符 $\sigma_r=\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}/r$ 对 $(\boldsymbol{l}^2,\boldsymbol{j}^2,j_z)$ 的共同本征函数 ϕ_{ljm_j} 的作用结果(取 $\hbar=1$).

解　我们从 σ_r 和 $\boldsymbol{j}$ 的对易关系入手. $\boldsymbol{\sigma}$ 和 $\boldsymbol{r}/r$ 可对易，利用题 6.21 式(5)，即得

$$[\boldsymbol{\sigma},\sigma_r]=2\mathrm{i}\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\sigma} \tag{1}$$

$\boldsymbol{\sigma}$ 及 r 均与 $\boldsymbol{l}$ 对易，利用 $\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{l}$ 的对易式

$$[x_\alpha,l_\beta]=\mathrm{i}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}x_\gamma \quad (\text{取 }\hbar=1)$$

可得

$$[l_z,\sigma_r]=\frac{1}{r}[l_z,x\sigma_x+y\sigma_y+z\sigma_z]$$

$$=\frac{\mathrm{i}}{r}(y\sigma_x-x\sigma_y)=-\frac{\mathrm{i}}{r}(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\sigma})_z$$

亦即

$$[\boldsymbol{l},\sigma_r]=-\mathrm{i}\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\sigma} \tag{2}$$

由于

$$\boldsymbol{j}=\boldsymbol{l}+\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma} \tag{3}$$

利用式(1)、(2)即得

$$\boxed{[\boldsymbol{j},\sigma_r]=0} \tag{4}$$

因此 σ_r 和 $\boldsymbol{j}^2$、j_z 对易，σ_r 作用于 ϕ_{ljm_j} 的结果，量子数 j 和 m_j 均不变.

给定 j 和 m_j 后，ϕ_{ljm_j} 有两种，相应于 $l=j\pm\frac{1}{2}$. 具体函数形式为[①](θ,φ,s_z 表象)

$$\phi^A_{jm_j}=\frac{1}{\sqrt{2l+1}}\begin{bmatrix}\sqrt{l+m+1} & \mathrm{Y}_{lm}\\ \sqrt{l-m} & \mathrm{Y}_{l,m+1}\end{bmatrix}$$

$$j=l+\frac{1}{2},\quad m_j=m+\frac{1}{2} \tag{5a}$$

$$\phi^B_{jm_j}=\frac{1}{\sqrt{2l'+1}}\begin{bmatrix}-\sqrt{l'-m} & \mathrm{Y}_{l'm}\\ \sqrt{l'+m+1} & \mathrm{Y}_{l',m+1}\end{bmatrix}$$

---

① 参看曾谨言. 量子力学卷Ⅰ. 北京：科学出版社，1997. §8.2.

$$j = l' - \frac{1}{2} \quad (l' \neq 0), \quad m_j = m + \frac{1}{2} \tag{5b}$$

注意,对于同一个 j 值,上式中 $l'=l+1$,因为 Y_{lm} 的宇称为 $(-1)^l$,所以式(5)中两种波函数的宇称相反.

σ_r 是奇宇称算符,受它作用后,波函数的宇称要改变.但由于量子数 j, m_j 不变,σ_r 对 ϕ_{ljm_j} 作用的结果必然是

$$\sigma_r \phi^A_{jm_j} = C\phi^B_{jm_j}, \quad \sigma_r \phi^B_{jm_j} = C'\phi^A_{jm_j} \tag{6}$$

由于 σ_r 是厄米算符,而且

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{r})^2 = r^2, \quad (\sigma_r)^2 = 1 \tag{7}$$

式(5)中两个波函数又都是归一化的,所以

$$\phi^A_{jm_j} = (\sigma_r)^2 \phi^A_{jm_j} = \sigma_r C \phi^B_{jm_j} = C'C\phi^A_{jm_j}$$

因此

$$C'C = 1, \quad C' = 1/C$$

又

$$C' = \langle \phi^A_{jm_j} \mid \sigma_r \mid \phi^B_{jm_j} \rangle = (\langle \phi^B_{jm_j} \mid \sigma_r \mid \phi^A_{jm_j} \rangle)^* = C^*$$

因此

$$C'C = C^*C = 1, \quad |C| = 1 \tag{8}$$

如果限于利用对易关系,式(6)中系数 C 和 C' 只能确定到式(8)的程度.如再采用 Pauli 表象中 σ_r 的矩阵表示

$$\sigma_r = \frac{1}{r}(x\sigma_x + y\sigma_y + z\sigma_z)$$

$$= \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{bmatrix} \tag{9}$$

并利用球谐函数的递推公式,容易算出 $C=C'=-1$,即

$$\boxed{\begin{aligned} \sigma_r \phi^A_{jm_j} &= -\phi^B_{jm_j} \\ \sigma_r \phi^B_{jm_j} &= -\phi^A_{jm_j} \end{aligned}} \tag{10}$$

6.34 对于电子和其他自旋 1/2 粒子,s_z 的本征态常记为 α 和 β,α 即 $\chi_{\frac{1}{2}}$,β 即 $\chi_{-\frac{1}{2}}$.已知电子的波函数为

$$\psi(r,\theta,\varphi,s_z) = \alpha Y_{l0}(\theta,\varphi)R(r) \tag{1}$$

求总角动量 j^2, j_z 的可能测值及相应概率(取 $\hbar=1$).

解一　径向波函数 $R(r)$ 显然与问题无关,只需考虑波函数的 (θ,φ,s_z) 部分,即

$$\phi(\theta,\varphi,s_z)=\alpha Y_{l0}=\begin{bmatrix} Y_{l0} \\ 0 \end{bmatrix} \tag{1'}$$

显然这是 l^2、l_z、σ_z、j_z 的共同本征函数,本征值为

$$l^2=l(l+1),\quad l_z=0,\quad \sigma_z=1,\quad j_z=1/2 \tag{2}$$

所以 j_z 的测量值必然是 1/2(概率=1).

j^2 的本征值为 $j(j+1), j=l\pm\frac{1}{2}$. 如将 $\phi=\alpha Y_{l0}$ 表示成 (l^2, j^2, j_z) 的共同本征态 ϕ_{ljm_j} 的线性叠加,必为

$$\phi=\alpha Y_{l0}=C_1\phi_{l,l+\frac{1}{2},\frac{1}{2}}+C_2\phi_{l,l-\frac{1}{2},\frac{1}{2}} \tag{3}$$

则 $j=l+\frac{1}{2}$ 的概率为 $|C_1|^2$, $j=l-\frac{1}{2}$ 的概率为 $|C_2|^2$. ϕ_{ljm_j} 的具体函数形式见上题,

$$\phi_{l,l+\frac{1}{2},\frac{1}{2}}=\sqrt{\frac{l+1}{2l+1}}\alpha Y_{l0}+\sqrt{\frac{l}{2l+1}}\beta Y_{l1} \tag{4}$$

$$\phi_{l,l-\frac{1}{2},\frac{1}{2}}=-\sqrt{\frac{l}{2l+1}}\alpha Y_{l0}+\sqrt{\frac{l+1}{2l+1}}\beta Y_{l1}$$

容易求得

$$C_1=\langle\phi_{l,l+\frac{1}{2},\frac{1}{2}}\mid\alpha Y_{l0}\rangle=\sqrt{\frac{l+1}{2l+1}}$$

$$C_2=\langle\phi_{l,l-\frac{1}{2},\frac{1}{2}}\mid\alpha Y_{l0}\rangle=-\sqrt{\frac{l}{2l+1}} \tag{5}$$

因此,测得 $j^2=\left(l+\frac{1}{2}\right)\left(l+\frac{3}{2}\right)$ 的概率为 $|C_1|^2=\frac{l+1}{2l+1}$

测得 $j^2=\left(l-\frac{1}{2}\right)\left(l+\frac{1}{2}\right)$ 的概率为 $|C_2|^2=\frac{l}{2l+1}$

解二　关于 j_z 取值的论证和结论与解一相同. j^2 的可能测值为本征值 $j(j+1), j=l\pm\frac{1}{2}$. 设 $j=l+\frac{1}{2}$ 的概率为 ω,则 $j=l-\frac{1}{2}$ 的概率为 $(1-\omega)$, j^2 的平均值应为

$$\begin{aligned}\langle j^2\rangle&=\left(l+\frac{1}{2}\right)\left(l+\frac{3}{2}\right)\omega+\left(l-\frac{1}{2}\right)\left(l+\frac{1}{2}\right)(1-\omega)\\&=(2l+1)\omega+l^2-\frac{1}{4}\end{aligned} \tag{6}$$

本题所给波函数中,自旋变量和轨道变量是分离的,$\langle \boldsymbol{j}^2 \rangle$很容易计算如下:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{j}^2 &= \boldsymbol{l}^2 + \frac{3}{4} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{l} \\ &= \boldsymbol{l}^2 + \frac{3}{4} + \sigma_x l_x + \sigma_y l_y + \sigma_z l_z \end{aligned} \tag{7}$$

波函数 $\phi = \alpha \mathrm{Y}_{l0}$ 是 $\boldsymbol{l}^2$ 的本征函数,所以

$$\langle \boldsymbol{l}^2 \rangle = l(l+1)$$

由于 $\phi = \alpha \mathrm{Y}_{l0}$ 是 l_z 的本征函数,$\langle l_x \rangle$和$\langle l_y \rangle$均为 0,$\langle l_z \rangle$也为 0,因此

$$\begin{aligned} \langle \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{l} \rangle &= \langle \alpha \mathrm{Y}_{l0} \mid \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{l} \mid \alpha \mathrm{Y}_{l0} \rangle = \langle \alpha \mid \boldsymbol{\sigma} \mid \alpha \rangle \cdot \langle \mathrm{Y}_{l0} \mid \boldsymbol{l} \mid \mathrm{Y}_{l0} \rangle \\ &= \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \cdot \langle \boldsymbol{l} \rangle = 0 \end{aligned} \tag{8}$$

于是

$$\langle \boldsymbol{j}^2 \rangle = l(l+1) + \frac{3}{4} \tag{9}$$

比较式(6)和(9),即得

$$w = \frac{l+1}{2l+1}, \quad 1 - w = \frac{l}{2l+1} \tag{10}$$

因此,测得 $\boldsymbol{j}^2 = \left(l + \frac{1}{2}\right)\left(l + \frac{3}{2}\right)$的概率为 $w = \frac{l+1}{2l+1}$,

测得 $\boldsymbol{j}^2 = \left(l - \frac{1}{2}\right)\left(l + \frac{1}{2}\right)$的概率为 $(1-w) = \frac{l}{2l+1}$.

6.35 自旋 1/2 粒子,处于$(\boldsymbol{l}^2, \boldsymbol{j}^2, j_z)$的共同本征态$|ljm_j\rangle$,证明

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \langle \boldsymbol{j} \rangle \left[\frac{j(j+1) - l(l+1) + 3/4}{j(j+1)} \right] \quad (\text{取 } \hbar = 1)$$

证 利用题 6.21 的式(4),令 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{l}$,得到

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{l}) + (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{l})\boldsymbol{\sigma} = 2\boldsymbol{l} \tag{1}$$

上式在$|ljm_j\rangle$态下求平均值,由于$|ljm_j\rangle$也是 $\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{l}$ 的本征态,故得

$$\begin{aligned} \langle ljm_j \mid \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{l}) \mid ljm_j \rangle &= \langle ljm_j \mid (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{l})\boldsymbol{\sigma} \mid ljm_j \rangle \\ &= \langle ljm_j \mid \boldsymbol{\sigma} \mid ljm_j \rangle (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{l})_{\text{本征值}} \end{aligned} \tag{2}$$

因此

$$\langle \boldsymbol{l} \rangle = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \langle \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{l} \rangle_{\text{本征值}} \tag{3}$$

$$\langle \boldsymbol{j} \rangle = \left\langle \boldsymbol{l} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma} \right\rangle = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \left(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{l} + \frac{1}{2} \right)_{\text{本征值}} \tag{4}$$

利用公式

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l})^2+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}-\boldsymbol{l}^2=0 \tag{5}$$

可得

$$\boldsymbol{j}^2=\boldsymbol{l}^2+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}+\frac{3}{4} \tag{6}$$

$$=(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l})^2+2\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}+\frac{3}{4}$$

$$=\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}+\frac{1}{2}\right)\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}+\frac{3}{2}\right) \tag{6'}$$

因此，式(4)两端各乘$\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}+\frac{3}{2}\right)_{\text{本征值}}$，即得

$$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle(\boldsymbol{j}^2)_{\text{本征值}}=\langle\boldsymbol{j}\rangle\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}+\frac{3}{2}\right)_{\text{本征值}}$$

$$=\langle\boldsymbol{j}\rangle\left(\boldsymbol{j}^2-\boldsymbol{l}^2+\frac{3}{4}\right)_{\text{本征值}}$$

亦即

$$\boxed{\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle=\langle\boldsymbol{j}\rangle\left[\frac{j(j+1)-l(l+1)+3/4}{j(j+1)}\right]} \tag{7}$$

在$|ljm_j\rangle$态下，$\langle j_x\rangle=\langle j_y\rangle=0$，$\langle j_z\rangle=m_j$，上式即

$$\langle\sigma_x\rangle=0,\quad\langle\sigma_y\rangle=0 \tag{7a}$$

$$\boxed{\langle\sigma_z\rangle=m_j\frac{j(j+1)-l(l+1)+3/4}{j(j+1)}} \tag{7b}$$

以$l=j\pm\frac{1}{2}$代入上式，可得

$$\langle\sigma_z\rangle=\begin{cases}m_j/j, & j=l+\frac{1}{2}\\ -m_j/(j+1), & j=l-\frac{1}{2}\end{cases} \tag{8}$$

利用

$$\boldsymbol{l}=\boldsymbol{j}-\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$$

易得$\boldsymbol{l}$在$|ljm_j\rangle$态下的平均值为

$$\left.\begin{aligned}\langle l_x\rangle&=0\\ \langle l_y\rangle&=0\end{aligned}\right\} \tag{9a}$$

$$\langle l_z\rangle = m_j - \frac{1}{2}\langle\sigma_z\rangle = m_j\,\frac{j(j+1)+l(l+1)-3/4}{2j(j+1)} \tag{9b}$$

以上数值结果也可以利用$|ljm_j\rangle$的具体波函数形式(见题 6.33)直接计算平均值而求得.

6.36 电子的磁矩(算符)为

$$\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_l + \boldsymbol{\mu}_s = -\frac{e}{2m_e c}(\boldsymbol{l}+2\boldsymbol{s}) \tag{1}$$

试对$|ljm_j\rangle$态计算 μ_z 平均值.

解 如以 Bohr 磁子 $\mu_B = e\hbar/2m_e c$ 作为磁矩单位,则电子的磁矩算符可以写成(以下取 $\hbar=1$)

$$\boldsymbol{\mu} = -(\boldsymbol{l}+2\boldsymbol{s}) = -(\boldsymbol{j}+\boldsymbol{s}) = -\left(\boldsymbol{j}+\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\right) \tag{2}$$

利用上题结果,即得

$$\langle ljm_j \mid \mu_z \mid ljm_j\rangle = -gm_j \tag{3}$$

其中

$$\boxed{g = 1+\frac{j(j+1)-l(l+1)+3/4}{2j(j+1)}} \quad \text{(Landè } g \text{ 因子)} \tag{4}$$

通常以 m_j 取最大值($m_j=j$)时 μ_z 的平均值作为磁矩观测值的定义,记作 μ. 对于电子,

$$\boxed{\mu = \langle ljj \mid \mu_z \mid ljj\rangle = -gj} \tag{5}$$

即

$$\mu = \begin{cases} -\left(j+\dfrac{1}{2}\right), & j = l+\dfrac{1}{2} \\ -j(2j+1)/(2j+2), & j = l-\dfrac{1}{2} \end{cases} \tag{5'}$$

6.37 由两个自旋 1/2 粒子组成的体系,令 $\boldsymbol{s}_1 = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}_1$, $\boldsymbol{s}_2 = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}_2$. 求算符 $H=\frac{1}{2}(\sigma_{1x}\sigma_{2y}-\sigma_{1y}\sigma_{2x})$的本征函数、本征值.

解一 H 是二体厄米算符,本征值应该是实数. 态矢空间的基矢可以取为

$$\alpha(1)\alpha(2),\quad \beta(1)\beta(2),\quad \alpha(1)\beta(2),\quad \beta(1)\alpha(2)$$

H 中二项算符对前二个基矢的作用结果是

$$\sigma_{1x}\sigma_{2y}\alpha(1)\alpha(2) = -\sigma_{1y}\sigma_{2x}\alpha(1)\alpha(2) = \mathrm{i}\beta(1)\beta(2)$$
$$\sigma_{1x}\sigma_{2y}\beta(1)\beta(2) = \sigma_{1y}\sigma_{2x}\beta(1)\beta(2) = -\mathrm{i}\alpha(1)\alpha(2)$$

因此

$$H\alpha(1)\alpha(2) = 0, \quad H\beta(1)\beta(2) = 0$$

$\alpha(1)\alpha(2)$与 $\beta(1)\beta(2)$都是 H 的本征函数，本征值都为零. H 对后二个基矢的作用结果是

$$\sigma_{1x}\sigma_{2y}\alpha(1)\beta(2) = -\mathrm{i}\beta(1)\alpha(2), \quad \sigma_{1y}\sigma_{2x}\alpha(1)\beta(2) = \mathrm{i}\beta(1)\alpha(2)$$
$$\sigma_{1x}\sigma_{2y}\beta(1)\alpha(2) = \mathrm{i}\alpha(1)\beta(2), \quad \sigma_{1y}\sigma_{2x}\beta(1)\alpha(2) = -\mathrm{i}\alpha(1)\beta(2)$$
$$H\alpha(1)\beta(2) = -\mathrm{i}\beta(1)\alpha(2), \quad H\beta(1)\alpha(2) = \mathrm{i}\alpha(1)\beta(2)$$

在$\{\alpha(1)\beta(2), \beta(1)\alpha(2)\}$态矢空间，$H$ 的矩阵表示是

$$\begin{bmatrix} \langle\alpha(1)\beta(2)\mid H\mid\alpha(1)\beta(2)\rangle & \langle\alpha(1)\beta(2)\mid H\mid\beta(1)\alpha(2)\rangle \\ \langle\beta(1)\alpha(2)\mid H\mid\alpha(1)\beta(2)\rangle & \langle\beta(1)\alpha(2)\mid H\mid\beta(1)\alpha(2)\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & \mathrm{i} \\ -\mathrm{i} & 0 \end{bmatrix}$$

其构造与 Pauli 矩阵($-\sigma_y$)相同. 如所周知，s_z 表象中 σ_y 的本征值、本征函数是

$$\sigma_y = 1, \quad \psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ \mathrm{i} \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{\frac{1}{2}} + \mathrm{i}\chi_{-\frac{1}{2}})$$

$$\sigma_y = -1, \quad \psi_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ -\mathrm{i} \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{\frac{1}{2}} - \mathrm{i}\chi_{-\frac{1}{2}})$$

其中$\chi_{\pm\frac{1}{2}}$是 s_z 表象的基矢. 仿此，H 也有下列本征值、本征函数：

$$H = -1, \quad \phi_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\alpha(1)\beta(2) + \mathrm{i}\beta(1)\alpha(2)\}$$

$$H = 1, \quad \phi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\alpha(1)\beta(2) - \mathrm{i}\beta(1)\alpha(2)\}$$

解二　以下是本书著者初次见到本题时在课堂上的即兴解法. 据经验，类似本题类型的算符，取其平方，一般总可化简.

$$H^2 = \frac{1}{4}(2 - \sigma_{1x}\sigma_{2y}\sigma_{1y}\sigma_{2x} - \sigma_{1y}\sigma_{2x}\sigma_{1x}\sigma_{2y})$$
$$= \frac{1}{4}(2 - 2\sigma_{1z}\sigma_{2z}) = \frac{1}{2}(1 - \sigma_{1z}\sigma_{2z})$$

σ_{1z}与 σ_{2z}的本征值均为±1，故 H^2 的本征值为 0，1. 则 H 的本征值为 0，±1. 其中 $H\Rightarrow0$ 相应于 $\sigma_{1z}\sigma_{2z}\Rightarrow1$，对应的波函数为 $\alpha(1)\alpha(2)$及 $\beta(1)\beta(2)$. $H=\pm1$ 相应于 $\sigma_{1z}\sigma_{2z}=-1$，对应的波函数为 $\alpha(1)\beta(2)$或 $\beta(1)\alpha(2)$，以下本征函数的解法同解一.

其实,仔细审视 H 的构造,$\sigma_{1x}\sigma_{2y}$ 与 $\sigma_{1y}\sigma_{2x}$ 是对易算符,各自的本征值都是 ±1,所以 H 的本征值为 $0,\pm1$. 本题中,算符 H 具有交换反对称性,即

$$P_{12}H=-H$$

这种反对称算符,如其本征函数是对称或反对称函数,则相应的本征值必然为零. 本题中前两个本征函数正是这种情形. 后两个本征函数 $\phi_{\pm1}$ 则既非对称函数,也非反对称函数,它们的交换性质是

$$P_{12}\phi_{-1}=\mathrm{i}\phi_1,\quad P_{12}\phi_1=-\mathrm{i}\phi_{-1}$$

相应的本征值是绝对值相同的一对正、负数.

6.38 对于两个自旋 1/2 粒子组成的体系的自旋单态 χ_{00} 和三重态 χ_{11}、χ_{10}、χ_{1-1},研究二体算符 $\sigma_{1x}\sigma_{2x}$,$\sigma_{1y}\sigma_{2y}$,$\sigma_{1z}\sigma_{2z}$ 对它们的作用结果.

解 对于粒子 1、2 的交换,χ_{11}、χ_{10}、χ_{1-1} 是对称的,而 χ_{00} 是反对称的. 三个二体算符则都是对称的.

$$\chi_{11}=\alpha(1)\alpha(2),\quad \chi_{1-1}=\beta(1)\beta(2) \tag{1}$$

它们显然是 $\sigma_{1z}\sigma_{2z}$ 的本征函数,本征值都是 1.

$$\boxed{\sigma_{1z}\sigma_{2z}\chi_{11}=\chi_{11},\quad \sigma_{1z}\sigma_{2z}\chi_{1-1}=\chi_{1-1}} \tag{2}$$

而 $\sigma_{1y}\sigma_{2y}$、$\sigma_{1x}\sigma_{2x}$ 对它们的作用结果则是

$$\boxed{\begin{aligned}&\sigma_{1x}\sigma_{2x}\chi_{11}=\chi_{1-1},\quad \sigma_{1x}\sigma_{2x}\chi_{1-1}=\chi_{11} &(3)\\ &\sigma_{1y}\sigma_{2y}\chi_{11}=-\chi_{1-1},\quad \sigma_{1y}\sigma_{2y}\chi_{1-1}=-\chi_{11} &(4)\end{aligned}}$$

χ_{10} 与 χ_{00} 的构造是

$$\chi_{10}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)+\beta(1)\alpha(2)] \tag{5}$$

$$\chi_{00}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)] \tag{6}$$

它们都是 $\sigma_{1z}\sigma_{2z}$ 的本征函数,本征值都是 -1.

$$\boxed{\sigma_{1z}\sigma_{2z}\chi_{10}=-\chi_{10},\quad \sigma_{1z}\sigma_{2z}\chi_{00}=-\chi_{00}} \tag{7}$$

由于

$$\sigma_{1x}\sigma_{2x}\alpha(1)\beta(2)=\beta(1)\alpha(2),\quad \sigma_{1x}\sigma_{2x}\beta(1)\alpha(2)=\alpha(1)\beta(2)$$
$$\sigma_{1y}\sigma_{2y}\alpha(1)\beta(2)=\beta(1)\alpha(2),\quad \sigma_{1y}\sigma_{2y}\beta(1)\alpha(2)=\alpha(1)\beta(2)$$

所以

$$\boxed{\sigma_{1x}\sigma_{2x}\chi_{10}=\chi_{10},\quad \sigma_{1y}\sigma_{2y}\chi_{10}=\chi_{10}} \tag{8}$$

$$\boxed{\sigma_{1x}\sigma_{2x}\chi_{00}=-\chi_{00},\quad \sigma_{1y}\sigma_{2y}\chi_{00}=-\chi_{00}} \tag{9}$$

即χ_{10},χ_{00}都是$\sigma_{1x}\sigma_{2x}$及$\sigma_{1y}\sigma_{2y}$的本征函数.

值得特别注意的是,算符$\sigma_{1x}\sigma_{2x}$,$\sigma_{1y}\sigma_{2y}$,$\sigma_{1z}\sigma_{2z}$是互相对易的,由它们可以构成$\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$,

$$\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2=\sigma_{1x}\sigma_{2x}+\sigma_{1y}\sigma_{2y}+\sigma_{1z}\sigma_{2z} \tag{10}$$

而式(7)、(8)、(9)表明,χ_{10}与χ_{00}都是式(10)中三个二体算符的共同本征函数.对于χ_{00},本征值都是-1.对于χ_{10},本征值分别为$1,1,-1$.因此,χ_{10},χ_{00}也是$\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$的本征函数.另外,仔细观察式(2)、(3)、(4)可知,χ_{11},χ_{1-1}虽然不是式(10)中三个算符的共同本征函数,但仍是$\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$的本征函数.总之

$$\boxed{\begin{aligned}&\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2\chi_{00}=-3\chi_{00}\\&\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2\chi_{1M}=\chi_{1M},\quad M=1,0,-1\end{aligned}} \tag{11}$$

6.39　对于两个自旋1/2粒子组成的体系,以$\boldsymbol{s}_1$、$\boldsymbol{\sigma}_1$和$\boldsymbol{s}_2$、$\boldsymbol{\sigma}_2$分别表示粒子1和2的自旋角动量及Pauli算符,

$$\boldsymbol{s}_1=\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_1,\quad \boldsymbol{s}_2=\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_2.\quad (\text{取}\ \hbar=1)$$

试求$\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$满足的最简代数方程,并用以确定$\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$的本征值,进而再确定总自旋$\boldsymbol{S}^2$的本征值.

解　σ_1与σ_2分别属于粒子1和2,因而互相对易.利用公式

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{A}+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{A}) \tag{1}$$

并令$\boldsymbol{\sigma}\to\boldsymbol{\sigma}_1$,$\boldsymbol{A}\to\boldsymbol{\sigma}_2$,即得

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)^2=\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{\sigma}_2+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\cdot(\boldsymbol{\sigma}_2\times\boldsymbol{\sigma}_2) \tag{2}$$

由于

$$\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{\sigma}_2=3,\quad \boldsymbol{\sigma}_2\times\boldsymbol{\sigma}_2=2\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{3}$$

代入式(2),即得

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)^2+2\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2-3=(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2-1)(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2+3)=0 \tag{4}$$

这无疑是$\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$满足的最简单的代数方程,因此$\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$的本征值为(参看题4.24

证明的定理)

$$\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 = 1, -3 \tag{5}$$

总自旋为

$$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{s}_1 + \boldsymbol{s}_2 = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2) \tag{6}$$

$$\boldsymbol{S}^2 = \frac{1}{4}(\boldsymbol{\sigma}_1^2 + \boldsymbol{\sigma}_2^2 + 2\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2)$$

$$= \frac{3}{2} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 \tag{7}$$

因此 $\boldsymbol{S}^2$ 的本征值为

$$\boxed{\begin{aligned} &\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 = 1, \quad \boldsymbol{S}^2 = 2 \\ &\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 = -3, \quad \boldsymbol{S}^2 = 0 \end{aligned}} \tag{8}$$

亦即

$$\boldsymbol{S}^2 = S(S+1), \quad S = 1, 0 \tag{8'}$$

如将 $\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2$ 作用于$(\boldsymbol{S}^2, S_z)$共同本征态χ_{SM_S},显然有下列结果:

$$\begin{aligned} &S = 1(\text{三重态}), \\ &S = 0(\text{单态}), \end{aligned} \quad \boxed{\begin{aligned} &\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 \chi_{1M_S} = \chi_{1M_S} \\ &\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 \chi_{00} = -3\chi_{00} \end{aligned}} \quad M_S = 1, 0, -1 \tag{9}$$

6.40 对于两个自旋 1/2 粒子组成的体系,以 P_{12} 表示两粒子间的"自旋交换算符",即定义

$$P_{12}\chi(s_{1z}, s_{2z}) = \chi(s_{2z}, s_{1z}) \tag{1}$$

取 $\hbar = 1$,试证明

$$\boxed{P_{12} = \frac{1}{2}(1 + \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2) = \boldsymbol{S}^2 - 1} \tag{2}$$

证 自旋三重态$\chi_{1M_S}(S=1, M_S=1, 0, -1)$是交换对称的,

$$P_{12}\chi_{1M_S} = \chi_{1M_S} \tag{3}$$

自旋单态$\chi_{00}(S=0, M_S=0)$是交换反对称的,

$$P_{12}\chi_{00} = -\chi_{00} \tag{4}$$

和上题式(9)比较,显然可见,对于 $S=1$ 和 0,均有

$$P_{12}\chi_{SM_S}=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)\chi_{SM_S}=(\boldsymbol{S}^2-1)\chi_{SM_S} \tag{5}$$

体系的任何自旋态$\chi(s_{1z},s_{2z})$总可以表示成各χ_{SM_S}的线性叠加，因此式(2)对体系的任何自旋态成立.

6.41　对于两个自旋 1/2 粒子组成的体系，试写出由 $\boldsymbol{\sigma}_1$ 和 $\boldsymbol{\sigma}_2$（或 $\boldsymbol{s}_1$ 和 $\boldsymbol{s}_2$）构成的各种可能的三重乘积，并化简（取 $\hbar=1$）.

解　基本关系式有（单粒子公式只对粒子 1 写出）

(a) $\boldsymbol{s}_1^2=\frac{3}{4},\boldsymbol{\sigma}_1^2=3;(s_{1x})^2=\frac{1}{4},(\sigma_{1x})^2=1$，等等. (1)

(b) $\boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_1=\mathrm{i}\boldsymbol{s}_1,\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_1=2\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1$ (2)

(c) $\sigma_{1x}\sigma_{1y}=-\sigma_{1y}\sigma_{1x}=\mathrm{i}\sigma_{1z}$，等等. (3)

(d) $\boldsymbol{s}_1$ 与 $\boldsymbol{s}_2$ 对易，$\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2=\boldsymbol{s}_2\cdot\boldsymbol{s}_1,\boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2=-\boldsymbol{s}_2\times\boldsymbol{s}_1$ (4)

三重乘积，有以下各种：

1°

$$\boldsymbol{s}_1\cdot(\boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2)=(\boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_1)\cdot\boldsymbol{s}_2=\mathrm{i}\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2 \tag{5}$$

$$\boldsymbol{s}_2\cdot(\boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2)=-\boldsymbol{s}_2\cdot(\boldsymbol{s}_2\times\boldsymbol{s}_1)$$

$$=-(\boldsymbol{s}_2\times\boldsymbol{s}_2)\cdot\boldsymbol{s}_1=-\mathrm{i}\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2 \tag{6}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_1\cdot(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)=2\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{7}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_2\cdot(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)=-2\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{8}$$

2°　$\boldsymbol{\sigma}_1(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)$型. 由于 $\boldsymbol{\sigma}_1$ 与 $\boldsymbol{\sigma}_2$ 对易，利用题 6.21 证明的公式

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})-\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}-(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\boldsymbol{\sigma}$$

$$=\mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma},\quad(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{A}\text{ 对易})$$

令 $\boldsymbol{\sigma}$ 和 $\boldsymbol{A}$ 一个等于 $\boldsymbol{\sigma}_1$，另一个等于 $\boldsymbol{\sigma}_2$，即得

$$\boldsymbol{\sigma}_1(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)=\boldsymbol{\sigma}_2-\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{9}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_2(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)=\boldsymbol{\sigma}_1+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{10}$$

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)\boldsymbol{\sigma}_1=\boldsymbol{\sigma}_2+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{11}$$

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)\boldsymbol{\sigma}_2=\boldsymbol{\sigma}_1-\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{12}$$

$$\boldsymbol{s}_1(\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2)=\frac{1}{4}\boldsymbol{s}_2-\frac{\mathrm{i}}{2}\boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2,\text{等等.} \tag{13}$$

$$[\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2,\boldsymbol{s}_1]=\mathrm{i}\boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2 \tag{14}$$

$$[\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2,\boldsymbol{s}_2]=-\mathrm{i}\boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2 \tag{15}$$

3°　$\boldsymbol{s}_1\times(\boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2)$型. 利用矢量算符公式（见题 4.1）

$$\boldsymbol{A}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})=\overbrace{\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{B}\boldsymbol{C})}-(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})\boldsymbol{C}$$

$$(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\times\boldsymbol{C}=\overbrace{\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{B}\boldsymbol{C})}-\boldsymbol{A}(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{C})$$

可得

$$\boldsymbol{s}_1\times(\boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2)=(\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2)\boldsymbol{s}_1-\frac{3}{4}\boldsymbol{s}_2=\frac{\mathrm{i}}{2}\boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2-\frac{1}{2}\boldsymbol{s}_2 \tag{16}$$

$$(\boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2)\times\boldsymbol{s}_1=\frac{3}{4}\boldsymbol{s}_2-\boldsymbol{s}_1(\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2)=\frac{1}{2}\boldsymbol{s}_2+\frac{\mathrm{i}}{2}\boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2 \tag{17}$$

$$\boldsymbol{s}_2\times(\boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2)=\frac{1}{2}\boldsymbol{s}_1+\frac{\mathrm{i}}{2}\boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2 \tag{18}$$

$$(\boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2)\times\boldsymbol{s}_2=\frac{\mathrm{i}}{2}\boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2-\frac{1}{2}\boldsymbol{s}_1 \tag{19}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_1\times(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)=\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2-2\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{20}$$

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)\times\boldsymbol{\sigma}_1=\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2+2\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{21}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_2\times(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)=\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2+2\boldsymbol{\sigma}_1 \tag{22}$$

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)\times\boldsymbol{\sigma}_2=\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2-2\boldsymbol{\sigma}_1 \tag{23}$$

4° 总自旋 $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2$,

$$\boldsymbol{S}^2=2\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2+\frac{3}{2} \tag{24}$$

$$[\boldsymbol{S}^2,\boldsymbol{s}_1]=2[\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2,\boldsymbol{s}_1]=2\mathrm{i}\boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2 \tag{25}$$

$$[\boldsymbol{S}^2,\boldsymbol{s}_2]=-2\mathrm{i}\boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2 \tag{26}$$

$$\boldsymbol{S}\cdot(\boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2)=(\boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2)\cdot\boldsymbol{S}=0 \tag{27}$$

$$\boldsymbol{S}(\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2)=(\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2)\boldsymbol{S}=\frac{1}{4}\boldsymbol{S} \tag{28}$$

$$\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^2=\boldsymbol{S}^2\boldsymbol{S}=2\boldsymbol{S} \tag{29}$$

6.42 对于两个自旋 1/2 粒子组成的体系,令

$$\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2,\quad \boldsymbol{n}=\boldsymbol{r}/r,\quad (\boldsymbol{r}\text{ 方向单位矢量})$$

定义张量算符(取 $\hbar=1$)

$$\boxed{S_{12}=3(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{n})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{n})-\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2} \tag{1}$$

(a) 证明 $(S_{12})^2=4\boldsymbol{S}^2-2S_{12}$,$\boldsymbol{S}$ 为总自旋. 再进而证明 S_{12} 的任意正整数次幂均可表示成 S_{12} 和 $\boldsymbol{S}^2$ 的线性组合;

(b) 求 S_{12} 的本征值;

(c) 令 $\boldsymbol{n}$ 经历各种方向(机会均等),求 S_{12} 的平均.

解 总自旋 $\boldsymbol{S}$、$\boldsymbol{S}^2$ 以及 $\boldsymbol{S}$ 在 $\boldsymbol{n}$ 方向的投影可以表示成

$$\boldsymbol{S}=\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2=\frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2) \tag{2}$$

$$\boldsymbol{S}^2=\frac{3}{2}+\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{3}$$

$$S_n=\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{n}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{n}+\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{n})=\frac{1}{2}(\sigma_{1n}+\sigma_{2n}) \tag{4}$$

利用

$$(\sigma_{1n})^2=(\sigma_{2n})^2=1 \tag{5}$$

可得

$$(S_n)^2=\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\sigma_{1n}\sigma_{2n} \tag{6}$$

因此，张量算符 S_{12} 可以表示成

$$\boxed{S_{12}=3\sigma_{1n}\sigma_{2n}-\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2=6S_n^2-2\boldsymbol{S}^2} \tag{7}$$

于是

$$(S_{12})^2=36S_n^4+4\boldsymbol{S}^4-12(S_n^2\boldsymbol{S}^2+\boldsymbol{S}^2S_n^2) \tag{8}$$

由式(5)和(6)容易证明

$$S_n^4=S_n^2 \tag{9}$$

上题已经证明

$$\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^2=\boldsymbol{S}^2\boldsymbol{S}=2\boldsymbol{S} \tag{10}$$

再以 $\boldsymbol{S}$ 点乘式(10)，即得

$$\boldsymbol{S}^4=2\boldsymbol{S}^2 \tag{11}$$

式(10)两端取 $\boldsymbol{n}$ 方向投影，得到

$$S_n\boldsymbol{S}^2=\boldsymbol{S}^2S_n=2S_n \tag{10'}$$

将式(9)、(10′)、(11)代入式(8)，即得

$$\boxed{(S_{12})^2=4\boldsymbol{S}^2-2S_{12}} \tag{12}$$

式(7)和(12)表明 S_{12} 及 S_n 和 $\boldsymbol{S}^2$ 均对易. 以 $\boldsymbol{S}^2$ 乘式(7)，并利用式(11)及(10′)，可得

$$S_{12}\boldsymbol{S}^2=\boldsymbol{S}^2S_{12}=2S_{12} \tag{13}$$

以 S_{12} 乘式(12)，并利用式(13)，即得 S_{12} 满足的最简代数方程

$$(S_{12})^3+2(S_{12})^2-8S_{12}=0 \tag{14}$$

由式(12)、(14)可知，S_{12} 的任何正整数次幂必可表示成 S_{12} 和 $\boldsymbol{S}^2$ 的线性组合，或表

示成 S_{12}、$\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2$ 及 I(单位矩阵)的线性组合. 式(14)可以写成

$$S_{12}(S_{12}-2)(S_{12}+4)=0 \tag{14'}$$

因此 S_{12} 的本征值为

$$S_{12}=2,0,-4 \tag{15}$$

这个结论也可以由式(7)得出,由于 $\boldsymbol{S}^2$ 与 S_n 对易,所以本征值为

$$\boxed{\begin{array}{lll} \boldsymbol{S}^2=0(S=0), & S_n=0, & S_{12}=0 \\ \boldsymbol{S}^2=2(S=1), & S_n=\pm 1, & S_{12}=2 \\ & S_n=0, & S_{12}=-4 \end{array}} \tag{15'}$$

最后,如以 (n_x,n_y,n_z) 表示 $\boldsymbol{n}$ 的直角坐标分量,则

$$\begin{aligned} S_n^2 &= (n_xS_x+n_yS_y+n_zS_z)^2 \\ &= n_x^2S_x^2+n_y^2S_y^2+n_z^2S_z^2+n_xn_y(S_xS_y+S_yS_x)+\cdots \end{aligned}$$

对 $\boldsymbol{n}$ 的各种可能取向平均,应有

$$(n_x^2)_{\text{平均}}=(n_y^2)_{\text{平均}}=(n_z^2)_{\text{平均}}=\frac{1}{3},\quad (n_xn_y)_{\text{平均}}=0,\text{等等.}$$

因此 $(S_n^2)_{\text{平均}}=\frac{1}{3}\boldsymbol{S}^2$,代入式(7),即得

$$(S_{12})_{\text{平均}}=0 \tag{16}$$

6.43 对于两个自旋 1/2 粒子组成的体系,证明张量算符

$$S_{12}=\frac{3}{r^2}(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{r})-\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$$

与 $\boldsymbol{S}^2$ 和 $\boldsymbol{J}$ 对易. $\boldsymbol{S}$ 为总自旋,$\boldsymbol{J}$ 为总角动量,$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{S}+\boldsymbol{l}$,$\boldsymbol{l}$ 为体系的轨道角动量,在质心坐标系中,$\boldsymbol{l}$ 的算符形式为

$$\boldsymbol{l}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}=-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}\times\nabla,\quad \boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2\quad\text{(相对坐标)}$$

解 上题已经证明

$$S_{12}=6S_n^2-2\boldsymbol{S}^2 \tag{1}$$

其中

$$S_n=\boldsymbol{S}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r} \tag{2}$$

由于 $\boldsymbol{S}^2$ 和 S_n 对易,所以 S_{12} 和 $\boldsymbol{S}^2$ 对易.

$\boldsymbol{S}$ 和 S_n 并不对易,利用自旋角动量基本对易式

$$\boldsymbol{S}\times\boldsymbol{S}=\mathrm{i}\boldsymbol{S}$$

容易证明

$$[\boldsymbol{S},S_n]=\mathrm{i}\frac{\boldsymbol{r}}{r}\times\boldsymbol{S} \tag{3}$$

$\boldsymbol{l}$ 和 $\boldsymbol{S}$ 对易，但 $\boldsymbol{l}$ 和 S_n 并不对易，利用基本对易式

$$[l_\alpha,x_\beta]=\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}x_\gamma$$

容易证明

$$[\boldsymbol{l},S_n]=\left[\boldsymbol{l},\boldsymbol{S}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right]=-\mathrm{i}\frac{\boldsymbol{r}}{r}\times\boldsymbol{S} \tag{4}$$

式(3)加式(4)，即得

$$[\boldsymbol{J},S_n]=[\boldsymbol{l}+\boldsymbol{S},S_n]=0 \tag{5}$$

即 $\boldsymbol{J}$ 和 S_n 对易. $\boldsymbol{J}$ 和 $\boldsymbol{S}^2$ 显然对易，则由式(1)可知 $\boldsymbol{J}$ 和 S_{12} 也对易. 证明完毕.

6.44　某物理体系由两个自旋 1/2 的非全同粒子组成. 已知粒子 1 处于 $s_{1z}=1/2$ 的本征态，粒子 2 处于 $s_{2x}=1/2$ 的本征态，求体系总自旋 $\boldsymbol{S}^2$ 的可能测值及相应概率. (取 $\hbar=1$)

解一　$s_{1z}=\pm1/2$ 的单粒子自旋态记为 $\alpha(1),\beta(1)$，在 Pauli 表象中 $\alpha=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$，$\beta=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$. $s_{2x}=\frac{1}{2}$ 的单粒子自旋态为

$$\phi(2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}_2=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(2)+\beta(2)] \tag{1}$$

因此，体系的自旋态为

$$\chi(1,2)=\alpha(1)\phi(2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\alpha(2)+\alpha(1)\beta(2)] \tag{2}$$

总自旋 $\boldsymbol{S}^2$ 共有两个本征值：0 和 2. $\boldsymbol{S}^2=0$ 的本征态为

$$\chi_{00}(1,2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)] \tag{3}$$

在体系的自旋态 χ 中测得 $\boldsymbol{S}^2=0$ 的概率为 $|\langle\chi_{00}|\chi\rangle|^2$. 根据 α、β 的正交归一性

$$\langle\alpha\mid\alpha\rangle=\langle\beta\mid\beta\rangle=1,\quad\langle\alpha\mid\beta\rangle=\langle\beta\mid\alpha\rangle=0$$

容易求出

$$\langle\chi_{00}|\chi\rangle=\frac{1}{2} \tag{4}$$

因此,测得 $\boldsymbol{S}^2=0$ 的概率为 $\frac{1}{4}$,从而测得 $\boldsymbol{S}^2=2$ 的概率为

$$\left(1-\frac{1}{4}\right)=\frac{3}{4}$$

$\boldsymbol{S}^2$ 的平均值为 $\frac{3}{2}$.

解二 同上,体系的自旋态为 $\chi(1,2)=\alpha(1)\phi(2)$,而

$$\boldsymbol{S}^2=(\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2)^2=\frac{3}{2}+2(s_{1x}s_{2x}+s_{1y}s_{2y}+s_{1z}s_{2z}) \tag{5}$$

如对 $\chi(1,2)$ 态计算 $\langle\boldsymbol{S}^2\rangle$,由于 χ 中关于粒子 1、2 的变量是分离的,计算极易完成. 例如

$$\langle\chi\mid s_{1x}s_{2x}\mid\chi\rangle=\langle\alpha(1)\mid s_{1x}\mid\alpha(1)\rangle\langle\phi(2)\mid s_{2x}\mid\phi(2)\rangle$$

$$=0\times\frac{1}{2}=0$$

类似地,可得

$$\langle\chi\mid s_{1y}s_{2y}\mid\chi\rangle=0,\quad\langle\chi\mid s_{1z}s_{2z}\mid\chi\rangle=0$$

因此

$$\langle\boldsymbol{S}^2\rangle=\frac{3}{2} \tag{6}$$

设 $\boldsymbol{S}^2=0$ 的概率为 $\omega(0)$,则 $\boldsymbol{S}^2=2$ 的概率为 $\omega(2)=1-\omega(0)$,

$$\langle\boldsymbol{S}^2\rangle=0\times w(0)+2\times w(2)=2-2w(0)=3/2$$

容易求出

$$w(0)=1/4,\quad w(2)=3/4 \tag{7}$$

6.45 由两个自旋 1/2 粒子组成的体系,置于均匀磁场中,如以磁场方向作为 z 轴方向,与自旋有关的体系 Hamilton 量为

$$H=a\sigma_{1z}+b\sigma_{2z}+c_0\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{1}$$

其中 a、b 项来自磁场与粒子内禀磁矩的作用,c_0 项来自两粒子的相互作用. a、b、c_0 均为实常数. (对于全同粒子,$a=b$,非全同粒子,一般 $a\neq b$.)试求体系的能级.

解 我们将在自旋态矢量空间中,用矩阵方法求解. 基矢可以取为 $(\sigma_{1z},\sigma_{2z})$ 的共同本征态

$$\alpha(1)\alpha(2),\quad\alpha(1)\beta(2),\quad\beta(1)\alpha(2),\quad\beta(1)\beta(2)$$

也可以取为总自旋算符$(\boldsymbol{S}^2, S_z)$的共同本征态χ_{SM_S}. 对于本题,从$\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2$ 的对角化考虑,采用χ_{SM_S}作为基矢较为方便. 为叙述方便,基矢的编号顺序如下:

$$\left.\begin{aligned}
\chi_1 &= \chi_{11} = \alpha(1)\alpha(2) \\
\chi_2 &= \chi_{1-1} = \beta(1)\beta(2) \\
\chi_3 &= \chi_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)] \\
\chi_4 &= \chi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)]
\end{aligned}\right\} \tag{2}$$

将 Hamilton 算符改写成

$$H = c_0\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 + c_1(\sigma_{1z} + \sigma_{2z}) + c_2(\sigma_{1z} - \sigma_{2z}) \tag{1'}$$

$$c_1 = \frac{1}{2}(a+b), \quad c_2 = \frac{1}{2}(a-b) \tag{3}$$

四个基矢都是$(\boldsymbol{S}^2, S_z)$的共同本征态,即都是$\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2$ 和$(\sigma_{1z}+\sigma_{2z})$的共同本征态. 容易看出$\chi_1$和$\chi_2$也是$(\sigma_{1z}-\sigma_{2z})$的本征态,因而$\chi_1$和$\chi_2$已经是 H 的本征态.

$$H\chi_1 = (c_0 + 2c_1)\chi_1 = (c_0 + a + b)\chi_1 \tag{4}$$

$$H\chi_2 = (c_0 - 2c_1)\chi_2 = (c_0 - a - b)\chi_2 \tag{5}$$

这样,我们就得到了体系的两个能级:$E = c_0 \pm 2c_1$.

容易算出$(\sigma_{1z}-\sigma_{2z})$对基矢的作用结果,为

$$(\sigma_{1z} - \sigma_{2z})\chi_1 = 0, \quad (\sigma_{1z} - \sigma_{2z})\chi_2 = 0 \tag{6}$$

$$(\sigma_{1z} - \sigma_{2z})\chi_3 = 2\chi_4, \quad (\sigma_{1z} - \sigma_{2z})\chi_4 = 2\chi_3 \tag{7}$$

因此,在$\{\chi_3, \chi_4\}$子空间中,$(\sigma_{1z}-\sigma_{2z})$的矩阵元为

$$\left.\begin{aligned}
(\sigma_{1z} - \sigma_{2z})_{33} &= (\sigma_{1z} - \sigma_{2z})_{44} = 0 \\
(\sigma_{1z} - \sigma_{2z})_{34} &= (\sigma_{1z} - \sigma_{2z})_{43} = 2
\end{aligned}\right\} \tag{7'}$$

$(\sigma_{1z}+\sigma_{2z})$的矩阵元全部为 0. H 的矩阵表示为

$$H = \begin{bmatrix} c_0 & 2c_2 \\ 2c_2 & -3c_0 \end{bmatrix} \tag{8}$$

设能量本征态为

$$\chi = f_3\chi_3 + f_4\chi_4 \tag{9}$$

代入能量本征方程

$$H\chi = E\chi \tag{10}$$

得到

$$\begin{bmatrix} c_0 - E & 2c_2 \\ 2c_2 & -3c_0 - E \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \end{bmatrix} = 0 \tag{10'}$$

能级 E 由下式决定:

$$\det(H - E) = 0 \tag{11}$$

即

$$\begin{vmatrix} c_0 - E & 2c_2 \\ 2c_2 & -3c_0 - E \end{vmatrix} = (E - c_0)(E + 3c_0) - 4c_2^2 = 0 \tag{11'}$$

解得

$$E = -c_0 \pm 2\sqrt{c_0^2 + c_2^2}$$

结论:本题共有四个能级(不考虑偶然简并),它们是

$$E = c_0 \pm 2c_1, \quad -c_0 \pm 2\sqrt{c_0^2 + c_2^2} \tag{12}$$

前两个能级的能量本征态分别为χ_1和χ_2,后两个能级的能量本征态为χ_3和χ_4的线性叠加.

6.46 对于二电子体系的总自旋单态χ_{00},证明平均值公式

$$\boxed{\langle (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{a})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \boldsymbol{b}) \rangle = -\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b}} \tag{1}$$

其中 $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$ 为常矢量或与自旋自由度无关的矢量算符.

证 自旋单态χ_{00}是总自旋

$$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{s}_1 + \boldsymbol{s}_2 = \frac{\hbar}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2)$$

及 s^2 的本征态,

$$\boldsymbol{S}^2 \, |\chi_{00}\rangle = 0, \quad \boldsymbol{S} \, |\chi_{00}\rangle = 0 \tag{2}$$

因此有

$$(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2) \, |\chi_{00}\rangle = 0, \quad \boldsymbol{\sigma}_1 \, |\chi_{00}\rangle = -\boldsymbol{\sigma}_2 \, |\chi_{00}\rangle \tag{3}$$

以及

$$\langle \boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2 \rangle = 0, \quad \langle \boldsymbol{\sigma}_1 \rangle = -\langle \boldsymbol{\sigma}_2 \rangle \tag{4}$$

此外,对于粒子 1、2 的交换,χ_{00}是反对称的,因此$\langle \boldsymbol{\sigma}_1 \rangle = \langle \boldsymbol{\sigma}_2 \rangle$. 再联合式(4),可得

$$\langle \boldsymbol{\sigma}_1 \rangle = \langle \boldsymbol{\sigma}_2 \rangle = 0 \tag{5}$$

另外，由(3)式，可知

$$(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{a})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \boldsymbol{b})\,|\chi_{00}\rangle = -(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{a})(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{b})\,|\chi_{00}\rangle \tag{6}$$

再用公式(见题 6.19)

$$(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{a})(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{b}) = \boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} + \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \cdot (\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}) \tag{7}$$

并计及式(5)，则由式(6)即可得到式(1). 证明完毕.

6.47　两个自旋 1/2 的定域非全同粒子(不考虑轨道运动)，相互作用能为(取 $\hbar=1$)

$$H = A\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2 \tag{1}$$

$t=0$ 时，粒子 1 自旋“向上”($s_{1x}=1/2$)，粒子 2 自旋“向下”$\left(s_{2z}=-\frac{1}{2}\right)$. 求任意 $t>0$ 时刻(a)粒子 1 自旋“向上”的概率；(b)粒子 1 和 2 自旋均“向上”的概率；(c)总自旋量子数 S=1 和 0 的概率；(d)$\boldsymbol{s}_1$ 和 $\boldsymbol{s}_2$ 的平均值.

解　从求体系的自旋波函数入手. 由于

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

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

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

$t=0$ 时，体系的自旋态为

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

因此，$t>0$ 时波函数为

$$\chi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\,\chi_{10}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_1 t} + \frac{1}{\sqrt{2}}\,\chi_{00}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_0 t} \tag{4}$$

即

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

(a) 由式(4′)可知，在时刻 t，粒子 1 自旋“向上”[同时粒子 2 自旋“向下”，相当

于 $\alpha(1)\beta(2)$项]的概率为 $\cos^2\left(\frac{At}{2}\right)$.

(b) 粒子 1 和 2 自旋均"向上"[相应于 $\alpha(1)\alpha(2)$,式$(4')$中没有这种项]的概率为 0. 这是容易理解的,因为总自旋 $\boldsymbol{S}_z$ 为守恒量,而体系初态 $S_z=0$,所以任何时刻 S_z 必为 0,不可能出现两个粒子自旋均"向上"$(S_z=1)$的情形.

(c) 由式(4)可知,总自旋量子数 $\boldsymbol{S}$ 取 1 和 0 的概率相等,各为 1/2. 由于 $\boldsymbol{S}^2$ 守恒,这个概率不随时间改变.

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

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

6.48 考虑由三个自旋 1/2 的非全同粒子组成的体系,Hamilton 量为

$$H=A\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2+B(\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2)\cdot\boldsymbol{s}_3\tag{1}$$

A、B 为实常数. 试找出体系的守恒量,确定体系的能级和简并度,(取 $\hbar=1$)

解 粒子 1、2 自旋之和记为 $\boldsymbol{S}_{12}$,总自旋记为 $\boldsymbol{S}_{123}$,即

$$\boldsymbol{S}_{12}=\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2,\quad \boldsymbol{S}_{123}=\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2+\boldsymbol{s}_3=\boldsymbol{S}_{12}+\boldsymbol{s}_3\tag{2}$$

显然,$\boldsymbol{S}_{12}$和 $\boldsymbol{S}_{123}$都具有角动量的性质,满足对易式

$$\boldsymbol{S}_{12}\times\boldsymbol{S}_{12}=\mathrm{i}\boldsymbol{S}_{12},\qquad[\boldsymbol{S}_{12}^2,\boldsymbol{S}_{12}]=0\tag{3}$$

$$\boldsymbol{S}_{123}\times\boldsymbol{S}_{123}=\mathrm{i}\boldsymbol{S}_{123},\quad[\boldsymbol{S}_{123}^2,\boldsymbol{S}_{123}]=0\tag{4}$$

$\boldsymbol{s}_1$、$\boldsymbol{s}_2$、$\boldsymbol{s}_3$ 互相对易,而且

$$\boldsymbol{s}_1^2=\boldsymbol{s}_2^2=\boldsymbol{s}_3^2=\frac{3}{4}\tag{5}$$

因此

$$\boldsymbol{S}_{12}^2=\boldsymbol{s}_1^2+\boldsymbol{s}_2^2+2\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2=\frac{3}{2}+2\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2\tag{6}$$

$$\boldsymbol{S}_{123}^2=\frac{9}{4}+2(\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2+\boldsymbol{s}_2\cdot\boldsymbol{s}_3+\boldsymbol{s}_3\cdot\boldsymbol{s}_1)\tag{7}$$

据此,H 可以写成

$$\begin{aligned}H&=(A-B)\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2+B(\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2+\boldsymbol{s}_2\cdot\boldsymbol{s}_3+\boldsymbol{s}_3\cdot\boldsymbol{s}_1)\\&=\frac{1}{2}(A-B)\boldsymbol{S}_{12}^2+\frac{B}{2}\boldsymbol{S}_{123}^2-\frac{3}{8}(2A+B)\end{aligned}\tag{1'}$$

由于 $\boldsymbol{S}_{12}^2$ 和 $\boldsymbol{S}_{12}$ 对易，和 $\boldsymbol{s}_3$ 对易，所以 $\boldsymbol{S}_{12}^2$ 和 $\boldsymbol{S}_{123}$ 对易. 因此，由式(1′)显而易见，$\boldsymbol{S}_{12}^2$、$\boldsymbol{S}_{123}$，$\boldsymbol{S}_{123}^2$ 都是守恒量. 作为守恒量完全集，可取($\boldsymbol{S}_{12}^2$，$\boldsymbol{S}_{123}^2$，$(S_{123})_z$)，前二者的本征值为

$$\boldsymbol{S}_{12}^2 = S'(S'+1), \quad S' = 0,1 \tag{8}$$

$$\boldsymbol{S}_{123}^2 = S(S+1), \quad S = \frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{3}{2} \tag{9}$$

代入式(1′)，就得到能级值，可以记为 $E_{SS'}$. 由于体系能量与 $(S_{123})_z$，即总自旋 z 分量的本征值[$S, S-1, \cdots, (-S)$]无关，故能级 $E_{SS'}$ 的简并度为(2S+1). 量子数 S'、S 的可能组合以及能级和简并度如下：

S'	1		0
S	3/2	1/2	1/2
$E_{SS'}$	$\frac{A}{4}+\frac{B}{2}$	$\frac{A}{4}-B$	$-\frac{3}{4}A$
简并度(2S+1)	4	2	2

如不出现偶然简并，体系将有三条能级. 其中 $S'=0$ 相当于

$$\boldsymbol{S}_{12} \to 0, \quad \boldsymbol{s}_1 \sim\!\!- \boldsymbol{s}_2$$

所以

$$\boldsymbol{H} \to \boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2 \sim\!\!- A\boldsymbol{s}_1^2 = -\frac{3}{4}A$$

$S=3/2$ 相当于 $\boldsymbol{s}_1$、$\boldsymbol{s}_2$、$\boldsymbol{s}_3$ 互相“平行”，这时

$$\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2 = \boldsymbol{s}_2 \cdot \boldsymbol{s}_3 = \boldsymbol{s}_3 \cdot \boldsymbol{s}_1 = \frac{1}{4} \quad (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 = \cdots = 1)$$

所以

$$\boldsymbol{H} \to (\boldsymbol{A}+2\boldsymbol{B})\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2 \to \frac{1}{4}(A+2B)$$

6.49　考虑由三个自旋 1/2 的可分辨粒子组成的体系，Hamilton 量为

$$H = A(\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2 + \boldsymbol{s}_2 \cdot \boldsymbol{s}_3 + \boldsymbol{s}_3 \cdot \boldsymbol{s}_1) \quad (A \text{ 为实数}) \tag{1}$$

(a) 求体系的能级和简并度；

(b) 找一个守恒量完全集，求出其共同本征函数，从而得到一组正交完备的能量本征函数.

解　采用上题的算符及量子数记号，H 可以写成

$$H = \frac{A}{2}\left(\boldsymbol{S}_{123}^2 - 3\times\frac{3}{4}\right) \tag{1′}$$

因此,能级为(取 $\hbar=1$)

$$E_S=\frac{A}{2}\left[S(S+1)-\frac{9}{4}\right] \tag{2}$$

守恒量完全集可以取$[\boldsymbol{S}_{123}^2,(S_{123})_z,\boldsymbol{S}_{12}^2]$,本征值为

$$\left.\begin{aligned}&\boldsymbol{S}_{12}^2=S'(S'+1),\quad S'=1,0\\&\boldsymbol{S}_{123}^2=S(S+1),\quad S=\frac{3}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\\&(S_{123})_z=M=S,S-1,\cdots,(-S)\end{aligned}\right\} \tag{3}$$

量子数 S'、S 的可能组合为 $S=S'\pm\frac{1}{2}>0$,即

$$\left.\begin{aligned}&S=3/2,\quad S'=1\\&S=1/2,\quad S'=1,0\end{aligned}\right\} \tag{4}$$

对每组(S,S'),能级简并度为$(2S+1)$,所以

$$E_{3/2}=\frac{3}{4}A,\quad S=\frac{3}{2},\quad S'=1,\quad \text{简并度}=4$$

$$E_{1/2}=-\frac{3}{4}A,\quad S=\frac{1}{2},\quad S'=1,0,\quad \text{简并度}=4 \tag{5}$$

下面设法确定$[\boldsymbol{S}_{123}^2,(S_{123})_z,\boldsymbol{S}_{12}^2]$的共同本征态. 第 k 个粒子$(k=1,2,3)$的自旋"向上"和"向下"态记为 $\alpha(k)$、$\beta(k)$,相应于 $s_{kz}=\frac{1}{2}$、$-\frac{1}{2}$. 如所周知,$\boldsymbol{S}_{12}^2$和$(S_{12})_z$的共同本征态为

$$\chi_{11}(1,2)=\alpha(1)\alpha(2),\quad S'=1,\quad (S_{12})_z=1$$

$$\chi_{10}(1,2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)+\beta(1)\alpha(2)],\quad S'=1,\quad (S_{12})_z=0$$

$$\chi_{1,-1}(1,2)=\beta(1)\beta(2),\quad S'=1,\quad (S_{12})_z=-1$$

$$\chi_{00}(1,2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)],\quad S'=0,\quad (S_{12})_z=0$$

$\boldsymbol{S}_{12}^2$、$\boldsymbol{S}_{123}^2$、$(S_{123})_z$ 的共同本征态记为$\chi_{S'SM}(1,2,3)$. 三个量子数均取最大值时,本征态显然是

$$\chi_{1\frac{3}{2}\frac{3}{2}}=\chi_{11}(1,2)\alpha(3)=\alpha(1)\alpha(2)\alpha(3) \tag{6a}$$

$S=3/2$ 时,M 共有 4 种取值,与 $M=\frac{1}{2},-\frac{1}{2},-\frac{3}{2}$相应的本征态可以用阶梯算符$[(S_{123})_x-\mathrm{i}(S_{123})_y]$重复作用于$\chi_{1\frac{3}{2}\frac{3}{2}}$而求出. 由于阶梯算符以及$\chi_{1\frac{3}{2}\frac{3}{2}}$对于粒子间

的交换是对称的，因此，由此而得到的各$\chi_{1\,\frac{3}{2}M}$都是对称函数. 根据这个判断，再考虑到 M 的取值，立即可以写出这几个函数的唯一可能的结构式：

$$\chi_{1\,\frac{3}{2}\,\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{3}}[\alpha(1)\alpha(2)\beta(3)+\beta(1)\alpha(2)\alpha(3)+\alpha(1)\beta(2)\alpha(3)] \tag{6b}$$

$$\chi_{1\,\frac{3}{2},-\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{3}}[\alpha(1)\beta(2)\beta(3)+\beta(1)\alpha(2)\beta(3)+\beta(1)\beta(2)\alpha(3)] \tag{6c}$$

$$\chi_{1\,\frac{3}{2},-\frac{3}{2}}=\beta(1)\beta(2)\beta(3) \tag{6d}$$

$S'=0$ 时体系波函数中关于粒子 1、2 的部分只能是χ_{00}，再考虑到 M 的取值，立即可以断定

$$\chi_{0\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}}=\chi_{00}(1,2)\alpha(3)$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)\alpha(3)-\beta(1)\alpha(2)\alpha(3)] \tag{7a}$$

$$\chi_{0\,\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}=\chi_{00}(1,2)\beta(3)$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)\beta(3)-\beta(1)\alpha(2)\beta(3)] \tag{7b}$$

现在只剩$\chi_{1\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}}$和$\chi_{1\,\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}$有待确定. $\chi_{1\frac{1}{2}\frac{1}{2}}$的构造式中，每一项应包含两个 α 态，一个 β 态，它应该是$\chi_{11}(1,2)\beta(3)$和$\chi_{10}(1,2)\alpha(3)$的线性叠加，它和$\chi_{1\,\frac{3}{2}\,\frac{1}{2}}$的 S 值不同，所以应该互相正交. $\chi_{1\,\frac{3}{2}\,\frac{1}{2}}$即式(6b)，可以表示成

$$\chi_{1\,\frac{3}{2}\,\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{3}}[\chi_{11}(1,2)\beta(3)+\sqrt{2}\,\chi_{10}(1,2)\alpha(3)] \tag{6b'}$$

因此，$\chi_{1\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}}$的构造式只能是

$$\chi_{1\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{3}}[\sqrt{2}\,\chi_{11}(1,2)\beta(3)-\chi_{10}(1,2)\alpha(3)]$$

$$=\frac{1}{\sqrt{6}}[2\alpha(1)\alpha(2)\beta(3)-\alpha(1)\beta(2)\alpha(3)-\beta(1)\alpha(2)\beta(3)] \tag{8a}$$

类似地，式(6c)可以表示成

$$\chi_{1\,\frac{3}{2},-\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{3}}[\sqrt{2}\,\chi_{10}(1,2)\beta(3)+\chi_{1-1}(1,2)\alpha(3)] \tag{6c'}$$

$\chi_{1\,\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}$应该用同样的项叠加而成，但和上式正交，所以

$$\chi_{1\,\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{3}}[\chi_{10}(1,2)\beta(3)-\sqrt{2}\,\chi_{1,-1}(1,2)\alpha(3)]$$

$$= \frac{1}{\sqrt{6}}[\alpha(1)\beta(2)\beta(3) + \beta(1)\alpha(2)\beta(3) - 2\beta(1)\beta(2)\alpha(3)] \tag{8b}$$

以上式(6)、(7)、(8)就是 $\boldsymbol{S}_{12}^2$、$\boldsymbol{S}_{123}^2$、$(S_{123})_z$ 的全部共同本征函数. 容易验证它们的确互相正交. 由于每个粒子有 2 种自旋态 α 和 β,三粒子的体系共有 8 个独立状态,因此式(6)至(8)正是所求的一组正交完备的能量本征态.

读者不难自行验证,按照角动量耦合的理论,利用 C. G. 系数表,也可得到同样的结果.

6.50 设 $\boldsymbol{J}$ 为角动量算符,$\boldsymbol{n}$ 和 $\boldsymbol{J}$ 对易,证明

$$\boxed{[\boldsymbol{J}, \boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}] = \mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J}} \quad (\text{取 } \hbar = 1) \tag{1}$$

证一 设 $\boldsymbol{n}=(n_x, n_y, n_z)$,则

$$\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n} = \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J} = n_xJ_x + n_yJ_y + n_zJ_z \tag{2}$$

利用角动量的基本对易式

$$\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J} = \mathrm{i}\boldsymbol{J} \tag{3}$$

即得

$$[J_x, \boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}] = n_y[J_x, J_y] + n_z[J_x, J_z]$$
$$= \mathrm{i}(n_yJ_z - n_zJ_y) = \mathrm{i}(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J})_x$$

此即式(1)的 x 分量. 同理可证 y 分量和 z 分量公式.

证二 利用矢量算符三重矢积公式

$$\boldsymbol{A}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C}) = \overbrace{\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{B}\boldsymbol{C})} - (\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})\boldsymbol{C}$$
$$= \boldsymbol{B}(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{C}) - (\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})\boldsymbol{C} \quad (\text{条件:}\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}\text{ 对易})$$

即得

$$[\boldsymbol{J}, \boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}] = \boldsymbol{J}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}) - (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J})\boldsymbol{J} = \boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J})$$

再利用基本对易式 $\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J}=\mathrm{i}\boldsymbol{J}$,即得式(1).

6.51 设 $\boldsymbol{J}$ 为角动量,$\boldsymbol{n}$、$\boldsymbol{m}$ 为任意两个方向的单位矢量,计算$[J_m, J_n]$. 其中 $J_m=\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{J}$, $J_n=\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}$

解一 利用上题结果,即得(取 $\hbar=1$)

$$[J_m, J_n] = \boldsymbol{m}\cdot[\boldsymbol{J}, \boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}] = \mathrm{i}\boldsymbol{m}\cdot(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J}) = \mathrm{i}(\boldsymbol{m}\times\boldsymbol{n})\cdot\boldsymbol{J} \tag{1}$$

解二 设 $\boldsymbol{n}=(n_x, n_y, n_z)$, $\boldsymbol{m}=(m_x, m_y, m_z)$,则

$$J_m = m_xJ_x + m_yJ_y + m_zJ_z$$

$$J_n = n_x J_x + n_y J_y + n_z J_z$$

因此

$$\begin{aligned}[J_m, J_n] &= m_x n_y [J_x, J_y] + m_y n_x [J_y, J_x] + \cdots \\ &= (m_x n_y - m_y n_x) \mathrm{i} J_z + \cdots \\ &= \mathrm{i}(\boldsymbol{m} \times \boldsymbol{n}) \cdot \boldsymbol{J} \end{aligned} \tag{1}$$

讨论：如 $\boldsymbol{n} \perp \boldsymbol{m}$，令 $\boldsymbol{k} = \boldsymbol{m} \times \boldsymbol{n}$，则 $\boldsymbol{k}$ 也是单位矢量，而且 $\boldsymbol{k}$、$\boldsymbol{m}$、$\boldsymbol{n}$ 互相垂直，三者具有对称的关系：

$$\boldsymbol{k} = \boldsymbol{m} \times \boldsymbol{n}, \quad \boldsymbol{m} = \boldsymbol{n} \times \boldsymbol{k}, \quad \boldsymbol{n} = \boldsymbol{k} \times \boldsymbol{m} \tag{2}$$

这时 $\boldsymbol{J}$ 在 $\boldsymbol{k}$、$\boldsymbol{m}$、$\boldsymbol{n}$ 三个方向的投影有下列关系：

$$[J_k, J_m] = \mathrm{i} J_n, \quad [J_m, J_n] = \mathrm{i} J_k, \quad [J_n, J_k] = \mathrm{i} J_m \tag{3}$$

这是基本对易式 $[J_x, J_y] = \mathrm{i} J_z$ 等的推广.

6.52　设 $\boldsymbol{J}$ 为角动量算符，$J_\pm = J_x \pm \mathrm{i} J_y$，取 $\hbar = 1$

(a) 证明

$$J_z^n J_\pm = J_\pm (J_z \pm 1)^n, \quad n = 0, 1, 2, \cdots \tag{1}$$

(b) 证明

$$\boxed{\begin{aligned} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda J_z} J_x \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_z} &= J_x \cos\lambda - J_y \sin\lambda \\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda J_z} J_y \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_z} &= J_x \sin\lambda + J_y \cos\lambda \end{aligned}} \tag{2}$$

证　(a) 利用基本对易式 $\boldsymbol{J} \times \boldsymbol{J} = \mathrm{i}\boldsymbol{J}$，易得

$$[J_z, J_\pm] = \pm J_\pm \tag{3}$$

亦即

$$J_z J_\pm = J_\pm (J_z \pm 1) \tag{3'}$$

反复应用此式，即得

$$J_z^n J_\pm = J_\pm (J_z \pm 1)^n, \quad n = 0, 1, 2, \cdots \tag{4}$$

因此，对于任何可以表示成 J_z 正幂级数的函数(算符) $f(J_z)$，有

$$\boxed{f(J_z) J_\pm = J_\pm f(J_z \pm 1)} \tag{5}$$

例如

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda J_z} J_\pm = J_\pm \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda J_z} \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}\lambda} \quad (\lambda \text{ 为常数}) \tag{6}$$

(b) 以 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_z}$ 右乘式(6)，得到

$$\boxed{\begin{aligned} e^{i\lambda J_z} J_+ e^{-i\lambda J_z} &= J_+ e^{i\lambda} \\ e^{i\lambda J_z} J_- e^{-i\lambda J_z} &= J_- e^{-i\lambda} \end{aligned}} \tag{7}$$

二式相加、减,利用

$$J_x = \frac{1}{2}(J_+ + J_-), \quad J_y = \frac{1}{2i}(J_+ - J_-) \tag{8}$$

即得式(2).

证明式(7)也可用参数微分法,即视 λ 为参变数,令

$$f(\lambda) = e^{i\lambda J_z} J_+ e^{-i\lambda J_z}$$

注意 $f(0)=J_+$. 上式对 λ 求导,得到

$$\frac{d}{d\lambda} f(\lambda) = i e^{i\lambda J_z} [J_z, J_+] e^{-i\lambda J_z} = i f(\lambda)$$

其解为

$$f(\lambda) = f(0) e^{i\lambda} = J_+ e^{i\lambda}$$

此即式(7)中第一式. 上式取共轭,并将 λ^* 再换成 λ,即得式(7)第二式.

式(2)中 x、y、z 轮换,还可以得到以下各式:

$$\begin{aligned} e^{i\lambda J_x} J_y e^{-i\lambda J_x} &= J_y \cos\lambda - J_z \sin\lambda \\ e^{i\lambda J_x} J_z e^{-i\lambda J_x} &= J_y \sin\lambda + J_z \cos\lambda \end{aligned} \tag{9}$$

$$\begin{aligned} e^{i\lambda J_y} J_z e^{-i\lambda J_y} &= J_z \cos\lambda - J_x \sin\lambda \\ e^{i\lambda J_y} J_x e^{-i\lambda J_y} &= J_z \sin\lambda + J_x \cos\lambda \end{aligned} \tag{10}$$

式(2)、(9)、(10)在有关转动变换的问题中经常用到.

6.53 设 $\boldsymbol{J}$ 为角动量算符,$\boldsymbol{n}$ 为任意给定方向的单位矢量,λ 为实数. 令 $J_n = \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}$,并取 $\hbar=1$,证明

$$\boxed{e^{i\lambda J_n} \boldsymbol{J} e^{-i\lambda J_n} = \boldsymbol{n} J_n + (\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J})\times\boldsymbol{n}\cos\lambda + \boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J}\sin\lambda} \tag{1}$$

证 视 λ 为参变量,但 $\boldsymbol{n}$ 固定不变,令

$$\boldsymbol{f}(\lambda) = e^{i\lambda J_n} \boldsymbol{J} e^{-i\lambda J_n} \tag{2}$$

注意

$$\boldsymbol{f}(0) = \boldsymbol{J}, \quad \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{f}(\lambda) = J_n \tag{3}$$

式(2)对 λ 求导,并利用公式(见题 6.50)

$$[\boldsymbol{J}, J_n] = i\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J} \tag{4}$$

得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\boldsymbol{f}(\lambda) = -\mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda J_n}[\boldsymbol{J}, J_n]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_n} = \boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(\lambda) \tag{5}$$

再以 $\boldsymbol{n}\times$式(5),得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}[\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(\lambda)] = \boldsymbol{n}\times[\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(\lambda)] = \boldsymbol{n}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{f}) - \boldsymbol{f} = \boldsymbol{n}J_n - \boldsymbol{f}(\lambda) \tag{6}$$

式(5)$\pm$i×式(6),得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}[\boldsymbol{f}(\lambda) \pm \mathrm{i}\boldsymbol{n}\times f(\lambda)] = \mp\mathrm{i}[\boldsymbol{f}(\lambda) \pm \mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(\lambda) - \boldsymbol{n}J_n]$$

由于 $\boldsymbol{n}J_n$ 与 λ 无关,上式即

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}[\boldsymbol{f}(\lambda) + \mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(\lambda) - \boldsymbol{n}J_n] = -\mathrm{i}[\boldsymbol{f}(\lambda) + \mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(\boldsymbol{\lambda}) - \boldsymbol{n}J_n] \tag{7}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}[\boldsymbol{f}(\lambda) - \mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(\lambda) - \boldsymbol{n}J_n] = \mathrm{i}[\boldsymbol{f}(\lambda) - \mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(\boldsymbol{\lambda}) - \boldsymbol{n}J_n] \tag{7'}$$

注意,$\boldsymbol{f}(\lambda)$为厄米算符,所以式(7′)为式(7)的共轭方程,它们的解显然是

$$\begin{aligned}\boldsymbol{f}(\lambda) + \mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(\lambda) - \boldsymbol{n}J_n &= [\boldsymbol{f}(0) + \mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(0) - \boldsymbol{n}J_n]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda} \\ &= [\boldsymbol{J} + \mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J} - \boldsymbol{n}J_n]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda} \\ &= [(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J})\times\boldsymbol{n} + \mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J}]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda} \qquad (8)\end{aligned}$$

$$\boldsymbol{f}(\lambda) - \mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(\lambda) - \boldsymbol{n}J_n = [(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J})\times\boldsymbol{n} - \mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J}]\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda} \tag{8'}$$

式(8′)是式(8)的共轭方程,二式相加,即得

$$\boldsymbol{f}(\lambda) = \boldsymbol{n}J_n + (\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J})\times\boldsymbol{n}\cos\lambda + \boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J}\sin\lambda \tag{9}$$

此即式(1),其中

$$(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J})\times\boldsymbol{n} = \boldsymbol{J} - \boldsymbol{n}J_n \tag{10}$$

故式(9)也可以写成

$$\boldsymbol{f}(\lambda) = \boldsymbol{n}J_n(1-\cos\lambda) + \boldsymbol{J}\cos\lambda + \boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J}\sin\lambda \tag{9'}$$

如 $\boldsymbol{J}$ 是自旋 1/2 粒子的自旋角动量,即

$$\boldsymbol{J} \to \boldsymbol{s} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$$

式(1)就变成题 6.26 式(1).

如 $\boldsymbol{n}$ 为正 z 轴,即 $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{e}_z$,则

$$J_n = J_z, \quad \boldsymbol{n}J_n = \boldsymbol{e}_z J_z, \quad \boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J} = \boldsymbol{e}_y J_x - \boldsymbol{e}_x J_y$$

代入式(9′),就得到上题式(2).

6.54 以 $\boldsymbol{n}$ 表示(θ_0,φ_0)方向的单位矢量,即

$$\boldsymbol{n}=(\sin\theta_0\cos\varphi_0,\sin\theta_0\sin\varphi_0,\cos\theta_0) \tag{1}$$

轨道角动量算符 $\boldsymbol{l}$ 在 $\boldsymbol{n}$ 方向的投影为

$$l_n=\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{l}=l_x\sin\theta_0\cos\varphi_0+l_y\sin\theta_0\sin\varphi_0+l_z\cos\theta_0 \tag{2}$$

证明 $\psi=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi_0 l_z}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta_0 l_y}\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$是 l_n 的本征态,本征值为 m.(取 $\hbar=1$)

证一 算符 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta_0 l_y}$相当于将体系绕 y 轴转 θ_0 角,算符 $e^{-\mathrm{i}\varphi_0 l_z}$相当于将体系绕 z 轴转 φ_0 角,Y_{lm}原为 l_z 的本征态,本征值为 m. 经过两次转动,固定于体系的坐标系(即随体系一起转动的坐标系)的 z'轴(开始时和实验室 z 轴重合)已转到实验室坐标系的(θ_0,φ_0)方向,即 $\boldsymbol{n}$ 方向,Y_{lm}变成了 ψ,即变成了 l_n 的本征态. 本征值是状态的物理属性,不受坐标变换的影响,故仍为 m.

证二 $\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$是 l_z 的本征态,满足本征方程

$$l_z\mathrm{Y}_{lm}=m\mathrm{Y}_{lm} \tag{3}$$

利用题 6.52 式(10)(取 $\lambda=-\theta_\theta$),可得公式

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta_0 l_y}l_z=(l_z\cos\theta_0+l_x\sin\theta_0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta_0 l_y}$$

再利用题 6.52 式(2),可得

$$\begin{aligned}&\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi_0 l_z}(l_z\cos\theta_0+l_x\sin\theta_0)\\=&[l_z\cos\theta_0+(l_x\cos\varphi_0+l_y\sin\varphi_0)\sin\theta_0]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi_0 l_z}\\=&l_n\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi_0 l_z}\end{aligned}$$

因此

$$\boxed{l_n\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi_0 l_z}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta_0 l_y}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi_0 l_z}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta_0 l_y}l_z} \tag{4}$$

将上式作用于 Y_{lm},并利用式(3),即得

$$l_n(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi_0 l_z}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta_0 l_y}\mathrm{Y}_{lm})=m\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi_0 l_z}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta_0 l_y}\mathrm{Y}_{lm} \tag{5}$$

可见 $\psi=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi_0 l_z}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta_0 l_y}\mathrm{Y}_{lm}$是 l_n 的本征函数,本征值为 m.

6.55 对于角动量算符$(\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{J}_z)$的共同本征态$|jm\rangle$,证明

(a) J_x 和 J_y 的任何奇幂次式的平均值为 0;

(b) 对于任何 m'值$(m'=j,j-1,\cdots,-j)$,J_x 或 J_y 取本征值$\pm m'$的概率相等(取 $\hbar=1$).

证 (a) 根据升降算符的定义和基本性质,

$$J_x=\frac{1}{2}(J_++J_-),\quad J_y=\frac{1}{2\mathrm{i}}(J_+-J_-) \tag{1}$$

$$J_{\pm}\mid jm\rangle \rightarrow \mid jm\pm 1\rangle \tag{2}$$

易知 J_x、J_y 的任何奇次式(如 J_x^3，$J_xJ_y^2$ 等等)均可表示成 J_+、J_- 的奇次式，而后者作用于$\mid jm\rangle$的结果，将得到各种$\mid jm'\rangle$，$m'-m=$奇数，因此 $m'\neq m$. 由此可见

$$\langle jm\mid (J_x,J_y\text{ 奇次式})\mid jm\rangle=\sum_{\substack{m'\\ m'\neq m}}C_{m'}\langle jm\mid jm'\rangle=0$$

证明完毕.

(b) 设在$\mid jm\rangle$态中测得 $J_x=m'$的概率为 $w(m')$，测得 $J_x=-m'$的概率为 $w(-m')$，下面证明 $w(m')=w(-m')$.

如 j 为正整数，作 J_x 的奇次式

$$f(J_x)=J_x(J_x^2-1^2)(J_x^2-2^2)\cdots(J_x^2-j^2)$$

其中不含因子$(J_x^2-m'^2)$，则

$$f(m')=-f(-m')\neq 0$$
$$f(m'')=0,\quad m''\neq\pm m'$$

根据(a)中的证明，在$\mid jm\rangle$态下 $f(J_x)$平均值应等于 0，因此

$$\langle f(J_x)\rangle=\sum_{m''}f(m'')w(m'')=f(m')[w(m')-w(-m')]=0$$

所以 $w(m')=w(-m')$.

如 j 为半奇数，作 J_x 的奇次式

$$f(J_x)=J_x\left[J_x^2-\left(\frac{1}{2}\right)^2\right]\left[J_x^2-\left(\frac{3}{2}\right)^2\right]\cdots[J_x^2-j^2]$$

其中不含因子$[J_x^2-m'^2]$. 仍可证明 $w(m')=w(-m')$.

对 J_y 取$\pm m'$的概率可以作出类似的证明.

最后，证明在$\mid jm\rangle$态下测得 $J_x=m'$的概率等于测得 $J_y=m'$的概率.

对于给定的 j，$J_x=m'$的本征态为(见上题，相当于 $\varphi_0=0,\theta_0=\pi/2$)

$$\mid J_x=m'\rangle=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{2}J_y}\mid jm'\rangle \tag{3}$$

因此，在$\mid jm\rangle$态下测得 $J_x=m'$的概率为

$$w(J_x=m')=\mid\langle jm\mid \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{2}J_y}\mid jm'\rangle\mid^2 \tag{4}$$

而 $J_y=m'$的本征态为(相当于上题中 $\theta_0=\varphi_0=\pi/2$)

$$\mid J_y=m'\rangle=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{2}J_z}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{2}J_y}\mid jm'\rangle \tag{5}$$

在$\mid jm\rangle$态下测得 $J_y=m'$的概率为

$$w(J_y=m')=\mid\langle jm\mid \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{2}J_z}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{2}J_y}\mid jm'\rangle\mid^2$$

$$= | \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\pi/2} \langle jm \, | \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{2}J_y} \, | \, jm' \rangle \, |^2 \tag{6}$$

由于$|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\pi/2}|=1$,所以$w(J_x=m')=w(J_y=m')$

讨论:对于任何垂直于z轴的方向$\boldsymbol{n}(\theta_0=\pi/2,\varphi_0$任意),$\boldsymbol{J}_n=\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}$取本征值$m'$的本征态为

$$| \, J_n = m' \rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi_0 J_z} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{2}J_y} \, | \, jm' \rangle \tag{7}$$

因此,在$|jm\rangle$态下测得$J_n=m'$的概率为

$$w(J_n = m') = | \, \langle jm \, | \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi_0 J_z} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{2}J_y} \, | \, jm' \rangle \, |^2$$

由于

$$\langle jm \, | \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi_0 J_z} = \langle jm \, | \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\varphi_0}$$

显然

$$w(J_n = m') = w(J_x = m') = w(J_y = m')$$
$$= | \, \langle jm \, | \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{2}J_y} \, | \, jm' \rangle \, |^2 \tag{8}$$

6.56 角动量为$j[\boldsymbol{J}^2=j(j+1)]$的体系,处于$J_z$取最大值($m=j$)的本征态$|jj\rangle$.设$z'$轴和$z$轴夹角为$\theta$,求在$|jj\rangle$态下测得$J_{z'}=j$的概率$P(\theta)$.先讨论$j=1/2$的情形,再推广到一般情形.

解 设z'轴是z轴绕y轴旋转θ角而成,则$J_{z'}=j$的本征态为

$$| \, j, J_{z'} = j \rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta J_y} \, | \, jj \rangle \tag{1}$$

因此,所求概率为

$$P(\theta) = | \, \langle jj \, | \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta J_y} \, | \, jj \rangle \, |^2 \tag{2}$$

对于自旋1/2体系,$j=1/2$,$\boldsymbol{J}=\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$,$\boldsymbol{\sigma}$为Pauli算符,

$$| \, jj \rangle = \left| \frac{1}{2} \, \frac{1}{2} \right\rangle = |+\rangle$$

$|+\rangle$表示$\sigma_z=1$的本征态.利用公式

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\sigma_y/2} = \cos\frac{\theta}{2} - \mathrm{i}\sigma_y \sin\frac{\theta}{2} \tag{3}$$

即得

$$P(\theta) = | \, \langle + | \left(\cos\frac{\theta}{2} - \mathrm{i}\sigma_y \sin\frac{\theta}{2} \right) |+\rangle \, |^2$$
$$= \cos^2\frac{\theta}{2} \tag{4}$$

计算中利用了$\langle + |\sigma_y| + \rangle = 0$.

对于一般的角动量 j，$|jj\rangle$态相当于 $2j$ 个自旋 1/2 粒子的体系处于全体粒子自旋“向上”的状态，即$|jj\rangle$可以等价地表示为

$$|jj\rangle = |+\rangle_1 |+\rangle_2 \cdots |+\rangle_{2j} \tag{5}$$

而

$$J_y = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{2j}(\boldsymbol{\sigma}_k)_y$$

各$(\boldsymbol{\sigma}_k)_y$ 彼此对易，因此，

$$e^{-i\theta J_y} = \prod_{k=1}^{2j}\left[\cos\frac{\theta}{2} - i(\boldsymbol{\sigma}_k)_y \sin\frac{\theta}{2}\right] \tag{6}$$

代入式(2)，即得

$$P(\theta) = \left|\langle jj \mid \prod_{k=1}^{2j}\left[\cos\frac{\theta}{2} - i(\boldsymbol{\sigma}_k)_y \sin\frac{\theta}{2}\right] \mid jj\rangle\right|^2$$

其中$(\boldsymbol{\sigma}_k)_y$ 作用于$|+\rangle_k$，变成 $i|-\rangle_k$，对 $P(\theta)$无贡献，因此

$$\boxed{P(\theta) = \left(\cos\frac{\theta}{2}\right)^{4j}} \tag{7}$$

6.57　设 $\boldsymbol{J}$ 为角动量. 在$(\boldsymbol{J}^2, J_z)$表象中定义矩阵

$$d^j_{m'm}(\lambda) \equiv \langle jm' \mid e^{-i\lambda J_y} \mid jm\rangle \quad (\lambda \text{ 为实数}) \tag{1}$$

$j=1$ 的情形，求 d 矩阵.

解　$j=1$ 时，J_y 的本征值为 1，0，−1，因此 J_y 满足代数方程

$$J_y^3 = J_y \tag{2}$$

而 $e^{-i\lambda J_y}$可以化成(参看题 6.10)

$$e^{-i\lambda J_y} = 1 - iJ_y \sin\lambda - (1-\cos\lambda)J_y^2 \tag{3}$$

利用升降算符 $J_\pm$对$|jm\rangle$的作用公式，容易求得 J_y 在$\langle \boldsymbol{J}^2, J_z\rangle$表象中的矩阵表示为

$$J_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0 & -i & 0\\ i & 0 & -i\\ 0 & i & 0\end{bmatrix}$$

$$= \frac{i}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0 & -1 & 0\\ 1 & 0 & -1\\ 0 & 1 & 0\end{bmatrix} \tag{4}$$

代入式(3),即得

$$d^1_{m'm}(\lambda)=\begin{bmatrix}\frac{1}{2}(1+\cos\lambda) & -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\lambda & \frac{1}{2}(1-\cos\lambda)\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\lambda & \cos\lambda & -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\lambda\\ \frac{1}{2}(1-\cos\lambda) & \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\lambda & \frac{1}{2}(1+\cos\lambda)\end{bmatrix} \tag{5}$$

6.58 同上题,对任意 j 值,求

$$d^j_{jm}(\lambda)=\langle jj\mid \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_y}\mid jm\rangle \tag{1}$$

解 根据角动量一般理论,

$$\left.\begin{aligned}J_+\mid jm\rangle&=(J_x+iJ_y)\mid jm\rangle=a_{jm}\mid jm+1\rangle\\ J_-\mid jm\rangle&=(J_x-iJ_y)\mid jm\rangle=a_{j,-m}\mid jm-1\rangle\end{aligned}\right\} \tag{2}$$

其中

$$a_{jm}=\sqrt{(j-m)(j+m+1)} \tag{3}$$

当 $m=j$ 时

$$J_+\mid jj\rangle=0,\quad \langle jj\mid J_-=0 \tag{4}$$

(第二式为第一式的共轭方程.)因此

$$\langle jj\mid J_-\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_y}\mid jm\rangle=0 \tag{5}$$

利用题 6.52 式(10),可得

$$\begin{aligned}J_-\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_y}&=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_y}(J_z\sin\lambda+J_x\cos\lambda-\mathrm{i}J_y)\\&=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_y}\left[J_z\sin\lambda+\frac{1}{2}(\cos\lambda-1)J_++\frac{1}{2}(\cos\lambda+1)J_-\right]\end{aligned} \tag{6}$$

代入式(5),并利用式(2),即得

$$\begin{aligned}&m\sin\lambda d^j_{jm}(\lambda)+\frac{1}{2}(\cos\lambda-1)a_{jm}d^j_{jm+1}(\lambda)\\&+\frac{1}{2}(\cos\lambda+1)a_{j,-m}d^j_{jm-1}(\lambda)=0\end{aligned} \tag{7}$$

另外,利用题 6.52 式(10),还可得到

$$J_z\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_y}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_y}(J_z\cos\lambda-J_x\sin\lambda)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_y}\left[J_z\cos\lambda-\frac{1}{2}\sin\lambda(J_++J_-)\right] \tag{8}$$

分别以〈jj|和|jm〉从左、右乘上式,即得

$$(j-m\cos\lambda)d^j_{jm}(\lambda)+\frac{1}{2}\sin\lambda\left[a_{jm}d^j_{jm+1}(\lambda)+a_{j,-m}d^j_{jm-1}(\lambda)\right]=0 \tag{9}$$

将式(7)和(9)合并，消去 $d^j_{jm-1}(\lambda)$，即得更简单的递推关系：

$$\sin\lambda\cdot a_{jm}d^j_{jm+1}(\lambda)=-(j-m)(1+\cos\lambda)d^j_{jm}(\lambda) \tag{10}$$

即

$$\boxed{d^j_{jm}(\lambda)=-\frac{\sin\frac{\lambda}{2}}{\cos\frac{\lambda}{2}}\left(\frac{j+m+1}{j-m}\right)^{\frac{1}{2}}d^j_{jm+1}(\lambda)} \tag{10'}$$

因此，只要求出 d^j_{jj}，即可递推出所有 d^j_{jm}. 下面先求 d^j_{jj}.

$$d^j_{jj}(\lambda)=\langle jj\mid e^{-i\lambda J_y}\mid jj\rangle \tag{11}$$

注意 $d^j_{jj}(0)=1$，上式对 λ 求导，得到

$$\frac{d}{d\lambda}d^j_{jj}(\lambda)=\langle jj\mid e^{-i\lambda J_y}(-iJ_y)\mid jj\rangle$$

$$=\frac{1}{2}\langle jj\mid e^{-i\lambda J_y}(J_--J_+)\mid jj\rangle$$

$$=\frac{1}{2}a_{j-j}d^j_{jj-1}(\lambda) \tag{12}$$

而式(7)取 $m=j$，注意到 $a_{jj}=0$，可得

$$\frac{1}{2}(\cos\lambda+1)a_{j,-j}d^j_{jj-1}(\lambda)=-j\sin\lambda\cdot d^j_{jj}(\lambda) \tag{13}$$

代入式(12)，即得

$$\frac{d}{d\lambda}d^j_{jj}(\lambda)=-j\frac{\sin\lambda}{1+\cos\lambda}d^j_{jj}(\lambda) \tag{14}$$

积分，并利用 $d^j_{jj}(0)=1$，得到

$$\boxed{d^j_{jj}(\lambda)=\left(\cos\frac{\lambda}{2}\right)^{2j}} \tag{15}$$

这个公式也可以利用题 6.56 的模型而导出. 利用式(15)及递推关系式(10′)，即可依次得出

$$d^j_{jj-1}(\lambda)=-(2j)^{1/2}\left(\cos\frac{\lambda}{2}\right)^{2j-1}\sin\frac{\lambda}{2}$$

$$d^j_{jj-2}(\lambda)=\left[\frac{2j(2j-1)}{2!}\right]^{\frac{1}{2}}\left(\cos\frac{\lambda}{2}\right)^{2j-2}\left(\sin\frac{\lambda}{2}\right)^2$$

$$\vdots$$

$$d^j_{jm}(\lambda)=(-1)^{j-m}\left[\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}\right]^{\frac{1}{2}}\left(\cos\frac{\lambda}{2}\right)^{j+m}\left(\sin\frac{\lambda}{2}\right)^{j-m} \tag{16}$$

$$\vdots$$

$$d^j_{j-j}(\lambda)=(-1)^{2j}\left(\sin\frac{\lambda}{2}\right)^{2j}$$

讨论 **1°** 当$\lambda\to-\lambda$,易见

$$d^j_{jm}(-\lambda)=(-1)^{j-m}d^j_{jm}(\lambda) \tag{17}$$

这结果和$d^j_{m'm}$的一般性质相符合.

2° 当$\lambda=\pi$,易见唯一不等于0的矩阵元为

$$d^j_{j-j}(\pi)=(-1)^{2j} \tag{18}$$

这是因为

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi J_y}\mid jm\rangle&=(-1)^{j-m}\mid j-m\rangle\\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi J_y}\mid j-j\rangle&=(-1)^{2j}\mid jj\rangle\end{aligned} \tag{19}$$

[算符$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi J_y}$的意义是将体系绕$y$轴旋转180°,因此$|jm\rangle$态变成$|j-m\rangle$态,式(19)是对$|jm\rangle$和$|j-m\rangle$关系的相因子所作的规定.]

6.59 设体系处于$(\boldsymbol{J}^2,J_z)$的共同本征态$|jj\rangle$,方向$\boldsymbol{n}$和z轴的夹角为θ,求J_n的可能测值及相应概率.

解 取$\hbar=1$.当体系处于$|jj\rangle$态,$\boldsymbol{J}^2=j(j+1)$,J_n的可能测值即是本征值$m(=j,j-1,\cdots,-j)$,设相应概率为$w(m)$.

为了便于计算,可取$\boldsymbol{n}$在x-z平面内,则$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta J_y}|jm\rangle$就是$(\boldsymbol{J}^2,J_n)$的共同本征态,$J_n=m$.($\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta J_y}$相当于将体系绕$y$轴转$\theta$角)因此,在$|jj\rangle$态中测得$J_n=m$的概率为

$$w(m)=|\langle jj\mid\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta J_y}\mid jm\rangle|^2=|d^j_{jm}(\theta)|^2 \tag{1}$$

根据上题的计算,结果为

$$w(m)=\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}\left(\cos^2\frac{\theta}{2}\right)^{j+m}\left(\sin^2\frac{\theta}{2}\right)^{j-m} \tag{2}$$

讨论 **1°** 对于给定的方向θ,概率最大的m值满足

$$w(m)\geqslant w(m'),\quad m'\neq m$$

特别是

$$w(m)\geqslant w(m\pm1) \tag{3}$$

由式(2)可得

$$\frac{w(m+1)}{w(m)}=\frac{j-m}{j+m+1}\cdot\frac{\cos^2\frac{\theta}{2}}{\sin^2\frac{\theta}{2}} \tag{4}$$

则式(3)给出

$$\left(j+\frac{1}{2}\right)\cos\theta-\frac{1}{2}\leqslant m\leqslant\left(j+\frac{1}{2}\right)\cos\theta+\frac{1}{2} \tag{5}$$

据此，给定 j 和 θ，就可定出 J_n 取值概率最大的 m 值.

对于 $\theta=\pi/2$，式(5)成为

$$-\frac{1}{2}\leqslant m\leqslant\frac{1}{2} \tag{6}$$

因此，如 j 为整数，则在 $\theta=\pi/2$ 方向上(即在和 z 轴垂直的方向上)J_n 取值为 0 的概率最大；如 j 为半奇数，则在 $\theta=\pi/2$ 方向上 J_n 取值 $\pm\frac{1}{2}$ 的概率最大[由式(2)易知，$w\left(\frac{1}{2}\right)=w\left(-\frac{1}{2}\right)$]. 具体数值为

$$\theta=\frac{\pi}{2},\quad w(0)=\frac{(2j)!}{(j!)^2 2^{2j}}=\frac{(2j-1)!!}{(2j)!!},\quad j\text{ 为整数} \tag{7}$$

$$w\left(\pm\frac{1}{2}\right)=\frac{(2j)!}{\left(j+\frac{1}{2}\right)!\left(j-\frac{1}{2}\right)!2^{2j}}=\frac{(2j)!!}{(2j+1)!!},\quad j\text{ 为半奇数} \tag{8}$$

2°　对于指定的 j、m，概率 $w(m)$ 取极大值的方向由极值条件 $\mathrm{d}w(m)/\mathrm{d}\theta=0$ 决定. 经过简单计算，得到

$$\theta=\arccos\left(\frac{m}{j}\right) \tag{9}$$

特别是，对于 $m=j$，$\theta=0$；对于 $m=-j$，$\theta=\pi$；对于 $m=0$(j 为整数)，$\theta=\frac{\pi}{2}$.

当 $j\gg1\left(j\sim j+\frac{1}{2}\right)$，式(5)及(9)和经典力学结果一致. 经典力学中，如角动量 $\boldsymbol{J}$ 指向 z 轴，则在 θ 方向的投影为

$$(\boldsymbol{J})_n=J\cos\theta$$

$(\boldsymbol{J})_n$ 相当于本题式(5)或(9)中的 m，$J=|\boldsymbol{J}|$ 相当于 j 或 $\left(j+\frac{1}{2}\right)$.

3°　对于式(2)，可给以如下形象地解释. 考虑由 $2j$ 个自旋 1/2 粒子构成的体系，$\boldsymbol{J}$ 代表体系的总自旋角动量(参看题 6.56)如各粒子均取“向上”自旋态$|+\rangle$，则体系状态为

$$|jj\rangle = |+\rangle_1 |+\rangle_2 \cdots |+\rangle_{2j}$$

在 θ 方向,各单粒子自旋投影($\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{n}$)取值$\frac{1}{2}$的概率为 $\cos^2\frac{\theta}{2}$,取值$\left(-\frac{1}{2}\right)$的概率为 $\sin^2\frac{\theta}{2}$(参看题 6.56 和题 6.13). 如在 θ 方向测得总自旋投影 $J_n=m$,则必有 $(j+m)$个粒子 $s_n=\frac{1}{2}$,$(j-m)$个粒子 $s_n=-\frac{1}{2}$,相应概率为

$$w(m)=C_{2j}^{j+m}\left(\cos^2\frac{\theta}{2}\right)^{j+m}\left(\sin^2\frac{\theta}{2}\right)^{j-m}$$

$$=\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}\left(\cos^2\frac{\theta}{2}\right)^{j+m}\left(\sin^2\frac{\theta}{2}\right)^{j-m}$$

此即式(2).

4° 利用二项式定理

$$(a+b)^n=\sum_{k=0}^{n}\frac{n!}{k!(n-k)!}a^k b^{n-k}$$

容易验证

$$\sum_m w(m)=\left(\cos^2\frac{\theta}{2}+\sin^2\frac{\theta}{2}\right)^{2j}=1 \tag{10}$$

其意义为在 θ 方向测得 J_n 取各种可能本征值($m=j,j-1,\cdots,-j$)的总概率为 1. 利用 $d^j_{jm}(\theta)$的定义,也很容易证明式(10)如下:

$$\sum_m w(m)=\sum_m |d^j_{jm}(\theta)|^2=\sum_m \langle jj|e^{-i\theta J_y}|jm\rangle\langle jm|e^{i\theta J_y}|jj\rangle$$

在属于同一个 j 的$|jm\rangle$($m=j,j-1,\cdots,-j$)子空间,$\sum_m |jm\rangle\langle jm|=1$,因此

$$\sum_m w(m)=\langle jj|e^{-i\theta J_y}e^{i\theta J_y}|jj\rangle=\langle jj|jj\rangle=1$$

6.60 粒子处于轨道角动量(l^2,l_z)的共同本征态 Y_{20},求 l_x 的可能测值及概率(取 $\hbar=1$).

解 (l^2,l_z)的共同本征态 Y_{lm} 记为$|lm\rangle$. 设在$|20\rangle$态中测得 $l_x=m$ 的概率为 $w(m)$. 根据题 6.55 的证明,已知

$$w(-1)=w(1),\quad w(-2)=w(2) \tag{1}$$

因此只需计算 $w(0)$、$w(1)$、$w(2)$. 另外,总概率为 1,因此

$$\sum_m w(m)=w(0)+2w(1)+2w(2)=1 \tag{2}$$

所以，只要算出其中两个，就可得到第三个. $l=2$ 时，l_x 的本征态为

$$e^{-i\frac{\pi}{2}J_y}\mid 2m\rangle,\quad m=0,\pm1,\pm2$$

因此，在$|20\rangle$态中测得 $l_x=2$ 的概率为

$$w(2)=|\langle 20\mid e^{-i\frac{\pi}{2}J_y}\mid 22\rangle|^2=\left|d^2_{02}\left(\frac{\pi}{2}\right)\right|^2$$

$$=\left|d^2_{20}\left(-\frac{\pi}{2}\right)\right|^2 \tag{3}$$

根据题 6.58 的计算，

$$d^2_{20}\left(-\frac{\pi}{2}\right)=\left[\frac{4!}{(2!)^2}\right]^{\frac{1}{2}}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^4=\sqrt{\frac{3}{8}} \tag{4}$$

所以

$$w(2)=w(-2)=3/8 \tag{5}$$

另外，在$|20\rangle$态中，$l_z=0$，$l^2=6$，l_x^2 和 l_y^2 的平均值为

$$\langle l_x^2\rangle=\langle l_y^2\rangle=\frac{1}{2}\langle l^2-l_z^2\rangle=3 \tag{6}$$

亦即

$$\langle l_x^2\rangle=0\cdot w(0)+(\pm1)^2\cdot 2w(1)+(\pm2)^2 2w(2)$$

$$=2w(1)+8w(2)=3 \tag{7}$$

以式(5)代入式(7)，即得

$$w(1)=w(-1)=0 \tag{8}$$

再利用式(2)，即得 $w(0)=1/4$.

结论：在 Y_{20} 态中，

l_x 的可能测值为　2，　1，　0，　−1，　−2，

概率为　3/8，　0，　1/4，　0，　3/8.

6.61　设算符 F 和角动量算符 $\boldsymbol{J}$ 对易，即 F 为标量算符，证明：

(a) 在$(\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{J}_z)$共同本征态$|jm\rangle$下，$F$ 的平均值和量子数 m 无关；

(b) 给定 j 后，在$|jm\rangle$子空间中，F 可以表示成常数矩阵.

证　令 $J_\pm=J_x\pm iJ_y$，根据题设，

$$[F,J_\pm]=0,\quad [F,J_z]=0 \tag{1}$$

(a) 根据角动量一般理论，

$$J_+\mid jm\rangle=a_m\mid jm+1\rangle\quad(a_m\text{ 为实数}) \tag{2}$$

取共轭,成为

$$\langle jm \mid J_- = a_m \langle jm+1 \mid \tag{2'}$$

二式取内积,得到

$$\langle jm \mid J_- J_+ \mid jm \rangle = (a_m)^2 \langle jm+1 \mid jm+1 \rangle = (a_m)^2$$

亦即

$$J_- J_+ \mid jm \rangle = (a_m)^2 \mid jm \rangle \tag{3}$$

现在,在$|jm+1\rangle$态下计算 F 的平均值,并利用式(1)至(3),得到

$$\begin{aligned} \langle jm+1 \mid F \mid jm+1 \rangle &= \langle jm \mid J_- FJ_+ \mid jm \rangle / (a_m)^2 \\ &= \langle jm \mid FJ_- J_+ \mid jm \rangle / (a_m)^2 \\ &= \langle jm \mid F \mid jm \rangle \end{aligned} \tag{4}$$

依此类推,对于属于同一个 j 的 m、m',总有

$$\langle jm' \mid F \mid jm' \rangle = \langle jm \mid F \mid jm \rangle \tag{5}$$

即$\langle F \rangle$和 m 无关.

(b) 考虑到$|jm\rangle$是 J_z 的本征态(本征值 m),利用 F 和 J_z 的对易性,易得

$$m\langle jm' \mid F \mid jm \rangle = \langle jm' \mid FJ_z \mid jm \rangle = \langle jm' \mid J_z F \mid jm \rangle = m' \langle jm' \mid F \mid jm \rangle \tag{6}$$

由此可知,如 $m' \neq m$,则$\langle jm' | F | jm \rangle = 0$,亦即

$$\langle jm' \mid F \mid jm \rangle = \langle jm \mid F \mid jm \rangle \delta_{mm'} = f(j) \delta_{mm'} \tag{7}$$

其中

$$f(j) = \langle jj \mid F \mid jj \rangle = \langle j, j-1 \mid F \mid j, j-1 \rangle = \cdots = \langle jm \mid F \mid jm \rangle = \cdots$$

因此,当 j 给定后,在$|jm\rangle$子空间中,F 的非对角矩阵元全部为 0,对角矩阵元全部等于 $f(j)$,所以 F 的矩阵表示为

$$F = f(j) I \tag{8}$$

(I 为单位矩阵)即 F 相当于数 $f(j)$.

6.62 设 $\boldsymbol{J}$ 为角动量算符,$\boldsymbol{A}$ 为矢量算符,满足关系

$$[J_\alpha, A_\beta] = \mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} A_r \quad (\text{取 } \hbar = 1) \tag{1}$$

即

$$[J_x, A_x] = 0, \quad [J_x, A_y] = \mathrm{i}A_z \quad \text{等等.}$$

(a) 计算 $\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{J} + \boldsymbol{J} \times \boldsymbol{A}$

(b) 计算$[\boldsymbol{J},\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}],[\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{A}]$

(c) 证明$\boldsymbol{J}\times(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A})=(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A})\boldsymbol{J}-\boldsymbol{J}^2\boldsymbol{A}+\mathrm{i}\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A}$

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

(d) 证明$[\boldsymbol{J}^2,[\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{A}]]=2(\boldsymbol{J}^2\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\boldsymbol{J}^2)-4\boldsymbol{J}(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A})$

解　按照定义，$\boldsymbol{J}$ 和 $\boldsymbol{A}$ 的相同分量可以对易，因此

$$\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{J}=J_xA_x+J_yA_y+J_zA_z \tag{2}$$

根据式(1)，易得

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J}+\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A})_z&=A_xJ_y-A_yJ_x+J_xA_y-J_yA_x\\&=[A_x,J_y]+[J_x,A_y]=2\mathrm{i}A_z\end{aligned}$$

因此

$$\boxed{\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J}+\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A}=2\mathrm{i}\boldsymbol{A}} \tag{3}$$

其次

$$\begin{aligned}[J_x,\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}]&=[J_x,J_yA_y]+[J_x,J_zA_z]\\&=[J_x,J_y]A_y+J_y[J_x,A_y]+[J_x,J_z]A_z+J_z[J_x,A_z]\\&=\mathrm{i}(J_zA_y+J_yA_z)-\mathrm{i}(J_yA_z+J_zA_y)\\&=0\end{aligned}$$

亦即

$$\boxed{[\boldsymbol{J},\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}]=0} \tag{4}$$

这反映了 $\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}$ 是标量算符，其次

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{J}^2,A_x]&=[J_y^2,A_x]+[J_z^2,A_x]\\&=-\mathrm{i}(J_yA_z+A_zJ_y)+\mathrm{i}(J_zA_y+A_yJ_z)\\&=\mathrm{i}(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J}-\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A})_x\end{aligned}$$

亦即

$$\boxed{[\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{A}]=\mathrm{i}(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J}-\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A})} \tag{5}$$

式(3)或(5)两端乘 $\boldsymbol{J}$，取内积，即得

$$(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A})\cdot\boldsymbol{J}=\boldsymbol{J}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J})=\mathrm{i}\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A} \tag{6}$$

利用算符公式

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

可得

$$[\boldsymbol{J}\times(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A})]_x=\boldsymbol{J}\cdot(J_x\boldsymbol{A})-\boldsymbol{J}^2A_x$$

$$= J_x^2 A_x + J_y J_x A_y + J_z J_x A_z - \boldsymbol{J}^2 A_x$$
$$= J_x(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}) + \mathrm{i}(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A})_x - \boldsymbol{J}^2 A_x$$

即

$$\boldsymbol{J}\times(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A}) = \mathrm{i}\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A} + \boldsymbol{J}(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}) - \boldsymbol{J}^2\boldsymbol{A} \tag{7}$$

类似地,利用公式

$$[(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\times\boldsymbol{C}]_\alpha = \boldsymbol{A}\cdot(B_\alpha\boldsymbol{C}) - A_\alpha(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{C})$$

可证

$$(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J})\times\boldsymbol{J} = \mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J} + \boldsymbol{J}(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}) - \boldsymbol{A}\boldsymbol{J}^2 \tag{8}$$

[如 $\boldsymbol{A}$ 为厄米算符,式(7)取共轭即得式(8).]

利用式(5)以及 $\boldsymbol{J}^2$ 和 $\boldsymbol{J}$ 的对易性,可得

$$[\boldsymbol{J}^2,[\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{A}]] = \mathrm{i}[\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J}] - \mathrm{i}[\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A}]$$
$$= \mathrm{i}[\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{A}]\times\boldsymbol{J} - \mathrm{i}\boldsymbol{J}\times[\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{A}]$$
$$= (\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A} - \boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J})\times\boldsymbol{J} + \boldsymbol{J}\times(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J} - \boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A})$$

再利用式(3)、(7)、(8),上式可以化简成

$$\boxed{[\boldsymbol{J}^2,[\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{A}]] = 2(\boldsymbol{J}^2\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}\boldsymbol{J}^2) - 4\boldsymbol{J}(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A})} \tag{9}$$

上式左端即($\boldsymbol{J}^4\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}\boldsymbol{J}^4 - 2\boldsymbol{J}^2\boldsymbol{A}\boldsymbol{J}^2$).

6.63 设 $\boldsymbol{J}$ 为角动量,$\boldsymbol{A}$ 为矢量算符,满足关系(取 $\hbar=1$)

$$[J_\alpha, A_\beta] = \mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\gamma$$

在($\boldsymbol{J}^2, J_z$)表象中,证明

(a) 在$|jm\rangle$态下,$\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}$ 的平均值与量子数 m 无关;

(b) $\langle jm'|\boldsymbol{A}|jm\rangle = \langle jm'|\boldsymbol{J}|jm\rangle\dfrac{\langle\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}\rangle_j}{j(j+1)}$

证 (a) 上题已证明($\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}$)和 $\boldsymbol{J}$ 对易. 根据题 6.61 的论证,$\langle jm|\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}|jm\rangle$ 与 m 无关,仅为 j 的函数,可以记为

$$\langle jm\,|\,\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}\,|\,jm\rangle = \langle\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}\rangle_j \tag{1}$$

题 6.61 还证明了

$$\langle jm'\,|\,\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}\,|\,jm\rangle = \langle\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}\rangle_j\delta_{mm'} \tag{2}$$

亦即在属于同一个 j 的$\{|jm\rangle\}$子空间中,$\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}$ 等价于常数$\langle\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}\rangle_j$.

(b) 利用上题得到的公式

$$\boldsymbol{J}^4\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}\boldsymbol{J}^4 - 2\boldsymbol{J}^2\boldsymbol{A}\boldsymbol{J}^2 = 2(\boldsymbol{J}^2\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}\boldsymbol{J}^2) - 4\boldsymbol{J}(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}) \tag{3}$$

取矩阵元$\langle jm'|\cdots|jm\rangle$，则$\boldsymbol{J}^2\to j(j+1)$，$\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}\to\langle\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}\rangle_j$，式(3)左端对矩阵元的贡献为0，因此得到

$$\boxed{\langle jm'\mid\boldsymbol{A}\mid jm\rangle=\langle jm'\mid\boldsymbol{J}\mid jm\rangle\frac{\langle\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}\rangle_j}{j(j+1)}}\tag{4}$$

如取$m'=m$，即得平均值公式

$$\boxed{\langle\boldsymbol{A}\rangle_{jm}=\langle\boldsymbol{J}\rangle_{jm}\langle\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}\rangle_j/j(j+1)}\tag{5}$$

式(4)和(5)称为投影定理. 式(5)不仅对$|jm\rangle$态成立，而且对于$\boldsymbol{J}$在任何$\boldsymbol{n}$方向的投影J_n的任何一个本征态$|j,J_n=m\rangle$也是成立的.

6.64　设$\boldsymbol{J}_1$和$\boldsymbol{J}_2$为属于不同自由度的角动量，则它们之和$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{J}_1+\boldsymbol{J}_2$也是角动量. 试对$(\boldsymbol{J}_1^2,\boldsymbol{J}_2^2,\boldsymbol{J}^2,J_z)$的共同本征态$|j_1j_2jm\rangle$计算$\boldsymbol{J}_1$和$\boldsymbol{J}_2$的平均值.（取$\hbar=1$）

解　$\boldsymbol{J}_1$、$\boldsymbol{J}_2$各自满足角动量算符基本对易式

$$\boldsymbol{J}_1\times\boldsymbol{J}_1=\mathrm{i}\boldsymbol{J}_1,\quad\boldsymbol{J}_2\times\boldsymbol{J}_2=\mathrm{i}\boldsymbol{J}_2\tag{1}$$

$\boldsymbol{J}_1$、$\boldsymbol{J}_2$属于不同自由度，彼此对易，于是

$$\begin{aligned}&[J_x,J_{1x}]=[J_{1x}+J_{2x},J_{1x}]=0\\&[J_x,J_{1y}]=[J_{1x}+J_{2x},J_{1y}]=\mathrm{i}J_{1z}\end{aligned}\tag{2}$$

$\boldsymbol{J}$和$\boldsymbol{J}_2$也有类似关系. 总之，$\boldsymbol{J}_1$或$\boldsymbol{J}_2$与$\boldsymbol{J}$之间满足上题中矢量算符$\boldsymbol{A}$和$\boldsymbol{J}$之间的全部关系. 而且

$$\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{J}_1=\boldsymbol{J}_1^2+\boldsymbol{J}_2\cdot\boldsymbol{J}_1=\frac{1}{2}(\boldsymbol{J}^2+\boldsymbol{J}_1^2-\boldsymbol{J}_2^2)\tag{3}$$

$$\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{J}_2=\boldsymbol{J}_2^2+\boldsymbol{J}_1\cdot\boldsymbol{J}_2=\frac{1}{2}(\boldsymbol{J}^2+\boldsymbol{J}_2^2-\boldsymbol{J}_1^2)\tag{4}$$

利用上题的式(5)，即得

$$j(j+1)\langle\boldsymbol{J}_1\rangle_{j_1j_2jm}=\frac{1}{2}[j(j+1)+j_1(j_1+1)-j_2(j_2+1)]\langle\boldsymbol{J}\rangle_{j_1j_2jm}\tag{5}$$

$$j(j+1)\langle\boldsymbol{J}_2\rangle_{j_1j_2jm}=\frac{1}{2}[j(j+1)+j_2(j_2+1)-j_1(j_1+1)]\langle\boldsymbol{J}\rangle_{j_1j_2jm}\tag{6}$$

由于在$|J_z=m\rangle$态中

$$\langle J_x\rangle=\langle J_y\rangle=0,\quad\langle J_z\rangle=m$$

所以式(5)和(6)给出

$$\langle J_{1x}\rangle_{j_1j_2jm}=\langle J_{1y}\rangle_{j_1j_2jm}=\langle J_{2x}\rangle_{j_1j_2jm}=\langle J_{2y}\rangle_{j_1j_2jm}=0$$

$$\langle J_{1z}\rangle_{j_1j_2jm}=m\frac{j(j+1)+j_1(j_1+1)-j_2(j_2+1)}{2j(j+1)} \tag{7}$$

$$\langle J_{2z}\rangle_{j_1j_2jm}=m\frac{j(j+1)+j_2(j_2+1)-j_1(j_1+1)}{2j(j+1)}$$

$$=m-\langle J_{1z}\rangle_{j_1j_2jm}$$

6.65 两个大小相等、属于不同自由度的角动量 $\boldsymbol{J}_1$ 和 $\boldsymbol{J}_2$ 耦合成总角动量 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{J}_1+\boldsymbol{J}_2$,取 $\hbar=1$,设

$$\boldsymbol{J}_1^2=\boldsymbol{J}_2^2=j(j+1) \tag{1}$$

则

$$\boldsymbol{J}^2=J(J+1),\quad J=2j,2j-1,\cdots,1,0 \tag{2}$$

在总角动量量子数 $J=0$ 的状态下,求 J_{1z}和 J_{2z}的可能取值及相应概率.

解 $(\boldsymbol{J}_1^2,J_{1z})$的本征态记为$|jm_1\rangle_1$,$(\boldsymbol{J}_2^2,J_{2z})$的本征态记为$|jm_2\rangle_2$,$(\boldsymbol{J}_1^2,\boldsymbol{J}_2^2,\boldsymbol{J}^2,J_z)$的共同本征态记为$|jjJM\rangle$,$M$ 为 J_z 的本征值. $|jjJM\rangle$也可简记为$|JM\rangle$.

$J=0$ 时,$M=0$,$m_1=-m_2=m$,故所讨论的状态可以表示为

$$|jj00\rangle=\sum_m C_m|jm\rangle_1|j-m\rangle_2 \tag{3}$$

C_m 即 $j_1=j_2=j$,$J=M=0$,$m_1=-m_2=m$ 时的 C. G. 系数$\langle j_1m_1j_2m_2|JM\rangle$. $|C_m|^2$ 即 J_{1z}取值 m(同时 J_{2z}取值$-m$)的概率. 下面求 C_m.

由于 $\boldsymbol{J}^2|jj00\rangle=0$,而 $\boldsymbol{J}^2$ 是正定的,因此必然有

$$\boldsymbol{J}|jj00\rangle=0 \tag{4}$$

从而

$$(J_x+\mathrm{i}J_y)|jj00\rangle=0 \tag{5}$$

其中

$$J_x+\mathrm{i}J_y=(J_{1x}+\mathrm{i}J_{1y})+(J_{2x}+\mathrm{i}J_{2y})=J_{1+}+J_{2+} \tag{6}$$

根据角动量升降算符的基本公式,

$$J_{1+}|jm\rangle_1=(J_{1x}+\mathrm{i}J_{1y})|jm\rangle_1=a_{jm}|jm+1\rangle_1 \tag{7a}$$

$$a_{jm}=\sqrt{(j-m)(j+m+1)}$$

$$J_{2+}|j,-m\rangle_2=(J_{2x}+\mathrm{i}J_{2y})|j,-m\rangle_2=a_{j,-m}|j,1-m\rangle_2 \tag{7b}$$

$$a_{j,-m}=\sqrt{(j+m)(j-m+1)}=a_{j,m-1}$$

将式(5)至(7)代入式(3),即得

$$\sum_m C_m[a_{jm}|j,m+1\rangle_1|j,-m\rangle_2+a_{j,m-1}|jm\rangle_1|j,1-m\rangle_2]==0 \tag{8}$$

由于

$$\sum_m C_m a_{j,m-1} \mid jm\rangle_1 \mid j,1-m\rangle_2 \xrightarrow{m\to m+1} \sum_m C_{m+1} a_{jm} \mid jm+1\rangle_1 \mid j,-m\rangle_2$$

因此式(8)即

$$\sum_m (C_m + C_{m+1}) a_{jm} \mid jm+1\rangle_1 \mid j,-m\rangle_2 = 0 \tag{8'}$$

由于各基矢是线性独立的,因此必有

$$(C_m + C_{m+1}) a_{jm} = 0 \tag{9}$$

亦即

$$C_m = -C_{m+1}, \quad m = j-1, j-2, \cdots, (-j) \tag{9'}$$

式(3)中$|jj00\rangle$、$|jm\rangle_1$、$|j,-m\rangle_2$等都是正交归一化的,而m共有$(2j+1)$种取值,由归一化条件

$$\sum_m |C_m|^2 = 1 \tag{10}$$

和式(9′),立刻得到$|C_m|^2 = 1/(2j+1)$. 如取

$$C_j = 1/\sqrt{2j+1}$$

就有

$$\boxed{C_m = (-1)^{j-m} C_j = (-1)^{j-m} \frac{1}{\sqrt{2j+1}}} \tag{11}$$

代入式(3)即得

$$|jj00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \sum_m (-1)^{j-m} \mid jm\rangle_1 \mid j,-m\rangle_2 \tag{12}$$

显然,在$J_{1z} = -J_{2z}$的前提下,J_{1z}和J_{2z}取各本征值$(j, j-1, \cdots, -j)$的概率相等,均为$1/(2j+1)$.

6.66　设$\boldsymbol{J}_1$和$\boldsymbol{J}_2$为属于不同自由度的角动量,则它们之和$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{J}_1 + \boldsymbol{J}_2$也是角动量. $(\boldsymbol{J}_1^2, \boldsymbol{J}_2^2, \boldsymbol{J}^2, J_z)$的共同本征态$|j_1 j_2 jm\rangle$简记为$|jm\rangle$. 试求$\langle j'm'|\boldsymbol{J}_1|jm\rangle \neq 0$时量子数$j$和$m$的选择定则,即求$\Delta j = (j'-j)$和$\Delta m = (m'-m)$的允许值.

解　$\boldsymbol{J}_1$和$\boldsymbol{J}_2$属于不同自由度,彼此对易. 令

$$\begin{aligned} J_{1\pm} &= J_{1x} \pm \mathrm{i} J_{1y}, \quad J_{2\pm} = J_{2x} \pm \mathrm{i} J_{2y} \\ J_\pm &= J_x \pm \mathrm{i} J_y = (J_{1x} + J_{2x}) \pm \mathrm{i}(J_{1y} + J_{2y}) \\ &= J_{1\pm} + J_{2\pm} \end{aligned} \tag{1}$$

利用基本对易式

$$\boldsymbol{J}_1 \times \boldsymbol{J}_1 = \mathrm{i}\boldsymbol{J}_1, \quad \boldsymbol{J}_2 \times \boldsymbol{J}_2 = \mathrm{i}\boldsymbol{J}_2 \tag{2}$$

易证

$$[J_z, J_{1z}] = 0, \quad [J_z, J_{1\pm}] = \pm J_{1\pm} \tag{3}$$

$\boldsymbol{J}_1^2$ 和 $\boldsymbol{J}_2^2$ 的本征值为

$$\boldsymbol{J}_1^2 = j_1(j_1+1), \quad \boldsymbol{J}_2^2 = j_2(j_2+1) \tag{4}$$

当 j_1 和 j_2 给定后,$\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的本征值为

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{J}^2 = j(j+1), \quad j = j_1+j_2, j_1+j_2-1, \cdots, |j_1-j_2| \\ &J_z = m, \qquad\qquad m = j, j-1, \cdots, (-j) \end{aligned} \tag{5}$$

式(3)取矩阵元$\langle j'm'|\cdots|jm\rangle$,即$\langle j_1 j_2 j'm'|\cdots|j_1 j_2 jm\rangle$,可得

$$\begin{aligned} &(m'-m)\langle j'm'|J_{1z}|jm\rangle = 0 \\ &(m'-m\mp 1)\langle j'm'|J_{1\pm}|jm\rangle = 0 \end{aligned} \tag{6}$$

易见 m 的选择定则为

$$\begin{aligned} &\langle j'm'|J_{1z}|jm\rangle \neq 0, \quad \Delta m = m'-m = 0 \\ &\langle j'm|(J_{1x} \pm \mathrm{i}J_{1y})|jm\rangle \neq 0, \quad \Delta m = m'-m = \pm 1 \end{aligned} \tag{7}$$

因此 $\boldsymbol{J}_1$ 有任何一个分量的矩阵元不为 0 的条件是 $\Delta m = 0, \pm 1$. 对于 $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{J}_1 + \boldsymbol{J}_2$,利用公式

$$J_z|jm\rangle = m|jm\rangle, \quad J_\pm|jm\rangle \longrightarrow |j, m\pm 1\rangle$$

易得选择定则为

$$\begin{aligned} &\langle j'm'|J_z|jm\rangle \neq 0, \quad \Delta j = j'-j = 0, \quad \Delta m = m'-m = 0 \\ &\langle j'm'|J_\pm|jm\rangle \neq 0, \quad \Delta j = 0, \quad \Delta m = m'-m = \pm 1 \end{aligned} \tag{8}$$

题 6.62 已经证明(取 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{J}_1$)

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{J}^4\boldsymbol{J}_1 + \boldsymbol{J}_1\boldsymbol{J}^4 - 2\boldsymbol{J}^2\boldsymbol{J}_1\boldsymbol{J}^2 - 2\boldsymbol{J}^2\boldsymbol{J}_1 - 2\boldsymbol{J}_1\boldsymbol{J}^2 \\ =& -4\boldsymbol{J}(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{J}_1) = -2\boldsymbol{J}(\boldsymbol{J}^2 + \boldsymbol{J}_1^2 - \boldsymbol{J}_2^2) \end{aligned} \tag{9}$$

取矩阵元$\langle jm'|\cdots|jm\rangle$,即得

$$2j(j+1)\langle jm'|\boldsymbol{J}_1|jm\rangle = [j(j+1) + j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)]\langle jm'|\boldsymbol{J}|jm\rangle \tag{10}$$

易见$\langle jm'|\boldsymbol{J}_1|jm\rangle \neq 0$ 和$\langle jm'|\boldsymbol{J}|jm\rangle \neq 0$ 的选择定则相同,为

$$\boxed{\begin{aligned} &\langle jm'|J_{1z}|jm\rangle \neq 0, \quad \Delta m = m'-m = 0 \\ &\langle jm'|(J_{1x} \pm \mathrm{i}J_{1y}|jm\rangle \neq 0, \quad \Delta m = m'-m = \pm 1 \end{aligned}} \tag{11}$$

式(11)和(7)的差别在于,式(7)仅是必要条件,式(11)则是充分必要条件.[注意式(11)是在 $j'=j$ 的条件下得出的.]

当 $j'\neq j$,式(9)取矩阵元$\langle j'm'|\cdots|jm\rangle$,右端贡献为 0,因此

$$[j'^2(j'+1)^2+j^2(j+1)^2-2jj'(j+1)(j'+1)$$
$$-2j'(j'+1)-2j(j+1)]\langle j'm'|\boldsymbol{J}_1|jm\rangle=0$$

因此,如$\langle j'm'|\boldsymbol{J}_1|jm\rangle\neq 0$,除了量子数 m'、m 必须满足式(7)外,还必须

$$j'^2(j'+1)^2+j^2(j+1)^2-2jj'(j+1)(j'+1)$$
$$-2j'(j'+1)-2j(j+1)=0 \tag{12}$$

上式可以化成

$$[(j'+j+1)^2-1][(j'-j)^2-1]=0 \tag{12'}$$

由于 $j'+j+1>1$,上式的解为

$$\boxed{\Delta j=j'-j=\pm 1} \tag{13}$$

结论:所求选择定则为

$$\boxed{\begin{aligned}&\Delta j=j'-j=0,\pm 1\\&\Delta m=m'-m=0,\pm 1\end{aligned}} \tag{14}$$

在计算过程中,对于 j_1、j_2 的相对大小未作任何限制,所以对于 $\boldsymbol{J}_2$ 也可以求出同样的选择定则.

6.67　考虑由两个自旋为 1 的粒子组成的体系,总自旋 $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2$,求总自旋平方及 z 分量$(\boldsymbol{S}^2,S_z)$的共同本征态,表示成 s_{1z},s_{2z}本征函数乘积的线性叠加(取 $\hbar=1$).

解　单粒子自旋分量 s_{1z}、s_{2z}的本征值为 1、0、−1,相应的本征态记为 α、β、γ,即

$$s_{iz}\alpha(i)=\alpha(i),\quad s_{iz}\beta(i)=0,\quad s_{iz}\gamma(i)=-\gamma(i),\quad i=1,2,$$

令

$$s_{i+}=s_{ix}+\mathrm{i}s_{iy},\quad s_{i-}=s_{ix}-\mathrm{i}s_{iy},\quad i=1,2$$

根据角动量普遍理论,

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

对于本题中粒子 1 或 2,相当于 $j=1$,$m=1$、0、−1,应有

$$s_{i+}\alpha(i)=0,\quad s_{i+}\beta(i)=\sqrt{2}\alpha(i),\quad s_{i+}\gamma(i)=\sqrt{2}\beta(i)$$

$$s_{i-}\alpha(i)=\sqrt{2}\beta(i),\quad s_{i-}\beta(i)=\sqrt{2}\gamma(i),\quad s_{i-}\gamma(i)=0 \tag{2}$$

其中 $i=1、2$ 代表粒子 1、2.

总自旋平方可以表示成

$$\begin{aligned}\boldsymbol{S}^2&=(\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2)^2=\boldsymbol{s}_1^2+\boldsymbol{s}_2^2+2\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2\\&=\boldsymbol{s}_1^2+\boldsymbol{s}_2^2+2\mathrm{s}_{1z}\mathrm{s}_{2z}+\mathrm{s}_{1+}\mathrm{s}_{2-}+\mathrm{s}_{1-}\mathrm{s}_{2+}\end{aligned} \tag{3}$$

其中

$$\boldsymbol{s}_1^2=\boldsymbol{s}_2^2=2 \tag{4}$$

根据角动量耦合的普遍理论,$\boldsymbol{S}^2$ 和 S_z 的本征值为

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{S}^2=S(S+1),\quad S=2,1,0\\&S_z=M,\quad M=S,S-1,\cdots,(-S)\end{aligned} \tag{5}$$

与量子数 $S、M$ 相应的$(\boldsymbol{S}^2,S_z)$的共同本征态记为χ_{SM}.

(a) $S=2$. M 的最大值为 2,最小值为-2,相应的本征函数显然是

$$\chi_{22}=\alpha(1)\alpha(2),\quad \chi_{2,-2}=\gamma(1)\gamma(2) \tag{6}$$

以量子数 M 的升降算符

$$S_+=s_{1+}+s_{2+},\quad S_-=s_{1-}+s_{2-} \tag{7}$$

作用于式(6),即可得到χ_{21}和$\chi_{2,-1}$,再作用之,即得χ_{20}. 利用式(1),应有

$$S_-\chi_{22}=2\chi_{21},\quad S_-\chi_{21}=\sqrt{6}\chi_{20},\quad S_+\chi_{2,-2}=2\chi_{2,-1}$$

再利用式(2),不难将χ_{2M}逐个求出:

$$\begin{aligned}\chi_{22}&=\alpha(1)\alpha(2)\\\chi_{21}&=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)+\beta(1)\alpha(2)]\\\chi_{20}&=\frac{1}{\sqrt{6}}[\alpha(1)\gamma(2)+2\beta(1)\beta(2)+\gamma(1)\alpha(2)]\\\chi_{2,-1}&=\frac{1}{\sqrt{2}}[\beta(1)\gamma(2)+\gamma(1)\beta(2)]\\\chi_{2,-2}&=\gamma(1)\gamma(2)\end{aligned} \tag{8}$$

(b) $S=1$. M 最大为 1,χ_{11}显然只能由 $\alpha(1)\beta(2)$和 $\beta(1)\alpha(2)$组成,χ_{11}应和χ_{21}正交,因此χ_{11}必然是

$$\chi_{11}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)]$$

(按通常习惯,取 $\alpha(1)$ 项系数为正). 再以 S_- 逐次作用之,即可求出

$$\chi_{10}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\gamma(2)-\gamma(1)\alpha(2)]$$
$$\chi_{1,-1}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\beta(1)\gamma(2)-\gamma(1)\beta(2)] \tag{9}$$

(c) $S=0$. M 只能是 0,χ_{00} 可以利用 6.65 题结果写出:

$$\chi_{00}=\frac{1}{\sqrt{3}}[\alpha(1)\gamma(2)-\beta(1)\beta(2)+\gamma(1)\alpha(2)] \tag{10}$$

容易验证,以上 9 个 χ_{SM} 是互相正交的. 它们作为 S_z 的本征函数,是明显可见的;以式(3)作用之,可以验明它们确实均为 $\boldsymbol{S}^2$ 的本征态.

6.68　对于两个自旋 1/2 粒子体系,写出全部 $\sigma_{1\alpha}\sigma_{2\beta}$($\alpha,\beta$ 均代表 x,y,z)型二体算符,讨论其基本性质,并求出各个算符的本征函数(取非耦合表象).

解　$\sigma_{1\alpha},\sigma_{2\beta}$ 各有 3 种,故 $\sigma_{1\alpha}\sigma_{2\beta}$ 型二体算符共有 9 个,即

$$\sigma_{1x}\sigma_{2x},\sigma_{1y}\sigma_{2y},\sigma_{1z}\sigma_{2z},\sigma_{1x}\sigma_{2y},\sigma_{1y}\sigma_{2z},\sigma_{1z}\sigma_{2x},\sigma_{1x}\sigma_{2z},\sigma_{1z}\sigma_{2y},\sigma_{1y}\sigma_{2x}$$

由于单粒子 Pauli 算符有性质

$$(\sigma_{i\alpha})^+=\sigma_{i\alpha}=(\sigma_{i\alpha})^{-1},\quad (\sigma_{i\alpha})^2=1,\quad \sigma_{i\alpha}\text{ 本征值为}\pm1$$

所以上述 9 种二体算符均有类似性质,即

$$(\sigma_{1\alpha}\sigma_{2\beta})^+=\sigma_{1\alpha}\sigma_{2\beta}=(\sigma_{1\alpha}\sigma_{2\beta})^{-1},\quad (\sigma_{1\alpha}\sigma_{2\beta})^2=1,\quad \sigma_{1\alpha}\sigma_{2\beta}\text{ 本征值为}\pm1$$

σ_{1z},σ_{2z} 的本征矢记为

$$|\uparrow\rangle_1,|\downarrow\rangle_1,|\uparrow\rangle_2,|\downarrow\rangle_2 \text{ 即 } \alpha(1),\beta(1),\alpha(2),\beta(2)$$

非耦合表象基矢取为 σ_{1z}、σ_{2z} 的共同本征矢,即

$$|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2,\quad |\downarrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2,\quad |\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2,\quad |\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2 \tag{1}$$

它们都是 $\sigma_{1z}\sigma_{2z}$ 的本征矢,本征值依次为 1,1,−1,−1.

其他 8 个二体算符作用于这 4 个基矢,刚好使它们俩俩耦合. 具体关系是

$$\sigma_{1x}\sigma_{2x}|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2=|\downarrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2,\quad \sigma_{1x}\sigma_{2x}|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2=|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2$$
$$\sigma_{1y}\sigma_{2y}|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2=-|\downarrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2,\quad \sigma_{1y}\sigma_{2y}|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2=|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2$$
$$\sigma_{1x}\sigma_{2y}|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2=\mathrm{i}|\downarrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2,\quad \sigma_{1x}\sigma_{2y}|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2=-\mathrm{i}|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2$$
$$\sigma_{1y}\sigma_{2x}|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2=\mathrm{i}|\downarrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2,\quad \sigma_{1y}\sigma_{2x}|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2=\mathrm{i}|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2$$
$$\sigma_{1y}\sigma_{2z}|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2=\mathrm{i}|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2,\quad \sigma_{1y}\sigma_{2z}|\downarrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2=\mathrm{i}|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2$$
$$\sigma_{1z}\sigma_{2y}|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2=\mathrm{i}|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2,\quad \sigma_{1z}\sigma_{2y}|\downarrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2=\mathrm{i}|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2$$
$$\sigma_{1z}\sigma_{2x}|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2=|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2,\quad \sigma_{1z}\sigma_{2x}|\downarrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2=-|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2$$
$$\sigma_{1x}\sigma_{2z}|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2=|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2,\quad \sigma_{1x}\sigma_{2z}|\downarrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2=-|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2 \tag{2}$$

由于各个算符的逆算符均等于原算符,所以式(2)中任何一个公式可以将等号左右的态矢量(连带相因子±i,−1 等)互换位置,等式仍旧成立.

利用式(2),稍加思考,即可求出这 8 个二体算符的本征矢,如下:

$$\sigma_{1x}\sigma_{2x}=1,\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2+|\downarrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2),\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2+|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2)$$

$$\sigma_{1x}\sigma_{2x}=-1,\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2-|\downarrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2),\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2-|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2) \tag{3}$$

$$\sigma_{1y}\sigma_{2y}=1,\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2-|\downarrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2),\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2+|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2)$$

$$\sigma_{1y}\sigma_{2y}=-1,\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2+|\downarrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2),\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2-|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2) \tag{4}$$

$$\sigma_{1x}\sigma_{2y}=1,\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2+\mathrm{i}|\downarrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2),\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2-\mathrm{i}|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2)$$

$$\sigma_{1x}\sigma_{2y}=-1,\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2-\mathrm{i}|\downarrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2),\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2+\mathrm{i}|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2) \tag{5}$$

$$\sigma_{1y}\sigma_{2x}=1,\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2+\mathrm{i}|\downarrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2),\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2+\mathrm{i}|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2)$$

$$\sigma_{1y}\sigma_{2x}=-1,\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2-\mathrm{i}|\downarrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2),\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2-\mathrm{i}|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2)$$

$$\sigma_{1y}\sigma_{2z}=1,\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2+\mathrm{i}|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2),\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2+\mathrm{i}|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2) \tag{6}$$

$$\sigma_{1y}\sigma_{2z}=-1,\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2-\mathrm{i}|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2),\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2-\mathrm{i}|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2)$$

$$\sigma_{1z}\sigma_{2y}=1,\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2+\mathrm{i}|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2),\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2+\mathrm{i}|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2) \tag{7}$$

$$\sigma_{1z}\sigma_{2y}=-1,\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2-\mathrm{i}|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2),\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2-\mathrm{i}|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2)$$

$$\sigma_{1z}\sigma_{2x}=1,\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2+|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2),\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2-|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2) \tag{8}$$

$$\sigma_{1z}\sigma_{2x}=-1,\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2-|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2),\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2+|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2)$$

$$\sigma_{1x}\sigma_{2z}=1,\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2+|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2),\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2-|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2) \tag{9}$$

$$\sigma_{1x}\sigma_{2z}=-1,\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2-|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2),\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2+|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2) \tag{10}$$

注意，每个算符的本征值均为±1，每个本征值都对应两个互相正交的本征矢. 以上列出的本征矢，均为最简便的选择，每个态矢仅由非耦合表象中 2 个基矢构成. 如将两个简并态线性叠加，本征值不变，态矢则由 4 个基矢共同构成了. 下题就出现了这种情形.

6.69　对于两个自旋 1/2 粒子体系，$\sigma_{1\alpha}\sigma_{2\beta}$型二体算符共有 9 种：

$$\sigma_{1x}\sigma_{2x},\sigma_{1y}\sigma_{2y},\sigma_{1z}\sigma_{2z};\sigma_{1x}\sigma_{2y},\sigma_{1y}\sigma_{2z},\sigma_{1z}\sigma_{2x};\sigma_{1x}\sigma_{2z},\sigma_{1z}\sigma_{2y},\sigma_{1y}\sigma_{2x}$$

如从其中任取 3 个互相对易者列为一组，共有下列 6 组：

$$\begin{aligned}&(\sigma_{1x}\sigma_{2x},\sigma_{1y}\sigma_{2y},\sigma_{1z}\sigma_{2z}),\quad (\sigma_{1x}\sigma_{2y},\sigma_{1y}\sigma_{2x},\sigma_{1z}\sigma_{2z})\\&(\sigma_{1x}\sigma_{2y},\sigma_{1y}\sigma_{2z},\sigma_{1z}\sigma_{2x}),\quad (\sigma_{1y}\sigma_{2z},\sigma_{1z}\sigma_{2y},\sigma_{1x}\sigma_{2x})\\&(\sigma_{1x}\sigma_{2z},\sigma_{1z}\sigma_{2y},\sigma_{1y}\sigma_{2x}),\quad (\sigma_{1z}\sigma_{2x},\sigma_{1x}\sigma_{2z},\sigma_{1y}\sigma_{2y})\end{aligned} \tag{1}$$

试扼要说明这些算符组的构造特点，对易性的由来. 对各组的 3 个算符，列出其本征值的可能组合，求相应的共同本征矢.

解　单粒子 Pauli 算符 $\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z$ 互相反对易. 从上述 9 种二体算符中任取两个，如果其中单粒子算符有相同的（如 $\sigma_{1x}\sigma_{2y},\sigma_{1x}\sigma_{2x}$），则二者反对易；如果单粒子算符互不相同（如 $\sigma_{1x}\sigma_{2y},\sigma_{1z}\sigma_{2z}$），则二者对易. 所以，如 3 个二体算符互相对易，它们必然是由全部 6 种单体 Pauli 算符构造而成. 式(1)中 6 个二体算符组都是这种结构，所以各组中 3 个算符互相对易. 单体 Pauli 算符有关系

$$\sigma_\alpha\sigma_\beta\sigma_\gamma=\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\quad(\alpha、\beta、\gamma\text{ 互不相同})$$

所以各组中 3 个算符连乘，结果必为±1. 式(1)左边 3 组，为−1，例如

$$(\sigma_{1x}\sigma_{2y})(\sigma_{1y}\sigma_{2z})(\sigma_{1z}\sigma_{2x})=(\sigma_{1x}\sigma_{1y}\sigma_{1z})(\sigma_{2y}\sigma_{2z}\sigma_{2x})=\mathrm{i}\cdot\mathrm{i}=-1$$

右边 3 组，为 1. 因此各组中 3 个算符并不完全函数独立，但任取其中两个就可以构成体系自旋力学量完全集，它们的共同本征态必然也是第三个算符的本征态. 各组 3 个算符的共同本征矢都是完备的，都可以作为 Bell 基，它们都是这个二粒子体系的自旋纠缠态.

利用上题已经得到的结果,稍加思考,就可以求出式(1)中各算符组的本征态和本征值.结果如下.

Bell 基常见表示式	$\sigma_{1z}\sigma_{2z}$	$\sigma_{1x}\sigma_{2x}$	$\sigma_{1y}\sigma_{2y}$
$\frac{1}{\sqrt{2}}(\|\uparrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2-\|\downarrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2)$	−1	−1	−1
$\frac{1}{\sqrt{2}}(\|\uparrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2+\|\downarrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2)$	−1	1	1
$\frac{1}{\sqrt{2}}(\|\uparrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2-\|\downarrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2)$	1	−1	1
$\frac{1}{\sqrt{2}}(\|\uparrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2+\|\downarrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2)$	1	1	−1

	$\sigma_{1x}\sigma_{2y}$	$\sigma_{1y}\sigma_{2z}$	$\sigma_{1z}\sigma_{2x}$
$\frac{1}{2}(\|\uparrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2-\mathrm{i}\|\downarrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2-\|\uparrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2-\mathrm{i}\|\downarrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2)$	−1	−1	−1
$\frac{1}{2}(\|\uparrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2-\mathrm{i}\|\downarrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2+\|\uparrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2+\mathrm{i}\|\downarrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2)$	−1	1	1
$\frac{1}{2}(\|\uparrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2+\mathrm{i}\|\downarrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2+\|\uparrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2-\mathrm{i}\|\downarrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2)$	1	−1	1
$\frac{1}{2}(\|\uparrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2+\mathrm{i}\|\downarrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2+\|\uparrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2+\mathrm{i}\|\downarrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2)$	1	1	−1

	$\sigma_{1x}\sigma_{2z}$	$\sigma_{1z}\sigma_{2y}$	$\sigma_{1y}\sigma_{2x}$
$\frac{1}{2}(\|\uparrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2-\mathrm{i}\|\downarrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2-\mathrm{i}\|\uparrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2-\|\downarrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2)$	−1	−1	−1
$\frac{1}{2}(\|\uparrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2+\mathrm{i}\|\downarrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2+\mathrm{i}\|\uparrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2-\|\downarrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2)$	−1	1	1
$\frac{1}{2}(\|\uparrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2+\mathrm{i}\|\downarrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2-\mathrm{i}\|\uparrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2+\|\downarrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2)$	1	−1	1
$\frac{1}{2}(\|\uparrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2-\mathrm{i}\|\downarrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2+\mathrm{i}\|\uparrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2+\|\downarrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2)$	1	1	−1

	$\sigma_{1x}\sigma_{2y}$	$\sigma_{1y}\sigma_{2x}$	$\sigma_{1z}\sigma_{2z}$
$\frac{1}{\sqrt{2}}(\|\uparrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2+\mathrm{i}\|\downarrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2)$	−1	1	−1
$\frac{1}{\sqrt{2}}(\|\uparrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2-\mathrm{i}\|\downarrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2)$	−1	−1	1
$\frac{1}{\sqrt{2}}(\|\uparrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2-\mathrm{i}\|\downarrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2)$	1	−1	−1
$\frac{1}{\sqrt{2}}(\|\uparrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2+\mathrm{i}\|\downarrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2)$	1	1	1

	$\sigma_{1x}\sigma_{2x}$	$\sigma_{1y}\sigma_{2z}$	$\sigma_{1z}\sigma_{2y}$
$\frac{1}{2}(\|\uparrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2-\|\downarrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2-\mathrm{i}\|\uparrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2+\mathrm{i}\|\downarrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2)$	−1	1	−1
$\frac{1}{2}(\|\uparrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2-\|\downarrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2+\mathrm{i}\|\uparrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2-\mathrm{i}\|\downarrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2)$	−1	−1	1
$\frac{1}{2}(\|\uparrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2+\|\downarrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2-\mathrm{i}\|\uparrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2-\mathrm{i}\|\downarrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2)$	1	−1	−1
$\frac{1}{2}(\|\uparrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2+\|\downarrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2+\mathrm{i}\|\uparrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2+\mathrm{i}\|\downarrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2)$	1	1	1

	$\sigma_{1y}\sigma_{2y}$	$\sigma_{1z}\sigma_{2x}$	$\sigma_{1x}\sigma_{2z}$
$\frac{1}{2}(\|\uparrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2+\|\downarrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2+\|\uparrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2-\|\downarrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2)$	−1	1	−1
$\frac{1}{2}(\|\uparrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2+\|\downarrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2-\|\uparrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2+\|\downarrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2)$	−1	−1	1
$\frac{1}{2}(\|\uparrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2-\|\downarrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2-\|\uparrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2-\|\downarrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2)$	1	−1	−1
$\frac{1}{2}(\|\uparrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2-\|\downarrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2+\|\uparrow\rangle_1\|\downarrow\rangle_2+\|\downarrow\rangle_1\|\uparrow\rangle_2)$	1	1	1

6.70　对于两个自旋 1/2 粒子体系，下列 4 种自旋纠缠态称为 Bell 基，它们都是$(\sigma_{1z}\sigma_{2z},\sigma_{1x}\sigma_{2x},\sigma_{1y}\sigma_{2y})$的共同本征态.

$$\chi_{00}=\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2-|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2)=|\psi^-\rangle_{12}$$

$$\chi_{10}=\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2+|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2)=|\psi^+\rangle_{12}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{11}-\chi_{1-1})=\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2-|\downarrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2)=|\phi^-\rangle_{12}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{11}+\chi_{1-1})=\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2+|\downarrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2)=|\phi^+\rangle_{12}$$

试找出使它们相互转化的二体算符.

解　思路与 6.68 题相同，结果则比较简单，如下表.

算　符	初　态	终　态	算　符	初　态	终　态
$\mathrm{i}\sigma_{1x}\sigma_{2y}$	$\|\psi^-\rangle_{12}$	$\|\psi^+\rangle_{12}$	$-\mathrm{i}\sigma_{1x}\sigma_{2y}$	$\|\psi^+\rangle_{12}$	$\|\psi^-\rangle_{12}$
$-\mathrm{i}\sigma_{1y}\sigma_{2z}$	$\|\psi^-\rangle_{12}$	$\|\phi^-\rangle_{12}$	$\mathrm{i}\sigma_{1y}\sigma_{2z}$	$\|\phi^-\rangle_{12}$	$\|\psi^-\rangle_{12}$
$\sigma_{1z}\sigma_{2x}$	$\|\psi^-\rangle_{12}$	$\|\phi^+\rangle_{12}$	$\sigma_{1z}\sigma_{2x}$	$\|\phi^+\rangle_{12}$	$\|\psi^-\rangle_{12}$
$\sigma_{1z}\sigma_{2x}$	$\|\psi^+\rangle_{12}$	$\|\phi^-\rangle_{12}$	$\sigma_{1z}\sigma_{2x}$	$\|\phi^-\rangle_{12}$	$\|\psi^+\rangle_{12}$
$\mathrm{i}\sigma_{1z}\sigma_{2y}$	$\|\psi^+\rangle_{12}$	$\|\phi^+\rangle_{12}$	$-\mathrm{i}\sigma_{1z}\sigma_{2y}$	$\|\phi^+\rangle_{12}$	$\|\psi^+\rangle_{12}$
$-\mathrm{i}\sigma_{1x}\sigma_{2y}$	$\|\phi^-\rangle_{12}$	$\|\phi^+\rangle_{12}$	$\mathrm{i}\sigma_{1x}\sigma_{2y}$	$\|\phi^+\rangle_{12}$	$\|\phi^-\rangle_{12}$

注意,对于粒子 1,2 的交换,$|\psi^-\rangle_{12}$(即χ_{00})是反对称的,其他三者都是对称的,因为χ_{10},χ_{11},χ_{1-1}都是交换对称的. 表中各行中左、右两个算符互为对方的逆算符.

6.71 对于二电子体系总自旋($\boldsymbol{S}^2$,S_z)的共同本征态χ_{11},χ_{10},χ_{1-1},χ_{00},找出使它们相互转化的二体算符.

解 自旋态的记号同 6.68 题. 本题讨论的 4 种体系自旋态为

$$\chi_{11}=\alpha(1)\alpha(2) \quad \text{即} \quad |\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2$$

$$\chi_{1-1}=\beta(1)\beta(2) \quad \text{即} \quad |\downarrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2$$

$$\chi_{10}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)+\beta(1)\alpha(2)] \quad \text{即} \quad \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2+|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2]$$

$$\chi_{00}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)] \quad \text{即} \quad \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2-|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2]$$

使χ_{11}或χ_{1-1}向其他态转化的算符,利用 6.68 题式(2)即可迅速写出. 使χ_{10}和χ_{00}向其他态转化的算符,要多加思考才能找到. 较简单的结果如下表.

算 符	初 态	终 态	算 符	初 态	终 态
$\sigma_{1x}\sigma_{2x}$	χ_{11}	χ_{1-1}	$\sigma_{1x}\sigma_{2x}$	χ_{1-1}	χ_{11}
$\frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_{1x}\sigma_{2x}+\sigma_{1x}\sigma_{2z})$	χ_{11}	χ_{10}	$\frac{1}{\sqrt{2}}\sigma_{1z}(\sigma_{2x}+\mathrm{i}\sigma_{2y})$	χ_{10}	χ_{11}
$\frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_{1x}\sigma_{2x}-\sigma_{1x}\sigma_{2z})$	χ_{11}	χ_{00}	$\frac{1}{\sqrt{2}}\sigma_{1z}(\sigma_{2x}+\mathrm{i}\sigma_{2y})$	χ_{00}	χ_{11}
$-\frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_{1x}\sigma_{2z}+\sigma_{1z}\sigma_{2x})$	χ_{1-1}	χ_{10}	$-\frac{1}{\sqrt{2}}\sigma_{1z}(\sigma_{2x}-\mathrm{i}\sigma_{2y})$	χ_{10}	χ_{1-1}
$\frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_{1x}\sigma_{2x}-\sigma_{1x}\sigma_{2z})$	χ_{1-1}	χ_{00}	$\frac{1}{\sqrt{2}}\sigma_{1z}(\sigma_{2x}-\mathrm{i}\sigma_{2y})$	χ_{00}	χ_{1-1}
$\mathrm{i}\sigma_{1y}\sigma_{2x}$	χ_{10}	χ_{00}	$-\mathrm{i}\sigma_{1y}\sigma_{2x}$	χ_{00}	χ_{10}

注意,表中 2～5 行中的算符均不存在逆算符.

第七章　磁场中粒子的运动

7.1　质量为 μ，电荷为 q 的非相对论性粒子在电磁场中运动时，Hamilton 算符为

$$H=\frac{1}{2\mu}\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+q\phi \tag{1}$$

其中 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$和 $\phi(\boldsymbol{r},t)$是电磁场的矢势和标势，$\boldsymbol{p}$ 是正则动量算符，

$$\boldsymbol{p}=-\mathrm{i}\hbar\nabla \tag{2}$$

定义速度算符

$$\boldsymbol{v}=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{r},\hat{H}] \tag{3}$$

求$\boldsymbol{v}$ 的具体表示式以及$\boldsymbol{v}$ 各分量间的对易式.

解　以$\boldsymbol{v}$ 的一个分量为例，

$$v_x=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[x,H]=\frac{1}{2\mathrm{i}\hbar\mu}\left[x,\left(\mathbf{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\right]$$

$$=\frac{1}{2\mathrm{i}\hbar\mu}\left\{\left[x,\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right]\cdot\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)+\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\cdot\left[x,\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right]\right\}$$

x 和$\boldsymbol{A}$ 对易. 利用基本对易式

$$[x_\alpha,p_\beta]=\mathrm{i}\hbar\delta_{\alpha\beta}$$

即得

$$v_x=\frac{1}{\mu}\left(p_x-\frac{q}{c}A_x\right)$$

$$\boxed{\boldsymbol{v}=\frac{1}{\mu}\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)} \tag{4}$$

计算$\boldsymbol{v}$ 各分量间对易式时，可利用公式

$$[\boldsymbol{p},F(\boldsymbol{r})]=-\mathrm{i}\hbar\nabla F(\boldsymbol{r})$$

易得

$$[v_x,v_y]=-\frac{q}{\mu^2c}\{[p_x,A_y]+[A_x,p_y]\}$$

$$= \frac{\mathrm{i}\hbar q}{\mu^2 c}\left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}\right) = \frac{\mathrm{i}\hbar q}{\mu^2 c}(\nabla \times \boldsymbol{A})_z = \frac{\mathrm{i}\hbar q}{\mu^2 c}B_z \tag{5}$$

写成矢量形式,就是

$$\boxed{\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{v} = \mathrm{i}\hbar \frac{q}{\mu^2 c}\boldsymbol{B}} \tag{6}$$

其中 $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$ 是磁场. 利用上式,容易证明

$$[\boldsymbol{v}, \boldsymbol{v}^2] = \mathrm{i}\hbar \frac{q}{\mu^2 c}(\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B} - \boldsymbol{B} \times \boldsymbol{v}) \tag{7}$$

7.2 质量 μ,电荷 q 的粒子在磁场 $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$ 中运动,定义机械角动量算符

$$\boldsymbol{L} = \mu \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{v} \tag{1}$$

其中$\boldsymbol{v}$ 为速度算符. 计算 $\mathrm{d}\boldsymbol{v}/\mathrm{d}t$ 和 $\mathrm{d}\boldsymbol{L}/\mathrm{d}t$.

解 Hamilton 算符可以写成

$$H = \frac{1}{2\mu}\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 = \frac{1}{2}\mu \boldsymbol{v}^2 \tag{2}$$

利用上题求得的$\boldsymbol{v}$ 和$\boldsymbol{v}^2$的对易式(7),容易证明

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{v} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{v}, H] = \frac{q}{2\mu c}(\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B} - \boldsymbol{B} \times \boldsymbol{v}) \tag{3}$$

在经典电动力学中,Lorentz 力为

$$\boldsymbol{f} = \frac{q}{c}\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B}$$

运动方程为

$$\mu \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{v} = \boldsymbol{f} = \frac{q}{c}\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B} \tag{3'}$$

式(3)是经典运动方程(3′)的量子力学推广. 式(3)中,

$$\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B} = \frac{1}{\mu}\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right) \times \boldsymbol{B} = -\boldsymbol{B} \times \boldsymbol{v} - \frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu}\nabla \times \boldsymbol{B} \tag{4}$$

由电动力学,

$$\nabla \times \boldsymbol{B} = \frac{4\pi}{c}\boldsymbol{j}$$

$\boldsymbol{j}$ 为产生磁场的源电流. 因此,如在粒子运动的空间,源电流 $\boldsymbol{j}=0$,就有

$$\frac{q}{c}\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}=-\frac{q}{c}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v}=\boldsymbol{f} \tag{5}$$

这时式(3)仍可写成式(3′).对于均匀场,很明显式(3)和(3′)是等价的.

机械角动量也可以写成

$$\boldsymbol{L}=\mu\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{v}=\frac{1}{2}\mu(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{v}-\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{r}) \tag{1′}$$

(注意在 $\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{v}$ 中,$\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 的有关分量是对易的.)$\boldsymbol{L}$ 的时间微商为

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{L}}{\mathrm{d}t}=\frac{\mu}{2}\left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\times\boldsymbol{v}+\boldsymbol{r}\times\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}-\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}\times\boldsymbol{r}-\boldsymbol{v}\times\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\right)$$

利用式(3)及 $\mathrm{d}\boldsymbol{r}/\mathrm{d}t=\boldsymbol{v}$,即得

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{L}}{\mathrm{d}t}=\frac{q}{4c}[\boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B})+(\boldsymbol{B}\times v)\times\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v})-(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B})\times\boldsymbol{r}] \tag{6}$$

在式(5)成立的条件下,式(6)可以简化成

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{L}}{\mathrm{d}t}=\frac{q}{2c}[\boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B})+(\boldsymbol{B}\times v)\times\boldsymbol{r}]=\frac{1}{2}(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{f}-\boldsymbol{f}\times\boldsymbol{r}) \tag{7}$$

注意,$\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{f}$ 中,$\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{f}$ 的有关分量是不对易的,$\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{f}\neq-\boldsymbol{f}\times\boldsymbol{r}$,故式(7)右端和 $\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{f}$ 并不等价.

7.3　质量 μ,电荷 q 的粒子,在沿 z 轴方向的均匀磁场 B 作用下,在 xy 平面内运动($p_z=0$).定义"轨道中心算符"

$$\begin{aligned}\hat{x}_0&=x+\frac{1}{\omega}\hat{v}_y\\ \hat{y}_0&=y-\frac{1}{\omega}\hat{v}_x\end{aligned} \tag{1}$$

其中 $\omega=qB/\mu c$.试说明 x_0、y_0 的经典力学意义,并证明它们是运动常数.

解　在经典力学中,粒子受 Lorentz 力作用,将作匀速圆周运动,如图所示($q>0$).设 $\boldsymbol{r}_0(x_0,y_0)$ 为轨道中心,则轨道半径为($\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0$),角速度和速度为

$$\boldsymbol{\omega}=(0,0,-\omega),\quad \boldsymbol{v}=\boldsymbol{\omega}\times(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)$$

因此

$$\begin{aligned}v_x&=\omega_y(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)_z-\omega_z(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)_y=\omega(y-y_0)\\ v_y&=\omega_z(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)_x-\omega_x(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)_z=-\omega(x-x_0)\end{aligned}$$

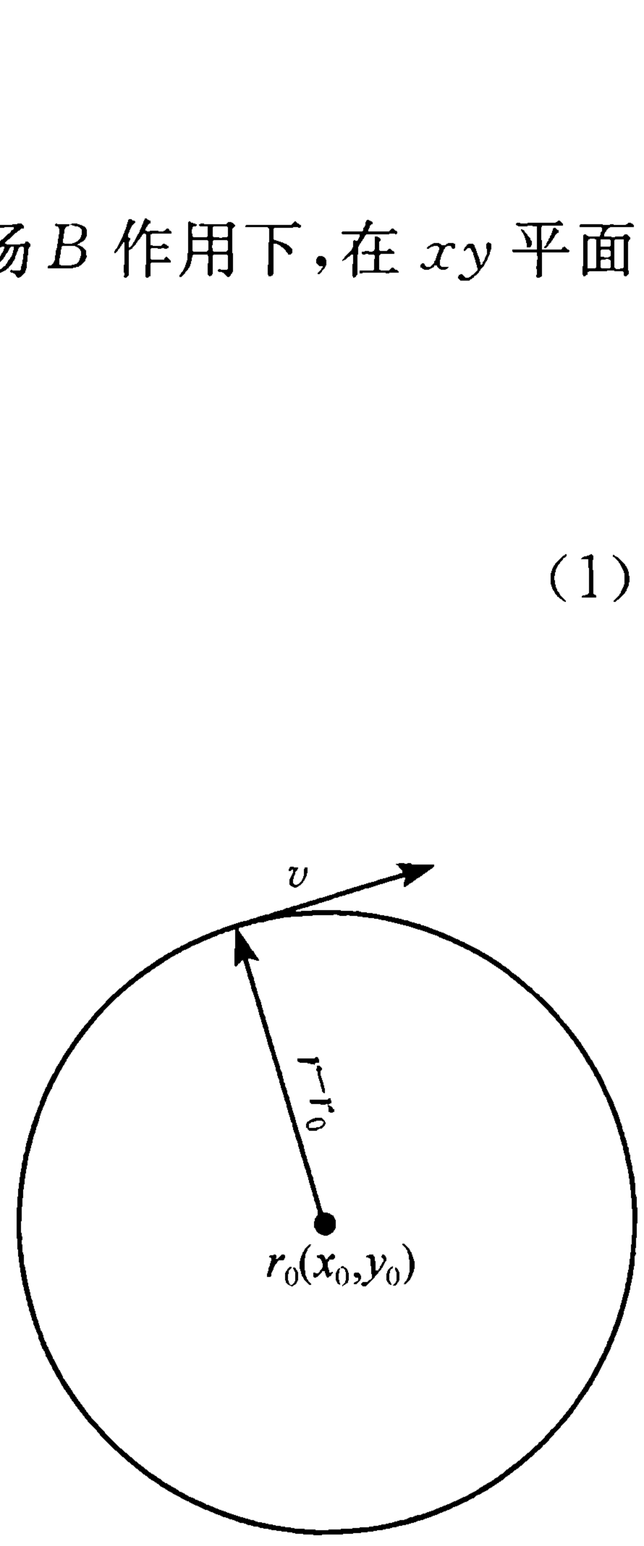


图 7.3

亦即

$$x_0 = x + \frac{1}{\omega} v_y, \quad y_0 = y - \frac{1}{\omega} v_x \tag{1'}$$

将v换成算符,即得式(1).ω的构造式可以利用"Lorentz 力等于向心力"这个条件导出,从略.

根据题 7.1 和 7.2 的计算.有下列对易式:

$$[x, \hat{v}_x] = \left[x, \frac{1}{\mu}\left(p_x - \frac{q}{c}A_x\right)\right] = \frac{1}{\mu}[x, p_x] = \frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu}$$

$$[y, \hat{v}_y] = \frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu} \tag{2}$$

$$[x, \hat{v}_y] = [y, \hat{v}_x] = 0$$

$$[\hat{v}_z, \hat{v}_y] = \mathrm{i}\hbar \frac{q}{\mu^2 c} B_z = \frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu} \frac{qB}{\mu c} = \frac{\mathrm{i}\hbar\omega}{\mu} \tag{3}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{\boldsymbol{v}} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{\boldsymbol{v}}, H] = \frac{q}{\mu c}\hat{\boldsymbol{v}} \times \boldsymbol{B} \tag{4}$$

因此

$$[\hat{x}_0, \hat{y}_0] = \frac{1}{\omega}[\hat{v}_y, y] - \frac{1}{\omega}[x, \hat{v}_x] - \frac{1}{\omega^2}[\hat{v}_y, \hat{v}_x] = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu\omega} \tag{5}$$

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{x}_0 &= \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} + \frac{1}{\omega}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{v}_y = \hat{v}_x + \frac{q}{\mu c\omega}(\hat{\boldsymbol{v}} \times \boldsymbol{B})_y \\ &= \hat{v}_x + \frac{1}{B}(\hat{\boldsymbol{v}} \times \boldsymbol{B})_y = \hat{v}_x - \hat{v}_x = 0 \end{aligned} \tag{6}$$

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{y}_0 &= \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} - \frac{1}{\omega}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{v}_x = \hat{v}_y - \frac{1}{B}(\hat{\boldsymbol{v}} \times \boldsymbol{B})_x \\ &= \hat{v}_y - \hat{v}_y = 0 \end{aligned} \tag{7}$$

式(6)和(7)表明,轨道中心算符 $\hat{x}_0$ 和 $\hat{y}_0$ 均为运动常数(守恒量),这一点和经典力学一致.式(5)则表明,$\hat{x}_0$ 和 $\hat{y}_0$ 是不对易的,不能同时取确定值,由不确定度关系

$$\Delta A \cdot \Delta B \geqslant \frac{1}{2}\left|\overline{[A, B]}\right|$$

可知

$$\Delta x_0 \cdot \Delta y_0 \geqslant \frac{\hbar}{2\mu|\omega|} = \frac{\hbar c}{2|q|B} \tag{8}$$

在经典物理学中,轨道中心当然是可以精确确定的.

7.4 关于磁通量量子化①.

① 此题取自 Stephen Gasiorowicz. Quantum Physics. John Wiley & Sons, 1977. 第 13 章题 5.

采用柱坐标(ρ,φ,z)，设磁场$\boldsymbol{B}$仅存在于很小的柱形区域$\rho<a$内，通量为Φ，$\rho>a$处无磁场. 令$a\to 0$，但保持通量Φ不变. (a) 证明矢势可以表示成

$$\boldsymbol{A}=\nabla f,\quad f=\frac{1}{2\pi}\Phi\varphi \tag{1}$$

(b) 讨论机械角动量$L_z=\mu(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{v})_z$的本征值，导出磁通量量子化.

解　(a) 当矢势$\boldsymbol{A}$取式(1)时，在$\rho\neq 0$处，显然有

$$\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}=\nabla\times\nabla f=0 \tag{2}$$

梯度算符的柱坐标表示式为

$$\nabla=\hat{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}+\hat{\varphi}\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\varphi}+\hat{z}\frac{\partial}{\partial z} \tag{3}$$

$\hat{\rho}$、$\hat{\varphi}$、$\hat{z}$分别为ρ、φ、z方向的单位矢量. 由式(1)，得到

$$\boldsymbol{A}=\hat{\varphi}\Phi/2\pi\rho \tag{4}$$

对于任何一个垂直于z轴的圆形截面，均有

$$\begin{aligned}\oiint\boldsymbol{B}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{s}&=\oiint(\nabla\times\boldsymbol{A})\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{s}=\oint\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r}\\&=\frac{1}{2\pi}\Phi\oint\frac{\hat{\varphi}}{\rho}\cdot\rho\,\mathrm{d}\varphi\hat{\varphi}\\&=\frac{1}{2\pi}\Phi\oint\mathrm{d}\varphi=\Phi\end{aligned} \tag{5}$$

Φ为磁通量. 可见表示式(1)是正确的.

(b) 位置矢量$\boldsymbol{r}$的柱坐标表示式为

$$\boldsymbol{r}=\rho\hat{\rho}+z\hat{z} \tag{6}$$

因此

$$\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{A}=\frac{1}{2\pi}\Phi\left(\hat{\rho}\times\hat{\varphi}+\frac{z}{\rho}\hat{z}\times\hat{\varphi}\right)=\frac{1}{2\pi}\Phi\left(\hat{z}-\frac{z}{\rho}\hat{\rho}\right) \tag{7}$$

机械角动量的z分量为

$$\begin{aligned}L_z&=\mu[\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{v}]_z=\left[\boldsymbol{r}\times\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\right]_z\\&=l_z-\frac{q}{c}(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{A})_z=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}-\frac{q}{2\pi c}\boldsymbol{\Phi}\end{aligned} \tag{8}$$

只需波函数满足周期性条件

$$\psi(\rho,\varphi,z)=\psi(\rho,\varphi+2\pi,z)$$

即可保证L_z为厄米算符，从而求得L_z的本征值为

$$L_z = m\hbar - \frac{q}{2\pi c}\Phi. \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots \tag{9}$$

但如选择 $\rho \to 0$ 处 $\psi = 0$,因 $\rho \neq 0$ 处磁场为 0,粒子的运动应不受场的影响,L_z 的本征值谱理应和 l_z 的相同,由此可知式(9)中第二项必为 $\hbar$ 之整数倍,即

$$\frac{q\Phi}{2\pi\hbar c} = n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots \tag{10}$$

这就是磁通量的量子化.

7.5 众所周知,质量 m,电荷 q 的粒子处于状态 $\psi(\boldsymbol{r})$ 时,空间各处的电荷密度及电流密度为

$$\rho(\boldsymbol{r}) = q\psi^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}) \tag{1}$$

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}) = -\frac{\mathrm{i}\hbar q}{2m}[\psi^* \nabla\psi - \psi\nabla\psi^*] \tag{2}$$

今引入电荷密度算符及电流密度算符

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{r}') = q\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \tag{3}$$

$$\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{r}') = \frac{q}{2m}[\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')]\hat{\boldsymbol{p}} + \hat{\boldsymbol{p}}\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')] \tag{4}$$

其中 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 为动量算符,

$$\hat{\boldsymbol{p}} = -\mathrm{i}\hbar\nabla = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}} \tag{5}$$

试解释算符 $\hat{\rho}$ 和 $\hat{\boldsymbol{j}}$ 的意义,并证明它们的平均值就是式(1)和(2). 再将结果推广到有磁场的情形.

解 在量子力学中,"带电粒子"是当作点电荷对待的,因此,当粒子的位置是 $\boldsymbol{r}$ 时,$\boldsymbol{r}'$ 处电荷密度为

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{r}') = q\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')$$

此即式(3)的意义. 如描写粒子状态的归一化波函数为 $\psi(\boldsymbol{r})$,则粒子在 $\boldsymbol{r}$ 附近 $\mathrm{d}\tau$ 体积中出现概率为 $\psi^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\tau$,由此而造成 $\boldsymbol{r}'$ 处平均电荷密度为

$$\langle\hat{\rho}(\boldsymbol{r}')\rangle = \int\psi^*(\boldsymbol{r})q\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\tau = q\psi^*(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}') = \rho(\boldsymbol{r}') \tag{6}$$

将 $\boldsymbol{r}'$ 换成 $\boldsymbol{r}$,即得式(1).

在经典物理中,电流密度等于电荷密度乘速度,即

$$\boldsymbol{j} = \rho\boldsymbol{v} = \frac{1}{m}\rho\boldsymbol{p}$$

换成量子力学算符.并使其成为厄米算符,即得

$$\hat{\boldsymbol{j}}=\frac{1}{2m}(\hat{\rho}\hat{\boldsymbol{p}}+\hat{\boldsymbol{p}}\hat{\rho}) \tag{7}$$

将 $\hat{\rho}$ 具体写出来，就成为式(4).

当粒子处于 $\psi(\boldsymbol{r})$状态，$\boldsymbol{r}'$处平均电流密度为

$$\langle\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{r}')\rangle=\frac{q}{2m}\int\psi^*(\boldsymbol{r})[\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\hat{\boldsymbol{p}}+\hat{\boldsymbol{p}}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')]\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\tau$$

$$=-\frac{\mathrm{i}\hbar q}{2m}\int\psi^*(\boldsymbol{r})[\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\nabla\psi(\boldsymbol{r})+\nabla\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r})]\mathrm{d}\tau \tag{8}$$

其中第一项可以直接积分，第二项可用分部积分法算出，结果为

$$\int\psi^*(\boldsymbol{r})\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\nabla\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\tau=\psi^*(\boldsymbol{r}')\nabla'\psi(\boldsymbol{r}')$$

$$\int\psi^*(\boldsymbol{r})\nabla\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\tau=-\int\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r})\nabla\psi^*(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\tau$$

$$=-\psi(\boldsymbol{r}')\nabla'\psi^*(\boldsymbol{r}')$$

代入式(8)，即得

$$\langle\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{r}')\rangle=-\frac{\mathrm{i}\hbar q}{2m}[\psi^*(\boldsymbol{r}')\nabla'\psi(\boldsymbol{r}')-\psi(\boldsymbol{r}')\nabla'\psi^*(\boldsymbol{r}')] \tag{9}$$

其中

$$\nabla'=\left(\frac{\partial}{\partial x'},\frac{\partial}{\partial y'},\frac{\partial}{\partial z'}\right)$$

式(9)中 $\boldsymbol{r}'$换成 $\boldsymbol{r}$，即得式(2).

以上结果限于势能仅为 $V(\boldsymbol{r})$的情形. 如果存在磁场，则式(4)中 $\boldsymbol{p}/m$ 应换成速度算符 $\boldsymbol{v}$，而成为

$$\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{r}')=\frac{q}{2m}\left[\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)+\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\right] \tag{10}$$

在 $\psi(\boldsymbol{r})$态中的平均值为(结果中 $\boldsymbol{r}'$换成 $\boldsymbol{r}$)

$$\langle\hat{\boldsymbol{j}}\rangle=-\frac{\mathrm{i}\hbar q}{2m}[\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*]-\frac{q^2}{mc}\boldsymbol{A}\psi^*\psi \tag{11}$$

电荷密度算符及其平均值仍由式(3)及(1)表示.

7.6　质量 μ，电荷 q，自旋为 0 的非相对论性粒子，在均匀磁场 $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$ 中运动，求能量本征值.

解　以磁场 $\boldsymbol{B}$ 的方向为 z 轴，并取

$$\boldsymbol{A}=\frac{1}{2}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r}=\left(-\frac{B}{2}y,\frac{B}{2}x,0\right) \tag{1}$$

Hamilton 算符为

$$H=\frac{1}{2\mu}\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2=\frac{\mu}{2}\boldsymbol{v}^2 \tag{2}$$

其中

$$\boldsymbol{v}=\frac{1}{\mu}\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right) \tag{3}$$

是速度算符. 容易求出$\boldsymbol{v}$的各分量间的对易式为

$$\begin{aligned}[v_x,v_y]&=-\frac{q}{\mu^2c}([p_x,A_y]+[A_x,p_y])\\&=\mathrm{i}\frac{\hbar q}{\mu^2c}\left(\frac{\partial A_y}{\partial x}-\frac{\partial A_x}{\partial y}\right)=\mathrm{i}\frac{\hbar qB}{\mu^2c}\end{aligned} \tag{4}$$

$$[v_x,v_z]=0,\quad [v_y,v_z]=0$$

如$q>0$,令

$$Q=\left(\frac{\mu^2c}{\hbar\,|q|\,B}\right)^{\frac{1}{2}}v_x,\quad P=\left(\frac{\mu^2c}{\hbar\,|q|\,B}\right)^{\frac{1}{2}}v_y \tag{5}$$

(如$q<0$,则Q、P的定义互换.)显然就有关系

$$[Q,P]=\mathrm{i} \tag{6}$$

而 Hamilton 算符则可以写成

$$H=\frac{\hbar\,|\,q\,|\,B}{2\mu c}(Q^2+P^2)+\frac{1}{2\mu}p_z^2=\frac{1}{2}\hbar\omega(Q^2+P^2)+\frac{1}{2\mu}p_z^2 \tag{7}$$

其中$\omega=|q|B/(\mu c)$,$\omega/2$即经典 Larmor 频率. p_z(即μv_z)和Q,P对易. 式(7)中第一项以及对易式(6)和一维谐振子完全类似(参看题 3.1),其本征值为

$$\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\quad n=0,1,2,\cdots \tag{8}$$

p_z的本征值则可以连续变化,$-\infty<p_z<\infty$. 因此,总能量本征值为

$$\boxed{\begin{aligned}&E=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega+\frac{1}{2\mu}p_z^2\\&n=0,1,2,\cdots,\quad -\infty<p_z<\infty\\&\omega=\frac{|q|\,B}{\mu c}\end{aligned}} \tag{9}$$

7.7　用柱坐标系(ρ,φ,z)具体求解上题.

解　柱坐标系中变量ρ、φ的定义和平面极坐标系相同，z的定义和直角坐标系相同. Laplace 算符的表示式为

$$\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}=\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\tag{1}$$

Hamilton 算符为

$$H=\frac{1}{2\mu}\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}+\frac{q^2}{2\mu c^2}\boldsymbol{A}^2-\frac{q}{2\mu c}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p})\tag{2}$$

取

$$\begin{gathered}\boldsymbol{A}=\frac{1}{2}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r}\\ \left(A_x=-\frac{B}{2}y,\quad A_y=\frac{B}{2}x,\quad A_z=0\right)\end{gathered}\tag{3}$$

则

$$\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}=2\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}=B(xp_y-yp_x)=Bl_z\tag{4}$$

$$\boldsymbol{A}^2=\frac{1}{4}B^2(x^2+y^2)\tag{5}$$

式(2)可以写成

$$\boxed{\begin{aligned}H&=\frac{1}{2\mu}(p_x^2+p_y^2)+\frac{q^2B^2}{8\mu c^2}(x^2+y^2)-\frac{qB}{2\mu c}l_z+\frac{p_z^2}{2\mu}\\&=H_0-\omega_{\mathrm{L}}l_z+\frac{1}{2\mu}p_z^2\end{aligned}}\tag{6}$$

其中

$$\omega_{\mathrm{L}}=\frac{qB}{2\mu c}\quad(\text{Larmor 频率})\tag{7}$$

$$L_z=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi},\quad p_z=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

$$\begin{aligned}H_0&=\frac{1}{2\mu}(p_x^2+p_y^2)+\frac{q^2B^2}{8\mu c^2}(x^2+y^2)\\&=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)+\frac{1}{2}\mu\omega_{\mathrm{L}}^2\rho^2\end{aligned}\tag{8}$$

注意：H_0即二维各向同性谐振子的能量算符，H_0、l_z、p_z互相对易. 它们的共同本征态也就是H的本征态，因此H的本征函数和本征值为

$$\psi_{nmk}=\rho^{|m|}F(-n,|m|+1,\alpha^2\rho^2)\mathrm{e}^{-\alpha^2\rho^2/2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}\tag{9}$$

$$\boxed{\begin{aligned} E_{nmk} &= (2n+1+|m|)\hbar|\omega_L| - m\hbar\omega_L + \frac{\hbar^2k^2}{2\mu} \\ &= (2n+1+|m|\mp m)\frac{\hbar B|q|}{2\mu c} + \frac{\hbar^2k^2}{2\mu} \end{aligned}} \tag{10}$$

其中

$$n = 0,1,2,\cdots, \quad m = 0,\pm1,\pm2,\cdots, \quad -\infty < k < \infty$$

$$\alpha^2 = \frac{\mu|\omega_L|}{\hbar} = \frac{|q|B}{2\hbar c}$$

式(9)中 e^{ikz} 是 p_z 的本征函数($p_z=\hbar k$),$e^{im\varphi}$ 是 l_z 的本征函数($l_z=m\hbar$). 式(10)第一项中,$q>0$ 时取"−"号,$q<0$ 时取"+"号. 式(9)和(10)称为 Laudau 波函数和 Laudau 能级. 本题中 $|\omega_L|$ 相当于上题中 $\omega/2$,本题中 $(2n+|m|\mp m)$ 相当于上题中 $2n$.

7.8 质量 μ、电荷 q、固有频率 ω_0 的三维各向同性谐振子置于均匀外磁场 $\boldsymbol{B}$ 中,求能级公式.

解 和前两题相比,本题 Hamilton 量中应该再添加一项谐振子势能 $\frac{1}{2}\mu\omega_0^2(x^2+y^2+z^2)$,因此

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2\mu}\boldsymbol{p}^2 + \frac{1}{2}\mu\omega_0^2(x^2+y^2+z^2) + \frac{q^2B^2}{8\mu c^2}(x^2+y^2) - \frac{qB}{2\mu c}l_z \\ &= H_1 + H_2 - \omega_L l_z \end{aligned} \tag{1}$$

其中

$$H_1 = \frac{1}{2\mu}p_z^2 + \frac{1}{2}\mu\omega_0^2 z^2$$

$$H_2 = \frac{1}{2\mu}(p_x^2+p_y^2) + \frac{1}{2}\mu(\omega_0^2+\omega_L^2)(x^2+y^2) \tag{2}$$

$$\omega_L = \frac{qB}{2\mu c}$$

H_1、H_2、l_z 是互相对易的守恒量,可以选为守恒量完全集. H_1 相当于一维谐振子的能量算符,其本征值为

$$E_{n_1} = \left(n_1+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0, \quad n_1 = 0,1,2,\cdots \tag{3}$$

H_2 相当于二维各向同性谐振子的总能量算符,其本征值为

$$E_{n_2 m} = (2n_2 + 1 + |\ m\ |)\hbar\omega$$
$$n_2 = 0,1,2,\cdots,\quad m = 0,\pm 1,\pm 2,\cdots \tag{4}$$

其中

$$\omega = \sqrt{\omega_0^2 + \omega_L^2} \tag{5}$$

l_z 的本征值为 $m\hbar$. 因此，本题能级为

$$\boxed{E_{n_1 n_2 m} = \left(n_1 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0 + (2n_2 + 1 + |\ m\ |)\hbar\omega - m\hbar\omega_L} \tag{6}$$

注意：ω_L 可正可负，视电荷 q 之正负而定；磁量子数 m 也可正可负. 因此 q 之正、负对总的能谱并无影响. 为确切起见，以下只讨论 $q>0(\omega_L>0)$ 的情形.

三种频率 ω_0、ω_L、ω 有如下关系：

$$0 < (\omega - \omega_L) < \omega_0 \tag{7}$$

能级和各量子数的依赖关系为(按能级变化量的大小次序排列)

$m \geqslant 0$，　m 增加 1，　　E 增加 $\hbar(\omega - \omega_L)$

　　n_1 增加 1，　　E 增加 $\hbar\omega_0$

$m \leqslant 0$，　$|\ m\ |$ 增加 1，　E 增加 $\hbar(\omega + \omega_L)$

　　n_2 增加 1，　　E 增加 $2\hbar\omega$

基态 E_0，显然 n_1、n_2、$|m|$ 均取最小值，

$$E_0 = E_{000} = \frac{1}{2}\hbar\omega_0 + \hbar\omega \tag{8}$$

第一激发态 E_1，$n_1 = n_2 = 0$，$m = 1$，

$$E_1 = E_{001} = \frac{1}{2}\hbar\omega_0 + 2\hbar\omega - \hbar\omega_L = E_0 + \hbar(\omega - \omega_L) \tag{9}$$

7.9　质量 μ、电荷 q 的粒子在方向互相垂直的均匀电场 $\boldsymbol{\mathscr{E}}$ 和均匀磁场 $\boldsymbol{B}$ 中运动，求能级和能量本征函数.

解　以电场方向为 x 轴，磁场方向为 z 轴，则

$$\boldsymbol{\mathscr{E}} = (\mathscr{E},0,0),\quad \boldsymbol{B} = (0,0,B) \tag{1}$$

取电磁场的标势和矢势为

$$\phi = -\mathscr{E}x,\quad \boldsymbol{A} = (0,Bx,0) \tag{2}$$

满足关系

$$\boldsymbol{\mathscr{E}} = -\nabla\phi,\quad \boldsymbol{B} = \nabla\times\boldsymbol{A}$$

粒子的 Hamilton 量为

$$H=\frac{1}{2\mu}\left[p_x^2+\left(p_y-\frac{qB}{c}x\right)^2+p_z^2\right]-q\mathscr{E}x \tag{3}$$

取守恒量完全集为(H,p_y,p_z),它们的共同本征函数可以写成

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

其中 p_y 和 p_z 为本征值,可取任意实数.

$\psi(x,y,z)$满足能量本征方程

$$H\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z)$$

因此 $\psi(x)$满足方程

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

亦即,对于 $\psi(x)$来说,H 和下式等阶:

$$\begin{aligned}H\Rightarrow&-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{q^2B^2}{2\mu c^2}x^2-\left(q\mathscr{E}+\frac{qB}{\mu c}p_y\right)x+\frac{1}{2\mu}(p_y^2+p_x^2)\\=&-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{q^2B^2}{2\mu c^2}(x-x_0)^2-\frac{q^2B^2}{2\mu c^2}x_0^2+\frac{1}{2\mu}(p_y^2+p_z^2)\end{aligned} \tag{6}$$

其中

$$x_0=\frac{\mu c^2}{q^2B^2}\left(q\mathscr{E}+\frac{qB}{\mu c}p_y\right)=\frac{\mu c}{qB}\left(\frac{c\mathscr{E}}{B}+\frac{p_y}{\mu}\right) \tag{7}$$

式(6)相当于一维谐振子能量算符

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2(x-x_0)^2,\quad \omega=\frac{|q|B}{\mu c}$$

再加上两项常数.因此,本题能级为

$$\begin{aligned}E=&\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega-\frac{q^2B^2}{2\mu c^2}x_0^2+\frac{1}{2\mu}(p_y^2+p_z^2)\\=&\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar B|q|}{\mu c}-\frac{c^2\mathscr{E}^2\mu}{2B^2}-\frac{c\mathscr{E}}{B}p_y+\frac{1}{2\mu}p_z^2\end{aligned} \tag{8}$$

其中 p_y、p_z 为任意实数,$n=0,1,2,\cdots$.

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

$$\psi(x)=\psi_n(x-x_0)=H_n(\xi)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2} \tag{9}$$

$H_n(\xi)$是 Hermite 多项式,$\xi=\left(\frac{|q|B}{\hbar c}\right)^{\frac{1}{2}}(x-x_0)$.

第八章　Hellmann 定理

8.1　设量子体系的束缚态能级和归一化能量本征态分别为 E_n 和 ψ_n（n 为量子数或编号数），设 λ 为 Hamilton 算符 H 含有的任何一个参数. 证明

$$\boxed{\frac{\partial E_n}{\partial \lambda}=\left\langle \psi_n \left| \frac{\partial H}{\partial \lambda} \right| \psi_n \right\rangle} \tag{1}$$

这称为 Hellmann 定理①.

证　ψ_n 满足能量本征方程

$$(H-E_n)\mid \psi_n\rangle = 0 \tag{2}$$

其共轭方程为

$$\langle \psi_n \mid (H-E_n) = 0 \tag{2'}$$

视 λ 为参变量，式(2)对 λ 求导，得到

$$\left(\frac{\partial H}{\partial \lambda}-\frac{\partial E_n}{\partial \lambda}\right)\mid \psi_n\rangle + (H-E_n)\frac{\partial}{\partial \lambda}\mid \psi_n\rangle = 0 \tag{3}$$

以 $\langle \psi_n \mid$ 左乘式(3)，利用式(2′)和归一化条件 $\langle \psi_n \mid \psi_n\rangle = 1$，即得式(1).

8.2　设 Hamilton 算符为

$$H=\frac{1}{2\mu}\boldsymbol{p}^2+V(\boldsymbol{r}) \tag{1}$$

设 ψ_n 为归一化的束缚态波函数，证明

$$\boxed{\left\langle \psi_n \left| \frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu} \right| \psi_n \right\rangle = \frac{1}{2}\langle \psi_n \mid \boldsymbol{r}\cdot\nabla V(\boldsymbol{r}) \mid \psi_n\rangle} \tag{2}$$

这称为位力定理. 讨论 $V(\boldsymbol{r})$ 是 (x,y,z) 的 ν 次齐次函数的情形.

证一　在 $\boldsymbol{r}$ 表象中，H 表示成

$$H=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(\boldsymbol{r}) \tag{1a}$$

---

① H. Hellmann. *Acta Physicochimica URSS* I, 1935, **6**: 913; IV, 1936, **2**: 225; R. F. Feynman. *Phys. Rev.*, 1939, **56**: 340. 总结性文章，可参看 C. Quigg and J. L. Rosner. *Physics Reports*, 1979, **56**: 167～235.

视 $\hbar$ 为参变量,则

$$\frac{\partial H}{\partial \hbar}=-\frac{\hbar}{\mu}\nabla^2=\frac{2}{\hbar}\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}$$

根据 Hellmann 定理,就有

$$\frac{\partial E_n}{\partial \hbar}=\left\langle \psi_n\left|\frac{\partial H}{\partial \hbar}\right|\psi_n\right\rangle=\frac{2}{\hbar}\left\langle \psi_n\left|\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}\right|\psi_n\right\rangle \tag{3}$$

在 $\boldsymbol{p}$ 表象中,H 表示成

$$H=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}+V\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}}\right) \tag{1b}$$

其中

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}}=\boldsymbol{r} \tag{4}$$

这时可得

$$\frac{\partial H}{\partial \hbar}=\frac{\partial V}{\partial \hbar}=\frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial \hbar}\cdot\frac{\partial V}{\partial \boldsymbol{r}}=\frac{\boldsymbol{r}}{\hbar}\cdot\nabla V(\boldsymbol{r}) \tag{5}$$

利用 Hellmann 定理,即得

$$\frac{\partial E_n}{\partial \hbar}=\frac{1}{\hbar}\langle\psi_n\mid \boldsymbol{r}\cdot\nabla V(\boldsymbol{r})\mid\psi_n\rangle \tag{3'}$$

比较式(3)和(3′),即得式(2).

证二 利用 Heisenberg 运动方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}F(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[F,H] \tag{6}$$

在束缚态 ψ_n 下求平均值,显然有

$$\left\langle \psi_n\left|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}F\right|\psi_n\right\rangle=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\psi_n\mid(FH-HF)\mid\psi_n\rangle=0 \tag{7}$$

取 $F=\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}$,则

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{r}\cdot\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t} \tag{8}$$

其中

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{r},H]=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\frac{1}{2\mu}[\boldsymbol{r},\boldsymbol{p}^2]=\frac{\boldsymbol{p}}{\mu} \tag{9}$$

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{p},H]=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{p},V(\boldsymbol{r})]=-\nabla V(\boldsymbol{r}) \tag{10}$$

代入式(8)，即得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})=\frac{\boldsymbol{p}^2}{\mu}-\boldsymbol{r}\cdot\nabla V(\boldsymbol{r}) \tag{8'}$$

对 ψ_n 态求平均值，并利用式(7)，即得式(2).

如 $V(\boldsymbol{r})$是(x,y,z)的 ν 次齐次函数，则

$$\boldsymbol{r}\cdot\nabla V(\boldsymbol{r})=\nu V(\boldsymbol{r}) \tag{11}$$

代入式(2)，即得

$$\boxed{\left\langle\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}\right\rangle_n=\frac{\nu}{2}\langle V\rangle_n} \tag{12}$$

其中〈　〉$_n$ 表示 ψ_n 态下的平均值. 式(12)规定了束缚态下动能平均值和势能平均值的比例关系. 如 E_n 已知，就有

$$\langle T\rangle_n=\left\langle\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}\right\rangle_n=\frac{\nu}{\nu+2}E_n,\quad \langle V\rangle_n=\frac{2}{\nu+2}E_n \tag{13}$$

对于库仑势及 δ 势阱，

$$\nu=-1,\quad \langle T\rangle_n=-E_n,\quad \langle V\rangle_n=2E_n$$

对于谐振子，

$$\nu=2,\quad \langle T_n\rangle=\langle V\rangle_n=\frac{1}{2}E_n$$

8.3　在原子核(电荷 Ze)周围运动的 N 电子体系，忽略自旋和相对论效应后，总能量算符可以写成

$$H=T+V \tag{1}$$

其中

$$T=\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{2\mu}\boldsymbol{p}_i^2,\quad \boldsymbol{p}_i=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}_i} \tag{2}$$

$$V=-Ze^2\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{r_i}+e^2\sum_{i<j}\frac{1}{|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j|} \tag{3}$$

对于体系的任何一个束缚态，证明位力定理：

$$\langle T\rangle=-\frac{1}{2}\langle V\rangle=-E \tag{4}$$

证一　令$(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N)=x_\alpha,\alpha=1,2,\cdots,3N$，动能可以表示成

$$T=\frac{1}{2\mu}\sum_a p_a^2=\frac{1}{2\mu}\sum_a\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x_a}\right)^2 \tag{2'}$$

势能 V 显然满足

$$\sum_a x_a\frac{\partial V}{\partial x_a}=-V \tag{5}$$

即 V 为各 x_a 的 $\nu=(-1)$次齐次函数.

本题和上题之差别,在于自由度从 3 变成 $3N$. 仿照上题,容易证明

$$\langle T\rangle=\frac{1}{2}\left\langle\sum_a x_a\frac{\partial V}{\partial x_a}\right\rangle=-\frac{1}{2}\langle V\rangle \tag{6}$$

由于 $E=(T+V)$,所以

$$\langle T\rangle=-\frac{1}{2}\langle V\rangle=-E \tag{4}$$

证二 设某个束缚态的归一化波函数为

$$\psi(x_a)=\psi(x_1,x_2,\cdots,x_{3N}) \tag{7}$$

引入参变量 λ,考虑归一化的试探波函数

$$\psi(\lambda,x_a)=\lambda^{3N/2}\psi(\lambda x_1,\cdots,\lambda x_{3N})=\lambda^{3N/2}\psi(\lambda x_a)$$

以〈 〉表示 $\psi(x_a)$态下平均值,〈 〉$_\lambda$ 表示 $\psi(\lambda,x_a)$态下平均值,容易求出

$$\begin{aligned}\langle T\rangle_\lambda&=\frac{\lambda^{3N}}{2\mu}\int\psi^*(\lambda x_a)\sum_a\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x_a}\right)^2\psi(\lambda x_a)\mathrm{d}x_1\cdots\mathrm{d}x_{3N}\\&=\frac{\lambda^2}{2\mu}\int\psi^*(\xi_a)\sum_a\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\xi_a}\right)^2\psi(\xi_a)\mathrm{d}\xi_1\cdots\mathrm{d}\xi_{3N}\\&=\lambda^2\langle T\rangle\end{aligned} \tag{8}$$

其中 $\xi_a=\lambda x_a$. 类似地可得

$$\langle V\rangle_\lambda=\lambda\langle V\rangle \tag{9}$$

因此

$$E(\lambda)=\langle T+V\rangle_\lambda=\lambda^2\langle T\rangle+\lambda\langle V\rangle \tag{10}$$

按照变分原理,束缚态能量应该取变分极小值,满足条件

$$\partial E(\lambda)/\partial\lambda=0 \tag{11}$$

由此得到

$$\lambda=-\langle V\rangle/2\langle T\rangle \tag{12}$$

但是,真正的束缚态波函数 $\lambda=1$,以此代入上式,即得

$$\langle T\rangle = -\frac{1}{2}\langle V\rangle = -E \tag{4}$$

8.4　质量为 μ 的粒子在势场 $V_1(x)$ 中运动时，束缚态能级为 $E_n(1)$；在势场 $V_2(x)$ 中运动时，束缚态能级为 $E_n(2)$，$n=1,2,\cdots$ 为能级编号. 设对于任何 x 值，均有

$$V_1(x) \leqslant V_2(x)$$

试证明

$$E_n(1) \leqslant E_n(2)$$

即 V_2 场的各个能级均高于(或等于)V_1 场的相应能级.

证　考虑另一个介于 V_1、V_2 间的势场

$$V(\lambda,x) = (2-\lambda)V_1(x) + (\lambda-1)V_2(x), \quad 1 \leqslant \lambda \leqslant 2 \tag{1}$$

相应的 Hamilton 算符记为

$$H(\lambda,x) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(\lambda,x) \tag{2}$$

能级记为 $E_n(\lambda)$. 注意

$$V(1,x) = V_1(x), \quad V(2,x) = V_2(x)$$

视 λ 为参变量，对 λ 求导，有

$$\frac{\partial H(\lambda,x)}{\partial\lambda} = \frac{\partial V(\lambda,x)}{\partial\lambda} = V_2(x) - V_1(x) \geqslant 0 \tag{3}$$

利用 Hellmann 定理，即得

$$\frac{\partial E_n(\lambda)}{\partial\lambda} \geqslant 0 \tag{4}$$

即 λ 增大时，$E_n(\lambda)$ 只增不减，所以

$$E_n(1) \leqslant E_n(2) \tag{5}$$

8.5　粒子在势场

$$V(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{2}kx^2, & |x| < b \\ \dfrac{1}{2}kb^2, & |x| > b \end{cases} \tag{1}$$

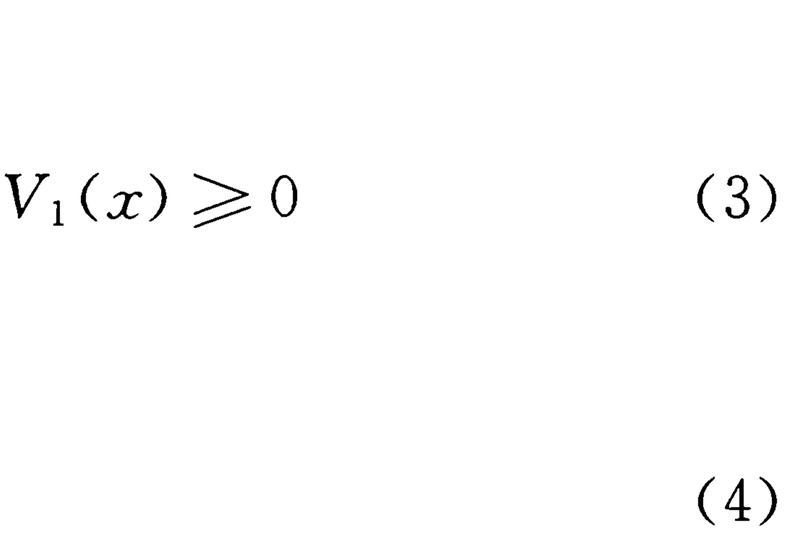


图 8.5

中运动，试粗略估计束缚态能级总数 N 的上、下限. (设 $N \gg 1$)

解 束缚态能量显然不能大于 $V(\pm\infty)$,即

$$E \leqslant \frac{1}{2}kb^2 \tag{2}$$

本题势能介于直角势阱

$$V_1(x) = \begin{cases} 0, & |x| < b \\ \dfrac{1}{2}kb^2, & |x| > b \end{cases} \tag{3}$$

和谐振子势阱

$$V_2(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 \tag{4}$$

之间,即

$$V_1(x) \leqslant V(x) \leqslant V_2(x) \tag{5}$$

根据上题,三种势场造成的能级应取和这相同的高低次序. 因此,在式(2)限制下,三者能级总数应取与此相反的大小次序,亦即

$$N_2 < N < N_1 \tag{6}$$

谐振子势阱 V_2 的能级为

$$E_n(2) = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0,1,2,\cdots \tag{7}$$

能级总数 N_2 由下式决定:

$$\left(N_2 - 1 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \leqslant \frac{1}{2}kb^2$$

作为粗略估计,可取

$$N_2 \approx \frac{kb^2}{2\hbar\omega} = \frac{b^2}{2\hbar}\sqrt{k\mu} \tag{8}$$

根据题 1.4 的计算,直角势阱 V_1 的能级总数约为

$$N_1 \approx \frac{2b^2}{\pi\hbar}\sqrt{k\mu} \tag{9}$$

本题能级总数 N 介于 N_2、N_1 之间,因此

$$\frac{b^2}{2\hbar}\sqrt{k\mu} < N < \frac{2b^2}{\pi\hbar}\sqrt{k\mu} \tag{10}$$

右端(N_1)为上限,左端(N_2)为下限.

8.6 粒子在 Hulthen 势场

$$V(r)=-\frac{V_0}{e^{r/a}-1},\quad V_0a>0 \tag{1}$$

中运动，证明束缚态能级 E_n 满足不等式

$$E_n>-\frac{\mu V_0^2a^2}{2n^2\hbar^2},\quad n=1,2,3,\cdots \tag{2}$$

证　和类氢离子能级公式比较，可以看出式(2)右端正好是 Coulomb 场

$$V_c(r)=-V_0a/r \tag{3}$$

的束缚态能级. 将 $V(r)$和 $V_c(r)$加以比较，易得

$$\begin{aligned}V(r)&=-V_0\Big/\left[\frac{r}{a}+\frac{1}{2!}\left(\frac{r}{a}\right)^2+\cdots\right]\\&=V_c(r)\Big/\left[1+\frac{1}{2!}\frac{r}{a}+\frac{1}{3!}\left(\frac{r}{a}\right)^2+\cdots\right]\end{aligned} \tag{4}$$

上式分母恒大于 1，因此

$$|V(r)|<|V_c(r)|,\quad V(r)>V_c(r) \tag{5}$$

根据题(5.4)，$V(r)$场的每个能级均应高于 $V_c(r)$场的相应能级，故不等式(2)成立.

8.7　粒子作一维运动，当总能量算符为

$$H_0=\frac{p^2}{2m}+V(x) \tag{1}$$

时，能级为 $E_n^{(0)}$. 如总能量算符变成

$$H=H_0+\frac{\lambda p}{m} \tag{2}$$

求能级 E_n.

解一　视 λ 为参变量，则

$$\frac{\partial H}{\partial\lambda}=\frac{p}{m} \tag{3}$$

根据 Hellmann 定理，应有

$$\frac{\partial E_n}{\partial\lambda}=\left\langle\frac{\partial H}{\partial\lambda}\right\rangle_n=\frac{1}{m}\langle p\rangle_n \tag{4}$$

但因

$$\frac{dx}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[x,H]=\frac{1}{i\hbar m}\left[x,\frac{p^2}{2}+\lambda p\right]=\frac{1}{m}(p+\lambda) \tag{5}$$

对于任何束缚态,均有

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} \right\rangle_n = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle xH - Hx \rangle_n = 0$$

因此

$$\langle p \rangle_n = -\lambda \tag{6}$$

代入式(4),即得

$$\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} = -\frac{\lambda}{m} \tag{7}$$

积分,即得

$$E_n = -\frac{\lambda^2}{2m} + C \tag{8}$$

C 为积分常数. 由于 $\lambda=0$ 时,$H=H_0$,$E_n=E_n^{(0)}$,所以 $C=E_n^{(0)}$,代入式(8),即得

$$E_n = E_n^{(0)} - \frac{\lambda^2}{2m} \tag{9}$$

解二 将 H 写成

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{\lambda p}{m} + V(x) = \frac{P^2}{2m} + V(x) - \frac{\lambda^2}{2m} \tag{10}$$

其中

$$P = p + \lambda \tag{11}$$

在动量表象中,

$$x = \mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial p} = \mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial P} \tag{12}$$

因此

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + V\left(\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial p}\right) \tag{13}$$

$$H = \frac{P^2}{2m} + V\left(\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial P}\right) - \frac{\lambda^2}{2m} \tag{14}$$

H 和 H_0 的差别,除常数项外,无非是 p 换成 P,后面这一点对能级没有影响. 由此可知

$$E_n = E_n^{(0)} - \frac{\lambda^2}{2m} \tag{15}$$

8.8 将电荷为 q 的一维谐振子放在均匀电场 $\mathscr{E}$ 中,总能量算符成为

$$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2-q\mathscr{E}x \tag{1}$$

求各束缚态能级和 $\bar{x}$.

解　本题将采取和题 3.4 不同的解法. 首先,利用 Heisenberg 运动方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}p=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[p,H]=q\mathscr{E}-m\omega^2x \tag{2}$$

在任何束缚态 ψ_n 下求平均值,得到

$$\left\langle\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}p\right\rangle_n=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle pH-Hp\rangle_n=0$$

所以

$$\langle x\rangle_n=\frac{q\mathscr{E}}{m\omega^2} \tag{3}$$

其次,视电场强度 $\mathscr{E}$ 为参变量,式(1)对 $\mathscr{E}$ 求导,得到

$$\frac{\partial H}{\partial\mathscr{E}}=-qx \tag{4}$$

利用 Hellmann 定理以及式(3),可得

$$\frac{\partial E_n}{\partial\mathscr{E}}=\left\langle\frac{\partial H}{\partial\mathscr{E}}\right\rangle_n=-\frac{q^2\mathscr{E}}{m\omega^2} \tag{5}$$

积分,即得

$$E_n=E_n(0)-\frac{q^2\mathscr{E}^2}{2m\omega^2} \tag{6}$$

$E_n(0)$为 $\mathscr{E}=0$ 时的能级,即自由谐振子的能级,

$$E_n(0)=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\quad n=0,1,2,\cdots \tag{7}$$

将式(7)代入式(6),最后得到能级公式

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega-\frac{q^2\mathscr{E}^2}{2m\omega^2} \tag{8}$$

8.9　质量为 μ 的粒子在中心力场中运动,

$$V(r)=\lambda r^\nu,\quad -2<\nu,\quad \nu/\lambda>0 \tag{1}$$

试利用 Hellmann 定理及位力定理分析能级构造式对于 $\hbar$、λ、μ 的依赖关系.

解　能量算符为

$$H = T+V = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+\lambda r^\nu \tag{2}$$

令 $\beta=\hbar^2/2\mu$,λ 和 β 是独立的参数. 易见

$$\beta\frac{\partial H}{\partial\beta} = T, \quad \lambda\frac{\partial H}{\partial\lambda} = V \tag{3}$$

根据 Hellmann 定理,对于任何一个束缚态,有

$$\langle T\rangle = \frac{\beta\partial E}{\partial\beta} \tag{4}$$

$$\langle V\rangle = \frac{\lambda\partial E}{\partial\lambda} \tag{5}$$

两式相加,即得

$$\beta\frac{\partial E}{\partial\beta}+\lambda\frac{\partial E}{\partial\lambda} = \langle T+V\rangle = E \tag{6}$$

而由位力定理则得

$$\langle T\rangle = \frac{\nu}{2}\langle V\rangle$$

亦即

$$\beta\frac{\partial E}{\partial\beta} = \frac{\nu}{2}\lambda\frac{\partial E}{\partial\lambda} \tag{7}$$

将式(7)代入式(6),可得

$$\left(1+\frac{\nu}{2}\right)\lambda\frac{\partial E}{\partial\lambda} = E \tag{8}$$

$$\left(1+\frac{2}{\nu}\right)\beta\frac{\partial E}{\partial\beta} = E \tag{9}$$

式(8)积分,得到 E 和 λ 间构造关系

$$E = C_1\lambda^{2/(2+\nu)} \tag{10}$$

C_1 为"积分常数",与 λ 无关. 式(9)积分,得到 E 和 β 间构造关系

$$E = C_2\beta^{\nu/(2+\nu)} \tag{11}$$

C_2 与 ν 无关. 比较式(10)和(11),可知

$$E = C\lambda^{2/(2+\nu)}\beta^{\nu/(2+\nu)} = C\lambda^{2/(2+\nu)}\left(\frac{\hbar^2}{2\mu}\right)^{\nu/(2+\nu)} \tag{12}$$

C 与 λ、β 无关,是无量纲纯数(和 ν 及量子数有关). 容易验证,上式是量纲正确的唯一可能的能量构造式.

由式(12)易见(注意 $\nu>-2$),当作用强度$|\lambda|$增加时,$|E|$随之增加,能级间隔增大.如 λ 与粒子质量无关,则当 $\nu>0$,μ 增大时$|E|$减小;当 $\nu<0$,μ 增大时$|E|$增大.

如 λ 与 μ 无关,由式(2)、(4)还可看出

$$\mu\frac{\partial E}{\partial \mu}=-\langle T\rangle<0 \tag{13}$$

即粒子质量的增大总是导致能级的代数值下降.

由式(12)还可看出,如果 $\lambda\propto\mu^{\nu/2}$,则 E 和 μ 无关.属于这种情况的著名例子就是谐振子,即

$$V(\boldsymbol{r})=\lambda r^2=\frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2$$

$$\left(\nu=2,\quad \lambda=\frac{1}{2}\mu\omega^2\right)$$

能级为

$$E_N=\left(N+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega,\quad N=0,1,2,\cdots$$

如 ω 保持不变,E_N 就与 μ 无关.

8.10　粒子在对数函数型势场中运动,

$$V(r)=C\ln\left(\frac{r}{r_0}\right),\quad C,r_0>0$$

C、r_0 是与质量无关之常数,试证明:(a)各束缚态动能平均值相等.(b)能级间距与粒子质量无关.

解　总能量算符为

$$H=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}+V(r)=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+C\ln\left(\frac{r}{r_0}\right) \tag{1}$$

视质量 μ 为参变量,显然有

$$-\mu\frac{\partial H}{\partial\mu}=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}=T \tag{2}$$

利用 Hellmann 定理,即得

$$-\mu\frac{\partial E_n}{\partial\mu}=\langle T\rangle_n \tag{3}$$

如对坐标作尺度变换,令

$$\boldsymbol{R}=\sqrt{\mu}\boldsymbol{r} \tag{4}$$

则能量算符可以重新写成

$$H \to \widetilde{H} = -\frac{\hbar^2}{2}\nabla_R^2 + C[\ln R - \ln(r_0\sqrt{\mu})] \tag{5}$$

这时有

$$-\mu\frac{\partial \widetilde{H}}{\partial \mu} = \frac{C}{2} \tag{6}$$

利用 Hellmann 定理即得

$$-\mu\frac{\partial E_n}{\partial \mu} = \frac{C}{2} \tag{7}$$

比较式(3)、(7),即得

$$\langle T\rangle_n = \frac{C}{2} \tag{8}$$

至此已经证明了命题(a). 对式(7)积分,得到

$$E_n = -\frac{C}{2}\ln\mu + \varepsilon_n \tag{9}$$

ε_n 为"积分常数",与 μ 无关. 任何两个能级之差为

$$E_n - E_k = \varepsilon_n - \varepsilon_k \tag{10}$$

与质量 μ 无关. 这就是命题(b).

命题(a)也可以直接用位力定理来证明.

8.11 粒子在势场

$$V(x) = V_0 \mid x/a \mid^{\nu}, \quad V_0, a > 0 \tag{1}$$

中运动,求 $\nu \to \infty$ 时能级和各参数的依赖关系.

解 总能量算符为

$$H = T + V = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V_0 \mid x/a \mid^{\nu} \tag{2}$$

从量纲关系看,如以 x_0 表示特征长度,应有

$$E \sim \frac{\hbar^2}{\mu x_0^2} \sim \frac{V_0 x_0^{\nu}}{a^{\nu}} \tag{3}$$

不难解出

$$x_0 \sim \left(\frac{\hbar^2 a^{\nu}}{\mu V_0}\right)^{\frac{1}{\nu+2}} \xrightarrow{\nu \to \infty} a \tag{4}$$

$$E\sim\left(\frac{\hbar^2}{\mu}\right)^{\frac{\nu}{\nu+2}}V_0^{2/(\nu+2)}a^{-2\nu/(\nu+2)}\xrightarrow{\nu\to\infty}\frac{\hbar^2}{\mu a^2}\tag{5}$$

特征长度和能级构造均与 V_0 无关，这个结论也可以引用题 8.9 的式(12)而得出，只需取

$$\lambda=V_0a^{-\nu}$$

并令 $\nu\to\infty$. 事实上，由式(1)不难看出

$$\nu\to\infty,\quad V(x)\to\begin{cases}0, & |x|<a\\ \infty, & |x|>a\end{cases}\tag{6}$$

这正是宽为 $2a$ 的无限深直角势阱，能级为

$$E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8\mu a^2}.\quad n=1,2,3,\cdots\tag{7}$$

当 ν 有限时，根据位力定理，对任何束缚态，动能平均值和势能平均值间有关系

$$\frac{2}{\nu}\langle T\rangle=\langle V\rangle\tag{8}$$

则当 $\nu\to\infty$，就有

$$\langle V\rangle\to0,\quad\langle T\rangle\to E\tag{9}$$

这个结论，也和无限深势阱问题相符合(参看题 1.5).

8.12　粒子在中心势场 $V(r)$ 中运动，试证明：在径向量子数 n_r 相同的各束缚态中，角量子数 l 越大，能级越高.

证　中心力场中束缚态波函数(取为 H,l^2,l_z 的共同本征函数)可以表示成

$$\psi(r,\theta,\varphi)=R(\boldsymbol{r})\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{1}{r}u(\boldsymbol{r})\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)\tag{1}$$

$u(r)$ 满足径向方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+V(r)+l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u(r)=Eu(r)\tag{2}$$

及边界条件

$$r\to0,\infty,\quad u(r)\to0\tag{3}$$

式(2)作为能量本征方程，和一维问题类似，$u(r)$ 相当于一维问题中的能量本征函数，能量算符相当于

$$H(l,r)=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+V(l,r)\tag{4}$$

$$V(l,r)=V(r)+l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\equiv V_l(r) \tag{5}$$

$V_l(r)$称为等效势能,其中和角量子数 l 有关的第二项是离心势能. 式(2)中能量本征值一般记为

$$E=E_{nl},\quad n=1,2,\cdots,\quad l=0,1,2,\cdots \tag{6}$$

n 是属于同一个 l 值的能级编号数,其次序为

$$E_{1l}<E_{2l}<E_{3l}<\cdots \tag{7}$$

通常 $n=n_r+1$,n_r 为径向量子数(径向波函数的节点数).

式(2)和(4)中,视 l 为参变数,显然有

$$\frac{\partial H(l,r)}{\partial l}=\frac{\partial V_l(r)}{\partial l}=\left(l+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar^2}{\mu r^2}>0 \tag{7'}$$

利用 Hellmann 定理,就有

$$\frac{\partial E_{nl}}{\partial l}=\left\langle\frac{\partial H(l,r)}{\partial l}\right\rangle_{nl}=\left(l+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar^2}{\mu}\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle_{nl}>0 \tag{8}$$

因此 E_{nl} 随 l 之增加而升高. n 固定时,l 越大,E_{nl} 越高. l 之最小值为 0,故基态必为 s 态($l=0$).

如能级已经求出,利用式(8)就可以得到离心势能的平均值

$$\left\langle l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\right\rangle_{nl}=\frac{l(l+1)}{2l+1}\frac{\partial E_{nl}}{\partial l} \tag{9}$$

8.13 质量为 μ 的粒子在中心势场 $V(r)$ 中运动,处于基态. 已知 $V(r)$ 是 r 之单调渐增函数,即 $\mathrm{d}V/\mathrm{d}r>0$. $V(r)$ 与质量 μ 无关. 试证明:在任意给定的球面(半径 R)内粒子出现的概率将随粒子质量的增加而增加.

证 基态必为 s 态($l=0$),波函数可以写成

$$\psi(r)=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\frac{u(r)}{r} \tag{1}$$

$u(r)$ 满足径向方程

$$u''(r)=\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}u(r)=\frac{2\mu}{\hbar^2}[V(r)-E]u(r) \tag{2}$$

设 ψ 已经归一化,则粒子在球面(半径 R)内出现概率为

$$P(R)=\int_0^R u^2(r)\mathrm{d}r \tag{3}$$

令

$$G(R)=\frac{1}{2}\frac{\partial P(R)}{\partial\mu}=\int_0^R u(r)\frac{\partial u(r)}{\partial\mu}\mathrm{d}r \tag{4}$$

需要证明：对于一切 R 值，$G(R)>0$.

对于任何质量值，概率 $P(R)$ 显然满足

$$P(0)=0,\quad P(\infty)=1 \tag{5}$$

因此 $G(R)$ 满足

$$G(0)=G(\infty)=0 \tag{6}$$

所以，要证明 $G(R)>0$，只需证明 $G(R)$ 只有极大，没有极小. 为此，只需证明

$$\frac{\mathrm{d}G}{\mathrm{d}R}=0\text{ 处},\quad \frac{\mathrm{d}^2G}{\mathrm{d}R^2}<0$$

由定义式(4)，易见

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}R}G(R)=u(R)\frac{\partial u(R)}{\partial\mu} \tag{7}$$

基态波函数没有节点，$u(R)\neq0$，因此

$$\frac{\mathrm{d}G}{\mathrm{d}R}=0\text{ 处},\quad \frac{\partial u(R)}{\partial\mu}=0 \tag{8}$$

式(7)再求导数，得到

$$\frac{\mathrm{d}^2G}{\mathrm{d}R^2}=u'(R)\frac{\partial u(R)}{\partial\mu}+u(R)\frac{\partial u'(R)}{\partial\mu} \tag{9}$$

利用式(8)，可知

$$\frac{\mathrm{d}G}{\mathrm{d}R}=0\text{ 处},\quad \frac{\mathrm{d}^2G}{\mathrm{d}R^2}=u(R)\frac{\partial u'(R)}{\partial\mu} \tag{10}$$

现在只需证明上式右端小于 0.

以 $u(r)\frac{\partial}{\partial\mu}$ 作用于式(2)两端，得到

$$u\frac{\partial u''}{\partial\mu}=\frac{2}{\hbar^2}\left[Vu^2-Eu^2-\mu\frac{\partial E}{\partial\mu}u^2+\mu(V-E)u\frac{\partial u}{\partial\mu}\right] \tag{11}$$

而由 Hellmann 定理，

$$-\mu\frac{\partial E}{\partial\mu}=-\mu\left\langle\frac{\partial H}{\partial\mu}\right\rangle=\left\langle\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}\right\rangle=E-\bar{V} \tag{12}$$

将式(12)代入式(11)，得到

$$u\frac{\partial u''}{\partial\mu}=\frac{2}{\hbar^2}(V-\bar{V})u^2+\frac{2\mu}{\hbar^2}(V-E)u\frac{\partial u}{\partial\mu} \tag{13}$$

另一方面,以 $\partial u/\partial\mu$ 乘式(2),则得

$$u''\frac{\partial u}{\partial\mu}=\frac{2\mu}{\hbar^2}(V-E)u\frac{\partial u}{\partial\mu} \tag{14}$$

式(13)减式(14),并积分 $\int_0^R\cdots\mathrm{d}r$,得到

$$\int_0^R\left(u\frac{\partial u''}{\partial\mu}-u''\frac{\partial u}{\partial\mu}\right)\mathrm{d}r=\frac{2}{\hbar^2}\int_0^R(V-\bar{V})u^2\mathrm{d}r \tag{15}$$

在题设的 $\mathrm{d}V/\mathrm{d}r>0$ 条件下,可以证明(见题 5.6)

$$\int_0^R(V-\bar{V})u^2\mathrm{d}r<0 \tag{16}$$

而式(15)右端为

$$\begin{aligned}&\int_0^R\left(u\frac{\partial u''}{\partial\mu}-u''\frac{\partial u}{\partial\mu}\right)\mathrm{d}r\\=&\int_0^R\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(u\frac{\partial u'}{\partial\mu}-u'\frac{\partial u}{\partial\mu}\right)\mathrm{d}r\\=&u(R)\frac{\partial u'(R)}{\partial\mu}-u'(R)\frac{\partial u(R)}{\partial\mu}-u(0)\frac{\partial u'(0)}{\partial\mu}+u'(0)\frac{\partial u(0)}{\partial\mu}\end{aligned}$$

在 $r=0$ 处,$u(0)=0$,因此 $\partial u(0)/\partial\mu=0$,所以

$$\int_0^R\left(u\frac{\partial u''}{\partial\mu}-u''\frac{\partial u}{\partial\mu}\right)\mathrm{d}r=u(R)\frac{\partial u'(R)}{\partial\mu}-u'(R)\frac{\partial u(R)}{\partial\mu} \tag{17}$$

将式(16)、(17)一起代入式(15),即得

$$u(R)\frac{\partial u'(R)}{\partial\mu}-u'(R)\frac{\partial u(R)}{\partial\mu}<0 \tag{18}$$

此式对任何 R 值成立. 再利用式(8)和(10),即得

$$在\frac{\mathrm{d}G}{\mathrm{d}R}=0\text{ 处},\quad\frac{\mathrm{d}^2G}{\mathrm{d}R^2}<0 \tag{19}$$

证明完毕①.

---

① 本题取自 C. Quigg and J. L. Rosner. *Physics Reports*, 1979, **56**: 167～235.

第九章　动量表象

9.1　质量为 m 的粒子在势场 $V(x)$ 中作一维运动，试建立动量表象中的能量本征方程.

解　采用 Dirac 符号，能量本征方程可以写成

$$H\mid\psi\rangle=(T+V)\mid\psi\rangle=E\mid\psi\rangle \tag{1}$$

其中 $T=p^2/2m$ 为动能算符. 以 $\mid p\rangle$、$\mid p'\rangle$ 等表示动量算符的本征态矢量，即

$$\hat{p}\mid p\rangle=p\mid p\rangle,\quad \hat{p}\mid p'\rangle=p'\mid p'\rangle \tag{2}$$

态矢量 $\mid\psi\rangle$ 在 p 表象中的表示式(即波函数)记为

$$\langle p\mid\psi\rangle=\varphi(p) \tag{3}$$

动量本征态矢量 $\mid p\rangle$ 的正交“归一”性和完备性条件为

$$\langle p\mid p'\rangle=\delta(p-p') \tag{4}$$

$$\int\mid p'\rangle\langle p'\mid \mathrm{d}p'=1 \tag{5}$$

利用式(5)，可将 $\mid\psi\rangle$ 表示成

$$\mid\psi\rangle=\int\mid p'\rangle\langle p'\mid\psi\rangle\mathrm{d}p'=\int\mid p'\rangle\varphi(p')\mathrm{d}p' \tag{6}$$

代入式(1)，即成

$$(T+V)\int\mid p'\rangle\varphi(p')\mathrm{d}p'=E\int\mid p'\rangle\varphi(p')\mathrm{d}p'$$

再以 $\langle p\mid$ 左乘上式，即得

$$\int\langle p\mid(T+V)\mid p'\rangle\varphi(p')\mathrm{d}p'=E\int\langle p\mid p'\rangle\varphi(p')\mathrm{d}p' \tag{7}$$

其中

$$\langle p\mid T\mid p'\rangle=\frac{p'^2}{2m}\langle p\mid p'\rangle=\frac{p^2}{2m}\delta(p-p') \tag{8}$$

定义 $V_{pp'}=\langle p\mid V\mid p'\rangle$，并利用公式

$$\int\delta(p-p')\varphi(p')\mathrm{d}p'=\varphi(p) \tag{9}$$

式(7)最后可以化成

$$\boxed{\frac{p^2}{2m}\varphi(p)+\int V_{pp'}\varphi(p')\mathrm{d}p'=E\varphi(p)} \tag{10}$$

这正是所求的 p 表象中的能量本征方程. 各式中 $\int\cdots\mathrm{d}p'$ 的积分上下限均为$-\infty$至$+\infty$.

式(10)中 $V_{pp'}$ 是势能 $V(x)$ 在 p 表象中的矩阵元,

$$V_{pp'}=\langle p\mid V\mid p'\rangle \tag{11}$$

如用 x 表象中波函数的积分形式来表示,就是

$$V_{pp'}=\int\psi_p^*(x)V(x)\psi_{p'}(x)\mathrm{d}x=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}V(x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p'-p)x/\hbar}\mathrm{d}x \tag{11'}$$

如果 $V(x)$ 可以方便地表示成 x 的正幂级数,

$$V(x)=\sum_{n=0}^{\infty}C_nx^n$$

由于

$$x\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p'-p)x/\hbar}=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p'-p)x/\hbar}$$

式(11′)可以进一步化成

$$\begin{aligned}V_{pp'}&=\sum_nC_n\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)^n\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p'-p)x/\hbar}\mathrm{d}x\\&=\sum_nC_n\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)^n\delta(p-p')\\&=V(\hat{x})\delta(p-p')\end{aligned} \tag{12}$$

其中

$$\hat{x}=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p} \tag{13}$$

代入式(10),即得

$$\boxed{\frac{p^2}{2m}\varphi(p)+V\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\varphi(p)=E\varphi(p)} \tag{14}$$

例如谐振子,

$$V(\hat{x})=\frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2=-\frac{1}{2}m\omega^2\hbar^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}p^2}$$

能量本征方程为

$$\frac{p^2}{2m}\varphi(p)-\frac{1}{2}m\omega^2\hbar^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}p^2}\varphi(p)=E\varphi(p)$$

其形式与 x 表象中的能量本征方程相似，这是谐振子 Hamilton 量（自然单位，$\hbar=m=\omega=1$）$H=\frac{1}{2}(p^2+x^2)$ 在相空间中旋转不变性的表现.

9.2　质量为 m 的粒子在均匀力场 $V(x)=Fx(F>0)$ 中运动，运动范围限制在 $x\geqslant 0$. 试在动量表象中求解束缚态能级和本征函数.

解　总能算符为

$$H=T+V=\frac{p^2}{2m}+Fx \tag{1}$$

在动量表象中，x 的算符表示为

$$\hat{x}=\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p} \tag{2}$$

H 的算符表示为

$$\hat{H}=\frac{p^2}{2m}+\mathrm{i}\hbar F\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p} \tag{3}$$

定态 Schrödinger 方程为

$$\frac{p^2}{2m}\varphi(p)+\mathrm{i}\hbar F\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}\varphi(p)=E\varphi(p) \tag{4}$$

其中 $\varphi(p)$ 是动量表象中的波函数. 式(4)是非常简单的一阶微分方程，其解为

$$\varphi(p)=A\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar F}\left(\frac{p^3}{6m}-Ep\right)\right] \tag{5}$$

A 是归一化常数.

变到 x 表象，波函数为

$$\begin{aligned}\psi(x)&=(2\pi\hbar)^{-1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p)\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}p\\&=A(2\pi\hbar)^{-1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[\frac{p^3}{6mF}+\left(x-\frac{E}{F}\right)p\right]\mathrm{d}p\\&=2A(2\pi\hbar)^{-1/2}\int_0^{\infty}\cos\left[\frac{p^3}{6\hbar mF}+\frac{p}{\hbar}\left(x-\frac{E}{F}\right)\right]\mathrm{d}p\\&=\frac{C}{\sqrt{\pi}}\int_0^{\infty}\cos\left(\frac{u^3}{3}+u\xi\right)\mathrm{d}u\end{aligned} \tag{6}$$

其中

$$u=p(2\hbar mF)^{-1/3} \tag{7}$$

$$\xi=\left(x-\frac{E}{F}\right)\left(\frac{2mF}{\hbar^2}\right)^{1/3}=\frac{x}{l}-\lambda \tag{8}$$

$$l=\left(\frac{\hbar^2}{2mF}\right)^{1/3} \tag{9}$$

$$\lambda=\left(\frac{2m}{\hbar^2F^2}\right)^{1/3}E=\frac{2mE}{\hbar^2}l^2 \tag{10}$$

l 是本题的特征长度.

除归一化常数 C 外,式(6)右端正是以 ξ 为变量的 Airy 函数①.

当 $\xi>0$($x>E/F$,即经典禁区),Airy 函数表现为第二类变形 Bessel 函数,即

$$\psi(x)=\sqrt{\xi}K_{\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}\xi^{3/2}\right)\xrightarrow{\xi\to\infty}\sqrt{\xi}\left(\frac{3\pi}{4\xi^{3/2}}\right)^{1/2}\mathrm{e}^{-\frac{2}{3}\xi^{3/2}} \tag{11}$$

当 $\xi<0$($x<E/F$,即经典允许区),Airy 函数表现为第一类 Bessel 函数,即

$$\psi(x)=\sqrt{|\xi|}\left[J_{\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}|\xi|^{3/2}\right)+J_{-\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}|\xi|^{3/2}\right)\right] \tag{12}$$

能级 E 由边界条件 $\psi(0)=0$ 决定,即

$$J_{\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}\lambda^{3/2}\right)+J_{-\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}\lambda^{3/2}\right)=0 \tag{13}$$

其解可由 Bessel 函数表查出,为

$$\lambda=2.3381,\ 4.0880,\ 5.5206,\ 6.7867,\ 7.9441,\cdots$$

能量本征值和 λ 的关系见式(10). 基态能级为

$$E_1=1.8558\left(\frac{\hbar^2F^2}{m}\right)^{1/3} \tag{14}$$

9.3 一个电子被限制在一块电介质(无限大)平面的上方($x\geqslant 0$)运动,介质的介电常数为 ε,不可穿透. 按电象法可求出静电势能为

$$V(x)=-\frac{\alpha}{x},\quad \alpha=\frac{e^2}{4}\left(\frac{\varepsilon-1}{\varepsilon+1}\right)>0 \tag{1}$$

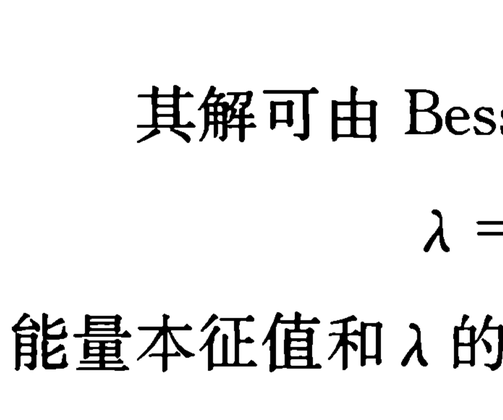


图 9.3

试求电子的能级($E<0$).

解一 电子在 y、z 方向的运动为自由运动,其动能可连续变化,这部分能量不予考虑. x 方向的运动,能量本征方程为

① Airy 函数的基本性质可以参看 Landau 等. 量子力学. 上册. 北京:高等教育出版社,1980. 附录 6.

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

边界条件为 $\psi(0)=0$.

式(2)的结构和 Coulomb 场 $V(r)=-\alpha/r$ 中 s 态($l=0$)的径向方程相同,后者为

$$\psi=R(r)=u(r)/r \tag{3}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}u(r)-\frac{\alpha}{r}u(r)=Eu(r) \tag{4}$$

边界条件为 $u(0)=0$[$\psi(0)$有限]. 众所周知,式(4)的束缚态能级为

$$E_n=-\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2n^2},\quad n=1,2,3,\cdots \tag{5}$$

这也就是式(2)的能级. 波函数也可以利用 Coulomb 场的 s 态解而写出来.

解二　在动量表象中求解. 能量本征方程为

$$\left(\frac{p^2}{2m}-\frac{\alpha}{x}\right)\varphi(p)=E\varphi(p) \tag{6}$$

$\varphi(p)$为波函数. 在 p 表象中,

$$x\Rightarrow \mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p},\quad \frac{1}{x}\Rightarrow\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int\mathrm{d}p \tag{7}$$

所以式(6)可以写成

$$(p^2+\eta^2)\varphi(p)=\frac{2m\alpha}{\mathrm{i}\hbar}\int\varphi(p)\mathrm{d}p,\quad \eta^2=-2mE \tag{8}$$

令

$$\Phi(p)=\int\varphi(p)\mathrm{d}p \tag{9}$$

则

$$\varphi(p)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}\Phi(p) \tag{9'}$$

式(8)可以写成一阶微分方程的形式:

$$(p^2+\eta^2)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}\Phi(p)=\frac{2m\alpha}{\mathrm{i}\hbar}\Phi(p) \tag{10}$$

即

$$\frac{\mathrm{d}\Phi}{\Phi}=\frac{2m\alpha}{\mathrm{i}\hbar}\frac{\mathrm{d}p}{p^2+\eta^2} \tag{10'}$$

积分,即得

$$\ln\Phi(p)=\frac{2m\alpha}{\mathrm{i}\hbar}\frac{1}{\eta}\arctan\left(\frac{p}{\eta}\right)$$

$$\Phi(p)=\int\varphi(p)\mathrm{d}p=\exp\left[\frac{2m\alpha}{\mathrm{i}\hbar}\frac{1}{\eta}\arctan\left(\frac{p}{\eta}\right)\right] \tag{11}$$

$\arctan\left(\frac{p}{\eta}\right)$是 p 的多值函数,

$$\arctan\left(\frac{p}{\eta}\right)=\left[\arctan\left(\frac{p}{\eta}\right)\right]_{\text{主值}}\pm k\pi,\quad k=1,2,3,\cdots$$

而 $\varphi(p)$和 $\Phi(p)$应该是单值的,为此,必须

$$\frac{2m\alpha}{\hbar\eta}\pi=2n\pi,\quad n=1,2,3,\cdots$$

即

$$\eta=\frac{m\alpha}{n\hbar} \tag{12}$$

因此,能级为

$$E=-\frac{\eta^2}{2m}=-\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2n^2},\quad n=1,2,3,\cdots \tag{13}$$

和式(5)一致.

9.4 在动量表象中求解 δ 势阱

$$V(x)=-V_0\delta(x)$$

的束缚态能级和本征函数.

解 动量表象中的能量本征方程为

$$\frac{p^2}{2m}\varphi(p)+\int_{-\infty}^{+\infty}V_{pp'}\varphi(p')\mathrm{d}p'=E\varphi(p) \tag{1}$$

其中

$$V_{pp'}=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}xV(x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p'-p)x/\hbar}$$

$$=-\frac{V_0}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\delta(x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p'-p)x/\hbar}=-\frac{V_0}{2\pi\hbar} \tag{2}$$

代入式(1),即得

$$\left(\frac{p^2}{2m}-E\right)\varphi(p)=\frac{V_0}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p')\mathrm{d}p'=C\quad(\text{与 }p\text{ 无关}) \tag{3}$$

所以

$$\varphi(p)=\frac{2mC}{p^2-2mE}=\frac{A}{p^2-2mE} \tag{4}$$

此即 p 表象中的能量本征函数，A 为归一化常数.

将式(4)代入式(3)右端，得到

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}p}{p^2-2mE}=\frac{\pi\hbar}{mV_0} \tag{5}$$

此即能级方程. 束缚态 $E<0$，令

$$k=\sqrt{-2mE}/\hbar \tag{6}$$

式(5)中定积分容易算出，为

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}p}{p^2-2mE}=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}p}{p^2+\hbar^2k^2}=\frac{\pi}{\hbar k}$$

代入式(5)，即得

$$k=mV_0/\hbar^2 \tag{7}$$

因此

$$\boxed{E=-\frac{\hbar^2k^2}{2m}=-\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}} \tag{8}$$

波函数 $\varphi(p)$ 由式(4)表示，即

$$\boxed{\varphi(p)=\frac{A}{p^2+\hbar^2k^2}} \tag{4'}$$

常数 A 可以利用归一化条件求得，

$$1=\int|\varphi(p)|^2\mathrm{d}p=|A|^2\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}p}{(p^2+\hbar^2k^2)^2}=|A|^2\frac{\pi}{2(\hbar k)^3}$$

$$A=\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2}(\hbar k)^{3/2}=\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2}\left(\frac{mV_0}{\hbar}\right)^{3/2} \tag{9}$$

x 表象中的波函数为

$$\psi(x)=(2\pi\hbar)^{-1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\varphi(p)\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}$$

$$=A(2\pi\hbar)^{-1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}p}{p^2+\hbar^2k^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar} \tag{10}$$

利用围道积分法容易求出

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}p}{p^2+\hbar^2k^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}=\frac{\pi}{\hbar k}\mathrm{e}^{-k|x|} \tag{11}$$

代入式(10)即得

$$\psi(x)=\sqrt{k}\mathrm{e}^{-k|x|} \tag{12}$$

这和题 2.1 所得结果完全一致.

9.5 利用上题得到的波函数,在 p 表象中计算 Δx、Δp,验证不确定度关系.

解 在 p 表象中归一化波函数为

$$\varphi(p)=A/(p^2+\hbar^2k^2) \tag{1}$$

其中

$$A=\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2}(\hbar k)^{3/2},\quad k=mV_0/\hbar^2 \tag{2}$$

p 和 p^2 平均值分别为

$$\overline{p}=\int p\mid\varphi(p)\mid^2\mathrm{d}p=A^2\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{p\mathrm{d}p}{(p^2+\hbar^2k^2)^2}=0 \tag{3}$$

$$\overline{p^2}=\int p^2\mid\varphi(p)\mid^2\mathrm{d}p=A^2\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{p^2\mathrm{d}p}{(p^2+\hbar^2k^2)^2}=A^2\frac{\pi}{2\hbar k}=\hbar^2k^2 \tag{4}$$

因此

$$\Delta p=(\overline{p^2}-\overline{p}^2)^{1/2}=\hbar k \tag{5}$$

在 p 表象中,x 的算符表示为

$$\hat{x}=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p} \tag{6}$$

利用平均值公式

$$\overline{F}=\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p)^*\hat{F}\varphi(p)\mathrm{d}p \tag{7}$$

即得

$$\overline{x}=\mathrm{i}\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}p}\mathrm{d}p=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}[\varphi(p)]^2\Big|_{-\infty}^{+\infty}=0 \tag{8}$$

$$\begin{aligned}\overline{x^2}&=(\mathrm{i}\hbar)^2\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi\frac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}p^2}\mathrm{d}p=\hbar^2\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}p}\right)^2\mathrm{d}p\\&=\hbar^2\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{4A^2p^2\mathrm{d}p}{(p^2+\hbar^2k^2)^4}=4\hbar^2A^2\frac{\pi}{16(\hbar k)^5}=\frac{1}{2k^2}\end{aligned} \tag{9}$$

因此

$$\Delta x = (\overline{x^2} - \bar{x}^2)^{1/2} = 1/\sqrt{2}k \tag{10}$$

$$\Delta x \cdot \Delta p = \hbar/\sqrt{2} \tag{11}$$

和不确定度关系

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

是一致的.

9.6　用动量表象计算粒子(能量 $E>0$)对于 δ 势垒 $V(x)=V_0\delta(x)$ 的透射概率.

解　x 表象中定态 Schrödinger 方程为

$$\psi'' + k^2\psi - \frac{2mV_0}{\hbar^2}\delta(x)\psi = 0, \quad k = \sqrt{2mE}/\hbar \tag{1}$$

令

$$\psi(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}p\varphi(p)\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar} \tag{2}$$

$\varphi(p)$即动量表象中的波函数,应满足方程

$$\frac{p^2}{2m}\varphi(p) + \int_{-\infty}^{+\infty} V_{pp'}\varphi(p')\mathrm{d}p' = E\varphi(p) \tag{3}$$

其中

$$V_{pp'} = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}xV_0\delta(x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p'-p)x/\hbar} = \frac{V_0}{2\pi\hbar} \tag{4}$$

因此,利用式(4)和(2),可求出

$$\int_{-\infty}^{+\infty} V_{pp'}\varphi(p')\mathrm{d}p' = \frac{V_0}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p')\mathrm{d}p' = \frac{V_0}{\sqrt{2\pi\hbar}}\psi(0) \tag{5}$$

将式(4)、(5)代入式(3),即得

$$(p^2 - \hbar^2k^2)\varphi(p) + \frac{2mV_0}{\sqrt{2\pi\hbar}}\psi(0) = 0 \tag{6}$$

根据 δ 函数的基本公式

$$(\xi - \xi_0)\delta(\xi - \xi_0) = 0 \tag{7}$$

可知式(6)的通解为

$$\varphi(p) = C_1\delta(p - \hbar k) + C_2\delta(p + \hbar k) - \frac{2mV_0}{\sqrt{2\pi\hbar}}\frac{\psi(0)}{(p^2 - \hbar^2k^2)} \tag{8}$$

其中 C_1、C_2、$\psi(0)$待定.

式(8)代入式(2),得到 x 表象中的波函数

$$\psi(x)=\frac{C_1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ikx}+\frac{C_2}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-ikx}-\frac{2mV_0}{2\pi\hbar}\psi(0)\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dp}{p^2-\hbar^2k^2}e^{ipx/\hbar} \tag{9}$$

式(9)中最后的积分应取主值,可以用复 p 平面上的围道积分法算出,结果为

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dp}{p^2-\hbar^2k^2}e^{ipx/\hbar}=\begin{cases}\dfrac{i\pi}{2\hbar k}(e^{ikx}-e^{-ikx}), & x>0\\ \dfrac{i\pi}{2\hbar k}(e^{-ikx}-e^{ikx}), & x<0\end{cases} \tag{10}$$

当 $x\to 0$,式(10)右端为 0,则由式(9)得到

$$\psi(0)=(C_1+C_2)/\sqrt{2\pi\hbar} \tag{11}$$

将式(10),(11)代入式(9),即得

$$\sqrt{2\pi\hbar}\psi(x)=C_1e^{ikx}+C_2e^{-ikx}-\frac{imV_0}{2\hbar^2k}(C_1+C_2)(e^{ikx}-e^{-ikx}),\quad x>0$$

如规定入射波为 e^{ikx}(即入射动量 $p=\hbar k$),则在 $x>0$ 区域应该只有透射波,即 e^{ikx} 项,而不能存在 e^{-ikx} 项. 因此 C_1、C_2 必须有下列关系:

$$C_2=-i\frac{mV_0}{2\hbar^2k}(C_1+C_2) \tag{12}$$

从而

$$\psi(x)=\frac{C_1+C_2}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ikx},\quad x>0 \tag{13}$$

类似地,可得

$$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}[(C_1-C_2)e^{ikx}+2C_2e^{-ikx}],\quad x<0 \tag{14}$$

其中 e^{ikx} 项为入射波,e^{-ikx} 项为反射波. 如规定入射波振幅为 1,即式(14)写成

$$\psi(x)=e^{ikx}+Re^{-ikx} \tag{14'}$$

则应取

$$C_1-C_2=\sqrt{2\pi\hbar} \tag{15}$$

由式(13)、(14)易见,

$$\text{透射系数}=\left|\frac{C_1+C_2}{C_1-C_2}\right|^2=\frac{1}{\left|1-\dfrac{2C_2}{C_1+C_2}\right|^2}$$

利用式(12),即得

$$\text{透射系数}=\frac{1}{|1+\mathrm{i}mV_0/\hbar^2k|^2}=\frac{1}{1+(mV_0/\hbar^2k)^2} \tag{16}$$

这结果和题 2.3 的式(9)完全一样.

9.7　质量为 m 的粒子束以动量 $p=\hbar k$ 从 $x=-\infty$ 处入射,受到周期性 δ 势垒

$$V(x)=V_0\sum_{n=0}\delta(x-na),\quad a>0$$

的作用,求能够出现完全反射的动量值.

解　采用动量表象,定态 Schrödinger 方程为

$$\frac{p^2}{2m}\varphi(p)+\int_{-\infty}^{+\infty}V_{pp'}\varphi(p')\mathrm{d}p'=E\varphi(p)=\frac{\hbar^2k^2}{2m}\varphi(p) \tag{1}$$

其中

$$V_{pp'}=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}xV(x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p'-p)x/\hbar}=\frac{V_0}{2\pi\hbar}\sum_{n=0}^{\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p'-p)na/\hbar} \tag{2}$$

$\varphi(p)$即 p 表象中的波函数. x 表象中的波函数为

$$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\varphi(p)\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar} \tag{3}$$

将式(2)代入式(1),得到

$$\begin{aligned}(p^2-\hbar^2k^2)\varphi(p)&=-\frac{mV_0}{\pi\hbar}\sum_n\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p'\varphi(p')\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p'-p)na/\hbar}\\&=-\frac{mV_0}{\pi\hbar}\sum_n\sqrt{2\pi\hbar}\psi(na)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}pna/\hbar}\end{aligned} \tag{4}$$

根据 δ 函数基本公式

$$(\xi-\xi_0)\delta(\xi-\xi_0)=0 \tag{5}$$

可知式(4)的通解为

$$\varphi(p)=\sqrt{2\pi\hbar}[A\delta(p-\hbar k)+B\delta(p+\hbar k)]-\frac{2mV_0}{\sqrt{2\pi\hbar}}\sum_n\frac{\psi(na)}{p^2-\hbar^2k^2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}pna/\hbar} \tag{6}$$

代入式(3),即得

$$\psi(x)=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}-\frac{mV_0}{\pi\hbar}\sum_n\psi(na)\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}p}{p^2-\hbar^2k^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(x-na)p/\hbar} \tag{7}$$

其中定积分应取主值,可以用复 p 平面上围道积分法算出,结果为

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}p}{p^2-\hbar^2k^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(x-na)p/\hbar}$$

$$=\begin{cases}\dfrac{\mathrm{i}\pi}{2\hbar k}\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x-na)}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(x-na)}\right], & x>na\\ \dfrac{\mathrm{i}\pi}{2\hbar k}\left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(x-na)}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x-na)}\right], & x<na\end{cases}$$

代入式(7),并令 $x\to\infty$(即 $x>na$,$n=0,1,2,\cdots$),即得

$$\psi(x)\xrightarrow{x\to\infty}\left[A-\mathrm{i}\frac{mV_0}{2\hbar^2k}\sum_n\psi(na)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}nak}\right]\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+\left[B+\mathrm{i}\frac{mV_0}{2\hbar^2k}\sum_n\psi(na)\mathrm{e}^{\mathrm{i}nak}\right]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \tag{8}$$

根据题意,入射波$\sim\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$,则在 $x\to\infty$处 $\psi(x)$应表现为透射波,即

$$\psi(x)\xrightarrow{x\to\infty}D\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$$

式(8)中 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$项系数应为 0,因此

$$B=-\mathrm{i}\frac{mV_0}{2\hbar^2k}\sum_n\psi(na)\mathrm{e}^{\mathrm{i}nak} \tag{9}$$

类似地,对于 $x<0$(即 $x<na$,$n=0,1,2,\cdots$),式(7)给出

$$\psi(x)=\left[A+\mathrm{i}\frac{mV_0}{2\hbar^2k}\sum_n\psi(na)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}nak}\right]\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+2B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \tag{10}$$

其中第一项为入射波,第二项为反射波.

如果出现完全反射,$x\to\infty$处透射波振幅应等于 0,即式(8)中 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$项系数为 0,这时

$$A=\mathrm{i}\frac{mV_0}{2\hbar^2k}\sum_n\psi(na)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}nak} \tag{11}$$

在这条件下,式(10)可以写成

$$\psi(x)=2A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+2B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx},\quad x<0 \tag{12}$$

这时,反射概率$=\left|\frac{B}{A}\right|^2=1$,所以$|B|=|A|$,即

$$\left|\sum_n\psi(na)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kna}\right|=\left|\sum_n\psi(na)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kna}\right| \tag{13}$$

能使式(13)成立的最简单的充分条件是

$$\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ka}=1 \tag{14}$$

相应的动量值为

$$p=\hbar k=\frac{\pi\hbar}{a},2\frac{\pi\hbar}{a},3\frac{\pi\hbar}{a},\cdots \tag{15}$$

入射波波长为

$$\lambda=\frac{2\pi}{k}=2a,\frac{1}{2}(2a),\frac{1}{3}(2a),\cdots \tag{15'}$$

在这条件下，从相邻两个 δ 势垒上反射回来的波相位相同，从而使总的反射波达到最强；而透射波则逐级减弱，最后衰减为零.

第十章　能量表象与 Heisenberg 图象

10.1　给定总能量算符 $H(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$，以 E_n、ψ_n 表示其本征值和本征函数. 态矢量 $|\psi_n\rangle$ 简记为 $|n\rangle$.

按照 Heisenberg 运动方程，力学量算符 $A(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$ 的时间变化率为

$$\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[A,H]=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(AH-HA) \tag{1}$$

定义能量表象中矩阵元

$$A_{kn}\equiv\langle\psi_k\mid A\mid\psi_n\rangle\equiv\langle k\mid A\mid n\rangle \tag{2}$$

证明

$$\boxed{\left(\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}\right)_{kn}=\mathrm{i}\omega_{kn}A_{kn}} \tag{3}$$

其中

$$\omega_{kn}=(E_k-E_n)/\hbar$$

证　ψ_n 满足本征方程

$$H\mid\psi_n\rangle=E_n\mid\psi_n\rangle \tag{4}$$

其共轭方程为

$$\langle\psi_n\mid H=E_n\langle\psi_n\mid \tag{4'}$$

式(1)两端取能量表象中矩阵元，即得

$$\begin{aligned}\left(\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}\right)_{kn}&=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\psi_k\mid AH-HA\mid\psi_n\rangle\\&=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(E_n-E_k)\langle\psi_k\mid A\mid\psi_n\rangle\\&=\mathrm{i}\omega_{kn}A_{kn}\end{aligned}$$

此即式(3).

10.2　设 $H=\boldsymbol{p}^2/2\mu+V(\boldsymbol{r})$，证明求和规则

$$\boxed{\sum_n(E_n-E_k)\mid x_{nk}\mid^2=\frac{\hbar^2}{2\mu}} \tag{1}$$

证　利用算符 x 的 Heisenberg 运动方程，可得

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[x,H]=\frac{1}{2\mathrm{i}\hbar\mu}[x,\boldsymbol{p}^2]=\frac{p_x}{\mu} \tag{2}$$

取矩阵元，并利用上题结果，即得

$$(p_x)_{kn}=\mathrm{i}\mu\omega_{kn}x_{kn} \tag{3}$$

再利用基本对易式

$$[x,p_x]=xp_x-p_xx=\mathrm{i}\hbar \tag{4}$$

在能量本征态$|k\rangle$下求平均值，即得

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar&=(xp_x)_{kk}-(p_xx)_{kk}=\sum_n[x_{kn}(p_x)_{nk}-(p_x)_{kn}x_{nk}]\\&=\mathrm{i}\mu\sum_n(\omega_{nk}x_{kn}x_{nk}-\omega_{kn}x_{kn}x_{nk})=2\mathrm{i}\mu\sum_n\omega_{nk}\mid x_{nk}\mid^2\\&=\frac{2\mathrm{i}\mu}{\hbar}\sum_n(E_n-E_k)\mid x_{nk}\mid^2\end{aligned}$$

两端各乘$(-\mathrm{i}\hbar/2\mu)$，即得式(1).

$\boldsymbol{r}$ 的另外两个分量 y 和 z 的矩阵元，显然也有同样的求和规则. 注意，式(1)中 E_k 可以是任何一个特定的能级，$\sum_n$ 则遍及所有能态.

10.3　一维谐振子的能量算符为

$$H=\frac{p_x^2}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2 \tag{1}$$

试利用前两题所得公式求出全部能级以及 x、p_x 的矩阵元. p_x 简写成 p.

解　利用 Heisenberg 运动方程，易得

$$\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[p,H]=\frac{\mu\omega^2}{2\mathrm{i}\hbar}[p,x^2]=-\mu\omega^2x \tag{2}$$

取能量表象矩阵元，即得

$$\mathrm{i}\omega_{kn}p_{kn}=-\mu\omega^2x_{kn} \tag{3}$$

而上题已得

$$p_{kn}=\mathrm{i}\omega_{kn}\mu x_{kn} \tag{4}$$

式(3)和(4)合并，即得

$$(\omega^2-\omega_{kn}^2)x_{kn}=0 \tag{5}$$

其中 k、n 可以理解为能态编号数. 由式(5)易见

$$\begin{aligned} &\text{如 } \omega_{kn} \neq \pm\omega, \quad \text{则 } x_{kn} = 0 \\ &\text{如 } x_{kn} \neq 0, \quad \text{则 } \omega_{kn} = \pm\omega \end{aligned} \tag{6}$$

由于

$$(x^2)_{kk} = \sum_n x_{kn}x_{nk} = \sum_n |\, x_{nk} \,|^2 > 0 \tag{7}$$

对于任何选定的能级 E_k,必有某些 n 使 $x_{nk} \neq 0$,则由式(6)可知,能级差 $E_n - E_k = \pm\hbar\omega$,亦即,任意指定一个能级后,必然还存在和它相差 $\hbar\omega$ 的其他能级. 所以,全部能级为

$$E = E_0, \quad E_0 + \hbar\omega, \quad E_0 + 2\hbar\omega, \cdots$$

即

$$E_n = E_0 + n\hbar\omega, \quad n = 0,1,2,\cdots \tag{8}$$

为了求出基态能级 E_0,可以利用上题证明的公式

$$\sum_n (E_n - E_k) |\, x_{nk} \,|^2 = \hbar^2/2\mu \tag{9}$$

取 k 为基态,由式(6)、(7)和(9),可得

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} = \hbar\omega \sum_n |\, x_{n0} \,|^2 = \hbar\omega (x^2)_{00}$$

因此,势能的基态平均值为

$$\frac{1}{2}\mu\omega^2 (x^2)_{00} = \frac{1}{4}\hbar\omega \tag{10}$$

而由位力定理,应有

$$\langle T\rangle_0 = \langle V\rangle_0 = \frac{1}{2}E_0$$

和式(10)比较,即得

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \tag{11}$$

代入式(8),即得能级公式

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0,1,2,\cdots \tag{8'}$$

考虑到式(6),由式(9)得出

$$|\, x_{k+1,k} \,|^2 - |\, x_{k-1,k} \,|^2 = \frac{\hbar}{2\mu\omega} \tag{12}$$

适当选择各能量本征函数的相因子($e^{i\delta}$),总可使各 x_{nk} 为非负实数,则式(12)可以写成(k 改为 n)

$$(x_{n+1,n})^2-(x_{n,n-1})^2=\frac{\hbar}{2\mu\omega} \tag{12'}$$

当 $n=0$,上式给出

$$(x_{10})^2=\frac{\hbar}{2\mu\omega},\quad x_{10}=\sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}} \tag{13}$$

反复利用式(12′)即得

$$x_{n+1,n}=\sqrt{\frac{n+1}{2}\frac{\hbar}{\mu\omega}},\quad n=0,1,2,\cdots \tag{14}$$

再利用式(4),即得

$$p_{n+1,n}=i\omega\mu x_{n+1,n} \tag{15}$$

注意:x 的矩阵元为实数,p 的矩阵元为纯虚数. 因此

$$x_{n,n+1}=(x_{n+1,n})^*=x_{n+1,n} \tag{16}$$

$$p_{n,n+1}=(p_{n+1,n})^*=-p_{n+1,n} \tag{17}$$

10.4　设 $F(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$ 为厄米算符,证明在能量表象中下式成立:

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

证　式(1)左端为

$$\begin{aligned}\sum_n(E_n-E_k)\mid F_{nk}\mid^2&=\sum_n(E_n-E_k)\langle k\mid F\mid n\rangle\langle n\mid F\mid k\rangle\\&=\sum_n\langle k\mid F\mid n\rangle\langle n\mid(HF-FH)\mid k\rangle\\&=\langle k\mid F[H,F]\mid k\rangle\end{aligned} \tag{2}$$

计算中利用了公式

$$\sum_n\mid n\rangle\langle n\mid=1 \tag{3}$$

由于 H、F 是厄米算符,有下列算符关系:

$$[H,F]^+=[F,H]=-[H,F] \tag{4}$$

式(2)取共轭,得到

$$\sum_n(E_n-E_k)\mid F_{nk}\mid^2=-\langle k\mid[H,F]F\mid k\rangle \tag{2'}$$

和式(2)相加,即得式(1).

10.5 对于任意算符 $F(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$及其共轭 F^+,有下列矩阵元关系:

$$(F_{kn})^* = (\langle k \mid F \mid n\rangle)^* = \langle n \mid F^+ \mid k\rangle = F^+_{nk}$$

试证明在能量表象中有下列求和规则:

$$\sum_n (E_n - E_k)(\mid F_{nk} \mid^2 + \mid F_{kn} \mid^2) = \langle k \mid [F^+,[H,F]] \mid k\rangle \tag{1}$$

证 $$[F^+,[H,F]] = F^+HF + FHF^+ - HFF^+ - F^+FH \tag{2}$$

在能量本征态$|k\rangle$下逐项计算平均值,并利用公式

$$\sum_n \mid n\rangle\langle n \mid = 1$$

即得

$$\langle k \mid F^+ HF \mid k\rangle = \sum_n \langle k \mid F^+ H \mid n\rangle\langle n \mid F \mid k\rangle$$

$$= \sum_n E_n F^+_{kn} F_{nk} = \sum_n E_n \mid F_{nk} \mid^2 \tag{3}$$

$$\langle k \mid FHF^+ \mid k\rangle = \sum_n \langle k \mid F \mid n\rangle\langle n \mid HF^+ \mid k\rangle$$

$$= \sum_n E_n F_{kn} F^+_{nk} = \sum_n E_n \mid F_{kn} \mid^2 \tag{4}$$

$$\langle k \mid HFF^+ \mid k\rangle = E_k \sum_n \langle k \mid F \mid n\rangle\langle n \mid F^+ \mid k\rangle$$

$$= E_k \sum_n F_{kn} F^+_{nk} = E_k \sum_n \mid F_{kn} \mid^2 \tag{5}$$

$$\langle k \mid F^+ FH \mid k\rangle = E_k \sum_n \langle k \mid F^+ \mid n\rangle\langle n \mid F \mid k\rangle$$

$$= E_k \sum_n F^+_{kn} F_{nk} = E_k \sum_n \mid F_{nk} \mid^2 \tag{6}$$

式(3)加式(4),再减式(5)和(6),即得式(1).

注意,如 $F \neq F^+$,F_{nk} 和 F_{kn} 并无简单关系.

如 F 为厄米算符,即 $F = F^+$,则 $F_{nk} = (F_{kn})^*$,这时 $|F_{nk}| = |F_{kn}|$,式(1)就变成题 10.4 式(1).

10.6 限于一维运动. 设

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x) \tag{1}$$

设 $F = F(x)$为 x 的任意函数,证明求和规则

$$\sum_n (E_n - E_k) \mid F_{nk} \mid^2 = \frac{\hbar^2}{2\mu} \langle k \mid\mid F' \mid^2 \mid k \rangle \tag{2}$$

其中 $F' = \mathrm{d}F/\mathrm{d}x$.

证　利用基本对易式

$$[p, F(x)] = -\mathrm{i}\hbar \mathrm{d}F/\mathrm{d}x = -\mathrm{i}\hbar F' \tag{3}$$

易得

$$[H, F] = \frac{1}{2\mu}[p^2, F] = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2\mu}(pF' + F'p) \tag{4}$$

$$[F^+, [H, F]] = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2\mu}([F^+, p]F' + F'[F^+, p])$$

$$= \frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\mathrm{d}F^+}{\mathrm{d}x}F' + F'\frac{\mathrm{d}F^+}{\mathrm{d}x}\right) = \frac{\hbar^2}{\mu} \mid F' \mid^2 \tag{5}$$

利用上题式(1)，即得

$$\sum_n (E_n - E_k)(\mid F_{nk} \mid^2 + \mid F_{kn} \mid^2) = \frac{\hbar^2}{\mu} \langle k \mid\mid F' \mid^2 \mid k \rangle \tag{6}$$

由于一维束缚定态波函数可以取为实函数，所以

$$F_{kn} = \int \psi_k(x) F(x) \psi_n(x) \mathrm{d}x = \int \psi_n F \psi_k \mathrm{d}x = F_{nk} \tag{7}$$

代入式(6)，即得式(2).

如取 $F(x) = x$，则 $F' = 1$，式(2)成为

$$\sum_n (E_n - E_k) \mid x_{nk} \mid^2 = \frac{\hbar^2}{2\mu} \tag{8}$$

此即题 10.2 已经证明的结果.

推广到三维情况，设 $F = F(\boldsymbol{r})$，则

$$\sum_n (E_n - E_k) \mid \langle n \mid F \mid k \rangle \mid^2 = \frac{\hbar^2}{2\mu} \langle k \mid\mid \nabla F \mid^2 \mid k \rangle \tag{9}$$

10.7　一维定态问题，设

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + V(x) \tag{1}$$

设 q 为实参数，证明

$$\sum_n (E_n - E_k) \mid \langle n \mid \mathrm{e}^{\mathrm{i}qx} \mid k \rangle \mid^2 = \frac{\hbar^2 q^2}{2\mu} \tag{2}$$

证　本题相当于上题中

$$F(x) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}qx} \tag{3}$$

$$F' = \mathrm{i}q\mathrm{e}^{\mathrm{i}qx}, \quad |F'|^2 = q^2 \tag{4}$$

将式(3)、(4)代入上题式(2),即得本题式(2).

10.8 设 $F(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$为任意算符,$F^+$为其共轭.证明能量表象中的求和规则

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

证 利用 Heisenberg 运动方程

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[F,H] = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}[H,F] \tag{2}$$

及其共轭方程

$$\frac{\mathrm{d}F^+}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}[H,F^+] = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[H,F]^+ \tag{3}$$

以及题 10.1 的式(3)(其中 A 改为 F):

$$\left(\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t}\right)_{kn} = \mathrm{i}\omega_{kn}F_{kn} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E_k - E_n)F_{kn} \tag{4}$$

可得

$$\begin{aligned}(E_k - E_n)^2 |F_{kn}|^2 &= \left|\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t}\right)_{kn}\right|^2 = |\langle k|[H,F]|n\rangle|^2 \\ &= \langle k|[H,F]|n\rangle\langle n|[H,F]^+|k\rangle\end{aligned} \tag{5}$$

式(5)对 n 求和,并利用公式

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$$

即得式(1).

如 F 为厄米算符,则$[H,F]^+ = [F,H]$,式(1)可以写成

$$\sum_n (E_k - E_n)^2 |F_{kn}|^2 = -\langle k|[H,F]^2|k\rangle \tag{6}$$

10.9 一维定态问题,设

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + V(x) \tag{1}$$

证明求和规则

$$\boxed{\sum_n (E_k - E_n)^2 |x_{kn}|^2 = -2\hbar^2 \frac{\partial E_k}{\partial \mu}} \tag{2}$$

证　利用上题式(6)，令 $F=x$，就有

$$[H,x]=\frac{1}{2\mu}[p^2,x]=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu}p \tag{3}$$

$$-[H,x]^2=\frac{\hbar^2}{\mu^2}p^2=\frac{2\hbar^2}{\mu}(H-V) \tag{4}$$

代入上题的式(6)，即得

$$\sum_n(E_k-E_n)^2\mid x_{kn}\mid^2=\frac{\hbar^2}{\mu^2}\langle p^2\rangle_k=\frac{2\hbar^2}{\mu}(E_k-\langle V\rangle_k) \tag{5}$$

根据位力定理，

$$\frac{1}{2\mu}\langle p^2\rangle_k=\frac{1}{2}\left\langle x\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right\rangle_k \tag{6}$$

式(5)又可以写成

$$\sum_n(E_k-E_n)^2\mid x_{kn}\mid^2=\frac{\hbar^2}{\mu}\left\langle x\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right\rangle_k \tag{5'}$$

如果 $V(x)$ 与粒子质量 μ 无关，则 Hellmann 定理给出

$$\frac{1}{2\mu}\langle p^2\rangle_k=-\mu\frac{\partial E_k}{\partial\mu} \tag{7}$$

代入式(5)，即得式(2). 各式中 $\langle\quad\rangle_k$ 表示 $|k\rangle$ 态下的平均值.

10.10　对于中心力场的 s 态($l=0$)和 p 态($l=1$)，证明

$$\sum_n(E_{n's}-E_{np})^2\mid z_{n's,np}\mid^2=\frac{2\hbar^2}{3\mu}\left\langle\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}\right\rangle_{n's} \tag{1}$$

证　$\psi_{n's}$ 即 $\psi_{n'lm}=\psi_{n'00}$，能使 $z_{n's,nlm}\neq0$ 的 (nlm) 必须是 $(n\ 1\ 0)$，这是式(1)左端求和时需要注意的. 正因为这样，

$$\text{式(1) 左端}=\sum_{nlm}(E_{n's}-E_{nl})^2\mid z_{n's,nlm}\mid^2 \tag{2}$$

由于

$$H=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}+V(r) \tag{3}$$

$$[H,z]=\frac{1}{2\mu}[\boldsymbol{p}^2,z]=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu}p_z \tag{4}$$

$$[H,z][H,z]^+=\left(-\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu}p_z\right)\left(\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu}p_z\right)=\frac{\hbar^2}{\mu^2}p_z^2$$

利用题 10.8 的式(1)，取 $F=z$，就得到

$$式(1)\ 左端 = \frac{\hbar^2}{\mu^2}\langle p_z^2\rangle_{n's} \tag{5}$$

$\psi_{n's}$是球对称的,应有

$$\langle p_x^2\rangle = \langle p_y^2\rangle = \langle p_z^2\rangle = \frac{1}{3}\langle \boldsymbol{p}^2\rangle \tag{6}$$

将式(6)代入式(5),即得式(1). 证明完毕.

如 $V(r)\propto r^{\nu}$,则可利用位力定理将式(1)进一步化成

$$\sum_n (E_{n's} - E_{np})^2 \mid z_{n's,np} \mid^2 = \frac{2\nu}{3(2+\nu)}\frac{\hbar^2}{\mu}E_{n's} \tag{7}$$

10.11 对于一维谐振子的 x、p,以及升降算符 a、a^+,求它们在 Heisenberg 图象中的表示式.

解 Schrödinger 图象中,a、a^+、x、p 和 H 间有如下关系(参看题 3.1):

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

$$p = \mathrm{i}\left(\frac{m\omega\hbar}{2}\right)^{\frac{1}{2}}(a^+ - a) \tag{2}$$

$$H = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \left(a^+ a + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{3}$$

$$[a, a^+] = 1 \tag{4}$$

$$[a, H] = a\hbar\omega$$

$$[a^+, H] = -a^+\hbar\omega \tag{5}$$

在 Heisenberg 图象中,

$$a(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht/\hbar}a\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar} \tag{6}$$

$$a^+(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht/\hbar}a^+\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar} = [a(t)]^+ \tag{7}$$

式(6)对 t 求导,并利用对易式(5),即得方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}a(t) = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht/\hbar}[H, a]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar} = -\mathrm{i}\omega a(t) \tag{8}$$

解为

$$a(t) = a(0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} = a\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \tag{9}$$

再取共轭,即得

$$a^+(t) = a^+\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} \tag{10}$$

算符之间的关系,不随表象而变. 将式(1)、(2)换成 Heisenberg 图象,即得

$$x(t) = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{1}{2}}[a(t) + a^+(t)] = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{1}{2}}[a\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} + a^+\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}]$$

$$= x\cos\omega t + p\frac{1}{m\omega}\sin\omega t \tag{11}$$

$$p(t) = \mathrm{i}\left(\frac{m\omega\hbar}{2}\right)^{\frac{1}{2}}[a^{+}(t) - a(t)] = \mathrm{i}\left(\frac{m\omega\hbar}{2}\right)^{\frac{1}{2}}[a^{+}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} - a\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}]$$

$$= p\cos\omega t - xm\omega\sin\omega t \tag{12}$$

注意，x 即 $x(t=0)$，p 即 $p(t=0)$. 式(11)、(12)在经典力学中也是成立的.

10.12　对于一维谐振子，计算 $x(t_1)$、$p(t_1)$及 $x(t_2)$、$p(t_2)$之间的对易式.

解　利用上题结果，易得

$$[x(t_1),x(t_2)] = [x,p]\frac{1}{m\omega}(\cos\omega t_1\sin\omega t_2 - \sin\omega t_1\cos\omega t_2)$$

$$= \frac{\mathrm{i}\hbar}{m\omega}\sin\omega(t_2 - t_1) \tag{1}$$

类似地，可得

$$[p(t_1),p(t_2)] = \mathrm{i}m\omega\hbar\sin\omega(t_2 - t_1) \tag{2}$$

$$[x(t_1),p(t_2)] = \mathrm{i}\hbar\cos\omega(t_2 - t_1) \tag{3}$$

(3) 式中当 $t_1 = t_2 = t$，得到

$$[x(t),p(t)] = \mathrm{i}\hbar \tag{4}$$

这个对易式相当于 Schrödinger 图象中的$[x,p] = \mathrm{i}\hbar$，它不仅适用于谐振子问题，也适用于任何其他问题. 至于式(1)、(2)、(3)，则是谐振子所特有的关系.

10.13　有一个定域电子(作为近似模型，可以不考虑轨道运动)受到均匀磁场作用，磁场 B 指向正 x 方向. 磁作用能为

$$H = \frac{eB}{\mu c}s_x = \frac{e\hbar B}{2\mu c}\sigma_x$$

设 $t=0$ 时电子的自旋“向上”，即 $s_z = \frac{\hbar}{2}$，求 $t>0$ 时，$\boldsymbol{s}$ 的平均值.

解　直接求解 Heisenberg 运动方程

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{s}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[s,H] \tag{1}$$

容易得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}s_x = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[s_x,H] = 0$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}s_y = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[s_y,H] = \frac{2\omega}{\mathrm{i}\hbar}[s_y,s_x] = -2\omega s_z \tag{2}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}s_z=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[s_z,H]=\frac{2\omega}{\mathrm{i}\hbar}[s_z,s_x]=2\omega s_y$$

式中 $\omega=\dfrac{eB}{2\mu c}$. 求平均值,即得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle s_x\rangle=0 \tag{3a}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle s_y\rangle=-2\omega\langle s_z\rangle \tag{3b}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle s_z\rangle=2\omega\langle s_y\rangle \tag{3c}$$

初始条件为

$$\langle s_x\rangle_{t=0}=\langle s_y\rangle_{t=0}=0,\quad \langle s_z\rangle_{t=0}=\frac{\hbar}{2} \tag{4}$$

由式(3a)容易解出

$$\langle s_x\rangle_t=\langle s_x\rangle_{t=0}=0 \tag{5}$$

注意 s_x 为守恒量,由于 $t=0$ 时其平均值为 0,所以 $\langle s_x\rangle_t=0$. 式(3c)+i×式(3b),得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle s_z+\mathrm{i}s_y\rangle=-2\mathrm{i}\omega\langle s_z+\mathrm{i}s_y\rangle \tag{3d}$$

解为

$$\langle s_z+\mathrm{i}s_y\rangle_t=\langle s_z+\mathrm{i}s_y\rangle_{t=0}\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\omega t}=\frac{\hbar}{2}\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\omega t} \tag{6}$$

$\langle s\rangle$应为实数,上式分别取实部、虚部,即得

$$\langle s_z\rangle_t=\frac{\hbar}{2}\cos 2\omega t$$

$$\langle s_y\rangle_t=-\frac{\hbar}{2}\sin 2\omega t \tag{7}$$

此结果与在 Schrödinger 图象中所得结果(见题 6.27)完全一样.

10.14 有一自旋$\frac{\hbar}{2}$的粒子,磁矩 $\boldsymbol{\mu}=\mu_0\boldsymbol{\sigma}$,置于均匀磁场 $\boldsymbol{B}$ 中,$\boldsymbol{B}$ 指向任意方向(θ,φ). 不考虑轨道运动. 设 $t=0$ 时粒子沿正 z 方向极化,即 $\sigma_z=1$,$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_{t=0}=\boldsymbol{e}_3$,试在 Heisenberg 图象中求 $t>0$ 时粒子的极化方向,即求$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_t$.

解一 哈密顿量为

$$H=-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}=-\mu_0 B\sigma_n \tag{1}$$

由 Heisenberg 运动方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{\sigma}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{\sigma},H]=\mathrm{i}\omega[\boldsymbol{\sigma},\sigma_n],\quad \omega=\mu_0 B/\hbar$$

在题 6.21 中已经证明

$$[\boldsymbol{\sigma},\sigma_n]=2\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma} \tag{2}$$

因此

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{\sigma}=-2\omega\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma} \tag{3}$$

以 $\boldsymbol{n}\times$式(3),得到

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})&=-2\omega\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\\&=2\omega(\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{n}\sigma_n)\end{aligned} \tag{4}$$

由于 σ_n 和 H 对易,为运动常数,$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sigma_n=0$. 以 i 乘式(4),和式(3)相加,即得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{\sigma}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{n}\sigma_n)=2\mathrm{i}\omega(\boldsymbol{\sigma}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{n}\sigma_n) \tag{5}$$

上式取平均值,即得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\boldsymbol{\sigma}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{n}\sigma_n\rangle=2\mathrm{i}\omega\langle\boldsymbol{\sigma}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{n}\sigma_n\rangle \tag{5'}$$

其解为

$$\langle\boldsymbol{\sigma}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{n}\sigma_n\rangle_t=\langle\boldsymbol{\sigma}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{n}\sigma_n\rangle_{t=0}\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\omega t} \tag{6}$$

由于 $\langle\dot{\sigma_n}\rangle_t=\langle\sigma_n\rangle_{t=0}$,上式分别取实部和虚部,即得

$$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_t=\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_{t=0}\cos 2\omega t-\boldsymbol{n}\times\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_{t=0}\sin 2\omega t+\boldsymbol{n}\langle\sigma_n\rangle_{t=0}(1-\cos 2\omega t) \tag{7a}$$

$$\boldsymbol{n}\times\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_t=\langle\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{n}\sigma_n\rangle_{t=0}\sin 2\omega t+\boldsymbol{n}\times\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_{t=0}\cos 2\omega t \tag{7b}$$

本题初始条件为

$$\left.\begin{aligned}&\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_{t=0}=\boldsymbol{e}_3,\quad \langle\sigma_n\rangle_{t=0}=n_3\\&\boldsymbol{n}\times\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_{t=0}=\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{e}_3=n_2\boldsymbol{e}_1-n_1\boldsymbol{e}_2\end{aligned}\right\} \tag{8}$$

代入式(7a),即得

$$\left.\begin{aligned}\langle\sigma_x\rangle_t&=n_1n_3(1-\cos 2\omega t)-n_2\sin 2\omega t\\\langle\sigma_y\rangle_t&=n_2n_3(1-\cos 2\omega t)+n_1\sin 2\omega t\\\langle\sigma_z\rangle_t&=n_3^2+(1-n_3^2)\cos 2\omega t\end{aligned}\right\} \tag{9}$$

这和题 6.28 在 Schrödinger 图象中所得结果式(13)完全一致.

解二 利用公式①

$$\chi(t) = U(t)\chi(0) \tag{10}$$

其中

$$U(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar} \tag{11}$$

为体系的时间演变算符. 在 $\chi(t)$态中 $\boldsymbol{\sigma}$ 的平均值为

$$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_t = \chi^+(t)\boldsymbol{\sigma}\chi(t) = \chi^+(0)U^+(t)\boldsymbol{\sigma}U(t)\chi(0)$$

$$= \chi^+(0)\mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht/\hbar}\boldsymbol{\sigma}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}\chi(0) \tag{12}$$

$$= \chi^+(0)\boldsymbol{\sigma}(t)\chi(0) \tag{12'}$$

其中 $\boldsymbol{\sigma}(t)$为 $\boldsymbol{\sigma}$ 在 Heisenberg 图象中的表示,即

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht/\hbar}\boldsymbol{\sigma}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t\sigma_n}\boldsymbol{\sigma}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t\sigma_n}, \quad \omega = \mu_0 B/\hbar \tag{13}$$

利用题 6.26 证明的公式

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_n}\boldsymbol{\sigma}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_n} = \boldsymbol{n}\sigma_n + (\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n}\cos 2\lambda + \boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin 2\lambda \tag{14}$$

即得

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = \boldsymbol{n}\sigma_n + (\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n}\cos 2\omega t - \boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin 2\omega t \tag{15}$$

再利用恒等式

$$(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n} = \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{n}\sigma_n \tag{16}$$

即得

$$\boldsymbol{\sigma}(t) = \boldsymbol{n}\sigma_n(1-\cos 2\omega t) + \boldsymbol{\sigma}\cos 2\omega t - \boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin 2\omega t \tag{15'}$$

代入式(12'),即得

$$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_t = \boldsymbol{n}\langle\sigma_n\rangle_{t=0}(1-\cos 2\omega t) + \langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_{t=0}\cos 2\omega t - \boldsymbol{n}\times\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_{t=0}\sin 2\omega t \tag{17}$$

这和解一所得式(7a)完全一样. 接下去的做法也和解一相同,不再重复.

题 10.13 也可以用这个方法求解.

10.15 两个自旋 1/2 的定域非全同粒子(不考虑轨道运动),相互作用能为

$$H = A\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2$$

$t=0$ 时,粒子 1 自旋"向上"($s_{1z}=1/2$),粒子 2 自旋"向下"($s_{2z}=-1/2$). 试在 Heisenberg 图象中求任意 $t>0$ 时刻(a)粒子 1 自旋"向上"的概率;(b)粒子 1 和 2 自旋均"向上"的概率;(c)总自旋量子数 $S=1$ 和 0 的概率;(d)$\boldsymbol{s}_1$ 和 $\boldsymbol{s}_2$ 的平

① 参看曾谨言. 量子力学. 卷Ⅰ. 北京:科学出版社. 1997. §5.2.

均值.

解一　从自旋算符的 Heisenberg 运动方程入手. 由 H 的构造式易见总自旋 $\boldsymbol{S}$ 和 H 对易，为守恒量，因此总 $\boldsymbol{S}$ 各分量的取值及相应概率均守恒不变，$\boldsymbol{S}^2$ 的取值分布概率也不变. $t=0$ 时体系自旋态 $\alpha(1)\beta(2)$ 是 s_{1z} 及 s_{2z} 的共同本征态，因此也是总 S_z 的本征态，本征值 $S_z=0$. 由于 S_z 是守恒量，所以任何时刻 S_z 只能取本征值 0，不能取其他本征值. 由此可见粒子 1，2 自旋均"向上"$\left(s_{1z}=s_{2z}=\frac{1}{2}, S_z=1\right)$的概率为 0. $t=0$ 时，题 6.47 式(3)成立，总自旋量子数 S=1、0，概率各为 1/2，由于 $\boldsymbol{S}^2$ 守恒，这个概率不随时间改变. 以上为(b)、(c)两项的结论.

为了计算$\langle \boldsymbol{s}_1 \rangle$和$\langle \boldsymbol{s}_2 \rangle$，可以求解 Heisenberg 运动方程.

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{s}_1 = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{s}_1, H] = \mathrm{i}A[\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2, \boldsymbol{s}_1] = -A\boldsymbol{s}_1 \times \boldsymbol{s}_2 \tag{1}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{s}_2 = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{s}_2, H] = \mathrm{i}A[\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2, \boldsymbol{s}_2] = A\boldsymbol{s}_1 \times \boldsymbol{s}_2 \tag{2}$$

两式相加、减，即得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{s}_1 + \boldsymbol{s}_2) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{S} = 0 \tag{3}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{s}_1 - \boldsymbol{s}_2) = -2A\boldsymbol{s}_1 \times \boldsymbol{s}_2 \tag{4}$$

$\boldsymbol{s}_1 \times$式(2)＋式(1)$\times \boldsymbol{s}_2$，可得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{s}_1 \times \boldsymbol{s}_2) = A[\boldsymbol{s}_1 \times (\boldsymbol{s}_1 \times \boldsymbol{s}_2) - (\boldsymbol{s}_1 \times \boldsymbol{s}_2) \times \boldsymbol{s}_2]$$

$$= \frac{A}{2}(\boldsymbol{s}_1 - \boldsymbol{s}_2) \tag{5}$$

计算中用到的 $\boldsymbol{s}_1$ 和 $\boldsymbol{s}_2$ 的三重乘积公式均见题 6.41.

式(5)乘 2i，和式(4)相加，得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{s}_1 - \boldsymbol{s}_2 + 2\mathrm{i}\boldsymbol{s}_1 \times \boldsymbol{s}_2) = \mathrm{i}A(\boldsymbol{s}_1 - \boldsymbol{s}_2 + 2\mathrm{i}\boldsymbol{s}_1 \times \boldsymbol{s}_2) \tag{6}$$

取平均值，并对 t 积分，即得

$$\langle \boldsymbol{s}_1 - \boldsymbol{s}_2 + 2\mathrm{i}\boldsymbol{s}_1 \times \boldsymbol{s}_2 \rangle_t = \langle \boldsymbol{s}_1 - \boldsymbol{s}_2 + 2\mathrm{i}\boldsymbol{s}_1 \times \boldsymbol{s}_2 \rangle_{t=0} \mathrm{e}^{\mathrm{i}At} \tag{7}$$

本题初始条件为

$$\chi(t=0) = \alpha(1)\beta(2) \tag{8}$$

因此

$$\left.\begin{aligned}&\langle \boldsymbol{s}_1\rangle_{t=0}=\left(0,0,\frac{1}{2}\right),\quad \langle \boldsymbol{s}_2\rangle_{t=0}=\left(0,0,-\frac{1}{2}\right)\\&\langle \boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2\rangle_{t=0}=0,\quad \langle \boldsymbol{s}_1-\boldsymbol{s}_2\rangle_{t=0}=(0,0,1)=\boldsymbol{e}_3\\&\langle \boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2\rangle_{t=0}=\langle \boldsymbol{s}_1\rangle_{t=0}\times\langle \boldsymbol{s}_2\rangle_{t=0}=0\end{aligned}\right\}\tag{8'}$$

代入式(7),即得

$$\langle \boldsymbol{s}_1-\boldsymbol{s}_2\rangle_t+2\mathrm{i}\langle \boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2\rangle_t=\mathrm{e}^{\mathrm{i}At}\boldsymbol{e}_3=(\cos At+\mathrm{i}\sin At)\boldsymbol{e}_3\tag{9}$$

由于 $\boldsymbol{s}_1,\boldsymbol{s}_2,\boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2$ 均为厄米算符,平均值为实数,所以

$$\langle \boldsymbol{s}_1-\boldsymbol{s}_2\rangle_t=\boldsymbol{e}_3\cos At\tag{10}$$

$$\langle \boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2\rangle_t=\frac{1}{2}\boldsymbol{e}_3\sin At\tag{11}$$

式(3)表明 $\boldsymbol{S}$ 守恒,由初始条件(8′)可知

$$\langle \boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2\rangle_t=\langle \boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2\rangle_{t=0}=0\tag{12}$$

式(10)、(12)相加、减,即得

$$\langle \boldsymbol{s}_1\rangle_t=-\langle \boldsymbol{s}_2\rangle_t=\frac{1}{2}\boldsymbol{e}_3\cos At\tag{13}$$

亦即

$$\left.\begin{aligned}&\langle s_{1x}\rangle_t=\langle s_{1y}\rangle_t=\langle s_{2x}\rangle_t=\langle s_{2y}\rangle_t=0\\&\langle s_{1z}\rangle_t=-\langle s_{2z}\rangle_t=\frac{1}{2}\cos At\end{aligned}\right.\tag{13'}$$

这结果和题 6.47 所得式(5)一致. 式(11)相当于

$$\left.\begin{aligned}&\langle s_{1x}s_{2y}-s_{1y}s_{2x}\rangle_t=\frac{1}{2}\sin At\\&\langle s_{1y}s_{2z}-s_{1z}s_{2y}\rangle_t=0\\&\langle s_{1z}s_{2x}-s_{1x}s_{2z}\rangle_t=0\end{aligned}\right.\tag{11'}$$

读者不难利用题 6.47 所得式(4′)验证这个结论,但在那里是不容易发现这个结果的.

设 $t>0$ 时粒子 1 自旋"向上"$\left(s_{1z}=\frac{1}{2}\right)$的概率为 $w(t)$,则

$$\langle s_{1z}\rangle_t=\frac{1}{2}\cos At=\frac{1}{2}w(t)-\frac{1}{2}[1-w(t)]=w(t)-\frac{1}{2}$$

由此求得

$$w(t)=\frac{1}{2}(1+\cos At)=\cos^2\frac{At}{2}\tag{14}$$

解二　利用平均值公式的 Heisenberg 图象

$$\langle \boldsymbol{s}_1 \rangle_t = \langle \chi(0) \mid \boldsymbol{s}_1(t) \mid \chi(0) \rangle = \langle \chi(0) \mid U^+(t)\boldsymbol{s}_1 U(t) \mid \chi(0) \rangle \tag{15}$$

其中

$$\left.\begin{aligned} U(t) &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}At\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2} \\ U^+(t) &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}At\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2} \end{aligned}\right\} \tag{16}$$

$\boldsymbol{s}_1(t)$可以化成(取 $\lambda = At$)

$$\begin{aligned} \boldsymbol{s}_1(t) &= U^+(t)\boldsymbol{s}_1 U(t) \\ &= \frac{1}{2}(\boldsymbol{s}_1 + \boldsymbol{s}_2) + \frac{1}{2}(\boldsymbol{s}_1 - \boldsymbol{s}_2)\cos At - \boldsymbol{s}_1 \times \boldsymbol{s}_2 \sin At \end{aligned} \tag{17}$$

代入式(15),并利用初始平均值

$$\begin{aligned} \langle \boldsymbol{s}_1 \rangle_{t=0} &= \langle \chi(0) \mid \boldsymbol{s}_1 \mid \chi(0) \rangle = \langle \alpha(1) \mid \boldsymbol{s}_1 \mid \alpha(1) \rangle \\ &= \left(0, 0, \frac{1}{2}\right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \boldsymbol{s}_2 \rangle_{t=0} &= \langle \chi(0) \mid \boldsymbol{s}_2 \mid \chi(0) \rangle = \langle \beta(2) \mid \boldsymbol{s}_2 \mid \beta(2) \rangle \\ &= \left(0, 0, -\frac{1}{2}\right) \end{aligned}$$

$$\langle \boldsymbol{s}_1 \times \boldsymbol{s}_2 \rangle_{t=0} = \langle \boldsymbol{s}_1 \rangle_{t=0} \times \langle \boldsymbol{s}_2 \rangle_{t=0} = 0 \tag{18}$$

即得

$$\begin{aligned} \langle \boldsymbol{s}_1 \rangle_t &= \frac{1}{2}\langle \boldsymbol{s}_1 + \boldsymbol{s}_2 \rangle_{t=0} + \frac{1}{2}\langle \boldsymbol{s}_1 - \boldsymbol{s}_2 \rangle_{t=0} \cos At - \langle \boldsymbol{s}_1 \times \boldsymbol{s}_2 \rangle_{t=0} \sin At \\ &= \frac{1}{2}\boldsymbol{e}_3 \cos At \end{aligned} \tag{19}$$

总自旋 $\boldsymbol{S} = \boldsymbol{s}_1 + \boldsymbol{s}_2$,和 $\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2$ 对易,因此和 U、U^+ 对易,所以

$$\boldsymbol{S}(t) = \boldsymbol{S} = \boldsymbol{s}_1 + \boldsymbol{s}_2 \tag{20}$$

$$\langle \boldsymbol{S} \rangle_t = \langle \boldsymbol{s}_1 + \boldsymbol{s}_2 \rangle_t = \langle \boldsymbol{s}_1 + \boldsymbol{s}_2 \rangle_{t=0} = 0 \tag{21}$$

因此

$$\langle \boldsymbol{s}_2 \rangle_t = \langle \boldsymbol{S} \rangle_t - \langle \boldsymbol{s}_1 \rangle_t = -\langle \boldsymbol{s}_1 \rangle_t = -\frac{1}{2}\boldsymbol{e}_3 \cos At \tag{22}$$

这些结果都和解一相同. 概率的计算方法和解一完全一样,结果当然也一样,从略.

10.16　对于自旋为 1/2 的粒子,常称$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle$为极化矢量,记作 $\boldsymbol{P}$. 它也就是自旋角动量的空间指向. 设粒子为定域的,并受到沿 z 方向但强度随时间变化的磁场

$\boldsymbol{B}(t)$的作用,作用势为

$$H = -\mu_0 \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{B}(t) = -\mu_0 \sigma_z B(t)$$

在 Heisenberg 图象中求极化矢量随时间变化的规律,即求 $\boldsymbol{P}(t)=\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_t$. 设 $\boldsymbol{P}(t=0)$ 指向(θ_0, φ_0)方向,$\theta_0 = 2\delta, \varphi_0 = 2\alpha$.

解 按照 Heisenberg 运动方程.

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sigma_z = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\sigma_z, H] = 0$$

所以

$$\langle \sigma_z \rangle_t = \langle \sigma_z \rangle_{t=0} = \cos\theta_0 = \cos 2\delta \tag{1}$$

此外,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sigma_x = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\sigma_x, H] = -\frac{\mu_0}{\mathrm{i}\hbar}B(t)[\sigma_x, \sigma_z] = \frac{2\mu_0}{\hbar}B(t)\sigma_y \tag{2}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sigma_y = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\sigma_y, H] = -\frac{2\mu_0}{\hbar}B(t)\sigma_x$$

二式合并,易得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\sigma_x + \mathrm{i}\sigma_y) = -\mathrm{i}\frac{2\mu_0}{\hbar}B(t)(\sigma_x + \mathrm{i}\sigma_y) \tag{3}$$

求平均值,并对 t 积分,即得

$$\langle \sigma_x + \mathrm{i}\sigma_y \rangle_t = \langle \sigma_x + \mathrm{i}\sigma_y \rangle_{t=0} \exp\left[-\mathrm{i}\frac{2\mu_0}{\hbar}\int_0^t B(\tau)\mathrm{d}\tau\right] \tag{4}$$

$\langle \sigma_x \rangle$、$\langle \sigma_y \rangle$均为实数,上式中分开实部、虚部,即得

$$\langle \sigma_x \rangle_t = \langle \sigma_x \rangle_{t=0} \cos\left[\frac{2\mu_0}{\hbar}\int_0^t B(\tau)\mathrm{d}\tau\right] + \langle \sigma_y \rangle_{t=0} \sin\left[\frac{2\mu_0}{\hbar}\int_0^t B(\tau)\mathrm{d}\tau\right] \tag{5}$$

$$\langle \sigma_y \rangle_t = \langle \sigma_y \rangle_{t=0} \cos\left[\frac{2\mu_0}{\hbar}\int_0^t B(\tau)\mathrm{d}\tau\right] - \langle \sigma_x \rangle_{t=0} \sin\left[\frac{2\mu_0}{\hbar}\int_0^t B(\tau)\mathrm{d}\tau\right]$$

初始平均值为

$$\langle \sigma_x \rangle_{t=0} = \sin 2\delta \cos 2\alpha, \quad \langle \sigma_y \rangle_{t=0} = \sin 2\delta \sin 2\alpha \tag{6}$$

代入式(5),并按题 6.30 式(10)定义 $\varphi(t)$,即得

$$\langle \sigma_x \rangle_t = \sin 2\delta \cos\varphi(t), \quad \langle \sigma_y \rangle_t = \sin 2\delta \sin\varphi(t) \tag{7}$$

$$\boldsymbol{P}(t) = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_t = (\sin 2\delta \cos\varphi(t), \sin 2\delta \sin\varphi(t), \cos 2\delta) \tag{8}$$

这些结果和题 6.30 所得的式(13)、(14)完全一致.

第十一章　定态微扰论

11.1　求非简并态能级的三级微扰修正公式.

解　设 $H=H_0+H'$，H'为微扰. H 的本征函数、本征值表示成

$$\begin{aligned}\psi_n &=\psi_n^{(0)}+\psi_n^{(1)}+\psi_n^{(2)}+\psi_n^{(3)}+\cdots\\ E_n &=E_n^{(0)}+E_n^{(1)}+E_n^{(2)}+E_n^{(3)}+\cdots\end{aligned}\tag{1}$$

式中右边各项分别表示零级近似、一级修正、二级修正、三级修正、…，规定 $\psi_n^{(0)}$ 是归一化的(ψ_n 未归一化)，并规定波函数的各修正项中不再包含 $\psi_n^{(0)}$，即各修正项均和 $\psi_n^{(0)}$ 正交：

$$\langle\psi_n^{(0)}\mid\psi_n^{(s)}\rangle=0.\quad s=1,2,3,\cdots\tag{2}$$

将展开式(1)代入能量本征方程

$$H\psi_n=(H_0+H')\psi_n=E_n\psi_n\tag{3}$$

得到(下标 n 暂时省略)

$$\begin{aligned}&(H_0+H')[\psi^{(0)}+\psi^{(1)}+\psi^{(2)}+\cdots]\\ &=[E^{(0)}+E^{(1)}+E^{(2)}+\cdots][\psi^{(0)}+\psi^{(1)}+\psi^{(2)}+\cdots]\end{aligned}$$

按量级分开，有下列各式：

零级项　$$(H_0-E^{(0)})\psi^{(0)}=0\tag{4}$$

一级项　$$(H_0-E^{(0)})\psi^{(1)}=(E^{(1)}-H')\psi^{(0)}\tag{5}$$

二级项　$$(H_0-E^{(0)})\psi^{(2)}=(E^{(1)}-H')\psi^{(1)}+E^{(2)}\psi^{(0)}\tag{6}$$

三级项　$$(H_0-E^{(0)})\psi^{(3)}=(E^{(1)}-H')\psi^{(2)}+E^{(2)}\psi^{(1)}+E^{(3)}\psi^{(0)}\tag{7}$$

等等，其中式(4)表示 $\psi^{(0)}$、$E^{(0)}$ 是 H_0 的本征函数、本征值. 以 $\psi^{(0)*}$ 左乘各式，并对全空间积分，利用正交条件(2)，即得

$$\boxed{E^{(1)}=\langle\psi^{(0)}\mid H'\mid\psi^{(0)}\rangle}\tag{8}$$

$$E^{(2)}=\langle\psi^{(0)}\mid H'\mid\psi^{(1)}\rangle\tag{9}$$

$$E^{(3)}=\langle\psi^{(0)}\mid H'\mid\psi^{(2)}\rangle\tag{10}$$

在许多场合，ψ 总是计算到一级修正项，因此式(10)不便于具体应用. 下面变化 $E^{(3)}$ 的表示式.

以 $\psi^{(1)*}$ 左乘式(6)，积分，得到

$$\langle\psi^{(1)}\mid(H_0-E^{(0)})\mid\psi^{(2)}\rangle=\langle\psi^{(1)}\mid(E^{(1)}-H')\mid\psi^{(1)}\rangle\tag{11}$$

以 $\psi^{(2)*}$ 左乘式(5),并积分,则得

$$\langle\psi^{(2)} \mid (H_0 - E^{(0)}) \mid \psi^{(1)}\rangle = -\langle\psi^{(2)} \mid H' \mid \psi^{(0)}\rangle = -E^{(3)} \tag{12}$$

因 H'为厄米算符,式(11)两端均应为实数,则式(11)与(12)左端相等,由此得到

$$\boxed{E^{(3)} = \langle\psi^{(1)} \mid (H' - E^{(1)}) \mid \psi^{(1)}\rangle} \tag{13}$$

此式便于应用. 如所周知,ψ 的一级修正为(以下添回下标 n)

$$\boxed{\psi_n^{(1)} = \sum_k{}' \frac{H'_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}\psi_k^{(0)}} \tag{14}$$

其中

$$H'_{kn} \equiv \langle\psi_k^{(0)} \mid H' \mid \psi_n^{(0)}\rangle \tag{15}$$

代入式(9)和(13),即得

$$\boxed{E_n^{(2)} = \sum_k{}' \frac{|H'_{kn}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}} \tag{16}$$

$$E_n^{(3)} = \sum_l{}' \sum_k{}' \frac{H'_{nl}H'_{lk}H'_{kn}}{(E_n^{(0)} - E_l^{(0)})(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})} - H'_{nn}\sum_k{}' \frac{|H'_{kn}|^2}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2} \tag{17}$$

各式中 $\sum_k{}'$ 表示求和时不包含 $k=n$ 项①.

11.2 有一个量子力学体系,其 Hamilton 算符为

$$H = H_0 + H' \tag{1}$$

H_0 为零级 Hamilton 量,H'为微扰. H_0 的本征函数和本征值记为

$$\psi_k^{(0)}, \quad E_k^{(0)}, \quad k = 1,2,\cdots,n,\cdots$$

设能级 $E_n^{(0)}$ 是二重简并的,相应的正交归一化的本征态记为 $\psi_{n\alpha}^{(0)}$、$\psi_{n\beta}^{(0)}$,简记为 ψ_α、ψ_β. 在 H_0 表象中,微扰矩阵元记为

$$\langle\psi_{n\alpha}^{(0)} \mid H' \mid \psi_k^{(0)}\rangle = H'_{\alpha k}$$
$$\langle\psi_{n\beta}^{(0)} \mid H' \mid \psi_k^{(0)}\rangle = H'_{\beta k}$$
$$\langle\psi_{n\alpha}^{(0)} \mid H' \mid \psi_{n\beta}^{(0)}\rangle = H'_{\alpha\beta}$$
$$\langle\psi_{n\alpha}^{(0)} \mid H' \mid \psi_{n\alpha}^{(0)}\rangle = H'_{\alpha\alpha} = \varepsilon_\alpha$$
$$\langle\psi_{n\beta}^{(0)} \mid H' \mid \psi_{n\beta}^{(0)}\rangle = H'_{\beta\beta} = \varepsilon_\beta$$

---

① 参考:曾谨言. 量子力学. 卷Ⅰ. 北京:科学出版社,1997. §10.1;Schiff. 量子力学. 北京:高等教育出版社,1981. §31;Landau 等. 量子力学. 北京:高等教育出版社,1980. §38.

等等. 试导出能级 $E_n^{(0)}$ 的微扰修正公式(二级近似),并讨论所得结果.

解　设微扰作用后,能级 $E_n^{(0)}$ 变成

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \cdots \tag{2}$$

H 的相应本征态为

$$\psi_n = \psi^{(0)} + \psi^{(1)} + \psi^{(2)} + \cdots \tag{3}$$

零级近似 $\psi^{(0)}$ 由两个简并态 ψ_α、ψ_β 组成:

$$\psi^{(0)} = C_\alpha \psi_\alpha + C_\beta \psi_\beta \tag{4}$$

和上题相同,仍规定波函数的各修正项和 $\psi^{(0)}$ 正交:

$$\langle \psi^{(0)} \mid \psi^{(1)} \rangle = 0, \quad \langle \psi^{(0)} \mid \psi^{(2)} \rangle = 0 \tag{5}$$

因此

$$\psi^{(1)} = \sum_k{}' C_k \psi_k^{(0)} \quad (k \neq n) \tag{6}$$

将式(2)、(3)代入能量本征方程

$$H\psi_n = (H_0 + H')\psi_n = E_n \psi_n \tag{7}$$

并按量级分开,可得

$$\text{零级项} \qquad [H_0 - E_n^{(0)}]\psi^{(0)} = 0 \tag{8}$$

$$\text{一级项} \qquad [H_0 - E_n^{(0)}]\psi^{(1)} = [E_n^{(1)} - H']\psi^{(0)} \tag{9}$$

$$\text{二级项} \qquad [H_0 - E_n^{(0)}]\psi^{(2)} = [E_n^{(1)} - H']\psi^{(1)} + E_n^{(2)}\psi^{(0)} \tag{10}$$

其中式(8)已自动满足. 以 ψ_α^* 和 ψ_β^* 分别左乘式(9),并对全空间积分,由于 ψ_α 和 ψ_β 均与 $\psi^{(1)}$ 正交,故得

$$\begin{cases} [\varepsilon_\alpha - E_n^{(1)}]C_\alpha + H'_{\alpha\beta}C_\beta = 0 \\ H'_{\beta\alpha}C_\alpha + [\varepsilon_\beta - E_n^{(1)}]C_\beta = 0 \end{cases} \tag{11}$$

上式相当于 $\{\psi_\alpha, \psi_\beta\}$ 子空间中 H' 的本征方程,即

$$H'\psi^{(0)} = \begin{bmatrix} \varepsilon_\alpha & H'_{\alpha\beta} \\ H'_{\beta\alpha} & \varepsilon_\beta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_\alpha \\ C_\beta \end{bmatrix} = E_n^{(1)} \begin{bmatrix} C_\alpha \\ C_\beta \end{bmatrix} = E_n^{(1)}\psi^{(0)} \tag{11'}$$

方程组(11)存在非平庸解的必要条件为

$$\begin{vmatrix} \varepsilon_\alpha - E_n^{(1)} & H'_{\alpha\beta} \\ H'_{\beta\alpha} & \varepsilon_\beta - E_n^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \tag{12}$$

这是 $E_n^{(1)}$ 的二次方程,其解为

$$\boxed{E_n^{(1)} = \frac{1}{2}[(\varepsilon_\alpha + \varepsilon_\beta) \pm \sqrt{(\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta)^2 + 4H'_{\alpha\beta}H'_{\beta\alpha}}] = E_\pm^{(1)}} \tag{13}$$

这结果表明,一般而言,在一级微扰近似中能级 $E_n^{(0)}$ 已发生分裂.

将 $E_n^{(1)}=E_+^{(1)}$ 和 $E_-^{(1)}$ 分别代回式(11),就可求出相应的零级波函数 $\psi^{(0)}$,记为 $\psi_+^{(0)}$ 和 $\psi_-^{(0)}$.

将 $E_+^{(1)}$、$\psi_+^{(0)}$ 或 $E_-^{(1)}$、$\psi_-^{(0)}$ 代入式(9),(10),可以求出相应的 $\psi^{(1)}$ 和 $E_n^{(2)}$,如下:

以 $\psi_k^{(0)*}$ 左乘式(9),利用式(6)并对全空间积分,即得

$$C_k=\frac{1}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}\langle\psi_k^{(0)}\mid H'\mid\psi^{(0)}\rangle \tag{14}$$

$$=\frac{1}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}(H'_{k\alpha}C_\alpha+H'_{k\beta}C_\beta) \tag{14'}$$

代入式(6),即得

$$\boxed{\psi^{(1)}=\sum_k{}'\frac{1}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}\langle\psi_k^{(0)}\mid H'\mid\psi^{(0)}\rangle\psi_k^{(0)}} \tag{15}$$

$$\boxed{=\sum_k{}'\frac{1}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}(H'_{k\alpha}C_\alpha+H'_{k\beta}C_\beta)\psi_k^{(0)}} \tag{15'}$$

以 $\psi^{(0)*}$ 左乘式(10),并对全空间积分,即得

$$\boxed{E_n^{(2)}=\langle\psi^{(0)}\mid H'\mid\psi^{(1)}\rangle} \tag{16}$$

亦即

$$E_n^{(2)}=\sum_k{}'\frac{1}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}\mid\langle\psi_k^{(0)}\mid H'\mid\psi^{(0)}\rangle\mid^2 \tag{16'}$$

$$=\sum_k{}'\frac{1}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}[\mid C_\alpha\mid^2\mid H'_{k\alpha}\mid^2$$

$$+\mid C_\beta\mid^2\mid H'_{k\beta}\mid^2+C_\alpha^*C_\beta H'_{\alpha k}H'_{k\beta}+C_\beta^*C_\alpha H'_{\beta k}H'_{k\alpha}] \tag{16''}$$

式(14)、(15)、(16)形式上和非简并态微扰论公式相同.但现在 $\psi^{(0)}$ 系由两个简并态 ψ_α 和 ψ_β 叠加而成,而在非简并态公式中 $\psi^{(0)}$ 即 $\psi_n^{(0)}$.

式(16″)表明,能级的二级修正相应于由 H' 造成的下列耦合:ψ_α-$\psi_k^{(0)}$-ψ_α,ψ_α-$\psi_k^{(0)}$-ψ_β,ψ_β-$\psi_k^{(0)}$-ψ_β,公式中 H' 的矩阵元就代表这种耦合.

讨论 1° 如在$\{\psi_\alpha,\psi_\beta\}$子空间中 H' 的对角元不相等,而非对角元为零,即

$$\varepsilon_\alpha>\varepsilon_\beta,\quad H'_{\alpha\beta}=H'_{\beta\alpha}=0 \tag{17}$$

这时式(13)给出

$$E_+^{(1)}=\varepsilon_\alpha=H'_{\alpha\alpha},\quad E_-^{(1)}=\varepsilon_\beta=H'_{\beta\beta} \tag{18}$$

而式(11)给出

$$\begin{aligned}&E_n^{(1)}=E_+^{(1)}=\varepsilon_\alpha,\quad C_\alpha=1,\quad C_\beta=0,\quad \psi_+^{(0)}=\psi_\alpha\\&E_n^{(1)}=E_-^{(1)}=\varepsilon_\beta,\quad C_\alpha=0,\quad C_\beta=1,\quad \psi_-^{(0)}=\psi_\beta\end{aligned} \tag{19}$$

即两个简并态并不发生耦合. 式(14)至(16″)形式上均和非简并态微扰论公式相同. 简言之,这种情况可按非简并态处理.

2°　如

$$\varepsilon_\alpha = \varepsilon_\beta = \varepsilon, \quad H'_{\alpha\beta} = |H'_{\alpha\beta}| e^{i\delta} \neq 0 \tag{20}$$

这时式(13)给出

$$E_\pm^{(1)} = \varepsilon \pm |H'_{\alpha\beta}| \tag{21}$$

而式(11)给出

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= E_+^{(1)}, \quad C_\alpha = C_\beta e^{i\delta} \\ \psi_+^{(0)} &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_\alpha + e^{-i\delta}\psi_\beta] \\ E_n^{(1)} &= E_-^{(1)}, \quad C_\alpha = -C_\beta e^{i\delta} \\ \psi_-^{(0)} &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_\alpha - e^{-i\delta}\psi_\beta] \end{aligned} \tag{22}$$

在 $\psi_\pm^{(0)}$ 中 ψ_α 和 ψ_β 的成分各占一半.

如选择 ψ_α 和 ψ_β 的相因子,使 $H'_{\alpha\beta} = H'_{\beta\alpha}$ = 实数,则

$$E_n^{(1)} = \varepsilon \pm H'_{\alpha\beta}, \quad C_\alpha = \pm C_\beta \tag{22'}$$

$$\psi^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_\alpha \pm \psi_\beta]$$

3°　如

$$\varepsilon_\alpha = \varepsilon_\beta = \varepsilon, \quad H'_{\alpha\beta} = H'_{\beta\alpha} = 0 \tag{23}$$

这种情况下,在 $\{\psi_\alpha, \psi_\beta\}$ 子空间中 H' 的作用和常数 ε 相同. 这时 $E_n^{(1)} = \varepsilon$,在一级近似下能级并不分裂,$\psi^{(0)}$ 也因此而未能完全确定. 这种情况下,确定 $\psi^{(0)}$(即求 C_α, C_β)和计算 $E_n^{(2)}$ 将同时进行,亦即能级分裂将发生在二级修正中. 请参看下题.

11.3　同上题,设 $H'_{\alpha\alpha} = H'_{\beta\beta} = \varepsilon$, $H'_{\alpha\beta} = 0$,求能级 $E_n^{(0)}$ 的微扰修正公式(二级近似).

解　上题中,到式(16″)为止仍然成立. 其中式(12)或(13)给出

$$E_n^{(1)} = \varepsilon \tag{1}$$

因此无法利用式(11)确定 C_α、C_β.

以 ψ_α^* 和 ψ_β^* 分别左乘上题式(10),并对全空间积分,由于 ψ_α 和 ψ_β 均与 $\psi^{(1)}$、$\psi^{(2)}$ 正交,故得

$$E_n^{(2)} C_\alpha = \sum_k{}' H'_{\alpha k} C_k$$

$$E_n^{(2)}C_\beta = \sum_k{}' H'_{\beta k}C_k \tag{2}$$

而上题式(14′)已得

$$C_k = \frac{1}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}(H'_{k\alpha}C_\alpha + H'_{k\beta}C_\beta) \tag{3}$$

代入式(2),即得

$$\begin{cases} \left[-E_n^{(2)} + \sum_k{}' \dfrac{H'_{\alpha k}H'_{k\alpha}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}\right]C_\alpha + \sum_k{}' \dfrac{H'_{\alpha k}H'_{k\beta}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}C_\beta = 0 \\ \sum_k{}' \dfrac{H'_{\beta k}H'_{k\alpha}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}C_\alpha + \left[-E_n^{(2)} + \sum_k{}' \dfrac{H'_{\beta k}H'_{k\beta}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}\right]C_\beta = 0 \end{cases} \tag{4}$$

存在非平庸解的条件为 C_α、C_β 的系数行列式等于 0,即

$$\begin{vmatrix} A - E_n^{(2)} & D^* \\ D & B - E_n^{(2)} \end{vmatrix} = 0 \tag{5}$$

其中

$$A = \sum_k{}' = \frac{|H'_{k\alpha}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

$$B = \sum_k{}' = \frac{|H'_{k\beta}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \tag{6}$$

$$D = \sum_k{}' = \frac{H'_{\beta k}H'_{k\alpha}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

由式(5)解出 $E_n^{(2)}$,再代回式(4),即可求出 C_α、C_β,即求得 $\psi^{(0)}$;再代入式(3),即可求出各 C_k,即求得 $\psi^{(1)}$.

讨论 **1°** 如果对于所有 $\psi_k^{(0)}$,均有 $H'_{\beta k}H'_{k\alpha}=0$,则在二级微扰近似中,不发生 ψ_α 和 ψ_β 态的耦合,这种情况下,$D=0$,式(5)和(4)给出

$$\begin{aligned} &E_n^{(2)} = A, \quad C_\alpha = 1, \quad C_\beta = 0, \quad \psi^{(0)} = \psi_\alpha \\ &E_n^{(2)} = B, \quad C_\alpha = 0, \quad C_\beta = 1, \quad \psi^{(0)} = \psi_\beta \end{aligned} \tag{7}$$

这些结果和非简并态微扰论的结果一样.

但是,如 $D=0$ 而 $A=B$,则在二级微扰近似下,能级简并仍未消除,因此 $\psi^{(0)}$ 也不能完全确定. 这种情况下,$\psi^{(0)}$ 的确定将和计算 $E_n^{(3)}$ 同时进行,亦即能级分裂将发生在三级近似中.

2° 如果由于 ψ_α、ψ_β 的对称性,使 $A=B$ 而且 D 为实数,则式(4)、(5)给出

$$\begin{aligned} &E_n^{(2)} = A \pm D, \quad C_\alpha = \pm C_\beta \\ &\psi^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_\alpha \pm \psi_\beta) \end{aligned} \tag{8}$$

3°　如果只有一个 $\psi_k^{(0)}$ 使 $H'_{k\alpha}$ 及 $H'_{k\beta}$ 不等于 0，这时选择 ψ_α、ψ_β 及 $\psi_k^{(0)}$ 的相因子，总可以使这两个矩阵元为实数，令

$$H'_{k\alpha}=a,\quad H'_{k\beta}=b$$

则式(4)、(5)给出

$$E_n^{(2)}=0,\quad C_\alpha=-\frac{b}{a}C_\beta$$

$$\begin{aligned}\psi^{(0)}&=\frac{1}{\sqrt{a^2+b^2}}(b\psi_\alpha-a\psi_\beta)\\ E_n^{(2)}&=\frac{a^2+b^2}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}},\quad C_\alpha=\frac{a}{b}C_\beta\\ \psi^{(0)}&=\frac{1}{\sqrt{a^2+b^2}}(a\psi_\alpha+b\psi_\beta)\end{aligned}\tag{9}$$

11.4　粒子在一维势场 $V(x)$ 中运动，能级为 $E_n^{(0)}$，$n=1,2,3,\cdots$. 如受到微扰 $H'=\frac{\lambda}{m}p$ 作用，求能级修正(三级近似)，并和能级的精确值比较.

解　微扰前能量算符为

$$H_0=\frac{p^2}{2m}+V(x)\tag{1}$$

H_0 的本征函数记为 $\psi_n^{(0)}$ 或 $|n\rangle$. 利用对易式

$$[x,p]=\mathrm{i}\hbar\tag{2}$$

易得

$$\frac{m}{\mathrm{i}\hbar}[x,H_0]=\frac{m}{\mathrm{i}\hbar}(xH_0-H_0x)=p\tag{3}$$

因此在 H_0 表象中(以 $|n\rangle$ 为基矢)有矩阵元关系

$$\langle k\mid p\mid n\rangle=\mathrm{i}m\omega_{kn}\langle k\mid x\mid n\rangle\tag{4}$$

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

$$E_n^{(1)}=\langle n\mid H'\mid n\rangle=\frac{\lambda}{m}\langle n\mid p\mid n\rangle=\mathrm{i}\lambda\omega_{nn}\langle n\mid x\mid n\rangle=0\tag{5}$$

二级修正为

$$E_n^{(2)}=\sum_k{}'\frac{|H'_{kn}|^2}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}=\frac{\lambda^2}{\hbar}\sum_k{}'\frac{\omega_{kn}^2\mid x_{kn}\mid^2}{\omega_{nk}}$$

$$=-\frac{\lambda^2}{\hbar^2}\sum_k (E_k^{(0)}-E_n^{(0)})\mid x_{kn}\mid^2 =-\frac{\lambda^2}{2m} \tag{6}$$

最后一步利用了求和规则(见题 10.2)

$$\sum_k (E_k^{(0)}-E_n^{(0)})\mid x_{kn}\mid^2 =\frac{\hbar^2}{2m} \tag{7}$$

三级微扰能为[见题 11.1 的式(17),注意 $H'_{nn}=0$]

$$E_n^{(3)}=\sum_l{}'\sum_k{}'\frac{H'_{nl}H'_{lk}H'_{kn}}{(E_n^{(0)}-E_l^{(0)})(E_n^{(0)}-E_k^{(0)})}=\frac{\lambda^3}{m^3\hbar^2}\sum_l{}'\sum_k{}'\frac{p_{nl}p_{lk}p_{kn}}{\omega_{nl}\omega_{nk}}$$

以式(4)代入上式,得到

$$E_n^{(3)}=\mathrm{i}\frac{\lambda^3}{\hbar^2}\sum_l{}'\sum_k{}'\omega_{lk}x_{nl}x_{lk}x_{kn} \tag{8}$$

因一维束缚态波函数为实函数,x_{nl} 等均为实数,$x_{nl}=x_{ln}$,故上式又可写成

$$E_n^{(3)}=\mathrm{i}\frac{\lambda^3}{\hbar^2}\sum_l{}'\sum_k{}'(-\omega_{kl})x_{nk}x_{kl}x_{ln} \tag{8'}$$

易见式(8)和(8′)右端刚好相差一个因子(−1),因此

$$E_n^{(3)}=-E_n^{(3)},\quad E_n^{(3)}=0 \tag{9}$$

也可以这样推理:$E_n^{(3)}$ 应为实数,而式(8)右端如不为 0,只能是纯虚数,所以 $E_n^{(3)}=0$.

本题能级可以利用 Hellmann 定理或 p 表象精确求解(见题 8.7),结果为

$$E_n=E_n^{(0)}-\frac{\lambda^2}{2m} \tag{10}$$

和上述微扰论三级近似相符合.

11.5 有一量子力学体系、能量算符 H_0,本征态 ψ_0、ψ_1、…、ψ_n、…记为$|0\rangle$、$|1\rangle$、…、$|n\rangle$、….给定厄米算符 A、B,以及 $C=\mathrm{i}[B,A]$. 设体系受到微扰作用,微扰算符可以表示成

$$\boxed{H'=\mathrm{i}\lambda[A,H_0]},\quad [\lambda(\text{实数})\text{为小量}] \tag{1}$$

如在微扰作用前的基态 ψ_0 下,A、B、C 的平均值为已知,记为 A_0、B_0、C_0,试对微扰后的基态(非简并)计算$\langle B\rangle$,准确到量级 λ.

解 根据题设,已知

$$\langle 0\mid A\mid 0\rangle=A_0,\quad \langle 0\mid B\mid 0\rangle=B_0,\quad \langle 0\mid C\mid 0\rangle=C_0 \tag{2}$$

按照微扰论公式,微扰作用后的基态为

$$\varphi_0=\psi_0+\sum_n{}'\frac{H'_{n0}}{E_0^{(0)}-E_n^{(0)}}\psi_n \tag{3}$$

即

$$|\varphi_0\rangle = |0\rangle + \sum_n{}' \frac{H'_{n0}}{E_0^{(0)} - E_n^{(0)}} |n\rangle \tag{3'}$$

其中

$$\begin{aligned} H'_{n0} &= \langle n | H' | 0\rangle = \mathrm{i}\lambda\langle n | (AH_0 - H_0A) | 0\rangle \\ &= \mathrm{i}\lambda(E_0^{(0)} - E_n^{(0)})\langle n | A | 0\rangle \end{aligned} \tag{4}$$

所以

$$\begin{aligned} |\varphi_0\rangle &= |0\rangle + \mathrm{i}\lambda \sum_n{}' |n\rangle\langle n | A | 0\rangle \\ &= |0\rangle + \mathrm{i}\lambda \sum_n |n\rangle\langle n | A | 0\rangle - \mathrm{i}\lambda A_0 | 0\rangle \end{aligned}$$

即

$$|\varphi_0\rangle = |0\rangle + \mathrm{i}\lambda(A - A_0) | 0\rangle \tag{5}$$

计算中利用了公式

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$$

由式(5)易得

$$\langle\varphi_0 | \varphi_0\rangle = 1 + \lambda^2(\langle 0 | A^2 | 0\rangle - A_0^2) \tag{6}$$

所以式(5)已经归一化至量级 λ.

在 φ_0 态下,算符 B 的平均值(准至量级 λ)为

$$\begin{aligned} \langle\varphi_0 | B | \varphi_0\rangle = &\langle 0 | B | 0\rangle + \mathrm{i}\lambda\langle 0 | B(A - A_0) | 0\rangle \\ &- \mathrm{i}\lambda\langle 0 | (A - A_0)B | 0\rangle + \lambda^2 \text{ 项} \end{aligned}$$

略去 λ^2 项,即得

$$\langle\varphi_0 | B | \varphi_0\rangle = B_0 + \mathrm{i}\lambda\langle 0 | (BA - AB) | 0\rangle = B_0 + \lambda C_0 \tag{7}$$

从以上整个推导过程来看,如将 ψ_0(即$|0\rangle$)换成 H_0 的任何一个非简并的本征态,φ_0 换成 H 的相应本征态,结果显然仍成立,因此式(5)和(7)适用于任何非简并的能量本征态.

11.6　(a)质量为 m 的粒子在一维区域

$$-\frac{L}{2} \leqslant x \leqslant \frac{L}{2}$$

中自由运动,波函数满足周期性边界条件

$$\psi\left(-\frac{L}{2}\right) = \psi\left(\frac{L}{2}\right)$$

试写出能级和能量本征函数.(b)如粒子还受到一个“陷阱”的作用,作用势为

$$H' = -V_0 e^{-x^2/a^2}, \quad a \ll L \tag{1}$$

试用微扰论计算能级修正(一级近似).

解 (a) 作自由运动的粒子,能量本征函数为

$$\psi^{(0)} \sim e^{ikx}, \quad e^{-ikx} \quad 或 \quad \cos kx, \quad \sin kx \tag{2}$$

由周期性边界条件,求得

$$k = 2\pi n/L, \quad n = 0,1,2,\cdots \tag{3}$$

能级为

$$E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{(2\pi n\hbar)^2}{2mL^2} \tag{4}$$

除基态($n=0$)外,其他能级都是二重简并的.考虑到微扰的特点,我们取式(2)中后两种函数作为“基矢”,它们具有确定的宇称,而且互相正交.这两个函数经归一化后,记为

$$\psi_{n+}^{(0)} = \sqrt{\frac{2}{L}}\cos\frac{2n\pi x}{L}, \quad \psi_{n-}^{(0)} = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{2n\pi x}{L} \tag{5}$$

下标“+,−”标明了波函数的宇称.

(b) 微扰 H'为偶宇称,因此

$$H'_{n+,n-} = \langle \psi_{n+}^{(0)} \mid H' \mid \psi_{n-}^{(0)} \rangle = 0 \tag{6}$$

亦即 $\psi_{n+}^{(0)}$ 和 $\psi_{n-}^{(0)}$ 已经是正确的零级波函数.能级的一级微扰修正等于 H'的平均值,即

$$\begin{aligned} E_{n+}^{(1)} &= H'_{n+,n+} = -\frac{2V_0}{L}\int_{-L/2}^{L/2} dx e^{-x^2\ a^2}\cos^2\frac{2n\pi x}{L} \\ &= -\frac{2V_0}{L}\int_0^{L/2} dx\left(1+\cos\frac{4n\pi x}{L}\right)e^{-x^2/a^2} \\ &\approx -\frac{2V_0}{L}\int_0^{\infty} dx\left(1+\cos\frac{4n\pi x}{L}\right)e^{-x^2/a^2} \\ &= -\sqrt{\pi}\frac{V_0 a}{L}(1+e^{-4\pi^2 n^2 a^2/L^2}) \end{aligned} \tag{7}$$

$$\begin{aligned} E_{n-}^{(1)} &= H'_{n-,n-} = -\frac{2V_0}{L}\int_{-L/2}^{L/2} dx e^{-x^2/a^2}\sin^2\frac{2n\pi x}{L} \\ &\approx -\frac{2V_0}{L}\int_0^{\infty} dx\left(1-\cos\frac{4\pi n x}{L}\right)e^{-x^2/a^2} \\ &= -\sqrt{\pi}\frac{V_0 a}{L}(1-e^{-4\pi^2 n^2 a^2/L^2}) \end{aligned} \tag{8}$$

以上结果表明,在“陷阱”作用下,能级下降,并分裂为二.奇宇称态 $\psi_{n-}^{(0)}$ 受陷阱

影响较小，能级下降小；偶宇称态 $\psi_{n+}^{(0)}$ 受陷阱影响大，能级下降大. 裂距为

$$\Delta E_n = E_{n-}^{(1)} - E_{n+}^{(1)} \approx 2\sqrt{\pi}\frac{V_0 a}{L}e^{-4\pi^2 n^2 a^2/L^2} \tag{9}$$

n 越小，裂距越大. 最大裂距为

$$\Delta E_1 \approx 2\sqrt{\pi}\frac{V_0 a}{L}e^{-4\pi^2 a^2/L^2} \sim 2\sqrt{\pi}V_0 a/L \tag{10}$$

基态($n=0,k=0$)能级无简并，零级波函数为

$$\psi_0^{(0)} = 1/\sqrt{L} \tag{11}$$

在“陷阱”作用下，能级移动

$$\Delta E_0 = E_0^{(1)} = \langle \psi_0^{(0)} \mid H' \mid \psi_0^{(0)} \rangle = -\frac{V_0}{L}\int_{-L/2}^{L/2} dx e^{-x^2/a^2} \approx -\sqrt{\pi}V_0 a/L \tag{12}$$

11.7　(a) 电子在一维区域

$$-\frac{L}{2} \leqslant x \leqslant \frac{L}{2}$$

自由运动，波函数满足周期性边界条件 $\psi(x)=\psi(x+L)$. 试写出动量和 Hamilton 量的共同本征函数(不考虑自旋)；

(b) 加上微扰 $H'=\varepsilon\cos qx$，其中 $Lq=4\pi N$(N 为大的正整数). 试就电子动量 $|p|=q\hbar/2$ 的情况求能级和定态波函数，准确到 ε 量级；

(c) 再计算情况(b)的能级修正，至 ε^2 量级；

(d) 对于 $|p|$ 接近(但不等于)$q\hbar/2$ 的情况，重复(b)和(c)的能级计算.

解　(a) 对于自由粒子，满足周期性条件的能量(H_0)和动量(p)的共同本征函数为

$$\psi_n^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{L}}e^{i2\pi nx/L}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots \tag{1}$$

本征值为

$$\begin{aligned} p_n &= \hbar k_n = 2\pi n\hbar/L \\ E_n^{(0)} &= \frac{p_n^2}{2m} = \frac{(2\pi n\hbar)^2}{2mL^2} \end{aligned} \tag{2}$$

(b) 微扰算符为

$$H' = \varepsilon\cos qx = \frac{\varepsilon}{2}(e^{i4\pi Nx/L} + e^{-i4\pi Nx/L}) \tag{3}$$

对于 $|p|=q\hbar/2=2\pi N\hbar/L$，相应的零级波函数为

$$\psi^{(0)} = C_N\psi_N^{(0)} + C_{-N}\psi_{-N}^{(0)} \tag{4}$$

容易算出

$$H'_{NN} = H'_{-N,-N} = 0, \quad H'_{N,-N} = H'_{-N,N} = \frac{\varepsilon}{2} \tag{5}$$

因此在$\{\psi_N^{(0)}, \psi_{-N}^{(0)}\}$子空间中,$H'$的矩阵表示为

$$H' = \frac{\varepsilon}{2}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{5'}$$

在这子空间中,$\psi^{(0)}$应满足本征方程(参看题 11.2)

$$H'\psi^{(0)} = E_N^{(1)}\psi^{(0)}$$

即

$$\frac{\varepsilon}{2}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} C_N \\ C_{-N} \end{bmatrix} = E_N^{(1)}\begin{bmatrix} C_N \\ C_{-N} \end{bmatrix} \tag{6}$$

容易解出

$$\boxed{\begin{aligned} &E_{N+}^{(1)} = \varepsilon/2 \\ &\psi^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_N^{(0)} + \psi_{-N}^{(0)}] = \psi_{N+}^{(0)} \\ &E_{N-}^{(1)} = -\varepsilon/2 \\ &\psi^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_N^{(0)} - \psi_{-N}^{(0)}] = \psi_{N-}^{(0)} \end{aligned}} \tag{7}$$

波函数的一级修正为[见题 11.2 式(15)]

$$\psi^{(1)} = \sum_n{}' \frac{1}{E_N^{(0)} - E_n^{(0)}}\langle\psi_n^{(0)} \mid H' \mid \psi^{(0)}\rangle\psi_n^{(0)} \quad (n \neq \pm N) \tag{8}$$

对 $\psi^{(1)}$有贡献的矩阵元为(相应于 $n=\pm 3N$)

$$H'_{3N,N} = H'_{-3N,-N} = \varepsilon/2$$

相应能级差为

$$E_N^{(0)} - E_{3N}^{(0)} = -8E_N^{(0)} = -\frac{8(2\pi N\hbar)^2}{2mL^2}$$

因此波函数一级修正为

$$E^{(1)} = E_{N+}^{(1)} = \frac{\varepsilon}{2}$$

$$\psi^{(1)} = -\frac{\varepsilon}{2}\frac{2mL^2}{8(2\pi N\hbar)^2}\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{3N}^{(0)} + \psi_{-3N}^{(0)}]$$

$$E^{(1)} = E_{N-}^{(1)} = -\frac{\varepsilon}{2}$$

$$\psi^{(1)} = -\frac{\varepsilon}{2}\frac{2mL^2}{8(2\pi N\hbar)^2}\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{3N}^{(0)} - \psi_{-3N}^{(0)}] \tag{9}$$

(c) 能级的二级修正为

$$E_N^{(2)} = \langle \psi^{(0)} \mid H' \mid \psi^{(1)} \rangle \tag{10}$$

以式(7)和(9)代入上式，即得

$$E_N^{(2)} = -\frac{\varepsilon^2}{32}\frac{2mL^2}{(2\pi N\hbar)^2} = -\frac{\varepsilon^2}{32E_N^{(0)}} \tag{11}$$

综合式(7)、(11)，可得能级的结论如下(准确到 ε^2 量级)：

$$\boxed{E_N = E_N^{(0)} + E_N^{(1)} + E_N^{(2)} = E_N^{(0)} \pm \frac{\varepsilon}{2} - \frac{\varepsilon^2}{32E_N^{(0)}}} \tag{12}$$

相应于

$$\psi^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_N^{(0)} \pm \psi_{-N}^{(0)}]$$

(d) 对于 $|p|$ 接近但不等于 $q\hbar/2$ 的情况，由于微扰 H' 的作用而能发生一级耦合的动量本征态为

$$\psi_{N+s}^{(0)} - \psi_{-N+s}^{(0)}, \quad |s| \ll N$$

这是两个近似简并的状态，相应于 H_0 的本征值 $E_{N\pm s}^{(0)}$. 作为能级的一种近似计算，可取

$$\psi \approx C_{N+s}\psi_{N+s}^{(0)} + C_{-N+s}\psi_{-N+s}^{(0)} \tag{13}$$

而令 ψ 满足能量本征方程

$$H\psi = (H_0 + H')\psi \approx E\psi \tag{14}$$

在 $\{\psi_{N+s}^{(0)}, \psi_{-N+s}^{(0)}\}$ 子空间内，H_0、H'、H 的矩阵表示为

$$\begin{aligned} H_0 &= \begin{bmatrix} E_{N+s}^{(0)} & 0 \\ 0 & E_{N-s}^{(0)} \end{bmatrix} \\ H' &= \frac{\varepsilon}{2}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \\ H &= \begin{bmatrix} E_{N+s}^{(0)} & \frac{\varepsilon}{2} \\ \frac{\varepsilon}{2} & E_{N-s}^{(0)} \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{15}$$

代入式(14)，成为

$$\begin{bmatrix} E_{N+s}^{(0)} & \frac{\varepsilon}{2} \\ \frac{\varepsilon}{2} & E_{N-s}^{(0)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{N+s} \\ C_{-N+s} \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} C_{N+s} \\ C_{-N+s} \end{bmatrix} \tag{14'}$$

上式有非平庸解的条件为

$$\det(H-E) = \begin{vmatrix} E_{N+s}^{(0)} - E & \frac{\varepsilon}{2} \\ \frac{\varepsilon}{2} & E_{N-s}^{(0)} - E \end{vmatrix} = 0 \tag{16}$$

由此解出

$$E = \frac{1}{2}\left[E_{N+s}^{(0)} + E_{N-s}^{(0)} \pm \sqrt{(E_{N+s}^{(0)} - E_{N-s}^{(0)})^2 + \varepsilon^2}\right] \tag{17}$$

当 $E_{N+s}^{(0)} - E_{N-s}^{(0)} \ll \varepsilon^2$,上式成为

$$E \approx \frac{1}{2}\left[E_{N+s}^{(0)} + E_{N-s}^{(0)}\right] \pm \frac{\varepsilon}{2}\left[1 + \frac{1}{2\varepsilon^2}(E_{N+s}^{(0)} - E_{N-s}^{(0)})^2\right] \tag{18}$$

其中

$$E_{N+s}^{(0)} + E_{N-s}^{(0)} = 2E_N\left(1 + \frac{s^2}{N^2}\right)$$

$$E_{N+s}^{(0)} - E_{N-s}^{(0)} = 4E_N \frac{s}{N}$$

因此

$$\boxed{E \approx E_N^{(0)} \pm \frac{\varepsilon}{2} + \frac{s^2}{N^2}E_N^{(0)}\left(1 \pm \frac{4}{\varepsilon}E_N^{(0)}\right)} \tag{18'}$$

当 $\varepsilon^2 \ll E_{N+s}^{(0)} - E_{N-s}^{(0)}$,式(17)给出

$$E \approx \frac{1}{2}\left[E_{N+s}^{(0)} + E_{N-s}^{(0)}\right] \pm \frac{1}{2}\left[E_{N+s}^{(0)} - E_{N-s}^{(0)}\right]\left[1 + \frac{\varepsilon^2}{2(E_{N+s}^{(0)} - E_{N-s}^{(0)})^2}\right]$$

$$= E_{N\pm s}^{(0)} \pm \frac{\varepsilon^2}{4(E_{N+s}^{(0)} - E_{N-s}^{(0)})} \tag{19}$$

$$= E_{N\pm s}^{(0)} \pm \frac{N}{16s}\frac{\varepsilon^2}{E_N^{(0)}} \tag{19'}$$

这个结果相当于 $\psi^{(0)}$ 取 $\psi_{N+s}^{(0)}$ 或 $\psi_{-N+s}^{(0)}$ 时非简并态微扰论给出的能级公式(二级近似).

讨论 当 L 很大时,自由电子的能级 $E_n^{(0)}$ 可以认为是接近于连续变化的,受到周期性势场 H' 作用后,在 $E_n^{(0)}$ 附近形成一个"能隙"(禁带),其宽度大致为 ε[见式(12)和(18')].这个结论是固体能带论的理论基础.

11.8　(a)粒子在二维无限深方势阱中运动，

$$V=\begin{cases}0, & 0<x<a, \quad 0<y<a\\ \infty, & \text{其他区域}\end{cases} \tag{1}$$

试写出能级和能量本征函数.(b)加上微扰

$$H'=\lambda xy \tag{2}$$

求最低的两个能级的一级微扰修正.

解　(a) 能级和能量本征函数为

$$E^{(0)}_{n_1n_2}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n_1^2+n_2^2), \quad n_1,n_2=1,2,3,\cdots \tag{3}$$

$$\psi^{(0)}_{n_1n_2}=\frac{2}{a}\sin\frac{n_1\pi x}{a}\sin\frac{n_2\pi y}{a} \quad (\text{阱内，下同}) \tag{4}$$

基态是非简并的，能级为 $E^{(0)}_{11}$，本征函数为

$$\psi^{(0)}_{11}=\frac{2}{a}\sin\frac{\pi x}{a}\sin\frac{\pi y}{a} \tag{5}$$

第一激发态是二重简并的，能级为 $E^{(0)}_{12}$，本征函数为

$$\begin{aligned}\psi^{(0)}_{12}&=\frac{2}{a}\sin\frac{\pi x}{a}\sin\frac{2\pi y}{a}=\psi_\alpha\\ \psi^{(0)}_{21}&=\frac{2}{a}\sin\frac{2\pi x}{a}\sin\frac{\pi y}{a}=\psi_\beta\end{aligned} \tag{6}$$

(b) 基态能级的一级修正等于 H' 的平均值，即

$$E^{(1)}_{11}=\langle\psi^{(0)}_{11}\mid H'\mid\psi^{(0)}_{11}\rangle=\frac{4\lambda}{a^2}\int_0^a\int_0^a xy\sin^2\frac{\pi x}{a}\sin^2\frac{\pi y}{a}\mathrm{d}x\mathrm{d}y=\frac{\lambda}{4}a^2 \tag{7}$$

对于 ψ_α 和 ψ_β，容易算出 H' 的矩阵元为

$$\begin{aligned}H'_{\alpha\alpha}&=H'_{\beta\beta}=\frac{\lambda}{4}a^2\\ H'_{\alpha\beta}&=H'_{\beta\alpha}=\frac{256}{81\pi^4}\lambda a^2\end{aligned} \tag{8}$$

在 $\{\psi_\alpha,\psi_\beta\}$ 子空间中，H' 的矩阵表示为

$$H'=\frac{\lambda}{4}a^2\begin{bmatrix}1 & \dfrac{1024}{81\pi^4}\\ \dfrac{1024}{81\pi^4} & 1\end{bmatrix} \tag{9}$$

能级的一级修正为[参看题 11.2 式(21)]

$$E_{12}^{(1)} = H'_{\alpha\alpha} \pm H'_{\alpha\beta} = \frac{\lambda}{4}a^2\left(1 \pm \frac{1024}{81\pi^4}\right)$$

$$= \frac{\lambda}{4}a^2(1 \pm 0.13) = \lambda a^2 \times \begin{cases} 0.2824 \\ 0.2176 \end{cases} \tag{10}$$

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 $0.065(\lambda a^2)$.

11.9 某体系能量算符为 H_0,有两个能级,$E_1^{(0)}$ 二重简并,$E_2^{(0)}$ 无简并,受微扰 H'作用后,能量算符(H_0 表象)变成

$$H = H_0 + H' = \begin{bmatrix} E_1^{(0)} & 0 & a \\ 0 & E_1^{(0)} & b \\ a & b & E_2^{(0)} \end{bmatrix} \tag{1}$$

(a) 用微扰论公式求能级(二级近似);

(b) 求能级的精确值,再作近似展开,和微扰论结果比较.

解 (a) 以 ψ_α、ψ_β、$\psi_2^{(0)}$ 表示 H_0 的正交归一化本征函数,前二者相应于能级 $E_1^{(0)}$,后者相应于 $E_2^{(0)}$. 由式(1)可知微扰矩阵元为

$$\begin{aligned} &H'_{\alpha\alpha} = H'_{\beta\beta} = H'_{\alpha\beta} = 0, \quad H'_{22} = 0 \\ &H'_{\alpha 2} = H'_{2\alpha} = a, \qquad\quad H'_{\beta 2} = H'_{2\beta} = b \end{aligned} \tag{2}$$

能级 E_2 无简并,可按非简并态微扰论公式直接写出结果:

$$E_2 = E_2^{(0)} + H'_{22} + \frac{1}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}}(|H'_{\alpha 2}|^2 + |H'_{\beta 2}|^2)$$

$$= E_2^{(0)} + \frac{a^2 + b^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} \tag{3}$$

能级 $E_1^{(0)}$ 为二重简并,相当于题 11.3 讨论的第 **3°**种情况,所以

$$E_1^{(1)} = 0, \quad E_1^{(2)} = 0, \quad \frac{a^2 + b^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \tag{4}$$

亦即 $E_1^{(0)}$ 分裂为二:

$$E_1 = E_1^{(0)}, \quad E_1^{(0)} + \frac{a^2 + b^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \tag{4'}$$

注意三条能级的总和为($2E_1^{(0)} + E_2^{(0)}$),和微扰前一样. 其原因为 H'的迹(对角元之和)为 0,H_0 和 H 的迹相等.

(b) H 的精确本征值由下式决定:

$$\det(H-E)=\begin{vmatrix} E_1^{(0)}-E & 0 & a \\ 0 & E_1^{(0)}-E & b \\ a & b & E_2^{(0)}-E \end{vmatrix}=0 \tag{5}$$

即

$$(E_1^{(0)}-E)\left[(E_1^{(0)}-E)(E_2^{(0)}-E)-(a^2+b^2)\right]=0 \tag{5'}$$

解为

$$E=E_1^{(0)}$$

和

$$\frac{1}{2}\left[E_1^{(0)}+E_2^{(0)}\pm\sqrt{(E_1^{(0)}-E_2^{(0)})^2+4(a^2+b^2)}\right] \tag{6}$$

如果 $4(a^2+b^2)\ll(E_1^{(0)}-E_2^{(0)})^2$，可作近似展开

$$\sqrt{(E_1^{(0)}-E_2^{(0)})^2+4(a^2+b^2)}\approx|E_1^{(0)}-E_2^{(0)}|+\frac{2(a^2+b^2)}{|E_1^{(0)}-E_2^{(0)}|}$$

代入式(6)，即得

$$E=E_1^{(0)},\quad E_1^{(0)}+\frac{a^2+b^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}},\quad E_2^{(0)}+\frac{a^2+b^2}{E_2^{(0)}-E_1^{(0)}} \tag{7}$$

和微扰论结果式(3)、(4′)一致.

11.10　一维谐振子，其能量算符为

$$H_0=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2 \tag{1}$$

设此谐振子受到微扰作用

$$H'=\frac{\lambda}{2}m\omega^2x^2,\quad |\lambda|\ll 1 \tag{2}$$

试求各能级的微扰修正(三级近似)，并和精确解比较.

解　H_0 的本征函数、本征值记为 $\psi_n^{(0)}$、$E_n^{(0)}$. 如所周知

$$E_n^{(0)}=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\quad n=0,1,2,\cdots \tag{3}$$

在 H_0 表象(以 $\psi_n^{(0)}$ 为基矢)中，x 的矩阵元中不等于 0 的类型为

$$x_{n+1,n}=x_{n,n+1}=\left(\frac{n+1}{2}\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2} \tag{4}$$

因此，不等于 0 的微扰矩阵元有下列类型：

$$H'_{nn}=\frac{\lambda}{2}m\omega^2\sum_k x_{nk}x_{kn}=\frac{\lambda}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega=\frac{\lambda}{2}E_n^{(0)} \tag{5}$$

$$H'_{n,n+2}=H'_{n+2,n}=\frac{\lambda}{2}m\omega^2 x_{n,n+1}x_{n+1,n+2}$$

$$=\frac{\lambda}{4}\sqrt{(n+1)(n+2)}\hbar\omega \tag{6}$$

能级 $E_n^{(0)}$ 的各级微扰修正为

$$E_n^{(1)}=H'_{nn}=\frac{\lambda}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{7}$$

$$E_n^{(2)}=\frac{1}{2\hbar\omega}[|H'_{n-2,n}|^2-|H'_{n+2,n}|^2]=-\frac{\lambda^2}{8}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{8}$$

$$E_n^{(3)}=\frac{1}{(2\hbar\omega)^2}[H'_{n+2,n+2}(H'_{n+2,n})^2+H'_{n-2,n-2}(H'_{n-2,n})^2$$

$$-H'_{nn}(|H'_{n+2,n}|^2+|H'_{n-2,n}|^2)]=\frac{\lambda^3}{16}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{9}$$

本题显然可以精确求解,因为

$$H=H_0+H'=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}(1+\lambda)m\omega^2x^2$$

令

$$\omega'=\omega\sqrt{1+\lambda}$$

H 可以写成

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}m\omega'^2x^2 \tag{10}$$

和式(1)比较,差别在于 $\omega\to\omega'$,因此 H 的本征值为

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega'=\left(n+\frac{1}{2}\right)\sqrt{1+\lambda}\hbar\omega \tag{11}$$

因为 $|\lambda|\ll1$,将 $\sqrt{1+\lambda}$ 作二项式展开,即得

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\left(1+\frac{\lambda}{2}-\frac{\lambda^2}{8}+\frac{\lambda^3}{16}-\cdots\right)\hbar\omega \tag{12}$$

和微扰论结果完全一致.

11.11 在球对称谐振子势阱

$$V(r)=\frac{1}{2}m\omega^2r^2$$

中运动的粒子,受到微扰作用为

$$H'=\lambda xyz+\frac{\lambda^2}{\hbar\omega}x^2y^2z^2$$

λ 为小常数.

(a) 计算基态能级的移动(准确到 λ^2);

(b) 对于微扰后的基态(一级近似),计算 $\langle \boldsymbol{r} \rangle$;

(c) 试用不依赖于微扰论的论据,解释(b)的结果.

解　(a) 以 ψ_n 表示一维谐振子能量本征态,则微扰前的能量本征态和能级为

$$\psi^{(0)}_{n_1 n_2 n_3} = \psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)\psi_{n_3}(z) \quad (\text{记为} \mid n_1 n_2 n_3 \rangle)$$

$$E^{(0)}_{n_1 n_2 n_3} = \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega \tag{1}$$

基态为

$$\psi^{(0)}_{000} = \psi_0(x)\psi_0(y)\psi_0(z) \quad (\text{记为} \mid 000 \rangle) \tag{2}$$

对于这状态,显然

$$\langle xyz \rangle = 0, \quad \langle x^2 y^2 z^2 \rangle = (\langle 0 \mid x^2 \mid 0 \rangle)^3 = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^3 \tag{3}$$

因此,基态能级的一级微扰修正为

$$E^{(1)}_{000} = \langle 000 \mid H' \mid 000 \rangle = \frac{\lambda^2}{8}\frac{\hbar^2}{m^3\omega^4} \tag{4}$$

由于 H' 中含有 λxyz 项,二级微扰修正也能产生 λ^2 量级的修正项. 能产生这种项的唯一微扰矩阵元是

$$\langle 111 \mid H' \mid 000 \rangle = \lambda(x_{10})(y_{10})(z_{10}) = \lambda\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2} \tag{5}$$

因此,基态能级的二级微扰修正中,λ^2 量级的项为

$$E^{(2)}_{000} \to -\frac{|\langle 111 \mid H' \mid 000 \rangle|^2}{3\hbar\omega} = -\frac{\lambda^2}{24}\frac{\hbar^2}{m^3\omega^4} \tag{6}$$

准确到 λ^2,基态能级移动为

$$\Delta E_{000} = \left(\frac{1}{8} - \frac{1}{24}\right)\frac{\lambda^2\hbar^2}{m^3\omega^4} = \frac{\lambda^2}{12}\frac{\hbar^2}{m^3\omega^4} \tag{7}$$

(b) 微扰后的基态波函数(准至 λ)为

$$\psi_0 = \psi^{(0)}_{000} - \frac{\langle 111 \mid H' \mid 000 \rangle}{3\hbar\omega}\psi^{(0)}_{111}$$

$$= \psi_0(x)\psi_0(y)\psi_0(z) - \frac{\lambda}{3\hbar\omega}\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2}\psi_1(x)\psi_1(y)\psi_1(z) \tag{8}$$

在 ψ_0 态下计算 $\boldsymbol{r}$ 的平均值,可得

$$\langle \psi_0 \mid \boldsymbol{r} \mid \psi_0 \rangle = 0 \tag{9}$$

(c) 受微扰作用后,势能变成

$$V(x,y,z)=\frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2+z^2)+\lambda xyz+\frac{\lambda^2}{\hbar\omega}x^2y^2z^2 \tag{10}$$

由极值条件

$$\frac{\partial V}{\partial x}=0,\quad \frac{\partial V}{\partial y}=0,\quad \frac{\partial V}{\partial z}=0$$

容易求得粒子的"平衡位置"(即 V 取极小值的位置)为

$$x=y=z=0$$

基态下$\langle \boldsymbol{r}\rangle=0$ 的根源即在于此.

11.12 在势场中作低速运动的粒子,计及相对论质能关系后,Hamilton 量可以近似取为

$$H=\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2-\frac{1}{8m^3c^2}\boldsymbol{p}^4+V(\boldsymbol{r}) \tag{1}$$

其中第二项为动能的相对论修正,可以作为微扰处理.(这里没有考虑与自旋有关的相对论修正项.)试对谐振子和类氢离子,计算这个修正项对能级的影响.

解 将式(1)写成

$$H=H_0+H' \tag{1'}$$

其中

$$H_0=\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2+V(\boldsymbol{r}),\quad H'=-\frac{1}{8m^3c^2}\boldsymbol{p}^4 \tag{2}$$

微扰 H'可以表示成

$$H'=-\frac{1}{2mc^2}\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\right)^2=-\frac{1}{2mc^2}(H_0-V)^2$$

$$=-\frac{1}{2mc^2}(H_0^2+V^2-H_0V-VH_0) \tag{3}$$

(a) 一维谐振子. H_0 的本征函数和本征值为 $\psi_n^{(0)}$、$E_n^{(0)}$,势能

$$V=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

根据位力定理,在 $\psi_n^{(0)}$ 态中 V 的平均值为

$$\langle\psi_n^{(0)}\mid V\mid\psi_n^{(0)}\rangle=\frac{1}{2}E_n^{(0)}=\frac{1}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{4}$$

按照非简并态微扰论,能级的一级微扰修正为

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} \mid H' \mid \psi_n^{(0)} \rangle$$

$$= -\frac{1}{2mc^2} \langle \psi_n^{(0)} \mid (H_0^2 + V^2 - H_0 V - V H_0) \mid \psi_n^{(0)} \rangle$$

$$= -\frac{1}{2mc^2} [(E_n^{(0)})^2 - 2E_n^{(0)} \langle V \rangle_n + \langle V^2 \rangle_n]$$

$$= -\frac{1}{2mc^2} \langle V^2 \rangle_n = -\frac{1}{2mc^2} \left(\frac{1}{2} m\omega^2 \right)^2 \langle x^4 \rangle_n \tag{5}$$

利用 x 的矩阵元公式(见题 11.10)容易算出

$$\langle x^4 \rangle_n = (x^2)_{nn}^2 + (x^2)_{n,n+2}^2 + (x^2)_{n,n-2}^2 = \frac{3}{4}(2n^2 + 2n + 1) \frac{\hbar^2}{m^2\omega^2} \tag{6}$$

代入式(5),即得

$$\boxed{E_n^{(1)} = -\frac{3}{16} \left(n^2 + n + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar^2 \omega^2}{mc^2}} \tag{7}$$

(b) 类氢离子. $V(r) = -Ze^2/r$, H_0 的本征函数和本征值为

$$\psi_{nlm}^{(0)} = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{8}$$

$$E_n^{(0)} = -\frac{Z^2 e^2}{2n^2 a_0}, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \tag{9}$$

由于 $\boldsymbol{p}^4$ 和 $\boldsymbol{l}^2$、l_z 对易,H'作用于$\psi_{nlm}^{(0)}$不改变量子数 l、m,因此在属于同一个 $E_n^{(0)}$ 的各个简并态(l,m 取不同值)之间,H'的非对角矩阵元全部为 0,即

$$\langle nlm \mid H' \mid nl'm' \rangle = \langle H' \rangle_{nlm} \delta_{ll'} \delta_{mm'} \tag{10}$$

从而在计算能级的一级微扰修正时,可以利用非简并态微扰论公式,即

$$E_{nlm}^{(1)} = \langle H' \rangle_{nlm} = -\frac{1}{2mc^2} \langle H_0^2 + V^2 - H_0 V - V H_0 \rangle_{nlm}$$

$$= -\frac{1}{2mc^2} [(E_n^{(0)})^2 - 2E_n^{(0)} \langle V \rangle_{nlm} + \langle V^2 \rangle_{nlm}] \tag{11}$$

按照位力定理,

$$\langle V \rangle_{nlm} = 2E_n^{(0)} \tag{12}$$

利用公式(见题 5.8)

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{nlm} = \frac{Z^2}{\left(l + \frac{1}{2} \right) n^3 a_0^2} \tag{13}$$

可得

$$\langle V^2 \rangle_{nlm} = \left\langle \frac{Z^2 e^4}{r^2} \right\rangle_{nlm} = \frac{1}{n^3 \left(l + \frac{1}{2} \right)} \left(\frac{Z^2 e^2}{a_0} \right)^2 \tag{14}$$

将式(12)、(14)代入式(11),即得能级的一级微扰修正,为

$$\boxed{E_{nlm}^{(1)} = -m_e c^2 \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^4 \frac{Z^4}{2n^4}\left[\frac{n}{l+\frac{1}{2}} - \frac{3}{4}\right]} \tag{15}$$

能级的"l 简并"已经消除. 对于氢原子($Z=1$)的基态,修正为

$$E_{100}^{(1)}(Z=1) = -\frac{5}{8}\left(\frac{1}{137}\right)^4 m_e c^2 = -9.1\times10^{-4}\,\text{eV}$$

和自旋-轨道耦合能的量级相同.

11.13 三维各向同性谐振子,能量算符为

$$H_0 = \sum_{i=1}^{3}\left(\frac{1}{2m}p_i^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x_i^2\right) \tag{1}$$

(x_1, x_2, x_3 即 x, y, z),设此振子又受到 x_3 方向均匀力场作用,总能量算符变成

$$H = H_0 + H', \quad H' = \lambda x_3 \tag{2}$$

视 H'为微扰,试利用题 11.5 建立的公式计算微扰作用后的基态平均值$\langle x_i\rangle$,$i=1、2、3$,并和精确值比较.

解 利用基本对易式

$$[x_\alpha, p_\beta] = \mathrm{i}\hbar\delta_{\alpha\beta} \tag{3}$$

易得

$$[p_3, H_0] = \frac{1}{2}m\omega^2[p_3, x_3^2] = -\mathrm{i}\hbar m\omega^2 x_3 \tag{4}$$

因此

$$H' = \lambda x_3 = \mathrm{i}\lambda\frac{1}{\hbar m\omega^2}[p_3, H_0] \tag{5}$$

相当于题 11.5 中取

$$A = \frac{p_3}{\hbar m\omega^2}$$

(a) 如取 $B=x_3$,则

$$C = \mathrm{i}[B,A] = -\frac{1}{m\omega^2}$$

微扰前的基态为$|0\rangle \sim \psi_0(x_1)\psi_0(x_2)\psi_0(x_3)$,根据宇称性显然可得

$$\langle 0 \mid x_3 \mid 0\rangle = 0, \quad \langle 0 \mid p_3 \mid 0\rangle = 0 \tag{6}$$

亦即

$$A_0 = 0, \quad B_0 = 0, \quad C_0 = C = -\frac{1}{m\omega^2}$$

根据题 11.5 最后所得式(7),对于微扰后的基态 φ_0,应有

$$\langle \varphi_0 \mid B \mid \varphi_0 \rangle = \langle \varphi_0 \mid x_3 \mid \varphi_0 \rangle = B_0 + \lambda C_0 = -\frac{\lambda}{m\omega^2} \tag{7}$$

(b) 如取 $B = x_2$,则 $C = \mathrm{i}[x_2, A] = 0$

现在,对于微扰前的基态$|0\rangle$,显然有

$$B_0 = \langle 0 \mid x_2 \mid 0 \rangle = 0, \quad C_0 = \langle 0 \mid C \mid 0 \rangle = 0$$

则由题 11.5 式(7),对于微扰后的基态 φ_0,应有

$$\langle \varphi_0 \mid x_2 \mid \varphi_0 \rangle = B_0 + \lambda C_0 = 0 \tag{8}$$

(c) 如取 $B = x_1$,同样可证

$$\langle \varphi_0 \mid x_1 \mid \varphi_0 \rangle = 0 \tag{9}$$

结论:对于微扰后的基态,x_i 的平均值为

$$\boxed{\langle x_1 \rangle = \langle x_2 \rangle = 0, \quad \langle x_3 \rangle = -\lambda / m\omega^2}$$

本题的精确解可参看 3.4 题. 微扰后 H 中势能的 x_3 部分为

$$\frac{1}{2}m\omega^2 x_3^2 + \lambda x_3 = \frac{1}{2}m\omega^2\left(x_3 + \frac{\lambda}{m\omega^2}\right)^2 - \frac{\lambda^2}{2m\omega^2} \tag{10}$$

基态波函数为

$$\varphi_0 = \psi_0(x_1)\psi_0(x_2)\psi_0\left(x_3 + \frac{\lambda}{m\omega^2}\right) \tag{11}$$

其中 ψ_0 为一维谐振子基态波函数. 由 ψ_0 的宇称性易知

$$\langle \varphi_0 \mid x_1 \mid \varphi_0 \rangle = 0, \quad \langle \varphi_0 \mid x_2 \mid \varphi_0 \rangle = 0$$

$$\left\langle \varphi_0 \middle| \left(x_3 + \frac{\lambda}{m\omega^2}\right) \middle| \varphi_0 \right\rangle = 0 \tag{12}$$

$$\langle \varphi_0 \mid x_3 \mid \varphi_0 \rangle = -\frac{\lambda}{m\omega^2}$$

和微扰论结果一致.

11.14　自旋为 0 的两个全同粒子在谐振子势场

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

中作一维运动. 粒子间有相互作用

$$V_{\text{int}}(x_1,x_2)=V_0\mathrm{e}^{-\beta^2(x_1-x_2)^2} \tag{1}$$

视 V_{int} 为微扰,求体系的基态能级(一级近似).

解 粒子 1、2 的坐标记为 x_1、x_2,体系 Hamilton 量为

$$H=H_0+V_{\text{int}}(x_1,x_2) \tag{2}$$

$$H_0=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right)+\frac{1}{2}m\omega^2(x_1^2+x_2^2) \tag{3}$$

体系基态波函数的零级近似为

$$\Psi_0^{(0)}(x_1,x_2)=\psi_0(x_1)\psi_0(x_2) \tag{4}$$

其中 $\psi_0(x)$ 为一维谐振子基态波函数,即

$$\psi_0(x)=\frac{\sqrt{\alpha}}{\pi^{1/4}}\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2/2},\quad \alpha=\sqrt{m\omega/\hbar} \tag{5}$$

基态能级的零级近似为

$$E_0^{(0)}=2\times\frac{1}{2}\hbar\omega=\hbar\omega \tag{6}$$

微扰论一级修正为

$$E_0^{(1)}=\langle\Psi_0^{(0)}\mid V_{\text{int}}\mid\Psi_0^{(0)}\rangle \tag{7}$$

计算 $E_0^{(1)}$ 有两种方法

(a) 直接积分. 将式(1)、(4)、(5)直接代入式(7),得到

$$\begin{aligned}E_0^{(1)}&=V_0\frac{\alpha^2}{\pi}\iint_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x_1\,\mathrm{d}x_2\,\mathrm{e}^{-\alpha^2(x_1^2+x_2^2)}\,\mathrm{e}^{-\beta^2(x_1-x_2)^2}\\&=V_0\frac{\alpha^2}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x_2\,\mathrm{e}^{-(\alpha^2+\beta^2)x_2^2}\,I(x_2)\end{aligned} \tag{8}$$

其中

$$\begin{aligned}I(x_2)&=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x_1\,\mathrm{e}^{-(\alpha^2+\beta^2)x_1^2+2\beta^2x_2x_1}\\&=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x_1\exp\left[-(\alpha^2+\beta^2)\left(x_1-\frac{\beta^2}{\alpha^2+\beta^2}x_2\right)^2+\frac{\beta^2}{\alpha^2+\beta^2}x_2^2\right]\\&=\left(\frac{\pi}{\alpha^2+\beta^2}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left(\frac{\beta^4}{\alpha^2+\beta^2}x_2^2\right)\end{aligned} \tag{9}$$

代入式(8),就可求出

$$E_0^{(1)}=V_0\Big/\left(1+\frac{2\beta^2}{\alpha^2}\right)^{1/2} \tag{10}$$

计算中利用了定积分公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\lambda x^2}\,\mathrm{d}x = \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \quad (\lambda > 0) \tag{11}$$

(b) 引入质心坐标 X 和相对坐标 x，即

$$X = \frac{1}{2}(x_1 + x_2), \quad x = x_1 - x_2 \tag{12}$$

利用

$$x_1^2 + x_2^2 = 2X^2 + \frac{1}{2}x^2 \tag{13}$$

可以将 $\Psi_0^{(0)}$ 表示成

$$\Psi_0^{(0)} = \psi_0(x_1)\psi_0(x_2) = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\mathrm{e}^{-\alpha^2 X^2}\,\mathrm{e}^{-\alpha^2 x^2/4} = \psi_0(X)\psi_0(x) \tag{14}$$

其中

$$\psi_0(X) = \left(\frac{2\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\mathrm{e}^{-\alpha^2 X^2}$$

$$\psi_0(x) = \left(\frac{\alpha^2}{2\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\mathrm{e}^{-\alpha^2 x^2/4} \tag{15}$$

二者均已归一化，分别代表体系质心运动和相对运动(均为谐振动)的基态. 利用式(14)，(15)以及式(11)，容易算出

$$E_0^{(1)} = \langle \Psi_0^{(0)} \mid V_{\mathrm{int}} \mid \Psi_0^{(0)} \rangle = \langle \psi_0(x) \mid V_0\mathrm{e}^{-\beta^2 x^2} \mid \psi_0(x) \rangle = V_0 \Big/ \left(1 + \frac{2\beta^2}{\alpha^2}\right)^{1/2}$$

这正是式(10).

11.15　(a)质量为 m 的粒子，限制在半径为 R 的环上自由运动；求能级和能量本征函数. (b)加上微扰

$$H' = V(\varphi) = \begin{cases} V_1, & -\alpha < \varphi < 0 \\ V_2, & 0 < \varphi < \alpha \\ 0, & \text{其他角度} \end{cases} \qquad (\alpha < \pi) \tag{1}$$

求最低的三条能级的一级微扰修正.

解　(a) 粒子在环上自由运动时，相当于一个“平面转子”，能级和能量本征函数为

$$E_n^{(0)} = \frac{n^2\hbar^2}{2mR^2}, \quad \psi_n^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}n\varphi}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots \tag{2}$$

基态($n=0$)不简并,其他能级都是二重简并.

(b) 对于任何 $\psi_n^{(0)}$,显然 H' 平均值为

$$H'_{nn}=\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}V(\varphi)\mathrm{d}\varphi=\frac{\alpha}{2\pi}(V_1+V_2)\equiv a \tag{3}$$

因此基态能级 $E_0^{(0)}$ 的一级微扰修正为

$$E_0^{(1)}=H'_{00}=a=\frac{\alpha}{2\pi}(V_1+V_2) \tag{4}$$

第一激发态 $n=\pm1$,微扰矩阵元为

$$H'_{-1,1}=\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}V(\varphi)\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\varphi}\mathrm{d}\varphi=\frac{1}{2\pi}(V_1\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}+V_2\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha})\sin\alpha\equiv b_1 \tag{5}$$

在 $\{\psi_1^{(0)},\psi_{-1}^{(0)}\}$ 子空间中,H' 的矩阵表示为

$$H'=\begin{bmatrix}a & b_1^*\\ b_1 & a\end{bmatrix} \tag{6}$$

能级的一级修正为[参看题 11.2 式(21)]

$$E_1^{(1)}=a\pm|\,b_1\,|=\frac{\alpha}{2\pi}(V_1+V_2)\pm\frac{\sin\alpha}{2\pi}\sqrt{V_1^2+V_2^2+2V_1V_2\cos2\alpha} \tag{7}$$

对于第二激发态($n=\pm2$),类似的计算给出

$$H'_{-2.2}=\frac{1}{4\pi}(V_1\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\alpha}+V_2\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\alpha})\sin2\alpha\equiv b_2 \tag{8}$$

$$E_2^{(1)}=a\pm|\,b_2\,|=\frac{\alpha}{2\pi}(V_1+V_2)\pm\frac{|\,\sin2\alpha\,|}{4\pi}\sqrt{V_1^2+V_2^2+2V_1V_2\cos4\alpha} \tag{9}$$

11.16 在原子结构的计算中,通常将原子核当作点电荷处理. 实际上原子核不是点电荷,它有一定的大小.

(a)以 R 表示原子核半径. 设核电荷(Ze)均匀分布于半径为 R 的球内,试用微扰论(一级近似)估算这种核的有限大小效应对原子的 1s 电子能级的影响.(1s 电子波函数取为类氢离子波函数.)(b)设核电荷分布于半径为 R 的球壳上,1s 电子的能级修正又如何?

解 (a) 用 Gauss 定理不难求出球形电荷分布的静电势为

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

电子的势能为 $V(r)=-e\phi(r)$. 而视核为点电荷时电子的势能为 $\left(-\frac{Ze^2}{r}\right)$, 二者之差

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

可以视为微扰. 类氢离子中 1s 轨道电子波函数为

$$\psi_{1s}=\left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-Zr/a_0} \tag{3}$$

a_0 为 Bohr 半径. 1s 能级的微扰论一级修正为

$$E_{1s}^{(1)}=\langle\psi_{1s}\mid H'\mid\psi_{1s}\rangle=\int_0^R\psi_{1s}^2H'4\pi r^2\,\mathrm{d}r \tag{4}$$

由于核半径 R 远小于原子半径 a_0/Z, 积分时可取

$$\mathrm{e}^{-2Zr/a_0}\approx 1$$

从而求出

$$E_{1s}^{(1)}\approx\frac{4Z^4e^2}{a_0^3}\int_0^R\left(r+\frac{r^4}{2R^3}-\frac{3r^2}{2R}\right)\mathrm{d}r=\frac{2}{5}\frac{Z^4e^2R^2}{a_0^3}=\frac{4}{5}\left(\frac{ZR}{a_0}\right)^2\mid E_{1s}^{(0)}\mid \tag{5}$$

其中

$$E_{1s}^{(0)}=-\frac{Z^2e^2}{2a_0}$$

为类氢离子基态能级.

(b) 视核电荷 Ze 为球壳电荷分布, 容易求出静电势为

$$\phi(r)=\begin{cases}Ze/R, & r<R\\ Ze/r, & r>R\end{cases} \tag{6}$$

因此, 微扰作用势为

$$H'=-e\phi(r)-(-Ze^2/r)=\begin{cases}Ze^2\left(\frac{1}{r}-\frac{1}{R}\right), & r<R\\ 0, & r>R\end{cases} \tag{7}$$

类似于(a)的计算, 给出能级修正为

$$E_{1s}^{(1)}\approx\frac{2}{3}\frac{Z^4e^2R^2}{a_0^3}=\frac{4}{3}\left(\frac{ZR}{a_0}\right)^2\mid E_{1s}^{(0)}\mid \tag{8}$$

讨论　(a), (b)两种情况的能级修正, 数量级相同, 和 E_{1s} 本身相比, 约为

$$\mid E_{1s}^{(1)}/E_{1s}\mid\sim Z^2R^2/a_0^2 \tag{9}$$

由于核半径 $R<10^{-12}\text{cm}$,而 $a_0=0.53\times10^{-8}\text{cm}$,故上式右端不超过 10^{-4}. 如换成 μ 原子(以 μ^- 粒子代替电子),情况将大不一样. 如 Z 很大,μ^- 粒子的轨道半径可以接近甚至小于核半径,这时核的有限大小将对 μ 原子的 1s 能级产生巨大影响.

11.17 很小的均匀带电球在外来静电场中获得势能

$$U(\boldsymbol{r})=V(\boldsymbol{r})+\frac{1}{6}r_0^2\nabla^2V(\boldsymbol{r})+\cdots \tag{1}$$

其中 r_0 是小球半径,$\boldsymbol{r}$ 是球心位置,$V(\boldsymbol{r})$是带电小球换成点电荷时获得的静电势能. 氢原子中,视电子为点电荷时,电子和原子核之间的库仑势能为

$$V(\boldsymbol{r})=-\frac{e^2}{r} \tag{2}$$

如视电子为带电$(-e)$小球,取 $r_0=e^2/m_ec^2$(经典电子半径),势能改用式(1),并视 r_0^2 项为微扰,求 1s 和 2p 能级的微扰修正[相当于 Lamb 移位(shift)].

解 将式(2)代入式(1),并写成

$$U(\boldsymbol{r})=-\frac{e^2}{r}+H' \tag{1'}$$

利用公式

$$\nabla^2\frac{1}{r}=-4\pi\delta(\boldsymbol{r}) \tag{3}$$

即得

$$\boxed{H'=\frac{2\pi}{3}e^2r_0^2\delta(\boldsymbol{r})} \tag{4}$$

能级的一级微扰修正等于 H'的平均值,即

$$\boxed{E^{(1)}=\int|\psi|^2H'\mathrm{d}^3x=\frac{2\pi}{3}e^2r_0^2|\psi(0)|^2} \tag{5}$$

对于 2p 态,

$$\psi_{2p}(0)=0,\quad E_{2p}^{(1)}=0$$

对于 1s 态,

$$|\psi_{1s}(0)|^2=\frac{1}{\pi a_0^3}=\frac{1}{\pi}\left(\frac{m_ee^2}{\hbar^2}\right)^3 \tag{6}$$

因此

$$\boxed{E_{1s}^{(1)}=\frac{2}{3}\frac{e^2r_0^2}{a_0^3}=\frac{2}{3}\alpha^6m_ec^2\approx5.1\times10^{-8}\text{eV}} \tag{7}$$

其中 $\alpha=e^2/\hbar c\approx 1/137$ 为精细结构常数.

和电子静能 $m_e c^2$ 相比，氢原子能级、能级的精细结构，Lamb 移位的数量级分别为 α^2、α^4、α^6.

11.18　氢原子处于基态. 沿 z 方向加一个均匀弱电场 $\mathscr{E}$，视电场为微扰. 求电场作用后的基态波函数(一级近似)，能级(二级近似)，平均电矩和电极化系数(不考虑自旋).

解　加电场前，基态波函数为

$$\psi^{(0)}=(\pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-r/a_0},\quad a_0=\frac{\hbar^2}{\mu e^2}\quad(\text{Bohr 半径}) \tag{1}$$

满足能量本征方程

$$H_0\psi^{(0)}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi^{(0)}-\frac{e^2}{r}\psi^{(0)}=E^{(0)}\psi^{(0)} \tag{2}$$

其中

$$E^{(0)}=-e^2/2a_0$$

视外电场为微扰，微扰作用势为

$$H'=e\mathscr{E}z=e\mathscr{E}r\cos\theta \tag{3}$$

由于 $\psi^{(0)}$ 为偶宇称，H' 为奇宇称，所以一级能量修正为 0，

$$E^{(1)}=\langle\psi^{(0)}\mid e\mathscr{E}z\mid\psi^{(0)}\rangle=0 \tag{4}$$

波函数的一级微扰修正 $\psi^{(1)}$ 满足方程(参看题 11.1)

$$[H_0-E^{(0)}]\psi^{(1)}=[E^{(1)}-H']\psi^{(0)}=-e\mathscr{E}r\cos\theta\psi^{(0)} \tag{5}$$

除了一个常系数外，$\cos\theta$ 即球谐函数 Y_{10}，考虑到 H_0 和 $\psi^{(0)}$ 都是球对称的，易知 $\psi^{(1)}$ 必可表示成

$$\psi^{(1)}=\psi^{(0)}f(r)\cos\theta \tag{6}$$

代入式(5)，并计及

$$\nabla^2\psi^{(1)}=f(r)\cos\theta\,\nabla^2\psi^{(0)}+\psi^{(0)}\,\nabla^2[f(r)\cos\theta]+2[\nabla\cos\theta f(r)]\cdot\nabla\psi^{(0)}$$

其中

$$\nabla^2[f(r)\cos\theta]=\cos\theta\left[\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}(rf)-\frac{2}{r^2}f\right]$$

$$[\nabla\cos\theta f(r)]\cdot\nabla\psi^{(0)}=\cos\theta\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}r}\frac{\mathrm{d}\psi^{(0)}}{\mathrm{d}r}=-\frac{1}{a_0}\cos\theta\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}r}\psi^{(0)}$$

由式(5)可得 $f(r)$ 满足的方程为

$$\frac{1}{2r}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}(rf)-\frac{1}{a_0}\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}r}-\frac{f}{r^2}=\frac{\mathscr{E}}{ea_0}r \tag{7}$$

边界条件为 $r\to 0$ 处,$f(r)\to 0$.

用级数解法或试探法,不难求出式(7)的解为

$$f(r)=-\frac{\mathscr{E}}{e}a_0^2\left[\frac{r}{a_0}+\frac{1}{2}\left(\frac{r}{a_0}\right)^2\right] \tag{8}$$

因此

$$\boxed{\psi^{(1)}=-\frac{\mathscr{E}}{e}a_0^2\left[\frac{r}{a_0}+\frac{1}{2}\left(\frac{r}{a_0}\right)^2\right]\psi^{(0)}\cos\theta} \tag{9}$$

按照微扰论公式,能级的二级修正(参看题 11.1)为

$$E^{(2)}=\langle\psi^{(0)}\mid H'\mid\psi^{(1)}\rangle \tag{10}$$

以式(3)、(9)代入上式,即得

$$E^{(2)}=-e\mathscr{E}\langle\psi^{(0)}\mid z^2 f(r)/r\mid\psi^{(0)}\rangle=-\frac{1}{3}e\mathscr{E}\langle\psi^{(0)}\mid rf(r)\mid\psi^{(0)}\rangle$$

$$=-\frac{1}{3}\mathscr{E}^2a_0^3\left\langle\psi^{(0)}\left|\left(\frac{r}{a_0}\right)^2+\frac{1}{2}\left(\frac{r}{a_0}\right)^3\right|\psi^{(0)}\right\rangle \tag{11}$$

利用 $\psi^{(0)}$ 的具体表示式(1),容易算出

$$\left\langle\psi^{(0)}\left|\left(\frac{r}{a_0}\right)^2\right|\psi^{(0)}\right\rangle=3$$

$$\left\langle\psi^{(0)}\left|\left(\frac{r}{a_0}\right)^3\right|\psi^{(0)}\right\rangle=\frac{15}{2}$$

因此

$$\boxed{E^{(2)}=-\frac{9}{4}\mathscr{E}^2a_0^3} \tag{12}$$

此即外电场引起的基态能级移动,它和 $\mathscr{E}^2$ 成正比.

电偶极矩算符为 $\boldsymbol{D}=-e\boldsymbol{r}$,其平均值为

$$\langle\boldsymbol{D}\rangle=-e\langle\psi\mid\boldsymbol{r}\mid\psi\rangle=-e\langle\psi^{(0)}+\psi^{(1)}\mid\boldsymbol{r}\mid\psi^{(0)}+\psi^{(1)}\rangle \tag{13}$$

根据 $\psi^{(0)}$ 和 $\psi^{(1)}$ 的对称性,易得

$$\langle D_x\rangle=0,\quad\langle D_y\rangle=0$$

$$\langle D_z\rangle=-2e\langle\psi^{(0)}\mid z\mid\psi^{(1)}\rangle=-\frac{2}{\mathscr{E}}E^{(2)}=\frac{9}{2}\mathscr{E}a_0^3 \tag{14}$$

原子的极化系数 α 由下式确定:

$$\langle D_z\rangle=\alpha\mathscr{E},\quad \text{或}\quad E^{(2)}=-\frac{1}{2}\alpha\mathscr{E}^2 \tag{15}$$

由此容易求得

$$\alpha=9a_0^3/2 \tag{16}$$

11.19　求氦原子的基态磁化率.

解　处于基态的氦原子,两个电子自旋反平行,总自旋为 0,因此基态能级没有精细结构. 又因为电子的轨道角动量也为 0,故外磁场(沿 z 方向)$\boldsymbol{B}$ 引起的磁作用能量为

$$H'=\frac{e^2B^2}{8m_ec^2}(x_1^2+y_1^2+x_2^2+y_2^2) \tag{1}$$

下标 1,2 表示该量属于电子 1,2. 如取基态波函数为

$$\psi_0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=\psi_0(r_1)\psi_0(r_2)$$

其中

$$\psi_0(r)=\left(\frac{\lambda^3}{\pi a_0^3}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-\lambda r/a_0},\quad a_0=\frac{\hbar^2}{m_ee^2} \tag{2}$$

容易求得

$$\langle x_1^2\rangle=\frac{1}{3}\langle r_1^2\rangle=\frac{1}{3}\int\psi_0^2(r)r^2\,\mathrm{d}\tau=\left(\frac{a_0}{\lambda}\right)^2 \tag{3}$$

基态能级的一级微扰修正为

$$E^{(1)}=\langle H'\rangle=\frac{e^2B^2}{8m_ec^2}4\langle x_1^2\rangle=\frac{1}{2\lambda^2}\frac{e^2B^2}{m_ec^2}a_0^2=E(B) \tag{4}$$

磁化率为

$$\alpha_\beta=-\frac{\partial^2E(B)}{\partial B^2}=-\frac{1}{\lambda^2}\frac{e^2a_0^2}{m_ec^2}=-\frac{4}{\lambda^2}\left(\frac{\hbar c}{e^2}\right)^2\frac{(\mu_\mathrm{B})^2}{m_ec^2} \tag{5}$$

$\alpha_\mathrm{B}<0$ 为抗磁性. 上式中

$$\mu_\mathrm{B}=\frac{e\hbar}{2m_ec}=5.79\times10^{-9}\,\mathrm{eV/Gs}$$

$$m_ec^2=5.11\times10^5\,\mathrm{eV},\quad \hbar c/e^2=137$$

因此

$$\alpha_\mathrm{B}=-\frac{1}{\lambda^2}4.93\times10^{-18}\,\mathrm{eV/(Gs)^2} \tag{5'}$$

如取 $\lambda=Z=2$,则得 $\alpha_\mathrm{B}=-1.23\times10^{-18}\,\mathrm{eV/(Gs)}$,如取 $\lambda=Z-5/16=27/16$(变分

法最佳值),则得

$$\alpha_B = -1.73\times10^{-18}\,\mathrm{eV/(Gs)^2}$$

11.20 一个氢原子处于某种离子点阵中,周围离子对氢原子中电子的作用势可以近似表示为

$$H' = V_0\left(x^4+y^4+z^4-\frac{3}{5}r^4\right) \tag{1}$$

H'可以视为微扰. 如氢原子的 3d 态波函数(正交归一的)取为

$$\begin{aligned}
\psi_1 &= \frac{1}{2}(y^2-z^2)f(r)\\
\psi_2 &= \frac{1}{2\sqrt{3}}(2x^2-y^2-z^2)f(r)\\
\psi_3 &= yzf(r)\\
\psi_4 &= zxf(r)\\
\psi_5 &= xyf(r)
\end{aligned} \tag{2}$$

设分析在 H'作用下 3d 能级的分裂以及分裂后各能级的简并度.

解 由各波函数在直角坐标系中的奇偶性容易看出

$$H'_{31}=0,\quad H'_{32}=0,\quad H'_{34}=0,\quad H'_{35}=0 \tag{3}$$

因此,在一级微扰作用下,ψ_3 态不会和其他各态发生耦合,即 ψ_3 是正确的(稳定的)零级波函数,能级的一级微扰修正等于 H'的平均值 H'_{33}. ψ_4 和 ψ_5 也有同样的结论,而且显然有

$$H'_{33}=H'_{44}=H'_{55} \tag{4}$$

因此,微扰作用后,ψ_3、ψ_4、ψ_5 仍是独立的定态,属于同一个能级.

对于 ψ_1 和 ψ_2,有三种 H'矩阵元,即 H'_{11}、H'_{22}、H'_{12},其中

$$H'_{12}=\iiint_{-\infty}^{\infty} f^2(r)H'\,\frac{1}{4\sqrt{3}}(z^4-y^4+2x^2y^2-2x^2z^2)\,\mathrm{d}\tau=0 \tag{5}$$

(其中 z^4 项和 y^4 项贡献相同,互相抵消;x^2y^2 项和 x^2z^2 项贡献相同,互相抵消.)

$$H'_{11}=\frac{1}{4}\iiint_{-\infty}^{\infty} f^2(r)H'(y^4+z^4-2y^2z^2)\,\mathrm{d}\tau$$

$$H'_{22}=\frac{1}{12}\iiint_{-\infty}^{\infty} f^2(r)H'(4x^4+y^4+z^4+2y^2z^2-4x^2y^2-4x^2z^2)\,\mathrm{d}\tau$$

其中 x^4 项、y^4 项、z^4 项贡献相等;x^2y^2 项、y^2z^2 项、z^2x^2 项贡献相等;因此 $H'_{11}=$

H'_{22}. 这样 ψ_1 和 ψ_2 仍是微扰作用后独立的定态，属于同一个能级.

结论：在微扰作用下，3d 能级分裂为二，即

$$E_{3d}^{(0)} \to E_{3d}^{(0)} + H'_{11} \quad E_{3d}^{(0)} + H'_{33} \tag{6}$$

前者为二重简并，对应于 ψ_1 和 ψ_2；后者为三重简并，对应于 ψ_3、ψ_4、ψ_5. 所有这 5 个状态，在一级微扰下，彼此不发生耦合，都仍是定态.

11.21　氢原子的 $n=2$ 能级的精细结构(计及相对论自旋效应，但忽略 Lamb 移位)如图 11.21 所示，其中

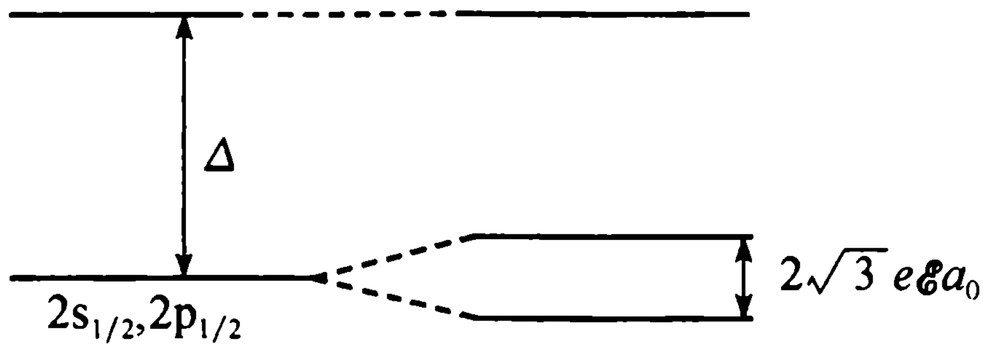


图 11.21

$$\Delta = E(2p_{3/2}) - E(2p_{1/2}) = \frac{1}{32}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^4 m_e c^2$$

$$= 4.5 \times 10^{-5}\,\mathrm{eV}$$

现将氢原子置于弱电场 $\mathscr{E}$ 中，求这组能级的分裂(一级近似). 解释“弱”电场的含义是什么?

解　以电场 $\mathscr{E}$ 的方向为 z 轴，电场对电子的作用能为

$$H' = e\boldsymbol{r}\cdot\mathscr{E} = e\mathscr{E}z = e\mathscr{E}r\cos\theta \tag{1}$$

引起的能级变化约为 $\Delta E \sim e\mathscr{E}a_0$ (a_0 为 Bohr 半径)，如 $\Delta E \ll \Delta$，即 $e\mathscr{E}a_0 \ll 4.5\times10^{-5}\,\mathrm{eV}$，就可以认为是“弱”电场，条件为

$$\mathscr{E} \ll \frac{4.5\times10^{-5}\,\mathrm{eV}}{ea_0} \sim 8.5\times10^{3}\,\mathrm{V/cm} \tag{2}$$

以下将视 H' 为微扰.

氢原子的(能量，$\boldsymbol{l}^2$，$\boldsymbol{J}^2$，$\boldsymbol{J}_z$)共同本征态可以表示成

$$\psi_{nlj m_j} = R_{nl}(r)\phi_{ljm_j}(\theta,\varphi,s_z) \tag{3}$$

本题涉及的各能级，量子数取值如下：

$$2s_{1/2}\text{——}n=2,\quad l=0,\quad j=\frac{1}{2},\quad m_j=\pm\frac{1}{2}$$

$$2p_{1/2}\text{——}n=2,\quad l=1,\quad j=\frac{1}{2},\quad m_j=\pm\frac{1}{2}$$

$$2p_{3/2}\text{——}n=2,\quad l=1,\quad j=\frac{3}{2},\quad m_j=\pm\frac{1}{2},\pm\frac{3}{2}$$

微扰算符 H' 和 J_z 对易，因此 H' 的作用不会改变 m_j 值，在 m_j 不同的状态之间，H' 的矩阵元为 0. H' 为奇宇称，因此在任何 ψ_{nljm_j} 态下 H' 的平均值为 0.

能级 $2p_{3/2}$ 共对应四种状态，它们的 m_j 值互不相同，因此在 $2p_{3/2}$ 子空间中，H' 的矩阵元全部为 0，在一级微扰近似下，H' 对能级没有影响，这个能级不分裂.

微扰作用前,能级 $2s_{1/2}$ 和 $2p_{1/2}$ 重合,它们各对应两个状态,共有四个简并态.其中 s 态和 p 态各有一个 $m_j=1/2$ 态,它们在一级微扰作用下将发生耦合,产生电偶极矩,从而导致能级分裂. 两个 $m_j=-1/2$ 态,也产生同样的结果. 以 $m_j=1/2$ 为例作具体计算. 有关波函数为

$$\psi_{20\frac{1}{2}\frac{1}{2}}=R_{20}(r)\mathrm{Y}_{00}\alpha$$

$$\psi_{21\frac{1}{2}\frac{1}{2}}=R_{21}(r)\left[-\frac{1}{\sqrt{3}}\mathrm{Y}_{10}\alpha+\sqrt{\frac{2}{3}}\mathrm{Y}_{11}\beta\right] \tag{4}$$

其中 α、β 为 σ_z 的本征态,分别属于本征值 1 和 -1. 在 σ_z 表象中,

$$\alpha=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix},\quad \beta=\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$$

利用 R_{20}、R_{21} 的具体函数形式,容易算出

$$\langle\psi_{20\frac{1}{2}\frac{1}{2}}\mid H'\mid\psi_{21\frac{1}{2}\frac{1}{2}}\rangle=-e\mathscr{E}\int\mathrm{Y}_{00}\mathrm{Y}_{10}\frac{1}{\sqrt{3}}\cos\theta\mathrm{d}\Omega\int_0^\infty R_{20}R_{21}r^3\mathrm{d}r$$

$$=-\frac{1}{3}(-3\sqrt{3})e\mathscr{E}a_0=\sqrt{3}e\mathscr{E}a_0 \tag{5}$$

因此,在 $\{\psi_{20\frac{1}{2}\frac{1}{2}},\psi_{21\frac{1}{2}\frac{1}{2}}\}$ 子空间中,H' 的矩阵表示为

$$H'=\sqrt{3}e\mathscr{E}a_0\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix} \tag{6}$$

由此导致能级的一级微扰修正和零级波函数为

$$\boxed{E^{(1)}=\pm\sqrt{3}e\mathscr{E}a_0} \tag{7}$$

$$\psi^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{20\frac{1}{2}\frac{1}{2}}\pm\psi_{21\frac{1}{2}\frac{1}{2}})$$

两个 $m_j=-1/2$ 态也产生类似的耦合,并导致相同的能级分裂. 能级分裂的示意图如图 11.21 所示.

11.22 有一种简化的“一维氦原子”模型,原子核-电子以及电子-电子间的作用势均用 δ 势阱(垒)表示,总能量算符取为

$$H=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right)-Ze^2[\delta(x_1)+\delta(x_2)]+e^2\delta(x_1-x_2) \tag{1}$$

其中 x_1、x_2 表示电子 1 和 2 的坐标,Ze 是原子核电荷. 如采用自然单位,即距离以 a_0/Z 为单位(a_0 是 Bohr 半径),能量以 Z^2e^2/a_0 为单位,则 H 可以简化成

$$H=-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right)-\delta(x_1)-\delta(x_2)+\frac{1}{Z}\delta(x_1-x_2) \tag{2}$$

如视电子-电子作用势(上式中最后一项)为微扰,试求体系的能级(一级近似),并和三维氦原子的微扰论结果比较.

解　将式(2)写成

$$H = H_0(1) + H_0(2) + H' \tag{2'}$$

其中

$$H_0(i) = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} - \delta(x_i), \quad i = 1,2 \tag{3}$$

$$H' = \frac{1}{Z}\delta(x_1 - x_2) \tag{4}$$

$H_0(i)$的本征函数和本征值见题 2.1,它们是

$$\psi(x_i) = \mathrm{e}^{-|x_i|}, \quad E(i) = -\frac{1}{2} \tag{5}$$

(相当于题 2.1 中 $m=\hbar=V_0=1, k=1$). 因此,作为微扰论的零级近似波函数,应取

$$\psi^{(0)}(x_1, x_2) = \mathrm{e}^{-|x_1|}\mathrm{e}^{-|x_2|} \tag{6}$$

体系能量的零级近似为

$$E^{(0)} = E(1) + E(2) = -1 \tag{7}$$

能级的一级微扰修正为

$$E^{(1)} = \langle \psi^{(0)} \mid H' \mid \psi^{(0)} \rangle$$

将式(4)及(6)代入上式,容易算出

$$E^{(1)} = \frac{1}{Z}\iint_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1\,\mathrm{d}x_2\,\delta(x_1 - x_2)\mathrm{e}^{-2|x_1|-2|x_2|} = \frac{1}{Z}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1\,\mathrm{e}^{-4|x_1|} = \frac{1}{2Z} \tag{8}$$

因此,准确到微扰论一级近似,体系能级为

$$E = E^{(0)} + E^{(1)} = \frac{1}{2Z} - 1 \tag{9}$$

换成普通单位,即

$$E = \left(\frac{1}{2Z} - 1\right)\frac{Z^2 e^2}{a_0} = \left(\frac{Z}{2} - Z^2\right)\frac{e^2}{a_0} \tag{10}$$

如所周知,三维氦原子(核电荷 Ze)基态能级的普通微扰论结果为

$$E_0 = \left(\frac{5}{8}Z - Z^2\right)\frac{e^2}{a_0}$$

二者仅相差$\frac{1}{8}Z\frac{e^2}{a_0}$.

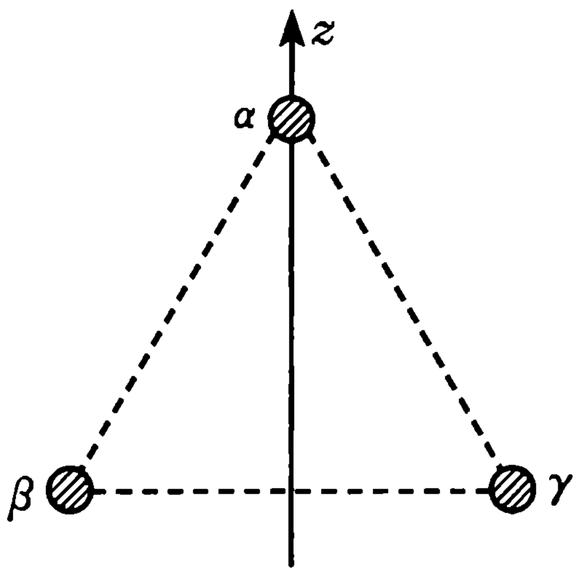


图 11.23

11.23 某分子由三个相同的原子构成,三个原子位于正三角形之顶点,如图 11.23 所示,分别记为 α、β、γ. 有一个价电子可以在三个原子间流动. 以 H_0 表示此价电子的 Hamilton 量,以 $|\alpha\rangle$、$|\beta\rangle$、$|\gamma\rangle$ 表示电子的原子轨道(分别属于原子 α,β,γ),设电子的原子能级为

$$\langle\alpha\mid H_0\mid\alpha\rangle=\langle\beta\mid H_0\mid\beta\rangle=\langle\gamma\mid H_0\mid\gamma\rangle=E_0 \tag{1}$$

在任何两个原子之间,H_0 的矩阵元为

$$\langle\alpha\mid H_0\mid\beta\rangle=\langle\beta\mid H_0\mid\gamma\rangle=\langle\gamma\mid H_0\mid\alpha\rangle=-a,\quad a>0 \tag{2}$$

设 $|\alpha\rangle$、$|\beta\rangle$、$|\gamma\rangle$ 互相正交,而且是归一化的。

(a) 计算能级分裂,即求分子能级;

(b) 沿 z 方向加均匀弱电场,视为微扰,这时(由于微扰的影响)原子 α 处的电子能级下降 b,即由 $E_0\to E_0-b$,设 $b\ll a$. 原子 β、γ 处的电子能级不变。仍为 E_0. 在任何两个原子之间,微扰矩阵元为 0. 求分子能级的变化(一级修正);

(c) 加电场后,设电子处于基态. 如突然将电场旋转 $\frac{2\pi}{3}$(指向原子 β),求电子仍然处于基态的概率.

解 (a) 电子的分子轨道波函数可以表示成

$$|\psi\rangle=C_\alpha|\alpha\rangle+C_\beta|\beta\rangle+C_r|\gamma\rangle \tag{3}$$

满足能量本征方程

$$H_0|\psi\rangle=E|\psi\rangle \tag{4}$$

在以 $|\alpha\rangle$、$|\beta\rangle$、$|r\rangle$ 为基矢的态空间中,H_0 的矩阵表示为

$$H_0=\begin{bmatrix}E_0 & -a & -a\\ -a & E_0 & -a\\ -a & -a & E_0\end{bmatrix} \tag{5}$$

本征方程(4)的矩阵表示为

$$(E-H_0)\psi=\begin{bmatrix}E-E_0 & a & a\\ a & E-E_0 & a\\ a & a & E-E_0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}C_\alpha\\ C_\beta\\ C_r\end{bmatrix}=0 \tag{4'}$$

能级 E 由下式决定:

$$\det(E-H_0)=0$$

即

$$\begin{vmatrix} E-E_0 & a & a \\ a & E-E_0 & a \\ a & a & E-E_0 \end{vmatrix} = 0 \tag{6}$$

解为

$$E = E_0 - 2a,\quad E_0 + a,\quad E_0 + a \tag{7}$$

此即分子能级.

(b) 加电场后,以 H' 表示微扰算符. 按照题意,H' 的矩阵元中仅 $\langle\alpha|H'|\alpha\rangle = -b$,其余均为 0,因此总能量算符的矩阵表示变成

$$H = H_0 + H' = \begin{bmatrix} E_0-b & -a & -a \\ -a & E_0 & -a \\ -a & -a & E_0 \end{bmatrix} \tag{8}$$

如 H 的本征态仍用式(3)表示,则本征方程为

$$(E-H)\psi = \begin{bmatrix} E-E_0+b & a & a \\ a & E-E_0 & a \\ a & a & E-E_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_\alpha \\ C_\beta \\ C_\gamma \end{bmatrix} = 0 \tag{9}$$

能级方程为

$$\det(E-H) = 0$$

即

$$\begin{vmatrix} E-E_0+b & a & a \\ a & E-E_0 & a \\ a & a & E-E_0 \end{vmatrix} = 0 \tag{10}$$

解为

$$E = E_0 + a,\quad E_0 - \frac{a+b}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{9a^2-2ab+b^2} \tag{11}$$

利用条件 $b \ll a$,对上式作近似展开,可得

$$E = E_0 + a,\quad E_0 + a - \frac{2}{3}b,\quad E_0 - 2a - \frac{1}{3}b \tag{12}$$

其中后者为基态能级,比加电场前下降 $b/3$. 原来的简并能级(E_0+a)在电场作用下已经分裂成两条.

(c) 加电场前,基态能级为(E_0-2a),由式(4′)容易求得

$$C_\alpha = C_\beta = C_\gamma$$

即基态波函数为

$$|\psi\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}(|\alpha\rangle+|\beta\rangle+|\gamma\rangle) \tag{13}$$

对于三个原子完全对称.

加电场后,对称性遭到一定程度的破坏,因$|\alpha\rangle$态能量降低,其成分应有所增加.以微扰后的基态能级

$$\left(E_0-2a-\frac{b}{3}\right)$$

代入式(9),即得

$$\begin{aligned}&\left(\frac{2b}{3a}-2\right)C_\alpha+C_\beta+C_\gamma=0\\&-\left(2+\frac{b}{3a}\right)C_\beta+C_\alpha+C_\gamma=0\\&-\left(2+\frac{b}{3a}\right)C_\gamma+C_\alpha+C_\beta=0\end{aligned} \tag{14}$$

由后二式可见$C_\beta=C_\gamma$,代入第一式即得

$$C_\beta=C_\gamma=\left(1-\frac{b}{3a}\right)C_\alpha \tag{15}$$

再利用归一化条件

$$\langle\psi|\psi\rangle=C_\alpha^2+C_\beta^2+C_\gamma^2=1$$

即得

$$C_\alpha=\frac{1}{\sqrt{3}}\left(1+\frac{2b}{9a}\right) \tag{16}$$

$$C_\beta=C_\gamma=\frac{1}{\sqrt{3}}\left(1-\frac{b}{9a}\right) \tag{16'}$$

(略去b^2/a^2项.)$|\alpha\rangle$态成分C_α^2略高于1/3.

电场旋转$2\pi/3$(转向原子β)后,新的基态应为

$$|\psi'\rangle=C'_\alpha|\alpha\rangle+C'_\beta|\beta\rangle+C'_\gamma|\gamma\rangle \tag{17}$$

其中

$$C'_\beta=C_\alpha,\quad C'_\gamma=C'_\alpha=C_\beta$$

新、旧基态波函数的标识为

$$\langle\psi'|\psi\rangle=C'_\alpha C_\alpha+C'_\beta C_\beta+C'_\gamma C_\gamma=2C_\alpha C_\beta+C_\beta^2$$

电场突然旋转时,电子波函数仍为ψ,则处于新的基态ψ'的概率为

$$|\langle\psi'|\psi\rangle|^2=(2C_\alpha C_\beta+C_\beta^2)^2=1-\mathrm{O}(b^2/a^2) \tag{18}$$

11.24　某量子力学体系，能量算符 H_0 的本征值和正交归一化本征函数为

$$E_1——\psi_1,\quad E_2——\psi_2,\psi_3$$

设此体系受到微扰作用，在 H_0 表象中微扰算符的矩阵表示为

$$H'=\begin{bmatrix}0 & b & c\\ b & -a & 0\\ c & 0 & a\end{bmatrix} \tag{1}$$

试求微扰作用后体系的能级(三级近似).

解　能级 E_1 是非简并的，其微扰修正可以按标准公式立即写出. 能级 E_2 是简并的，应按简并态微扰论处理. 鉴于本题只有三个能级，便于用矩阵对角化方法直接求解. 总能量算符为(H_0 表象)

$$H=H_0+H'=\begin{bmatrix}E_1 & b & c\\ b & E_2-a & 0\\ c & 0 & E_2+a\end{bmatrix} \tag{2}$$

能级方程为

$$\det(H-E)=\begin{vmatrix}E_1-E & b & c\\ b & E_2-a-E & 0\\ c & 0 & E_2+a-E\end{vmatrix}=0$$

即

$$\begin{aligned}&(E-E_1)(E-E_2+a)(E-E_2-a)\\&-(E-E_2+a)c^2-(E-E_2-a)b^2=0\end{aligned} \tag{3}$$

其中 E 为待定的体系能级，E_1 和 E_2 为零级能量，a,b,c 为一级小量.

1°　一级近似

如略去式(3)中二级以上(含二级，下同)小量，即得

$$(E-E_1)(E-E_2+a)(E-E_2-a)=0$$

解为

$$E=E_1,\quad E_2-a,\quad E_2+a \tag{4}$$

这个结果可以从 H 的矩阵表示式(2)直接看出.

2°　能级 E_1 的二级修正和三级修正.

令 $E=E_1+\Delta$，代入式(3)，得到

$$\begin{aligned}&\Delta(E_1-E_2+a+\Delta)(E_1-E_2-a+\Delta)\\&=(E_1-E_2+a+\Delta)c^2+(E_1-E_2-a+\Delta)b^2\end{aligned}$$

Δ 中包含二级和三级小量. 上式中略去四级以上小量，即得

$$(E_1-E_2)^2\Delta=(E_1-E_2)(c^2+b^2)+a(c^2-b^2)$$

即

$$\Delta=\frac{c^2+b^2}{E_1-E_2}+\frac{a(c^2-b^2)}{(E_1-E_2)^2} \tag{5}$$

其中第一项为二级修正,第二项为三级修正.上式也可以直接套用非简并态微扰论公式(参看题 11.1)而得出.

3° 能级 E_2 的二级修正和三级修正.

计及一级修正后,E_2 已经分裂为二,即 $E_2\pm a$,下面分别计算其二级和三级修正.

(i) $E=E_2+a+\Delta$,代入式(3),得到

$$(E_2-E_1+a+\Delta)(2a+\Delta)\Delta=(2a+\Delta)c^2+b^2\Delta$$

Δ 中包含二级和三级小量.上式中保留最低的两个量级,即三级和四级,而略去五级以上小量,即得

$$2a(E_2-E_1)\Delta-2ac^2=(c^2+b^2-2a^2)\Delta-(E_2-E_1)\Delta^2 \tag{6}$$

作为二级修正,只需保留 Δ 中二级项,这时上式右端全为四级项,可以略去,故得

$$\Delta\approx c^2/(E_2-E_1) \tag{7}$$

此即能级的二级修正.在三级近似中,可将式(7)代入式(6)右端,即保留式(6)中四级项,得到

$$\Delta=\frac{c^2}{E_2-E_1}+\frac{\frac{b^2c^2}{2a}-ac^2}{(E_2-E_1)^2} \tag{8}$$

(ii) $E=E_2-a+\Delta$,完全类似的计算可得

$$\Delta=\frac{b^2}{E_2-E_1}+\frac{ab^2-\frac{b^2c^2}{2a}}{(E_2-E_1)^2} \tag{9}$$

综合式(5)、(8)、(9),可得体系的全部能级(三级近似)为

$$E=E_1+\frac{c^2+b^2}{E_1-E_2}+\frac{a(c^2-b^2)}{(E_1-E_2)^2}$$

$$E_2+a+\frac{c^2}{E_2-E_1}+\frac{\frac{b^2c^2}{2a}-ac^2}{(E_2-E_1)^2} \tag{10}$$

$$E_2-a+\frac{b^2}{E_2-E_1}+\frac{ab^2-\frac{b^2c^2}{2a}}{(E_2-E_1)^2}$$

三个能量的总和为(E_1+2E_2),和微扰前相同.三条能级的一级修正总和,二级修

正总和，三级修正总和均为 0. 其根源在于 H' 的迹为 0，H_0 和 H 的迹相等.

11.25　有一个量子力学体系，Hamilton 量记为 H_0，能级和正交归一化的本征函数为

$$E_1^{(0)}\text{——}\psi_\alpha,\psi_\beta,\quad E_2^{(0)}\text{——}\psi_r,\psi_\delta$$

设体系受到微扰作用，微扰后的 Hamilton 量可以表示成下列矩阵形式（H_0 表象）：

$$H=H_0+H'=\begin{bmatrix}E_1^{(0)} & a & d & 0\\ a & E_1^{(0)} & b & 0\\ d & b & E_2^{(0)} & c\\ 0 & 0 & c & E_2^{(0)}\end{bmatrix}\tag{1}$$

设无偶然简并，试用二级微扰论计算体系能级.

解　(a) 一级近似.

在和 $E_1^{(0)}$ 相应的 $\{\psi_\alpha,\psi_\beta\}$ 子空间中，微扰的矩阵表示为

$$H'=\begin{bmatrix}0 & a\\ a & 0\end{bmatrix}\tag{2}$$

按照题 11.2 讨论过的第 **2°**种情况，即得能级的一级近似和零级波函数为

$$E=E_1^{(0)}\pm a,\quad \psi^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_\alpha\pm\psi_\beta)\tag{3}$$

在 $\{\psi_r,\psi_\delta\}$ 子空间中，微扰的矩阵表示为

$$H'=\begin{bmatrix}0 & c\\ c & 0\end{bmatrix}\tag{4}$$

能级的一级近似和零级波函数为

$$E=E_2^{(0)}\pm c,\quad \psi^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_r\pm\psi_\delta)\tag{5}$$

(b) 能级的二级修正.

由式(1)可知微扰矩阵元为

$$H'_{\alpha\beta}=a,\quad H'_{\alpha r}=d,\quad H'_{\alpha\delta}=0$$
$$H'_{\beta r}=b,\quad H'_{\beta\delta}=0,\quad H'_{r\delta}=c$$
$$H'_{\alpha\alpha}=H'_{\beta\beta}=H'_{rr}=H'_{\delta\delta}=0$$

题 11.2 已经得到能级二级修正公式

$$E_n^{(2)}=\sum_k{}'\frac{1}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}\left|\langle\psi_k^{(0)}\mid H'\mid\psi^{(0)}\rangle\right|^2\tag{6}$$

对于本题,即

$$E_1^{(2)} = \frac{1}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} |\langle \psi_r | H' | \psi^{(0)} \rangle|^2 = \frac{1}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \frac{1}{2}(d \pm b)^2 \tag{7}$$

$$E_2^{(2)} = \frac{1}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} [|\langle \psi_\alpha | H' | \psi^{(0)} \rangle|^2 + |\langle \psi_\beta | H' | \psi^{(0)} \rangle|^2]$$

$$= \frac{1}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} \frac{1}{2}(d^2 + b^2) \tag{8}$$

综合式(3)、(7)以及式(5)、(8),即得体系能级公式(二级近似)

$$\begin{aligned} E &= E_1^{(0)} \pm a + \frac{1}{2} \frac{(d \pm b)^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \\ &\quad E_2^{(0)} \pm c + \frac{1}{2} \frac{d^2 + b^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} \end{aligned} \tag{9}$$

11.26 已知体系的能量算符为

$$H = K\boldsymbol{l}^2 + \omega l_z + \lambda l_y \tag{1}$$

其中 K、$\omega \gg \lambda > 0$,$\boldsymbol{l}$ 为轨道角动量算符.

(a) 求体系能级的精确值;

(b) 视 λ 项为微扰,求能级(二级近似,不考虑偶然简并);

(c) 对于每一个能级,求 l_y、l_z 的平均值. 用精确解法和微扰论(准确到 λ 量级)分别计算,并作比较.

解 (a) 精确解. 令 $\lambda/\omega = \tan\theta$,并在 yz 平面上取方向 $\boldsymbol{n}$,$\boldsymbol{n}$ 和 z 轴夹角 θ. 则

$$\cos\theta = \omega/\sqrt{\omega^2 + \lambda^2}, \quad \sin\theta = \lambda/\sqrt{\omega^2 + \lambda^2}$$

$$\omega l_z + \lambda l_y = \sqrt{\omega^2 + \lambda^2}(l_z\cos\theta + l_y\sin\theta) = \sqrt{\omega^2 + \lambda^2} l_n \tag{2}$$

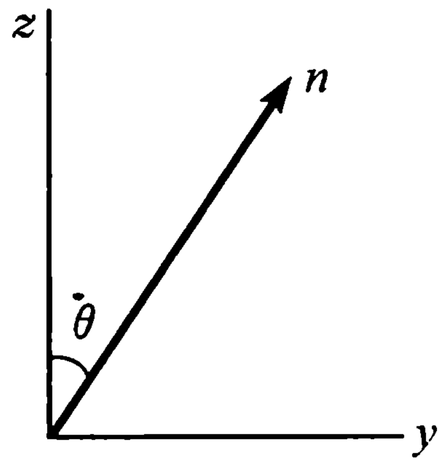


图 11.26

l_n 为 $\boldsymbol{l}$ 在 $\boldsymbol{n}$ 方向的投影. 总能量算符可以表示成

$$H = K\boldsymbol{l}^2 + \sqrt{\omega^2 + \lambda^2} l_n \tag{1'}$$

$\boldsymbol{l}^2$、l_n 可对易,它们的本征值分别为

$$\begin{aligned} \boldsymbol{l}^2 &= l(l+1)\hbar^2, \quad l = 0, 1, 2, \cdots \\ l_n &= m\hbar, \qquad\quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots, \pm l \end{aligned} \tag{3}$$

因此,体系能级为

$$E_{lm} = l(l+1)K\hbar^2 + m\hbar\sqrt{\omega^2 + \lambda^2} \tag{4}$$

如将上式展开成 λ 的幂级数,可得

$$E_{lm} = l(l+1)K\hbar^2 + m\omega\hbar\left(1 + \frac{\lambda^2}{2\omega^2} + \cdots\right) \tag{4'}$$

(b) 微扰论. 将 H 写成

$$H = H_0 + H'$$

$$H_0 = Kl^2 + \omega l_z, \quad H' = \lambda l_y \tag{5}$$

视 H'为微扰. H_0 的本征态即(l^2, l_z)的共同本征态$|lm\rangle$,能级的零级近似为

$$E_{lm}^{(0)} = l(l+1)K\hbar^2 + m\omega\hbar \tag{6}$$

一级修正为

$$E_{lm}^{(1)} = \langle lm \mid H' \mid lm \rangle = \lambda \langle lm \mid l_y \mid lm \rangle = 0 \tag{7}$$

二级修正为

$$E_{lm}^{(2)} = \lambda^2 \sum_{l'm'}{}' \frac{|\langle l'm' \mid l_y \mid lm \rangle|^2}{E_{lm}^{(0)} - E_{l'm'}^{(0)}} \tag{8}$$

利用 l_y 的矩阵元公式

$$\langle l'm' \mid l_y \mid lm \rangle = \frac{i\hbar}{2} \sqrt{(l+m)(l-m+1)}\,\delta_{ll'}\delta_{m-1,m'}$$

$$- \frac{i\hbar}{2} \sqrt{(l-m)(l+m+1)}\,\delta_{ll'}\delta_{m+1,m'} \tag{9}$$

可见对 $E_{lm}^{(2)}$ 有贡献的是 $l' = l, m' = m \pm 1$,从而得到

$$E_{lm}^{(2)} = \frac{\lambda^2}{\omega\hbar}\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 [(l+m)(l-m+1) - (l-m)(l+m+1)] = \frac{1}{2}m\lambda^2 \frac{\hbar}{\omega} \tag{10}$$

因此,体系的能级(微扰论二级近似)为

$$E_{lm} \approx E_{lm}^{(0)} + E_{lm}^{(1)} + E_{lm}^{(2)} = l(l+1)K\hbar^2 + m\omega\hbar + \frac{1}{2}m\lambda^2 \frac{\hbar}{\omega} \tag{11}$$

和精确解的级数展开式(4′)完全一致.

(c) 精确解中,对于(l^2, l_n)的共同本征态$|l, l_n = m\hbar\rangle$,l_z 和 l_y 的平均值为

$$\langle l_z \rangle = m\hbar\cos\theta = m\hbar\omega / \sqrt{\omega^2 + \lambda^2} \tag{12}$$

$$\langle l_y \rangle = m\hbar\sin\theta = m\hbar\lambda / \sqrt{\omega^2 + \lambda^2} \tag{13}$$

用微扰论方法计算$\langle l_z \rangle$、$\langle l_y \rangle$时,可以利用题 11.5 建立的公式. 由于

$$H' = \lambda l_y = i\lambda\left[\frac{1}{\omega\hbar} l_x, H_0\right] \tag{14}$$

相当于题 11.5 中取

$$A = \frac{1}{\omega\hbar} l_x$$

如再取 $B = l_y$,就有

$$C = \mathrm{i}[B,A] = \frac{\mathrm{i}}{\omega\hbar}[l_y, l_x] = \frac{1}{\omega} l_z$$

在微扰前 H_0 的本征态$|lm\rangle$下,显然有

$$B_0 = \langle lm \mid l_y \mid lm \rangle = 0$$

$$C_0 = \frac{1}{\omega}\langle lm \mid l_z \mid lm \rangle = m\hbar/\omega$$

因此,对于微扰后的能量本征态(能级 E_{lm}),应有

$$\langle l_y \rangle = B_0 + \lambda C_0 = m\lambda\hbar/\omega \tag{15}$$

类似地,如改取 $B=l_z$,就有

$$C = \mathrm{i}[B,A] = \frac{\mathrm{i}}{\omega\hbar}[l_z, l_x] = -\frac{1}{\omega} l_y$$

对于微扰前的 H_0 本征态$|lm\rangle$,有

$$B_0 = \langle lm \mid l_z \mid lm \rangle = m\hbar$$

$$C_0 = -\frac{1}{\omega}\langle lm \mid l_y \mid lm \rangle = 0$$

因此,对于微扰后的能量本征态(能级 E_{lm}),应有

$$\langle l_z \rangle = B_0 + \lambda C_0 = m\hbar \tag{16}$$

式(15)、(16)均准确到量级 λ,它们和精确的式(12)、(13)是符合的.

11.27 转动惯量为 I,电偶极矩为 D,可以在 xy 平面内自由转动的平面转子,其能量算符为

$$H_0 = l_z^2/2I = -\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varphi^2} \tag{1}$$

φ 为旋转角. 如沿 x 方向加上均匀外电场$\mathscr{E}$,转子将受到作用能

$$H' = -\boldsymbol{D}\cdot\boldsymbol{\mathscr{E}} = -D\mathscr{E}\cos\varphi \tag{2}$$

而总能量算符变成 $H=H_0+H'$.

(a) 写出 H_0 的本征函数,本征值,说明能级的简并度;

(b) 视 H'为微扰,求能级(二级近似).

解 (a) H_0 是 l_z 的函数,l_z 的本征函数显然就是H_0 的本征函数,故 H_0 的本征函数、本征值为

$$\psi_m^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}, \quad E_m^{(0)} = m^2\frac{\hbar^2}{2I}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots \tag{3}$$

除基态($m=0$)外,其他能级都是二重简并的.

(b) 微扰 H'可以写成

$$H' = -D\mathscr{E}\cos\varphi = -\frac{1}{2}D\mathscr{E}(e^{i\varphi}+e^{-i\varphi}) \tag{2'}$$

易见，在 H_0 表象中[以 $\psi_m^{(0)}$ 为基矢]，H'的矩阵元中不等于 0 的类型为

$$H'_{m,m\pm1} = \langle \psi_m^{(0)} \mid H' \mid \psi_{m\pm1}^{(0)} \rangle = -\frac{1}{2}D\mathscr{E} \tag{4}$$

除 $m=\pm1$ 以外，对于任何能级 $E_m^{(0)}$，在二级微扰近似下，不可能发生简并态 $\psi_m^{(0)}$ 和 $\psi_{-m}^{(0)}$的耦合，亦即

$$H'_{m,-m}=0, \quad H'_{mk}H'_{k,-m}=0 \quad (m\neq\pm1) \tag{5}$$

这正是题 11.3 讨论过的第 **1°**种情形，即可按非简并态微扰论处理的情形. 因此能级为

$$\begin{aligned} E_m &= E_m^{(0)} + H'_{mm} + \sum_k{}' \frac{|H'_{km}|^2}{E_m^{(0)}-E_k^{(0)}} \\ &= E_m^{(0)} + \frac{1}{4}D^2\mathscr{E}^2\left(\frac{1}{E_m^{(0)}-E_{m-1}^{(0)}}+\frac{1}{E_m^{(0)}-E_{m+1}^{(0)}}\right) \\ &= E_m^{(0)} + \frac{1}{4m^2-1}ID^2\mathscr{E}^2/\hbar^2 \quad (m\neq\pm1) \end{aligned} \tag{6}$$

注意，和微扰前相比，基态能级有所降低，各激发态能级则略有升高. 能级简并并未消除.

以下着重讨论 $m=\pm1$ 的情形. 由于

$$H'_{11}=H'_{-1,-1}=H'_{1,-1}=H'_{-1,1}=0 \tag{7}$$

因此在一级近似下，能级修正 $E_m^{(1)}=0$，能级简并依然存在.

在二级微扰近似中，两个简并态之间存在下列耦合方式：

$$\psi_1 \text{-} \psi_0 \text{-} \psi_{-1}$$

本例相当于题 11.3 中 $\alpha=1,\beta=-1,k=0,\pm2$(以下符号 A、B、D 的意义均同题 11.3). 容易算出

$$\sum_k{}' \frac{|H'_{k1}|^2}{E_1^{(0)}-E_k^{(0)}} = \frac{1}{4}D^2\mathscr{E}^2\left(\frac{1}{E_1^{(0)}-E_0^{(0)}}+\frac{1}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}\right) = \frac{1}{3}\frac{ID^2\mathscr{E}^2}{\hbar^2} = A$$

$$\sum_k{}' \frac{|H'_{k,-1}|^2}{E_{-1}^{(0)}-E_k^{(0)}} = \frac{1}{3}\frac{ID^2\mathscr{E}^2}{\hbar^2} = B$$

$$\frac{H'_{-1,0}H'_{01}}{E_1^{(0)}-E_0^{(0)}} = \frac{D^2\mathscr{E}^2}{4E_1^{(0)}} = \frac{1}{2}\frac{ID^2\mathscr{E}^2}{\hbar^2} = (\text{题 11.3 之 } D)$$

这正是题 11.3 讨论过的第 **2°**种情况，因此能级的二级微扰修正为

$$E_1^{(2)}=\left(\frac{1}{3}\pm\frac{1}{2}\right)\frac{ID^2\mathscr{E}^2}{\hbar^2}=\frac{ID^2\mathscr{E}^2}{\hbar^2}\times\begin{cases}5/6\\-1/6\end{cases}\tag{8}$$

即在二级近似中能级 E_1 分裂为二:

$$\begin{aligned}E_{1+}&=E_1^{(0)}+\frac{5}{6}ID^2\mathscr{E}^2/\hbar^2\\E_{1-}&=E_1^{(0)}-\frac{1}{6}ID^2\mathscr{E}^2/\hbar^2\end{aligned}\tag{9}$$

二者"重心"为

$$\frac{1}{2}(E_{1+}+E_{1-})=E_1^{(0)}+\frac{1}{3}ID^2\mathscr{E}^2/\hbar^2\tag{10}$$

这相当于式(6)中 $m=\pm1$ 的情形,当然这并非实际存在的能级.

按照题 11.3 式(8)和(3),容易求出和能级(9)相应的能量本征函数为(准确到一级近似)

$E=E_{1+}$,

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1^{(0)}+\psi_{-1}^{(0)})+\frac{ID\mathscr{E}}{\hbar^2}\left[\frac{\sqrt{2}}{6}(\psi_2^{(0)}+\psi_{-2}^{(0)})-\sqrt{2}\psi_0^{(0)}\right]$$

$E=E_{1-}$,

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1^{(0)}-\psi_{1-}^{(0)})+\frac{ID\mathscr{E}}{\hbar^2}\frac{\sqrt{2}}{6}(\psi_2^{(0)}-\psi_{-2}^{(0)})\tag{11}$$

与能级 $E_m(m\neq\pm1)$ 即式(6)相应的能量本征函数(一级近似),可按照非简并态微扰论公式写出,为

$$\psi_m=\psi_m^{(0)}+\frac{ID\mathscr{E}}{\hbar^2}\left[\frac{1}{2m+1}\psi_{m+1}^{(0)}-\frac{1}{2m-1}\psi_{m-1}^{(0)}\right]\tag{12}$$

讨论 由于 $H'_{mm'}\neq0$ 的条件(选择定则)为

$$\Delta m=m'-m=\pm1$$

属于能级 $E_m^{(0)}$ 的两个简并态 $\psi_m^{(0)}$ 和 $\psi_{-m}^{(0)}$ 至少要在 $2|m|$ 级微扰近似下才能发生耦合,例如 $\psi_2^{(0)}$ 和 $\psi_{-2}^{(0)}$,其耦合方式为

$$\psi_2^{(0)}\text{-}\psi_1^{(0)}\text{-}\psi_0^{(0)}\text{-}\psi_{-1}^{(0)}\text{-}\psi_{-2}^{(0)}$$

因此要在 $2|m|$ 级近似下,能级 E_m 的简并才能得到解除.

11.28 由两个自旋 1/2 粒子组成的体系,置于沿 z 方向的均匀磁场中,与自旋有关的体系 Hamilton 量为

$$H = a\sigma_{1z} + b\sigma_{2z} + c_0\sigma_1 \cdot \sigma_2 \tag{1}$$

其中 a、b 项表示磁场对粒子内禀磁矩的作用，c_0 项代表两粒子的相互作用. 设 $a \neq b$，试就弱磁场（$|c_0| \gg |a|, |b|$）和强磁场（$|a|, |b| \gg |c_0|$）两种情形，用微扰论计算体系的能级（二级近似），并和精确解比较.

解　(a) 弱磁场（$|c_0| \gg |a|, |b|$），将式(1)写成

$$H = c_0\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 + c_1(\sigma_{1z} + \sigma_{2z}) + c_2(\sigma_{1z} - \sigma_{2z}) = H_0 + H' \tag{2}$$

其中

$$c_1 = \frac{1}{2}(a+b), \quad c_2 = \frac{1}{2}(a-b) \tag{3}$$

$$H_0 = c_0\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 + c_1(\sigma_{1z} + \sigma_{2z}) \tag{4}$$

$$H' = c_2(\sigma_{1z} - \sigma_{2z}) \tag{5}$$

由于 $|c_0| \gg |c_2|$，所以 $|H_0| \gg |H'|$，可以视 H' 为微扰.

H_0 的本征态可以取为 $\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2$ 和 $(\sigma_{1z} + \sigma_{2z})$ 的共同本征态，亦即总自旋 $\boldsymbol{S}^2$、S_z 的共同本征态 χ_{SM_S}. 为计算方便，作如下编号：

H_0 的本征态	H_0 的本征值
$\psi_1^{(0)} = \chi_{11} = \alpha(1)\alpha(2)$,	$E_1^{(0)} = c_0 + 2c_1$
$\psi_2^{(0)} = \chi_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)]$,	$E_2^{(0)} = c_0$
$\psi_3^{(0)} = \chi_{1,-1} = \beta(1)\beta(2)$,	$E_3^{(0)} = c_0 - 2c_1$
$\psi_4^{(0)} = \chi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)]$,	$E_4^{(0)} = -3c_0$

(6)

全部能级都是非简并的. 注意，$\psi_1^{(0)}$ 和 $\psi_3^{(0)}$ 已经是 H' 的本征态.

容易算出 H' 的矩阵元中不等于 0 的只有

$$H'_{24} = H'_{42} = 2c_2 \tag{7}$$

因此，准确到二级近似，体系能级如下：

$$\begin{aligned}
E_1 &= E_1^{(0)} = c_0 + 2c_1 \\
E_2 &= E_2^{(0)} + \frac{|H'_{42}|^2}{E_2^{(0)} - E_4^{(0)}} = c_0 + \frac{c_2^2}{c_0} \\
E_3 &= E_3^{(0)} = c_0 - 2c_1 \\
E_4 &= E_4^{(0)} + \frac{|H'_{24}|^2}{E_4^{(0)} - E_2^{(0)}} = -3c_0 - \frac{c_2^2}{c_0}
\end{aligned} \tag{8}$$

注意，H' 引起的能级移动的总和为 0，其原因为矩阵 H' 的迹为 0.

(b) 强磁场（$|a|, |b| \gg |c_0|$）. 式(1)中应视 c_0 项为微扰，即取

$$H_0 = a\sigma_{1z} + b\sigma_{2z}, \quad H' = c_0\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 \tag{9}$$

H_0 的本征态应取为 σ_{1z}的本征态和σ_{2z}的本征态的直积. 规定波函数和能级的编号如下:

$$\begin{array}{ll} H_0 \text{ 的本征态} & H_0 \text{ 的本征值} \\ \psi_1^{(0)} = \alpha(1)\alpha(2), & E_1^{(0)} = a + b \\ \psi_2^{(0)} = \alpha(1)\beta(2), & E_2^{(0)} = a - b \\ \psi_3^{(0)} = \beta(1)\alpha(2), & E_3^{(0)} = -a + b \\ \psi_4^{(0)} = \beta(1)\beta(2), & E_4^{(0)} = -a - b \end{array} \tag{10}$$

其中 $\psi_1^{(0)}$ 和 $\psi_4^{(0)}$ 已经是 H'的本征态,本征值 $H' = c_0$. H'的矩阵元中不等于 0 的是

$$H'_{11} = H'_{44} = c_0, \quad H'_{22} = H'_{33} = -c_0, \quad H'_{23} = H'_{32} = 2c_0$$

因此,准确到二级近似,体系能级为

$$\begin{aligned} E_1 &= E_1^{(0)} + c_0 = a + b + c_0 = 2c_1 + c_0 \\ E_2 &= E_2^{(0)} + H'_{22} + \frac{|H'_{32}|^2}{E_2^{(0)} - E_3^{(0)}} \\ &= a - b - c_0 + \frac{2c_0^2}{a-b} = 2c_2 - c_0 + \frac{c_0^2}{c_2} \\ E_3 &= E_3^{(0)} + H'_{33} + \frac{|H'_{23}|^3}{E_3^{(0)} - E_2^{(0)}} = b - a - c_0 + \frac{2c_0^2}{b-a} \\ &= -2c_2 - c_0 - \frac{c_0^2}{c_2} \\ E_4 &= E_4^{(0)} + c_0 = -(a+b) + c_0 = -2c_1 + c_0 \end{aligned} \tag{11}$$

(c) 精确解(见题 6.45)结果为

$$E = c_0 \pm 2c_1, \quad -c_0 \pm 2\sqrt{c_0^2 + c_2^2} \tag{12}$$

其中前两个能级即为式(8)中的 E_1、E_3 以及式(11)中的 E_1、E_4. 对于弱磁场,$c_0^2 \gg c_2^2$,式(12)中$\sqrt{c_0^2 + c_2^2}$可以近似展开成

$$\sqrt{c_0^2 + c_2^2} \approx |c_0| \left(1 + \frac{c_2^2}{2c_0^2}\right) = |c_0| + \frac{c_2^2}{2|c_0|}$$

这时式(12)中后两个能级的近似展开即为式(8)中的 E_2、E_4. 对于强磁场,$c_2^2 \gg c_0^2$,可将$\sqrt{c_0^2 + c_2^2}$近似展开为

$$\sqrt{c_0^2 + c_2^2} \approx |c_2| \left(1 + \frac{c_0^2}{2c_2^2}\right) = |c_2| + \frac{c_0^2}{2|c_2|}$$

这时式(12)中后两个能级的近似展开即为式(11)中的 E_2、E_3.

11.29　对于氢原子的 s 态($l=0$),原子核(质子)与电子间的超精细相互作用势(和内禀磁矩有关)为

$$H' = -\frac{8\pi}{3}\mu_p \cdot \mu_e \delta(\boldsymbol{r}) \tag{1}$$

其中 $\boldsymbol{r}$ 为核至电子的相对距离,μ_p 和 μ_e 为质子和电子的内禀磁矩,即

$$\mu_e = -2\frac{e}{2m_e c}\boldsymbol{s}_e \tag{2}$$

$$\mu_p = g_p \frac{e}{2m_p c}\boldsymbol{s}_p, \quad g_p = 5.586$$

$\boldsymbol{s}_p$ 和 $\boldsymbol{s}_e$ 为质子和电子的自旋角动量.

试计算由 H'引起的基态能级的“超精细结构”。

解　氢原子的基态轨道波函数为

$$\psi_{100}(r) = (\pi a_0^3)^{-1/2} e^{-r/a_0} \tag{3}$$

a_0 为 Bohr 半径. 如以$\chi(e,p)$表示体系的自旋态,则体系的总状态(基态)可以表示成

$$\Psi_0 = \psi_{100}(r)\,\chi(e,p) \tag{4}$$

以 F 表示质子-电子体系总自旋平方的量子数,即

$$(\boldsymbol{s}_p + \boldsymbol{s}_e)^2 = F(F+1)\hbar^2 \tag{5}$$

对于自旋三重态χ_{11}、χ_{10}、χ_{1-1},$F=1$;对于自旋单态χ_{00},$F=0$. 这 4 种自旋态都是 $\boldsymbol{s}_p \cdot \boldsymbol{s}_e$的本征态,对于三重态,$\boldsymbol{s}_p \cdot \boldsymbol{s}_e = \hbar^2/4$;对于单态,$\boldsymbol{s}_p \cdot \boldsymbol{s}_e = -3\hbar^2/4$. 如以这 4 种自旋态作为自旋空间的基矢,则虽然体系的基态式(4)是 4 重简并的,但 H'已经对角化,H'的平均值就是基态能级的一级微扰修正,即

$$E^{(1)} = \langle \Psi_0 \mid H' \mid \Psi_0 \rangle = \frac{8\pi}{3}\frac{g_p}{2}\frac{m_e}{m_p}\left(\frac{e}{m_e c}\right)^2 \langle \chi \mid \boldsymbol{s}_p \cdot \boldsymbol{s}_e \mid \chi \rangle \int \psi_{100}^2(r)\delta(\boldsymbol{r})\,\mathrm{d}^3x$$

$$= \frac{4\pi}{3} g_p \frac{m_e}{m_p}\left(\frac{e}{m_e c}\right)^2 \psi_{100}^2(0)(\boldsymbol{s}_p \cdot \boldsymbol{s}_e)_{\text{本征值}} \tag{6}$$

其中

$$\psi_{100}^2(0) = \frac{1}{\pi a_0^3} = \frac{1}{\pi}\left(\frac{m_e e^2}{\hbar^2}\right)^3 \tag{7}$$

将 $\boldsymbol{s}_p \cdot \boldsymbol{s}_e$ 的本征值以及式(7)代入式(6),即得

自旋单态：　　$\chi_{00}(e,p), \quad F=0$

$$\boldsymbol{s}_p \cdot \boldsymbol{s}_e = -\frac{3}{4}\hbar^2$$

$$E^{(1)} = -g_p\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^4 \frac{m_e}{m_p} m_e c^2 \tag{8}$$

自旋三重态： $\chi_{1M_s}(e,p)$， $M_s = 1,0,-1$， $F = 1$

$$\boldsymbol{s}_p \cdot \boldsymbol{s}_e = \frac{1}{4}\hbar^2$$

$$E^{(1)} = \frac{1}{3} g_p\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^4 \frac{m_e}{m_p} m_e c^2 \tag{9}$$

亦即，由于质子-电子间的“超精细相互作用”，氢原子的基态能级分裂分二，$F=1$ 者较高，$F=0$ 者较低，裂距为

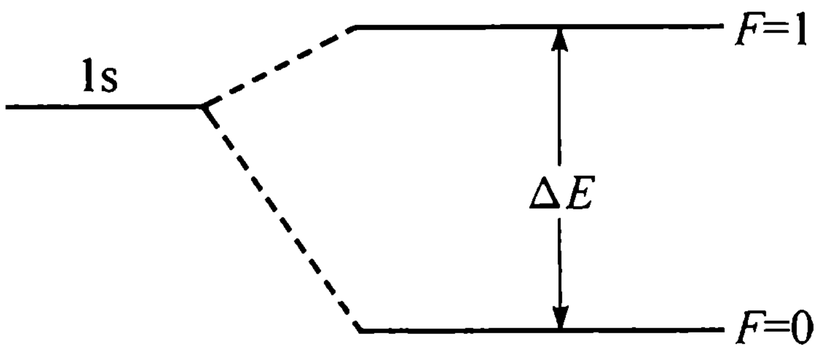


图 11.29

$$\Delta E = E^{(1)}(F=1) - E^{(1)}(F=0)$$
$$= \frac{4}{3} g_p\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^4 \frac{m_e}{m_p} m_e c^2 = 5.88 \times 10^{-6}\,\text{eV} \tag{10}$$

和能级的精细结构相比，超精细结构的数量级约为前者的 10^{-3}. 图 11.29 为超精细结构的示意图.

11.30 将处于超精细结构基态($1s, F=0$)的氢原子置于沿 z 方向的均匀弱磁场 $\boldsymbol{B}$ 中，外场引起的作用势的主要部分为

$$H' = -\boldsymbol{B}\cdot(\mu_e + \mu_p) = -B(\mu_e + \mu_p)_z \tag{1}$$

设由此而造成的能级移动为 $E(B)$，定义原子的磁化率

$$\alpha_B = -\left[\frac{\partial^2 E(B)}{\partial B^2}\right]_{B=0} \tag{2}$$

试用微扰论计算 $E(B)$及 α_B.

解 质子磁矩 μ_p 约为电子磁矩 μ_e 的千分之一，因此式(1)中可以略去 μ_p. 以 1 表示电子，2 表示质子，则 H'可以表示成

$$H' \approx -B(\mu_e)_z = B\mu_B\sigma_{1z} \tag{1'}$$

其中 $\mu_B = e\hbar/2m_e c$ 是 Bohr 磁子.

氢原子的超精细结构基态(参看上题)为

$$\Psi_{1s,F=0} = \psi_{100}(r)\,\chi_{00}(1,2) \tag{3}$$

是非简并的. 能级的一级微扰修正等于 H'的平均值，

$$E^{(1)}_{1s,F=0} = \langle\Psi_{1s,F=0}\mid H'\mid\Psi_{1s,F=0}\rangle = B\mu_B\langle\chi_{00}\mid\sigma_{1z}\mid\chi_{00}\rangle = 0 \tag{4}$$

计算能级的二级微扰修正时，只需考虑近邻的另一超精细结构能级($1s, F=1$)，其他电子能级相距较远(几个电子伏)，对二级微扰修正的贡献可以忽略不计.

能级 $E_{1s,F=1}$ 共有三个简并态，即

$$\Psi_{1s,F=1}=\psi_{100}(r)\,\chi_{1M_s},\quad M_s=1,0,-1$$

其中能使微扰矩阵元 $\langle\Psi_{1s,F=1}|\sigma_{1z}|\Psi_{1s,F=0}\rangle\neq0$ 的是 $\psi_{100}\chi_{10}$，矩阵元为

$$\langle\psi_{100}\,\chi_{10}\mid H'\mid\Psi_{1s,F=0}\rangle=B\mu_B\langle\chi_{10}\mid\sigma_{1z}\mid\chi_{00}\rangle=B\mu_B \tag{5}$$

因此，能级 $E_{1s,F=0}$ 的二级微扰修正为

$$E^{(2)}_{1s,F=0}=\frac{(B\mu_B)^2}{E_{1s,F=0}-E_{1s,F=1}}=E(B) \tag{6}$$

此即外磁场引起的能级移动. 磁化率为

$$\alpha_B=-\left[\frac{\partial^2E(B)}{\partial B^2}\right]_{B=0}=\frac{2(\mu_B)^2}{E_{1s,F=1}-E_{1s,F=0}} \tag{7}$$

上题已经算出

$$E_{1s,F=1}-E_{1s,F=0}=5.88\times10^{-6}\,\mathrm{eV}$$

而

$$\mu_B=\frac{e\hbar}{2m_ec}=5.79\times10^{-9}\,\mathrm{eV/Gs}$$

代入式(7)，即得

$$\alpha_B(1s,F=0)=1.14\times10^{-11}\,\mathrm{eV/(Gs)^2}$$

11.31　考虑两个自旋 1/2 的非全同粒子组成的体系，粒子间作用势为中心势，$V=V(r)$，$r=|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|$. 在质心坐标系中体系的总能量算符可以表示成

$$H_0=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(r) \tag{1}$$

μ 为折合质量. 体系的相对运动轨道角动量算符为

$$\boldsymbol{l}=-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}\times\nabla$$

体系的轨道状态($H,\boldsymbol{l}^2,l_z$ 的共同本征态)记为 $\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)$. 单粒子自旋、总自旋、总角动量及相应本征值记为(取 $\hbar=1$)

$$\boldsymbol{s}_1=\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_1,\quad \boldsymbol{s}_2=\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_2$$

$$\boldsymbol{s}=\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2=\frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2) \tag{2}$$

$$\boldsymbol{s}^2=s(s+1),\quad s=1,0$$

$$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{l}+\boldsymbol{s},\quad \boldsymbol{J}^2=j(j+1),\quad J_z=m_j$$

设两粒子的相互作用能中还包含微弱的张量力成分:

$$H' = \lambda[3(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{r})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \boldsymbol{r})/r^2 - \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2] \tag{3}$$

视 H'为微扰,试计算$^3\mathrm{p}_2$ 及$^3\mathrm{p}_1$ 能级的微扰修正(一级近似).

解 以 ψ_{nsljm_j}表示$(H_0, \boldsymbol{s}^2, \boldsymbol{l}^2, \boldsymbol{J}^2, \boldsymbol{J}_z)$的共同本征态. 6.43 题已经证明 H'和 $\boldsymbol{J}$ 对易,和 $\boldsymbol{s}^2$ 对易,因此 H'作用于ψ_{nsljm_j} 的结果,量子数 s、j、m_j 均不变. 给定 n、s、l、j 后,对于不同的 m_j、H'表现为对角化的常数矩阵(参看题 6.61). 因此,能级的一级微扰修正等于 ψ_{nsljm_j}态下 H'的平均值. 计算时 m_j 可在$(j, j-1, \cdots, -j)$中任取一个便于计算的值,一般可取 $m_j = j$.

(a) 能级 $n^3\mathrm{p}_2$, $s=1$, $l=1$, $j=2$. 取 $m_j = j = 2$,波函数为

$$\psi_{n1122} = R_{nl}(r)\mathrm{Y}_{11}(\theta, \varphi)\alpha(1)\alpha(2) \tag{4}$$

(α,β 为单粒子自旋态,分别代表自旋"向上"及"向下"). 由于 ψ 中轨道变量和自旋变量是分离的,计算$\langle H' \rangle$时各 Pauli 自旋算符均可独自进行平均,结果为

$$\langle \sigma_{1x} \rangle = \langle \sigma_{1y} \rangle = \langle \sigma_{2x} \rangle = \langle \sigma_{2y} \rangle = 0, \quad \langle \sigma_{1z} \rangle = \langle \sigma_{2z} \rangle = 1$$

因此

$$\langle \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 \rangle = 1, \quad \langle (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{r})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \boldsymbol{r})/r^2 \rangle = \langle z^2/r^2 \rangle \tag{5}$$

$$E^{(1)} = \langle H' \rangle = \lambda(3\langle z^2/r^2 \rangle - 1) = -2\lambda/5 \tag{6}$$

其中

$$\langle z^2/r^2 \rangle = \int |\ \mathrm{Y}_{11}\ |^2 \cos^2\theta \mathrm{d}\Omega = \frac{3}{8\pi}\int \sin^2\theta\cos^2\theta \mathrm{d}\Omega = \frac{1}{5} \tag{7}$$

(b) 能级 $n^1\mathrm{p}_1$, $s=0$, $l=j=1$,为自旋单态. 取 $m_j=1$,波函数为

$$\psi_{n0111} = R_{nl}(r)\mathrm{Y}_{11}(\theta, \varphi)\ \chi_{00}(1,2) \tag{8}$$

其中

$$\chi_{00}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)] \tag{9}$$

容易证明(参看题 6.42)

$$H' = \lambda\left[6\left(\boldsymbol{s} \cdot \frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)^2 - 2\boldsymbol{s}^2\right] \quad (\boldsymbol{s} \text{ 为总自旋})$$

对于自旋单态χ_{00}, $\boldsymbol{s}\chi_{00} = 0$,因此,$H'\chi_{00} = 0$,从而$\langle H' \rangle = 0$. 因此能级 $n^1\mathrm{p}_1$ 的一级微扰修正为 0.

讨论 不考虑张量力时,体系能级取决于量子数 n、l,即 $E = E_{nl}$,而和 s、j 无直接关系. 计及张量力后,则能级值和 s 及 j 也有关,亦即发生能级分裂. 另外,由于 H'和 $\boldsymbol{l}^2$ 不对易,在张量力作用下,l 不同的状态将发生混合(其后果将体现在波

函数的一级修正和能级的二级修正中). 由于 H' 为偶宇称，这种混合只能发生在 l 相差偶数的状态间. 典型的例子为氘核(n-p 结合态)，由于张量力的影响，氘核的基态并非纯粹的 S 态($l=0$)，还含有约 4% 的 D 态($l=2$).

11.32　自旋 1/2 的三维各向同性谐振子，处于基态. 设此粒子受到微扰 $H'=\lambda\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}$ 作用($\boldsymbol{\sigma}$ 是 Pauli 自旋算符)，求能级修正(二级近似).

解　能量算符、能级和波函数的零级近似为

$$H_0=\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2+\frac{1}{2}m\omega^2r^2 \tag{1}$$

$$E_n^{(0)}=\left(n+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega \tag{2}$$

$$n=n_1+n_2+n_3,\quad n_1,n_2,n_3=0,1,2,3,\cdots$$

$$\Psi_n^{(0)}=\psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)\psi_{n_3}(z)\alpha,\quad \psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)\psi_{n_3}(z)\beta \tag{3}$$

其中 $\psi_{n_1}(x)$ 为一维谐振子能量本征函数. α、β 为 σ_z 的本征函数，在 σ_z 表象中

$$\alpha=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix},\quad \beta=\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix} \tag{4}$$

微扰作用前，基态波函数为

$$\Psi_{0\alpha}^{(0)}=\psi_0(x)\psi_0(y)\psi_0(z)\alpha,\quad \Psi_{0\beta}^{(0)}=\psi_0(x)\psi_0(y)\psi_0(z)\beta \tag{5}$$

二者均为偶宇称. 微扰算符可以表示成

$$H'=\lambda\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}=\lambda(\sigma_x x+\sigma_y y+\sigma_z z) \tag{6}$$

H' 为奇宇称. 在两个基态波函数之间，H' 的矩阵元(包括平均值)显然全部为 0，因此基态能级的一级微扰修正等于 0.

H' 与总角动量算符

$$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{l}+\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$$

对易(参看题 6.33)，因此 H' 作用的结果不改变量子数 j 和 m_j 的值. $\Psi_{0\alpha}^{(0)}$ 和 $\Psi_{0\beta}^{(0)}$ 分别属于

$$j=\frac{1}{2},\quad m_j=\pm\frac{1}{2}$$

在任何级微扰近似中不可能因 H' 的作用而使它们混合. 因此，本题可以按非简并态微扰论处理. 从问题的对称性可知，基态的两种自旋方向(α，“向上”；β，“向下”)显然给出同样的能量修正值.

H' 为 $\boldsymbol{r}$ 的线性齐次函数，作用于基态的结果，量子数 n 将变成 1，即变成第一激发态，能量差为

$$E_0^{(0)} - E_1^{(0)} = -\hbar\omega$$

按照微扰论公式,基态能级的二级微扰修正为

$$E_0^{(2)} = \sum_n{}' \frac{1}{E_0^{(0)} - E_n^{(0)}} |\langle n | H' | 0\rangle|^2 \tag{7}$$

由于 $n\neq 1$ 时,$\langle n|H'|0\rangle=0$,所以上式可以写成

$$E_0^{(2)} = -\frac{1}{\hbar\omega}\sum_n \langle 0 | H' | n\rangle\langle n | H' | 0\rangle$$

利用公式

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$$

即得

$$E_0^{(2)} = -\frac{1}{\hbar\omega}\langle 0 | H'^2 | 0\rangle = -\frac{\lambda^2}{\hbar\omega}\langle 0 | (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})^2 | 0\rangle$$

$$= -\frac{\lambda^2}{\hbar\omega}\langle 0 | r^2 | 0\rangle = -\frac{3\lambda^2}{2m\omega^2} \tag{8}$$

计算中利用了$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})^2=r^2$ 以及位力定理的结果

$$\frac{1}{2}m\omega^2\langle 0 | r^2 | 0\rangle = \frac{1}{2}E_0^{(0)} = \frac{3}{4}\hbar\omega \tag{9}$$

结论:基态能级的微扰修正(二级近似)为

$$\Delta E = E_0^{(2)} = -\frac{3\lambda^2}{2m\omega^2}$$

$E_0^{(2)}$ 也可以换一种方法计算出来. 如取基态为

$$|0\rangle \Rightarrow \Psi_{0\alpha}^{(0)} \Rightarrow |000\alpha\rangle$$

式(7)中不等于 0 的矩阵元共有三个:

$$\langle 001\alpha | H' | 000\alpha\rangle = \langle 100\beta | H' | 000\alpha\rangle = \lambda\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

$$\langle 010\beta | H' | 000\alpha\rangle = \mathrm{i}\lambda\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

三者绝对值平方之和等于 $3\lambda^2\hbar/(2m\omega)$,代入式(7),仍得

$$E_0^{(2)} = -\frac{3\lambda^2}{2m\omega^2} \tag{8}$$

11.33 苯的"自由电子模型"把电子看成在一个环形势场中运动,并受到具有 C_6 对称性的微扰作用.

(a) 在不计及微扰的作用时,可以看作电子是在半径为 R 的环上自由运动,试写出能量本征值与本征函数;

(b) 设微扰势可以表示成

$$H' = V(\varphi) = -V_0\cos 6\varphi \tag{1}$$

在一级微扰下计算能量及相应的本征函数.

解　(a) 自由电子的 Hamilton 算符为

$$H_0 = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$$

取∇^2的球坐标(r,θ,φ)表示,并取 $r=R,\theta=\pi/2$,即得

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2mR^2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varphi^2} \tag{2}$$

这就是在环上自由运动粒子的能量算符,其本征函数和本征值为

$$\psi_n^{(0)}(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}n\varphi}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots \tag{3}$$

$$E_n^{(0)} = \frac{n^2\hbar^2}{2mR^2} \tag{4}$$

除基态($n=0$)外,所有能级都是二重简并的.

(b) 微扰算符可以写成

$$H' = -V_0\cos 6\varphi = -\frac{V_0}{2}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}6\varphi} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}6\varphi}) \tag{1'}$$

对于任何 n,显然

$$H'_{nn} = \langle \psi_n^{(0)} \mid H' \mid \psi_n^{(0)} \rangle = 0 \tag{5}$$

在一级微扰作用下,属于同一个能级的两个简并态能够发生耦合的只有 $n=\pm 3$,即

$$H'_{-3,3} = H'_{3,-3} = -\frac{V_0}{2} \tag{6}$$

因此,在$\{\psi_3^{(0)},\psi_{-3}^{(0)}\}$子空间,$H'$的矩阵表示为

$$H' = -\frac{V_0}{2}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{7}$$

能级的一级微扰修正为(参看题 11.2)

$$E_3^{(1)} = \pm\frac{V_0}{2} \tag{8}$$

相应的零级波函数为

$$\psi^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_3^{(0)}\mp\psi_{-3}^{(0)}] \tag{9}$$

其他能级($n\neq\pm3$)的一级微扰修正为0,在一级微扰下能级不分裂,简并没有消除.

11.34 氢原子处于基态(1s).设受到微扰作用,微扰算符为

$$H'=\phi(r)\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\phi(r) \tag{1}$$

$\phi(r)$为实函数,在$r\ll b$处有显著的值,$r>b$处迅速衰减而趋于0,$b\ll a_0$(Bohr半径),$\boldsymbol{\sigma}$为Pauli自旋算符.试证明,微扰后的基态并非纯粹的1s态,而是1s态中混杂着少量2p态.试给出一级微扰近似下基态波函数的公式.

解 以$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{l}+\boldsymbol{s}$表示电子的总角动量.容易证明

$$[\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p},\boldsymbol{l}]=-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{p}$$

$$[\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p},\boldsymbol{s}]=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{p} \tag{2}$$

$$[\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p},\boldsymbol{J}]=0 \tag{3}$$

因此,$\boldsymbol{H}'$和$\boldsymbol{J}$对易.如取微扰作用前的能量本征函数为$(H_0,\boldsymbol{l}^2,\boldsymbol{J}^2,J_z)$的共同本征函数

$$\psi_{nljm_j}=R_{nl}(r)\phi_{ljm_j}(\theta,\varphi,s_z) \tag{4}$$

由H'作用于ψ_{nljm_j}的结果,j和m_j不变.又因H'为奇宇称,作用后量子数l将改变±1.所以,微扰作用后的基态将是1s态和各np态的混合.又因H'起作用的有效范围是$r\leqslant b$,而$b\ll a_0$,各p态中以n最小的2p态贡献最大,其他np态的贡献可以忽略.因此一级近似下基态波函数为

$$\psi_0\approx\psi_{1s}+\frac{1}{E_1-E_2}\langle 2\mathrm{p}\mid H'\mid 1\mathrm{s}\rangle\psi_{2p} \tag{5}$$

其中

$$\psi_{1s}=\psi_{10\frac{1}{2}m_j},\quad \psi_{2p}=\psi_{21\frac{1}{2}m_j},\quad m_j=\pm\frac{1}{2}$$

以$m_j=\frac{1}{2}$为例,

$$\psi_{1s}=R_{10}\phi_{0\frac{1}{2}\frac{1}{2}}=R_{10}(r)\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix} \tag{6}$$

$$\psi_{2p}=R_{21}\phi_{1\frac{1}{2}\frac{1}{2}}=R_{21}(r)\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{bmatrix}-\mathrm{Y}_{10}\\\sqrt{2}\mathrm{Y}_{11}\end{bmatrix} \tag{7}$$

计算$\langle 2\mathrm{p}|H'|1\mathrm{s}\rangle$时,可以利用公式

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\psi_{1s}=-\mathrm{i}\hbar\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)\frac{\mathrm{d}R_{10}}{\mathrm{d}r}\phi_{0\frac{1}{2}\frac{1}{2}}=-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}R_{10}}{\mathrm{d}r}\sigma_r\phi_{0\frac{1}{2}\frac{1}{2}}=\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}R_{10}}{\mathrm{d}r}\phi_{1\frac{1}{2}\frac{1}{2}}\tag{8}$$

(参看题 6.33),因此

$$\langle 2\mathrm{p}\mid\phi(r)\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\mid 1\mathrm{s}\rangle=\mathrm{i}\hbar\int_0^\infty\phi(r)R_{21}\frac{\mathrm{d}R_{10}}{\mathrm{d}r}r^2\mathrm{d}r=\mathrm{i}A\tag{9}$$

另外,

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\phi(r)\psi_{1s}=-\mathrm{i}\hbar\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}[\phi(r)R_{10}(r)]\phi_{0\frac{1}{2}\frac{1}{2}}$$

$$=\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}[\phi(r)R_{10}(r)]\phi_{1\frac{1}{2}\frac{1}{2}}\tag{10}$$

$$\langle 2\mathrm{p}\mid\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\phi(r)\mid 1\mathrm{s}\rangle=\mathrm{i}\hbar\int_0^\infty R_{21}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}[\phi(r)R_{10}(r)]r^2\mathrm{d}r=\mathrm{i}B\tag{11}$$

因此

$$\langle 2\mathrm{p}\mid H'\mid 1\mathrm{s}\rangle=\mathrm{i}(A+B)\tag{12}$$

对于 $m_j=-\frac{1}{2}$,结果相同.

将式(12)代入式(5),即得基态波函数公式

$$\boxed{\psi_0\approx\psi_{1s}+\frac{\mathrm{i}(A+B)}{E_1-E_2}\psi_{2p}}\tag{13}$$

其中 E_1、E_2 为氢原子能级,A 和 B 可按式(9)和(11)算出. 其中 2p 态取 $j=\frac{1}{2}$,1s 态和 2p 态均取 $m_j=\frac{1}{2}$或 $m_j=-\frac{1}{2}$.

第十二章　变　分　法

12.1　设体系的 Hamilton 量 H 为已知. 设 ψ 为基态试探波函数，ψ_1 为真正的基态波函数，二者都是归一化的. 令

$$\varepsilon = 1 - |\langle \psi_1 | \psi | \rangle^2 \tag{1}$$

ε 表示 ψ 偏离 ψ_1 的程度. 令 $E = \langle \psi | H | \psi \rangle$，证明

$$\boxed{E - E_1 \geqslant (E_2 - E_1)\varepsilon} \tag{2}$$

E_1 和 E_2 分别表示 H 的基态和第一激发态的能量.

证　以 ψ_n 表示 H 的归一化本征函数，令

$$\psi = \sum_n C_n \psi_n \tag{3}$$

则

$$\varepsilon = 1 - |\langle \psi_1 | \psi \rangle|^2 = 1 - C_1^* C_1 \tag{4}$$

而

$$\begin{aligned} E - E_1 &= \langle \psi | (H - E_1) | \psi \rangle = \sum_n C_n^* C_n (E_n - E_1) \\ &= C_2^* C_2 (E_2 - E_1) + C_3^* C_3 (E_3 - E_1) + \cdots \\ &\geqslant (E_2 - E_1)(1 - C_1^* C_1) \end{aligned}$$

此即式(2).

讨论　如从宇称性等方面可以断定 ψ 中没有 ψ_2 的成分，即 $\langle \psi_2 | \psi \rangle = 0$，亦即 $C_2 = 0$，则式(2)变成

$$E - E_1 \geqslant (E_3 - E_1)\varepsilon \tag{5}$$

如可以断定 ψ 中既没有 ψ_2，也没有 ψ_3 的成分，即 $C_2 = C_3 = 0$，则

$$E - E_1 \geqslant (E_4 - E_1)\varepsilon$$

依此类推.

12.2　粒子在无限深势阱 $(-a < x < a)$ 中运动. 试用多项式近似结合变分法求基态能量和波函数，并和精确解比较.

解　任何能量本征函数，均需满足边界条件

$$\psi(x)=0,\quad |x|\geqslant a \tag{1}$$

精确的基态波函数和能级为

$$\psi_1(x)=\frac{1}{\sqrt{a}}\cos\frac{\pi x}{2a},\quad -a<x<a \tag{2}$$

$$E_1=\frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2}=1.233701\frac{\hbar^2}{ma^2} \tag{3}$$

如将基态波函数近似地用多项式表示，考虑到基态是偶宇称，可取

$$\psi=C_0+C_2\left(\frac{x}{a}\right)^2+C_4\left(\frac{x}{a}\right)^4+\cdots,\quad |x|<a \tag{4}$$

如只取前二项，为了满足边界条件，必须取 $C_2=-C_0$，归一化后，即得

$$\psi=C_0\left[1-\frac{x^2}{a^2}\right]=\sqrt{\frac{15}{16a}}\left[1-\frac{x^2}{a^2}\right] \tag{5}$$

ψ 已经完全被限定，没有任何选择余地，能量平均值为

$$E=-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-a}^{a}\psi\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}\mathrm{d}x=\frac{5}{4}\frac{\hbar^2}{ma^2} \tag{6}$$

和精确基态能级的比值为

$$E/E_1=10/\pi^2=1.0132 \tag{7}$$

式(5)和基态波函数的偏离度为

$$\varepsilon=1-|\langle\psi_1|\psi\rangle|^2=1-\frac{960}{\pi^6}=1.445\times10^{-3} \tag{8}$$

作为基态波函数的更好的近似，可取式(4)中前三项，为了满足边界条件，必须取 $C_4=-(C_0+C_2)$，因此试探波函数可以表成

$$\psi(\lambda,x)=N\left[1+\lambda\left(\frac{x}{a}\right)^2-(1+\lambda)\left(\frac{x}{a}\right)^4\right],\quad |x|<a \tag{9}$$

其中 N 为归一化常数，λ 为变分参数，利用归一化条件

$$\langle\psi|\psi\rangle=\int_{-a}^{a}\psi^2\mathrm{d}x=1$$

容易求得

$$N^2a=\frac{315}{16(\lambda^2+8\lambda+28)} \tag{10}$$

由公式

$$E=-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-a}^{a}\psi\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}\mathrm{d}x$$

求得

$$E(\lambda)=\frac{3}{4}\frac{11\lambda^2+36\lambda+60}{\lambda^2+8\lambda+28}\frac{\hbar^2}{ma^2} \tag{11}$$

λ 的最佳值由极小值条件 $\partial E(\lambda)/\partial\lambda=0$ 决定,求得两个根

$$\lambda_1=-1.2207500,\quad \lambda_2=-8.317712$$

而

$$E(\lambda_1)=1.233719\hbar^2/(ma^2)=1.0000147E_1 \tag{12}$$

$$E(\lambda_2)=12.7663\hbar^2/(ma^2) \tag{13}$$

$E(\lambda_1)$和基态能级的精确值几乎完全一样,$E(\lambda_2)$则接近于第二激发能级 E_3.

$\psi(\lambda_1,x)$和基态的偏离度为

$$\varepsilon=1-|\langle\psi_1\mid\psi\rangle|^2=6.8\times10^{-7} \tag{14}$$

而由不等式(参看上题)

$$E(\lambda_1)-E_1>(E_3-E_1)\varepsilon$$

则给出 $\varepsilon<1.8\times10^{-6}$,和式(14)一致.

12.3 同上题,求第一激发态波函数的多项式近似,及能级近似值,和精确解比较.

解 第一激发态波函数和能级为

$$\psi_2(x)=\frac{1}{\sqrt{a}}\sin\frac{\pi x}{a},\quad -a<x<a \tag{1}$$

$$E_2=\frac{\pi^2}{2}\frac{\hbar^2}{ma^2}=4.934802\frac{\hbar^2}{ma^2} \tag{2}$$

边界条件为

$$\psi(x)=0,\quad |x|\geqslant a \tag{3}$$

ψ_2 为奇宇称,因此其多项式近似应取

$$\psi=C_1\frac{x}{a}+C_3\left(\frac{x}{a}\right)^3+C_5\left(\frac{x}{a}\right)^5+\cdots,\quad |x|<a$$

如取前三项,并满足边界条件,则应取

$$C_5=-(C_1+C_3)$$

因此

$$\psi=N\left[\frac{x}{a}+\lambda\left(\frac{x}{a}\right)^3-(1+\lambda)\left(\frac{x}{a}\right)^5\right],\quad -a<x<a \tag{4}$$

其中 λ 为变分参数，N 为归一化常数. 利用归一化条件可得

$$N^2 a = \frac{3465}{16(5\lambda^2 + 32\lambda + 60)} \tag{5}$$

由平均值公式

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-a}^{a} \psi \frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}\mathrm{d}x$$

可得

$$E(\lambda) = \frac{1}{4}\frac{253\lambda^2 + 1100\lambda + 1540}{5\lambda^2 + 32\lambda + 60}\frac{\hbar^2}{ma^2} \tag{6}$$

由极值条件 $\partial E(\lambda)/\partial\lambda = 0$，求得 λ 的最佳值为

$$\lambda = -1.5169755$$

代入式(6)，即得

$$E = 4.937694\frac{\hbar^2}{ma^2} = 1.000586E_2 \tag{7}$$

ψ 偏离 ψ_2 的程度为

$$\varepsilon = 1 - |\langle\psi_2 | \psi\rangle|^2 = 0.00269 \tag{8}$$

而由不等式(参看 12.1 题，注意 ψ 和 ψ_1，ψ_3 正交)

$$E - E_2 > (E_4 - E_2)\varepsilon$$

则给出 $\varepsilon < 0.019$，这表明 ψ 中所含高激发态成分较多.

试探波函数 ψ 和第一激发态 ψ_2 的差别主要在于其极值位置不完全一致. 对于 ψ_2，极值位置为 $x = \pm\frac{a}{2}$，而对于 ψ，由极值条件 $\mathrm{d}\psi/\mathrm{d}x = 0$ 求得极值位置为

$$x = \pm 0.5073a$$

12.4　粒子在无限深势阱($-a < x < a$)中运动，取试探波函数(作为基态波函数的近似)为

$$\psi(x) = \begin{cases} N(a^2 - x^2)(a^2 - \lambda x^2), & |x| < a \\ 0, & |x| \geqslant a \end{cases} \tag{1}$$

试求能级近似值.

解　式(1)中 λ 为变分参数，N 为归一化常数. 归一化条件为

$$\int_{-a}^{a}\psi^2\mathrm{d}x = 1$$

容易求出

$$N^2 = \frac{315}{16(\lambda^2 - 6\lambda + 21)a} \tag{2}$$

由平均值公式

$$E=-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-a}^{a}\psi\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}\mathrm{d}x \tag{3}$$

求得

$$E(\lambda)=\frac{3}{4}\frac{11\lambda^2-14\lambda+35}{\lambda^2-6\lambda+21}\frac{\hbar^2}{ma^2} \tag{4}$$

由极值条件 $\partial E(\lambda)/\partial\lambda=0$,求得 λ 的最佳值为

$$\lambda_1=0.2207500,\quad \lambda_2=7.317712$$

代入式(4)即得

$$E(\lambda_1)=1.233719\frac{\hbar^2}{ma^2}=1.000015E_1 \tag{5}$$

$$E(\lambda_2)=12.76628\frac{\hbar^2}{ma^2} \tag{6}$$

$E(\lambda_1)$和基态能级很接近,$E(\lambda_2)$则比 E_3 稍大.

本题和 12.2 题等价,试探波函数的表面形式不同而已,实质上两题没有任何差异.

12.5 转动惯量为 I,电偶极矩为 D 的平面转子,置于均匀电场$\mathscr{E}$(沿 x 方向)中,总能量算符成为

$$H=-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varphi^2}-D\mathscr{E}\cos\varphi \tag{1}$$

φ 为旋转角(从 x 轴算起). 如电场很强,$D\mathscr{E}\gg\hbar^2/I$,求基态能量的近似值.

解一 能量本征方程为

$$H\psi=-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varphi^2}\psi-D\mathscr{E}\cos\varphi\cdot\psi=E\psi \tag{2}$$

在强电场作用下,转子(基态)只能在 $\varphi=0$ 附近作小振动,因此可将 $\cos\varphi$ 作近似展开:

$$\cos\varphi\approx 1-\frac{1}{2}\varphi^2 \tag{3}$$

代入本征方程,成为

$$-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varphi^2}\psi+\frac{1}{2}D\mathscr{E}\varphi^2\psi=(E+D\mathscr{E})\psi \tag{4}$$

这方程类似于一维谐振子的能量本征方程,后者为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi=E\psi \tag{5}$$

式(4)、(5)有如下对应关系：

$$x\text{-}\varphi,\quad m\text{-}I,\quad m\omega^2\text{-}D\mathscr{E},\quad E\text{-}(E+D\mathscr{E}) \tag{6}$$

谐振子的基态波函数和能级为

$$\psi_0(x)=\mathrm{N}\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2/\lambda},\quad \alpha^2=m\omega/\hbar$$

$$E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega$$

由对应关系式(6)易见，谐振子的 ω^2 对应于转子的 $D\mathscr{E}/I$，谐振子的 α^2 对应于转子的 $\sqrt{ID\mathscr{E}}/\hbar$，因此转子的基态波函数和能级为

$$\psi_0(\varphi)\approx\mathrm{N}\mathrm{e}^{-\beta^2\varphi^2/2},\quad \beta^2=\sqrt{ID\mathscr{E}}/\hbar \tag{7}$$

$$E_0\approx\frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{D\mathscr{E}}{I}}-D\mathscr{E} \tag{8}$$

由于 $D\mathscr{E}\gg\hbar^2/I$，所以 $\beta^2\gg1$，仅当 $|\varphi|\ll1$ 波函数才有显著的值，即转子主要出现在 $\varphi=0$(电场的方向)附近.

解二　用变分法，取试探波函数(归一化的)为

$$\psi(\lambda,\varphi)=\frac{\sqrt{\lambda}}{\pi^{1/4}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\lambda^2\varphi^2},\quad -\pi\leqslant\varphi\leqslant\pi \tag{9}$$

λ 为变分参数. 从量级看，$\lambda^2\sim\sqrt{ID\mathscr{E}}/\hbar\gg1$，动能平均值为

$$\begin{aligned}\langle T\rangle&=-\frac{\hbar^2}{2I}\int_{-\pi}^{\pi}\psi\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varphi^2}\psi\,\mathrm{d}\varphi\\&=-\frac{\hbar^2}{2I}\int_{-\pi}^{\pi}(\lambda^4\varphi^2-\lambda^2)\psi^2\,\mathrm{d}\varphi\\&=\frac{\hbar^2\lambda^2}{2I}-\frac{\hbar^2\lambda^5}{2I\sqrt{\pi}}\int_{-\pi}^{\pi}\varphi^2\mathrm{e}^{-\lambda^2\varphi^2}\,\mathrm{d}\varphi\end{aligned} \tag{10}$$

其中

$$\int_{-\pi}^{\pi}\varphi^2\mathrm{e}^{-\lambda^2\varphi^2}\,\mathrm{d}\varphi\approx\int_{-\infty}^{\infty}\varphi^2\mathrm{e}^{-\lambda^2\varphi^2}\,\mathrm{d}\varphi=\frac{\sqrt{\pi}}{2\lambda^3} \tag{11}$$

因此

$$\langle T\rangle\approx\frac{\hbar^2\lambda^2}{4I} \tag{12}$$

势能平均值为

$$\langle V\rangle = -D\mathscr{E}\langle\cos\varphi\rangle = -D\mathscr{E}\frac{\lambda}{\sqrt{\pi}}\int_{-\pi}^{\pi}\cos\varphi\,\mathrm{e}^{-\lambda^2\varphi^2}\,\mathrm{d}\varphi$$

$$\approx -D\mathscr{E}\frac{\lambda}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\cos\varphi\,\mathrm{e}^{-\lambda^2\varphi^2}\,\mathrm{d}\varphi$$

$$= -D\mathscr{E}\mathrm{e}^{-1/4\lambda^2} \approx -D\mathscr{E}\left(1-\frac{1}{4\lambda^2}\right) \tag{13}$$

合起来,就得到

$$E(\lambda) = \langle H\rangle = \langle T+V\rangle = \frac{\hbar^2\lambda^2}{4I} + \frac{D\mathscr{E}}{4\lambda^2} - D\mathscr{E} \tag{14}$$

λ 的最佳值由极值条件 $\partial E(\lambda)/\partial\lambda=0$ 决定,求得

$$\lambda^2 = \sqrt{ID\mathscr{E}}/\hbar \tag{15}$$

代入式(14),即得 $E(\lambda)$之极小值

$$E = -D\mathscr{E} + \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{D\mathscr{E}}{I}} \tag{16}$$

以及

$$\psi = \frac{\sqrt{\lambda}}{\pi^{1/4}}\mathrm{e}^{-\sqrt{ID\mathscr{E}}\varphi^2/2\hbar} \tag{17}$$

这些结果均和解一所得结果式(7)、(8)一致.

12.6 一维谐振子,取自然单位($\hbar=m=\omega=1$),能量算符可以表示成

$$H = -\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}x^2 \tag{1}$$

取基态试探波函数为

$$\psi = \begin{cases} N\left(1-\dfrac{|x|}{a}\right), & |x|<a \\ 0, & |x|>a \end{cases} \tag{2}$$

其中 a 为变分参数,N 为归一化常数. 求基态能级的上限,和精确值 $E_0=1/2$ 比较.

解 由归一化条件$\langle\psi|\psi\rangle=1$ 可得

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^2\,\mathrm{d}x = N^2\int_{-a}^{a}\left(1-\frac{|x|}{a}\right)^2\mathrm{d}x$$

$$= 2N^2a\int_0^1(1-\xi)^2\,\mathrm{d}\xi = \frac{2}{3}N^2a = 1$$

所以

$$N^2 = 3/2a \tag{3}$$

势能平均值为

$$\langle V\rangle = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} x^2\psi^2\,\mathrm{d}x = N^2a^3\int_0^1 \xi^2(1-\xi)^2\,\mathrm{d}\xi$$

$$= N^2a^3/30 = a^2/20 \tag{4}$$

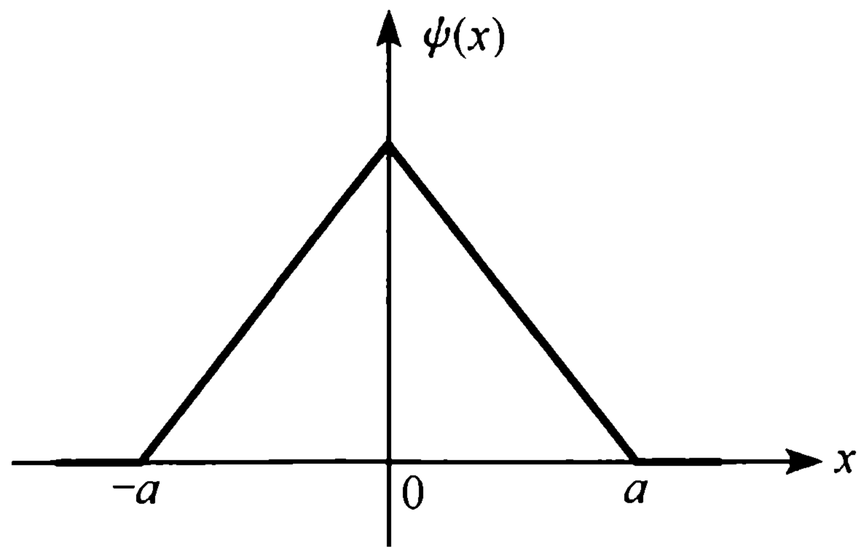


图 12.6

动能平均值为

$$\langle T\rangle = -\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\psi\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}\mathrm{d}x \tag{5}$$

由式(2)易得

$$\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x} = \begin{cases} 0, & |x|>a \\ N/a, & -a<x<0 \\ -N/a & 0<x<a \end{cases} \tag{6}$$

因此

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = \frac{N}{a}\delta(x+a) - \frac{2N}{a}\delta(x) + \frac{N}{a}\delta(x-a) \tag{7}$$

代入式(5),即得

$$\langle T\rangle = \frac{N}{a}\psi(0) = \frac{N^2}{a} = \frac{3}{2a^2} \tag{8}$$

$\langle T\rangle$也可以按下式计算:

$$\langle T\rangle = \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\left|\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right|^2\mathrm{d}x = \frac{1}{2}\int_{-a}^{a}\left(\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right)^2\mathrm{d}x$$

$$= \frac{1}{2}\left(\frac{N}{2}\right)^2\int_{-a}^{a}\mathrm{d}x = \frac{N^2}{a} = \frac{3}{2a^2} \tag{8'}$$

式(4)加式(8),即得

$$E(a) = \langle T+V\rangle = \frac{3}{2a^2} + \frac{a^2}{20} \tag{9}$$

由极值条件 $\partial E/\partial a=0$,求得 a 的最佳值为

$$a = (30)^{1/4} = 2.3403 \tag{10}$$

代入式(9)即得

$$E=\frac{3}{2\sqrt{30}}+\frac{\sqrt{30}}{20}=0.5477 \tag{11}$$

这个结果作为基态能级($E_0=0.5$)的上限,不太理想,其原因是试探波函数在 $x=0$ 附近变化太快,而真正的基态波函数(Gauss 型)在 $x=0$ 附近变化平缓.

12.7 质量为 m 的粒子在势场 $V(x)=kx^4(k>0)$ 中运动. 用数值积分法求得基态能级 $E_0=1.060(\hbar^2/2m)^{2/3}k^{1/3}$. (a)取试探波函数

$$\psi(\lambda,x)=\frac{\sqrt{\lambda}}{\pi^{1/4}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\lambda^2x^2} \tag{1}$$

求基态能级的上限;(b)对结果加以改进.

解 (a)以式(1)作为基态的试探波函数,可得

$$\langle T\rangle=\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right)^2\mathrm{d}x=\frac{\hbar^2\lambda^2}{4m} \tag{2}$$

$$\langle V\rangle=k\int_{-\infty}^{\infty}x^4\psi^2\mathrm{d}x=\frac{3k}{4\lambda^4} \tag{3}$$

相加,即得

$$E(\lambda)=\langle T+V\rangle=\frac{\hbar^2\lambda^2}{4m}+\frac{3k}{4\lambda^4} \tag{4}$$

由极值条件 $\partial E/\partial\lambda=0$ 求得 λ^2 的最佳值为

$$\lambda^2=(6mk/\hbar^2)^{1/3} \tag{5}$$

代入式(4),即得

$$E=\frac{3}{4}3^{1/3}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{2/3}k^{1/3}=1.0817\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{2/3}k^{1/3} \tag{6}$$

比基态能级的精确值高 2%.

(b)作为一种改进,可在试探波函数中添一个多项式因子,例如取

$$\psi(\lambda,\nu,x)=N[1+\nu(\lambda x)^2]\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\lambda^2x^2} \tag{7}$$

λ、ν 为变分参数,N 为归一化常数. 由归一化条件

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^2\mathrm{d}x=1$$

求得

$$N^2=\lambda\Big/\left[\left(1+\nu+\frac{3}{4}\nu^2\right)\sqrt{\pi}\right] \tag{8}$$

经过计算，可得

$$\langle T\rangle = \frac{\lambda^2\hbar^2 C(\nu)}{4mB(\nu)} \tag{9}$$

$$\langle V\rangle = \frac{3kA(\nu)}{4\lambda^4 B(\nu)} \tag{10}$$

$$E(\lambda,\nu) = \langle T+V\rangle = \frac{\lambda^2\hbar^2 C(\nu)}{4mB(\nu)} + \frac{3kA(\nu)}{4\lambda^4 B(\nu)} \tag{11}$$

其中

$$A(\nu) = 1 + 5\nu + \frac{35}{4}\nu^2$$

$$B(\nu) = 1 + \nu + \frac{3}{4}\nu^2$$

$$C(\nu) = 1 - \nu + \frac{7}{4}\nu^2 \tag{12}$$

由极值条件 $\partial E/\partial\lambda = 0$ 求得 λ 和 ν 的最佳配合为

$$\lambda^2 = \left(\frac{6mk}{\hbar^2}\right)^{1/3}\left[\frac{A(\nu)}{C(\nu)}\right]^{1/3} \tag{13}$$

代入式(11)即得

$$E(\nu) = \frac{3}{4}3^{1/3}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{2/3} k^{1/3}\,\frac{[A(\nu)]^{1/3}[C(\nu)]^{2/3}}{B(\nu)} \tag{14}$$

注意，如取 $\nu=0$，则 $A=B=C=1$，式(14)就是式(6).

经过数值计算，当 $\nu=0.28$，式(14)有极小值，即

$$\nu = 0.28,\quad A = 3.0860,\quad B = 1.3388,\quad C = 0.8572$$

$$A^{1/3}C^{2/3}/B = 0.98131$$

$$\lambda^2 = 1.5326(6mk/\hbar^2)^{1/3}$$

$$E = \frac{3}{4}3^{1/3}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{2/3} k^{1/3} \times 0.98131$$

$$= 1.0615\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{2/3} k^{1/3} \tag{15}$$

比基态能级的精确值仅高 0.14%.

12.8　粒子在势场

$$V(x) = g\,|\,x\,|,\quad g>0 \tag{1}$$

中运动，试用变分法求基态能级的上限，并和精确值比较，试探波函数取下列几种类型：

(a) $\psi(\lambda,x)=\sqrt{\lambda}\mathrm{e}^{-\lambda|x|}$

(b) $\psi(\alpha,x)=N\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$

(c) $$\psi(a,x)=\begin{cases}N\left(1-\dfrac{|x|}{a}\right), & |x|<a\\ 0, & |x|\geqslant a\end{cases}$$

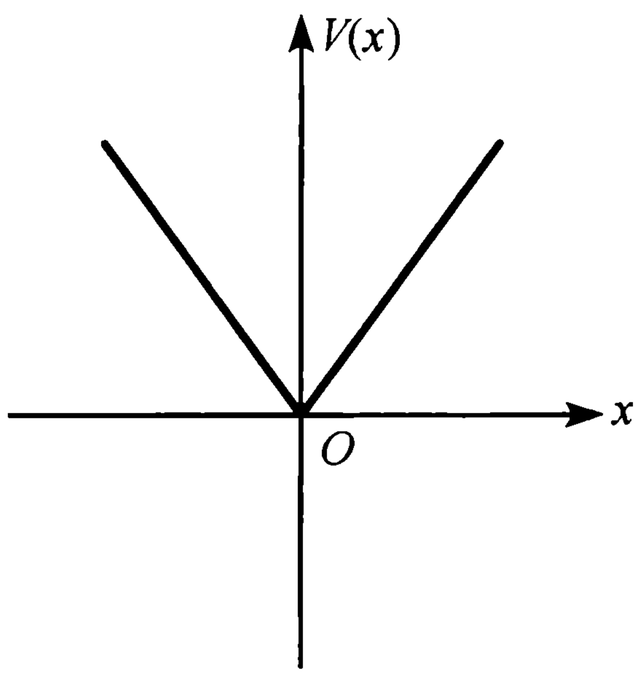


图 12.8

解 基态应该是偶宇称,三种试探波函数显然都符合这个条件.下面分别进行计算.

(a) 取 $\psi(\lambda,x)=\sqrt{\lambda}\mathrm{e}^{-\lambda|x|}$,$\lambda$ 为变分参数,容易求得

$$\langle T\rangle=\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right)^2\mathrm{d}x=\frac{\hbar^2\lambda^2}{2m}$$

$$\langle V\rangle=g\int_{-\infty}^{\infty}|x|\psi^2\mathrm{d}x$$

$$=2g\lambda\int_0^{\infty}x\mathrm{e}^{-2\lambda x}\mathrm{d}x=\frac{g}{2\lambda}$$

$$E(\lambda)=\langle T+V\rangle=\frac{\hbar^2\lambda^2}{2m}+\frac{g}{2\lambda}$$

由极值条件 $\partial E/\partial\lambda=0$ 求得 λ 的最佳值为

$$\lambda=(mg/2\hbar^2)^{1/3} \tag{2}$$

代入式(1),即得基态能级的上限为

$$E=\frac{3}{2}\left(\frac{1}{2}\right)^{2/3}\left(\frac{h^2g^2}{m}\right)^{1/3}=0.94494\left(\frac{\hbar^2g^2}{m}\right)^{1/3} \tag{3}$$

(b) 取 $\psi(\alpha,x)=\dfrac{\sqrt{\alpha}}{\pi^{1/4}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$,$\alpha$ 为变分参数.求得

$$\langle T\rangle=\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right)^2\mathrm{d}x=\frac{\hbar^2\alpha^2}{4m}$$

$$\langle V\rangle=\frac{2g\alpha}{\sqrt{\pi}}\int_0^{\infty}x\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2}\mathrm{d}x=\frac{g}{\sqrt{\pi}\alpha}$$

$$E(\alpha)=\langle T+V\rangle=\frac{\hbar^2\alpha^2}{4m}+\frac{g}{\sqrt{\pi}a} \tag{4}$$

由极值条件 $\partial E/\partial\alpha=0$,求得最佳 α 及 $E(\alpha)$ 最小值为

$$\alpha=(2mg/\sqrt{\pi}\hbar^2)^{1/3} \tag{5}$$

$$E=\frac{3}{2}\left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/3}\left(\frac{\hbar^2g^2}{m}\right)^{1/3}=0.81289\left(\frac{\hbar^2g^2}{m}\right)^{1/3} \tag{6}$$

(c) 取 $\psi(a,x)=\begin{cases}N(1-|x|/a) & |x|<a\\ 0, & |x|>a\end{cases}$

a 为变分参数，N 为归一化常数，容易求出 $N^2=\dfrac{3}{2a}$，

$$\langle T\rangle=\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-a}^{a}\left(\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right)^2\mathrm{d}x=\frac{3\hbar^2}{2ma^2}$$

$$\langle V\rangle=2gN^2\int_0^a x\left(1-\frac{x}{a}\right)^2\mathrm{d}x=\frac{ga}{4}$$

$$E(a)=\frac{3\hbar^2}{2ma^2}+\frac{ga}{4} \tag{7}$$

由极值条件 $\partial E/\partial a=0$ 求得最佳 a 及 $E(a)$最小值为

$$a=(12\hbar^2/mg)^{1\ 3} \tag{8}$$

$$E=\frac{3}{8}(12)^{1/3}\left(\frac{\hbar^2g^2}{m}\right)^{1,3}=0.85854\left(\frac{\hbar^2g^2}{m}\right)^{1\ 3} \tag{9}$$

基态能级的精确值为

$$\boxed{E_0=0.80862\left(\frac{\hbar^2g^2}{m}\right)^{1/3}} \tag{10}$$

三种变分法结果以(b)结果即式(6)为最好，比式(10)高 0.5%；(c)结果即式(9)比精确值式(10)高 6%；(a)结果即式(3)最差，比精确值高 17%. 究其原因，主要在于：真正的基态波函数，在 $x=0$ 处 ψ 及 $\mathrm{d}\psi/\mathrm{d}x$ 均应连续，而且由于 ψ 为偶宇称，$\psi'(0)=0$. 三种试探波函数中只有(b)满足这些条件，在 $x\sim0$ 处(概率最大的区域) ψ 的性质比较接近真实情况，因此所得能量值更接近于真正的基态能级.

基态能级精确解的解法和题 9.2 相似. 能量本征函数可以表示成 Airy 函数，在经典允许区($|x|<E/g$)，能量本征函数为

$$\psi(x)=\sqrt{|\xi|}\left[J_{\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}|\xi|^{3/2}\right)+J_{-\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}|\xi|^{3/2}\right)\right] \tag{11}$$

其中

$$\xi=\left(|x|-\frac{E}{g}\right)(2mg/\hbar^2)^{1/3} \tag{12}$$

当

$$x=0,\quad |\xi|=E(2m/\hbar^2g^2)^{1,3} \tag{13}$$

能级取决于 $x=0$ 处 ψ 的边界条件. 奇宇称态边界条件为

$$\psi(x=0)=0$$

偶宇称态边界条件为

$$\left.\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right|_{x=0}=0 \tag{14}$$

如令 $z=\frac{2}{3}|\xi|^{3/2}$,除一个常数因子外,式(11)可以写成

$$\psi(x)=z^{1/3}\left[J_{\frac{1}{3}}(z)+J_{-\frac{1}{3}}(z)\right] \tag{11'}$$

$\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}=0$ 相当于 $\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}=0$,利用 Bessel 函数的递推公式①

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left[z^{\nu}J_{\nu}(z)\right]=z^{\nu}J_{\nu-1}(z)$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left[z^{-\nu}J_{\nu}(z)\right]=-z^{-\nu}J_{\nu+1}(z)$$

可得

$$\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}=z^{1/3}\left[J_{-2/3}(z)-J_{2/3}(z)\right]$$

因此 $x=0$ 处边界条件可以表示成

$$J_{2/3}(z)-J_{-3/2}(z)=0$$

$$z=\frac{2}{3}|\xi|^{3/2}$$

$$|\xi|=E(2m/\hbar^2 g^2)^{1/3}$$

由 Bessel 函数表查得上式的第一个根(相当于基态)为

$$z=0.68555,\quad |\xi|=1.0188$$

因此

$$E_0=1.0188\left(\frac{\hbar^2 g^2}{2m}\right)^{1/3}=0.80862\left(\frac{\hbar^2 g^2}{m}\right)^{1/3} \tag{15}$$

12.9 设体系的 Hamilton 量为 H,能级为 $E_1,E_2,\cdots,E_n,\cdots$. 设 ψ 为归一化的试探波函数(作为基态波函数的近似). 令

$$K_n=\langle\psi|H^n|\psi\rangle,\quad n=1,2,\cdots \tag{1}$$

证明

$$K_1-\sqrt{K_2-K_1^2}\leqslant E_1\leqslant K_1 \tag{2}$$

---

① 参考郭敦仁. 数学物理方法. 北京:高等教育出版社,1978. §17.3.

此式给出了基态能级 E_1 的上限和下限.

证　设 ψ_n 为体系的真正的归一化的能量本征函数,满足本征方程

$$H\psi_n = E_n\psi_n, \quad n = 1,2,\cdots \tag{3}$$

作为基态波函数的近似的试探波函数 ψ,必可表示成

$$\psi = \sum_n C_n\psi_n \tag{4}$$

其中

$$\sum_n C_n^* C_n = 1 \quad \text{(归一化条件)} \tag{5}$$

因此

$$\begin{aligned} K_1 &= \langle\psi \mid H \mid \psi\rangle \\ &= \sum_{n,n'} C_n^* C_{n'} \langle\psi_n \mid H \mid \psi_{n'}\rangle \\ &= \sum_{n,n'} C_n^* C_{n'} E_n \delta_{nn'} \\ &= \sum_n C_n^* C_n E_n \geqslant E_1 \end{aligned} \tag{6}$$

令

$$I = \langle\psi \mid (H - K_1)^2 \mid \psi\rangle \geqslant 0 \tag{7}$$

将式(4)代入上式,并利用式(3)及(5),可得

$$\begin{aligned} I &= \sum_{n,n'} C_n^* C_{n'} \langle\psi_n \mid (H - K_1)^2 \mid \psi_{n'}\rangle \\ &= \sum_n C_n^* C_n (E_n - K_1)^2 \geqslant (K_1 - E_1)^2 \end{aligned} \tag{8}$$

(这里假定 ψ 是基态的良好近似,K_1 接近于 E_1,$|E_n - K_1| \geqslant K_1 - E_1$.)另外,根据定义(1),可得

$$I = \langle\psi \mid (H^2 - 2K_1H + K_1^2) \mid \psi\rangle = K_2 - K_1^2 \tag{9}$$

联合式(8)、(9),即得

$$I = K_2 - K_1^2 \geqslant (K_1 - E_1)^2 \geqslant 0$$

开方,即得

$$\sqrt{K_2 - K_1^2} \geqslant K_1 - E_1 \geqslant 0 \tag{10}$$

亦即

$$\boxed{K_1 - \sqrt{K_2 - K_1^2} \leqslant E_1 \leqslant K_1} \tag{2}$$

通常以 K_1 作为基态能级 E_1 的近似值.

12.10 粒子在一维势场中运动,$V(x)<0$,[当 $x\to\pm\infty$,$V(x)\to 0$]试证明,至少存在一个束缚态($E<0$).

证 粒子的总能量算符为

$$H=T+V=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x) \tag{1}$$

取变分试探波函数(已归一化)为

$$\psi(\lambda,x)=\frac{\sqrt{\lambda}}{\pi^{1/4}}\mathrm{e}^{-\lambda^2x^2/2},\quad \lambda>0 \tag{2}$$

λ 为变分参数. 动能和势能的平均值为

$$\langle T\rangle=\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right|^2\mathrm{d}x=\frac{\hbar^2\lambda^5}{2m\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}x^2\mathrm{e}^{-\lambda^2x^2}\mathrm{d}x=\frac{\hbar^2\lambda^2}{4m} \tag{3}$$

$$\langle V\rangle=\frac{\lambda}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}V(x)\mathrm{e}^{-\lambda^2x^2}\mathrm{d}x=\frac{\lambda}{\sqrt{\pi}}U(\lambda) \tag{4}$$

其中

$$U(\lambda)=\int_{-\infty}^{+\infty}V(x)\mathrm{e}^{-\lambda^2x^2}\mathrm{d}x \tag{5}$$

能量平均值为

$$E(\lambda)=\langle T+V\rangle=\frac{\hbar^2\lambda^2}{4m}+\frac{\lambda}{\sqrt{\pi}}U(\lambda) \tag{6}$$

由于

$$\lambda\to 0,\quad U(\lambda)\to U(0)=\int_{-\infty}^{+\infty}V(x)\mathrm{d}x<0 \tag{7}$$

当 λ 充分小时,式(6)中第二项是主要的,从而

$$E(\lambda)\to\frac{1}{\sqrt{\pi}}\lambda U(0)<0$$

亦即存在束缚能级.

12.11 质量为 m 的粒子在线性中心力场

$$V(r)=kr,\quad k>0 \tag{1}$$

中运动,(a)粗略估算基态能级的数量级;(b)用 Bohr 量子化条件求基态(圆轨

道)能级之值;(c)用变分法求基态能级的上限,并和精确解比较. 变分试探波函数取为

$$\text{(i)}\ \psi \sim \mathrm{e}^{-\lambda r},\quad \text{(ii)}\ \psi \sim \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\lambda^2 r^2}$$

解　(a)总能量算符为

$$H = T + V = \frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2 + kr \tag{2}$$

根据位力定理,对于任何能量本征态,有关系

$$\langle T\rangle = \frac{1}{2}\left\langle r\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right\rangle = \frac{1}{2}k\langle r\rangle$$

$$E = \langle T+V\rangle = \frac{3}{2}k\langle r\rangle \tag{3}$$

本题中,特征长度应该由 $\hbar$、m、k 构成,唯一的构造方式是

$$\boxed{r_0 = (\hbar^2/mk)^{1/3}} \tag{4}$$

对于基态,可以估计为$\langle r\rangle \sim r_0$,因此基态能级约为

$$E_0 \sim \frac{3}{2}kr_0 = \frac{3}{2}(\hbar^2 k^2/m)^{1\,3} \tag{5}$$

(b) 对于 Bohr 圆轨道,位力定理仍可成立,如以 r 表示轨道半径,应有关系

$$p^2 = mkr,\quad E = \frac{3}{2}kr \tag{6}$$

量子化条件为

$$|\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}| = rp = n\hbar,\quad n = 1,2,3,\cdots \tag{7}$$

对于基态,$n=1$,由量子化条件得到

$$r^2p^2 = \hbar^2$$

而由式(6)得到

$$r^2p^2 = mkr^3$$

因此

$$r = (\hbar^2/mk)^{1/3} = r_0$$

$$E_0 = \frac{3}{2}kr_0 = \frac{3}{2}(\hbar^2k^2/m)^{1\,3} \tag{8}$$

刚好和粗略估算结果式(5)一致.

(c) 用变分法求基态能级上限,因基态为 s 态($l=0$),应取试探波函数为径向函数 $\psi=\psi(r)$.

(i) 取

$$\psi(\lambda,r)=\left(\frac{\lambda^3}{\pi}\right)^{1/2}\mathrm{e}^{-\lambda r},\quad \lambda>0 \tag{9}$$

λ 为变分参数,容易算出

$$\langle T\rangle=\frac{\hbar^2}{2m}\int|\nabla\psi|^2\mathrm{d}\tau=\frac{\hbar^2}{2m}\int\left(\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}r}\right)\mathrm{d}\tau=\frac{\hbar^2}{2m}\lambda^2$$

$$\langle V\rangle=k\int_0^\infty r\psi^2 4\pi r^2\mathrm{d}r=\frac{3k}{2\lambda}$$

$$E(\lambda)=\langle T+V\rangle=\frac{\hbar^2\lambda^2}{2m}+\frac{3k}{2\lambda} \tag{10}$$

由极值条件 $\partial E/\partial\lambda=0$ 求得 λ 最佳值及 $E(\lambda)$最小值为

$$\lambda=\left(\frac{3}{2}\frac{mk}{\hbar^2}\right)^{1/3}=\left(\frac{3}{2}\right)^{1/3}\frac{1}{r_0} \tag{11}$$

$$E=\left(\frac{3}{2}\right)^{5/3}\left(\frac{\hbar^2k^2}{m}\right)^{1/3}=1.9656\left(\frac{\hbar^2k^2}{m}\right)^{1/3} \tag{12}$$

(ii) 取

$$\psi(\lambda,r)=\frac{\lambda^{3/2}}{\pi^{3/4}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\lambda^2r^2},\quad \lambda>0 \tag{13}$$

(已归一化)λ 为变分参数,容易算出

$$\langle T\rangle=\frac{\hbar^2}{2m}\int\left(\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}r}\right)^2\mathrm{d}\tau=\frac{3\hbar^2\lambda^2}{4m}$$

$$\langle V\rangle=k\int_0^\infty r\psi^2 4\pi r^2\mathrm{d}r=\frac{2k}{\sqrt{\pi}\lambda}$$

$$E(\lambda)=\langle T+V\rangle=\frac{3\hbar^2\lambda^2}{4m}+\frac{2k}{\sqrt{\pi}\lambda} \tag{14}$$

由极值条件 $\partial E/\partial\lambda=0$ 求得 λ 最佳值及 $E(\lambda)$最小值为

$$\lambda=\left(\frac{4mk}{3\sqrt{\pi}\hbar^2}\right)^{1/3}=\left(\frac{4}{3\sqrt{\pi}}\right)^{1/3}\frac{1}{r_0} \tag{15}$$

$$E=3\left(\frac{3\hbar^2k^2}{4\pi m}\right)^{1/3}=1.8611\left(\frac{\hbar^2k^2}{m}\right)^{1/3} \tag{16}$$

基态能级的精确值可以利用题 9.2 的结果而写出,中心力场中 s 态($l=0$)能级和相应的一维问题结果相同,即相当于

$$V(x)=kx,\quad x>0$$

边界条件:

$$x \to 0, \quad \infty \text{处}, \quad \psi(x) \to 0$$

根据题 9.2 结果，基态能级为

$$\boxed{E_0 = 1.8558\left(\frac{\hbar^2 k^2}{m}\right)^{1/3}} \tag{17}$$

作为变分法给出的基态能级上限，式(16)比 E_0 高 0.29%，式(12)则比 E_0 高 5.9%. 这表明式(13)比式(9)更接近于真正的基态波函数.

式(13)和(9)的优劣还可从波函数在原点的数值来鉴别.

对于式(13)，

$$|\psi(0)|^2 = \left(\frac{\lambda}{\sqrt{\pi}}\right)^3 = \frac{4}{3\pi^2 r_0^3} \tag{18}$$

对于式(9)，

$$|\psi(0)|^2 = \frac{\lambda^3}{\pi} = \frac{3}{2\pi r_0^3} \tag{19}$$

$|\psi(0)|^2$ 的精确值为(参看题 5.7)

$$|\psi(0)|^2 = \frac{m}{2\pi\hbar^2}\left\langle \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right\rangle \tag{20}$$

对于本题，$\mathrm{d}V/\mathrm{d}r = k$，因此

$$\boxed{|\psi(0)|^2 = \frac{mk}{2\pi\hbar^2} = \frac{1}{2\pi r_0^3}} \tag{21}$$

式(18)为精确值的 $8/3\pi$ 倍，式(19)则为精确值的 3 倍！由于基态波形为钟形，$\psi(0)$的值在相当大程度上反映出试探波函数的优劣程度，可见式(13)远比式(9)为佳.

12.12　设在氘核中，质子与中子的作用势表示成

$$V(r) = -V_0 \mathrm{e}^{-r/a} \tag{1}$$

取 $V_0 = 32.7\mathrm{MeV}$，$a = 2.16\mathrm{fm}$(力程). 试用变分法求氘核的基态能级及基态半径.

解　基态为 s 态($l=0$)，波函数为径向函数，为了计算方便，取试探函数为

$$\psi(\lambda, r) = N\mathrm{e}^{-\lambda r/2a} \tag{2}$$

λ 为变分参数，N 为归一化常数. 由归一化条件

$$\int |\psi|^2 \mathrm{d}\tau = 4\pi \int_0^\infty \psi^2 r^2 \mathrm{d}r = 1$$

求得

$$N^2 = \lambda^3/8\pi a^3 \tag{3}$$

动能和势能平均值分别为

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

$$\langle V\rangle = -V_0 N^2 4\pi\int_0^{\infty} \mathrm{e}^{-r/\varepsilon}\mathrm{e}^{-\lambda r/a}r^2\mathrm{d}r$$

$$= -V_0\left(\frac{\lambda}{1+\lambda}\right)^3$$

因此

$$E(\lambda) = \langle T+V\rangle = \frac{\hbar^2\lambda^2}{8\mu a^2} - V_0\left(\frac{\lambda}{1+\lambda}\right)^3 \tag{4}$$

其中 μ 为质子-中子体系折合质量,即

$$\mu = m_{\mathrm{p}}m_{\mathrm{n}}/(m_{\mathrm{p}}+m_{\mathrm{n}}) = 469.45\mathrm{MeV}/c^2$$

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

$$\frac{\lambda}{(1+\lambda)^1} = \frac{\hbar^2}{12\mu a^2 V_0} \tag{5}$$

给定了上式右端各参数之值后,可用数值解法求出 λ 的最佳值. 相应的 $E(\lambda)$ 最小值可以表示成

$$E = \frac{\hbar^2}{4\mu a^2}\lambda^2\left[\frac{1}{2} - \frac{1}{3}(1+\lambda)\right] \tag{6}$$

式(5)中,

$$\frac{\hbar^2}{12\mu a^2 V_0} = \frac{(\hbar c)^2}{12\mu c^2 a^2 V_0} = 0.04531$$

由式(5)求得 λ 最佳值为

$$\lambda = 1.326 \tag{7}$$

代入式(6),即得

$$E \doteq -2.15\mathrm{MeV} \tag{8}$$

氘核基态能级的实验值为 $E=-2.23\mathrm{MeV}$,二者相差约 3.6%.

式(2)作为基态波函数的近似表达式,虽不十分准确,但简明易算. 例如,由式(2)易得基态最概然半径为

$$r_0 = 2a/\lambda = 3.26\mathrm{fm} \tag{9}$$

和公认的数值基本一致,最概然半径同径向概率密度的极值条件决定,即满足

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}(r^2\psi^2)\,|_{r=r_0}=0 \tag{10}$$

由式(2)还可求出基态平均半径为

$$\langle r\rangle=\int r\psi^2\,\mathrm{d}\tau=3a/\lambda=4.89\mathrm{fm} \tag{11}$$

12.13　质量为 m 的粒子在汤川势阱中运动，

$$V(r)=-V_0\frac{\mathrm{e}^{-r/a}}{r/a},\quad V_0,a>0 \tag{1}$$

试估算形成束缚态所需临界 V_0 值，(a)利用不确定度关系作粗略估算，(b)用变分法作较为精确的估算.

解　(a)设基态半径为 R，即粒子主要出现在 $r\sim R$ 附近. 利用不确定度关系 $\Delta p\Delta x\sim\hbar$，并取 $\Delta x\sim R$，即得

$$\langle T\rangle\sim\frac{1}{2m}(\Delta p)^2\sim\frac{\hbar^2}{2mR^2}$$

势能平均值可以取为

$$\langle V\rangle\sim-V_0\frac{\mathrm{e}^{-R/a}}{R/a}$$

因此，基态能量可以估计为

$$E=\langle T+V\rangle\sim\frac{\hbar^2}{2mR^2}-V_0\frac{\mathrm{e}^{-R/a}}{R/a} \tag{2}$$

束缚态 $E<0$，因此必须

$$V_0>\frac{\hbar^2}{2maR}\mathrm{e}^{R/a} \tag{3}$$

当 $R=a$，上式右端为极小，故得

$$V_0>\frac{e}{2}\frac{\hbar^2}{ma^2}=1.36\frac{\hbar^2}{ma^2} \tag{4}$$

当然，数字 1.36 仅有数量极的意义.

(b)用变分法，取试探波函数为(已归一化)

$$\psi(\lambda,r)=\left(\frac{\lambda^3}{8\pi a^3}\right)^{1/2}\mathrm{e}^{-\lambda r/2a} \tag{5}$$

λ 为变分参数，容易求得

$$\langle T\rangle=\frac{\hbar^2}{2m}\int\left(\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}r}\right)^2\mathrm{d}\tau=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\lambda}{2a}\right)^2=\frac{\hbar^2\lambda^2}{8ma^2}$$

$$\langle V\rangle = -V_0 a 4\pi \int_0^\infty \psi^2 \mathrm{e}^{-r/a} r\,\mathrm{d}r = -\frac{V_0}{2}\frac{\lambda^3}{(1+\lambda)^2}$$

$$E(\lambda) = \langle T+V\rangle = \frac{\hbar^2\lambda^2}{8ma^2} - \frac{V_0\lambda^3}{2(1+\lambda)^2} \tag{6}$$

束缚态 $E\leqslant 0$,因此必须

$$V_0 \geqslant \frac{(1+\lambda)^2}{\lambda}\frac{\hbar^2}{4ma^2} \tag{7}$$

当 $\lambda=1$,上式右端为极小,故得 V_0 的临界值为

$$V_0 \geqslant \hbar^2/ma^2 \tag{8}$$

这和式(4)基本一致,考虑到式(5)并非真正的基态波函数,所以实际上 V_0 的临界值还可以比式(8)稍小一些.

12.14 设氘核中质子与中子间作用势为汤川势:

$$V(r) = -V_0\frac{\mathrm{e}^{-r/a}}{r/a},\quad V_0, a>0 \tag{1}$$

取试探波函数 $\psi\sim \mathrm{e}^{-\lambda r/2a}$,用变分法求基态能级公式,并利用能级的实验值求作用强度 V_0 与力程 a 的关系.

解 能级公式见上题式(6),为

$$E(\lambda) = \frac{\hbar^2\lambda^2}{8\mu a^2} - \frac{V_0\lambda^3}{2(1+\lambda)^2} \tag{2}$$

其中 λ 为变分参数,μ 为折合质量($2\mu=938.9\mathrm{MeV}/c^2$).

由极值条件 $\partial E/\partial\lambda=0$ 可得最佳 λ 满足的方程:

$$\frac{\lambda(3+\lambda)}{(1+\lambda)^3} = \frac{\hbar^2}{2\mu a^2 V_0} \equiv \eta \tag{3}$$

相应的 $E(\lambda)$最小值为

$$E = \frac{V_0}{4}\frac{(1-\lambda)\lambda^3}{(1+\lambda)^3} \tag{4}$$

给定 V_0 和 a 后,由式(3)即可解出 λ,代入式(4)即得 E(基态能级的近似值).

反之,如式(4)中 E 取实验值($-2.23\mathrm{MeV}$),则给定 V_0 后,由式(4)即可定出 λ,代入式(3)即可求出相应 a 值.数值计算结果如下表,其中第三、四组数据接近公认的数值.

$E=-2.23\text{MeV}$					
$V_0(\text{MeV})$	40	35	30	25	20
λ	1.8265	1.9042	2.0023	2.1315	2.3114
$\eta=\frac{\lambda(3+\lambda)}{(1+\lambda)^3}$	0.3904	0.3812	0.3701	0.3562	0.3381
$a(\text{fm})$	1.63	1.76	1.93	2.16	2.48

12.15　粒子在吸引的中心力场中运动，

$$V(r)=Ar^{\nu},\quad \nu>-2,\quad A\nu>0 \tag{1}$$

试用变分法求基态能级的上限，并讨论所得结果.(a)取试探波函数 $\psi\sim e^{-\lambda r/2}$；(b)取 $\psi\sim e^{-\lambda^2 r^2/2}$；(c)比较这两种波函数的优劣.

解　(a)试探波函数取为(已归一化)

$$\psi(\lambda,r)=\left(\frac{\lambda^3}{8\pi}\right)^{1/2}e^{-\lambda r/2},\quad \lambda>0 \tag{2}$$

容易算出

$$\langle T\rangle=\frac{\hbar^2}{2m}\int\left(\frac{d\psi}{dr}\right)^2 d\tau=\frac{\hbar^2\lambda^2}{8m}$$

$$\langle V\rangle=4\pi A\int_0^\infty \psi^2 r^{\nu+2}dr=\frac{A}{2}\lambda^{-\nu}\Gamma(3+\nu)$$

$$E(\lambda)=\langle T+V\rangle=\frac{\hbar^2\lambda^2}{8m}+\frac{A}{2}\lambda^{-\nu}\Gamma(3+\nu) \tag{3}$$

计算中利用了公式

$$\int_0^\infty x^{\alpha-1}e^{-x}dx=\Gamma(\alpha),\quad \alpha>0 \tag{4}$$

由极值条件 $\partial E/\partial\lambda=0$ 求得 λ 的最佳值为

$$\lambda=\left[\frac{2m}{\hbar^2}A\nu\Gamma(3+\nu)\right]^{1/(2+\nu)} \tag{5}$$

代入(3)式，即得 $E(\lambda)$ 最小值为

$$E=\frac{A}{4}(2+\nu)\Gamma(3+\nu)\left[\frac{2m}{\hbar^2}A\nu\Gamma(3+\nu)\right]^{-\nu/(2+\nu)} \tag{6}$$

特例：(i) $\nu=-1$，$A=-e^2$，相当于氢原子问题.

$$E=\frac{A}{4}\Gamma(2)\left[-\frac{2m}{\hbar^2}A\Gamma(2)\right]$$

$$=-\frac{mA^2}{2\hbar^2}=-\frac{e^2}{2a_0} \tag{7}$$

其中 $a_0=\hbar^2/me^2$,为 Bohr 半径. 式(7)正好是氢原子的基态能级精确值. 所以能得到这样好的结果,是因为所选试探波函数的函数形式与真正的基态波函数相同.

(ii) $\nu=2, A=\frac{1}{2}m\omega^2$,相当于三维谐振子.

$$E=A\Gamma(5)\left[\frac{4m}{\hbar^2}A\Gamma(5)\right]^{-1/2}=\sqrt{3}\hbar\omega \tag{8}$$

基态能级的精确值为 $3\hbar\omega/2$,式(8)比精确值高 15.5%.

(iii) $\nu=1, A>0, V=Ar$,式(6)给出

$$E=\frac{3}{4}A\Gamma(4)\left[\frac{2m}{\hbar^2}A\Gamma(4)\right]^{-1/3}=\left(\frac{3}{2}\right)^{5/3}\left(\frac{\hbar^2A^2}{m}\right)^{1/3} \tag{9}$$

和题 12.11 的式(12)一致.

(b)试探波函数取为(已归一化)

$$\psi(\lambda,r)=\lambda^{3/2}\pi^{-3/4}\mathrm{e}^{-\lambda^2r^2/2} \tag{10}$$

容易算出

$$\langle T\rangle=\frac{\hbar^2}{2m}\int\left(\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}r}\right)^2\mathrm{d}\tau=\frac{3\hbar^2\lambda^2}{4m}$$

$$\langle V\rangle=4\pi A\int_0^\infty\psi^2r^{\nu+2}\mathrm{d}r=\frac{4}{\sqrt{\pi}}A\lambda^3\int_0^\infty\mathrm{e}^{-\lambda^2r^2}r^{\nu+2}\mathrm{d}r$$

$$=\frac{2}{\sqrt{\pi}}A\lambda^{-\nu}\int_0^\infty\mathrm{e}^{-x}x^{\frac{\nu}{2}+\frac{1}{2}}\mathrm{d}x=\frac{2}{\sqrt{\pi}}A\lambda^{-\nu}\Gamma\left(\frac{\nu}{2}+\frac{3}{2}\right)$$

$$E(\lambda)=\langle T+V\rangle=\frac{3\hbar^2\lambda^2}{4m}+\frac{2}{\sqrt{\pi}}A\Gamma\left(\frac{\nu}{2}+\frac{3}{2}\right)\lambda^{-\nu} \tag{11}$$

由极值条件 $\partial E/\partial\lambda=0$ 求得 λ 最佳值为

$$\lambda=\left[\frac{4}{3\sqrt{\pi}}\frac{mA}{\hbar^2}\nu\Gamma\left(\frac{\nu}{2}+\frac{3}{2}\right)\right]^{1/(2+\nu)} \tag{12}$$

代入式(11),即得 $E(\lambda)$ 最小值为

$$E=\frac{A}{\sqrt{\pi}}(2+\nu)\Gamma\left(\frac{\nu}{2}+\frac{3}{2}\right)\left[\frac{2}{3\sqrt{\pi}}\frac{2m}{\hbar^2}A\nu\Gamma\left(\frac{\nu}{2}+\frac{3}{2}\right)\right]^{-\nu/(2+\nu)} \tag{13}$$

特例:(i)$\nu=-1, A=-e^2$,相当于氢原子问题.

$$E=-\frac{4}{3\pi}\frac{mA^2}{\hbar^2}=-\frac{4e^2}{3\pi a_0} \tag{14}$$

比基态能级精确值($E_1=-e^2/2a_0$)高 15.1%.

(ii) $\nu=2, A=\frac{1}{2}m\omega^2$,相当于三维谐振子.

$$E=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)m\omega^2\left[\frac{4}{3\sqrt{\pi}}\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}\right]^{-\frac{1}{2}}=\frac{3}{2}\hbar\omega \tag{15}$$

其中

$$\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)=\frac{3}{2}\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)=\frac{3}{2}\cdot\frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)=\frac{3}{4}\sqrt{\pi}$$

由于试探波函数的函数形式和真正的基态波函数相同，所以变分法所得能级等于基态能级的准确值.

(iii) $\nu=1, A>0, V=Ar$，式(13)给出

$$E=\frac{1}{\sqrt{\pi}}3A\Gamma(2)\left[\frac{4}{3\sqrt{\pi}}\Gamma(2)\ \frac{mA}{\hbar^2}\right]^{-1/3}$$

$$=3\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/3}\left(\frac{\hbar^2A^2}{m}\right)^{1/3} \tag{16}$$

和题 12.11 的式(16)一致.

(c) 将(a)中所得能级近似值式(6)记为 E_a，(b)中所得能级近似值式(13)记为 E_b，利用公式

$$\Gamma(2z)=2^{2z-1}\pi^{-1/2}\Gamma\left(z+\frac{1}{2}\right)\Gamma(z)$$

可得

$$\frac{E_a}{E_b}=\frac{\sqrt{\pi}}{4}\left(\frac{2}{3\sqrt{\pi}}\right)^{\nu/(2+\nu)}\left[\frac{\Gamma(3+\nu)}{\Gamma\left(\frac{3+\nu}{2}\right)}\right]^{2/(2+\nu)}$$

$$=\left[\left(\frac{2}{3}\right)^{\nu/2}\Gamma\left(2+\frac{\nu}{2}\right)\right]^{2/(2+\nu)} \tag{17}$$

当 $\nu\to0, E_a/E_b\to1$;

当 $\nu\neq0(\nu>-2)$，$\Gamma\left(2+\frac{\nu}{2}\right)$ 总是大于 $\left(\frac{3}{2}\right)^{\frac{\nu}{2}}$，因此

$$E_a/E_b>1;$$

当 $\nu<0, A<0$，E_a, E_b 均为负数，所以 $E_a<E_b$;

当 $\nu>0, A>0$，E_a, E_b 均为正数，所以 $E_a>E_b$.

由此可得结论如下：

当 $-2<\nu<0$，试探波函数(a)型优于(b)型;

当 $\nu>0$，试探波函数(b)型优于(a)型.

12.16　设体系的 Hamilton 量为 H_0 时，基态能级和波函数为 E_0, ψ_0. 设体系

受到微扰 H'作用,Hamilton 量变成 $H=H_0+H'$. 取基态试探波函数为

$$\boxed{\psi(\lambda)=N(1+\lambda H')\psi_0} \tag{1}$$

λ 为变分参数. 试用变分法求 H 的基态能级上限,计算中保留二级小量. 略去三级小量.

解 微扰前的基态 ψ_0 下的平均值记为$\langle\rangle_0$,即

$$\langle\psi_0\mid H'\mid\psi_0\rangle=\langle H'\rangle_0,\quad \langle\psi_0\mid H'^2\mid\psi_0\rangle=\langle H'^2\rangle_0$$

等等. 令试探波函数 $\psi(\lambda)$满足归一化条件

$$\langle\psi(\lambda)\mid\psi(\lambda)\rangle=1 \tag{2}$$

即得

$$N^2=1/(1+2\lambda\langle H'\rangle_0+\lambda^2\langle H'^2\rangle_0) \tag{3}$$

在 $\psi(\lambda)$中,能量平均值为

$$\begin{aligned}E(\lambda)=&\langle\psi\mid H\mid\psi\rangle=N^2\langle(1+\lambda H')(H_0+H')(1+\lambda H')\rangle_0\\=&N^2(E_0+\langle H'\rangle_0+2\lambda E_0\langle H'\rangle_0+2\lambda\langle H'^2\rangle_0+\lambda^2\langle H'H_0H'\rangle_0+\lambda^2\langle H'^3\rangle_0)\end{aligned} \tag{4}$$

其中

$$2H'H_0H'=H'[H_0,H']+H'^2H_0+H_0H'^2-[H_0,H']H'$$

$$\langle H'H_0H'\rangle_0=E_0\langle H'^2\rangle_0+\frac{1}{2}\langle[H',[H_0,H']]\rangle_0 \tag{5}$$

代入式(4),得到

$$\begin{aligned}E(\lambda)=&E_0+\langle H'\rangle_0+N^2\{2\lambda\langle H'^2\rangle_0-2\lambda(\langle H'\rangle_0)^2\\&+\lambda^2\langle H'^3\rangle_0+\frac{\lambda^2}{2}\langle[H',[H_0,H']]\rangle_0-\lambda^2\langle H'\rangle_0\langle H'^2\rangle_0\}\end{aligned}$$

略去三级小量($\langle H'^3\rangle_0$,$\langle H'\rangle_0\langle H'^2\rangle_0$ 等等),即得

$$E(\lambda)=E_0+\langle H'\rangle_0+2\lambda\langle H'^2\rangle_0-2\lambda(\langle H'\rangle_0)^2+\frac{\lambda^2}{2}\langle[H',[H_0,H']]\rangle_0 \tag{6}$$

由极值条件 $\partial E/\partial\lambda=0$,求得最佳 λ 为

$$\lambda=-\frac{\langle H'^2\rangle_0-(\langle H'\rangle_0)^2}{\frac{1}{2}\langle[H',[H_0,H']]\rangle_0}=\frac{\langle H'^2\rangle_0-(\langle H'\rangle_0)^2}{E_0\langle H'^2\rangle_0-\langle H'H_0H'\rangle_0} \tag{7}$$

代入式(6),即得 $E(\lambda)$极小值为

$$E = E_0 + \langle H' \rangle_0 - \frac{2[\langle H'^2 \rangle_0 - (\langle H' \rangle_0)^2]^2}{\langle [H', [H_0, H']] \rangle_0} \tag{8}$$

$$= E_0 + \langle H' \rangle_0 + \frac{[\langle H'^2 \rangle_0 - (\langle H' \rangle_0)^2]^2}{E_0 \langle H'^2 \rangle_0 - \langle H' H_0 H' \rangle_0} \tag{8'}$$

此即以式(1)为试探波函数时，基态能级的上限. 公式中各项平均值，均系对微扰前的基态(非简并)ψ_0 而言.

12.17　转动惯量为 I，电偶极矩为 D 的空间转子，自由转动时，能量算符为 $H_0 = l^2/2I$. 当此转子受到均匀电场(沿 z 方向)$\mathscr{E}$ 作用后，能量算符变成

$$H = H_0 + H' = \frac{l^2}{2I} - D\mathscr{E}\cos\theta \tag{1}$$

(a) 写出 H_0 的本征值和本征函数，说明能级的简并度；

(b) 视 H' 为微扰，求基态能级的微扰修正(二级近似)；

(c) 取试探波函数为

$$\psi(\lambda) = N(1 + \lambda H')\psi_0 \tag{2}$$

其中 ψ_0 为自由转动时的基态波函数. 用变分法求基态能级近似值(准确到 $\mathscr{E}^2$ 量级)，并和微扰论结果比较.

解　(a) H_0 的本征函数为 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$，记成 $|lm\rangle$. 能级为

$$E_l = l(l+1)\hbar^2/2I, \quad l = 0, 1, 2, \cdots \tag{3}$$

给定 l 后，m 可取 $0, \pm 1, \cdots, \pm l$，故能级 E_l 的简并度为 $(2l+1)$. 基态 $E_0 = 0$，$\psi_0 = Y_{00} = 1/\sqrt{4\pi}$，是非简并的.

(b) 微扰 $H' = -D\mathscr{E}\cos\theta$，按照非简并态微扰论，基态能级的微扰论一级修正和二级修正为

$$E_0^{(1)} = \langle H' \rangle_0 = -D\mathscr{E}\langle \cos\theta \rangle_0 = 0 \tag{4}$$

$$E_0^{(2)} = \sum_{l,m}{}' |\langle lm | H' | 00 \rangle|^2/(E_0 - E_l) \tag{5}$$

由于

$$\cos\theta Y_{00} = \frac{\cos\theta}{\sqrt{4\pi}} = \frac{1}{\sqrt{3}} Y_{10} \tag{6}$$

式(5)中有贡献的项为 $(l, m) = (1, 0)$，因此

$$E_0^{(2)} = -\frac{|D\mathscr{E}\langle 10 | \cos\theta | 00 \rangle|^2}{E_1} = -\frac{1}{3}\frac{\mathscr{E}^2 D^2 I}{\hbar^2} \tag{7}$$

基态能级为

$$E = E_0 + E_0^{(1)} + E_0^{(2)} = -\frac{1}{3}\frac{\mathscr{E}^2 D^2 I}{\hbar^2} \tag{8}$$

(c) 取式(2)为试探波函数. 用变分法求基态能级近似值,可以利用上题的式(8′),其中$\langle H' \rangle_0 = 0$,

$$\langle H'^2 \rangle_0 = D^2 \mathscr{E}^2 \langle 00 \mid \cos^2\theta \mid 00 \rangle$$

$$= D^2 \mathscr{E}^2 \frac{1}{3} \langle 10 \mid 10 \rangle = \frac{1}{3} D^2 \mathscr{E}^2$$

$$\langle H' H_0 H' \rangle_0 = D^2 \mathscr{E}^2 \langle 00 \mid \cos\theta \cdot H_0 \cdot \cos\theta \mid 00 \rangle$$

$$= \frac{1}{3} D^2 \mathscr{E}^2 \langle 10 \mid H_0 \mid 10 \rangle$$

$$= \frac{1}{3} D^2 \mathscr{E}^2 E_1 = \frac{1}{3} D^2 \mathscr{E}^2 \frac{\hbar^2}{I}$$

代入上题的式(8′),即得

$$E = E_0 - \frac{1}{3}\frac{\mathscr{E}^2 D^2 I}{\hbar^2} = -\frac{1}{3}\frac{\mathscr{E}^2 D^2 I}{\hbar^2} \tag{9}$$

和微扰论结果一致. 另外,利用上题式(7),λ 最佳值为

$$\lambda = -I/\hbar^2 \tag{10}$$

代入式(2),即得

$$\psi = N\left(1 + \frac{ID}{\hbar^2}\mathscr{E}\cos\theta\right) \mathrm{Y}_{00}$$

$$\approx \mathrm{Y}_{00} + \frac{1}{\sqrt{3}}\frac{ID\mathscr{E}}{\hbar^2}\mathrm{Y}_{10} \quad (\text{取 } N \sim 1) \tag{11}$$

按照微扰论一级近似,基态波函数为

$$\psi \approx \psi_0 + \sum_{l,m}{}' \frac{\langle lm \mid H' \mid 00 \rangle}{E_0 - E_1} \mathrm{Y}_{lm}$$

$$= \mathrm{Y}_{00} - \frac{\langle 10 \mid H' \mid 00 \rangle}{E_1} \mathrm{Y}_{10}$$

$$= \mathrm{Y}_{00} + \frac{ID\mathscr{E}}{\sqrt{3}\hbar^2}\mathrm{Y}_{10} \tag{12}$$

式(11)与(12)完全一致. 正因为所取试探波函数的函数形式刚好是微扰论的一级近似波函数,所以变分法求得的能级等于微扰论二级近似.

12.18 氢原子的 Hamilton 量为

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 - \frac{e^2}{r} = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r} \tag{1}$$

如沿 z 方向加上均匀电场 $\mathscr{E}$(当作微扰),能量算符变成

$$H = H_0 + H' = H_0 + e\mathscr{E}z \tag{2}$$

如取试探波函数为

$$\psi(\lambda, r) = N(1 + \lambda e\mathscr{E}z)\psi_0(r) \tag{3}$$

其中 ψ_0 为微扰前的基态波函数,即 $\psi_0 = \psi_{100}$. 试用变分法求基态能级的上限和电极化率,并和微扰论结果比较.

解　微扰前,基态能级和基态波函数为

$$E_0 = -\frac{e^2}{2a_0} = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \tag{4}$$

$$\psi_0 = \psi_{100} = (\pi a_0^3)^{-1/2} \mathrm{e}^{-r/a_0}$$

$$a_0 = \hbar^2/\mu e^2 (\text{Bohr 半径}) \tag{5}$$

试探波函数式(3)即

$$\psi(\lambda, r) = N(1 + \lambda H')\psi_0 \tag{3'}$$

这正是题 12.16 所取的试探函数,因此准确到 $\mathscr{E}^2$ 量级的基态能级上限,可以按题 12.16 式(8)或(8′)算出. 对于本题,以式(8)较容易. 有关对易式为

$$[H_0, H'] = \frac{e\mathscr{E}}{2\mu}[p^2, z] = -\mathrm{i}\hbar\frac{e\mathscr{E}}{\mu}p_z$$

$$[H', [H_0, H']] = -\mathrm{i}\hbar\frac{e^2\mathscr{E}^2}{\mu}[z, p_z] = \hbar^2 e^2 \mathscr{E}^2/\mu$$

因此

$$\langle [H', [H_0, H']] \rangle_0 = \hbar^2 e^2 \mathscr{E}^2/\mu \tag{6}$$

另外,容易算出

$$\langle H' \rangle_0 = e\mathscr{E}\langle z \rangle_0 = 0 \tag{7}$$

$$\langle H'^2 \rangle_0 = e^2\mathscr{E}^2\langle z^2 \rangle_0 = \frac{1}{3}e^2\mathscr{E}^2\langle r^2 \rangle_0 = e^2\mathscr{E}^2 a_0^2 \tag{8}$$

代入题 12.16 式(7)、(8),即得

$$\lambda = -2a_0/e^2 = 1/E_0 \tag{9}$$

$$E = E_0 - 2\mathscr{E}^2 a_0^3 \tag{10}$$

$$\psi = N\left(1 - \frac{2a_0}{e^2}e\mathscr{E}z\right)\psi_0 \tag{11}$$

式(11)作为近似的基态波函数,已不再是球对称的,电偶极矩平均值为(取 $N \sim 1$)

$$\langle D_z \rangle = \langle \psi \mid (-ez) \mid \psi \rangle = 4\mathscr{E}a_0\langle z^2 \rangle_0 = 4\mathscr{E}a_0^3 \tag{12}$$

极化率为

$$\alpha=\frac{\langle D_z\rangle}{\mathscr{E}}=-\frac{\partial^2 E}{\partial\mathscr{E}^2}=4a_0^3 \tag{13}$$

微扰论的计算结果(参看题 11.18)为

$$E=E_0-\frac{9}{4}\mathscr{E}^2a_0^3,\quad \langle D_z\rangle=\frac{9}{2}\mathscr{E}a_0^3,\quad \alpha=\frac{9}{2}a_0^3$$

变分法所得能级略高于微扰论结果,$\langle D_z\rangle$及α则略小于后者.

12.19 题 11.22 曾用微扰论方法处理"一维氦原子"问题. 试用变分法处理同样的问题.

解 采用自然单位后,体系 Hamilton 量可以表示成

$$\begin{aligned}H&=-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right)-\delta(x_1)-\delta(x_2)+\frac{1}{Z}\delta(x_1-x_2)\\&=T_1+T_2+V_1+V_2+V_{12}\end{aligned} \tag{1}$$

取试探波函数为

$$\psi(\lambda,x_1,x_2)=\lambda\,\mathrm{e}^{-\lambda|x_1|-\lambda|x_2|} \tag{2}$$

(已归一化),H 中各项的平均值为

$$\langle T_1\rangle=\langle T_2\rangle=\frac{\lambda}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\left|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\mathrm{e}^{-\lambda|x|}\right|^2\mathrm{d}x=\frac{\lambda^2}{2} \tag{3}$$

$$\langle V_1\rangle=\langle V_2\rangle=-\lambda\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-2\lambda|x|}\delta(x)\mathrm{d}x=-\lambda \tag{4}$$

$$\begin{aligned}\langle V_{12}\rangle&=\frac{\lambda^2}{Z}\int_{-\infty}^{\infty}\int\mathrm{e}^{-2\lambda|x_1|-2\lambda|x_2|}\delta(x_1-x_2)\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\\&=\frac{2\lambda^2}{Z}\int_0^{\infty}\mathrm{e}^{-4\lambda x_1}\mathrm{d}x_1=\frac{\lambda}{2Z}\end{aligned} \tag{5}$$

合起来,即得

$$E(\lambda)=\langle H\rangle=\lambda^2-2\lambda+\frac{\lambda}{2Z} \tag{6}$$

由极值条件求得 λ 的最佳值为

$$\lambda=1-\frac{1}{4Z} \tag{7}$$

相应的能量值为

$$E=-\left(1-\frac{1}{4Z}\right)^2 \tag{8}$$

换到普通单位，为

$$E=-\frac{Z^2e^2}{a_0}\left(1-\frac{1}{4Z}\right)^2=-\frac{e^2}{a_0}\left(Z-\frac{1}{4}\right)^2 \tag{9}$$

微扰论结果(参看题 11.22)为

$$E'=-\frac{e^2}{a_0}\left(Z^2-\frac{Z}{2}\right)$$

变分法结果比微扰论结果低$\frac{1}{16}e^2/a_0$.

如所周知，三维氦原子(核电荷 Ze)的简单变分法结果是

$$E=-\frac{e^2}{a_0}\left(Z-\frac{5}{16}\right)^2$$

和式(9)只有微小的差别.①

12.20　质量 m，电荷 q 的粒子在中心力场 $V(r)$ 中运动，$r\to\infty$ 处 $V(r)\to 0$. 已知粒子处于能量本征态

$$\psi_0=Are^{-r/a},\quad a>0 \tag{1}$$

A 为归一化常数.

(a) 求能量 E_0，角动量 l 以及势能 $V(r)$；

(b) 沿 z 方向加弱电场 $\mathscr{E}$，取试探波函数为

$$\psi=(C_1+C_2z)\psi_0 \tag{2}$$

用变分法求能量本征值(准确到 $\mathscr{E}^2$ 量级)；

(c) 求诱导电偶极矩和电极化率.

解　(a) ψ_0 为径向函数，与 θ、φ 无关，所以角动量 $l=0$. 将式(1)代入能量本征方程

$$H_0\psi_0=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(r)\right]\psi_0=E_0\psi_0 \tag{3}$$

得到

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}(r\psi_0)+V(r)\psi_0=E_0\psi_0 \tag{3'}$$

化简后，得到

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2}{r^2}-\frac{4}{ar}+\frac{1}{a^2}\right)+V(r)=E_0 \tag{4}$$

---

① 参考曾谨言. 量子力学. 卷 I. 北京：科学出版社，1997. §13.2.

令 $r\to\infty$,由于 $V(\infty)=0$,即得

$$E_0=-\frac{\hbar^2}{2ma^2} \tag{5}$$

代入式(4),即得

$$V(r)=\frac{\hbar^2}{m}\left(\frac{1}{r^2}-\frac{2}{ar}\right) \tag{6}$$

另外,由归一化条件

$$\int\psi_0^2\,\mathrm{d}\tau=4\pi\int_0^\infty\psi_0^2r^2\,\mathrm{d}r=1$$

容易求出

$$A^2=\frac{1}{3\pi a^5} \tag{7}$$

除 $r=0$ 外,ψ_0 没有节点,所以 ψ_0 应该就是基态波函数.

(b) 视外电场 $\mathscr{E}$ 为微扰,总能量算符可以写成

$$H=H_0+H' \tag{8}$$

其中

$$H_0=T+V=\frac{p^2}{2m}+V(r) \tag{9}$$

$$H'=-\boldsymbol{D}\cdot\boldsymbol{\mathscr{E}}=-q\mathscr{E}z \tag{10}$$

试探波函数式(2)亦即为

$$\psi(\lambda,\boldsymbol{r})=N(1+\lambda H')\psi_0 \tag{11}$$

这正是题 12.16 的试探波函数类型. 容易算出

$$\langle H'\rangle_0=\langle\psi_0\mid H'\mid\psi_0\rangle=0$$

$$\langle H'^2\rangle_0=q^2\mathscr{E}^2\langle\psi_0\mid z^2\mid\psi_0\rangle=\frac{5}{2}\mathscr{E}^2q^2a^2 \tag{12}$$

$$[H',[H_0,H']]\doteq\mathscr{E}^2q^2\hbar^2/m$$

利用 12.16 题式(7)和(8),即得

$$\lambda=-5ma^2/\hbar^2 \tag{13}$$

$$E=E_0-\frac{25}{2}\frac{\mathscr{E}^2q^2ma^4}{\hbar^2}=-\frac{\hbar^2}{2ma^2}-\frac{25}{2}\frac{\mathscr{E}^2q^2ma^4}{\hbar^2} \tag{14}$$

将 λ 值代入式(11),即得(取 $N\approx1$)

$$\psi\approx\left(1+5\frac{\mathscr{E}qma^2}{\hbar^2}z\right)\psi_0 \tag{15}$$

(c) 诱导电偶极矩为

$$\langle D_z\rangle = \langle\psi \mid qz \mid \psi\rangle = 10\,\frac{\mathscr{E}q^2ma^2}{\hbar^2}\langle z^2\rangle_0 = 25\mathscr{E}\frac{mq^2a^4}{\hbar^2} \tag{16}$$

极化率为

$$\alpha = \frac{\langle D_z\rangle}{\mathscr{E}} = -\frac{\partial^2 E}{\partial\mathscr{E}^2} = 25\,\frac{mq^2a^4}{\hbar^2} \tag{17}$$

第十三章　量子跃迁

13.1　有一量子力学体系，能级和能量本征态记为 $E_n,\psi_n,n=0,1,2,\cdots$. $t\leqslant 0$ 时，体系处于基态 ψ_0. $t\geqslant 0$ 时受到微扰 $H'(x,t)=F(x)\mathrm{e}^{-t/\tau}$ 作用. 试用一级微扰论计算微扰作用后($t\gg\tau$)体系处于激发态 ψ_n 的概率.

解　$t\geqslant 0$ 时波函数可以表示成

$$\psi(t)=\sum_n C_n(t)\psi_n\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_n t} \tag{1}$$

其中 $\omega_n=E_n/\hbar$. 微扰论计算(一级近似)给出[①]

$$C_n(t)=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^t H'_{n0}(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{n0}t}\mathrm{d}t \tag{2}$$

$|C_n(t)|^2$ 即时刻 t 体系处于 ψ_n 态的概率. 显然

$$H'_{n0}(t)=F_{n0}\mathrm{e}^{-t/\tau} \tag{3}$$

其中

$$F_{n0}=\langle\psi_n\mid F(x)\mid\psi_0\rangle$$

代入式(2)即得

$$C_n(t)=\frac{F_{n0}}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^t \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{n0}t-t/\tau}\mathrm{d}t=\frac{F_{n0}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{n0}t-t/\tau}-1)}{-\hbar\omega_{n0}-\mathrm{i}\hbar/\tau} \tag{4}$$

当 $t\gg\tau$，可取 $\mathrm{e}^{-t/\tau}\approx 0$，因此

$$C_n(t\gg\tau)=F_{n0}\Big/\left(\hbar\omega_{n0}+\frac{\mathrm{i}\hbar}{\tau}\right) \tag{5}$$

$$|C_n(t\gg\tau)|^2=\frac{|F_{n0}|^2}{(\hbar\omega_{n0})^2+\dfrac{\hbar^2}{\tau^2}}=\frac{|F_{n0}|^2}{(E_n-E_0)^2+\dfrac{\hbar^2}{\tau^2}} \tag{6}$$

此即所求概率.

微扰论成立的条件为 $|C_n|^2\ll 1$，即

$$|F_{n0}|\ll(E_n-E_0)\text{，或}|F_{n0}|\ll\hbar/\tau \tag{7}$$

13.2　氢原子处于基态，受到脉冲电场

---

① 参看曾谨言. 量子力学. 卷Ⅰ. 北京：科学出版社，1997. §12.1.

$$\mathscr{E}(t) = \mathscr{E}_0\delta(t) \tag{1}$$

作用，$\mathscr{E}_0$为常数. 试用微扰论计算电子跃迁到各激发态的概率以及仍停留在基态的概率.

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 ψ_n（n 代表 nlm 三个量子数），满足本征方程

$$H_0\psi_n = E_n\psi_n \tag{2}$$

如以电场方向作为 z 轴，微扰作用势可以表示成

$$H' = e\mathscr{E}(t)\cdot\boldsymbol{r} = e\mathscr{E}_0 z\delta(t) \tag{3}$$

在电场作用过程中，波函数满足 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t) = H_0\psi + H'\psi \tag{4}$$

初始条件为

$$\psi(t = 0^-) = \psi_1 \equiv \psi_{100}(r) \tag{5}$$

令

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = \sum_n C_n(t)\psi_n(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt/\hbar} \tag{6}$$

初始条件(5)亦即

$$C_n(0^-) = \delta_{n1} \tag{5'}$$

以式(6)代入式(4)，但微扰项 $H'\psi$ 中 ψ 取初始值 ψ_1（这是微扰论的实质性要点！）即得

$$\sum_n \mathrm{i}\hbar\psi_n\frac{\mathrm{d}C_n}{\mathrm{d}t}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt/\hbar} = H'\psi_1 = e\mathscr{E}_0 z\psi_1\delta(t)$$

以 ψ_n^* 左乘上式两端，并对全空间积分，即得

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}C_n}{\mathrm{d}t} = e\mathscr{E}_0 z_{n1}\delta(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}E_nt/\hbar}$$

再对 t 积分，由 $t=0^-\to t>0$，即得

$$C_n(t) = \frac{e\mathscr{E}_0}{\mathrm{i}\hbar}z_{n1} \quad (n\neq 1) \tag{7}$$

因此 $t>0$ 时（即脉冲电场作用后）电子已经跃迁到 ψ_n 态的概率为

$$P_n = |\,C_n(t)\,|^2 = \left(\frac{e\mathscr{E}_0}{\hbar}\right)^2 |\,z_{n1}\,|^2 \tag{8}$$

根据选择定则（$\Delta l=1,\Delta m=0$），终态量子数必须是

$$(nlm)=(n10)$$

即电子只跃迁到各 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

$$\sum_n{}'P_n=\left(\frac{e\mathscr{E}_0}{\hbar}\right)^2\sum_n{}'|z_{n1}|^2$$

$$=\left(\frac{e\mathscr{E}_0}{\hbar}\right)^2\left[\sum_n|z_{n1}|^2-|z_{11}|^2\right] \tag{9}$$

其中

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

$$\sum_n|z_{n1}|^2=\sum_n\langle\psi_1|z|\psi_n\rangle\langle\psi_n|z|\psi_1\rangle$$

$$=\langle\psi_1|z^2|\psi_1\rangle=\frac{1}{3}\langle\psi_1|r^2|\psi_1\rangle=a_0^2 \tag{10}$$

a_0 为 Bohr 半径. 代入式(9)即得

$$\sum_n{}'P_n=(e\mathscr{E}_0a_0/\hbar)^2 \tag{11}$$

电场作用后电子仍留在基态的概率为

$$1-\sum_n{}'P_n=1-(e\mathscr{E}_0a_0/\hbar)^2 \tag{12}$$

13.3 氢原子处于基态,受到脉冲电场

$$\mathscr{E}(t)=\mathscr{E}_0\delta(t)$$

作用,$\mathscr{E}_0$为常数. 求作用后($t>0$)发现氢原子仍处于基态的概率(精确解).

解 基态是球对称的,所求概率显然和电场方向无关,也和自旋无关. 以$\mathscr{E}_0$方向作为 z 轴,电场对原子的作用能可以表示成

$$H'=ez\mathscr{E}(t)=e\mathscr{E}_0z\delta(t) \tag{1}$$

以 H_0 表示自由氢原子的 Hamilton 量,则电场作用过程中总 Hamilton 量为

$$H=H_0+H'=H_0+e\mathscr{E}_0z\delta(t) \tag{2}$$

电子的波函数满足 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t)=(H_0+H')\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{3}$$

初始条件为

$$\psi(t=0^-)=\psi_{100}(r)\equiv\psi_0 \tag{4}$$

为了便于用初等方法求解式(3),我们采取 $\mathscr{E}(t)$ 的下列表示形式:

$$\mathscr{E}(t)=\begin{cases}\mathscr{E}_0/\tau, & 0\leqslant t\leqslant\tau;\\ 0, & t<0,t>\tau,\end{cases}\qquad(\tau\to 0^+)\tag{5}$$

$\mathscr{E}(t)$ 的图形如图 13.3 所示. 注意

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathscr{E}(t)\mathrm{d}t=\mathscr{E}_0\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(t)\mathrm{d}t=\mathscr{E}_0\tag{6}$$

式(5)显然也给出同样的结果. 利用式(5),可以将式(1)等价地表示成

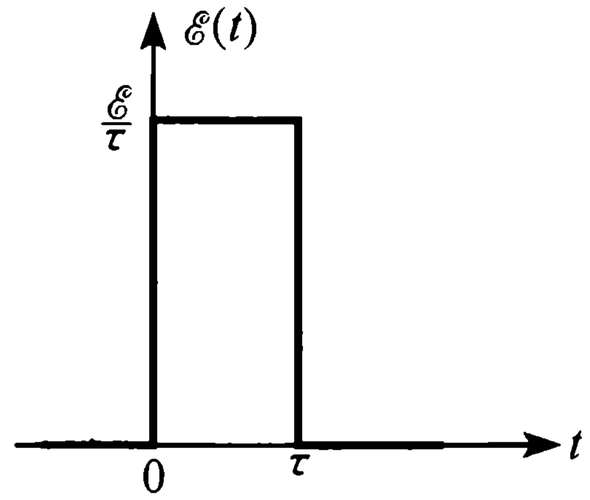


图 13.3

$$H'=\begin{cases}e\mathscr{E}_0 z/\tau, & 0\leqslant t\leqslant\tau\\ 0, & t<0,t>\tau\end{cases}\qquad(\tau\to 0^+)\qquad(1')$$

下面将在相互作用表象中求解方程(3),即令

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\mathrm{e}^{H_0 t/\mathrm{i}\hbar}\phi(\boldsymbol{r},t)\tag{7}$$

代入式(3),并用算符 $\mathrm{e}^{-H_0 t/\mathrm{i}\hbar}$ 左乘之,得到

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi(\boldsymbol{r},t)=\widetilde{H}'\phi(\boldsymbol{r},t)\tag{8}$$

其中

$$\widetilde{H}'=\mathrm{e}^{-H_0 t/\mathrm{i}\hbar}H'\mathrm{e}^{H_0 t/\mathrm{i}\hbar}\tag{9}$$

一般来说,H' 和 H_0 不对易,但因 H' 仅在 $0\leqslant t\leqslant\tau$ 才不为 0,故当 $\tau\to 0^+$ 时

$$\mathrm{e}^{H_0 t/\mathrm{i}\hbar}\to 1$$

(条件是 $H_0\tau/\hbar\ll 1$),因此 $\widetilde{H}'\to H'$,代入式(8)即得

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi(\boldsymbol{r},t)=H'\phi(\boldsymbol{r},t)\tag{10}$$

再利用式(1′),即得

$$t<0,t>\tau,\quad \frac{\partial}{\partial t}\phi(\boldsymbol{r},t)=0$$

$$0\leqslant t\leqslant\tau,\quad \frac{\partial}{\partial t}\phi(\boldsymbol{r},t)=\frac{\mathrm{e}\mathscr{E}_0 z}{\mathrm{i}\hbar\tau}\phi(\boldsymbol{r},t)\tag{11}$$

初始条件(4)等价于

$$\phi(\boldsymbol{r},0)=\phi_0\equiv\psi_{100}(r)\tag{4'}$$

方程(11)满足初始条件的解显然是

$$\phi(\boldsymbol{r},t)=\phi_0\exp\left(\frac{e\mathscr{E}_0 z}{\mathrm{i}\hbar\tau}t\right),\quad 0\leqslant t\leqslant\tau\tag{12}$$

当 $t>\tau$(电场作用以后),$\phi(\boldsymbol{r},t)$不再变化,为

$$\phi(\boldsymbol{r},t)=\phi(\boldsymbol{r},\tau)=\phi_0 e^{-i\kappa z},\kappa=e\mathscr{E}_0/\hbar \tag{13}$$

代入式(7),即得

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=e^{H_0 t/i\hbar}\psi_{100}(r)e^{-i\kappa z},\quad t>0 \tag{14}$$

这是方程(3)的精确解.

$t>0$ 时(电场作用以后)发现电子仍处于基态的概率为

$$P=|\langle\psi_{100}\mid\psi(\boldsymbol{r},t)\rangle|^2=|\langle\psi_{100}\mid e^{-i\kappa z}\psi_{100}\rangle|^2 \tag{15}$$

计算中利用了公式

$$\langle\psi_{100}\mid e^{H_0 t/i\hbar}=\langle\psi_{100}\mid e^{E_1 t/i\hbar}$$

利用基态波函数的具体形式

$$\psi_{100}=(\pi a_0^3)^{-1/2}e^{-r/a_0} \tag{16}$$

容易算出

$$\langle\psi_{100}\mid e^{-i\kappa z}\psi_{100}\rangle=\frac{1}{\pi a_0^3}\int e^{-2r/a_0}e^{-i\kappa r\cos\theta}r^2\,dr d\Omega$$

$$=\frac{4}{a_0^3}\int_0^\infty\cdot\frac{\sin\kappa r}{\kappa r}e^{-2r/a_0}r^2\,dr=\frac{1}{\left(1+\frac{1}{4}\kappa^2a_0^2\right)^2} \tag{17}$$

a_0 为 Bohr 半径. 将上式代入式(15),即得所求概率为

$$P=|\langle\psi_{100}\mid\psi(\boldsymbol{r},t)\rangle|^2=\frac{1}{\left(1+\frac{1}{4}\kappa^2a_0^2\right)^4} \tag{18}$$

如电场很弱,即 $\kappa a_0\ll1$,上式给出

$$P\approx1-\kappa^2a_0^2=1-(e\mathscr{E}_0a_0/\hbar)^2 \tag{19}$$

这正是上题用微扰论求得的结果,$\kappa^2a_0^2$ 为跃迁到各激发态的概率总和.

13.4 有一个二能级体系,Hamilton 量记为 H_0,能级和能量本征态记为 E_1,E_2;ψ_1,ψ_2. 设 $E_1<E_2$. $t\leqslant0$ 时,体系处于状态 ψ_1,$t\geqslant0$ 时,体系受到微扰 H' 作用,设

$$H'_{11}=\alpha,\quad H'_{22}=\beta,\quad H'_{12}=H'_{21}=\gamma$$

求 $t>0$ 时体系处于 ψ_2 态的概率.

解 $t\geqslant0$ 时,体系的 Hamilton 量为 $H=H_0+H'$,其矩阵表示(H_0 表象)为

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

设 H 的本征函数为

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

代入本征方程

$$H\psi_E = E\psi_E \tag{3}$$

得到

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

上式存在非平庸解的条件为

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

由此解出

$$E = \frac{1}{2}[E_1 + \alpha + E_2 + \beta \pm \sqrt{(E_2 + \beta - E_1 - \alpha)^2 + 4\gamma^2}] = E_{\pm} \tag{5}$$

令

$$\omega_1 = \frac{E_1 + \alpha}{\hbar}, \quad \omega_2 = \frac{E_2 + \beta}{\hbar}, \quad \omega = \omega_2 - \omega_1 \tag{6}$$

式(5)可以写成

$$E_{\pm} = \frac{\hbar}{2}(\omega_1 + \omega_2 \pm \sqrt{\omega^2 + 4\gamma^2/\hbar^2}) \tag{5'}$$

当 $E = E_+$，由式(4)求得

$$C_2 = \frac{\hbar}{2\gamma}(\omega + \sqrt{\omega^2 + 4\gamma^2/\hbar^2})C_1$$

取 $C_1 = 1$，即得相应的能量本征函数(未归一化)为

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

当 $E = E_-$，类似地可以求得

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

$t=0$ 时,体系的初始状态为

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

其中

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

因此 $t\geqslant 0$ 时波函数为

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

以式(5′)、(7)、(8)代入上式,即得

$$\psi(t)=\psi_1\left(\cos\frac{\Omega t}{2}+\mathrm{i}\frac{\omega}{\Omega}\sin\frac{\Omega t}{2}\right)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}(\omega_1+\omega_2)t}+\psi_2\left(-\mathrm{i}\frac{2\gamma}{\hbar\Omega}\sin\frac{\Omega t}{2}\right)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}(\omega_1+\omega_2)t} \tag{12}$$

体系处于 ψ_2 态的概率为

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

13.5 上题中,如能级是简并的,令 $E_1=E_2=E_0$. 设微扰矩阵元 $H'_{11}=H'_{22}=0$,$H'_{12}=H'_{21}=\gamma$. 如 $t=0$ 时 $\psi=\psi_1$,求 $\psi(t)$,并和经典共振现象作对比讨论.

解 $t\geqslant 0$ 时,Hamilton 量为(H_0 表象)

$$H=H_0+H'=\begin{bmatrix}E_0 & \gamma\\ \gamma & E_0\end{bmatrix} \tag{1}$$

容易求得 H 的本征值和本征函数为

$$E_+=E_0+\gamma,\quad \psi_{E_+}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1+\psi_2)$$

$$E_-=E_0-\gamma,\quad \psi_{E_-}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1-\psi_2) \tag{2}$$

初始波函数可以表示成

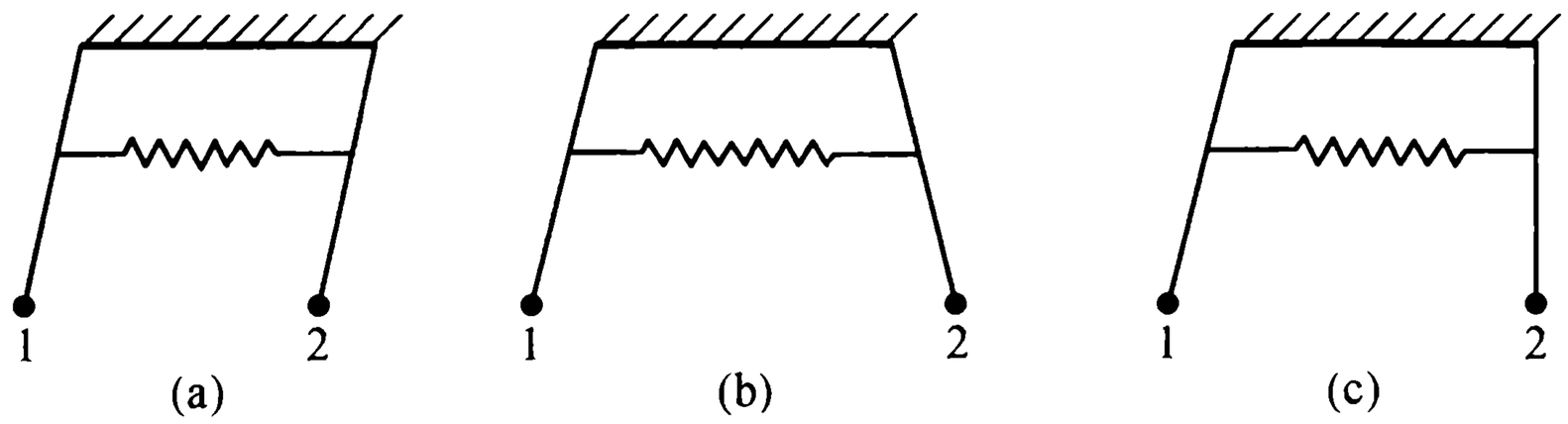
$$\psi(t=0)=\psi_1=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{E_+}+\psi_{E_-}) \tag{3}$$

因此

$$\psi(t)=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{E_+}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_+t/\hbar}+\psi_{E_-}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_-t/\hbar})$$

$$=\left(\psi_1\cos\frac{\gamma t}{\hbar}-\mathrm{i}\psi_2\sin\frac{\gamma t}{\hbar}\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_0t/\hbar} \tag{4}$$

上式表明，由于微扰 H' 的作用，体系将在原来的两个简并态之间振荡. $t=0$ 时，$\psi=\psi_1$，$t=\pi\hbar/2\gamma$，$\psi\sim\psi_2$；再经过同样的时间，体系又回到 ψ_1 态，如此周而复始，循环不已，振荡的周期为 $T=\pi\hbar/\gamma$. 耦合强度 γ 越大，振荡越快，周期 T 越小.



(a)　(b)　(c)

图 13.5

上述量子振荡图像可以和经典耦合摆的振荡对比. 设有两个相同的单摆，用一条很轻的弹簧联结起来，从而形成耦合摆. 图 13.5(a)二者同相($\sim\psi_{E_+}$)，图 13.5(b)二者反相($\sim\psi_{E_-}$)，这两种振荡是稳定的($\sim$定态). 图 13.5(c)所示振荡，相当于开始时摆 1 有角偏离，而摆 2 静止于平衡位置. 此后，由于弹簧的耦合，两摆不断交换能量，来回振荡($\sim\psi(t)$)，这是一种不稳定振荡.

13.6　有一个自旋 1/2，磁矩为 μ，电荷为 0 的粒子，置于磁场 $\boldsymbol{B}$ 中，开始时($t=0$)磁场沿 z 方向，$\boldsymbol{B}=\boldsymbol{B}_0=(0,0,B_0)$，粒子处于 σ_z 的本征态 $\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$，即 $\sigma_z=-1$.

$t>0$ 时再加上沿 x 方向的较弱的磁场 $\boldsymbol{B}_1=(B_1,0,0)$，从而

$$\boldsymbol{B}=\boldsymbol{B}_0+\boldsymbol{B}_1=(B_1,0,B_0)$$

求 $t>0$ 时粒子的自旋态，以及测得自旋“向上”($\sigma_z=1$)的概率.

解　粒子的磁矩算符可以表示成

$$\boldsymbol{\mu}=\mu\boldsymbol{\sigma} \tag{1}$$

$\boldsymbol{\sigma}$ 为 Pauli 自旋算符. 磁场对粒子的作用能为

$$H=-\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{\mu}=-\mu(B_1\sigma_x+B_0\sigma_z) \tag{2}$$

在 σ_z 表象中，H 的矩阵表示为

$$H=-\mu B_1\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}-\mu B_0\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix}=-\mu\begin{bmatrix}B_0&B_1\\B_1&-B_0\end{bmatrix} \tag{2'}$$

以下求 H 的本征值和本征函数. 设本征函数为

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

本征方程为 $H\psi=E\psi$，即

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

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

$$\mu B_0=\hbar\omega_0,\quad \mu B_1=\hbar\omega_1,\quad \sqrt{\omega_0^2+\omega_1^2}=\omega \tag{6}$$

由式(5)容易解出

$$E=\pm\hbar\omega \tag{7}$$

将 E 之值代回式(4),即可求出如下本征函数:

$$\begin{aligned}&E=\hbar\omega, && E=-\hbar\omega\\ &C_1/C_2=-\omega_1/(\omega+\omega_0), && C_1/C_2=\omega_1/(\omega-\omega_0)\end{aligned}$$

$$\psi_+=\begin{pmatrix}-\omega_1\\ \omega+\omega_0\end{pmatrix},\quad \psi_-=\begin{pmatrix}\omega_1\\ \omega-\omega_0\end{pmatrix} \tag{8}$$

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

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

注意 $\psi(t)$ 满足归一化条件

$$\langle\psi(t)\mid\psi(t)\rangle=1$$

在时刻 $t>0$,测得粒子自旋"向上"($\sigma_z=1$)的概率为

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

本题可以视为 13.4 题的一个实例.

13.7　电子在中心力场中运动，能级为 E_{nl}，能量本征态取为 $(H, \boldsymbol{l}^2, \boldsymbol{J}^2, J_z)$ 的共同本征态，记为 ψ_{nljm_j}. 求电偶极自发跃迁选择定则.

解　设电子由能量本征态 ψ_{nljm_j} 跃迁至 $\psi_{n'l'j'm'_j}$，电偶极自发跃迁速率为①

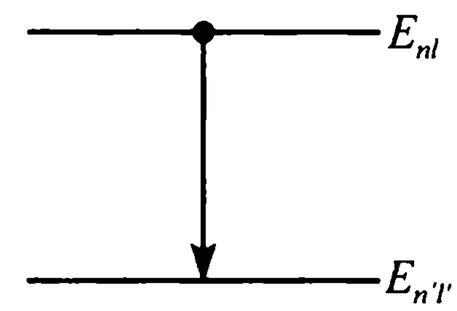


图 13.7

$$A_{n\to n'} = \frac{4}{3}\frac{e^2\omega^3}{\hbar c^3}\,|\,\boldsymbol{r}_{n'n}\,|^2 \tag{1}$$

其中 n、n' 各代表 4 个量子数，$\omega=(E_{nl}-E_{n'l'})/\hbar$. 上式中

$$|\,\boldsymbol{r}_{n'n}\,|^2 = |\,x_{n'n}\,|^2 + |\,y_{n'n}\,|^2 + |\,z_{n'n}\,|^2 \tag{2}$$

三个矩阵元中至少要有一个不等于 0，跃迁才是允许的.

ψ_{nljm_j} 可以表示成

$$\psi_{nljm_j} = R_{nl}(r)\phi_{ljm_j}(\theta,\varphi,s_z) \tag{3}$$

其中 R_{nl} 为径向波函数，ϕ_{ljm_j} 为 $(\boldsymbol{l}^2, \boldsymbol{J}^2, J_z)$ 的共同本征函数，可以分成两类②

$$\phi^A_{jm_j} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}}\begin{pmatrix}\sqrt{l+m+1} & \mathrm{Y}_{lm}\\ \sqrt{l-m} & \mathrm{Y}_{lm+1}\end{pmatrix}$$

$$j = l+\frac{1}{2},\quad m_j = m+\frac{1}{2}$$

$$\phi^B_{jm_j} = \frac{1}{\sqrt{2l'+1}}\begin{pmatrix}-\sqrt{l'-m} & \mathrm{Y}_{l'm}\\ \sqrt{l'+m+1} & \mathrm{Y}_{l'm+1}\end{pmatrix}$$

$$j = l'-\frac{1}{2},\quad m_j = m+\frac{1}{2} \tag{4}$$

利用式(3)，矩阵元 $\boldsymbol{r}_{n'n}$ 可以分离变量地表示成

$$\boldsymbol{r}_{n'n} = \left\langle \phi_{l'j'm'_j}\,\middle|\,\frac{\boldsymbol{r}}{r}\,\middle|\,\phi_{ljm_j}\right\rangle \int_0^\infty R_{n'l'}R_{nl}r^3\,dr \tag{5}$$

其中径向积分通常与选择定则无关.

利用公式(见题 6.21)

$$2\frac{\boldsymbol{r}}{r} = \boldsymbol{\sigma}\sigma_r + \sigma_r\boldsymbol{\sigma}\quad(\sigma_r = \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}/r) \tag{6}$$

以及 6.33 题证明的公式

$$\sigma_r\phi^A_{jm_j} = -\phi^B_{jm_j},\quad \sigma_r\phi^B_{jm_j} = -\phi^A_{jm_j} \tag{7}$$

---

① 参看曾谨言. 量子力学. 卷Ⅰ. 北京：科学出版社，1997. §12.3.

② 参看曾谨言. 量子力学. 卷Ⅰ. 北京：科学出版社，1997. §8.2.

即得

$$\left\langle \phi^B_{j'm'_j} \mid \frac{\boldsymbol{r}}{r} \mid \phi^B_{jm_j} \right\rangle = \left\langle \phi^A_{j'm'_j} \mid \sigma_r \frac{\boldsymbol{r}}{r} \sigma_r \mid \phi^A_{jm_j} \right\rangle$$

$$= \left\langle \phi^A_{j'm'_j} \mid \frac{\boldsymbol{r}}{r} \mid \phi^A_{jm_j} \right\rangle \quad (\text{利用了 } \sigma_r^2 = 1) \tag{8}$$

类似地,可得

$$\left\langle \phi^B_{j'm'_j} \mid \frac{\boldsymbol{r}}{r} \mid \phi^A_{jm_j} \right\rangle = \left\langle \phi^A_{j'm'_j} \mid \frac{\boldsymbol{r}}{r} \mid \phi^B_{jm_j} \right\rangle \tag{9}$$

再利用式(6),可得

$$-2\left\langle \phi^A_{j'm'_j} \mid \frac{\boldsymbol{r}}{r} \mid \phi^A_{jm_j} \right\rangle = \langle \phi^A_{j'm'_j} \mid \boldsymbol{\sigma} \mid \phi^B_{jm_j} \rangle + \langle \phi^B_{j'm'_j} \mid \boldsymbol{\sigma} \mid \phi^A_{jm_j} \rangle \tag{10}$$

$$-2\left\langle \phi^B_{j'm'_j} \mid \frac{\boldsymbol{r}}{r} \mid \phi^A_{jm_j} \right\rangle = \langle \phi^A_{j'm'_j} \mid \boldsymbol{\sigma} \mid \phi^A_{jm_j} \rangle + \langle \phi^B_{j'm'_j} \mid \boldsymbol{\sigma} \mid \phi^B_{jm_j} \rangle \tag{11}$$

利用 Pauli 矩阵 $\boldsymbol{\sigma}$ 的具体形式

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

以及 Y_{lm} 的正交归一性和式(4),就可算出这些矩阵元. 这样计算较之直接利用 Y_{lm} 的递推公式要方便得多,特别是有利于确定选择定则. 但是定性地利用 Y_{lm} 的递推公式还是有益的,它们是

$$\frac{z}{r} Y_{lm} = \cos\theta Y_{lm} \to Y_{l+1,m}, \quad Y_{l-1,m}$$

$$\frac{x \pm \mathrm{i}y}{r} Y_{lm} = \sin\theta \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}\varphi} Y_{lm} \to Y_{l+1,m\pm1}, \quad Y_{l-1,m\pm1} \tag{12}$$

由此可见,量子数 l 的选择定则是 $\Delta l = \pm 1$.

下面分类讨论.

1° $E_{nl} \to E_{n'l'}, \quad l' = l+1, \quad \Delta l = l' - l = 1$

(a) $\phi^A \to \phi^A$ 型

$$j = l + \frac{1}{2}, \quad j' = l' + \frac{1}{2} = j + 1$$

$$\Delta j = j' - j = 1$$

$\phi^A_{jm_j}$ 中球谐函数的阶为 l;$\phi^A_{j'm'_j}$ 中,阶为$(l+1)$. $\phi^B_{jm_j}$ 中,阶为$(l+1)$;$\phi^B_{j'm'_j}$ 中,阶为$(l+2)$.

$\boldsymbol{\sigma}$ 作用的结果. 并不改变球谐函数的阶. 属于不同阶的球谐函数是互相正交的. 因此式(10)右端第二项为 0,从而

$$\left\langle \phi^A_{j'm_j'} \left| \frac{\boldsymbol{r}}{r} \right| \phi^A_{jm_j} \right\rangle$$

$$=-\frac{1}{2}\langle \phi^A_{j'm_j'} \mid \boldsymbol{\sigma} \mid \phi^B_{jm_j} \rangle$$

$$=-\frac{1}{2(2l+3)}\int \mathrm{d}\Omega \begin{pmatrix} \sqrt{l+m'+2}\,\mathrm{Y}_{l+1,m'} \\ \sqrt{l-m'+1}\,\mathrm{Y}_{l+1,m'+1} \end{pmatrix}^{+} \boldsymbol{\sigma} \begin{pmatrix} -\sqrt{l-m+1}\,\mathrm{Y}_{l+1,m} \\ \sqrt{l+m+2}\,\mathrm{Y}_{l+1,m+1} \end{pmatrix}$$

容易看出，仅当 $m'=m$、$m\pm1$ 时，上式才不等于 0，故 m_j 的选择定则为

$$\Delta m_j = m_j' - m_j = 0, \pm 1 \tag{13}$$

当 $\Delta m_j=0$，

$$\left\langle \phi^A_{j'm_j} \left| \frac{x}{r} \right| \phi^A_{jm_j} \right\rangle = 0$$

$$\left\langle \phi^A_{j'm_j} \left| \frac{y}{r} \right| \phi^A_{jm_j} \right\rangle = 0$$

$$\left\langle \phi^A_{j'm_j} \left| \frac{z}{r} \right| \phi^A_{jm_j} \right\rangle = \frac{1}{2l+3}\sqrt{(l+m+2)(l-m+1)}$$

当 $\Delta m_j=1$，

$$\left\langle \phi^A_{j'm_j+1} \left| \frac{x}{r} \right| \phi^A_{jm_j} \right\rangle = \mathrm{i}\left\langle \phi^A_{j'm_j+1} \left| \frac{y}{r} \right| \phi^A_{jm_j} \right\rangle$$

$$=-\frac{1}{2(2l+3)}\sqrt{(l+m+3)(l+m+2)} \tag{14}$$

$$\left\langle \phi^A_{j'm_j+1} \left| \frac{z}{r} \right| \phi^A_{jm_j} \right\rangle = 0$$

当 $\Delta m_j=-1$，

$$\left\langle \phi^A_{j'm_j-1} \left| \frac{x}{r} \right| \phi^A_{jm_j} \right\rangle = -\mathrm{i}\left\langle \phi^A_{j'm_j-1} \left| \frac{y}{r} \right| \phi^A_{jm_j} \right\rangle$$

$$=\frac{1}{2(2l+3)}\sqrt{(l-m+2)(l-m+1)}$$

$$\left\langle \phi^A_{j'm_j-1} \left| \frac{z}{r} \right| \phi^A_{jm_j} \right\rangle = 0$$

(b) $\phi^B \to \phi^B$ 型

$$j = l-\frac{1}{2}, \quad j' = l'-\frac{1}{2} = j+1$$

$$\Delta j = j'-j = 1$$

根据式(8)，只需将情况(a)所得公式中 l 换成 $(l-1)$，即可得到相应的矩阵元公式. m_j 的选择定则仍为 $\Delta m_j=0,\pm1$.

当 $\Delta m_j=0$,

$$\left\langle \phi^B_{j'm_j} \left| \frac{z}{r} \right| \phi^B_{jm_j} \right\rangle = \frac{1}{2l+1}\sqrt{(l+m+1)(l-m)}$$

$\frac{x}{r},\frac{y}{r}$矩阵元为 0.

当 $\Delta m_j=1$,

$$\begin{aligned}\left\langle \phi^B_{j'm_j+1} \left| \frac{x}{r} \right| \phi^B_{jm_j} \right\rangle &= \mathrm{i}\left\langle \phi^B_{j'm_j+1} \left| \frac{y}{r} \right| \phi^B_{jm_j} \right\rangle \\ &= -\frac{1}{2(2l+1)}\sqrt{(l+m+2)(l+m+1)}\end{aligned} \tag{15}$$

$\frac{z}{r}$矩阵元为 0.

当 $\Delta m_j=-1$,

$$\begin{aligned}\left\langle \phi^B_{j'm_j-1} \left| \frac{x}{r} \right| \phi^B_{jm_j} \right\rangle &= -\mathrm{i}\left\langle \phi^B_{j'm_j-1} \left| \frac{y}{r} \right| \phi^B_{jm_j} \right\rangle \\ &= \frac{1}{2(2l+1)}\sqrt{(l-m+1)(l-m)}\end{aligned}$$

$\frac{z}{r}$矩阵元为 0.

(c) $\phi^A\to\phi^B$ 型

$$j=l+\frac{1}{2},\quad j'=l'-\frac{1}{2}=l+\frac{1}{2}=j,\quad \Delta j=j'-j=0$$

根据式(11),取

$$j=j'=l+\frac{1}{2}$$

利用球谐函数的正交性,易得 m_j 的选择定则仍为 $\Delta m_j=0,\pm1$. $\boldsymbol{r}/r$ 的矩阵元中不等于 0 的是

$$\Delta m_j=0,\left\langle \phi^B_{jm_j} \left| \frac{z}{r} \right| \phi^A_{jm_j} \right\rangle = -\frac{2m+1}{(2l+1)(2l+3)}$$

$$\Delta m_j=1,\left\langle \phi^B_{jm_j+1} \left| \frac{x}{r} \right| \phi^A_{jm_j} \right\rangle = \mathrm{i}\left\langle \phi^B_{jm_j+1} \left| \frac{y}{r} \right| \phi^A_{jm_j} \right\rangle = -\frac{\sqrt{(l+m+2)(l-m)}}{(2l+1)(2l+3)}$$

$$\begin{aligned}\Delta m_j=-1,\left\langle \phi^B_{jm_j-1} \left| \frac{x}{r} \right| \phi^A_{jm_j} \right\rangle &= -\mathrm{i}\left\langle \phi^B_{jm_j-1} \left| \frac{y}{r} \right| \phi^A_{jm_j} \right\rangle \\ &= -\frac{\sqrt{(l+m+1)(l-m+1)}}{(2l+1)(2l+3)}\end{aligned} \tag{16}$$

(d) $\phi^B \to \phi^A$ 型

$$j = l - \frac{1}{2}, \quad j' = l' + \frac{1}{2} = j + 2$$

$$\Delta j = j' - j = 2$$

由式(9)及(11)得到

$$\left\langle \phi^A_{j'm'_j} \left| \frac{\boldsymbol{r}}{r} \right| \phi^B_{jm_j} \right\rangle = -\frac{1}{2}\langle \phi^A_{j'm'_j} \mid \boldsymbol{\sigma} \mid \phi^A_{jm_j} \rangle - \frac{1}{2}\langle \phi^B_{j'm'_j} \mid \boldsymbol{\sigma} \mid \phi^B_{jm_j} \rangle$$

球谐函数的阶，$\phi^A_{j'm'_j}$ 中为$(l+1)$(即 l')，$\phi^A_{jm'_j}$ 中为$(l-1)\left(\text{即 } j-\frac{1}{2}\right)$，$\phi^B_{j'm'_j}$ 中为$(l+2)\left(\text{即 } j'+\frac{1}{2}\right)$，$\phi^B_{jm_j}$ 中为 $l\left(\text{即 } j+\frac{1}{2}\right)$. 由球谐函数的正交性，易见上式右端等于 0. 故 $\Delta j=2$ 的跃迁是禁戒的.

总结以上结果，跃迁 $E_{nl} \to E_{n'l+1}(\Delta l=1)$ 的选择定则为

$$\boxed{\Delta j = 1, 0;\ \Delta m_j = 0, \pm 1} \tag{17}$$

$\Delta j=1$ 相应于 $\phi^A \to \phi^A$ 型或 $\phi^B \to \phi^B$ 型. $\Delta j=0$ 相应于 $\phi^A \to \phi^B$ 型，由于是从“$\boldsymbol{l}, \boldsymbol{s}$ 平行”状态跃迁到“$\boldsymbol{l}, \boldsymbol{s}$ 反平行”状态，虽然量子数 l 增加 1，总角动量量子数 j 不变.

2°　$E_{nl} \to E_{n'l'}, \quad l' = l-1, \quad \Delta l = l' - l = -1$

计算类似于 **1°**，选择定则为

$$\Delta j = -1, 0; \quad \Delta m_j = 0, \pm 1 \tag{18}$$

$\Delta j=-1$ 相应于 $\phi^A \to \phi^A$ 型或 $\phi^B \to \phi^B$ 型. $\Delta j=0$ 相应于 $\phi^B \to \phi^A$ 型.

3°　如电子原来处于能级 E_{nl} 上角动量状态 $\phi^A_{jm_j}$ 中，如计算跃迁到能级 $E_{n'l+1}$ 的总概率，则需将矩阵元 $\left\langle \phi_{j'm'_j} \left| \frac{\boldsymbol{r}}{r} \right| \phi^A_{jm_j} \right\rangle$ 的绝对值平方对一切可能的终态($n'l'$ 固定，$l'=l+1$)求和. 利用上面得到的公式，容易算出

$$\sum_{j'm'_j} \left| \left\langle \phi_{j'm'_j} \left| \frac{\boldsymbol{r}}{r} \right| \phi^A_{jm_j} \right\rangle \right|^2$$

$$= \sum_{m'_j} \left| \left\langle \phi^A_{j+1,m'_j} \left| \frac{\boldsymbol{r}}{r} \right| \phi^A_{jm_j} \right\rangle \right|^2 + \sum_{m'_j} \left| \left\langle \phi^B_{jm'_j} \left| \frac{\boldsymbol{r}}{r} \right| \phi^A_{jm_j} \right\rangle \right|^2$$

$$= \frac{l+1}{2l+1} \tag{19}$$

类似地，如电子原来处于能级 E_{nl} 上 $\phi^B_{jm_j}$ 态中，计算其跃迁到能级 $E_{n'l+1}$ 的总概率时，仍有

$$\sum_{j'm'_j} \left| \left\langle \phi_{j'm'_j} \left| \frac{\boldsymbol{r}}{r} \right| \phi^B_{jm_j} \right\rangle \right|^2 = \sum_{m'_j} \left| \left\langle \phi^B_{j+1,m'_j} \left| \frac{\boldsymbol{r}}{r} \right| \phi^B_{jm_j} \right\rangle \right|^2 = \frac{l+1}{2l+1} \tag{20}$$

亦即从能级 E_{nl} 上任何一个能量本征态跃迁到能级 $E_{n'l+1}$ 的总概率是一样的. 不难验证,如不考虑自旋自由度,这个概率仍不变,原因是:电偶极跃迁的作用和自旋无关.

13.8 不考虑自旋,原子中的电子状态可以表示为

$$\psi_{nlm} = R_{nl}(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$$

对于初态为 s 态(能级 E_{nl},$l=0$),终态为 p 态(能级 $E_{n'l'}$,$l'=1$)的电偶极自发跃迁,求终态磁量子数 $m=1,0,-1$ 的分支比.

解 初态波函数为

$$\psi_{n00} = R_{n0}(r)\mathrm{Y}_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}R_{n0}(r) \tag{1}$$

终态波函数为

$$\psi_{n'1m} = R_{n'1}(r)\mathrm{Y}_{1m}(\theta,\varphi), \quad m=1,0,-1 \tag{2}$$

由于三种终态的径向波函数相同,跃迁分支比等于电偶极矩的矩阵元$\langle 1m|\boldsymbol{r}|00\rangle$的绝对值平方之比. 由于

$$\begin{aligned}\boldsymbol{r} &= x\boldsymbol{e}_1 + y\boldsymbol{e}_2 + z\boldsymbol{e}_3 \\ &= r\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}(\mathrm{Y}_{1-1}-\mathrm{Y}_{11})\boldsymbol{e}_1 + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(\mathrm{Y}_{11}+\mathrm{Y}_{1-1})\boldsymbol{e}_2 + \mathrm{Y}_{10}\boldsymbol{e}_3\right]\end{aligned} \tag{3}$$

利用 Y_{lm} 的正交归一性,容易求出

$$|\langle 10|\boldsymbol{r}|00\rangle|^2 = \left|\frac{1}{\sqrt{3}}r\boldsymbol{e}_3\right|^2 = \frac{r^2}{3}$$

$$|\langle 11|\boldsymbol{r}|00\rangle|^2 = \left|\frac{r}{\sqrt{6}}(\mathrm{i}\boldsymbol{e}_2-\boldsymbol{e}_1)\right|^2 = \frac{r^2}{6}\times 2 = \frac{r^2}{3}$$

$$|\langle 1-1|\boldsymbol{r}|00\rangle|^2 = \left|\frac{r}{\sqrt{6}}(\mathrm{i}\boldsymbol{e}_2+\boldsymbol{e}_1)\right|^2 = \frac{r^2}{6}\times 2 = \frac{r^2}{3} \tag{4}$$

由此可见,终态磁量子数 $m=1,0,-1$ 的分支比为 1∶1∶1,即由 s 态跃迁到三种 p 态的概率相等.

13.9 同上题,设能级只取决于主量子数 n. 设初态为(nlm),终态为$(n'l'm')$,n、n'、l、m 均已给定.

(a) 求跃迁到 l' 相同,m' 不同的各个终态的分支比;

(b) 求 l' 不同的各个终态(对 m' 求和)的分支比.

解 令 $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{r}/r$,则有

$$n_x \pm \mathrm{i}n_y = \frac{1}{r}(x \pm \mathrm{i}y) = \sin\theta \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}\varphi}$$

$$n_z = z/r = \cos\theta \tag{1}$$

$$\boldsymbol{r}/r = \boldsymbol{n} = n_x \boldsymbol{e}_1 + n_y \boldsymbol{e}_2 + n_z \boldsymbol{e}_3$$

$$= \frac{1}{2}(n_x + \mathrm{i}n_y)(\boldsymbol{e}_1 - \mathrm{i}\boldsymbol{e}_2) + \frac{1}{2}(n_x - \mathrm{i}n_y)(\boldsymbol{e}_1 + \mathrm{i}\boldsymbol{e}_2) + n_z \boldsymbol{e}_3 \tag{2}$$

利用 Y_{lm} 的递推公式

$$n_z \mathrm{Y}_{lm} = \cos\theta \mathrm{Y}_{lm}(\theta, \varphi)$$

$$= \left[\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+3)(2l+1)}\right]^{\frac{1}{2}} \mathrm{Y}_{l+1,m} + \left[\frac{(l+m)(l-m)}{(2l-1)(2l+1)}\right]^{\frac{1}{2}} \mathrm{Y}_{l-1,m}$$

$$(n_x \pm \mathrm{i}n_y)\mathrm{Y}_{lm} = \sin\theta \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}\varphi} \mathrm{Y}_{lm}(\theta, \varphi)$$

$$= \mp \left[\frac{(l \pm m + 2)(l \pm m + 1)}{(2l+3)(2l+1)}\right]^{\frac{1}{2}} \mathrm{Y}_{l+1, m\pm 1}$$

$$\pm \left[\frac{(l \mp m)(l \mp m - 1)}{(2l-1)(2l+1)}\right]^{\frac{1}{2}} \mathrm{Y}_{l-1, m\pm 1} \tag{3}$$

易见 $\boldsymbol{n}$(即 $\boldsymbol{r}/r$)的矩阵元中不等于 0 者为

$$\langle l \pm 1, m \mid n_z \mid lm \rangle, \langle l \pm 1, m+1 \mid (n_x + \mathrm{i}n_y) \mid lm \rangle,$$

$$\langle l \pm 1, m-1 \mid (n_x - \mathrm{i}n_y) \mid lm \rangle.$$

(a) 终态 $l' = l+1$,

$m' = m$,

$$|\langle l+1, m \mid \boldsymbol{n} \mid lm \rangle|^2 = \frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+3)(2l+1)} \tag{4}$$

$m' = m \pm 1$,

$$|\langle l+1, m\pm 1 \mid \boldsymbol{n} \mid lm \rangle|^2 = \frac{(l \pm m + 2)(l \pm m + 1)}{2(2l+3)(2l+1)}$$

$$\sum_{m'} |\langle l+1, m' \mid \boldsymbol{n} \mid lm \rangle|^2 = \frac{l+1}{2l+1} \tag{5}$$

所以跃迁到终态 $m' = m+1, m, m-1$ 的分支比为

$$(l+m+2)(l+m+1) : 2(l+m+1)(l-m+1) :$$

$$(l-m+2)(l-m+1)$$

例如初态 $l = m = 0$,终态 $l' = 1$,则 $m' = 1, 0, -1$ 的分支比为 2 : 2 : 2,此即上题结果.

(b) 终态 $l' = l-1$,

$m' = m$,

$$|\langle l-1,m\,|\,\boldsymbol{n}\,|\,lm\rangle|^2=\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)} \tag{6}$$

$m'=m\pm1$,

$$|\langle l-1,m\pm1\,|\,\boldsymbol{n}\,|\,lm\rangle|^2=\frac{(l\mp m)(l\mp m-1)}{2(2l+1)(2l-1)}$$

$$\sum_{m'}|\langle l-1,m'\,|\,\boldsymbol{n}\,|\,lm\rangle|^2=\frac{l}{2l+1} \tag{7}$$

所以跃迁到终态 $m'=m+1,m,m-1$ 的分支比为

$$(l-m)(l-m-1):2(l+m)(l-m):(l+m)(l+m-1)$$

式(5)和(7)给出终态 $l'=l+1,l-1$ 分支比为

$$(l+1):l \tag{8}$$

注意这个分支比和初态磁量子数 m 无关. 跃迁到 $l'=l+1$ 或 $l'=l-1$ 态的概率(对 m'求和)也与初态磁量子数 m 无关.

另外,考虑到选择定则 $\Delta l=l'-l=\pm1$,由式(5),(7)即得

$$\sum_{l',m'}|\langle l'm'\,|\,\boldsymbol{n}\,|\,lm\rangle|^2=1 \tag{9}$$

这个结果可以利用 Y_{lm} 的正交归一性和完备性公式

$$\sum_{l',m'}|\,l'm'\rangle\langle l'm'\,|=1 \tag{10}$$

直接导出,如下:

$$\sum_{l',m'}|\langle l'm'\,|\,\boldsymbol{n}\,|\,lm\rangle|^2$$

$$=\sum_{l',m'}\langle lm\,|\,\boldsymbol{n}\,|\,l'm'\rangle\cdot\langle l'm'\,|\,\boldsymbol{n}\,|\,lm\rangle$$

$$=\langle lm\,|\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{n}\,|\,lm\rangle=\langle lm\,|\,lm\rangle=1$$

13.10 以平面线偏振光射向处于基态的氢原子,造成电子能级跃迁 $1s\to2p$. 考虑自旋,但忽略 $2p_{1/2}$和 $2p_{3/2}$的能量差. 设基态电子自旋"向上"($s_z=\hbar/2$).

(a)求终态为 $2p_{3/2}$和 $2p_{1/2}$的分支比,它与入射光的偏振方向无关. (b)设入射光的电场沿 z 方向偏振,求终态为 $2p_{3/2}$时

$$m_j=\frac{3}{2},\quad\frac{1}{2},\quad-\frac{1}{2},\quad-\frac{3}{2}$$

的分支比. (c)设光沿 x 方向入射,为非偏振光,求终态为 $2p_{3/2}$时各 m_j 态的分支比.

解　(a) 以$\mathscr{E}$表示入射光的电场. 以$|i\rangle$表示电子的初态，$|f\rangle$表示终态，在电偶极跃迁中，跃迁概率和$|\langle f|\mathscr{E}\cdot\boldsymbol{r}|i\rangle|^2$成正比. 对于各终态来说，径向波函数相同，因此，讨论分支比时可以不管矩阵元中的径向积分，而只考虑波函数的角动量部分. $(\boldsymbol{l}^2, l_z)$的共同本征态记为$|lm\rangle$；s_z本征态记为$\left|\frac{1}{2}\right\rangle, \left|-\frac{1}{2}\right\rangle$；$(\boldsymbol{l}^2, \boldsymbol{J}^2, J_z)$的共同本征态记为$|ljm_j\rangle$. 后者的非耦合角动量表象展开式为

初态：$l=m=0, j=\frac{1}{2}, m_j=s_z=\frac{1}{2}$

$$|i\rangle=\left|0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle=|0\ 0\rangle\left|\frac{1}{2}\right\rangle\Rightarrow \mathrm{Y}_{00}\alpha \tag{1}$$

终态：$l=1$，　$j=l\pm\frac{1}{2}=\frac{3}{2}, \frac{1}{2}$，　$m_j=\pm\frac{3}{2}, \pm\frac{1}{2}$.

$j=\frac{3}{2}$，共有 4 种状态，相应于$m_j=\frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}$，

$$\left|1\ \frac{3}{2}\ \frac{3}{2}\right\rangle=|\ 11\rangle\left|\frac{1}{2}\right\rangle\Rightarrow \mathrm{Y}_{11}\alpha$$

$$\left|1\ \frac{3}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}|\ 11\rangle\left|-\frac{1}{2}\right\rangle+\sqrt{\frac{2}{3}}|\ 10\rangle\left|\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$\Rightarrow\frac{1}{\sqrt{3}}\mathrm{Y}_{11}\beta+\sqrt{\frac{2}{3}}\mathrm{Y}_{10}\alpha$$

$$\left|1\ \frac{3}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle=\sqrt{\frac{2}{3}}|\ 10\rangle\left|-\frac{1}{2}\right\rangle+\frac{1}{\sqrt{3}}|\ 1-1\rangle\left|\frac{1}{2}\right\rangle \tag{2}$$

$$\Rightarrow\sqrt{\frac{2}{3}}\mathrm{Y}_{10}\beta+\frac{1}{\sqrt{3}}\mathrm{Y}_{1-1}\alpha$$

$$\left|1\ \frac{3}{2}-\frac{3}{2}\right\rangle=|\ 1-1\rangle\left|-\frac{1}{2}\right\rangle\Rightarrow \mathrm{Y}_{1-1}\beta$$

$j=\frac{1}{2}$，共有 2 种状态，相应于$m_j=\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$，

$$\left|1\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle=\sqrt{\frac{2}{3}}|\ 11\rangle\left|-\frac{1}{2}\right\rangle-\frac{1}{\sqrt{3}}|\ 10\rangle\left|\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$\Rightarrow\sqrt{\frac{2}{3}}\mathrm{Y}_{11}\beta-\frac{1}{\sqrt{3}}\mathrm{Y}_{10}\alpha$$

$$\left|1\ \frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}|\ 10\rangle\left|-\frac{1}{2}\right\rangle-\sqrt{\frac{2}{3}}|\ 1-1\rangle\left|\frac{1}{2}\right\rangle \tag{3}$$

$$\Rightarrow\frac{1}{\sqrt{3}}\mathrm{Y}_{10}\beta-\sqrt{\frac{2}{3}}\mathrm{Y}_{1-1}\alpha$$

式(2)中,第一式可以直接写出,其余三式可用算符$(J_x-\mathrm{i}J_y)$逐次作用于第一式而得出.式(3)中,第一式可以利用式(2)以及正交条件

$$\left\langle 1\ \frac{3}{2}\ \frac{1}{2}\middle|1\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle=0$$

而得出,再用$(J_x-\mathrm{i}J_y)$作用于第一式,得出第二式.

由于初态自旋状态为α,计算矩阵元$\langle f|\boldsymbol{r}|i\rangle$时,有贡献的只是终态波函数中含有$\alpha$的项.利用公式

$$\begin{aligned}\boldsymbol{r}&=x\boldsymbol{e}_1+y\boldsymbol{e}_2+z\boldsymbol{e}_3\\&=r\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}(\mathrm{Y}_{1-1}-\mathrm{Y}_{11})\boldsymbol{e}_1+\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(\mathrm{Y}_{1-1}+\mathrm{Y}_{11})\boldsymbol{e}_2+\mathrm{Y}_{10}\boldsymbol{e}_3\right]\end{aligned}\tag{4}$$

容易求出

$$\begin{aligned}\left\langle 1\ \frac{3}{2}\ \frac{3}{2}\mid\boldsymbol{r}\mid i\right\rangle&=\frac{r}{\sqrt{6}}(-\boldsymbol{e}_1+\mathrm{i}\boldsymbol{e}_2)\\\left\langle 1\ \frac{3}{2}\ \frac{1}{2}\mid\boldsymbol{r}\mid i\right\rangle&=\frac{\sqrt{2}}{3}r\boldsymbol{e}_3\\\left\langle 1\ \frac{3}{2}-\frac{1}{2}\mid\boldsymbol{r}\mid i\right\rangle&=\frac{\sqrt{2}}{6}r(\boldsymbol{e}_1+\mathrm{i}\boldsymbol{e}_2)\\\left\langle 1\ \frac{3}{2}-\frac{3}{2}\mid\boldsymbol{r}\mid i\right\rangle&=0\\\left\langle 1\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\mid\boldsymbol{r}\mid i\right\rangle&=-\frac{r}{3}\boldsymbol{e}_3\\\left\langle 1\ \frac{1}{2}-\frac{1}{2}\mid\boldsymbol{r}\mid i\right\rangle&=-\frac{r}{3}(\boldsymbol{e}_1+\mathrm{i}\boldsymbol{e}_2)\end{aligned}\tag{5}$$

令

$$\boldsymbol{\mathscr{E}}=\mathscr{E}_x\boldsymbol{e}_1+\mathscr{E}_y\boldsymbol{e}_2+\mathscr{E}_z\boldsymbol{e}_3\tag{6}$$

即得

$$\begin{aligned}\left|\left\langle 1\ \frac{3}{2}\ \frac{3}{2}\mid\boldsymbol{\mathscr{E}}\cdot\boldsymbol{r}\mid i\right\rangle\right|^2&=\frac{1}{6}r^2(\mathscr{E}_x^2+\mathscr{E}_y^2)\\\left|\left\langle 1\ \frac{3}{2}\ \frac{1}{2}\mid\boldsymbol{\mathscr{E}}\cdot\boldsymbol{r}\mid i\right\rangle\right|^2&=\frac{2}{9}r^2\mathscr{E}_z^2\\\left|\left\langle 1\ \frac{3}{2}-\frac{1}{2}\mid\boldsymbol{\mathscr{E}}\cdot\boldsymbol{r}\mid i\right\rangle\right|^2&=\frac{1}{18}r^2(\mathscr{E}_x^2+\mathscr{E}_y^2)\\\left|\left\langle 1\ \frac{3}{2}-\frac{3}{2}\mid\boldsymbol{\mathscr{E}}\cdot\boldsymbol{r}\mid i\right\rangle\right|^2&=0\\\left|\left\langle 1\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\mid\boldsymbol{\mathscr{E}}\cdot\boldsymbol{r}\mid i\right\rangle\right|^2&=\frac{1}{9}r^2\mathscr{E}_z^2\end{aligned}$$

$$\left|\left\langle 1\ \frac{1}{2}-\frac{1}{2}\mid \mathscr{E}\cdot\boldsymbol{r}\mid i\right\rangle\right|^2=\frac{1}{9}r^2(\mathscr{E}_x^2+\mathscr{E}_y^2) \tag{7}$$

除共同的常数因子外，跃迁到 $2p_{3/2}$ 态的总概率

$$W_{3/2}\propto\sum_{m_j}\left|\left\langle 1\ \frac{3}{2}m_j\mid \mathscr{E}\cdot\boldsymbol{r}\mid i\right\rangle\right|^2=\frac{2}{9}r^2\mathscr{E}^2 \tag{8}$$

跃迁到 $2p_{1/2}$ 态的总概率

$$W_{1/2}\propto\sum_{m_j}\left|\left\langle 1\ \frac{1}{2}m_j\mid \mathscr{E}\cdot\boldsymbol{r}\mid i\right\rangle\right|^2=\frac{1}{9}r^2\mathscr{E}^2 \tag{9}$$

二者均和入射光的偏振方向无关. 分支比为

$$W_{3/2}:W_{1/2}=2:1 \tag{10}$$

（b）入射光电场沿 z 方向偏振，这时

$$\mathscr{E}_x=0,\quad \mathscr{E}_y=0,\quad \mathscr{E}_z=\mathscr{E}$$

由式(7)易见，当终态为 $2p_{3/2}$ 时 $m_j=\frac{3}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2},-\frac{3}{2}$ 的分支比为 $0:1:0:0$，即终态只能是 $(ljm_j)=\left(1\ \frac{3}{2}\ \frac{1}{2}\right)$. 这个结论可以直接利用选择定则 $\Delta m_s=0,\Delta m=0,\Delta m_j=0$（由于 z 和 J_z 对易）得出.

（c）当入射光为沿 x 方向入射的非偏振光时，

$$\mathscr{E}_x=0,\quad \langle\mathscr{E}_y^2\rangle=\langle\mathscr{E}_z^2\rangle=\frac{1}{2}\mathscr{E}^2$$

由式(7)易得，终态为 $2p_{3/2}$ 时，$m_j=\frac{3}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2},-\frac{3}{2}$ 的分支比为

$$\frac{1}{6}:\frac{2}{9}:\frac{1}{18}:0=3:4:1:0$$

13.11　用沿正 z 方向传播的右旋圆偏振光照射原子，造成原子中电子的受激跃迁. 求选择定则.

解　右旋偏振光中的电场 $\mathscr{E}$ 的旋转方向符合右手螺旋法则. 因波长远大于原子半径，可以略去电场的空间变化（相当于只考虑电偶极跃迁）. 如以 $2\mathscr{E}_0$ 表示光波电场的振幅，则电场的时间变化为

$$\begin{aligned}
\mathscr{E}_x(t)&=2\mathscr{E}_0\cos\omega t=\mathscr{E}_0e^{i\omega t}+\mathscr{E}_0e^{-i\omega t}\\
\mathscr{E}_y(t)&=2\mathscr{E}_0\sin\omega t=-i\mathscr{E}_0e^{i\omega t}+i\mathscr{E}_0e^{-i\omega t}\\
\mathscr{E}_z(t)&=0\\
\mathscr{E}(t)&=\boldsymbol{e}_1\mathscr{E}_x(t)+\boldsymbol{e}_2\mathscr{E}_y(t)
\end{aligned}$$

$$=(\boldsymbol{e}_1-\mathrm{i}\boldsymbol{e}_2)\mathscr{E}_0\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}+(\boldsymbol{e}_1+\mathrm{i}\boldsymbol{e}_2)\mathscr{E}_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \tag{1}$$

光波对原子的作用能为

$$H'=e\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\mathscr{E}}(t)=(x-\mathrm{i}y)e\mathscr{E}_0\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}+(x+\mathrm{i}y)e\mathscr{E}_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \tag{2}$$

(a) 电子由(nlm)态→$(n'l'm')$态,$E_n>E_{n'}$.

电子由高能级跃迁到低能级(放出光子),这时式(2)中 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}$ 项对跃迁产生主要贡献($\hbar\omega\sim E_n-E_{n'}$),跃迁矩阵元为$\langle n'l'm'|(x-\mathrm{i}y)|nlm\rangle$.根据球谐函数的递推关系(见题 13.9),易得选择定则为

$$\Delta l=l'-l=\pm1,\quad \Delta m=m'-m=-1 \tag{3}$$

(b) 电子由(nlm)态→$(n'l'm')$态,$E_n<E_{n'}$.

电子由低能级跃迁到高能级(吸收光子),这时式(2)中 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$ 项对跃迁产生主要贡献($\hbar\omega\sim E_{n'}-E_n$),跃迁矩阵元为$\langle n'l'm'|(x+\mathrm{i}y)|nlm\rangle$,选择定则为

$$\Delta l=l'-l=\pm1,\quad \Delta m=m'-m=+1 \tag{4}$$

以上结果可以用角动量守恒定律解释如下.光子自旋为 $\hbar$,其 z 分量为 $\hbar$、0、$-\hbar$.沿正 z 方向传播的右旋偏振光,光子自旋的 z 分量为 $\hbar$,当电子吸收一个光子后,其角动量的 z 分量增加 $\hbar$,故有选择定则 $m'-m=1$.反之,在受激辐射中,电子放出一个右旋偏振光子后,角动量 z 分量减少 $\hbar$,故选择定则为

$$m'-m=-1$$

量子数 l 的选择定则 $\Delta l=\pm1$ 也可以用电子-光子角动量耦合的矢量模型(三角形法则)结合宇称考虑而得到解释.

注:被电子吸收或放出的光子,其轨道角动量为 0,理由如下:光子动量 $p=h/\lambda$,λ 为波长.轨道角动量约为 $|\boldsymbol{l}|\sim rp\sim ha_0/\lambda$,$a_0$ 为 Bohr 半径.由于 $\lambda\gg a_0$,所以 $|\boldsymbol{l}|\ll h$,即 $|\boldsymbol{l}|\sim0$.所以只需要考虑光子的自旋.

13.12 根据实验测定,氢原子的 $2s_{1/2}$ 能级高于 $2p_{1/2}$ 能级 1058MHz(Lamb 移位).试求电子从 $2s_{1/2}$ 能级到 $2p_{1/2}$ 能级的自发跃迁平均寿命.

解 电子由初态$|i\rangle$自发跃迁至终态$|f\rangle$,电偶极型跃迁的跃迁速率为

$$A_{i\to f}=\frac{4}{3}\frac{e^2\omega^3}{\hbar c^3}\,|\langle f|\boldsymbol{r}|i\rangle|^2 \tag{1}$$

其中 $\hbar\omega$ 为能级差,初、终态的量子数为

初态$(2s_{1/2})$:$n=2,l=0,j=\frac{1}{2},m_j=m_s=\pm\frac{1}{2}$

终态$(2p_{1/2})$:$n=2,l=1,j=\frac{1}{2},m_j=\pm\frac{1}{2}$

最子数关系完全符合电偶极跃迁选择定则

$$\Delta l = \pm 1, \quad \Delta j = 0, \pm 1, \quad \Delta m_j = 0, \pm 1$$

的要求，初态波函数有二种：

$$\psi_i = R_{20}(r)\mathrm{Y}_{00} \cdot \alpha, \quad R_{20}(r)\mathrm{Y}_{00} \cdot \beta \tag{2}$$

α、β 为 s_z 的本征态$\left(\text{相应于 } m_s = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right)$. 初态的自旋指向显然不影响跃迁速率和寿命，可以任选一种进行计算. 终态波函数也有二种(参看题 13.10)：

$$\psi_f = R_{21}(r)\left[\sqrt{\frac{2}{3}}\mathrm{Y}_{11} \cdot \beta - \frac{1}{\sqrt{3}}\mathrm{Y}_{10} \cdot \alpha\right] \quad \left(j = \frac{1}{2}, m_j = \frac{1}{2}\right) \tag{3}$$

$$R_{21}(r)\left[\frac{1}{\sqrt{3}}\mathrm{Y}_{10} \cdot \beta - \sqrt{\frac{2}{3}}\mathrm{Y}_{1-1} \cdot \alpha\right] \quad \left(j = \frac{1}{2}, m_j = -\frac{1}{2}\right)$$

计算由初态到终态的总跃迁速率时，应将式(1)对终态求和，对初态求平均. 初态平均寿命 τ 等于总跃迁速率的倒数，即

$$\frac{1}{\tau} = \sum_f \frac{4}{3}\frac{e^2\omega^3}{\hbar c^3}\langle f \mid \boldsymbol{r} \mid i\rangle \mid^2 \tag{4}$$

跃迁矩阵元中，角度-自旋部分可以利用 13.8 题结果. 如取初态自旋态为 $\alpha(s_z = \hbar/2)$，容易求出

$$\begin{aligned}\sum_f \mid \langle f \mid \boldsymbol{r} \mid i\rangle \mid^2 &= \mid r_{21,20} \mid^2\left[\frac{1}{3}\left|\left\langle 10\left|\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right|00\right\rangle\right|^2 + \frac{2}{3}\left|\left\langle 1-1\left|\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right|00\right\rangle\right|^2\right] \\ &= \mid r_{21,20} \mid^2\left[\frac{1}{3}\left|\frac{1}{\sqrt{3}}\boldsymbol{e}_3\right|^2 + \frac{2}{3}\left|\frac{1}{\sqrt{6}}(\boldsymbol{e}_1 + \mathrm{i}\boldsymbol{e}_2)\right|^2\right] \\ &= \mid r_{21.20} \mid^2\left[\frac{1}{3}\cdot\frac{1}{3} + \frac{2}{3}\cdot\frac{2}{6}\right] = \frac{1}{3} \mid r_{21,20} \mid^2\end{aligned} \tag{5}$$

其中

$$r_{21,20} = \int_0^\infty R_{21}(r) r R_{20}(r) r^2 \mathrm{d}r = -3\sqrt{3}a_0 \tag{6}$$

a_0 为 Bohr 半径. 将式(6)代入式(5)，即得

$$\sum_f \mid \langle f \mid \boldsymbol{r} \mid i\rangle \mid^2 = 9a_0^2 \tag{7}$$

如取初态自旋态为 $\beta(s_z = -\hbar/2)$，结果相同.

由式(4)得到初态平均寿命为

$$\tau = \frac{\hbar c^3}{12e^2\omega^3 a_0^2} = \frac{1}{12}\frac{\hbar c}{e^2}\left(\frac{c}{a_0}\right)^2\frac{1}{\omega^3} \tag{8}$$

以 $\omega = 1058 \times 2\pi \times 10^6/\mathrm{s}$ 代入上式，即得

$$\tau = 1.25 \times 10^9 \mathrm{s} = 39.5 \text{ 年} \tag{9}$$

13.13　通过强子反应可以产生中性 K 介子. 例如

$$\pi^- + \mathrm{p} \to \Lambda^0 + \mathrm{K}^0$$

K^0 的反粒子记为 $\overline{K}^0$,它们的奇异量子数 S 分别为 1 和 -1,即

$$S|K^0\rangle = |K^0\rangle, \quad S|\overline{K}^0\rangle = -|\overline{K}^0\rangle$$

K^0 介子通过弱作用发生衰变.实验发现在 K^0 的衰变过程中可能出现 $\overline{K}^0$,试解释这个事实.

解 用 C 表示电荷共轭变换(或称粒子-反粒子变换),即

$$C|K^0\rangle = |\overline{K}^0\rangle, \quad C|K^0\rangle = |\overline{K}^0\rangle \tag{1}$$

如以 $|K^0\rangle$、$|\overline{K}^0\rangle$ 作为基矢,建立一个表象,即取

$$|K^0\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, \quad |\overline{K}^0\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \tag{2}$$

则 S 和 C 的矩阵表示为

$$S = \begin{bmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{bmatrix}, \quad C = \begin{bmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{bmatrix} \tag{3}$$

在 K^0 介子的衰变过程中,奇异数 S 不守恒,而电荷共轭变换 C 是守恒量,C 的本征态记为 $|K_S\rangle$ 和 $|K_L\rangle$,它们是

$$|K_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|K^0\rangle + |\overline{K}^0\rangle)$$

$$|K_L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|K^0\rangle - |\overline{K}^0\rangle) \tag{4}$$

容易验证

$$C|K_S\rangle = |K_S\rangle, \quad C|K_L\rangle = -|K_L\rangle \tag{5}$$

(读者可以注意,S 和 $|K^0\rangle$,$|\overline{K}^0\rangle$ 的表示形式类似于自旋 1/2 粒子的 s_z 表象中Pauli矩阵 σ_z 及其本征函数,C 和 $|K_S\rangle$,$|K_L\rangle$ 则类似于 σ_x 及其本征函数.)

$|K_S\rangle$ 和 $|K_L\rangle$ 都是似稳态,其衰变寿命 $\tau_S \ll \tau_L$(约相差 500 倍),分别称为短寿命和长寿命 K^0 介子,也就是说,如 K^0 介子的初始状态为 $\psi(t=0) = |K_S\rangle$,则 $t>0$ 时

$$\psi(t) = |K_S\rangle e^{-i\omega_S t} e^{-t/2\tau_S}$$

类似地,如 $\psi(t=0) = |K_L\rangle$,则 $t>0$ 时

$$\psi(t) = |K_L\rangle e^{-i\omega_L t} e^{-t/2\tau_L}$$

其中

$$\hbar\omega_S = \sqrt{p^2c^2 + m_S^2c^4}, \quad \hbar\omega_L = \sqrt{p^2c^2 + m_L^2c^4}$$

m_S 和 m_L 为 K_S 和 K_L 介子的静质量.

现在来分析 K^0 介子的衰变过程. 以 K^0 介子产生之时作为 $t=0$,则

$$\psi(t=0)=|K^0\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|K_S\rangle+|K_L\rangle) \tag{6}$$

在衰变过程中($t>0$),

$$\psi(t)=|K_S\rangle\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\omega_S t-t/2\tau_S}+|K_L\rangle\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\omega_L t-t/2\tau_L} \tag{7}$$

在时刻 t 粒子处于$|\overline{K}^0\rangle$态的概率幅度为

$$\begin{aligned}\langle\overline{K}^0\mid\psi(t)\rangle&=\frac{1}{\sqrt{2}}\langle\overline{K}^0\mid K_S\rangle e^{-i\omega_S t-t/2\tau_S}+\frac{1}{\sqrt{2}}\langle\overline{K}^0\mid K_L\rangle e^{-i\omega_L t-t/2\tau_L}\\&=\frac{1}{2}(e^{-i\omega_S t-t/2\tau_S}-e^{-i\omega_L t-t/2\tau_L})\end{aligned} \tag{8}$$

测得 $\overline{K}^0$ 的概率为

$$P_{\overline{K}^0}(t)=|\langle\overline{K}^0\mid\psi(t)\rangle|^2 \tag{9}$$

由式(8),即得

$$P_{\overline{K}^0}(t)=\frac{1}{4}[e^{-t/\tau_S}+e^{-t/\tau_L}-2e^{-\frac{t}{2}(\frac{1}{\tau_S}+\frac{1}{\tau_L})}\cos(\omega_S-\omega_L)t] \tag{10}$$

当 $t=0$,$P_{\overline{K}^0}=0$;

当 $\tau_S<t\ll\tau_L$,$P_{\overline{K}^0}\approx\frac{1}{4}$[这时式(7)中$|K_S\rangle$项已衰变殆尽,但$|K_L\rangle$项衰变甚少].

当 $t>\tau_L$,$P_{\overline{K}^0}\to 0$.

由此可见,测得 $\overline{K}^0$ 的可能性确实是存在的.

第十四章　弹 性 散 射

14.1　粒子束被势场 $V(r)$ 散射，求散射振幅的 Born 一级近似和二级修正公式.

解　总波函数满足定态 Schrödinger 方程

$$(\nabla^2+k^2)\psi=\frac{2\mu}{\hbar^2}V(\boldsymbol{r})\psi,\quad k=\sqrt{2\mu E}/\hbar \tag{1}$$

取入射波为

$$\psi^{(0)}(\boldsymbol{r})=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{r}} \tag{2}$$

$\boldsymbol{k}_0=(0,0,k)$ 为入射波波矢量. 在 Born 近似法中，以 $\psi^{(0)}$ 作为 ψ 的零级近似，ψ 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

$$\psi^{(1)}\approx f^{(1)}(\theta,\varphi)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}$$

$$\psi^{(2)}\approx f^{(2)}(\theta,\varphi)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}$$

$$\psi^{(1)}+\psi^{(2)}+\cdots\approx[f^{(1)}+f^{(2)}+\cdots]\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}$$

$$=f(\theta,\varphi)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} \tag{4}$$

$f(\theta,\varphi)$ 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

$$\begin{cases}(\nabla^2+k^2)\psi^{(1)}=\dfrac{2\mu}{\hbar^2}V(\boldsymbol{r})\psi^{(0)}\\[2ex](\nabla^2+k^2)\psi^{(2)}=\dfrac{2\mu}{\hbar^2}V(\boldsymbol{r})\psi^{(1)}\\[2ex]\cdots\cdots\end{cases} \tag{7}$$

式(7)的形式解为

$$\begin{aligned}\psi^{(1)} &= (\nabla^2 + k^2)^{-1}\frac{2\mu}{\hbar^2}V(\boldsymbol{r})\psi^{(0)}\\ &= (\nabla^2 + k^2)^{-1}\rho_1(\boldsymbol{r})\\ \psi^{(2)} &= (\nabla^2 + k^2)^{-1}\frac{2\mu}{\hbar^2}V(\boldsymbol{r})\psi^{(1)}\\ &= (\nabla^2 + k^2)^{-1}\rho_2(\boldsymbol{r})\end{aligned} \tag{8}$$

如引入 Green 函数

$$G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = (\nabla^2 + k^2)^{-1}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \tag{9}$$

并利用公式

$$\rho(\boldsymbol{r}) = \int\rho(\boldsymbol{r}')\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3x' \tag{10}$$

式(8)可以进一步写成

$$\begin{aligned}\psi^{(1)}(\boldsymbol{r}) &= \int G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\rho_1(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3x'\\ &= \frac{2\mu}{\hbar^2}\int G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')V(\boldsymbol{r}')\psi^{(0)}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3x'\end{aligned} \tag{11}$$

$$\psi^{(2)}(\boldsymbol{r}) = \frac{2\mu}{\hbar^2}\int G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')V(\boldsymbol{r}')\psi^{(1)}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3x' \tag{12}$$

式(9)仅为 Green 函数的形式定义，选取具体形式时应符合问题的性质，并满足相应的边界条件. 对于散射问题，可取

$$\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3}\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}\mathrm{d}^3k' \tag{13}$$

由于

$$(\nabla^2 + k^2)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}} = (k^2 - k'^2)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}}$$

Green 函数可以取为

$$G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3}\int\frac{1}{k^2 - k'^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}\mathrm{d}^3k' \tag{14}$$

积分在 $\boldsymbol{k}'$ 空间进行，$\boldsymbol{k}$、$\boldsymbol{r}$、$\boldsymbol{r}'$ 作为常量对待. 如取 $\boldsymbol{k}'$ 空间球坐标 (k',θ,φ)，并以 $\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'$ 作为极轴，则

$$\mathrm{d}^3k' = k'^2\mathrm{d}k'\mathrm{d}\Omega,\quad \mathrm{d}\Omega = \sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi$$

式(14)中角度部分积分容易算出，为

$$\int e^{ik'\cdot(r-r')}d\Omega = \int e^{ik'|r-r'|\cos\theta}\sin\theta d\theta d\varphi$$
$$= 2\pi\int_{-1}^{1} e^{ik'|r-r'|\xi}d\xi$$
$$= 4\pi\frac{\sin(k'|r-r'|)}{k'|r-r'|} \tag{15}$$

代入式(14),即得

$$G(r,r') = \frac{1}{2\pi^2}\int_0^\infty \frac{k'^2dk'}{k^2-k'^2}\frac{\sin(k'|r-r'|)}{k'|r-r'|}$$
$$= \frac{i}{8\pi^2}\frac{1}{|r-r'|}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{1}{k'-k}+\frac{1}{k'+k}\right)e^{ik'|r-r'|}dk' \tag{14'}$$

$k'=\pm k$ 为被积函数的一级极点. 式(14′)可以利用 k' 复平面上围道积分法算出. 为了确保 $G(r,r')$ 中只包含出射波项,与边界条件(4)相符,在 k' 复平面的左半平面,积分路线应取实轴上岸,在 k' 右半平面,积分路线应取实轴下岸,如图 14.1(a)所示. 亦即式(14′)中的积分规定成

$$\int_{-\infty}^{\infty}\cdots dk' = \int_C \cdots dk' \tag{16}$$

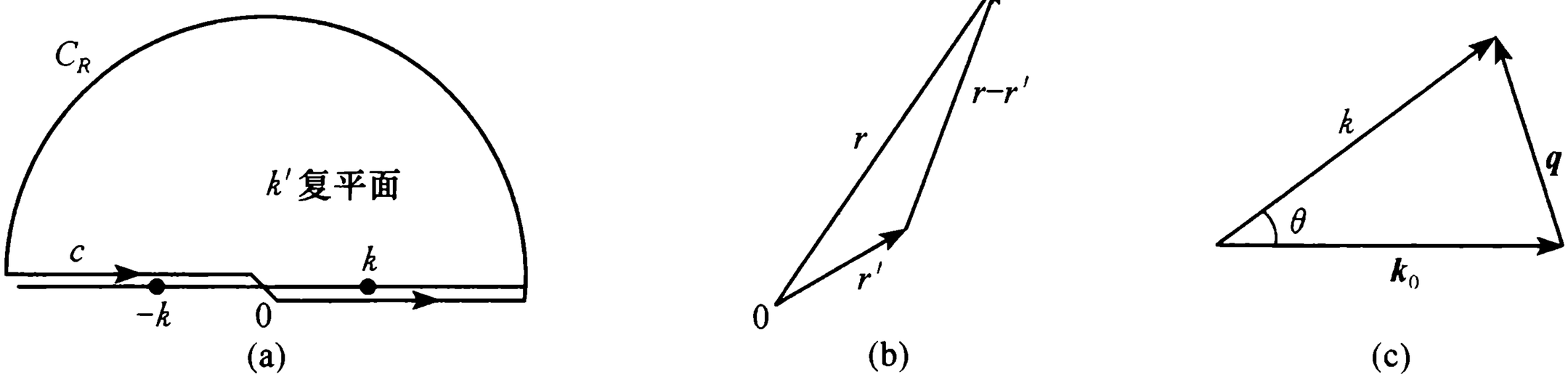


图 14.1

作此规定后,可求出

$$G(r,r') = \frac{i}{8\pi^2|r-r'|}\int_C\left(\frac{1}{k'-k}+\frac{1}{k'+k}\right)e^{ik'|r-r'|}dk'$$
$$= -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ik|r-r'|}}{|r-r'|} \tag{17}$$

(注意,沿大圆弧 C_R 积分为 0.)

上述积分路线的规定等价于式(14′)中或式(14)中

$$k \to k + i\varepsilon \quad (\varepsilon \text{ 为无限小正实数}) \tag{18}$$

反之,如取积分路线为左实轴下岸及右实轴上岸(相当于 $k\to k-i\varepsilon$),将给出

$$G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = -\frac{1}{4\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}/|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|$$

这和散射问题的边条件不符.

将式(17)代入式(11),得到

$$\psi^{(1)}(\boldsymbol{r}) = -\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{1}{4\pi}\int\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}V(\boldsymbol{r}')\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{r}'}\mathrm{d}^3x' \tag{19}$$

在远离散射中心处,$r\gg r'$,可取近似[参看图 14.1(b)]

$$|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\approx r-\boldsymbol{r}'\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}$$

$$k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\approx kr-k\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{r}'=kr-\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}' \tag{20}$$

$\boldsymbol{k}$ 为出射波波矢量,沿 $\boldsymbol{r}$ 方向,即沿散射角方向. $\boldsymbol{k}=k\boldsymbol{r}/r$. 将近似式(20)代入式(19),即得散射波的 Born 一级近似:

$$\boxed{\psi^{(1)}(\boldsymbol{r})\approx-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}\int V(\boldsymbol{r}')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0)\cdot\boldsymbol{r}'}\mathrm{d}^3x'} \tag{21}$$

令

$$\boldsymbol{q}=\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0,\quad q=|\boldsymbol{q}|=2k\sin\frac{\theta}{2} \tag{22}$$

如图 14.1(c)所示,并令

$$V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0)=\int V(\boldsymbol{r}')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0)\cdot\boldsymbol{r}'}\mathrm{d}^3x' \tag{23}$$

式(21)可以写成

$$\psi^{(1)}(r)\approx-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} \tag{21'}$$

和式(4)比较,即得散射振幅的一级近似:

$$\boxed{f^{(1)}(\theta,\varphi)=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0)} \tag{24}$$

注意,式(21)或(21′)仅适用于 $r\gg r'$ 处,式(19)则对任何 $\boldsymbol{r}$ 值均成立.

将式(11)代入式(12),并将式(12)中积分变数 $\boldsymbol{r}'$ 改写为 $\boldsymbol{r}''$,得到

$$\psi^{(2)}(\boldsymbol{r})=\left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^2\iint G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}'')V(\boldsymbol{r}'')G(\boldsymbol{r}'',\boldsymbol{r}')V(\boldsymbol{r}')\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{r}'}\mathrm{d}^3x'\mathrm{d}^3x''$$

在远离散射区域处,$r\gg r''$,对 $G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}'')$ 可作类似于式(20)的近似处理,即

$$G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}'')=-\frac{1}{4\pi}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}''|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}''|}\approx-\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\boldsymbol{r}}}{4\pi r}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\cdot\boldsymbol{r}''} \tag{25}$$

对于$G(\boldsymbol{r}'',\boldsymbol{r}')$只能取式(14)或(17)的形式,我们取式(14)(注意$\boldsymbol{r}$换成$\boldsymbol{r}''$),和式(25)一起代入$\psi^{(2)}$中,得到

$$\begin{aligned}\psi^{(2)}(\boldsymbol{r})\approx&-\left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^2\frac{1}{(2\pi)^3}\frac{1}{4\pi}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\boldsymbol{r}}}{r}\\&\cdot\iiint\mathrm{d}^3k'\mathrm{d}^3x'\mathrm{d}^3x''\frac{1}{k^2-k'^2}V(\boldsymbol{r}'')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}''}V(\boldsymbol{r}')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}_0)\cdot\boldsymbol{r}'}\\=&\left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^2\frac{1}{32\pi^4}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\boldsymbol{r}}}{r}\int\frac{1}{k'^2-k^2}V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')V(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}_0)\mathrm{d}^3k'\end{aligned} \tag{26}$$

和式(14)比较,即得散射振幅的 Born 二级修正公式:

$$\boxed{f^{(2)}(\theta,\varphi)=\frac{1}{32\pi^4}\left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^2\int\frac{1}{k'^2-k^2}V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')V(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}_0)\mathrm{d}^3k'} \tag{27}$$

上二式中,k^2 均应按式(18),理解成$(k+\mathrm{i}\epsilon)^2$.

从量子跃迁观点来看,散射过程相当于从初态 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0\cdot r}$ 向终态 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\cdot r}$ 的跃迁,$V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0)$相当于跃迁矩阵元. 式(21)相当于微扰论一级近似. 式(26)相当于二级微扰修正,即二级跃迁:先由 $\boldsymbol{k}_0$ 变到中间态 $\boldsymbol{k}'$,再变到终态 $\boldsymbol{k}$,V 的两个矩阵元清楚地表明了这一点.①

14.2 质量为μ的粒子束被球壳δ势场散射,

$$V(r)=V_0\delta(r-a)$$

在高能近似下,用 Born 近似计算散射振幅和微分截面.

解 散射振幅的 Born 近似公式为

$$f(\theta)=-\frac{2\mu}{\hbar^2 q}\int_0^\infty\mathrm{d}r r V(r)\sin qr \tag{1}$$

其中$q=2k\sin\frac{\theta}{2}$,θ为散射角. 根据δ函数的积分性质,容易算出

$$f(\theta)=-\frac{2\mu V_0 a}{\hbar^2 q}\sin qa=-\frac{2\mu V_0 a^2}{\hbar^2}\frac{\sin\left(2ka\sin\frac{\theta}{2}\right)}{2ka\sin\frac{\theta}{2}} \tag{2}$$

---

① 参考曾谨言. 量子力学. 下册. 北京:科学出版社,1981. §10.5. Landau 等. 量子力学. 下册. 北京:高等教育出版社,1980. §126.

在高能条件($ka\gg1$)下,对于一般的散射角θ,有$ka\theta\gg1$,上式中$\sin\left(2ka\sin\frac{\theta}{2}\right)$随$\theta$变化而迅速振荡,其平方可以按1/2对待,因此微分截面为

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2\approx\frac{1}{2}\left(\frac{\mu V_0 a}{\hbar^2 k\sin\frac{\theta}{2}}\right)^2 \tag{3}$$

$\theta\to0$处,应取

$$\sigma(0)=|f(0)|^2=(2\mu V_0 a^2/\hbar^2)^2 \tag{4}$$

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σ_t之值主要来自角范围$\theta\lesssim1/ka$,由此可得

$$\begin{aligned}\sigma_t&\sim2\pi\sigma(0)\int_0^{1/ka}\sin\theta\mathrm{d}\theta\sim\frac{\pi\sigma(0)}{k^2a^2}\\&\sim\frac{4\pi\mu^2V_0^2a^2}{k^2\hbar^4}=\frac{2\pi\mu V_0^2a^2}{\hbar^2E}\end{aligned} \tag{6}$$

14.3　设有某种球对称的电荷分布,电荷密度记为$\rho(r)$,具有下列性质:$r\to\infty$,$\rho(r)$迅速趋于0;

$$\int\rho(r)\mathrm{d}^3x=0;\quad\int\rho(r)r^2\mathrm{d}^3x=A \tag{1}$$

今有一束质量m,电荷e,动量$p=\hbar k$的粒子,沿z轴方向入射,受到此电荷分布所生静电场作用而发生散射.试用一级Born近似公式计算向前散射($\theta=0$)的微分截面.

解　粒子受到的静电作用势为

$$V(r)=e\int\frac{\rho(r')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3x' \tag{2}$$

以$\boldsymbol{k}_0=(0,0,k)$表示入射波波矢量,$\boldsymbol{k}$表示被散射到(θ,φ)方向的粒子的波矢量,$\hbar\boldsymbol{k}$为散射粒子的动量.按照Born一级近似,散射振幅为

$$f(\theta)=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int V(r)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}_0-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}^3x \tag{3}$$

粒子向前散射($\theta\to0$)时$\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}_0$,散射振幅为

$$f(0)=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int V(r)\mathrm{d}^3x=-\frac{me}{2\pi\hbar^2}\iint\frac{\rho(r')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3x'\mathrm{d}^3x \tag{4}$$

可以证明

$$\int\frac{\mathrm{d}^3x}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}=4\pi\int_0^\infty\mathrm{d}r r^2\times\begin{cases}1/r',r<r'\\1/r,r>r'\end{cases}$$

$$=4\pi\left[\frac{1}{r'}\int_0^{r'}r^2\mathrm{d}r+\int_{r'}^\infty r\mathrm{d}r\right] \tag{5}$$

$$=2\pi R^2-\frac{2\pi}{3}r'^2,\quad R\to\infty \tag{6}$$

代入式(4),即得

$$f(0)=\frac{me}{\hbar^2}\int\left(\frac{1}{3}r'^2-R^2\right)\rho(r')\mathrm{d}^3x',\quad R\to\infty$$

再利用式(1),即得

$$f(0)=meA/3\hbar^2 \tag{7}$$

向前散射的微分截面为

$$\sigma(\theta\to0)=|f(0)|^2=m^2e^2A^2/9\hbar^4 \tag{8}$$

附注 式(5)的证明如下:

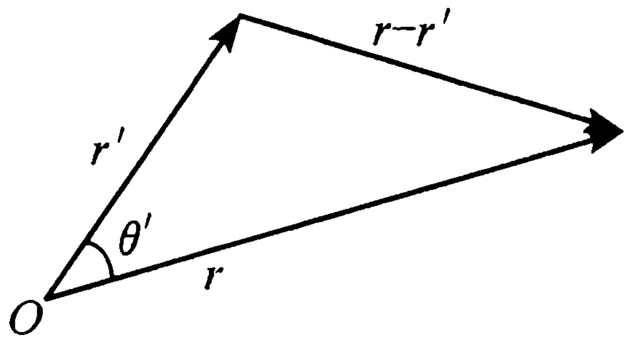


图 14.3

计算积分$\int\cdots\mathrm{d}^3x$时,以$\boldsymbol{r}'$为极轴,则

$$\mathrm{d}^3x=r^2\mathrm{d}r\sin\theta'\mathrm{d}\theta'\mathrm{d}\varphi'$$

$$|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|=(\boldsymbol{r}^2+\boldsymbol{r}'^2-2rr'\cos\theta')^{\frac{1}{2}}$$

对角度积分,即得

$$\int\frac{\sin\theta'\mathrm{d}\theta'\mathrm{d}\varphi'}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}=2\pi\int_{\theta'=0}^{\theta'=\pi}\frac{-\mathrm{d}\cos\theta'}{(r^2+r'^2-2rr'\cos\theta')^{\frac{1}{2}}}$$

$$=\frac{2\pi}{rr'}[(r+r')-|r-r'|]$$

$$=4\pi\times\begin{cases}1/r',r<r'\\1/r,r>r'\end{cases}$$

此即式(5).

14.4 质量m,自旋1/2,能量E的两个全同粒子,从相反方向入射,发生弹性散射.粒子间的作用势为

$$V(r)=\frac{\beta}{r}\mathrm{e}^{-r/a},\quad a>0 \tag{1}$$

两个粒子都是未极化的.

(a) 设入射能量 E 很大($ka\gg1$),求微分散射截面;

(b) 设在 θ 及 $\pi-\theta$ 方向(见图 14.4)测得两个出射粒子,求它们的总自旋 $S=1$ 的概率,以及两个粒子自旋都指向入射方向(z 轴)的概率;

(c) a 项中所作近似,对能量有何要求?

(d) 如 $E\to0$,散射后两个粒子总自旋 $S=1$ 的概率等于多少?

解　本题的实验室坐标系就是质心系,总动能 $E_c=2E$,折合质量 $\mu=m/2$. 令

$$k=\sqrt{2\mu E_c}/\hbar=\sqrt{4mE}/\hbar \tag{2}$$

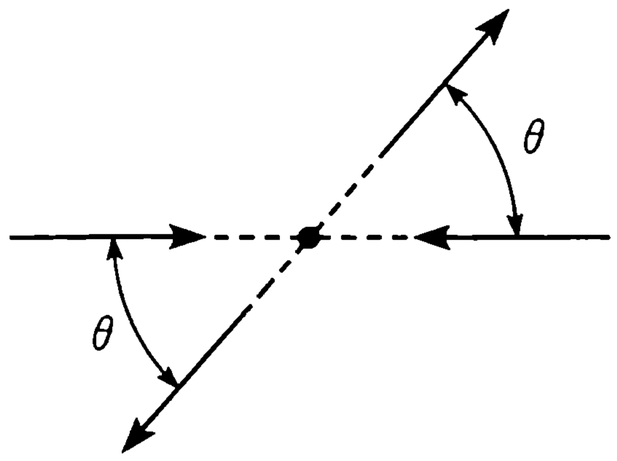


图 14.4

(a) 对于高能情形($k\alpha\geqslant1$),如用 Born 近似,散射振幅为

$$f(\theta)=-\frac{2\mu}{\hbar^2}\int_0^\infty\frac{\sin qr}{qr}V(r)r^2\mathrm{d}r \tag{3}$$

其中

$$q=2k\sin\frac{\theta}{2} \tag{4}$$

将式(1)代入式(3),利用公式

$$\int_0^\infty \mathrm{e}^{-r/a}\sin qr\,\mathrm{d}r=\frac{qa^2}{1+q^2a^2}$$

容易求出

$$f(\theta)=-\frac{2\mu\beta a^2}{\hbar^2}\frac{1}{1+4k^2a^2\sin^2\dfrac{\theta}{2}} \tag{5}$$

由于 $ka\geqslant1$,故除 $\theta\to0$ 外,可取近似

$$f(\theta)\approx-\frac{2\mu\beta}{4\hbar^2k^2}\frac{1}{\sin^2\dfrac{\theta}{2}}=-\frac{\beta}{8E}\frac{1}{\sin^2\dfrac{\theta}{2}} \tag{6}$$

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

$$\begin{aligned}\sigma_s(\theta)&=|\,f(\theta)+f(\pi-\theta)\,|^2\\&=\frac{\beta^2}{64E^2}\left(\frac{1}{\sin^2\dfrac{\theta}{2}}+\frac{1}{\cos^2\dfrac{\theta}{2}}\right)^2\end{aligned}$$

$$= \frac{\beta^2}{4E^2 \sin^4\theta} \tag{7}$$

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

$$\sigma_a(\theta) = |\, f(\theta) - f(\pi-\theta)\,|^2 = \frac{\beta^2 \cos^2\theta}{4E^2 \sin^4\theta} \tag{8}$$

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

$$\sigma(\theta) = \frac{1}{4}\sigma_s(\theta) + \frac{3}{4}\sigma_a(\theta) = \frac{\beta^2(1+3\cos^2\theta)}{16E^2 \sin^4\theta} \tag{9}$$

(b) 在 θ 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

$$P(S=0) = \frac{\frac{1}{4}\sigma_s(\theta)}{\sigma(\theta)} = \frac{1}{1+3\cos^2\theta} \tag{10}$$

$$P(S=1) = \frac{\frac{3}{4}\sigma_a(\theta)}{\sigma(\theta)} = \frac{3\cos^2\theta}{1+3\cos^2\theta} \tag{11}$$

$S=1$ 共有 3 种状态,即

$$\chi_{11} = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2, \quad \chi_{1,-1} = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2$$

$$\chi_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2\right]$$

两个粒子自旋均指向入射方向,即状态 χ_{11},另外二种状态并不包含此种成分. 可见,散射后两粒子自旋均指向入射方向的概率为

$$P(\uparrow\uparrow) = \frac{1}{3}P(S=1) = \frac{\cos^2\theta}{1+3\cos^2\theta} \tag{12}$$

(c) 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近表示式

$$\psi(\boldsymbol{r}) \approx \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} - \frac{1}{4\pi}\frac{2\mu}{\hbar^2}\int \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\,\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\,|} V(\boldsymbol{r}')\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz'}\,\mathrm{d}^3x' \tag{13}$$

按微扰论观点,上式即

$$\psi \approx \psi^{(0)} + \psi^{(1)}$$

微扰论成立条件为 $|\psi^{(1)}| \ll |\psi^{(0)}|$,即在 $V(r)$ 的有效范围内,

$$\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\left|\int\frac{e^{ik|r-r'|}}{|r-r'|}\frac{\beta}{r'}e^{-r'/a}e^{ikz'}d^3x'\right|\ll 1 \tag{14}$$

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

$$|r-r'|\sim r', d^3x'\sim 4\pi r'^2\Delta r'\sim 4\pi r'^2/k$$

$$\int\cdots d^3x'\sim 4\pi\beta/k$$

故条件(14)相当于

$$\frac{2\mu\beta}{\hbar^2 k}\ll 1,\quad 即\ E\gg\frac{m\beta^2}{2\hbar^2} \tag{15}$$

在此条件下，式(5)成立.

式(6)成立的条件是 $ka\gg 1$，即 $E\gg\hbar^2/2ma^2$.

(d) 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 $\sigma_a(\theta)=0$，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. ①

14.5　粒子被中心力场 $V(r)$ 散射，设作用是短程的，当 r 大于某个值("作用球"半径 a)，$V(r)$ 即迅速趋于 0. 试将低能 s 波($l=0$)散射的相移、散射振幅、散射截面等用"散射长度"表示出来.

解　s 波($l=0$)的波函数可以记为

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}R_0(r)=\frac{u(r)}{r} \tag{1}$$

$u(r)$ 满足径向方程

$$\frac{d^2}{dr^2}u+\left[k^2-\frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)\right]u=0 \tag{2}$$

其中 $k=\sqrt{2\mu E}/\hbar$，E 为粒子的入射动能.

方程(2)中当 $r>a$，则 $V(r)$ 可以略去；如再取低能极限，即 $k\to 0$，则方程(2)成为

$$\frac{d^2}{dr^2}u\approx 0\quad (r>a, k\to 0) \tag{3}$$

其解为

---

① 参考曾谨言. 量子力学. 下册. 北京：科学出版社，1981. §10.5，10.6. Landau 等. 量子力学. 北京：高等教育出版社，1980. §45，126.

$$u(r) \approx C\left(1-\frac{r}{a_0}\right) \tag{4}$$

其中 C 为归一化常数,a_0 称为散射长度.

另一方面,在作用球外($r>a$),$V(r)\to 0$,方程(2)的一般解可以表示为

$$u(r) \approx A\sin(kr+\delta_0) = A\sin\delta_0(\cos kr + \cot\delta_0 \sin kr) \tag{5}$$

δ_0 为 s 波相移,上式如取低能极限 $k\to 0$,则

$$\cos kr \to 1, \quad \sin kr \to kr$$

$$u(r) \approx A\sin\delta_0(1+kr\cot\delta_0) \tag{6}$$

比较式(4)、(6),即得相移和散射长度的关系

$$\boxed{k\cot\delta_0 = -1/a_0 \quad (k\to 0)} \tag{7}$$

只考虑 s 波散射时,散射振幅为

$$\boxed{f=\frac{1}{k}e^{i\delta_0}\sin\delta_0 = \frac{1}{k\cot\delta_0 - ik}} \tag{8}$$

在低能极限,将式(7)代入式(8),即得

$$\boxed{f = -\frac{a_0}{1+ika_0} \quad (k\to 0)} \tag{9}$$

s 波总截面为

$$\sigma_0 = 4\pi |f|^2 = 4\pi a_0^2/[1+(ka_0)^2] \tag{10}$$

如散射长度 a_0 取有限值,则在低能极限($k\to 0$)下,$k|a_0| \ll 1$,式(9)和(10)分母上的 ka_0 可以略去,从而得到

$$f = -a_0, \quad \sigma_0 = 4\pi a_0^2 \quad (k\to 0) \tag{11}$$

而式(7)则给出

$$-ka_0 = \tan\delta_0 \approx \delta_0 \quad (k\to 0) \tag{12}$$

这种情况下势场 $V(r)$ 的散射效果相当于半径为 a_0 的刚球.

如散射长度 $a_0\to\pm\infty$,就出现共振散射,这时式(7)、(8)、(10)分别给出

$$\boxed{k\cot\delta_0 \to 0, \quad \delta_0 = \frac{\pi}{2} \text{ 或 } -\frac{\pi}{2}} \tag{13}$$

$$\boxed{f=\frac{i}{k}, \quad \sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2} = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu E}} \tag{14}$$

散射截面和入射动能 E 成反比,当 $E\to 0$,$\sigma_0\to\infty$.

14.6　同 14.2 题，求低能($ka \ll 1$)s 波散射截面.

解　s 波($l=0$)波函数可以写成

$$\psi = u(r)/r \tag{1}$$

$u(r)$满足径向方程

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}u + k^2 u - \frac{2\mu}{\hbar^2}V_0\delta(r-a)u = 0 \tag{2}$$

上式在 $r=a$ 附近积分，可得 u'的跃变条件

$$u'(a+0) - u'(a-0) = \frac{2\mu}{\hbar^2}V_0 u(a) \tag{3}$$

亦即

$$\left.\frac{u'}{u}\right|_{a-0}^{a+0} = \frac{2\mu V_0}{\hbar^2} \tag{3'}$$

此外，u 还必须满足边界条件 $u(0)=0$.

$r \neq a$ 处，方程(2)中最后一项为 0，其解可以表示成

$$u(r) = B\sin kr, \qquad r < a$$

$$u(r) = A\sin(kr + \delta_0), r > a \tag{4}$$

δ_0 为相移. 利用跃变条件(3′)，可得到确定 δ_0 的超越方程

$$k\cot(ka + \delta_0) - k\cot ka = 2\mu V_0/\hbar^2 \tag{5}$$

对于低能极限，$ka \ll 1$，可取

$$\cot(ka + \delta_0) \approx \cot\delta_0, \quad k\cot ka \approx 1/a$$

代入式(5)，即得

$$k\cot\delta_0 \approx \frac{1}{a} + \frac{2\mu V_0}{\hbar^2} \tag{6}$$

根据上题式(8)，散射振幅为

$$f = \frac{1}{k\cot\delta_0 - \mathrm{i}k} \approx \frac{1}{\dfrac{1}{a} + \dfrac{2\mu V_0}{\hbar^2} - \mathrm{i}k} \tag{7}$$

在非共振条件下，上式分母中的 $\mathrm{i}k$ 可以略去，从而得到

$$f \approx 1\Big/\left(\frac{1}{a} + \frac{2\mu V_0}{\hbar^2}\right) \tag{7'}$$

s 波散射截面为

$$\sigma_0 = 4\pi \mid f \mid^2 \approx 4\pi \Big/ \left(\frac{1}{a} + \frac{2\mu V_0}{\hbar^2}\right)^2 \tag{8}$$

发生低能共振散射时,$k\cot\delta_0 \to 0$,由式(6)易见共振条件为

$$V_0 a = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \tag{9}$$

这正是球壳 δ 势阱中存在一条 s 态束缚能级 $E=0^-$ 的条件[见题 5.24 式(11)]. 发生低能共振散射时,式(7)给出

$$f = \mathrm{i}/k \tag{10}$$

从而

$$\sigma_0 = 4\pi \mid f \mid^2 = \frac{4\pi}{k^2} = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu E} \tag{11}$$

这在上题中已经给予普遍证明.

14.7 同上题,求各分波的相移 δ_l,并和刚球散射的结果比较.

解 令

$$\psi = \sum_l R_l(r)\mathrm{Y}_{l0}(\theta) \tag{1}$$

R_l 为第 l 分波的径向波函数,它应该具有下列渐近性质:

$$R_l(r) \sim \frac{1}{kr}\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right), \quad kr \to \infty \tag{2}$$

R_l 满足径向方程

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}R_l + \frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}R_l + \left[k^2 - \frac{2\mu}{\hbar^2}V(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R_l = 0 \tag{3}$$

将势能写成

$$V(r) = V_0\delta(r-a) \equiv \frac{\hbar^2\Omega}{2\mu a}\delta(r-a) \tag{4}$$

并令 $kr=\rho$,方程(3)可以写成

$$\frac{\mathrm{d}^2R_l}{\mathrm{d}\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{\mathrm{d}R_l}{\mathrm{d}\rho} + \left[1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R_l - \frac{\Omega}{ka}\delta(p-ka)R_l = 0 \tag{5}$$

当 $\rho \neq ka$,上式即球 Bessel 方程,它在 $\rho \to 0$ 处有限的解为

$$R_l = Cj_l(\rho), \quad \rho < ka \tag{6}$$

在 $\rho>ka$ 区域，方程(5)的具有渐近性质(2)的解为

$$R_l = j_l(\rho)\cos\delta_l - n_l(\rho)\sin\delta_l, \quad \rho > ka \tag{7}$$

j_l 为球 Bessel 函数，n_l 为球 Neumann 函数.

在 $\rho=ka$ 处，R_l 应该连续，即

$$Cj_l(ka) - j_l(ka)\cos\delta_l + n_l(ka)\sin\delta_l = 0 \tag{8}$$

但在 $\rho=ka$ 处，R_l'是不连续的. 把方程(5)在 $\rho=ka$ 附近积分，容易得到

$$R_l'(ka+0) - R_l'(ka-0) = \frac{\Omega}{ka}R_l(ka) \tag{9}$$

亦即

$$j_l'(ka)\cos\delta_1 - n_l'(ka)\sin\delta_l - Cj_l'(ka) = \frac{\Omega}{ka}Cj_l(ka) \tag{10}$$

式(8)乘 $j_l'(ka)$，式(10)乘 $j_l(ka)$，相加，并利用公式

$$j_l(\rho)n_l'(\rho) - n_l(\rho)j_l'(\rho) = 1/\rho^2$$

即得

$$\tan\delta_l = \frac{ka\Omega[j_l(ka)]^2}{ka\Omega j_l(ka)n_l(ka) - 1} \tag{11}$$

给定 ka 及 Ω(无量纲)之值后，利用 Bessel 函数表，即可求出 δ_l.

讨论　1°　如 Ω 很大，式(11)分母中可以略去(−1)，得到

$$\tan\delta_l \approx j_l(ka)/n_l(ka) \tag{12}$$

这正是刚球(半径 a)散射的相移公式.①

2°　如 ka 很小，以致式(11)分母中 $ka\Omega$ 项可以略去(低能极限)，则得

$$\begin{aligned}\delta_l &\approx \tan\delta_1 \approx -ka\Omega[j_l(ka)]^2 \\ &\approx -\Omega\frac{(ka)^{2l+1}}{[(2l+1)!!]^2}\end{aligned} \tag{13}$$

δ_1 和作用强度 Ω 以及 $(ka)^{2l+1}$ 成正比，这和球方势垒(阱)低能散射结果类似.(参看题 14.9)

14.8　粒子被势场

$$V(r) = \frac{\alpha}{r^4}, \quad \alpha > 0 \tag{1}$$

---

① 关于刚球散射，参看曾谨言. 量子力学. 下册. 北京：科学出版社，1981. §10.2. 关于 j_l 和 n_l 的公式参看同书附录六.

散射,求低能($E\to 0$)s 波散射的散射长度、相移、散射振幅和散射截面.

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

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}u=\frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)u=\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}\frac{u}{r^4} \tag{2}$$

边界条件为

$$u(0)=0,\quad u(\infty)\text{ 有界}$$

令 $\xi=\hbar r/\sqrt{2\mu\alpha}$,式(2)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 $r\to\infty$,$1/\xi\to 0$,$u(r)$的渐近表示为

$$u(r)\approx\xi\left(1-\frac{1}{\xi}\right)=\xi-1$$

$$=-\left(1-\frac{\hbar}{\sqrt{2\mu\alpha}}r\right) \tag{4}$$

和题 14.5 式(4)比较,即得散射长度

$$a_0=\sqrt{2\mu\alpha}/\hbar \tag{5}$$

按照题 14.5 式(11)、(12),可得相移

$$\delta_0=-ka_0=-\frac{k}{\hbar}\sqrt{2\mu\alpha}=-\frac{2\mu}{\hbar^2}\sqrt{\alpha E} \tag{6}$$

散射振幅

$$f=-a_0=-\sqrt{2\mu\alpha}/\hbar \tag{7}$$

s 波总截面

$$\sigma_0=4\pi|f|^2=8\pi\mu\alpha/\hbar^2 \tag{8}$$

14.9 在作用势 $V(r)$很弱的条件下,证明相移 δ_l 的 Born 近似公式

$$\boxed{\delta_l\approx-\frac{2\mu k}{\hbar^2}\int_0^\infty V(r)[j_l(kr)]^2r^2\,\mathrm{d}r} \tag{1}$$

并用来处理球方势阱(垒)

$$V(r)=\begin{cases}V_0, & r<a\\ 0, & r>a\end{cases} \tag{2}$$

的低能散射($ka\ll1$)问题.

证一　按照 Born 近似,散射振幅为

$$f(\theta)=-\frac{2\mu}{\hbar^2}\int_0^\infty \mathrm{d}r r^2 V(r)\frac{\sin qr}{qr} \tag{3}$$

其中 $q=2k\sin\frac{\theta}{2}$,θ 为散射角、利用展开公式①

$$\frac{\sin qr}{qr}=\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)[j_l(kr)]^2P_l(\cos\theta) \tag{4}$$

代入式(3),即得

$$f(\theta)=-\frac{2\mu}{\hbar^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)\int_0^\infty V(r)[j_l(kr)]^2r^2\mathrm{d}r \tag{5}$$

与分波法公式

$$f(\theta)=\frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}\sin\delta_l P_l(\cos\theta) \tag{6}$$

比较,当作用势很弱时,$|\delta_l|\ll1$,可取

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}\approx1,\quad \sin\delta_l\approx\delta_l$$

因此

$$\delta_l\approx-\frac{2\mu k}{\hbar^2}\int_0^\infty V(r)[j_l(kr)]^2r^2\mathrm{d}r$$

此即式(1).

证二　将入射波 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}$ 展开为球面波的叠加

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr\cos\theta}&=\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{i}^l j_l(kr)P_l(\cos\theta)\\&=\frac{1}{kr}\sum_l u_l^{(0)}(r)P_l(\cos\theta)\end{aligned} \tag{7}$$

其中

$$u_l^{(0)}(r)=(2l+1)\mathrm{i}^l krj_l(kr) \tag{8}$$

$u_l^{(0)}$ 满足自由粒子的径向方程

---

① 参看 G. N. Watson. Theory of Bessel Function. Cambridge University Press. p. 363.

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}u_l^{(0)}+k^2u_l^{(0)}-\frac{l(l+1)}{r^2}u_l^{(0)}=0 \tag{9}$$

散射后,总波函数可以展开成

$$\psi=\frac{1}{kr}\sum_l u_l(r)P_l(\cos\theta) \tag{10}$$

$u_l(r)$满足径向方程

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}u_l+\left[k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}-\frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)\right]u_l=0 \tag{11}$$

以 $u_l^{(0)}$ 左乘式(11),以 u_l 左乘式(9),相减,即得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left[u_l^{(0)}\frac{\mathrm{d}u_l}{\mathrm{d}r}-u_l\frac{\mathrm{d}u_l^{(0)}}{\mathrm{d}r}\right]=\frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)u_lu_l^{(0)}$$

积分,即得

$$\frac{2\mu}{\hbar^2}\int_0^\infty V(r)u_lu_l^{(0)}\,\mathrm{d}r=\left[u_l^{(0)}\frac{\mathrm{d}u_l}{\mathrm{d}r}-u_l\frac{\mathrm{d}u_l^{(0)}}{\mathrm{d}r}\right]\Bigg|_{r=0}^{r\to\infty} \tag{12}$$

由于

$$r\to 0,\quad u_l\to 0,\quad u_l^{(0)}\to 0$$

$$r\to\infty,\quad u_l^{(0)}\to(2l+1)\mathrm{i}^l\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)$$

$$u_l\to(2l+1)\mathrm{i}^l\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right)$$

可得

$$\left(u_l^{(0)}\frac{\mathrm{d}u_l}{\mathrm{d}r}-u_l\frac{\mathrm{d}u_l^{(0)}}{\mathrm{d}r}\right)\xrightarrow{r\to\infty}(-1)^{l+1}(2l+1)^2k\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}\sin\delta_l \tag{13}$$

代入式(12),即得

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}\sin\delta_l=(-1)^{l+1}\frac{2\mu}{\hbar^2k(2l+1)^2}\int_0^\infty V(r)u_lu_l^{(0)}\,\mathrm{d}r \tag{14}$$

至此是严格的.

如作用势 $V(r)$很弱,则$|\delta_l|\ll 1$,上式左端可用 δ_l 代替,右端可按微扰论精神用 $u_l^{(0)}$ 代替,u_l,再利用式(8),即得

$$\delta_l\approx-\frac{2\mu k}{\hbar^2}\int_0^\infty V(r)[j_l(kr)]^2r^2\,\mathrm{d}r \tag{1}$$

证明完毕.

如果 $V(r)$仅在某个“作用球”(半径 a)内才有显著的值,在作用球外可以忽略

不计，则式(1)中积分上限可以换成 $r=a$. 在低能极限($ka\ll1$)下，$j_l(kr)$可取其级数展开式的首项：

$$j_l(kr)\approx(kr)^l/(2l+1)!!\quad(kr\ll1)$$

于是得到

$$\boxed{\delta_l\approx-\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{k^{2l+1}}{[(2l+1)!!]^2}\int_0^a r^{2l+2}V(r)\mathrm{d}r\propto k^{2l+1}}\tag{15}$$

对于球方势阱(垒)式(2)，在低能极限($ka\ll1$)下，上式给出

$$\delta_l\approx-\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}a^2(ka)^{2l+1}/(2l+1)!!(2l+3)!!\tag{16}$$

$\delta_l\propto(ka)^{2l+1}$. 随 l 之增大，δ_l 下降很快，所以通常只需考虑 l 较小的少数分波. 能量很低时，只需考虑 s 波，这时

$$\delta_0\approx-\frac{2}{3}\frac{\mu V_0}{\hbar^2}ka^3\ll1\tag{17}$$

散射振幅为

$$f=\frac{\delta_0}{k}\approx-\frac{2}{3}\frac{\mu V_0a^3}{\hbar^2}\tag{18}$$

总截面为

$$\sigma_t=4\pi\mid f\mid^2\approx\frac{16\pi}{9}\left(\frac{\mu V_0a^3}{\hbar^2}\right)^2\tag{19}$$

这些结果也可利用式(3)直接求出，即对于球方势阱低能散射，$ka\ll1$，因此

$$qr\ll1,\quad\frac{\sin qr}{qr}\approx1$$

代入式(3)，即得

$$f(\theta)\approx-\frac{2\mu}{\hbar^2}\int_0^a V_0r^2\mathrm{d}r=-\frac{2}{3}\frac{\mu V_0a^3}{\hbar^2}$$

总截面为

$$\sigma_t=\int\mid f(\theta)\mid^2\mathrm{d}\Omega=4\pi\mid f\mid^2=\frac{16\pi}{9}\left(\frac{\mu V_0a^3}{\hbar^2}\right)^2$$①

14.10　求中子-中子低能($E\to0$)s 波散射截面. 设两中子间的作用势为

① 参考曾谨言. 量子力学. 下册. 北京：科学出版社，1981. §10.5.

$$V=\begin{cases}\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2V_0, & r\leqslant a\\ 0, & r>a\end{cases}\tag{1}$$

其中 $V_0>0$,$\boldsymbol{\sigma}_1$、$\boldsymbol{\sigma}_2$ 为两中子的 Pauli 自旋算符. 入射中子和靶中子都是未极化的.

解 中子-中子体系的总波函数必须是交换反对称的. s 波($l=0$)波函数是两粒子空间坐标的对称函数,所以自旋波函数必须是反对称的,即为自旋单态. 因此,体系总自旋为 0,

$$\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2=-3$$

亦即,对于低能 s 波散射,式(1)等价于球方势阱:

$$V(r)=\begin{cases}-3V_0, & r\leqslant a\\ 0, & r>a\end{cases}\tag{1'}$$

在质心系中,s 态空间波函数可以写成

$$\psi(r)=u(r)/r\tag{2}$$

其中 r 为两中子的相对距离,即 $r=|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|$. $E\to0$ 时,径向方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}u''+V(r)u=0\tag{3}$$

亦即

$$\begin{aligned}&u''+k_0^2u=0, && r\leqslant a\\ &u''=0, && r>a\end{aligned}\qquad(E\to0)\tag{3'}$$

其中

$$k_0=\sqrt{6\mu V_0}/\hbar=\sqrt{3mV_0}/\hbar\tag{4}$$

m 为中子质量,$\mu=m/2$ 为两中子体系的折合质量.

方程(3')满足边界条件 $u(0)=0$ 的解为

$$u(r)=\begin{cases}A\sin k_0r, & r\leqslant a\\ C\left(1-\dfrac{r}{a_0}\right), & r>a\end{cases}\tag{5}$$

其中 a_0 为散射长度(待定),$(-a_0)$即散射振幅. 利用 $r=a$ 处 u'/u 的连续条件,求得

$$a_0=-a\left(\frac{\tan k_0a}{k_0a}-1\right)\tag{6}$$

$$f(\theta)=-a_0=a\left(\frac{\tan k_0a}{k_0a}-1\right)\tag{7}$$

由于是全同粒子散射,s 波微分截面为

$$\sigma(\theta) = |\ f(\theta) + f(\pi-\theta)\ |^2 = 4a_0^2 \tag{8}$$

总截面(自旋单态,s 波)为

$$\sigma_t = 4\pi\sigma(\theta) = 16\pi a_0^2 \tag{9}$$

考虑到入射中子和靶中子都是未极化的,自旋指向取随机分布,两中子形成自旋单态($S=0$)的概率为 1/4,形成自旋三重态($S=1$)的概率为 3/4,后者对 s 波散射无贡献.因此,有效的总截面为

$$\sigma_{有效} = \frac{1}{4}\sigma_t = 4\pi a_0^2 = 4\pi a^2\left(\frac{\tan k_0 a}{k_0 a} - 1\right)^2 \tag{10}$$

在不发生共振散射的条件下,散射振幅和散射截面均和入射能量无关,这是低能散射的特点.共振散射的条件为 $a_0 \to \pm\infty$,亦即[参看式(6)]

$$k_0 a = \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \frac{5\pi}{2}, \cdots \tag{11}$$

这正是势阱的"阱口"出现束缚能级($E=0^-$)的条件.这时式(9)和(10)应改为[参看题 14.5]

$$\sigma_t = 16\pi\ |\ f\ |^2 = \frac{16\pi}{k^2} = \frac{8\pi\hbar^2}{\mu E_c} = \frac{32\pi\hbar^2}{mE} \tag{12}$$

$$\sigma_{有效} = \frac{1}{4}\sigma_t = \frac{8\pi\hbar^2}{mE} \tag{13}$$

其中 E 为实验室坐标系中入射中子动能,$E_c = E/2$ 为质心系中总动能,$E_c = \hbar^2 k^2/2\mu$.

14.11　热中子被质子散射.姑且设作用势为球方势阱,且与自旋无关,即

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

已知势阱中存在一个束缚态($l=0$)能级,其值为

$$\varepsilon = -2.23\text{MeV}$$

(氘核结合能).热中子动能约为 $E_0 \approx \frac{1}{40}$eV.势阱宽(核力力程)$a \approx 2\times10^{-13}$cm,$V_0$ 约 25～30MeV.试证明散射只在 s 道($l=0$)进行,总截面可以近似表示成

$$\sigma_0 \approx \frac{4\pi\hbar^2}{m\ |\ \varepsilon\ |}$$

证　以 m 表示中子质量,中子-质子体系的折合质量 $\mu \approx m/2$.当热中子以实验室功能

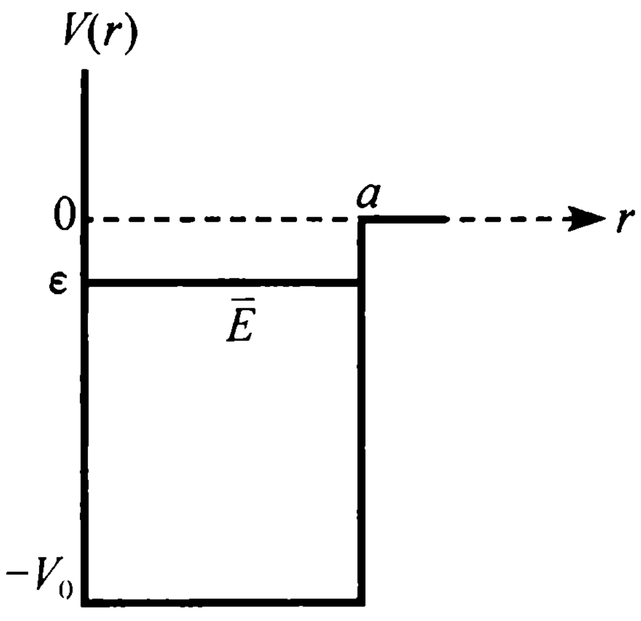


图 14.11

$$E_0 \approx \frac{1}{40}\text{eV}$$

入射,质心系中总动能约为

$$E \approx \frac{1}{2}E_0 \approx \frac{1}{80}\text{eV}$$

因此

$$k = \sqrt{2\mu E}/\hbar \approx \sqrt{mc^2 E}/\hbar c \approx 1.7 \times 10^8 \text{cm}^{-1}$$

$$ka \approx 3.5 \times 10^{-5} \ll 1$$

因此只需考虑 s 波散射. s 态波函数可以表示成

$$\psi(r) = u(r)/r$$

束缚态和散射态都是 s 态,其波函数分别记为

$$\psi_\varepsilon = \frac{u_\varepsilon(r)}{r}, \quad \psi_E = \frac{u_E(r)}{r} \tag{1}$$

u_ε 和 u_E 分别满足径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}u''_\varepsilon + V(r)u_\varepsilon = \varepsilon u_\varepsilon \quad (\varepsilon < 0) \tag{2}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}u''_{E'} + V(r)u_E = Eu_E \quad (E > 0) \tag{3}$$

在势阱内($r<a$),$V(r)=-V_0$,由于 $V_0 \gg E, |\varepsilon|$,如略去方程中含有 ε 和 E 的项,对波函数并无多大影响. 由此可以断定

$$u_\varepsilon \approx u_E, \quad r < a \tag{4}$$

阱外($r>a$)$V(r)=0$,方程(2)和(3)的解可以表示成

$$u_\varepsilon(r) = Ce^{-\beta r}, \quad r > a, \quad \beta = \sqrt{2\mu|\varepsilon|}/\hbar \tag{5}$$

$$u_E(r) = A\sin(kr + \delta_0), \quad r > a \tag{6}$$

(均已考虑到 $r\to\infty$ 处的边界条件.)在 $r=a$ 处,势阱内、外波函数应满足 u'/u 连续的条件. 由于在阱内 $u_\varepsilon \approx u_E$,故应有

$$\left.\frac{u'_\varepsilon}{u_\varepsilon}\right|_{r=a} \approx \left.\frac{u'_E}{u_E}\right|_{r=a} \tag{7}$$

而由阱外波函数的表示式(5)、(6)可得

$$\left.\frac{u'_\varepsilon}{u_\varepsilon}\right|_{r=a} = -\beta, \quad \left.\frac{u'_E}{u_E}\right|_{r=a} = k\cot(ka + \delta_0) \tag{8}$$

因此

$$k\cot(ka+\delta_0)\approx-\beta=-\sqrt{2\mu|\varepsilon|}/\hbar \tag{9}$$

上式就是确定相移 δ_0 的方程(近似的),成立条件为 $V_0\gg E,|\varepsilon|$.

当 $E\to0,ka\to0$,式(9)成为

$$k\cot\delta_0\approx-\beta=-\sqrt{2\mu|\varepsilon|}/\hbar\quad(k\to0) \tag{10}$$

所以 $1/\beta$ 就是散射长度[参看 14.5 题式(7)]. 散射振幅为

$$f=\frac{1}{k\cot\delta_0-\mathrm{i}k}=-\frac{1}{\beta+\mathrm{i}k} \tag{11}$$

s 波总截面为

$$\sigma_0=4\pi|f|^2=\frac{4\pi}{\beta^2+k^2}=\frac{4\pi\hbar^2}{2\mu(|\varepsilon|+E)} \tag{12}$$

热中子能量 E 远小于氘核结合能$|\varepsilon|$,上式中略去 E,即得

$$\boxed{\sigma_0\approx\frac{2\pi\hbar^2}{\mu|\varepsilon|}\approx\frac{4\pi\hbar^2}{m|\varepsilon|}} \tag{13}$$

以 ε 及 m(中子质量)之值代入上式,算出 $\sigma_0\approx2.3\times10^{-24}\,\mathrm{cm}^2$.

讨论　1°　本题所得主要结果式(10)至(13),均和势阱的深度 V_0 及宽度 a 无直接关系,亦即和作用势的具体函数形式无关. 只要是短程作用($ka\ll1$),并满足条件$|\varepsilon|\ll V_0$,式(10)至(13)即可成立.

2°　散射长度 a_0 和束缚态能级 ε 的关系为

$$1/a_0=\beta=\sqrt{2\mu|\varepsilon|}/\hbar$$

因此,当势阱中存在束缚态能级时,散射长度必为正值;反之,如 $a_0<0$,则势阱中必然不存在束缚态能级. 可以想象,如势阱适当地变得更浅、更窄,则能级 ε 的绝对值将越来越小、而趋于 0,这时 a_0 为很大的正值($a_0\to\infty$). 如势阱再进一步变浅、变窄,a_0 将变为很大的负值($1/a_0$ 由稍大于 0 变为稍小于 0),这时势阱中已经不存在束缚态能级,但有时仍称由下式定义的量

$$\varepsilon=\frac{\hbar^2}{2\mu a_0^2}(a_0\text{ 为很大的负值})$$

为该势阱的“虚能级”,意思是,只要势阱稍为变深或变宽,该“虚能级”就可以变成真实的能级.

3°　式(11)中,k 为正实数. 但如将式(11)解析延拓到 E 可以取一切复数值,则显然 $k=\mathrm{i}\beta$(即 $E=-|\varepsilon|$)为散射振幅 f 的奇点. 可以普遍证明①,分立能级是散

---

① 参看 Landau 等. 量子力学. 北京:高等教育出版社,1980. § 128.

射振幅 f 的单极点(在解析延拓的意义上).

4° 事实上,中子-质子作用势和自旋有关.氘核自旋为 1,故本题结果相当于 n-p 自旋三重态($S=1$)的散射. n-p 体系处于自旋单态($S=0$)时,不存在束缚态,散射长度为负值(参看下题).

14.12 实验发现,中子-质子低能 s 波散射的散射振幅和散射截面与中子-质子体系的自旋状态有关.对于自旋单态和自旋三重态,散射振幅分别为

$$f_1 = -2.37\times10^{-12}\,\text{cm},\quad f_3 = 0.538\times10^{-12}\,\text{cm}$$

(a) 分别求自旋单态及自旋三重态的总散射截面;

(b) 如入射中子(n)和质子(p)都是未极化的,求总截面;

(c) 如入射中子自旋"向上",质子靶自旋"向下",求总截面以及散射后 n、p 自旋均转向相反方向的概率.

解 (a)以 ψ_i 表示入射波,ψ_s 表示散射波.如散射振幅与自旋无关,s 波散射过程可以表示成

$$\psi_i = e^{ikz} \to \psi_s \approx f\frac{e^{ikr}}{r} \tag{1}$$

其中箭头表示由入射波转化成散射波,f 为散射振幅.如果散射作用势与自旋有关,则散射振幅 f 也与体系的自旋状态有关,式(1)应改为

$$\chi_{00}\,e^{ikz} \to f_1\,\chi_{00}\,\frac{e^{ikr}}{r}$$

$$\chi_{1M}e^{ikz} \to f_3\,\chi_{1M}\,\frac{e^{ikr}}{r},\quad M=1,0,-1 \tag{2}$$

其中χ_{00}表示 n-p 体系自旋单态($S=0$),χ_{1M}表示自旋三重态($S=1$).

s 波散射的总截面为

$$\sigma = 4\pi\,|\,f\,|^2 \tag{3}$$

自旋单态和三重态的总截面分别为

$$\begin{aligned}\sigma_1 &= 4\pi\,|\,f_1\,|^2 = 70.6\times10^{-24}\,\text{cm}^2\\ \sigma_3 &= 4\pi\,|\,f_3\,|^2 = 3.64\times10^{-24}\,\text{cm}^2\end{aligned} \tag{4}$$

(b) 如 n、p 均未极化,即自旋指向是混乱的,则构成单态($S=0$)的概率为 1/4,构成三重态($S=1$)的概率为 3/4,因此总截面应为

$$\begin{aligned}\sigma &= \frac{1}{4}\sigma_1 + \frac{3}{4}\sigma_3 = \pi(|\,f_1\,|^2 + 3\,|\,f_3\,|^2)\\ &= 20.4\times10^{-24}\,\text{cm}^2\end{aligned} \tag{5}$$

(c) 入射波波函数的自旋部分为

$$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_{\mathrm{n}}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_{\mathrm{p}}=\frac{1}{2}\left\{\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_{\mathrm{n}}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_{\mathrm{p}}+\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_{\mathrm{n}}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_{\mathrm{p}}\right\}+\frac{1}{2}\left\{\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_{\mathrm{n}}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_{\mathrm{p}}-\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_{n}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_{\mathrm{p}}\right\}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}}\chi_{10}+\frac{1}{\sqrt{2}}\chi_{00}$$

入射波为

$$\psi_i=\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{10}+\chi_{00})\mathrm{e}^{ikz} \tag{6}$$

按照式(2),散射波为

$$\psi_s\approx\frac{1}{\sqrt{2}}(f_1\chi_{00}+f_3\chi_{10})\frac{\mathrm{e}^{ikr}}{r} \tag{7}$$

散射截面和散射波的径向流密度成正比,后者定义是

$$j_s=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2\mu}\psi_s^{+}\frac{\partial}{\partial r}\psi_s+\mathrm{c.c.} \tag{8}$$

对于式(1),略去 $1/r^3$ 以上小量后,求出

$$j_s=\frac{\hbar k}{\mu}\frac{1}{r^2}\mid f\mid^2 \tag{9}$$

对于式(7),注意到χ_{00}和χ_{10}的正交归一性,容易算出

$$j_s=\frac{\hbar k}{\mu}\frac{1}{r^2}\frac{1}{2}(f_1^2+f_3^2) \tag{10}$$

式(10)相当于式(9)中$|f|^2$ 换成$\frac{1}{2}(f_1^2+f_3^2)$. 总截面可在式(3)中作同样的代换而得出

$$\sigma=2\pi(f_1^2+f_3^2)=\frac{1}{2}(\sigma_1+\sigma_3)=37.1\times10^{-24}\,\mathrm{cm}^2 \tag{11}$$

最后,为了计算 n、p 自旋反转概率,将式(7)写成

$$\psi_s=\frac{1}{\sqrt{2}}(f_1\chi_{00}+f_3\chi_{10})\frac{\mathrm{e}^{ikr}}{r}$$

$$=\left\{\frac{1}{2}(f_3+f_1)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_{\mathrm{n}}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_{\mathrm{p}}+\frac{1}{2}(f_3-f_1)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_{\mathrm{n}}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_{\mathrm{p}}\right\}\frac{\mathrm{e}^{ikr}}{r} \tag{12}$$

其中第一项的自旋状态和入射波相同,第二项反映出由于散射而发生了 n、p 自旋指向反转. 因此

$$\text{自旋反转概率}=\frac{(f_3-f_1)^2}{(f_3+f_1)^2+(f_3-f_1)^2}=\frac{(f_3-f_1)^2}{2(f_3^2+f_1^2)}=0.716 \tag{13}$$

14.13 同上题,设质子自旋"向上"(指向 z 轴方向,即入射方向),入射中子自旋指向(θ,φ)方向,求低能 s 波散射总截面.

解 以 ξ、η 分别表示散射前中子和质子的自旋态,它们是(参看 6.12 题)

$$\xi=\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{pmatrix},\quad \eta=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \tag{1}$$

二者都是归一化的,但是并不正交,标积为

$$\xi^{+}\eta=\eta^{+}\xi=\cos\frac{\theta}{2} \tag{2}$$

散射前 n-p 体系的自旋态为

$$\chi(\mathrm{n},\mathrm{p})=\xi(\mathrm{n})\eta(\mathrm{p})=\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{pmatrix}_{\mathrm{n}}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_{\mathrm{p}} \tag{3}$$

需要将$\chi(\mathrm{n},\mathrm{p})$展开成自旋单态和三重态之和. 单态是交换反对称的,三重态则是对称的. 由单粒子态 ξ、η 可以构成的对称和反对称态显然如下:

$$\begin{aligned}&\text{对称态}\quad \chi^{(S)}=\frac{1}{2}[\xi(\mathrm{n})\eta(\mathrm{p})+\eta(\mathrm{n})\xi(\mathrm{p})]\\ &\text{反对称态}\quad \chi^{(A)}=\frac{1}{2}[\xi(\mathrm{n})\eta(\mathrm{p})-\eta(\mathrm{n})\xi(\mathrm{p})]\end{aligned} \tag{4}$$

$\chi^{(S)}$ 和$\chi^{(A)}$ 显然是正交的,但不归一化,

$$\begin{aligned}\langle\chi^{(S)}\mid\chi^{(S)}\rangle&=\frac{1}{4}[2+\xi^{+}(\mathrm{n})\eta(\mathrm{n})\eta^{+}(\mathrm{p})\xi(\mathrm{p})+\mathrm{c.c.}]\\ &=\frac{1}{2}\left(1+\cos^2\frac{\theta}{2}\right)\end{aligned} \tag{5}$$

$$\langle\chi^{(A)}\mid\chi^{(A)}\rangle=\frac{1}{2}\left(1-\cos^2\frac{\theta}{2}\right)=\frac{1}{2}\sin^2\frac{\theta}{2}$$

入射波波函数可以表示成

$$\psi_i=\xi(\mathrm{n})\eta(\mathrm{p})e^{ikz}=[\chi^{(S)}+\chi^{(A)}]e^{ikz} \tag{6}$$

仿照上题,可知散射波为

$$\psi_s = [f_3\chi^{(S)} + f_1\chi^{(A)}]\frac{e^{ikr}}{r} \tag{7}$$

总截面为

$$\begin{aligned}\sigma &= 4\pi[f_3^2\langle\chi^{(S)} \mid \chi^{(S)}\rangle + f_1^2\langle\chi^{(A)} \mid \chi^{(A)}\rangle] \\ &= 4\pi\left[f_3^2 \cdot \frac{1}{2}\left(1+\cos^2\frac{\theta}{2}\right)+ f_1^2 \cdot \frac{1}{2}\sin^2\frac{\theta}{2}\right] \\ &= \frac{1}{2}\sigma_1\sin^2\frac{\theta}{2} + \frac{1}{2}\sigma_3\left(1+\cos^2\frac{\theta}{2}\right) \\ &= \frac{1}{4}(1-\cos\theta)\sigma_1 + \frac{1}{4}(3+\cos\theta)\sigma_3 \end{aligned} \tag{8}$$

讨论　1°　如果中子的极化方向 $\theta=0$，入射波自旋态

$$\chi(\mathrm{n,p}) = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_{\mathrm{n}}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_{\mathrm{p}} = \chi_{11}$$

为单纯三重态，式(8)给出 $\sigma=\sigma_3$.

如果 $\theta=\pi$，则入射波自旋态为 $\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_{\mathrm{n}}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_{\mathrm{p}}$，式(8)给出

$$\sigma = \frac{1}{2}(\sigma_1+\sigma_3)$$

这种情况类似于上题(c).

2°　如果入射中子是未极化的，则计算有效总截面时应将式(8)对于各 (θ,φ) 方向平均. 由于 $\cos\theta$ 平均为 0，故得

$$\sigma_{\text{有效}} = \frac{1}{4}\sigma_1 + \frac{3}{4}\sigma_3$$

这种情况类似于上题(b).

14.14　质量为 μ 的粒子被中心势场

$$V(r) = \frac{\alpha}{r^2}, \quad \alpha > 0$$

散射. (a)求各分波相移 δ_l；(b)在条件 $\frac{\mu\alpha}{\hbar^2} \ll \frac{1}{8}$ 下，求相移，散射振幅及微分截面的近似公式；(c)用 Born 近似计算散射振幅及微分截面，并和(b)的结果比较.

解　(a) 定态 Schrödinger 方程为

$$\nabla^2\psi + \left[k^2 - \frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)\right]\psi = 0 \tag{1}$$

令

$$\psi=\sum_l R_l(r)\mathrm{Y}_{l0}(\theta)=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\sum_l\sqrt{2l+1}R_l(r)P_l(\cos\theta) \tag{2}$$

则 R_l 满足径向方程

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}R_l+\frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}R_l+\left[k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}-\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2r^2}\right]R_l=0 \tag{3}$$

当 $\alpha=0$(势场为 0,粒子作自由运动)时,方程(3)满足边界条件

当 $r\to 0,\infty$ 时, $R_l(r)$ 有限

的解为

$$R_l^{(0)}(r)=j_l(kr)=\sqrt{\frac{\pi}{2kr}}J_{l+\frac{1}{2}}(kr) \tag{4}$$

$kr\to\infty$处,渐近表示为

$$R_l^{(0)}(r)=j_l(kr)\xrightarrow{r\to\infty}\frac{1}{kr}\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right) \tag{5}$$

如令

$$l(l+1)+2\mu\alpha/\hbar^2=\nu(\nu+1) \tag{6}$$

即

$$\nu+\frac{1}{2}=\left[\left(l+\frac{1}{2}\right)^2+\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{6'}$$

则式(3)可以写成

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}R_l+\frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}R_l+\left[k^2-\frac{\nu(\nu+1)}{r^2}\right]R_l=0 \tag{3'}$$

在原点为有限的解为

$$R_l(r)=\sqrt{\frac{\pi}{2kr}}J_{\nu+\frac{1}{2}}(kr) \tag{7}$$

式(7)和(4)的差别在于 l 换成了 ν. 式(7)的渐近表示为

$$R_l(r)\xrightarrow{r\to\infty}\frac{1}{kr}\sin\left(kr-\frac{\nu\pi}{2}\right) \tag{8}$$

按照分波法普遍理论,R_l 的渐近表示为(略去常数因子)

$$R_l(r)\xrightarrow{r\to\infty}\frac{1}{kr}\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right) \tag{9}$$

比较式(8)、(9)，即得 l 分波的相移公式：

$$\delta_l = -\frac{\pi}{2}(\nu - l)$$

$$= -\frac{\pi}{2}\left[\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2 + \frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}} - \left(l+\frac{1}{2}\right)\right] \tag{10}$$

注意，δ_l 与入射能量($E=\hbar^2k^2/2\mu$)无关. 散射振幅为

$$f(\theta) = \frac{1}{k}\sum_l (2l+1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}\sin\delta_l P_l(\cos\theta) \tag{11}$$

显然 $f(\theta)\propto 1/k$，因此微分截面 $\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2\propto 1/E$.

(b) 如果$\frac{\mu\alpha}{\hbar^2}\ll\frac{1}{8}$，可对式(6′)和(10)作近似展开，

$$\nu+\frac{1}{2} = \left(l+\frac{1}{2}\right)\left[1+\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}\right]^{1/2}$$

$$\approx l+\frac{1}{2}+\frac{\mu\alpha}{\left(l+\frac{1}{2}\right)\hbar^2}$$

$$\delta_l = -\frac{\pi}{2}(\nu-l) \approx -\frac{\pi\mu\alpha}{(2l+1)\hbar^2} \tag{12}$$

注意，$|\delta_l|\ll 1$，因此式(11)中可取

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}\approx 1, \quad \sin\delta_l\approx\delta_l$$

从而得到

$$f(\theta)\approx\frac{1}{k}\sum_l(2l+1)\delta_l P_l(\cos\theta)$$

$$= -\frac{\pi\mu\alpha}{\hbar^2 k}\sum_{l=0}^{\infty}P_l(\cos\theta) = -\frac{\pi\mu\alpha}{2\hbar^2 k\sin\frac{\theta}{2}} \tag{13}$$

计算中利用了公式

$$1/\sin\frac{\theta}{2} = 2\sum_{l=0}^{\infty}P_l(\cos\theta) \tag{14}$$

微分截面为

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 \approx \frac{\pi^2\mu^2\alpha^2}{4\hbar^4k^2}\frac{1}{\sin^2\frac{\theta}{2}} \tag{15}$$

由于 $\theta\to 0$ 处 $\sigma(\theta)\propto 1/\theta^2$，总截面是发散的.

注意,即使条件$\frac{\mu\alpha}{\hbar^2}\ll\frac{1}{8}$不成立,对于足够大的$l$,式(12)仍可成立,因此$\theta\to0$处$f(\theta)$和$\sigma(\theta)$的奇异性仍如式(13)和(15)所示,总截面仍是发散的.发散是由角动量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.

(c) 按照 Born 近似,散射振幅为

$$f(\theta)=-\frac{2\mu}{\hbar^2}\int_0^\infty \mathrm{d}r r^2V(r)\frac{\sin qr}{qr}=-\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}\int_0^\infty \mathrm{d}r\frac{\sin qr}{qr}$$

$$=-\frac{\pi\mu\alpha}{\hbar^2 q}=-\pi\mu\alpha/2\hbar^2 k\sin\frac{\theta}{2}\quad\left(q=2k\sin\frac{\theta}{2}\right)\tag{16}$$

和式(13)一致,因此微分截面仍由式(15)表示,总截面是发散的.①

附注 式(14)证明如下:

利用$P_l(x)$的母函数公式

$$(1+z^2-2xz)^{-1/2}=\sum_l z^l P_l(x)$$

令$z\to1$,即得

$$\sum_l P_l(x)=1/\sqrt{2(1-x)}$$

再令$x=\cos\theta$,即得

$$\sum_l P_l(\cos\theta)=1/\sqrt{2(1-\cos\theta)}=1/2\sin\frac{\theta}{2}$$

此即式(14).

14.15 在弹性散射问题中,以入射方向为z轴,以θ表示散射角,入射波和散射波记为ψ_i和ψ_s,粒子动量记为$p=\hbar k$.如取入射波为

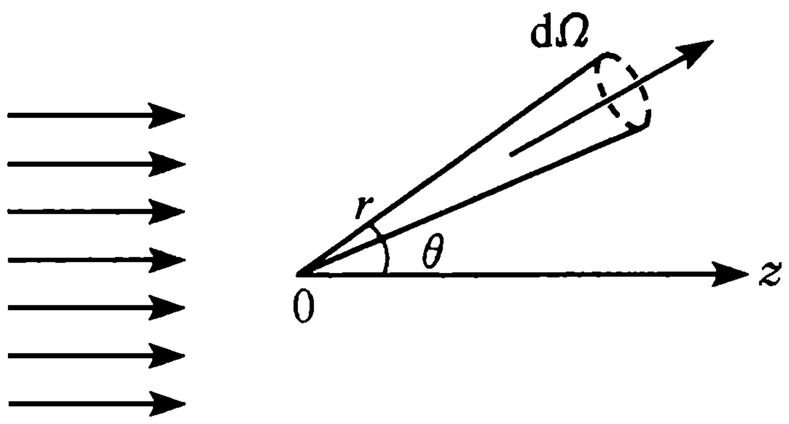


图 14.15

$$\psi_i=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}$$

在远离散射中心处($r\to\infty$),散射波的渐近形式为

$$\psi_s\xrightarrow{r\to\infty}f(\theta,\varphi)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}$$

$f(\theta,\varphi)$称为散射振幅.微分散射截面和总散射截面分别记为$\sigma(\theta,\varphi)$和σ_t,按照散射问题一般理论②,

$$\sigma(\theta,\varphi)=|f(\theta,\varphi)|^2$$

---

① 参考曾谨言.量子力学.下册.北京:科学出版社,1981. §10.2,10.5. D. ter Haar.量子力学习题集.北京:高等教育出版社,1965. §9.

② 参看曾谨言.量子力学.卷Ⅰ.北京:科学出版社,1997. §11.1.

$$\sigma_t = \int \sigma(\theta,\varphi)\mathrm{d}\Omega = \int |\ f(\theta,\varphi)\ |^2 \mathrm{d}\Omega$$

试证明下列“光学定理”：

$$\boxed{\sigma_t = \frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}f(0)}$$

证一　在远离散射中心处($r\to\infty$)，总波函数为

$$\psi = \psi_i + \psi_s \to \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} + f(\theta,\varphi)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}/r \tag{1}$$

径向流量为

$$j_r = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2\mu}\left(\psi^*\ \frac{\partial}{\partial r}\psi - \psi\frac{\partial}{\partial r}\psi^*\right) \tag{2}$$

考虑到 $z=r\cos\theta$，容易算出

$$\begin{aligned} j_r =& \frac{\hbar k}{\mu}\left[\cos\theta + \frac{ff^*}{r^2} + \frac{1+\cos\theta}{2r}(f\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr(1-\cos\theta)} + \text{c. c.})\right] \\ &+ \left[\frac{\mathrm{i}\hbar}{2\mu}\frac{f}{r^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr(1-\cos\theta)} + \text{c. c.}\right] \end{aligned} \tag{3}$$

其中 c. c. 表示前一项的共轭复数. 上式中第一项($\cos\theta$ 项)来自入射波 ψ_i，第二项(ff^* 项)来自散射波 ψ_s，其他各项来自 ψ_i 和 ψ_s 的“干涉效应”. 这些干涉项均含有因子 $\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}kr(1-\cos\theta)}$，由于 kr 很大，当 θ 变化时，这些干涉项将迅速振荡. 利用公式

$$\lim_{\alpha\to\infty}\alpha\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha x} = 2\mathrm{i}\delta(x), \quad x \geqslant 0 \tag{4}$$

可以将 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr(1-\cos\theta)}$ 表示成

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr(1-\cos\theta)} \xrightarrow{kr\to\infty} \frac{2\mathrm{i}}{kr}\delta(1-\cos\theta) \tag{5}$$

代入式(3)，即得

$$\begin{aligned} j_r =& \frac{\hbar k}{\mu}\left(\cos\theta + \frac{ff^*}{r^2}\right) \\ &+ \mathrm{i}\frac{\hbar}{\mu}(f - f^*)\frac{1+\cos\theta}{r^2}\delta(1-\cos\theta) \\ &- \frac{\hbar}{k\mu}\frac{f+f^*}{r^3}\delta(1-\cos\theta) \end{aligned} \tag{6}$$

在半径为 r 的大球面上，净流出量应该为 0，即

$$\oint j_r r^2 \mathrm{d}\Omega = 0 \tag{7}$$

注意到

$$\oint \cos\theta \mathrm{d}\Omega = 0$$

$$\oint \delta(1-\cos\theta)\mathrm{d}\Omega = \oint \delta(1-\cos\theta)\sin\theta \mathrm{d}\theta \mathrm{d}\varphi$$

$$= 2\pi \int_{\theta=0}^{\theta=\pi} \delta(1-\cos\theta)\mathrm{d}(1-\cos\theta) \quad (\text{令 } 1-\cos\theta = x)$$

$$= 2\pi \int_0^2 \delta(x)\mathrm{d}x = \pi$$

并注意到 $r\to\infty$ 处式(6)中 $1/r^3$ 项对积分无贡献,即得

$$\oint j_r r^2 \mathrm{d}r = \frac{\hbar k}{\mu}\int f^* f \mathrm{d}\Omega + \mathrm{i}\frac{2\pi\hbar}{\mu}[f(0) - f^*(0)] = 0$$

亦即

$$\sigma_t = \int f^* f \mathrm{d}\Omega = -\frac{2\pi}{k}\mathrm{i}[f(0) - f^*(0)]$$

$$= \frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}f(0) \tag{8}$$

此即光学定理,其中 $f(0)$为 $\theta=0$ 方向的散射振幅.

证二 根据分波法基本公式

$$f(\theta) = \frac{1}{k}\sum_l (2l+1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}\sin\delta_l P_l(\cos\theta) \tag{9}$$

$$\sigma_t = \frac{4\pi}{k^2}\sum_l (2l+1)\sin^2\delta_l \tag{10}$$

易得

$$f(0) = \frac{1}{k}\sum_l (2l+1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}\sin\delta_l \quad (P_l(1)=1)$$

$$\mathrm{Im}f(0) = \frac{1}{k}\sum_l (2l+1)\sin^2\delta_l$$

因此

$$\sigma_t = \frac{4\pi}{k^2}\sum_l (2l+1)\sin^2\delta_l = \frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}f(0) \tag{11}$$

此即光学定理. 这个证明的局限性是仅适用于中心力散射问题. 证一没有这种局限性.

附注 式(4)之证明如下:

设 $f(x)$为任何变化平缓的连续函数,应有

$$\int_{-a}^{a} f(x)\delta(x)\mathrm{d}x = f(0) \quad (a>0)$$

$$\int_0^a f(x)\delta(x)\mathrm{d}x = \frac{1}{2}f(0) \tag{12}$$

现在考虑积分

$$I = \int_0^a \alpha f(x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha x}\mathrm{d}x, \quad \alpha \to \infty$$

在 $x>0$ 处，由于 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha x}$ 迅速振荡，对积分无贡献. 积分之值主要来自 $x\approx 0$ 处，因此可取 $f(x)\sim f(0)$，从而得到

$$I = f(0)\int_0^a \alpha\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha x}\mathrm{d}x = -\mathrm{i}f(0)[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha a}-1]$$

当 $\alpha\to\infty$，$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha a}$ 为不定值，可取其局域平均为 0，因此

$$I = \int_0^a f(x)\alpha\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha x}\mathrm{d}x = \mathrm{i}f(0), \quad \alpha\to\infty$$

和式(12)比较，即得

$$\alpha\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha x} = 2\mathrm{i}\delta(x), \quad \alpha\to\infty$$

此即式(4)①.

14.16　关于质量为 m 的粒子对有限深球方势阱

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

的散射，用 Born 一级近似讨论其截面随能量的变化规律.

解　按 Born 一级近似，散射波幅为

$$\begin{aligned} f_B(\theta) &= \frac{2mV_0}{\hbar^2 q}\int_0^a r\sin qr\mathrm{d}r \\ &= \frac{2mV_0a^3}{\hbar^2}\left[\frac{\sin qa}{(qa)^3}-\frac{\cos qa}{(qa)^2}\right] \\ &= \frac{2mV_0a^3}{3\hbar^2}[3j_1(z)/z] \\ &= \frac{2mV_0a^3}{3\hbar^2}G(z) \end{aligned} \tag{2}$$

式中 $q=2k\sin\dfrac{\theta}{2}=q_{\max}\sin\dfrac{\theta}{2}$，$q_{\max}=2k=2\sqrt{2mE}/\hbar$，$z=qa$（无量纲），这里利用了球 Bessel 函数

---

① 参考 C. J. Joachain. Quantum Collision Theory. North-Holland, 1975. chapter 3.

$$j_1(z)=\frac{\sin z}{z^2}-\frac{\cos z}{z} \tag{3}$$

取 $G(z)=3j_1(z)/z$ 是为了方便,使 $G(0)=1$.

散射截面为

$$\sigma(\theta)=|\ f_B(\theta)\ |^2=\left(\frac{2mV_0a^3}{3\hbar^2}\right)^2|\ G(z)\ |^2 \tag{4}$$

$|G(z)|^2$ 随角度的变化,如图 14.16 所示. 图中给出了几种不同能量 E(即 $Z_{\max}$)下的曲线,能量 $E=Z_{\max}^2\hbar^2/8ma^2$,是为了便于和球方势阱中的束缚能级进行比较.

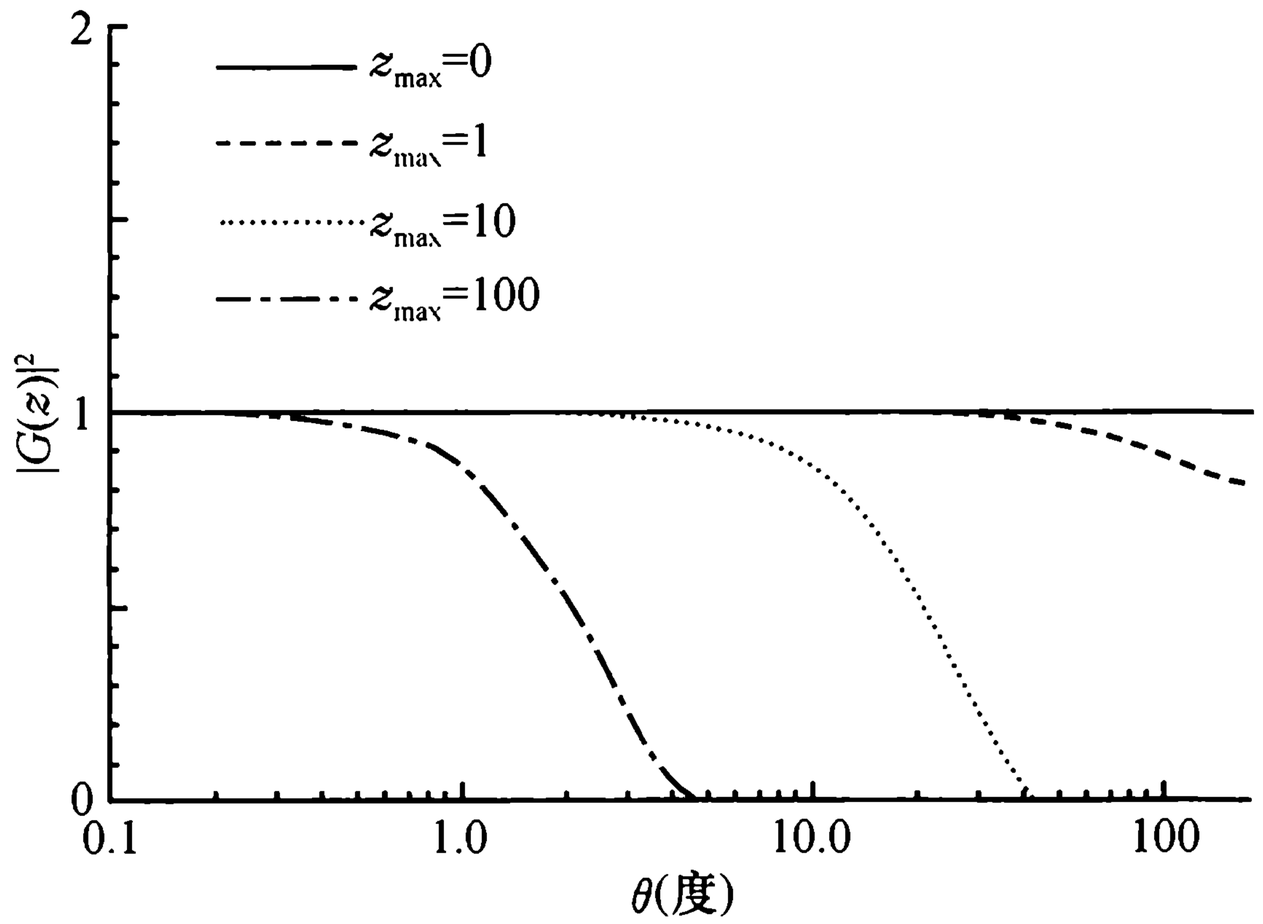


图 14.16 $|G(z)|^2$ 随角度 θ 的变化.

$G(z)=3j_1(z)/z, z=qa, z_{\max}=2ka, z=z_{\max}\sin\theta/2$.

随能量 E(即 $z_{\max}$)不同,$|G(z)|^2$ 曲线呈现不同行为

讨论

1° 低能散射($z=qa\to 0$)

$$f_B(\theta)\approx\frac{2mV_0a^3}{3\hbar^2} \tag{5}$$

与散射角无关,是各向同性散射.

2° 高能散射($qa\gg 1$),截面的峰的位置往小角度($\theta\sim 0$)靠近. 由于 $\sin qa=\sin\left(2ka\sin\frac{\theta}{2}\right)$,相位迅速变化,$\theta$ 角实际上局限在 $\theta\leqslant\theta_{\max}$,而 $2ka\sin\frac{\theta}{2}\leqslant ka\theta_{\max}\sim 1$,$\theta_{\max}\sim 1/ka$. 散射总截面 σ_t 可粗略估算如下:

$$\sigma_t=\int\sigma(\theta)\mathrm{d}\Omega\approx 2\pi\int_0^{1/ka}|\ f_B(\theta)\ |^2\sin\theta\mathrm{d}\theta$$

$$\approx 2\pi\ |\ f(0)\ |^2\int_0^{1/ka}\theta\mathrm{d}\theta\approx\frac{\pi\ |\ f(0)\ |^2}{k^2a^2}\propto\frac{1}{E} \tag{6}$$

σ_t 随 E 增大而减小.

14.17　对于两束全同粒子的散射，计及波函数的交换对称性，证明：

(1) 对于自旋 $s=0$ 的全同粒子，散射截面为

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2+|f(\pi-\theta)|^2+2\mathrm{Re}[f(\theta)f^*(\pi-\theta)] \tag{1}$$

(2) 对于自旋 $s=1/2$ 的非极化全同粒子束，

$$\sigma(\theta)=\frac{1}{4}|f(\theta)+f(\pi-\theta)|^2+\frac{3}{4}|f(\theta)-f(\pi-\theta)|^2$$

$$=|f(\theta)^2|+|f(\pi-\theta)|^2-\mathrm{Re}[f(\theta)f^*(\pi-\theta)] \tag{2}$$

(3) 对于自旋 $s=1$ 的非极化全同粒子束，

$$\sigma(\theta)=\frac{5+1}{9}|f(\theta)+f(\pi-\theta)|^2+\frac{3}{9}|f(\theta)-f(\pi-\theta)|^2$$

$$=|f(\theta)|^2+|f(\pi-\theta)|^2+\frac{2}{3}\mathrm{Re}[f(\theta)f^*(\pi-\theta)] \tag{3}$$

(4) 对于自旋为 s 的全同粒子束，散射截面的表示式为

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2+|f(\pi-\theta)|^2+\frac{2(-1)^{2s}}{(2s+1)}\mathrm{Re}[f(\theta)f^*(\pi-\theta)] \tag{4}$$

14.18　荷电为 Z_1e 和 Z_2e 的两个粒子的 Coulomb 散射，$V(r)=Z_1Z_2e^2/r$，在 Born 近似下，散射振幅为

$$f_B(\theta)=-\frac{2\mu Z_1Z_2e^2}{\hbar^2}\frac{1}{q^2} \tag{1}$$

$q^2=4k^2\sin^2\dfrac{\theta}{2}$. 散射截面为

$$\sigma_B(\theta)=|f_B(\theta)|^2=\left(\frac{2\mu Z_1Z_2e^2}{\hbar^2q^2}\right)^2=\left(\frac{Z_1Z_2e^2}{4E}\right)^2\frac{1}{\sin^4\theta/2} \tag{2}$$

更严格求解 Coulomb 散射，可得出散射波幅为

$$f_C(\theta)=f_B(\theta)\exp\left[-\mathrm{i}\eta\ln\left(\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\right)+2\mathrm{i}\beta\right] \tag{3}$$

$$\eta=\frac{\mu Z_1Z_2e^2}{\hbar^2k}$$

$$e^{2\mathrm{i}\beta}=\Gamma(1+\mathrm{i}\eta)/\Gamma(1-\mathrm{i}\eta)$$

η 依赖于 Planck 常数 $\hbar$，是一种量子效应. 当 $\hbar\to0$ 时，$\eta\to\infty$，此急剧振荡的相因子，对于在有限 θ 角范围中的截面的观测值无贡献. $|f_C(\theta)|^2=|f_B(\theta)|^2$. 但对于全同粒子($Z_1=Z_2=Z$)的散射，此相因子有可观测的影响. 干涉项(见上题)

$$\mathrm{Re}[f_C(\theta)f_C^*(\pi-\theta)]$$

$$\propto \frac{1}{\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)}\mathrm{Re}\left[e^{-i\eta}\ln\left(\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\right)\cdot e^{i\eta}\ln\left(\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\right)\right]$$

$$= \frac{1}{\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)}\mathrm{Re}\left[e^{-i\eta}\ln\left(\tan^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\right)\right]$$

$$= \frac{1}{\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)}\cos\left(\eta\ln\left(\tan^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\right)\right) \tag{4}$$

式中

$$\eta = \frac{\mu Z^2 e^2}{\hbar^2 k}$$

证明,对于自旋为 0 的两束全同荷电 Ze 的粒子,散射截面为

$$\sigma_C(\theta) = \left(\frac{Z^2e^2}{4E}\right)^2\left[\frac{1}{\sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)} + \frac{1}{\cos^4\left(\frac{\theta}{2}\right)} + \frac{2\cos\left(\eta\ln\left(\tan^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\right)\right)}{\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)}\right] \tag{5}$$

第十五章　对　称　性

15.1　考虑由两个全同粒子组成的体系. 设可能的单粒子态为 ϕ_1、ϕ_2、ϕ_3，试求体系的可能态数目. 分三种情况讨论：(a)粒子为 Bose 子(Bose 统计)；(b)粒子为 Fermi 子(Fermi 统计)；(c)粒子为经典粒子(Boltzmann 统计).

解　以符号△、○、□分别表示 ϕ_1、ϕ_2、ϕ_3 态. Bose 子体系的量子态对于两个粒子的交换必须是对称的，Fermi 子体系则必须是反对称的，经典粒子被认为是可区分的，体系状态没有对称性的限制.

当两个粒子处于相同的单粒子态时，体系的状态必然是交换对称的，这种状态只能出现于 Bose 子体系和经典粒子体系，体系波函数的构造方式为

$$\psi(1,2)=\phi_i(1)\phi_i(2),\quad i=1,2,3$$

当两个粒子处于不同的单粒子态(ϕ_i 和 ϕ_j，$i\neq j$)时，如果是经典粒子，有两种体系态，即

$$\psi(1,2)=\phi_i(1)\phi_j(2),\quad \phi_i(2)\phi_j(1),\quad i\neq j$$

由单粒子态 ϕ_i 和 ϕ_j 可以构成对称和反对称的体系态各一种，即

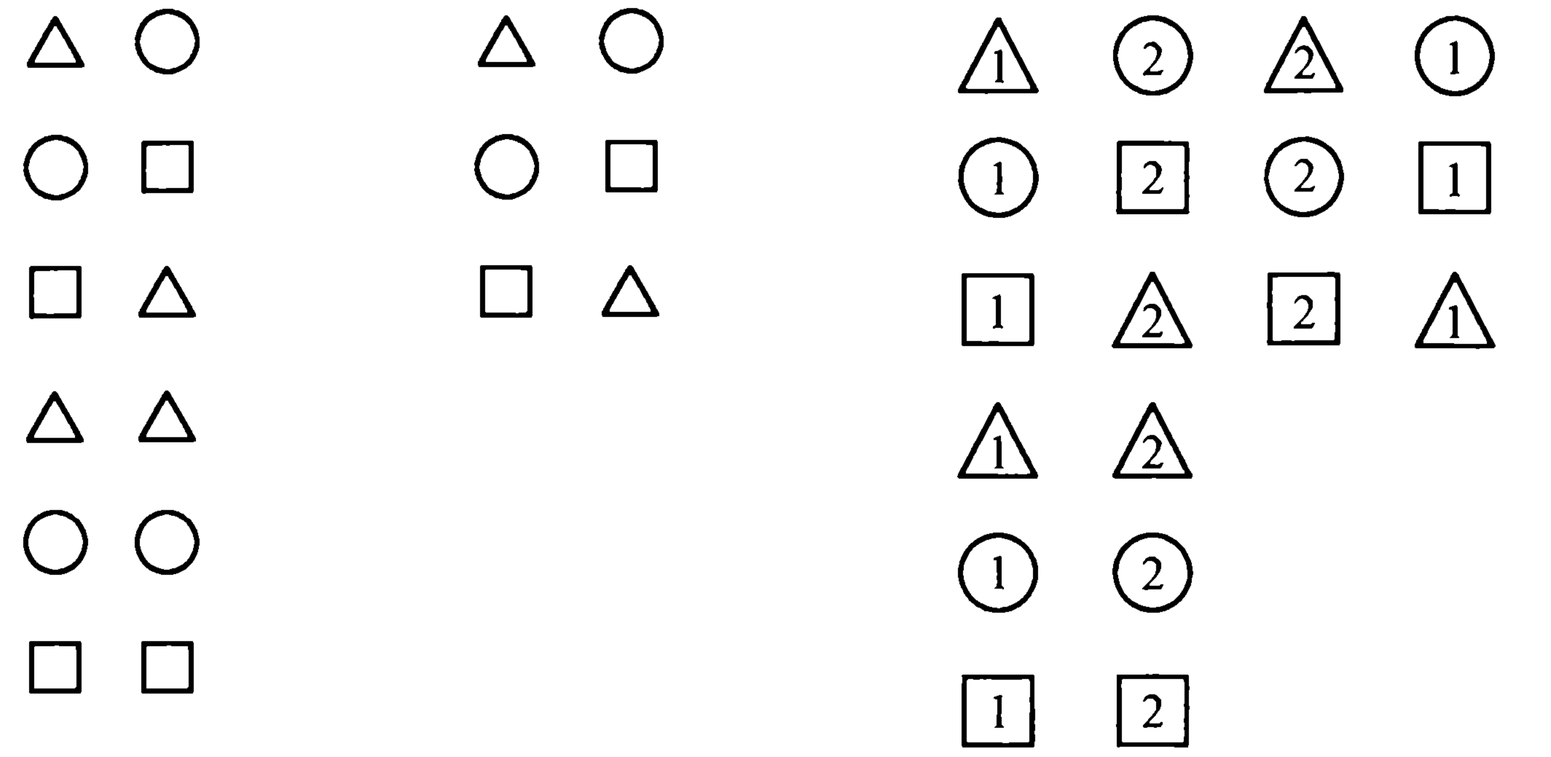
$$\psi(1,2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_i(1)\phi_j(2)\pm\phi_i(2)\phi_j(1)],\quad i\neq j$$

对称态适用于 Bose 子体系，反对称态适用于 Fermi 子体系.

对于两粒子体系来说，Bose 子体系的可能态总数与 Fermi 子体系的可能态总数之和，显然正好等于经典粒子(可区分粒子)体系的可能态总数. 如可能的单粒子态为 k 个，则三种两粒子体系的可能态数目如下：

经典粒子	$N=k^2$
Fermi 子	$N=\frac{1}{2}k(k-1)$
Bose 子	$N=\frac{1}{2}k(k+1)$

本题 $k=3$，Fermi 子、Bose 子、经典粒子体系的可能态数目分别为 3、6、9. 体系态的构造方式如下：



Bose 子体系态(共 6 种,均为交换对称态)有

$$\phi_1(1)\phi_1(2),\quad \phi_2(1)\phi_2(2),\quad \phi_3(1)\phi_3(2)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_i(1)\phi_j(2)+\phi_i(2)\phi_j(1)],\quad i,j=1,2,3,\quad i\neq j$$

Fermi 子体系态(反对称态)只有 3 种:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_i(1)\phi_j(2)-\phi_i(2)\phi_j(1)]$$

$$i,j=1,2,3,\quad i\neq j$$

当全同粒子体系的粒子数超过两个时,一般来说,对于粒子间的交换完全对称的状态(适用于 Bose 子)数目与完全反对称的状态(适用于 Fermi 子)数目之和,总是小于没有对称性限制的体系状态(适用于经典粒子)总数. 亦即,后者除了完全对称态和完全反对称态,还有一些没有对称性或只有混杂对称性的状态. 例如,由三个全同粒子组成的体系,如可能的单粒子态有 3 种,则在 Boltzmann 统计、Bose 统计、Fermi 统计下,体系的可能态数目分别为 27、10 和 1.

15.2 设 $^{8}_{4}\mathrm{Be}$ 核可以看成由两个 α 粒子组成,证明总轨道角动量量子数 L 必为偶数(取质心坐标系).

证 α 粒子的自旋为 0,只需考虑轨道波函数. 在质心坐标系(即 Be 核为静止的坐标系)中,两 α 粒子(1,2)体系的波函数可以表示成

$$\Psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=\psi(\boldsymbol{r})=R(r)\mathrm{Y}_{LM}(\theta,\varphi) \tag{1}$$

其中 $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2$ 为两 α 粒子的相对坐标,(r,θ,φ) 是 $\boldsymbol{r}$ 的球坐标表示. 波函数(1)已经取为相对运动角动量(在质心系中,就是总角动量)$\boldsymbol{L}$ 的平方和 z 分量$(\boldsymbol{L}^2,L_z)$的共同本征函数.(设两个 α 粒子间的作用势只与 $r=|\boldsymbol{r}|$ 有关.)

交换两个 α 粒子(即交换 $\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2$)时,$r=|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|$ 不变,θ、φ 的变化为

$$\theta\to\pi-\theta,\quad \varphi\to\pi+\varphi$$

因此，波函数的变化为

$$P_{12}\Psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=\Psi(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_1)=\psi(-\boldsymbol{r})=R(r)\mathrm{Y}_{LM}(\pi-\theta,\pi+\varphi)$$
$$=(-1)^L R(r)\mathrm{Y}_{LM}(\theta,\varphi)=(-1)^L\psi(\boldsymbol{r})=(-1)^L\Psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) \quad (2)$$

α 粒子为玻色子，玻色子体系的总波函数必须是交换对称的，即必须满足

$$P_{12}\Psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=\Psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) \quad (3)$$

只有 $L=0,2,4,\cdots$(偶数)才能满足这条件，因此 L 必须取偶数.

15.3　两个全同粒子，处于中心外力场中，单粒子能级为 E_{nlj}(与单粒子总角动量量子数 j 有关). 试证明：不管它们是 Bose 子(j 为整数)还是 Fermi 子(j 为半奇数)，当它们处于同一个单粒子能级时，体系的总角动量量子数 J 必为偶数.

证　这两粒子体系的总波函数可以取为守恒量完全集$(H,\boldsymbol{J}_1^2,\boldsymbol{J}_2^2,\boldsymbol{J}^2,J_z)$的共同本征函数

$$\Psi(1,2)=R(r)\psi(j_1j_2JM) \quad (1)$$

其中 $R(r)$为径向波函数$(r=|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|)$，它是交换对称的；$\psi(j_1j_2JM)$为$(\boldsymbol{J}_1^2,\boldsymbol{J}_2^2,\boldsymbol{J}^2,J_z)$的共同本征函数，它的交换对称性和 $\Psi(1,2)$的相同. 当两个粒子处于同一条能级 E_{nlj}时，$j_1=j_2=j$，按角动量耦合法则，当不考虑对称性时 J 的可能取值是

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

以 ϕ_{jm}表示单粒子角动量本征态，按照角动量耦合的理论，在非耦合表象中 $\psi(jjJM)$的表示式为

$$\psi(jjJM)=\sum_{m_1,m_2}\langle jm_1jm_2\mid JM\rangle\phi_{jm_1}(1)\phi_{jm_2}(2) \quad (3)$$

根据 C. G. 系数的对称性公式

$$\langle jm_1jm_2\mid JM\rangle=(-1)^{2j-J}\langle jm_2jm_1\mid JM\rangle \quad (4)$$

易知：当$(2j-J)$为偶数，

$$\langle jm_1jm_2\mid JM\rangle=\langle jm_2jm_1\mid JM\rangle$$

相应的 $\psi(jjJM)$为交换对称；

当$(2j-J)$为奇数，

$$\langle jm_1jm_2\mid JM\rangle=-\langle jm_2,jm_1\mid JM\rangle$$

相应的 $\psi(jjJM)$为交换反对称.

对于 Bose 子体系，$2j$ 为偶数，而 $\psi(jjJM)$应该交换对称，故 J 应取偶数. 对于 Fermi 子体系，$2j$ 为奇数，而 $\psi(jjJM)$应该是反对称函数，故 J 也应取偶数.

讨论　给定 $j_1=j_2=j$ 后，共有$(2j+1)$种单粒子状态$[\phi_{jm},m=j,j-1,\cdots,$

$(-j)]$,两粒子体系(不考虑对称性)的独立状态数为$(2j+1)^2$,其中对称态比反对称态多$(2j+1)$种(参看 15.1 题),所以

$$\begin{aligned}&\text{对称态数目}=(j+1)(2j+1)\\&\text{反对称态数目}=j(2j+1)\end{aligned}\tag{5}$$

从另一方面看,给定 $j_1=j_2=j$ 后,J 的可能取值如式(2)所示,每种 J 值又有$(2J+1)$种 M 值与之相应,所以体系状态总数为

$$\sum_{J=0}^{2j}(2J+1)=\frac{1}{2}(2j+1)(1+4j+1)=(2j+1)^2$$

当 $2j$ 为奇数,对称态和反对称态各有$\frac{1}{2}(2j+1)$种 J 值,

对称态	$J=2j,2j-2,\cdots,1$
反对称态	$J=2j-1,2j-3,\cdots,0$

易见对称态数目比反对称态数目多$\frac{1}{2}(2j+1)\times2=2j+1$.($J=2j$ 和 $J=2j-1$ 相比,前者状态数多 2,依此类推.)

当 $2j$ 为偶数(j 为整数),对称态有$(j+1)$种 J 值,反对称态有 j 种 J 值,

对称态	$J=2j,2j-2,\cdots,2,0$
反对称态	$J=2j-1,2j-3,\cdots,1$

易见对称态数目仍比反对称态数目多$(2j+1)$. 所以,无论 $2j$ 是奇数还是偶数,对称态和反对称态数目均为式(5).

Bose 子体系应为对称态,状态数目为$(j+1)(2j+1)$;

Fermi 子体系应为反对称态,状态数目为 $j(2j+1)$,与式(5)一致.

15.4 原子中处于同一个单电子能级 E_{nl} 上的两个电子,讨论其总 L、S、J 的可能取值,证明 $L+S=$偶数.

解 以 $\boldsymbol{l}_1$、$\boldsymbol{s}_1$、$\boldsymbol{j}_1$ 及 $\boldsymbol{l}_2$、$\boldsymbol{s}_2$、$\boldsymbol{j}_2$ 分别表示电子 1、2 的轨道、自旋和总角动量,以 $\boldsymbol{L}$、$\boldsymbol{S}$、$\boldsymbol{J}$ 表示两电子体系的总轨道角动量、总自旋和总角动量.

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{L}=\boldsymbol{l}_1+\boldsymbol{l}_2,\quad \boldsymbol{S}=\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2\\&\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}=\boldsymbol{j}_1+\boldsymbol{j}_2\end{aligned}\tag{1}$$

$\boldsymbol{J}$ 的构成可取 L-S 耦合,也可取 j-j 耦合,我们取 L-S 耦合,即取守恒量完全集为$(H,\boldsymbol{L}^2,\boldsymbol{S}^2,\boldsymbol{J}^2,J_z)$. 在以下的讨论中取 $\hbar=1$.

总自旋量子数记为 S,$\boldsymbol{S}^2$ 的本征值为 $S(S+1)$,$S=1$ 相应于自旋三重态(对称

态)χ_{1M_S}($M_S=1,0,-1$),$S=0$ 相应于自旋单态(反对称态)χ_{00}.

总轨道角动量量子数记为 L,$\boldsymbol{L}^2$ 的本征值为 $L(L+1)$. 由于两个电子处于同一能级 E_{nl},所以 $l_1=l_2=l$,根据角动量耦合法则,L 的取值为

$$L=2l,2l-1,\cdots,1,0 \tag{2}$$

L 为偶数时,是对称态;L 为奇数时,是反对称态(参看 15.2 题).

电子是 Fermi 子,总波函数应该是反对称的. 因此

$$\begin{aligned} &S=0,\quad L\text{ 取偶数}\\ &S=1,\quad L\text{ 取奇数} \end{aligned} \tag{3}$$

体系总角动量 $\boldsymbol{J}$ 的平方的本征值为 $\boldsymbol{J}^2=J(J+1)$,按照角动量耦合法则,J 的可能取值是

$$J=L+S,L+S-1,\cdots,|L-S| \tag{4}$$

当 $S=0$,$J=L$,必为偶数;当 $S=1$,$J=L+1,L,L-1$,有偶数,也有奇数. 但式(3)表明,$L+S$ 必为偶数.

注意,本题和 15.3 题不同,15.3 题中两粒子 $j_1=j_2$,本题 j_1,j_2 可能相同,也可能不同,甚至可能 j_1,j_2 没有确定值.

15.5　对于原子中处于 np 能级($l=1$)的两个电子,试分别用 L-S 耦合和 j-j 耦合求所有可能的总角动量本征态的数目.

解　(a) L-S 耦合　根据上题的分析,L、S、J 的可能组合以及相应状态数如下表:

L	2	0	1
S	0	0	1
J	2	0	0　1　2
光谱学符号	$^1D_2$	$^1S_0$	$^3P_0$　$^3P_1$　$^3P_2$
简并度(2J+1)	5	1	1+3+5

共有 15 种可能的总角动量(J^2,J_2)本征态(反对称态).

(b) j-j 耦合,单电子总角动量量子数的可能取值为

$$j=\frac{1}{2},\frac{3}{2}$$

体系可能的电子组态和相应的 J 值及简并度如下表:

电子组态	$(p_{1/2})^2$	$(p_{3/2})^2$	$(p_{1/2})(p_{3/2})$
J	0	0,2	1,2
简并度(2J+1)	1	1+5	3+5

总状态数仍为 15.

两种耦合方式相当于选取不同的基矢,但不会影响状态总数.

15.6 比较双原子分子 H_2、D_2、HD、O_2 的转动光谱线的强度变化规律.

解 分子发生转动跃迁时,原子中电子轨道并无变化,只需考虑原子核体系波函数的变化.

(a) 氢分子 H_2

两个原子核均为质子(自旋 1/2),两质子总自旋量子数 S 的取值为 1 或 0. 两质子体系总波函数(取质心坐标系)可以取为

$$\Psi_{H_2} = R(r)Y_{LM}(\theta,\varphi)\chi_{SM_S} \tag{1}$$

其中 χ_{SM_S} 为自旋波函数,(r,θ,φ) 是两原子核相对距离 $(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)$ 的球坐标表示. 质子为 Fermi 子,体系波函数应该是反对称的,因此 S,L 的可能取值是

$$\begin{aligned} &S=1(\text{三重态}),\quad L=1,3,5,\cdots \\ &S=0(\text{单态}),\quad L=0,2,4,\cdots \end{aligned} \tag{2}$$

转动跃迁属于电型跃迁,自旋量子数 S 不变,为了保持总波函数的反对称性,跃迁前后 L 必须相差偶数,概率最大的是 $\Delta L=2$. [跃迁概率和 $(e^2/\hbar c)^{2\Delta L}$ 成正比,ΔL 越大,跃迁概率越小,所以 $\Delta L=4,6,8,\cdots$ 的跃迁可以忽略.]如以 I 表示分子的转动惯量,转动跃迁 $L\to L-2$,所放光子能量为

$$\Delta E=\frac{\hbar^2}{2I}[L(L+1)-(L-2)(L-1)]=\frac{\hbar^2}{I}(2L-1) \tag{3}$$

ΔE 和 L 呈线性关系. 在氢分子的自然分布中,正氢分子($S=1$)数是仲氢分子($S=0$)数的 3 倍,所以 L 为奇数的谱线强度大体上是 L 为偶数的谱线强度的 3 倍,所以相邻谱线的强度呈现出明显的明暗交替规律.

(b) 重氢分子 D_2

D 表示氘核,自旋为 1,是 Bose 子,总波函数应该交换对称. 两原子核体系总自旋量子数 $S=2、1、0$,因此,$S、L$ 的可能取值为

$$\begin{aligned} &S=2、0,\quad L=\text{偶数(自旋和轨道波函数均为对称)} \\ &S=1,\quad\ \ L=\text{奇数(自旋和轨道波函数均为反对称)} \end{aligned}$$

跃迁前后 $\Delta S=0,\Delta L=2$(理由同 H_2 分子). 在自然界分布中 S 取 2、1、0 的分子数(和 $2S+1$ 成正比)之比为 5∶3∶1,S 取偶数的分子数和 $S=1$ 的分子数之比为

$$(5+1):3=2:1$$

故转动光谱的相邻谱线仍呈明暗交替规律,强度比约为 2∶1.

(c) HD 分子

两原子核一为质子,一为氘核,是不同粒子,原子核体系的波函数没有交换对

称性的要求，S 和 L 的取值没有制约关系. 所以转动光谱谱线强度没有明暗交替的变化.

(d) 氧分子 O_2

在自然分布中，绝大多数氧原子核为 ^{16}O，自旋为 0，是 Bose 子. 两原子核体系的总波函数(即总轨道波函数)可以表示成

$$\Psi_{O_2} = R(r)Y_{LM}(\theta,\varphi) \tag{4}$$

(r,θ,φ) 是相对距离 $(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)$ 的球坐标表示. Ψ_{O_2} 应该交换对称，故 L 必为偶数. 跃迁前后仍有 $\Delta L=2$. 转动光谱线全部属于 $L=$偶数的情形，谱线强度没有明暗交替的现象.

15.7　已知氘核(d)自旋为 1，宇称为偶；中子(n)自旋为 1/2；π^- 介子自旋为 0. 试根据反应

$$\pi^-(\text{静止})+\text{d}\rightarrow\text{n}+\text{n}$$

决定 π^- 介子的内禀宇称.

解　取质心坐标系. 反应前 π^- 介子及氘核均处于静止状态，总动量和总轨道角动量均为 0，体系的总角动量量子数 $J=1$. 反应前后总角动量应守恒，所以反应后两中子体系的总角动量量子数 $J=1$.

以 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{l}_1+\boldsymbol{l}_2$ 和 $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2$ 表示中子体系的轨道和自旋角动量，它们的可能取值为

$$\boldsymbol{L}^2 = L(L+1),\quad L=0,1,2,\cdots$$
$$\boldsymbol{S}^2 = S(S+1),\quad S=1,0$$

L 取偶数时，轨道波函数为交换对称；L 取奇数时为反对称态；$S=1$，自旋波函数为对称态(三重态)；$S=0$，为反对称态(单态). 中子是 Fermi 子，体系总波函数必须是反对称的，因此 $S=0$ 时 L 应取偶数，$S=1$ 时 L 应取奇数. J 和 L、S 的关系是

$$J=L+S,L+S-1,\cdots,|L-S|$$

反应后 $J=1$，因此 L 和 S 的取值只能是

$$\boxed{L=1,\quad S=1}$$

因为 $L=1$，中子体系总状态为奇宇称. 本题反应类型属于强作用，宇称应守恒，所以反应前总宇称为奇. 由于氘核为偶宇称，π^- 和 d 的轨道角动量又均等于 0(因此轨道波函数为偶宇称)，故知 π^- 介子的内禀宇称为奇.

15.8　π^- 分子(赝标量粒子，自旋为 0，宇称为奇)在氘核(质子和中子的 $^3S_1$

结合态)Coulomb 场的作用下处于基态,后来该 π^- 介子被氘核 d 俘获而产生下列反应:

$$\pi^- + \mathrm{d} \to \mathrm{n} + \mathrm{n}$$

(a)求反应后中子对的轨道角动量;(b)求反应后中子对的自旋角动量.(c)求两中子自旋均指向与氘核自旋相反方向的概率.(d)如果原来氘核自旋是 100%沿 $\hat{k}$ 方向(z 轴)极化的,求出射中子中有一个自旋和氘核自旋方向相反的角分布概率.

解 反应前 π^- 介子和氘核的轨道角动量均为 0,氘核自旋为 1,因此反应前总角动量为 1.反应前后总角动量应该守恒,因此反应后中子对的总角动量 $J=1$.设中子对的轨道和自旋角动量分别为 L、S,根据角动量耦合的三角形法则,不考虑对称性时 L、S 的取值有下列可能组合:

(i) $S=0, L=1$;

(ii) $S=1, L=0,2$;

(iii) $S=1, L=1$.

其中(i)、(ii)两种情形,中子对总波函数是交换对称的,第(iii)种情形则是反对称的.中子为 Fermi 子,体系波函数应该是反对称的,所以,S、L 只能取第(iii)种情况,即

$$\boxed{S=1, \quad L=1} \tag{1}$$

以反应前氘核的极化方向(即氘核自旋指向,也就是氘核总角动量的指向)$\hat{k}$ 为 z 轴,则总角动量平方及 z 分量的量子数为

$$J=1, \quad J_z=M=1 \tag{2}$$

这也就是反应后中子对的总角动量量子数.如两中子自旋均指向 $-\hat{k}$ 方向,则总 $S_z=-1$,从而 L_z 必须取 $+2$ 才能使 $J_z=1$.但由式(1),$L=1$,故 L_z 不可能取 $+2$.这个矛盾表明两中子自旋不可能均指向 $-k$ 方向.至此,已可对前三个问题作出回答,即

$$\boxed{\text{(a) } L=1, \quad \text{(b) } S=1, \quad \text{(c) 概率为 0}}$$

中子对 S_z 和 L_z 的可能取值为

$$S_z=1, \quad L_z=0; \quad \text{或} \quad S_z=0, \quad L_z=1 \tag{3}$$

因此中子对总波函数的角动量部分为

$$\psi(S=1, L=1, J=1, J_z=1)=C_1\chi_{11}Y_{10}(\theta,\varphi)+C_2\chi_{10}Y_{11}(\theta,\varphi) \tag{4}$$

(r,θ,φ) 为两中子相对距离 $\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2$ 的球坐标.在总角动量

$$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}$$

的构造中，$\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{S}$ 的地位相等($L=S=1$)，因此可以断定式(4)中$|C_1|=|C_2|$. 事实上，由 C. G. 系数表查得

$$C_1=-1/\sqrt{2},\quad C_2=1/\sqrt{2} \tag{5}$$

式(4)中 C_1 项相当于 $S_z=1$，即两中子自旋均指向 $+\hat{\boldsymbol{k}}$ 方向；C_2 项相当于 $S_z=0$，即两中子自旋一个指向 $+\hat{\boldsymbol{k}}$，另一个指向 $-\hat{\boldsymbol{k}}$ 方向，这正是问题(d)所指的情况. 所以问题(d)的回答是

(d) 设两中子的出射方向联线指向(θ,φ)方向，[一个中子沿(θ,φ)方向出射，另一个中子沿$(\pi-\theta,\pi+\varphi)$方向出射.]其中一个中子自旋指向 $-\hat{\boldsymbol{k}}$ 方向(另一个自旋指向 $+\hat{\boldsymbol{k}}$)的角分布概率(每单位立体角)为

$$|C_2Y_{11}|^2=\frac{3}{16\pi}\sin^2\theta \tag{6}$$

总概率为$|C_2|^2=1/2$.

由于 $\sin\theta=\sin(\pi-\theta)$，故发现任何一个中子沿$(\theta,\varphi)$方向立体角元 $d\Omega$ 出射，且其自旋指向 $-\hat{\boldsymbol{k}}$ 方向的概率为

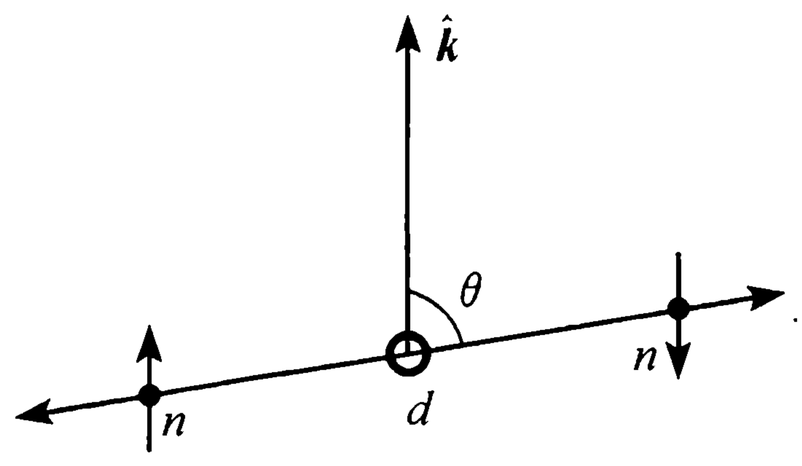


图 15.8

$$|C_2Y_{11}|^2\mathrm{d}\Omega=\frac{3}{16\pi}\sin^2\theta\mathrm{d}\Omega$$

15.9　作为一维铁磁体的简化模型，考虑自旋为 $\frac{\hbar}{2}$ 的许多粒子排列在一直线上，每个粒子各处一定的位置，如图所示. 假设每个粒子只与左右近邻发生自旋-自旋相互作用，体系的总能量算符为(取 $\hbar=1$)

$$H=\gamma\sum_i\left[\frac{1}{4}-\boldsymbol{s}_i\cdot\boldsymbol{s}_{i+1}\right],\quad \gamma>0$$

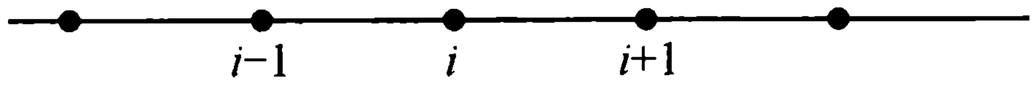


图 15.9

试证明(a)总自旋

$$\boldsymbol{S}=\sum_i\boldsymbol{s}_i$$

为守恒量；(b)在体系的基态下，相邻粒子之间必然构成自旋三重态(自旋指向互相“平行”). 讨论基态能级的简并度.

(本题内容即 Heisenberg 铁磁体一维模型.)

证　属于不同粒子的自旋算符 $\boldsymbol{s}_i$ 和 $\boldsymbol{s}_j(i\neq j)$是互相对易的. 以 P_{ij} 表示粒子 i

和 j 之间的自旋交换算符,容易证明

$$P_{ij} = \boldsymbol{S}_{ij}^2 - 1 \tag{1}$$

其中

$$\boldsymbol{S}_{ij} = \boldsymbol{s}_i + \boldsymbol{s}_j$$

$$\boldsymbol{S}_{ij}^2 = \boldsymbol{s}_i^2 + \boldsymbol{s}_j^2 + 2\boldsymbol{s}_i \cdot \boldsymbol{s}_j = \frac{3}{2} + 2\boldsymbol{s}_i \cdot \boldsymbol{s}_j \tag{2}$$

因此

$$\boldsymbol{s}_i \cdot \boldsymbol{s}_j = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{S}_{ij}^2 - \frac{3}{2}\right) = \frac{1}{2}\left(P_{ij} - \frac{1}{2}\right)$$

$$\frac{1}{4} - \boldsymbol{s}_i \cdot \boldsymbol{s}_j = \frac{1}{2}(1 - P_{ij}) \tag{3}$$

于是,总能量算符可以写成

$$\boxed{H = \frac{\gamma}{2}\sum_i (1 - P_{i,i+1}), \quad \gamma > 0} \tag{4}$$

总自旋算符

$$\boldsymbol{S} = \sum_i \boldsymbol{s}_i$$

显然和 $P_{i,i+1}$ 对易,因此 $\boldsymbol{S}$ 和 H 对易,所以 $\boldsymbol{S}$ 为守恒量.

当近邻粒子 $i, i+1$ 形成自旋三重态(交换对称态)时,$\boldsymbol{S}_{i,i+1}^2$ 取本征值 2,$P_{i,i+1}$ 取本征值 1;当粒子 $i, i+1$ 形成自旋单态(反对称态)时,$\boldsymbol{S}_{i,i+1}^2$ 取本征值 0,$P_{i,i+1}$ 取本征值 -1.

当体系状态为 $\alpha(1)\alpha(2)\cdots\alpha(i)\alpha(i+1)\cdots$,即所有粒子自旋平行"向上",这时总自旋量子数 $S=\frac{1}{2}\times$(粒子总数),为 S 的最大值. 这时任何一对粒子之间均构成对称态(三重态),即

$$P_{i,i+1} = 1$$

因而 H 取极小值,即 $E=0$,此即体系的基态能级.

将总自旋算符 $(S_x - iS_y)$ 作用于 $\alpha(1)\alpha(2)\cdots\alpha(i)\cdots$,总自旋 z 分量 S_z 的本征值将减少 1,而总 $\boldsymbol{S}^2$ 的量子数 S 则不变,波函数的对称性也不变,因此仍有 $P_{i,i+1}=1$,$E=0$. 依此类推. 可见基态能级是简并的,简并度为

$$2S_{\max} + 1 = \text{粒子总数} + 1 \tag{5}$$

总 S_z 取最小值的状态显然是 $\beta(1)\beta(2)\cdots\beta(i)\cdots$,所有粒子自旋均平行"向下",因此 $P_{i,i+1}=1$,$H=0$.

讨论　式(4)中，相邻的交换算符($P_{i-1,i}$和$P_{i,i+1}$)是不对易的(原因在于$\boldsymbol{s}_{i-1}\cdot\boldsymbol{s}_i$和$\boldsymbol{s}_i\cdot\boldsymbol{s}_{i+1}$不对易)，因此一般来说$H$的本征值并不等于各项$\frac{\gamma}{2}(1-P_{i,i+1})$的本征值之和. 但是上述各种完全对称态$\alpha(1)\alpha(2)\cdots\alpha(i)\cdots$则是例外，他们是所有$P_{ij}$的共同本征态(本征值均为1)，因此各$(1-P_{i,i+1})$同时为0，能级亦为0. 由于$H$是正定的[因为$(1-P_{i,i+1})$是正定的]，所以$E=0$必为基态能级.

反之，如同时取各$P_{i,i+1}=-1$(相当于$\boldsymbol{s}_i\cdot\boldsymbol{s}_{i+1}=-3/4$)，因而认为体系能级的最大值等于$\gamma\times$(粒子总数$-1$)，就不对了，因为根本不存在这样的状态.

15.10　利用同位旋守恒定律证明反应

$$\mathrm{p}+\mathrm{d}\rightarrow\begin{cases}\mathrm{n}+\pi^{+}+\mathrm{d}\\ \mathrm{p}+\pi^{0}+\mathrm{d}\end{cases}$$

的分支比为2∶1.

证　本题讨论的反应属于强作用，同位旋量子数I及I_z应该守恒. 各粒子的同位旋如下：

$$\begin{array}{lll}\mathrm{d} & I=I_z=0 & \\ \mathrm{p},\mathrm{n} & I=1/2, & I_z=1/2,-1/2\\ \pi^{+},\pi^{0},\pi^{-} & I=1, & I_z=1,0,-1\end{array}$$

反应前总同位旋为$I=1/2, I_z=1/2$，由于同位旋守恒，这也就是反应后的总同位旋量子数. 氘核d同位旋为0，在以下的讨论中不予考虑. 反应后，π介子(记为1)核子(记为2)体系的同位旋状态(耦合表象)为

$$|II_z\rangle=\left|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle \tag{1}$$

反应产物的两个分支，同位旋状态(无耦合表象)为

$$(\pi^{+},\mathrm{n}),\ |I_1I_{1z},I_2I_{2z}\rangle=\left|11,\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$(\pi^{0},\mathrm{p}),\ |I_1I_{1z},I_2I_{2z}\rangle=\left|10,\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle \tag{2}$$

同位旋的耦合法则与角动量类似，如将式(1)按照式(2)展开，

$$\begin{aligned}\left|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle=&\left|11,\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle\left\langle 11,\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right|\left.\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle\\&+\left|10,\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle\left\langle 10,\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right|\left.\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle\end{aligned} \tag{3}$$

第一项相应于产物(π^{+},n)，第二项相应于产物(π^{0},p). 由C. G. 系数表查得

$$\left\langle 11,\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\middle|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle=\sqrt{2/3}$$

$$\left\langle 10,\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\middle|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle=-\sqrt{1/3} \tag{4}$$

它们的平方就是反应产物两个分支出现的概率,即产物为(π^+,n)的概率为 2/3,产物为(π^0,p)的概率为 1/3,亦即分支比为

$$\frac{2}{3}:\frac{1}{3}=2:1$$

15.11 在核子与 π 介子反应过程中,同位旋(I,I_z)守恒. 设反应主要通过 $I=3/2$ 道进行,试求下列反应的分支比.

(a) $p+\pi^+\rightarrow p+\pi^+$

(b) $p+\pi^-\rightarrow n+\pi^0$

(c) $p+\pi^-\rightarrow p+\pi^-$

解 核子 N(质子 p 或中子 n)的同位旋量子数为

$$I_N=\frac{1}{2},\quad I_{Nz}=\pm\frac{1}{2} \tag{1}$$

π 介子(π^+,π^0,π^-)的同位旋量子数为

$$I_\pi=1,\quad I_{\pi z}=1,0,-1 \tag{2}$$

故核子-π 介子体系总同位旋 $I=3/2$ 或 1/2. 在耦合表象和无耦合表象中核子-π 介子体系的同位旋本征态分别记为

耦合表象,$|II_z\rangle$,　即　$|I_NI_\pi II_z\rangle$

非耦合表象,$|I_NI_{Nz}\rangle|I_\pi I_{\pi z}\rangle$

由于 I_z 守恒,所以反应前后

$$I_z=I_{\pi z}+I_{Nz} \tag{3}$$

不变. 反应(a)、(b)、(c)中,反应前后的同位旋状态均为无耦合表象中的基矢,它们在耦合表象中的表达式如下:

$$|p,\pi^+\rangle=\left|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle|11\rangle=\left|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle$$

$$|p,\pi^-\rangle=\left|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle|1,-1\rangle=\left(\left|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\left\langle\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right|+\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\left\langle\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right|\right)\left|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle|1,-1\rangle$$

$$=\frac{1}{\sqrt{3}}\left|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle+\sqrt{\frac{2}{3}}\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle \tag{4}$$

$$|\,\mathrm{n},\pi^0\rangle=\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\left|10\right\rangle=\sqrt{\frac{2}{3}}\left|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle-\frac{1}{\sqrt{3}}\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$$

以 $V(\mathrm{N},\pi)$表示 N-π 作用势，$f_{3/2}$和 $f_{1/2}$表示同位旋三重态和单态的跃迁振幅. 由于同位旋守恒，跃迁(反应)过程可以表示成

$$V\left|\frac{3}{2},I_z\right\rangle\to f_{3/2}\left|\frac{3}{2},I_z\right\rangle$$

$$V\left|\frac{1}{2},I_z\right\rangle\to f_{1/2}\left|\frac{1}{2},I_z\right\rangle \tag{5}$$

由题设，反应的主要通道为 $I=3/2$，亦即$|f_{3/2}|\gg|f_{1/2}|$. 如略去 $f_{1/2}$项，则除去共同的常数因子后，三种反应的跃迁矩阵元为

(a) $\langle \mathrm{p}\pi^+|V|\mathrm{p}\pi^+\rangle\Rightarrow f_{3/2}=f_a$

(b) $\langle \mathrm{n}\pi^0|V|\mathrm{p}\pi^-\rangle\Rightarrow\frac{\sqrt{2}}{3}f_{3/2}-\frac{\sqrt{2}}{3}f_{1/2}\approx\frac{\sqrt{2}}{3}f_{3/2}=f_b$ (6)

(c) $\langle \mathrm{p}\pi^-|V|\mathrm{p}\pi^-\rangle\Rightarrow\frac{1}{3}f_{3/2}+\frac{2}{3}f_{1/2}\approx\frac{1}{3}f_{3/2}=f_c$

它们的平方之比即三种反应的分支比：

$$\sigma_a:\sigma_b:\sigma_c=f_a^2:f_b^2:f_c^2=9:2:1 \tag{7}$$

实验分析表明，这个分支比关系基本上是正确的.

15.12　质量为 m 的两个粒子处于谐振子势 $V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ 中. 设一个粒子处于基态 $\psi_0(x)$，一个粒子处于第一激发态 $\psi_1(x)$. 当不计及两个粒子相互作用时，两个粒子组成的体系的波函数可分三种情况：(1)两粒子可以分辨(非全同)情况，波函数不计及交换对称性，

$$\psi_D(x_1,x_2)=\psi_0(x_1)\psi_1(x_2) \tag{1}$$

(2)对于全同粒子(不可分辨)，空间波函数要求满足交换对称或反对称，

$$\psi_S(x_1,x_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_0(x_1)\psi_1(x_2)+\psi_0(x_2)\psi_1(x_1)] \tag{2}$$

$$\psi_A(x_1,x_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_0(x_1)\psi_1(x_2)-\psi_0(x_2)\psi_1(x_1)] \tag{3}$$

例如，对于自旋为 0 的两个全同粒子，空间波函数就应该为 ψ_S，而对于自旋为 1/2 的粒子，若处于自旋三重态，则空间波函数应取 ψ_A，若处于自旋单态，则空间波函

数应取 ψ_S.

现假设两个粒子有相互作用

$$V(x_1,x_2)=\frac{g}{d\sqrt{\pi}}\mathrm{e}^{-(x_1-x_2)^2/2d^2} \tag{4}$$

g 表示作用强度,d 表征力程. 不难证明

$$\lim_{d\to 0}V(x_1,x_2)=g\delta(x_1-x_2) \tag{5}$$

试用微扰论一级近似计算三种情况下的能级移动和两个粒子相对位置分布的特点.

解 利用

$$\psi_0(x)=\sqrt{\frac{1}{L\sqrt{\pi}}}\mathrm{e}^{-x^2/2L^2},\quad L=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

$$\psi_1(x)=\sqrt{\frac{2}{L\sqrt{\pi}}}\left(\frac{x}{\alpha}\right)\mathrm{e}^{-x^2/2L^2} \tag{6}$$

可得能级移动分别为

$$\Delta E_D=(\psi_D,V\psi_D)=\frac{g}{\sqrt{\pi}}\frac{L^2+d^2}{(2L^2+d^2)^{3/2}}\doteq V_0\left[\frac{1+\lambda^2}{(2+\lambda^2)^{3/2}}\right] \tag{7}$$

$$\Delta E_S=(\psi_S,V\psi_S)=\frac{g}{\sqrt{\pi}}\frac{2L^2+d^2}{(2L^2+d^2)^{3/2}}=V_0\left[\frac{2+\lambda^2}{(2+\lambda^2)^{3/2}}\right] \tag{8}$$

$$\Delta E_A=(\psi_A,V\psi_A)=\frac{g}{\sqrt{\pi}}\frac{d^2}{(2L^2+d^2)^{3/2}}=V_0\left[\frac{\lambda^2}{(2+\lambda^2)^{3/2}}\right] \tag{9}$$

式中 $V_0=g/(L\sqrt{\pi})$,$\lambda=d/L$(无量纲参数). ΔE 随参数 λ 的变化,见图 15.12. 图中点线……是空间波函数对称(S)情况,划线----是反对称(A)情况,实线——是可分辨(D)情况. 可以看出,ΔE 与两个粒子的交换对称性密切相关.

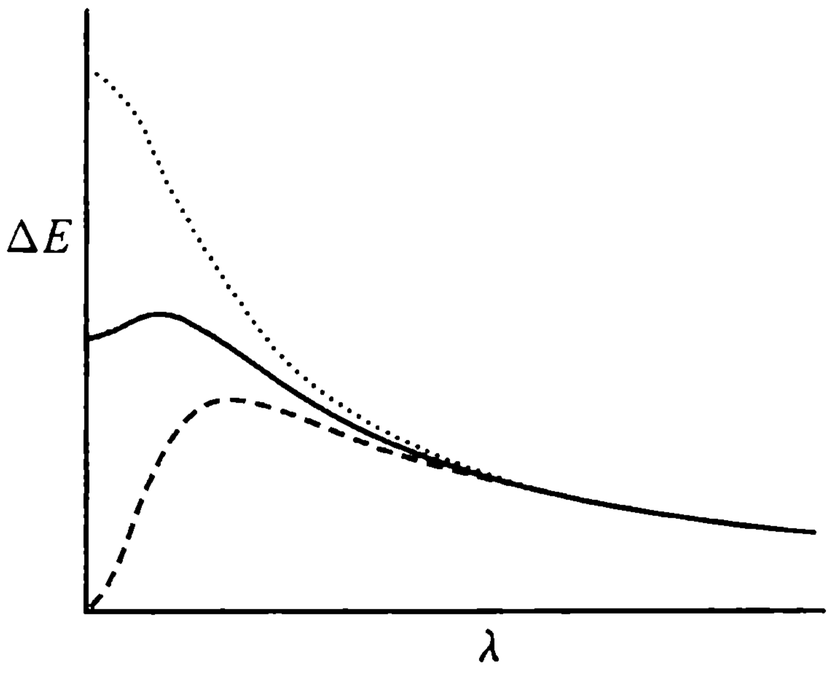


图 15.12 ΔE 随 λ 变化示意图

参数 $\lambda=d/L$ 是力程与谐振子势中粒子自然长度 L 之比. 当 $\lambda\ll 1$(力程≪两粒子相对距离)时,三种情况下的 ΔE 相差颇大,是波函数的交换对称性(全同性)导致的一种量子效应. 当 $\lambda\gg 1$ 时,这种差别逐渐消失.

以上结果可以从两个粒子的相对距离的平方的平均值来理解. 不难证明,在三种情况下,$\bar{x}_1=\bar{x}_2=0$,而

	$\overline{x_1^2}$	$\overline{x_2^2}$	$\overline{x_1 x_2}$	$\overline{(x_1-x_2)^2}$
ψ_D	$L^2/2$	$3L^2/2$	0	$2L^2$
ψ_S	L^2	L^2	$L^2/2$	L^2
ψ_A	L^2	L^2	$-L^2/2$	$3L^2$

可见，与 ψ_D 情况(可分辨，非全同粒子)相比，在 ψ_S 态下，两粒子相对靠拢，表现两粒子有吸引作用. 而在 ψ_A 态下，两粒子相对远离，表现两者有排斥作用.

15.13　试比较下列几种势场中的粒子能级的简并度. (a)三维各向同性谐振子势场；(b)无限深球方势阱或 Woods-Saxon 势场；(c)进一步假设粒子有自旋 1/2，考虑自旋轨道耦合作用对能级的影响；(d)设势场发生变形，但保持轴对称，对称轴取为 z 轴；(e)设此轴对称势场以匀角速度 Ω 绕 x 轴旋转.

解　(a) 三维各向同性谐振子势场

$$V(r)=\frac{1}{2}M\omega^2 r^2 \tag{1}$$

中粒子的能级为

$$E_N=\left(N+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega \tag{2}$$

其中

$$N=n_x+n_y+n_z,\quad n_x,n_y,n_z,N=0,1,2,\cdots \tag{3}$$

给定 N 后，(n_x,n_y,n_z)有$\frac{1}{2}(N+1)(N+2)$种组合，所以 E_N 能级的简并度为

$$\boxed{f_N=\frac{1}{2}(N+1)(N+2)} \tag{4}$$

如在球坐标系中解定态 Schrödinger 方程，并取能量本征函数为(H,l^2,l_z)的共同本征函数，可得能级表达式为

$$E_N=\left(N+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega$$

其中

$$N=2n_r+l,\quad l,n_r=0,1,2,\cdots \tag{5}$$

n_r 是径向量子数，即径向波函数的节点(不包括无限远点)数. 给定 N 后，l 的可能值为

$$l=N,N-2,\cdots,1(N\text{奇})\text{或}0(N\text{偶})$$

对应每一个 l 值,l_z 尚有$(2l+1)$种本征值:

$$l_z = m = l, l-1, \cdots, -l$$

所以能级简并度为

$$f_N = \sum_l (2l+1) = \frac{1}{2}(N+1)(N+2) \tag{6}$$

和式(4)一致. 能级简并度取决于势场的对称性,选取不同的坐标系,当然不会影响简并度的计算结果.

(b) 无限深球方势阱

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r < R \\ \infty, & r \geqslant R \end{cases} \tag{7}$$

和 Woods-Saxon 势场

$$V(r) = -V_0/[1 + \mathrm{e}^{(r-R)/a}] \tag{8}$$

(V_0 刻画势阱深度,R 代表势阱"半径",a 代表势阱延伸的有效距离.)这些势场都属于一般的中心势场,粒子的轨道角动量 $\boldsymbol{l}$ 是守恒量. 在球坐标系中求解定态 Schrödinger 方程,并取能量本征函数为$(H, \boldsymbol{l}^2, l_z)$的共同本征函数,所得径向方程中只出现角量子数 l,而与磁量子数 m 无关. 解径向方程时,根据边界条件可以求出能量本征值,它既依赖于角量子数 l,也与径向量子数 n_r 有关,故能级一般应表示成 $E_{n_r l}$. 由于能级与磁量子数 m 无关,所以能级 $E_{n_r l}$ 的简并度为

$$\boxed{f_{n_r l} = 2l+1} \tag{9}$$

这是中心力场问题中最小的能级简并度. 在三维各向同性谐振子势场中,能级只依赖于 n_r 与 l 的一种特殊组合,即依赖于

$$N = 2n_r + l$$

给定 N 后,l 尚有多种取值($l = N, N-2, \cdots$)均给出相同的能量,所以能级的简并度增大. 这是由于 $V(r) \propto r^2$ 这种特殊对称性造成的. 三维各向同性谐振子势场具有 SU_3 对称性,而一般中心力场只具有 SO_3 对称性($SO_3 \subset SU_3$).

(c) 在一般中心力场中,如粒子具有自旋 $s = 1/2$,而势场与自旋无关,则能级对于自旋的不同指向是简并的,即对

$$m_s = \pm \frac{1}{2}$$

简并. 因此各能级的简并度都增加一倍,$f_{n_r l} = 2(2l+1)$.

若存在自旋轨道耦合作用,作用势$\propto \boldsymbol{s} \cdot \boldsymbol{l}$,则 $\boldsymbol{l}$ 与 $\boldsymbol{s}$ 不再是守恒量. 但可证明粒子的总角动量 $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{l} + \boldsymbol{s}$ 仍为守恒量,$\boldsymbol{l}^2$ 也是守恒量. 这时可选$(H, \boldsymbol{l}^2, \boldsymbol{J}^2, J_z)$作为守

恒量完全集，它们的共同本征态记为 $\psi_{n_r l j m_j}$，相应的能级记为 $E_{n_r lj}$，它不依赖于 m_j（J_z 的本征值），因此能级简并度为

$$\boxed{f_{n_r lj} = 2j + 1} \tag{10}$$

量子数 j 和 l 的关系是

$$j = \begin{cases} l \pm 1/2, & l \neq 0 \\ 1/2, & l = 0 \end{cases} \tag{11}$$

给定 $n_r l$ 后，如 $l=0$（s 态），则 $j=1/2$，只形成一个能级，能值不变，简并度为 2；如 $l\neq 0$，则 $j=l\pm 1/2$，原来的（没有自旋轨道耦合作用的）能级 $E_{n_r l}$ 在自旋轨道耦合作用下分裂成两条能级，其中 $j=l+1/2$ 者简并度为 $(2l+2)$，$j=l-1/2$ 者简并度为 $2l$，这两条能级相应的状态总数为 $(4l+2)$，和能级分裂前的状态数 $2f_{n_r l}$ 相同.

(d) 如势场发生轴对称变形（取对称轴为 z 轴），则 $\boldsymbol{l}^2$ 和 $\boldsymbol{J}^2$ 不再是守恒量，但 J_z 仍守恒. 但是通常所指轴对称变形势场还具有镜像反射（对于包含 z 轴在内的平面而言）对称性. 例如无限深椭球势阱. 又例如可分离势场

$$V(x,y,z) = V_1(\rho) + V_2(z), \quad \rho = \sqrt{x^2 + y^2} \tag{12}$$

其中包括轴对称变形谐振子势场

$$V = \frac{1}{2} M\omega_\perp^2 \rho^2 + \frac{1}{2} M\omega_z^2 z^2 \tag{13}$$

在此情况下，能级与轨道角动量沿对称轴的投影 l_z 的绝对值 $|m|$ 有关，即能级对于 $l_z = \pm m$ 是简并的. 所以通常能级为二重简并. 至于轴对称变形谐振子势场 (13)，由于 $V_1(\rho) \propto \rho^2$，具有 SU_2 对称性，能级有更高的简并度.

在一般中心力场中运动的带电粒子，如再受到均匀外电场（沿 z 轴方向）的作用，也属于这种情况. 例如碱金属原子光谱的 Stark 效应.

能级的这种二重简并性，也可以解释为 Kramers 简并，即时间反演不变性对 Fermi 子体系能级带来的简并. 这时，ψ_m 与 ψ_{-m} 互为时间反演态（相因子的差别除外），它们对应的能量相同.

在中心力场中运动的带电粒子，如再受到均匀外磁场（沿 z 轴方向）的作用，能级将与 l_z 的本征值 m 直接有关，ψ_m 与 ψ_{-m} 将对应不同的能级，这时能级简并全部解除. 例如碱金属原子光谱的 Zeeman 效应. 简并消除是由于外磁场的作用破坏了时间反演不变性（参看题 7.8）.

(e) 设轴对称变形势场被推动，以匀角速度 Ω 绕 x 轴旋转，在这转动参照系中看来，粒子将受到一项 Coriolis 作用

$$H_C = -\Omega l_x \tag{14}$$

它反映粒子所受到的 Coriolis 力和离心力. 在此情况下,l_z 不再是守恒量,$[l_z, H_C] \neq 0$,或者说时间反演不变性被破坏,能级简并全部消除.

以上讨论粗略地反映了 30 多年来原子核结构理论的几个发展阶段. 在 1949 年以前,只考虑核子在原子核内受到一个中心势场的作用,而未考虑自旋轨道耦合作用,所得出的单粒子能级无法解释由实验确定的"幻数". M. G. Mayer 与 J. H. D. Jensen 提出了具有强自旋轨道耦合作用的壳层模型,正确地得出了"幻数". 50 年代,A. Bohr 与 B. R. Mottelson 认识到原子核可能有变形以及转动和振动,而且对于变形较大的核,形变是轴对称的,这样产生的单粒子能级是二重简并的,这就是著名的 Nilsson 能级. 在 70 年代后,对于高自旋核态的研究,说明 Coriolis 作用的重要性. 考虑 Coriolis 作用后,轴对称性被破坏,单粒子能级的二重简并最终被全部解除. 对于这一点,也可以理解为 Coriolis 作用破坏了时间反演不变性,从而解除了 Kramers 简并.

15.14 在非相对论情况下,试根据各种对称性要求,分析它们对于二核子相互作用势函数形式的限制.

解 核子-核子作用势可由二核子的坐标、动量、自旋、同位旋等力学量构成. 考虑到体系的时间平移不变性,作用势不应显含时间 t,所以

$$V = V(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2, \boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2, \boldsymbol{\tau}_1, \boldsymbol{\tau}_2) \tag{1}$$

考虑到空间平移不变性,V 中不能含质心坐标

$$\boldsymbol{R} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{r}_1 + \boldsymbol{r}_2)$$

只能含相对坐标 $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2$. 再考虑到 Galileo 变换下 V 的不变性,V 中不能含体系总动量 $\boldsymbol{P} = \boldsymbol{p}_1 + \boldsymbol{p}_2$,只能含相对动量

$$\boldsymbol{p} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{p}_1 - \boldsymbol{p}_2)$$

考虑到以上对称性后,可以确定 V 的可能形式为

$$V = V(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2, \boldsymbol{\tau}_1, \boldsymbol{\tau}_2) \tag{2}$$

再考虑 V 对同位旋的依赖关系. 利用单粒子同位旋分量的对易关系

$$\tau_\alpha \tau_\beta = \delta_{\alpha\beta} + i\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\tau_\gamma \quad (\alpha, \beta, \gamma = x, y, z)$$

$\boldsymbol{\tau}$ 的任意多项式均可简化成 $\boldsymbol{\tau}$ 的线性函数,所以 V 可以表示成 $\boldsymbol{\tau}_1$(以及 $\boldsymbol{\tau}_2$)的线性函数. 考虑到同位旋空间的转动不变性,V 中只应含有由 $\boldsymbol{\tau}_1$ 和 $\boldsymbol{\tau}_2$ 组成的标量,即 $(\boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2)$. ($\boldsymbol{\tau}_1^2$ 和 $\boldsymbol{\tau}_2^2$ 也是标量,但均等于常数 3,不必写出.)因此可以进一步确定 V 的函数形式为

$$V = V_1(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},\boldsymbol{\sigma}_1,\boldsymbol{\sigma}_2) + \boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2 V_2(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},\boldsymbol{\sigma}_1,\boldsymbol{\sigma}_2) \tag{3}$$

下面讨论与同位旋无关的其他对称性要求对 V 的限制. 所得结论对 V_1、V_2 同样适用,所以 V 的下标 1、2 从略.

根据空间反射不变性,应有

$$V(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},\boldsymbol{\sigma}_1,\boldsymbol{\sigma}_2) = V(-\boldsymbol{r},-\boldsymbol{p},\boldsymbol{\sigma}_1,\boldsymbol{\sigma}_2) \tag{4}$$

而根据全同粒子交换对称性,应有

$$V(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},\boldsymbol{\sigma}_1,\boldsymbol{\sigma}_2) = V(-\boldsymbol{r},-\boldsymbol{p},\boldsymbol{\sigma}_2,\boldsymbol{\sigma}_1) \tag{5}$$

联合式(4)、(5),可知

$$V(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},\boldsymbol{\sigma}_1,\boldsymbol{\sigma}_2) = V(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},\boldsymbol{\sigma}_2,\boldsymbol{\sigma}_1) \tag{6}$$

现在考虑坐标空间转动不变性对 V 的限制. 将 V 展开成 σ_1、σ_2 各分量的幂级数,利用 Pauli 矩阵的对易关系,V 可以表示成

$$V(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},\boldsymbol{\sigma}_1,\boldsymbol{\sigma}_2) = V_a(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p}) + V_\beta(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},\boldsymbol{\sigma}_1,\boldsymbol{\sigma}_2) + V_r(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},\boldsymbol{\sigma}_1,\boldsymbol{\sigma}_2) \tag{7}$$

其中 V_a 与自旋无关,V_β 为 $\boldsymbol{\sigma}_1$、$\boldsymbol{\sigma}_2$ 的一次函数,V_r 为 $\boldsymbol{\sigma}_1$、$\boldsymbol{\sigma}_2$ 的二次函数[$\sigma_i(1)\sigma_j(2)$型]. V_a 必须是空间转动下的标量,而由 $\boldsymbol{r}$、$\boldsymbol{p}$ 可以构成的标量厄米算符只有

$$\boldsymbol{r}^2,\quad \boldsymbol{p}^2,\quad \boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}$$

考虑到时间反演不变性,最后一种必须以平方的形式出现. 可以证明

$$(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})^2 = 2\boldsymbol{r}^2\boldsymbol{p}^2 + 2\boldsymbol{p}^2\boldsymbol{r}^2 - 4\boldsymbol{l}^2 + 3\hbar^2$$

(其中 $\boldsymbol{l}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$,为质心系中轨道角动量算符)因此 V_a 可以表示成

$$V_a = V_a(\boldsymbol{r}^2,\boldsymbol{p}^2,\boldsymbol{l}^2) \tag{8}$$

V_β 是 $\boldsymbol{\sigma}_1$、$\boldsymbol{\sigma}_2$ 的一次函数,在式(6)的限制下,V_β 必须与总自旋

$$\boldsymbol{S} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2)$$

成正比. 但因 V_β 必须是空间转动下的标量,所以 $\boldsymbol{S}$ 必须和另一矢量以内积的形式构成标量,唯一的构造是($\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{l}$). 所以式(7)中 V_β 的可能形式是

$$V_\beta(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},\boldsymbol{\sigma}_1,\boldsymbol{\sigma}_2) = (\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{l})V_\beta(\boldsymbol{r}^2,\boldsymbol{p}^2,\boldsymbol{l}^2) \tag{9}$$

V_r 是 $\boldsymbol{\sigma}_1$、$\boldsymbol{\sigma}_2$ 的二次型,这种形式的标量[而且满足式(6)]有下列几种:

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2,\quad (\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{r}),\quad (\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{p})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{p})\\
&(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{l})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{l}) + (\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{l})(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{l})\\
&(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{p})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{r}) + (\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{p}) + 1\leftrightarrow 2(\text{前两项中 } 1,2 \text{ 互换})
\end{aligned} \tag{10}$$

考虑到时间反演不变性,最后一种应该用下式代替:

$$[(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{p})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{r}) + (\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{p}) + 1\leftrightarrow 2](\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})$$

可以证明,这一项可以表示成式(10)中前几项的叠加. 因此,V_r 可以表示成

$$V_r = \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 V_r^{\mathrm{I}} + (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{r})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \boldsymbol{r}) V_r^{\mathrm{II}} + (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{p})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \boldsymbol{p}) V_r^{\mathrm{III}} + [(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{l})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \boldsymbol{l}) + 1 \leftrightarrow 2] V_r^{\mathrm{IV}} \tag{11}$$

其中 V_r^{I} 至 V_r^{IV} 均为$(\boldsymbol{r}^2, \boldsymbol{p}^2, \boldsymbol{l}^2)$的函数.

总结一下,核子-核子作用势的一般形式为式(3),其中 V_1、V_2 均可表示成下列形式:

$$V_{1,2} = V_0 + V_\sigma(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2) + V_T S_{12} + V_{ls}(\boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{l}) + V_{\sigma p}(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{p})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \boldsymbol{p}) + V_{\sigma l}[(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{l})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \boldsymbol{l}) + 1 \leftrightarrow 2] \tag{12}$$

其中 V_0、V_σ、V_T、V_{ls}、$V_{\sigma p}$、$V_{\sigma l}$都是$(\boldsymbol{r}^2, \boldsymbol{p}^2, \boldsymbol{l}^2)$的函数,而

$$S_{12} = \frac{3}{r^2}(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{r})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \boldsymbol{r}) - (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2) \tag{13}$$

用 S_{12}代替$(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{r})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \boldsymbol{r})$的好处是,$S_{12}$对空间各方向的平均值为 0,即

$$\int S_{12} \, \mathrm{d}\Omega = 0$$

因此张量力 $V_T S_{12}$对空间各方向的平均值为 0(参看题 6.42).

15.15 同上题,进一步假设核子-核子作用势为定域势,试写出其一般表示式.

解 作为定域势,应与动量 $\boldsymbol{p}$ 无关,因而与轨道角动量 $\boldsymbol{l}$ 也无关. 在上题式(12)中去掉与 $\boldsymbol{p}$ 与 $\boldsymbol{l}$ 有关的各项后,可知

$$V(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2, \boldsymbol{\tau}_1, \boldsymbol{\tau}_2) = V_c + V_T \tag{1}$$

V_c 为中心力,V_T 为张量力,即

$$V_c = V_0(r) + V_\sigma(r)(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2) + V_\tau(r)(\boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2) + V_{\sigma\tau}(r)(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2)(\boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2) \tag{2}$$

$$V_T = [V_{T0}(r) + V_{Tc}(r)(\boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2)] S_{12} \tag{3}$$

存在张量力的证据之一是氘核(np 结合态)的基态($J^\pi = 1^+$)电四极矩不为 0. 若核力为纯中心力,则基态轨道角动量 $l=0$,电四极矩应为 0. 若存在张量力(非中心力),基态将含有 d 波($l=2$)成分,从而具有电四极矩.

引入坐标、自旋、同位旋交换算符 P_r、P_σ、P_τ,波函数的反对称性要求归结为

$$\boxed{P_r P_\sigma P_\tau = -1} \tag{4}$$

另外,容易证明

$$P_\sigma = \frac{1}{2}(1 + \sigma_1 \cdot \sigma_2), \quad P_\tau = \frac{1}{2}(1 + \boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2) \tag{5}$$

因此式(2)中各算符均可用 P_r、P_σ、P_rP_σ 表示，其中

$$(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2)(\boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2) = 1 - 4P_r - 2P_\sigma + 2P_rP_\sigma \tag{6}$$

因此式(2)可以重新写成

$$V_c = V_W(r) + V_M(r)P_r + V_B(r)P_\sigma + V_H(r)P_rP_\sigma \tag{7}$$

其中

$$\begin{aligned} V_W &= V_0 - V_\sigma - V_r + V_{\sigma\tau} && \text{(Wigner 力)} \\ V_M &= -4V_{\sigma\tau} && \text{(Majorana 力)} \\ V_B &= 2V_\sigma - 2V_{\sigma\tau} && \text{(Bartlett 力)} \\ V_H &= 2V_{\sigma\tau} - 2V_\tau && \text{(Heisenberg 力)} \end{aligned}$$

15.16　讨论一维无限深势阱($0 \leqslant x \leqslant L$)中的电子气体的性质.

解　粒子能级公式为

$$E = E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}n^2, \quad n = 1,2,3,\cdots \tag{1}$$

电子从最低能级($n=1$)开始，在不违反 Pauli 原理的原则下，一直填充到 Fermi 能级($n=n_F$).考虑到电子的自旋自由度，电子气的电子总数为

$$N = 2n_F \tag{2}$$

Fermi 能为

$$E_F = \frac{\pi_2\hbar^2}{2mL^2}n_F^2 = \frac{\pi^2\hbar^2}{8mL^2}N^2 \tag{3}$$

电子气的总能量为

$$\begin{aligned} E_t &= 2\sum_{n=1}^{n_F} E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{mL^2}\sum_{n=1}^{n_F} n^2 \\ &= \frac{\pi^2\hbar^2}{mL^2}\,\frac{1}{6}n_F(n_F+1)(2n_F+1) \\ &\approx \frac{\pi^2\hbar^2}{3mL^2}n_F^3 \quad (n_F \gg 1) \\ &= \frac{\pi^2\hbar^2}{24mL^2}N^3 \end{aligned} \tag{4}$$

每个电子的平均能量为

$$\bar{E} = E_t/N \approx \frac{\pi^2\hbar^2}{24mL^2}N^2 \tag{5}$$

不难看出

$$\bar{E}=\frac{1}{3}E_F \tag{6}$$

定义 $n_e=N/L$(一维电子气的线密度),则

$$E_F=\frac{\pi^2\hbar^2}{8m}n_e\propto n_e \tag{7}$$

即 E_F 和 $\bar{E}$ 都与 n_e 成正比.

值得注意,Pauli 原理在此起了重要作用. 如不计及 Pauli 原理,则电子气的最低能量为 NE_1. 而

$$\frac{E_t}{NE_1}=\frac{N^2}{12}\quad(N\gg 1) \tag{8}$$

E_t 比 NE_1 大得多. 与此类似,如要压缩阱壁(缩小阱宽 L),则电子气将给阱壁作用力

$$F=-\frac{\partial E_t}{\partial L}=\frac{\pi^2\hbar^2}{12m}n_e^3 \tag{9}$$

也是不考虑 Pauli 原理情况下的作用力的 $N^2/12$ 倍.

15.17 讨论边长为 L 的二维盒子中的电子气体的性质.

解 二维盒子中的粒子的能级公式为

$$E=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}(n_x^2+n_y^2),\quad n_x,n_y=1,2,3,\cdots$$

$$=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}n^2,\quad n^2=n_x^2+n_y^2 \tag{1}$$

电子从基态开始,在不违反 Pauli 原理的原则下,一直往高能级填充,直到 Fermi 能级. 对于电子数目很大的体系,我们不妨把量子数 n 看成连续变化,以计算电子气的各种性质. 为此,把(n_x,n_y)换成"平面极坐标"(图 15.17). 考虑到电子的自旋自由度,处于量子数$(n,n+\mathrm{d}n)$中的电子数为

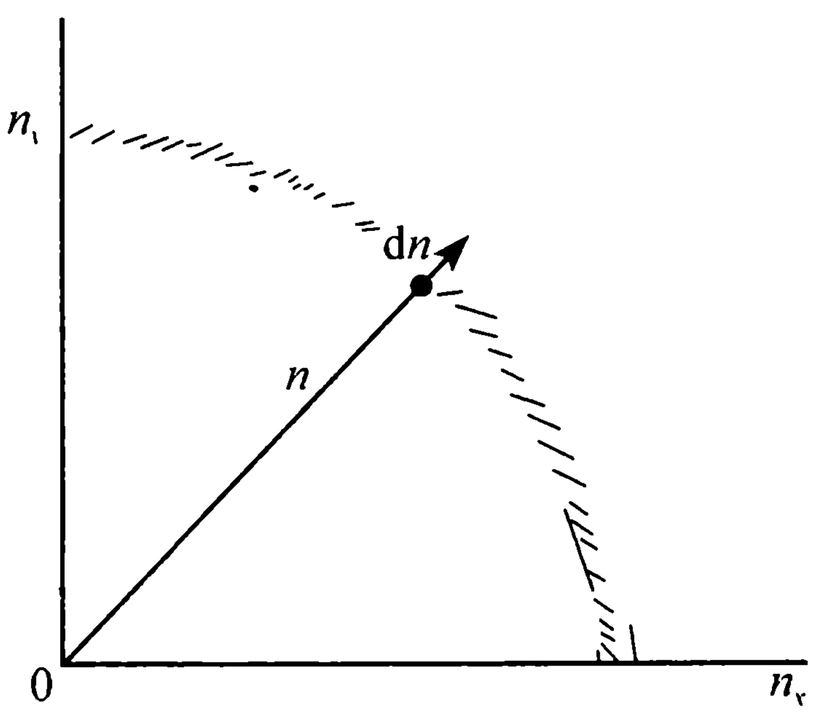


图 15.17

$$\mathrm{d}N=2\cdot\frac{2\pi n\mathrm{d}n}{4}=\pi n\mathrm{d}n \tag{2}$$

利用(1)式,得

$$\mathrm{d}E=\frac{\pi^2\hbar^2}{mL^2}n\mathrm{d}n \tag{3}$$

所以态密度

$$\rho(E)=\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}E}=\frac{mL^2}{\pi\hbar^2} \tag{4}$$

电子总数为

$$N=\frac{mL^2}{\pi\hbar^2}\int_0^{E_f}\mathrm{d}E=\frac{mL^2}{\pi\hbar^2}E_f \tag{5}$$

电子的平均能量为(利用(4)式)

$$\bar{E}=\int_0^{E_f}E\mathrm{d}N\Big/\int_0^{E_f}\mathrm{d}N=\int_0^{E_f}E\mathrm{d}E\Big/\int_0^{E_f}\mathrm{d}E=\frac{1}{2}E_f \tag{6}$$

令 $n_e=N/L^2$ 表示二维电子气的空间面密度,则由(5)式可得

$$E_f=\frac{\pi\hbar^2}{m}\left(\frac{N}{L^2}\right)=\frac{\pi\hbar^2}{m}n_e\propto n_e \tag{7}$$

即 Fermi 能量 $E_f\propto n_e$(电子气面密度).

电子气的总能量为

$$E_t=N\bar{E}=\frac{1}{2}NE_F=\frac{\pi\hbar^2}{2mL^2}N^2=\frac{\pi\hbar^2}{2mA}N^2\quad(A=L^2,\text{面积}) \tag{8}$$

如要压缩二维电子气的面积 A,则"表面张力"为

$$F=-\frac{\partial E_t}{\partial A}=\frac{\pi\hbar^2}{2m}\left(\frac{N}{A}\right)^2=\frac{\pi\hbar^2}{2m}n_e^2 \tag{9}$$

F 正比于二维电子气的面密度的平方.

15.18　讨论边长为 L 的三维盒子中的电子气体的性质.

解　单粒子能级公式为

$$E=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}(n_x^2+n_y^2+n_z^2),\quad n_x,n_y,n_z=1,2,3,\cdots$$

$$=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}n^2\quad(n^2=n_x^2+n_y^2+n_z^2) \tag{1}$$

$n=\sqrt{2mL^2E}/\pi\hbar$. 在(n_x,n_y,n_z)相应的"球坐标系"中,$(n,n+\mathrm{d}n)$范围中的电子数(计及电子自旋态)为

$$\mathrm{d}N=2\cdot\frac{4\pi n^2\mathrm{d}n}{8}\approx\pi n^2\mathrm{d}n \tag{2}$$

所以,当把(n_x,n_y,n_z)空间中半径$\lesssim R_N$ 的量子态全填满后,电子总数为

$$N=\pi\int_0^{R_N}n^2\mathrm{d}n=\frac{\pi}{3}R_N^3 \tag{3}$$

即 $R_N=(3N/\pi)^{1/3}$. 电子气的总能量为

$$E_t=2\sum_{(n_x,n_y,n_z)}E(n_x,n_y,n_z)=\int_{(\text{Fermi球})}E(n)\mathrm{d}N$$

$$=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\int_0^{R_N}n^2\pi n^2\mathrm{d}n=\frac{\pi^3\hbar^2}{10mL^2}R_N^5 \tag{4}$$

所以

$$E_t=\frac{\pi^3\hbar^2}{10mL^2}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{5/3}N^{5/3} \tag{5}$$

而 Fermi 能量为

$$E_F=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}R_N^2=\frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\left(\frac{3}{\pi}N\right)^{2/3} \tag{6}$$

电子平均能量为

$$\bar{E}=E_t/N=\frac{\pi^3\hbar^2}{10mL^2}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{5/3}N^{2/3} \tag{7}$$

由(6)、(7)式可得

$$\bar{E}=\frac{3}{5}E_F \tag{8}$$

当 L 固定时,$E_t\propto N^{5/3}$,$\bar{E}\propto N^{2/3}$,$E_F\propto N^{2/3}$.

对于电子数固定的电子气,令 $\Omega\equiv L^3$ 表示电子气的体积,则电子气压强为

$$P=-\frac{\partial E_t}{\partial\Omega} \tag{9}$$

利用(5)式($E_t\propto L^{-2}=\Omega^{-2/3}$),可得出

$$P=\frac{\pi^3}{15}\cdot\left(\frac{3}{\pi}\right)^{5/3}\frac{\hbar^2}{m}\cdot n_e^{5/3}\propto n_e^{5/3} \tag{10}$$

式中 $n_e=N/\Omega$ 为电子气的空间密度. 所以 $P\propto n_e^{5/3}$,这是 Pauli 原理的表现(对于经典的理想气体,$P\propto n$). 电子气的可压缩性(compressibility)可用 B 来刻画,

$$B=-\Delta P\Big/\left(\frac{\Delta\Omega}{\Omega}\right)=-\Omega\frac{\partial P}{\partial\Omega} \tag{11}$$

B 愈大,气体愈不可压缩. 利用(10)式,可得出

$$B=\frac{5}{3}P \tag{12}$$

例如,对于 Na 原子气体(每个原子带一个价电子),$n_e=2.6\times10^{22}\,\mathrm{cm}^{-3}$,可得出 $B\approx9\times10^9\,\mathrm{N/m^2}$. 实验观测值为$\sim6.4\times10^{10}\,\mathrm{N/m^2}$. 这里显示出 Pauli 原理的重要

影响(反抗压缩).

以上结果还可如下得出.利用(1)和(2)式,可求出

$$\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}E}=\frac{m^2L^3}{\pi^2\hbar^2}\sqrt{2mE} \tag{13}$$

所以

$$N=\frac{m^2L^3}{\pi^2\hbar^2}\int_0^{E_F}\sqrt{2mE}\mathrm{d}E=\frac{L^3}{3\pi^2}\left(\frac{2mE_F}{\hbar^2}\right)^{3/2}=\frac{L^3}{3\pi^2}k_F^3 \tag{14}$$

式中 $k_F=\sqrt{2mE_F}/\hbar$ 为 Fermi 波数.可以看出,$k_F\propto(N/L^3)^{1/3}=n_e^{1/3}$,而 $E_F\propto n^{2/3}\propto N^{2/3}$.此外,还容易求出(利用(13)式)

$$\bar{E}=\int E\mathrm{d}N\Big/\int\mathrm{d}N=\int_0^{E_f}E\sqrt{E}\mathrm{d}E\Big/\int_0^{E_F}\sqrt{E}\mathrm{d}E=\frac{3}{5}E_F$$

15.19　设有大量电子(或其他自旋为 1/2 的全同粒子)被束缚于二维各向同性谐振子势阱中,讨论电子气体的性质.

解　二维各向同性谐振子的能级公式为

$$E_n=(n+1)\hbar\omega,\quad n=0,1,2,\cdots \tag{1}$$

简并度为 $f_n=(n+1)$.设电子从 $n=0$ 能级开始,一直填充到 $n_F=(K-1)$能级,$E_F=K\hbar\omega$.电子总数为

$$N=2\sum_{n=0}^{K-1}(n+1)=K(K+1)\approx K^2\quad(\text{对于 }K\gg1) \tag{2}$$

电子气的总能量为

$$\begin{aligned}E_t&=2\sum_{n=0}^{K-1}(n+1)E_n=2\hbar\omega\sum_{n=0}^{K-1}(n+1)^2\\&=2\cdot\frac{1}{6}K(K+1)(2K+1)\hbar\omega\\&\approx\frac{2}{3}K^3\hbar\omega\end{aligned} \tag{3}$$

单个电子的平均能量为

$$\bar{E}=E_t/N=\frac{1}{3}(2K+1)\hbar\omega \tag{4}$$

所以

$$\bar{E}=\frac{2}{3}\left(1+\frac{1}{K}\right)E_F\approx\frac{2}{3}E_F\quad(\text{对于 }K\gg1) \tag{5}$$

对于 E_n 能级的粒子,按位力定理,势能平均值为 $\frac{1}{2}m\omega^2\langle r^2\rangle_n=\frac{1}{2}E_n=\frac{1}{2}(n+1)\hbar\omega$,所以 $\langle r^2\rangle_n=(n+1)\frac{\hbar}{m\omega}$,对于电子气,则

$$\langle r^2\rangle=\frac{1}{N}\sum_{n=0}^{K-1}2(n+1)(n+1)\frac{\hbar}{m\omega}$$

$$=\frac{\hbar}{3m\omega}(2K+1)\simeq\frac{2\hbar K}{3m\omega}\quad(K\gg1)$$

$$=\frac{2\hbar}{3m\omega}N^{1/2}\tag{6}$$

二维电子气的"面积"为

$$A=\pi\langle r^2\rangle=\frac{2\pi\hbar}{3m\omega}K\approx\frac{2\pi\hbar}{3m\omega}N^{1/2}\tag{7}$$

电子气的平均面密度为

$$n_e=\frac{N}{A}=\frac{3m\omega}{\pi\hbar}\frac{K(K+1)}{(2K+1)}=\frac{3m\omega}{2\pi\hbar}K\approx\frac{3m\omega}{2\pi\hbar}N^{1/2}\tag{8}$$

电子气的总能量为

$$E_t\approx\frac{2}{3}\hbar\omega N^{3/2}\approx\frac{2}{3}\hbar\omega\left(\frac{3m\omega}{2\pi\hbar}\right)^3A^3\tag{9}$$

若 ω 保持为常数,则 $E_t\propto N^{3/2}\propto A^3$. 若要缩小二维电子气的面积,需要加"压力".

$$P=\frac{\partial E_t}{\partial A}=2\hbar\omega\left(\frac{3m\omega}{2\pi\hbar}\right)^3A^2=\frac{3m\omega^2}{\pi}N\tag{10}$$

这是 Pauli 原理的表现. 随 N 增大,要压缩电子气则愈困难.

如要保持二维电子气的面密度为常数,从(8)式可以看出,要求 $N^{1/2}\omega$ 为常数,即要求

$$\omega\propto N^{-1/2}\tag{11}$$

此时,二维电子气的"半径"(见(6)式)

$$\sqrt{\langle r^2\rangle}\propto N^{1/2}\tag{12}$$

而

$$A=\pi\langle r^2\rangle\alpha N\tag{13}$$

这可以视为"二维核物质"的一种模型,其面密度是均匀分布的.

15.20 在原子核的壳模型理论中,原子核被看成是在三维各向同性谐振子势

$V(r)=\frac{1}{2}m\omega^2r^2$ 中运动的全同粒子(中子或质子)系. 讨论此全同粒子系的性质.

解　单粒子能级为

$$E_k=\left(k+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega,\quad k=0,1,2,\cdots \tag{1}$$

简并度(计及核子自旋态)为 $f_k=(k+1)(k+2)$. 设核子从 $k=0$ 能级开始,一直填满 $k=K$ 壳层,则核子(中子或质子)总数为①

$$N=\sum_{k=0}^{K}(k+1)(k+2)\approx\frac{1}{3}K^3\quad(\text{对于 }K\gg1,\text{下同}) \tag{2}$$

体系的总能量为

$$\begin{aligned}E_t&=\sum_{k=0}^{K}f_kE_k=\sum_{k=0}^{K}(k+1)(k+2)(k+3/2)\hbar\omega\\&=\hbar\omega\sum_{k=0}^{K}\left[k^3+\frac{9}{2}k^2+\frac{13}{2}k+3\right]\approx\frac{1}{4}\hbar\omega K^4\end{aligned} \tag{3}$$

每粒子的能量平均值为

$$\bar{E}=E_t/N\approx\frac{3}{4}K\hbar\omega\propto N^{1/3}\omega \tag{4}$$

Fermi 能量为 $E_F=(K+3/2)\hbar\omega$,

$$\frac{\bar{E}}{E_F}\approx\frac{3}{4} \tag{5}$$

此结果与三维方盒子(边长固定)中的核子气的性质相似.

根据位力定理,对于处于 E_k 能壳的核子

$$\frac{1}{2}m\omega^2\langle r^2\rangle_k=\frac{1}{2}E_k=\frac{1}{2}\left(k+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega$$

所以 $\langle r^2\rangle_k=\left(k+\frac{3}{2}\right)\hbar/m\omega$,而原子核的 r^2 平均值为

$$\begin{aligned}\langle r^2\rangle&=\frac{1}{N}\sum_{k=0}^{k}f_k\langle r^2\rangle_k\\&=\frac{1}{N}\frac{\hbar}{2m\omega}\sum_{k=0}^{K}(k+1)(k+2)\left(k+\frac{3}{2}\right)\end{aligned}$$

---

① 这里利用了

$$\sum_{k=0}^{K}k=\frac{1}{2}K(K+1),\sum_{k=1}^{K}k^2=\frac{1}{6}K(K+1)(2K+1),\sum_{k=0}^{K}k^3=\frac{1}{4}K^2(K+1)^2.$$

$$= \frac{3}{4}(K+2)\frac{\hbar}{m\omega} \approx \frac{3}{4}K\frac{\hbar}{m\omega} \quad (K \gg 1)$$

$$\approx \frac{3}{4}^{4/3} N^{1/3}\frac{\hbar}{m\omega} \tag{6}$$

核子在空间的平均密度为(设 Ω 为核体积)

$$n = N/\Omega \propto K^3/\langle r^2\rangle^{3/2} \propto K^{3/2}\omega^{3/2} \propto N^{1/2}\omega^{3/2} \tag{7}$$

对于实际原子核,它是一个具有短程强相互作用的全同粒子体系,表现为核子的空间密度近似为常数(在这里,Pauli 原理及强短程作用起了关键作用). 这样,作为它的一个近似模型,壳模型中的谐振子势的强度参数 ω 就不应该为常数. 按(7)式,均匀空间密度的要求,可得

$$\omega \propto N^{-1/3} \tag{8}$$

对于轻核,中子数 N=质子数 Z,核子总数 $A=N+Z=2N$,因此

$$\omega \propto A^{-1/3} \tag{9}$$

这正是核壳模型理论中习惯采用的关系式. 在这种假定下,原子核的 $\langle r^2\rangle \propto A^{2/3}$,因而核半径 $R \propto \sqrt{\langle r^2\rangle} \propto A^{1/3}$,即核半径的 $A^{1/3}$ 律.

15.21 氢原子的 Hamilton 算符为

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu} - \frac{\mathrm{e}^2}{r} \tag{1}$$

试按照下列步骤导出束缚态($E<0$)能级公式.

(a) 定义 Runge-Lenz 矢量算符

$$\boldsymbol{K} = \frac{\boldsymbol{r}}{r} + \frac{1}{2\mu e^2}(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}) \tag{2}$$

(b) 证明 $\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{l}=\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{K}=0$,

证明 $[\boldsymbol{K}, H]=0$,即 $\boldsymbol{K}$ 为守恒量.

(c) 证明 $\boldsymbol{K}\times\boldsymbol{K} = -\frac{2H}{\mu e^4}\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{l}$, $\quad \boldsymbol{K}^2 = 1+\frac{2H}{\mu e^4}(\boldsymbol{l}^2+\hbar^2)$.

(d) 在束缚态($E<0$)子空间中,定义

$$\boldsymbol{A} = \left(-\frac{\mu e^4}{2H}\right)^{1/2}\boldsymbol{K} \tag{3}$$

证明

$$\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{A}=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{l},\quad \boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{l}=0$$

$$[\boldsymbol{l}_\alpha,\boldsymbol{A}_\beta]=\mathrm{i}\hbar\epsilon_{\alpha\beta\gamma}A_r,\quad \boldsymbol{l}\times\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{l}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{A}$$

(e) 再定义 $\boldsymbol{J}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{l}+\boldsymbol{A})$，证明

$$\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J}=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{J},\qquad \boldsymbol{J}^2=-\frac{1}{4}\left(\hbar^2+\frac{\mu e^4}{2H}\right)$$

(f) 确定 $\boldsymbol{J}^2$ 的本征值，从而得出束缚态能级公式.

解　利用公式(见题 4.6)

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

$$\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}+\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p} \tag{5}$$

可以将由式(2)定义的 Runge-Lenz 矢量写成以下几种等价的表示式：

$$\mathbf{K}=\frac{\boldsymbol{r}}{r}+\frac{1}{2\mu e^2}(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}) \tag{2}$$

$$=\frac{\boldsymbol{r}}{r}+\frac{1}{\mu e^2}(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p}-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}) \tag{2'}$$

$$=\frac{\boldsymbol{r}}{r}+\frac{\mathrm{i}}{2\hbar\mu e^2}[\boldsymbol{l}^2,\boldsymbol{p}] \tag{2''}$$

在题 4.7 中已经证明

$$\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{l}=\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{r}=0 \tag{6}$$

$$\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{l}=\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{p}=0 \tag{7}$$

$$\boldsymbol{l}\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{l}=0 \tag{8}$$

利用式(2')以及式(6)、(7)、(8)，即得

$$\mathbf{K}\cdot\boldsymbol{l}=\boldsymbol{l}\cdot\mathbf{K}=0 \tag{9}$$

由于$[\boldsymbol{l}^2,\boldsymbol{p}^2]=0$，$\left[\boldsymbol{l}^2,\frac{1}{r}\right]=0$，因此利用式(2'')即得

$$[\mathbf{K},H]=\frac{1}{2\mu}\left[\frac{\boldsymbol{r}}{r},\boldsymbol{p}^2\right]-\frac{\mathrm{i}}{2\mu\hbar}\left(\boldsymbol{l}^2\left[\boldsymbol{p},\frac{1}{r}\right]-\left[\boldsymbol{p},\frac{1}{r}\right]\boldsymbol{l}^2\right) \tag{10}$$

在题 4.4 中已经算出

$$\left[\boldsymbol{p},\frac{1}{r}\right]=\mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{r}}{r^3} \tag{11}$$

$$\left[\boldsymbol{p}^2,\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right]=2\hbar^2\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}+2\mathrm{i}\hbar\left[\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})-\frac{1}{r}\boldsymbol{p}\right] \tag{12}$$

代入式(10)，得到

$$[\boldsymbol{K},H]=\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu}\left[\frac{1}{r}\boldsymbol{p}-\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})\right]-\frac{\hbar^2}{\mu}\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}+\frac{1}{2\mu r^3}[\boldsymbol{l}^2,\boldsymbol{r}] \tag{13}$$

容易证明

$$[\boldsymbol{l}^2,\boldsymbol{r}]=\mathrm{i}\hbar(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{l}-\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{r})=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{l}+2\hbar^2\boldsymbol{r} \tag{14}$$

$$\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{l}=\boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})=\boldsymbol{r}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})-r^2\boldsymbol{p} \tag{15}$$

因此

$$\frac{1}{r^3}[\boldsymbol{l}^2,\boldsymbol{r}]=2\mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})-2\mathrm{i}\hbar\frac{1}{r}\boldsymbol{p}+2\hbar^2\frac{\boldsymbol{r}}{r^3} \tag{16}$$

将式(16)代入式(13),即得

$$[\boldsymbol{K},H]=0 \tag{17}$$

因此 Runge-Lenz 矢量 $\boldsymbol{K}$ 是守恒量. 经典力学中也有这结论.

下面计算 $\boldsymbol{K}\times\boldsymbol{K}$. 由式(2′),

$$\boldsymbol{K}\times\boldsymbol{K}=\frac{1}{\mu e^2}\left[\frac{\boldsymbol{r}}{r}\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})+(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right]+\frac{1}{\mu^2e^4}(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})$$

$$-\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu^2e^4}[\boldsymbol{p}\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})+(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times\boldsymbol{p}] \tag{18}$$

根据题 4.10 的计算,式(18)中最后一项为 0. 再利用公式(见题 4.11、4.13)

$$\frac{\boldsymbol{r}}{r}\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})+(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times\frac{\boldsymbol{r}}{r}=2\mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{l}}{r} \tag{19}$$

$$(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{l}\boldsymbol{p}^2 \tag{20}$$

即得

$$\boldsymbol{K}\times\boldsymbol{K}=\frac{2\mathrm{i}\hbar}{\mu e^2}\frac{\boldsymbol{l}}{r}-\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu^2e^4}\boldsymbol{l}\boldsymbol{p}^2=-\frac{2\mathrm{i}\hbar}{\mu e^4}\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}-\frac{e^2}{r}\right)\boldsymbol{l}=-\frac{2}{\mu e^4}H\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{l} \tag{21}$$

再计算 $\boldsymbol{K}^2=\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{K}$. 由式(2′)

$$\boldsymbol{K}^2=1+\frac{1}{\mu^2e^4}[(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})^2-\hbar^2\boldsymbol{p}^2-\mathrm{i}\hbar(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{p}-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})]$$

$$+\frac{1}{\mu e^2}\left[\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})+(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}-\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)\right] \tag{22}$$

利用公式(见题 4.7、4.12、4.9、4.5)

$$(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{p}=0 \tag{23}$$

$$\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}^2 \tag{24}$$

$$(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})^2=\boldsymbol{l}^2\boldsymbol{p}^2 \tag{25}$$

$$\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=2\mathrm{i}\hbar\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}-\frac{1}{r}\boldsymbol{l}^2=2\hbar^2\frac{\partial}{\partial r}-\frac{1}{r}\boldsymbol{l}^2 \tag{26}$$

$$(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}=-\frac{1}{r}\boldsymbol{l}^2 \tag{27}$$

$$\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}=2p_r=-2\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right) \tag{28}$$

即得

$$\boldsymbol{K}^2=1+\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{\mu^2e^4}-\frac{2}{\mu e^2r}\right)(\boldsymbol{l}^2+\hbar^2)=1+\frac{2}{\mu e^4}H(\boldsymbol{l}^2+\hbar^2) \tag{29}$$

在束缚态子空间中，$E<0$，因此$(-H)^{-1/2}$存在，定义

$$\boldsymbol{A}=\left(-\frac{\mu e^4}{2}H^{-1}\right)^{1/2}\boldsymbol{K} \tag{3}$$

由于 H、$\boldsymbol{K}$ 对易，因此显然有

$$\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{A}=-\frac{\mu e^4}{2}H^{-1}\boldsymbol{K}\times\boldsymbol{K}$$

利用式(21)．即得

$$\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{A}=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{l} \tag{30}$$

由于 H、$\boldsymbol{l}$ 对易，则由定义式(3)并利用式(9)，即得

$$\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{l}=\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{A}=0 \tag{31}$$

利用 $\boldsymbol{l}$ 和 $\boldsymbol{r}$、$\boldsymbol{p}$ 的对易式

$$[l_\alpha,x_\beta]=\mathrm{i}\hbar\,\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}x_\gamma,\quad [l_\alpha,p_\beta]=\mathrm{i}\hbar\,\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}p_\gamma$$

以及 $\boldsymbol{K}$ 的表示式(2″)，易得 $\boldsymbol{l}$、$\boldsymbol{K}$ 的对易关系

$$[l_\alpha,K_\beta]=\mathrm{i}\hbar\,\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}K_\gamma \tag{32}$$

$$\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{K}+\boldsymbol{K}\times\boldsymbol{l}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{K} \tag{33}$$

由于 $\boldsymbol{H}$ 与 $\boldsymbol{l}$ 对易，$\boldsymbol{l}$ 和 $\boldsymbol{A}$ 显然也有类似关系

$$[l_\alpha,A_\beta]=\mathrm{i}\hbar\,\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\gamma \tag{34}$$

$$\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{l}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{A} \tag{35}$$

再定义

$$\boxed{\boldsymbol{J}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{l}+\boldsymbol{A})} \tag{36}$$

显然有对易关系

$$\begin{aligned}\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J}&=\frac{1}{4}(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{l}+\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{A}+\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{l})\\&=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}(\boldsymbol{l}+\boldsymbol{A})=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{J}\end{aligned} \tag{37}$$

即 $\boldsymbol{J}$ 满足角动量算符的基本对易式. 根据角动量基本理论,易知

$$[\boldsymbol{J},\boldsymbol{J}^2]=0 \tag{38}$$

$\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的本征值为

$$\boldsymbol{J}^2=j(j+1)\hbar^2,\quad j\text{ 取 }0\text{,正整数或正半奇数} \tag{39}$$

$$J_z=m_j\hbar,\quad m_j=j,j-1,\cdots,(-j) \tag{40}$$

由于 $J_z=\frac{1}{2}(l_z+A_z)$,而 l_z、A_z 对易,故 J_z 的本征值为 l_z 的本征值及 A_z 的本征值之和. l_z 的本征值为

$$l_z=m_l\hbar,\quad m_l=0,\pm1,\pm2,\cdots \tag{41}$$

由于 m_j 必须是 $\frac{1}{2}$ 的整倍数,所以 $A_z/\hbar$ 必须是整数. 给定 A_z 的一个本征值后,由于 m_l 的最小变化为 1,所以 m_j 的最小变化为 $\frac{1}{2}$,因此 m_j 可取一切正负整数(包括 0)和半奇数,从而 j 的取值为

$$\boxed{j=0,\frac{1}{2},1,\frac{3}{2},2,\cdots} \tag{42}$$

利用 $\boldsymbol{J}$ 的定义式(36)以及式(31)、(3)、(29),易得

$$\boldsymbol{J}^2=\frac{1}{4}(\boldsymbol{l}^2+\boldsymbol{A}^2)=-\frac{1}{4}\left(\hbar^2+\frac{\mu e^4}{2}H^{-1}\right) \tag{43}$$

因此

$$\boxed{H=-\frac{\mu e^4}{8}\left(\boldsymbol{J}^2+\frac{\hbar^2}{4}\right)^{-1}} \tag{44}$$

以 $\boldsymbol{J}^2$ 的本征值 $j(j+1)\hbar^2$ 代入上式,即得氢原子束缚态能级公式

$$E=-\frac{\mu e^4}{8\left(j+\frac{1}{2}\right)^2\hbar^2}=-\frac{\mu e^4}{2n^2\hbar^2} \tag{45}$$

$$\boxed{n = 2j + 1 = 1,2,3,\cdots} \tag{46}$$

这结果和通常由定态 Schrödinger 方程解出的结果完全一致.

15.22　求 Galileo 变换下波函数的变换规律.

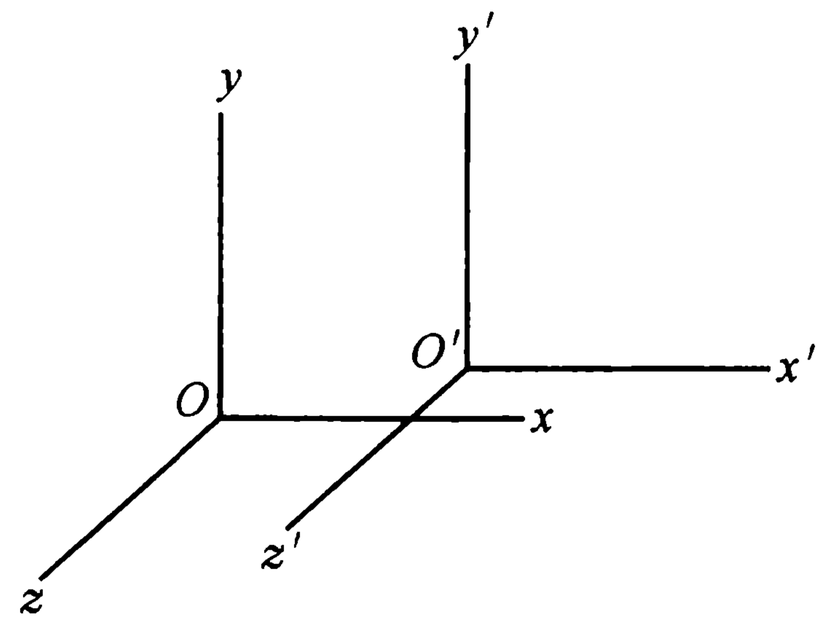


图 15.22

解　设惯性系 $O'(x',y',z')$相对于惯性系 $O(x,y,z)$以匀速 v 沿 x 轴正向运动,同一个物理点在两个惯性系中的坐标由 Galileo 变换联系:

$$\begin{cases} x' = x - vt \\ y' = y, z' = z, t' = t \end{cases} \tag{1}$$

并设在 O 和 O' 系中粒子所受作用力相同,即

$$V'(x',y',z',t') = V(x,y,z,t) = V(x' + vt',y',z',t') \tag{2}$$

在 $O(x,y,z)$系中,Schrödinger 方程为

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(x,y,z,t)$$

$$= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V(x,y,z,t) \right]\psi(x,y,z,t) \tag{3}$$

Schrödinger 方程应该具有 Galileo 不变性,即在 $O'(x',y',z')$系中方程应为

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t'}\psi'(x',y',z',t')$$

$$= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2}{\partial y'^2} + \frac{\partial^2}{\partial z'^2}\right) + V'(x',y',z',t') \right]\psi'(x',y',z',t') \tag{4}$$

粒子的空间概率分布应该不受 Galileo 变换的影响,因此应有

$$|\psi(x,y,z,t)|^2 = |\psi'(x',y',z',t')|^2 \tag{5}$$

因而波函数 ψ 和 ψ' 间的变换关系可以表示成下列形式:

$$\psi' = \mathrm{e}^{S/\mathrm{i}\hbar}\psi \tag{6}$$

其中 $S = S(x,y,z,t)$为实函数,其具体形式应该取决于变换式(1),而与势能 V 无关. 将式(6)代入式(4),并利用微分变换关系

$$\frac{\partial}{\partial t'} = \frac{\partial t}{\partial t'}\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial x}{\partial t'}\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial t} + v\frac{\partial}{\partial x}$$

$$\frac{\partial}{\partial x'} = \frac{\partial x}{\partial x'}\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\frac{\partial}{\partial y'}=\frac{\partial}{\partial y}$$
$$\frac{\partial}{\partial z'}=\frac{\partial}{\partial z} \tag{7}$$

经过仔细计算,得到 $S(x,y,z,t)$ 满足的方程为

$$\frac{\partial S}{\partial x}-mv=0,\quad \frac{\partial S}{\partial y}=0,\quad \frac{\partial S}{\partial z}=0 \tag{8a}$$

$$\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}+\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2-v\frac{\partial S}{\partial x}-\frac{\partial S}{\partial t}=0 \tag{8b}$$

式(8a)之解为

$$S=S(x,t)=mvx+f(t)$$

代入式(8b),求得

$$f(t)=C-\frac{1}{2}mv^2t$$

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

$$S(x,t)=mvx-\frac{1}{2}mv^2t \tag{9}$$

代入式(6),即得波函数的变换规律

$$\boxed{\psi'=\psi\exp\left[\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left(mvx-\frac{1}{2}mv^2t\right)\right]} \tag{10}$$

逆变换为

$$\psi=\psi'\mathrm{e}^{\mathrm{i}s/\hbar}=\psi'\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(mvx'+\frac{1}{2}mv^2t'\right)\right] \tag{10'}$$

相当于式(10)中 $v\to -v$,带"′"的量和不带"′"的量互换.

讨论 $S(x,t)$ 的函数形式也可以用下法求出.

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

沿 x 方向运动的自由粒子,在 Galileo 变换下,动量、能量的变换关系为

$$p'=p-mv$$
$$E'=\frac{p'^2}{2m}=\frac{p^2}{2m}-vp+\frac{1}{2}mv^2=E-vp+\frac{1}{2}mv^2 \tag{11}$$

据此,O 系和 O' 系中相应的平面波波函数为

$$\psi = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(px-Et)/\hbar}$$
$$\psi' = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(p'x'-E't')/\hbar} \tag{12}$$

将变换关系(1),(11)代入式(12),即得

$$\psi' = \psi\exp\left[\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left(mvx - \frac{1}{2}mv^2t\right)\right]$$

此即式(10).由于这个变换关系仅取决于 O' 系和 O 系的相对速度 v,而与粒子的动量 p 无关,所以上式适用于任何自由粒子,它正是所求的变换关系.

15.23　两个质量相同($m_1=m_2=m$)的粒子,同在一维谐振子势场中运动.如忽略二粒子间相互作用,则体系的总能量算符为

$$H = H_1 + H_2 = T_1 + T_2 + V_1 + V_2$$
$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2(x_1^2 + x_2^2) \tag{1}$$

(a) 引入质心坐标 x_C 和相对坐标 x,

$$x_C = \frac{1}{2}(x_1 + x_2), \quad x = x_2 - x_1 \tag{2}$$

将 H 用 x_C 和 x 表示出来,解释其意义.

(b) 讨论体系的最低三个能级及相应的波函数构造.(先用 x_1, x_2 表示,再用 x_C, x 表示.)

解　粒子 1、2 的动量算符是

$$p_1 = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x_1}, \quad p_2 = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x_2} \tag{3}$$

动能算符是

$$T_1 = \frac{p_1^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}, \quad T_2 = \frac{p_2^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \tag{4}$$

(a) 引入质心坐标 x_C,相对坐标 x,以及总质量 M,折合质量 μ,

$$M = m_1 + m_2 = 2m, \quad \mu = \frac{m_1m_2}{m_1 + m_2} = \frac{m}{2} \tag{5}$$

势能函数可以表示成

$$V_1 + V_2 = \frac{1}{2}m\omega^2(x_1^2 + x_2^2) = \frac{1}{2}M\omega^2x_C^2 + \frac{1}{2}\mu\omega^2x^2 \tag{6}$$

再引入总动量算符 $P = p_1 + p_2$,由于

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial x_C}{\partial x_1}\frac{\partial}{\partial x_C} + \frac{\partial x}{\partial x_1}\frac{\partial}{\partial x} = \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x_C} - \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_2}=\frac{\partial x_C}{\partial x_2}\frac{\partial}{\partial x_C}+\frac{\partial x}{\partial x_2}\frac{\partial}{\partial x}=\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x_C}+\frac{\partial}{\partial x} \tag{7}$$

所以

$$P=p_1+p_2=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x_C} \tag{8}$$

$$\frac{1}{2}(p_2-p_1)=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}=p \tag{9}$$

总动量 P 也称质心动量，p 则是相对动量.

动量算符 p_1,p_2,P,p 是互相对易的. 容易验证

$$T_1+T_2=\frac{p_1^2}{2m}+\frac{p_2^2}{2m}=\frac{P^2}{2M}+\frac{p^2}{2\mu} \tag{10}$$

经典力学中也有同样的关系，因此上式右端第一项为质心动能(算符)，第二项为相对动能(算符).

体系的总能量算符可以表示成

$$\begin{aligned}H&=\frac{P^2}{2M}+\frac{p^2}{2\mu}+\frac{1}{2}M\omega^2x_C^2+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2\\&=-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial x_C^2}+\frac{1}{2}M\omega^2x_C^2-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2\end{aligned} \tag{11}$$

H 可以分解成质心运动与相对运动，二者都相当于简谐振子，而且振动角频率 ω 相同.

(b) 按照式(1)，体系能级(H 的本征值)为

$$\begin{gathered}E_{n_1n_2}=\left(n_1+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega+\left(n_2+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega=(n_1+n_2+1)\hbar\omega\\n_1=0,1,2,\cdots,\quad n_2=0,1,2,\cdots\end{gathered} \tag{12}$$

相应的本征函数为

$$\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2)\quad\text{或}\quad\psi_{n_2}(x_1)\psi_{n_1}(x_2) \tag{13}$$

其中各 ψ_{n_i} 为谐振子的能量本征函数. 当 $n_1=n_2=n$，上式即 $\psi_n(x_1)\psi_n(x_2)$，是交换对称的. 当 $n_1\neq n_2$，由式(13)中二项可以构造出交换对称和反对称的波函数：

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2)\pm\psi_{n_2}(x_1)\psi_{n_1}(x_2)] \tag{13'}$$

按照式(11)，体系能级可以表示为

$$\begin{gathered}E_{nn'}=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega+\left(n'+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega=(n+n'+1)\hbar\omega\\n=0,1,2,\cdots\quad n'=0,1,2,\cdots\end{gathered} \tag{14}$$

相应的本征函数为

$$\psi_n(x_C)\psi_{n'}(x) \quad 或 \quad \psi_{n'}(x_C)\psi_n(x) \tag{15}$$

当粒子 1,2 交换时，x_C 不变，x 则变为 $-x$. 所以质心波函数 $\psi_n(x_C)$ 总是交换对称的，而描述相对运动的波函数 $\psi_n(x)$ 的交换对称性则为 $(-1)^n$，等同于 $\psi_n(x)$ 的宇称性. 式(13)中，$\psi_n(x_1)$ 与 $\psi_n(x_2)$ 函数形式相同，差别只是 $x_1 \leftrightarrow x_2$. 以粒子 1 为例，与最低三个能级相应的波函数是

$$\begin{aligned}
\psi_0(x_1) &= \pi^{-1/4}\sqrt{\alpha}\mathrm{e}^{-\alpha^2 x_1^2/2}, \quad \alpha = \sqrt{m\omega/\hbar} \\
\psi_1(x_1) &= \pi^{-1/4}\sqrt{2\alpha}\alpha x_1 \mathrm{e}^{-\alpha^2 x_1^2/2} = \sqrt{2}\alpha x_1 \psi_0(x_1) \\
\psi_2(x_1) &= \sqrt{2}\left(\alpha^2 x_1^2 - \frac{1}{2}\right)\psi_0(x_1)
\end{aligned} \tag{16}$$

式(15)中 $\psi_n(x_C)$ 的构造是 $\psi_n(x_1)$ 中 $x_1 \to x_C$，$\alpha \to \alpha_M$；而 $\psi_n(x)$ 的构造是 $\psi_n(x_1)$ 中 $x_1 \to x$，$\alpha \to \alpha_\mu$. 其中

$$\alpha = \sqrt{m\omega/\hbar}, \quad \alpha_M = \sqrt{M\omega/\hbar} = \sqrt{2}\alpha, \quad \alpha_\mu = \sqrt{\mu\omega/\hbar} = \alpha/\sqrt{2} \tag{17}$$

还有

$$\alpha^2 x_1^2 + \alpha^2 x_2^2 = \alpha_M^2 x_C^2 + \alpha_\mu^2 x^2 \tag{18}$$

式(18)与式(6)等价. 这些关系有助于导出下述波函数关系.

体系的基态能级为

$$E_{00} = \hbar\omega \quad (n_1 = n_2 = n = n' = 0) \tag{19}$$

基态波函数为

$$\psi_0(x_1)\psi_0(x_2) = \psi_0(x_C)\psi_0(x) \tag{20}$$

显然这是交换对称的.

第一激发能级为

$$E_{01} = E_{10} = 2\hbar\omega \quad \left(n_1, n_2 = \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases}, \quad n, n' = \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases}\right) \tag{21}$$

相应波函数为

$$\psi_0(x_1)\psi_1(x_2), \quad \psi_1(x_1)\psi_0(x_2) \tag{22a}$$

或

$$\psi_0(x_C)\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_0(x_1)\psi_1(x_2) - \psi_1(x_1)\psi_0(x_2)] \tag{22b}$$

$$\psi_1(x_C)\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_0(x_1)\psi_1(x_2) + \psi_1(x_1)\psi_0(x_2)] \tag{22c}$$

式(22c)为交换对称,式(22b)为反对称.体系的第二激发能级是

$$E_{11}=E_{02}=E_{20}=3\hbar\omega \tag{23}$$

$$\left(n_1=n_2=1\text{ 或 }n_1,n_2=\begin{cases}0\\2\end{cases};\quad n=n'=1\text{ 或 }n,n'=\begin{cases}0\\2\end{cases}\right)$$

相应波函数分别为

$$\begin{aligned}&\psi_1(x_1)\psi_1(x_2),\quad \psi_0(x_1)\psi_2(x_2),\quad \psi_2(x_1)\psi_0(x_2)\\&\psi_1(x_C)\psi_1(x),\quad \psi_0(x_C)\psi_2(x),\quad \psi_2(x_C)\psi_0(x)\end{aligned} \tag{24a}$$

以及它们的任何线性叠加.交换对称的有

$$\psi_1(x_1)\psi_1(x_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_2(x_C)\psi_0(x)-\psi_0(x_C)\psi_2(x)]$$

$$\psi_0(x_C)\psi_2(x)=\frac{1}{2}[\psi_0(x_1)\psi_2(x_2)+\psi_2(x_1)\psi_0(x_2)]-\frac{1}{\sqrt{2}}\psi_1(x_1)\psi_1(x_2)$$

$$\psi_2(x_C)\psi_0(x)=\frac{1}{2}[\psi_0(x_1)\psi_2(x_2)+\psi_2(x_1)\psi_0(x_2)]+\frac{1}{\sqrt{2}}\psi_1(x_1)\psi_1(x_2)$$

$$\psi_0(x_C)\psi_2(x)+\psi_2(x_C)\psi_0(x)=\psi_0(x_1)\psi_2(x_2)+\psi_2(x_1)\psi_0(x_2) \tag{24b}$$

反对称的为

$$\psi_1(x_C)\psi_1(x)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_0(x_1)\psi_2(x_2)-\psi_2(x_1)\psi_0(x_2)] \tag{24c}$$

15.24 上题中,如二粒子间有微弱相互作用(当作微扰)

$$H'=V_{12}=A\delta(x_2-x_1)=A\delta(x) \tag{1}$$

求体系的最低三个能级的一级微扰修正.

解 基态见上题式(20),波函数为

$$\psi_0(x_1)\psi_0(x_2)=\psi_0(x_C)\psi_0(x)$$

无简并,能级的一级修正等于 H' 的平均值.用 x_C,x 坐标表述较为方便,即

$$E^{(1)}=\langle H'\rangle=\int\psi_0^2(x_C)\mathrm{d}x_C\int\psi_0^2(x)A\delta(x)\mathrm{d}(x)$$

$$\doteq A\psi_0^2(0)=A\alpha_\mu/\sqrt{\pi}=A\alpha/\sqrt{2\pi}=A\sqrt{m\omega/2\pi\hbar} \tag{2}$$

如用 x_1,x_2 坐标,则得

$$E^{(1)}=\langle H'\rangle=\iint\psi_0^2(x_1)A\delta(x_2-x_1)\psi_0^2(x_2)\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2$$

$$= A\int \psi_0^4(x_1)\mathrm{d}x_1 = A\frac{\alpha^2}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-2\alpha^2 x_1^2}\mathrm{d}x_1 = A\frac{\alpha}{\sqrt{2\pi}}$$

结果相同，但计算较繁. 以下计算一律用 x_C，x 坐标.

第二个能级，二重简并，波函数为

$$\psi_1(x_C)\psi_0(x),\quad \psi_0(x_C)\psi_1(x)$$

二者质心波函数互不相同，互相正交. 而 H' 仅与相对坐标有关，故 H' 不能造成两个简并态的耦合，能级的一级修正直接等于 H' 的平均值.

$$\psi_1(x_C)\psi_0(x),\quad E^{(1)} = \langle H'\rangle = A\psi_0^2(0) = A\alpha/\sqrt{2\pi} \tag{3a}$$

$$\psi_0(x_C)\psi_1(x),\quad E^{(1)} = \langle H'\rangle = A\psi_1^2(0) = 0 \tag{3b}$$

第三个能级，三重简并，波函数为

$$\psi_1(x_C)\psi_1(x),\quad \psi_0(x_C)\psi_2(x),\quad \psi_2(x_C)\psi_0(x)$$

三者质心波函数互不相同，互相正交. 同样的理由，对三种简并态分别求出：

$$\psi_1(x_C)\psi_1(x),\quad E^{(1)} = \langle H'\rangle = A\psi_1^2(0) = 0 \tag{4a}$$

$$\psi_0(x_C)\psi_2(x),\quad E^{(1)} = A\psi_2^2(0) = \frac{1}{2}A\psi_0^2(0) = A\alpha/2\sqrt{2\pi} \tag{4b}$$

$$\psi_2(x_C)\psi_0(x),\quad E^{(1)} = A\psi_0^2(0) = A\alpha/\sqrt{2\pi} \tag{4c}$$

微扰论适用条件为

$$|A|\alpha \ll \hbar\omega,\quad \text{即}\quad A^2 \ll \left(\frac{\hbar\omega}{\alpha}\right)^2 = \frac{\omega\hbar^3}{m} \tag{5}$$

微扰造成的能级变化如图 15.24 所示.

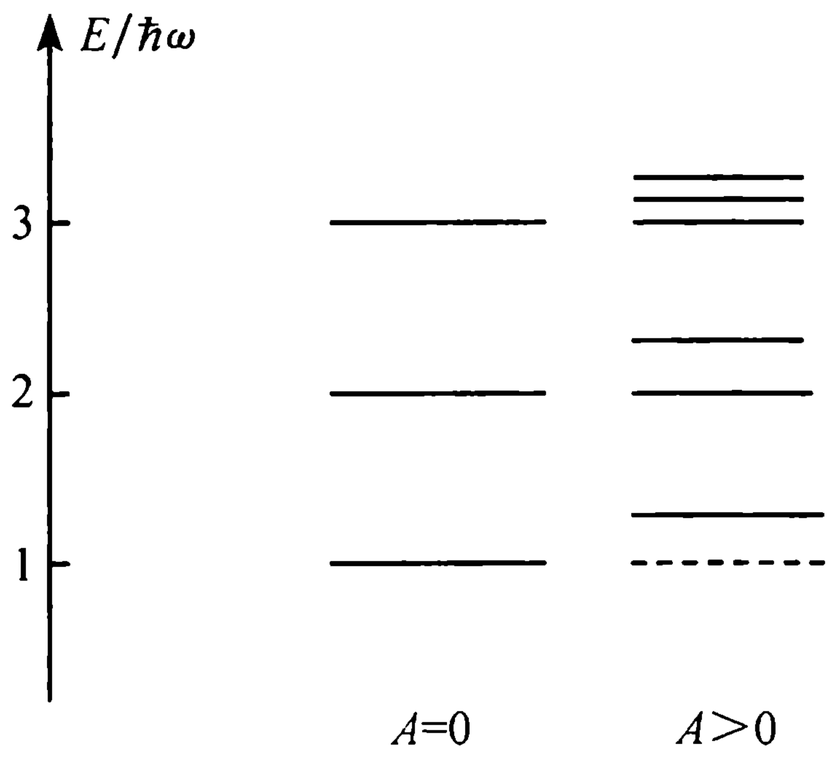


图 15.24

15.25　对于自旋 1/2 粒子，取 $\hbar=1$，则 $\boldsymbol{S}=\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$. 在 σ_z 表象中，求 σ_x，σ_y 的本征函数. 并注意选择本征函数中的相因子，使满足 (x,y,z) 的轮换对称性.

解 算符 $\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z$ 间的基本代数关系是

$$\sigma_\alpha\sigma_\beta=\delta_{\alpha\beta}+\mathrm{i}\sum_\gamma \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_\gamma \tag{1}$$

即

$$\sigma_x^2=\sigma_y^2=\sigma_z^2=1 \tag{2a}$$

$$\sigma_x\sigma_y=-\sigma_y\sigma_x=\mathrm{i}\sigma_z$$

$$\sigma_y\sigma_z=-\sigma_z\sigma_y=\mathrm{i}\sigma_x \tag{2b}$$

$$\sigma_z\sigma_x=-\sigma_x\sigma_z=\mathrm{i}\sigma_y$$

本题中,$\sigma_z,\sigma_x,\sigma_y$ 的本征函数符号规定如下:

$$\sigma_z=1,\chi_{\frac{1}{2}}. \qquad \sigma_z=-1,\chi_{-\frac{1}{2}}. \tag{3a}$$

$$\sigma_x=1,\eta_{\frac{1}{2}}. \qquad \sigma_x=-1,\eta_{-\frac{1}{2}}. \tag{3b}$$

$$\sigma_y=1,\zeta_{\frac{1}{2}}. \qquad \sigma_y=-1,\zeta_{-\frac{1}{2}} \tag{3c}$$

在量子力学中,本征函数的表示具有相位不定性,因而在以某个力学量算符的本征函数(本征矢)作为基矢的表象中,各力学量(算符)的矩阵表示式也具有相应的相位不定性.一般规定 σ_z 表象中 σ_z 的本征函数为(已做了相位规定)

$$\chi_{\frac{1}{2}}=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}, \qquad \chi_{-\frac{1}{2}}=\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix} \tag{4}$$

而 $\sigma_z,\sigma_x,\sigma_y$ 的矩阵表示,取为

$$\sigma_z=\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix}, \qquad \sigma_x=\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}, \qquad \sigma_y=\begin{bmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{bmatrix} \tag{5}$$

上式中各矩阵也已经做了一定的相位选择,称为 Pauli 表象.按式(4)、(5),易知

$$\sigma_z\chi_{\frac{1}{2}}=\chi_{\frac{1}{2}}, \qquad \sigma_z\chi_{-\frac{1}{2}}=-\chi_{-\frac{1}{2}} \tag{6a}$$

$$\sigma_x\chi_{\frac{1}{2}}=\chi_{-\frac{1}{2}}, \qquad \sigma_x\chi_{-\frac{1}{2}}=\chi_{\frac{1}{2}} \tag{6b}$$

$$\sigma_y\chi_{\frac{1}{2}}=\mathrm{i}\chi_{-\frac{1}{2}}, \qquad \sigma_y\chi_{-\frac{1}{2}}=-\mathrm{i}\chi_{\frac{1}{2}} \tag{6c}$$

由式(6b)、(6c),可以得到下列关系:

$$\begin{aligned}&(\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y)\chi_{\frac{1}{2}}=0, \qquad (\sigma_y+\mathrm{i}\sigma_y)\chi_{-\frac{1}{2}}=2\chi_{\frac{1}{2}}\\&(\sigma_x-\mathrm{i}\sigma_y)\chi_{-\frac{1}{2}}=0, \qquad (\sigma_x-\mathrm{i}\sigma_y)\chi_{\frac{1}{2}}=2\chi_{-\frac{1}{2}}\end{aligned} \tag{7}$$

由式(6b)和(6c)可见,$\chi_{\frac{1}{2}}$ 与 $\chi_{-\frac{1}{2}}$ 可以经由算符 σ_x 或 σ_y 的作用而互相转化,

$$\chi_{-\frac{1}{2}}=\sigma_x\chi_{\frac{1}{2}}=-\mathrm{i}\sigma_y\chi_{\frac{1}{2}} \tag{8a}$$

按照轮换对称性,$\eta_{\frac{1}{2}}$ 与 $\eta_{-\frac{1}{2}}$ 之间,$\zeta_{\frac{1}{2}}$ 与 $\zeta_{-\frac{1}{2}}$ 之间也应该有类似的转化关系

$$\eta_{-\frac{1}{2}} = \sigma_y \eta_{\frac{1}{2}} = -\mathrm{i}\sigma_z \eta_{\frac{1}{2}} \tag{8b}$$

$$\zeta_{-\frac{1}{2}} = \sigma_z \zeta_{\frac{1}{2}} = -\mathrm{i}\sigma_x \zeta_{\frac{1}{2}} \tag{8c}$$

因此，如 $\eta_{\frac{1}{2}}$ 已经确定，则 $\eta_{-\frac{1}{2}}$ 完全由式(8b)给出，其相因子不再有自主选择的余地. $\zeta_{\frac{1}{2}}$ 与 $\zeta_{-\frac{1}{2}}$ 的关系与此类似.

为了确定 σ_x 的本征函数，通常是求解 σ_z 表象中 σ_x 的本征方程：

$$\sigma_x \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix}$$

容易求出本征值 $\lambda = \pm 1$. 对于 $\lambda = 1$，求出 c_1、c_2 关系为 $c_1 = c_2$，所以 $\eta_{\frac{1}{2}}$ 作为 $\sigma_x = 1$ 的归一化的本征函数，其一般形式为

$$\eta_{\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_{\frac{1}{2}} + \chi_{-\frac{1}{2}}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha} \quad (\alpha \text{ 为实数}) \tag{9}$$

作为 σ_x 的本征函数，上式中位相 α 是任意的，通常取 $\alpha = 0$，以方便运算.

另外，$\eta_{\frac{1}{2}}$ 作为 σ_x 的本征态(本征值 $\sigma_x = 1$)，可以从 $\sigma_z = 1$ 的本征态 $\chi_{\frac{1}{2}}$ 绕 y 轴旋转 $\pi/2$ 角(z 轴转成 x 轴)而得出. 相应的转动算符为

$$R_y(\pi/2) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{2}S_y} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{4}\sigma_y} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 - \mathrm{i}\sigma_y) \tag{10}$$

而

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(1 - \mathrm{i}\sigma_y)\chi_{\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{\frac{1}{2}} + \chi_{-\frac{1}{2}}) \tag{9'}$$

但上式作为 $\sigma_x = 1$ 的本征态，仍有一个相位不定性. 总之，$\eta_{\frac{1}{2}}$ 最一般的表示是

$$\eta_{\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}(1 - \mathrm{i}\sigma_y)\chi_{\frac{1}{2}} \tag{11a}$$

上式与式(9)等价. 从轮换对称性，类似的关系还应该有

$$\zeta_{\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}(1 - \mathrm{i}\sigma_z)\eta_{\frac{1}{2}} \tag{11b}$$

$$\chi_{\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}(1 - \mathrm{i}\sigma_x)\zeta_{\frac{1}{2}} \tag{11c}$$

将式(9)或式(11a)代入式(8)，得到

$$\eta_{-\frac{1}{2}} = -\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} = -\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}(\chi_{\frac{1}{2}} - \chi_{-\frac{1}{2}}) \tag{12}$$

通常书中取 $\sigma_x=-1$ 的本征函数为 $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\-1\end{bmatrix}$.

将式(9)或式(11a)代入式(11b),得到

$$\zeta_{\frac{1}{2}}=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1-\mathrm{i}\\1+\mathrm{i}\end{bmatrix}\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\alpha}=\frac{1-\mathrm{i}}{2}\begin{bmatrix}1\\\mathrm{i}\end{bmatrix}\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\alpha} \tag{13a}$$

通常书中取 $\sigma_y=1$ 的本征函数为 $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\\mathrm{i}\end{bmatrix}$.

将式(13a)代入式(8c),得到

$$\zeta_{-\frac{1}{2}}=\frac{1-\mathrm{i}}{2}\begin{bmatrix}1\\-\mathrm{i}\end{bmatrix}\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\alpha} \tag{13b}$$

通常书中取 $\sigma_y=-1$ 的本征函数为 $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\-\mathrm{i}\end{bmatrix}$ 或 $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}\mathrm{i}\\1\end{bmatrix}$.

以上各式中,相因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}$,$\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\alpha}$ 尚待确定. 联合式(11a)、(11b)、(11c),就有

$$\begin{aligned}\chi_{\frac{1}{2}}&=\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\right)^3(1-\mathrm{i}\sigma_x)(1-\mathrm{i}\sigma_z)(1-\mathrm{i}\sigma_y)\chi_{\frac{1}{2}}\\&=\frac{1}{\sqrt{8}}\mathrm{e}^{3\mathrm{i}\alpha}(2-2\mathrm{i}\sigma_z)\chi_{\frac{1}{2}}=\frac{1-\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{3\mathrm{i}\alpha}\chi_{\frac{1}{2}}\end{aligned}$$

因此

$$\begin{aligned}&\mathrm{e}^{3\mathrm{i}\alpha}=\frac{\sqrt{2}}{1-\mathrm{i}}=\frac{1+\mathrm{i}}{\sqrt{2}}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(\frac{\pi}{4}+2n\pi\right)}\\&\alpha=\frac{\pi}{12}+\frac{2}{3}n\pi,\quad n=0,\pm1,\pm2,\cdots\end{aligned} \tag{14}$$

α 的两种简单特例为

$$n=0,\quad \alpha_0=\frac{\pi}{12}.\qquad n=1,\quad \alpha_1=\frac{3}{4}\pi \tag{15}$$

利用式(14),可将式(13a,b)简化成

$$\zeta_{\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\\mathrm{i}\end{bmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha},\quad \zeta_{-\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\-\mathrm{i}\end{bmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha} \tag{16}$$

通常书中常取 $\alpha=0$.

结论 σ_z 表象中 σ_x 的本征函数可取为式(9)、(12),σ_y 的本征函数可取为式(16). 其中相因子 $\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\alpha}$ 由式(14)决定,这样做可以使(x,y,z)轮换对称性得到完美体现.

利用本题的结果,容易构造出 σ_z 表象$\rightarrow\sigma_x$(或 σ_y)表象的变换矩阵,(注意,变

换矩阵也有相位不定性)从而将各算符和波函数从 σ_z 表象变换到 σ_x(或 σ_y)表象中去,具体领悟其中的轮换对称性. 请读者自行完成相应表象变换.

轮换对称性还有许多表现形式,例如

$$\begin{aligned}\langle\chi_{\frac{1}{2}}\mid\eta_{\frac{1}{2}}\rangle=\langle\eta_{\frac{1}{2}}\mid\zeta_{\frac{1}{2}}\rangle=\langle\zeta_{\frac{1}{2}}\mid\chi_{\frac{1}{2}}\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\alpha}\\ \langle\chi_{-\frac{1}{2}}\mid\eta_{\frac{1}{2}}\rangle=\langle\eta_{-\frac{1}{2}}\mid\zeta_{\frac{1}{2}}\rangle=\langle\zeta_{-\frac{1}{2}}\mid\chi_{\frac{1}{2}}\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\alpha}\end{aligned}\tag{17}$$

等等,读者不难验证.

15.26　求二电子系统总自旋 $\boldsymbol{S}^2$, S_x 的共同本征函数,记为 η_{11}, η_{10}, η_{1-1}, η_{00}, 将它们表示成 χ_{SM}($\boldsymbol{S}^2$, S_z 的共同本征函数)的线性叠加.

解　根据上题,单电子 S_x 的本征函数取为

$$\eta_{\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}e^{i\alpha}=\frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\alpha}(\chi_{\frac{1}{2}}+\chi_{-\frac{1}{2}})$$

$$\eta_{-\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}-i\\i\end{bmatrix}e^{i\alpha}=-\frac{i}{\sqrt{2}}e^{i\alpha}(\chi_{\frac{1}{2}}-\chi_{-\frac{1}{2}})$$

仿照 χ_{SM} 的构造,并令 $\chi_{\frac{1}{2}}=\alpha$, $\chi_{-\frac{1}{2}}=\beta$,可知

$$\begin{aligned}\eta_{11}&=\eta_{\frac{1}{2}}(1)\eta_{\frac{1}{2}}(2)\\&=\frac{1}{2}e^{2i\alpha}[\alpha(1)\alpha(2)+\beta(1)\beta(2)+\alpha(1)\beta(2)+\beta(1)\alpha(2)]\\&=\left[\frac{1}{2}(\chi_{11}+\chi_{1-1})+\frac{1}{\sqrt{2}}\chi_{10}\right]e^{2i\alpha}\\ \eta_{1-1}&=\eta_{-\frac{1}{2}}(1)\eta_{-\frac{1}{2}}(2)\\&=\frac{1}{2}e^{2i\alpha}[\alpha(1)\beta(2)+\beta(1)\alpha(2)-\alpha(1)\alpha(2)-\beta(1)\beta(2)]\\&=\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\chi_{10}-\frac{1}{2}(\chi_{11}+\chi_{1-1})\right]e^{2i\alpha}\\ \eta_{10}&=\frac{1}{\sqrt{2}}[\eta_{\frac{1}{2}}(1)\eta_{-\frac{1}{2}}(2)+\eta_{-\frac{1}{2}}(1)\eta_{\frac{1}{2}}(2)]\\&=\frac{i}{2\sqrt{2}}e^{2i\alpha}[2\beta(1)\beta(2)-2\alpha(1)\alpha(2)]\\&=-\frac{i}{\sqrt{2}}(\chi_{11}-\chi_{1-1})e^{2i\alpha}\end{aligned}$$

$$\eta_{00}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\eta_{\frac{1}{2}}(1)\eta_{-\frac{1}{2}}(2)-\eta_{-\frac{1}{2}}(1)\eta_{\frac{1}{2}}(2)]$$

$$=\frac{\mathrm{i}}{2\sqrt{2}}\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\alpha}[2\alpha(1)\beta(2)-2\beta(1)\alpha(2)]$$

$$=\mathrm{i}\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\alpha}\chi_{00}$$

易见这 4 个波函数互相正交. 注意 η_{00} 与 χ_{00} 代表同一种状态,即总自旋 $\boldsymbol{S}=0$ 的状态.

15.27 求二电子系统总自旋 $\boldsymbol{S}^2, S_y$ 的共同本征函数,记为 $\zeta_{11},\zeta_{10},\zeta_{1-1},\zeta_{00}$,将它们表示成 χ_{SM} 的线性叠加.

解 根据 15.25 题,单电子 S_y 的本征函数取为

$$\zeta_{\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ \mathrm{i}\end{bmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}=\frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}(\chi_{\frac{1}{2}}+\mathrm{i}\chi_{-\frac{1}{2}})$$

$$\zeta_{-\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ -\mathrm{i}\end{bmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}=\frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}(\chi_{\frac{1}{2}}-\mathrm{i}\chi_{-\frac{1}{2}})$$

仿照总自旋 $\boldsymbol{S}^2, S_z$ 的共同本征函数 χ_{SM} 的构造,可知

$$\zeta_{11}=\zeta_{\frac{1}{2}}(1)\zeta_{\frac{1}{2}}(2)$$

$$=\frac{1}{2}\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\alpha}[\alpha(1)\alpha(2)-\beta(1)\beta(2)+\mathrm{i}\alpha(1)\beta(2)+\mathrm{i}\beta(1)\alpha(2)]$$

$$=\left[\frac{1}{2}(\chi_{11}-\chi_{1-1})+\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\chi_{10}\right]\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\alpha}$$

$$\zeta_{1-1}=\zeta_{-\frac{1}{2}}(1)\zeta_{-\frac{1}{2}}(2)$$

$$=\frac{1}{2}\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\alpha}[\alpha(1)\alpha(2)-\beta(1)\beta(2)-\mathrm{i}\alpha(1)\beta(2)-\mathrm{i}\beta(1)\alpha(2)]$$

$$=\left[\frac{1}{2}(\chi_{11}-\chi_{1-1})-\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\chi_{10}\right]\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\alpha}$$

$$\zeta_{10}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\zeta_{\frac{1}{2}}(1)\zeta_{-\frac{1}{2}}(2)+\zeta_{-\frac{1}{2}}(1)\zeta_{\frac{1}{2}}(2)]$$

$$=\frac{1}{2\sqrt{2}}\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\alpha}[2\alpha(1)\alpha(2)+2\beta(1)\beta(2)]$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{11}+\chi_{1-1})\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\alpha}$$

$$\zeta_{00}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\zeta_{\frac{1}{2}}(1)\zeta_{-\frac{1}{2}}(2)-\zeta_{-\frac{1}{2}}(1)\zeta_{\frac{1}{2}}(2)]$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{2}} e^{-2i\alpha}[-2i\alpha(1)\beta(2) + 2i\beta(1)\alpha(2)]$$

$$= -ie^{-2i\alpha}\chi_{00}$$

这 4 个波函数也是互相正交的.

注意χ_{00}，η_{00}，ζ_{00}代表同样的态，即总自旋 $\boldsymbol{S}=0$ 的本征态(总 S_x，S_y，S_z 共同本征态)，但三者依次相差相因子 $ie^{2i\alpha}$，(注意 $e^{6i\alpha}=i$)即

$$\langle\chi_{00} \mid \eta_{00}\rangle = \langle\eta_{00} \mid \zeta_{00}\rangle = \langle\zeta_{00} \mid \chi_{00}\rangle = ie^{2i\alpha}$$

类似的轮换对称性很多，例如

$$\langle\chi_{11} \mid \eta_{11}\rangle = \langle\eta_{11} \mid \zeta_{11}\rangle = \langle\zeta_{11} \mid \chi_{11}\rangle = \frac{1}{2}e^{2i\alpha}$$

$$\langle\chi_{11} \mid \eta_{1-1}\rangle = \langle\eta_{11} \mid \zeta_{1-1}\rangle = \langle\zeta_{11} \mid \chi_{1-1}\rangle = -\frac{1}{2}e^{2i\alpha}$$

$$\langle\chi_{10} \mid \eta_{11}\rangle = \langle\eta_{10} \mid \zeta_{11}\rangle = \langle\zeta_{10} \mid \chi_{11}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{2i\alpha}$$

χ_{10}，η_{10}，ζ_{10}互相正交，这情况与 6.4 题类似.

15.28　对于自旋为 1/2 的粒子，只考虑自旋自由度并取 $\hbar=1$. 绕 y 轴旋转 $\pi/2$ 角的转动算符为

$$R_y(\pi/2) = e^{-i\frac{\pi}{2}S_y} = e^{-i\frac{\pi}{4}\sigma_y} \tag{1}$$

试对于 $\sigma_z=\pm1$ 的本征态$\chi_{\pm\frac{1}{2}}$计算 $R_y(\pi/2)\chi_{\frac{1}{2}}$，$R_y(\pi/2)\chi_{-\frac{1}{2}}$并解释其含义.

解　由 6.22 题式(6)，$R_y(\pi/2)$可以表示成

$$R_y(\pi/2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 - i\sigma_y) \tag{2}$$

因此

$$\begin{aligned} R_y(\pi/2)\chi_{\frac{1}{2}} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\{\chi_{\frac{1}{2}} + \chi_{-\frac{1}{2}}\} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix} \\ R_y(\pi/2)\chi_{-\frac{1}{2}} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\{\chi_{-\frac{1}{2}} - \chi_{\frac{1}{2}}\} = -\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\-1\end{bmatrix} \end{aligned} \tag{3}$$

如所周知，式(3)正是 $\sigma_x=\pm1$ 的自旋波函数[第二式中因子(−1)理解为相因子]. 从几何上说，绕 y 轴旋转 $\pi/2$ 角，则 z 轴变成 x 轴，$-z$ 轴变成 $-x$ 轴，故 $\sigma_z=\pm1$ 的本征态变成 $\sigma_x=\pm1$ 的本征态.

15.29 同上题,定义 Hadmard 算符

$$H=\frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_x+\sigma_z) \tag{1}$$

计算 $H\chi_{\frac{1}{2}}$,$H\chi_{-\frac{1}{2}}$,并解释所得结果.

解

$$H\chi_{\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_x+\sigma_z)\chi_{\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{-\frac{1}{2}}+\chi_{\frac{1}{2}})=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix} \tag{2}$$

$$H\chi_{-\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_x+\sigma_z)\chi_{-\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{\frac{1}{2}}-\chi_{-\frac{1}{2}})=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\-1\end{bmatrix} \tag{3}$$

与上题类似,式(2)、(3)正是 $\sigma_x=\pm1$ 的本征函数.

如规定 z-x 平面内 $\boldsymbol{n}$ 方向单位矢量

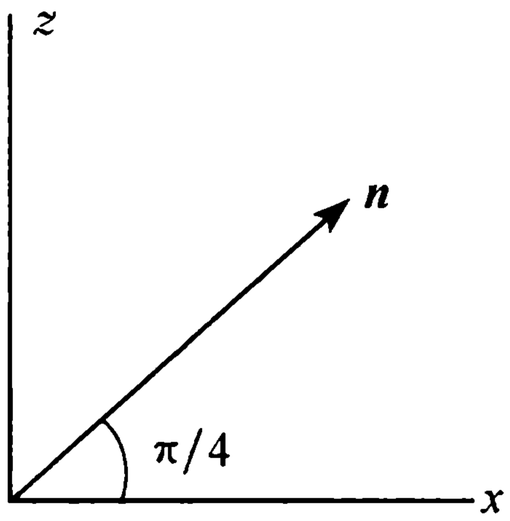


图 15.29

$$\boldsymbol{n}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{e}_x+\boldsymbol{e}_z) \tag{4}$$

则 $\boldsymbol{\sigma}$ 在 $\boldsymbol{n}$ 方向的投影为

$$\sigma_n=\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_x+\sigma_z)=H \tag{5}$$

绕 $\boldsymbol{n}$ 方向旋转 π 角的转动算符为

$$R_n(\pi)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{2}\sigma_n}=-\mathrm{i}\sigma_n=-\mathrm{i}H \tag{6}$$

即

$$H=\mathrm{i}R_n(\pi) \tag{6'}$$

绕 $\boldsymbol{n}$ 方向旋转 π 角,x 轴与 z 轴方向恰好互换,$\sigma_z=\pm1$ 的本征态→$\sigma_x=\pm1$ 的本征态. 式(2)、(3)反映的正是这个事实. 由式(1)容易证明 $H^2=1$. 即经过 H 作用二次后,一切还原.

15.30 对于自旋为 1/2 的粒子,取 $\hbar=1$,则 $\boldsymbol{S}=\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$,$\boldsymbol{\sigma}$ 为 Pauli 算符. 以 $\boldsymbol{r}$ 表示粒子的空间位矢,$\boldsymbol{r}$ 方向单位矢量为 $\frac{\boldsymbol{r}}{r}$.

(a) 定义旋度(helicity)算符 $\hat{h}=\boldsymbol{S}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}$,证明 $\hat{h}^2=\frac{1}{4}$.

(b) 定义幺正变换 $U=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi\hat{h}}$,证明 $U=2\mathrm{i}\hat{h}$. U 称为膺自旋变换(pseudospin transformation).

(c) 证明在 U 变换下,有关粒子运动的任何算符 F 的变换规则是

$$\tilde{F}\equiv U^{-1}FU=F+4\hat{h}[F,\hat{h}] \tag{1}$$

(d) 对于粒子的自旋与轨道角动量算符 $\boldsymbol{S},\boldsymbol{l}$,以及总角动量 $\boldsymbol{j}=\boldsymbol{l}+\boldsymbol{S}$,证明变换规律是

$$\tilde{\boldsymbol{S}}=U^{-1}\boldsymbol{S}U=-\boldsymbol{S}+2\frac{\boldsymbol{r}}{r}\hat{h} \tag{2}$$

$$\tilde{\boldsymbol{l}}=U^{-1}\boldsymbol{l}U=\boldsymbol{l}+2\boldsymbol{S}-2\frac{\boldsymbol{r}}{r}\hat{h} \tag{3}$$

$$\tilde{\boldsymbol{j}}=U^{-1}\boldsymbol{j}U=\boldsymbol{j} \tag{4}$$

验证 $[\boldsymbol{j},\hat{h}]=0$,$\hat{h}$ 为膺标量.

(e) 证明

$$\tilde{\boldsymbol{l}}^2=\boldsymbol{l}^2+4\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{S}+2 \tag{5}$$

$$\tilde{\boldsymbol{l}}\cdot\tilde{\boldsymbol{S}}=-\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{S}-1 \tag{6}$$

证　(a) 参看 6.33 题,$\hat{h}$ 即

$$\hat{h}=\boldsymbol{S}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}=\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}=\frac{1}{2}\sigma_r=S_r \tag{7}$$

其中 $\sigma_r=\boldsymbol{\sigma}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}$ 为 $\boldsymbol{\sigma}$ 在 $\boldsymbol{r}$ 方向的投影,因而

$$\sigma_r^2=1,\quad \hat{h}^2=\frac{1}{4},\quad \hat{h}\text{ 本征值为}\pm\frac{1}{2}$$

(b)
$$U=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi\hat{h}}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\pi}{2}\sigma_r}=\mathrm{i}\sigma_r=2\mathrm{i}\hat{h} \tag{8a}$$

(参看 6.22 题式(6),$\lambda=\pi/2$)由此可知

$$U^{+}=U^{-1}=-\mathrm{i}\sigma_r=-2\mathrm{i}\hat{h} \tag{8b}$$

(c)
$$\tilde{F}=U^{-1}\hat{F}U=4\hat{h}\hat{F}\hat{h}=4\hat{h}(\hat{F}\hat{h}-\hat{h}\hat{F}+\hat{h}\hat{F})=4\hat{h}[\hat{F},\hat{h}]+\hat{F}$$

此即式(1).

(d) 利用题 6.50 证明的公式

$$[\boldsymbol{J},J_n]=[\boldsymbol{J},\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}]=\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J} \tag{9}$$

取 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{S}$,就有

$$[\boldsymbol{S},\hat{h}]=\left[\boldsymbol{S},\boldsymbol{S}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right]=\mathrm{i}\frac{\boldsymbol{r}}{r}\times\boldsymbol{S} \tag{10}$$

$$\tilde{\boldsymbol{S}}=\boldsymbol{S}+4\hat{h}[\boldsymbol{S},\hat{h}]=\boldsymbol{S}+4\mathrm{i}\hat{h}\frac{\boldsymbol{r}}{r}\times\boldsymbol{S} \tag{11}$$

再利用 6.21 题证明的公式

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})-\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}-(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\boldsymbol{\sigma}=\mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma}$$

即得

$$4\hat{h}\frac{\boldsymbol{r}}{r}\times\boldsymbol{S}=-\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)\boldsymbol{\sigma}\times\frac{\boldsymbol{r}}{r}=\left(\mathrm{i}\frac{\boldsymbol{r}}{r}\times\boldsymbol{\sigma}-\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)\times\frac{\boldsymbol{r}}{r}=-\mathrm{i}\left(\boldsymbol{\sigma}\times\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)\times\frac{\boldsymbol{r}}{r}$$

$$=-\mathrm{i}\left\{\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)\frac{\boldsymbol{r}}{r}-\boldsymbol{\sigma}\right\}=2\mathrm{i}\boldsymbol{S}-2\mathrm{i}\frac{\boldsymbol{r}}{r}\hat{h}$$

代入式(11),即得式(2).

轨道角动量 $\boldsymbol{l}$ 经过变换,成为

$$\tilde{\boldsymbol{l}}=U^{-1}\boldsymbol{l}U=\boldsymbol{l}+4\hat{h}\left[\boldsymbol{l},\hat{h}\right]=\boldsymbol{l}+4\boldsymbol{S}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\left[\boldsymbol{l},\boldsymbol{S}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right]\tag{12}$$

其中

$$\left[\boldsymbol{l},\boldsymbol{S}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right]=\left[\boldsymbol{e}_\alpha l_\alpha,S_\beta x_\beta\right]\frac{1}{r}=\frac{1}{r}\boldsymbol{e}_\alpha S_\beta\left[l_\alpha,x_\beta\right]$$

$$=\frac{1}{r}\boldsymbol{e}_\alpha S_\beta\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}x_\gamma=\frac{\mathrm{i}}{r}\boldsymbol{S}\times\boldsymbol{r}=\frac{\mathrm{i}}{2}\boldsymbol{\sigma}\times\frac{\boldsymbol{r}}{r}\tag{13}$$

$$4\boldsymbol{S}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\left[\boldsymbol{l},\boldsymbol{S}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right]=\frac{\mathrm{i}}{r^2}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{r}=\frac{\mathrm{i}}{r^2}(\boldsymbol{r}-\mathrm{i}\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{r}$$

$$=\frac{1}{r^2}(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{r}=\boldsymbol{\sigma}-\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)\frac{\boldsymbol{r}}{r}$$

$$=2\boldsymbol{S}-2\left(\boldsymbol{S}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)\frac{\boldsymbol{r}}{r}\tag{14}$$

代入式(12),即得式(3).式(2)+式(3),即得式(4).

由式(10),(13),立即得到

$$\left[j,\hat{h}\right]=\left[\boldsymbol{l},\boldsymbol{S}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right]+\left[\boldsymbol{S},\boldsymbol{S}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right]=0\tag{15}$$

(e) 由式(3),可得

$$\tilde{\boldsymbol{l}}^2=\left(\boldsymbol{l}+2\boldsymbol{S}-2\frac{\boldsymbol{r}}{r}\hat{h}\right)\cdot\left(\boldsymbol{l}+2\boldsymbol{S}-2\frac{\boldsymbol{r}}{r}\hat{h}\right)$$

$$=\boldsymbol{l}^2+4\boldsymbol{S}^2+4\hat{h}^2+4\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{S}-2\boldsymbol{l}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\hat{h}-2\hat{h}\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{l}-8\hat{h}^2$$

由于 $\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{l}=0$(见 4.7 题),$\boldsymbol{S}^2=\frac{3}{4}$,$4\hat{h}^2=1$,上式即式(5).同样的理由,用式(2)、(3),容易证明式(6).

(本题参考 A. Bohr, I. Hamamoto, B. R. Mottelson. *Physica Scripta*, 1982, **26**:267)

15.31 一个核子(质量 μ)在下列势阱中运动,分别写出能级,标记定态的好

量子数，能级简并度.

(a) 球形谐振子势，即 $V(r)=\frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2$，能量算符为

$$H_0=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}+V(r)$$

(b) 球形谐振子势$+(-Dl^2)$，即

$$H=H_0-Dl^2,\quad D\text{ 为常数}$$

(c) Mayer-Jensen 球形壳模型势，即

$$H=H_0-Dl^2-C\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{l},\quad C>0,D>0\text{ 为常数.}$$

解　注意 $H_0,l^2,\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{l}$ 互相对易. 结果如下：

能　　级	好量子数	能级简并度
(a) $E_N=\left(N+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega$	$Nlmm_s$，宇称 $\pi=(-1)^N$，$N=0,1,2,\cdots$ $l=N,N-2,\cdots,1(N\text{ 奇})\text{或 }0(N\text{ 偶})$ $m=l,l-1,\cdots,-l;m_s=\pm\frac{1}{2}$	$f_N=(N+1)(N+2)$
(b) $E_{Nl}=E_N-Dl(l+1)\hbar^2$	$Nlmm_s$ 其余同上	$f_{Nl}=2(2l+1)$
(c) $E_{Nlj}=E_{Nl}$ $-\frac{C\hbar^2}{2}\begin{cases}l, & j=l+1/2\\ -(l+1), & j=l-1/2(l>0)\end{cases}$	$Nljm_j$ Nl 同上，$\pi=(-1)^N$ $j=l-\frac{1}{2}(l>0),l+\frac{1}{2};m_j=j,j-1,\cdots,-j$	$f_{Nlj}=(2j+1)$

第十六章　准经典近似

16.1　对于无自旋粒子，将波函数写成

$$\psi=\sqrt{\rho}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\xi} \tag{1}$$

其中 ρ、ξ 为实函数，$\rho\geqslant 0$. 试求概率流密度的表达式，并在准经典近似下设法导出量子化条件.

解　由式(1)，显然可见概率密度为

$$\rho=\psi^{*}\psi=|\psi|^{2} \tag{2}$$

概率流密度的量子力学公式为

$$\boldsymbol{j}=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}(\psi^{*}\ \boldsymbol{\nabla}\psi-\psi\boldsymbol{\nabla}\psi^{*}) \tag{3}$$

由式(1)易得

$$\ln\psi=\frac{1}{2}\ln\rho+\mathrm{i}\xi \tag{4}$$

上式求梯度，即得

$$\frac{\boldsymbol{\nabla}\psi}{\psi}=\frac{1}{2}\frac{\boldsymbol{\nabla}\rho}{\rho}+\mathrm{i}\boldsymbol{\nabla}\xi$$

以 $\psi^{*}\psi$ 乘上式，得到

$$\psi^{*}\ \boldsymbol{\nabla}\psi=\frac{1}{2}\ \boldsymbol{\nabla}\rho+\mathrm{i}\rho\boldsymbol{\nabla}\xi \tag{5}$$

其共轭方程为

$$\psi\boldsymbol{\nabla}\psi^{*}=\frac{1}{2}\ \boldsymbol{\nabla}\rho-\mathrm{i}\rho\boldsymbol{\nabla}\xi \tag{5'}$$

将式(5)、(5′)代入式(3)，即得概率流密度的表达式

$$\boldsymbol{j}=\frac{\hbar}{m}\rho\boldsymbol{\nabla}\xi \tag{6}$$

在准经典近似下，可取粒子速度为

$$\boldsymbol{v}=\frac{1}{\rho}\boldsymbol{j} \tag{7}$$

则式(6)给出

$$\nabla\xi = \frac{m}{\hbar}v = \frac{p}{\hbar} \tag{8}$$

p 为粒子的动量. 在准经典条件下，粒子的运动可以用轨道描述. 将式(8)沿任何闭合轨道积分，得到

$$\oint p \cdot \mathrm{d}r = \hbar \oint \nabla\xi \cdot \mathrm{d}r = \hbar \oint \mathrm{d}\xi \tag{9}$$

根据波函数的单值性，ξ 沿闭合轨道的改变量必须是 2π 的整倍数，即上式右端必须等于 $2\pi\hbar$ 的整倍数. 因此

$$\oint p \cdot \mathrm{d}r = 2n\pi\hbar = nh, \quad n = 1,2,3,\cdots \tag{10}$$

此即量子化条件.

16.2　质量为 m 的粒子在势场 $V(x)$ 作用下作一维运动. 根据 WKB 近似法，准经典束缚态的能级由量子化条件

$$\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m[E-V(x)]}\,\mathrm{d}x = \left(n+\frac{1}{2}\right)\pi\hbar \tag{1}$$

决定，其中 $n=0$、1、2、$\cdots$，x_1 和 x_2 为经典转折点，即势能等于总能之处，

$$V(x_1) = V(x_2) = E \tag{2}$$

试利用量子化条件(1)和 Hellmann 定理，证明：对于任何一个准经典束缚态，动能平均值$\langle T\rangle$和总能 E 有如下关系：

$$\boxed{\langle T\rangle_n = \frac{1}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\partial E_n}{\partial n}} \tag{3}$$

证　仔细观察量子化条件(1)，可知能级 E 是$\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar$ 的函数，即

$$E_n = E\left(\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\right) \tag{4}$$

总能量算符为

$$H = T+V = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)$$

根据 Hellmann 定理，

$$\frac{\partial E_n}{\partial\hbar} = \left\langle\frac{\partial H}{\partial\hbar}\right\rangle_n = \frac{2}{\hbar}\langle T\rangle_n \tag{5}$$

而由式(4)易见

$$\frac{1}{n+\frac{1}{2}}\frac{\partial E_n}{\partial \hbar}=\frac{1}{\hbar}\frac{\partial E_n}{\partial\left(n+\frac{1}{2}\right)}=\frac{1}{\hbar}\frac{\partial E_n}{\partial n}$$

代入式(5),即得式(3).

16.3 质量为 m 的粒子在势场

$$V(x)=\lambda\mid x\mid^{\nu},\quad \lambda,\nu>0$$

中运动,求准经典近似条件下能级 E_n 和量子数 n 的函数关系.

解 上题已经证明

$$\langle T\rangle_n=\frac{1}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\partial E_n}{\partial n} \tag{1}$$

而由位力定理,

$$\langle T\rangle_n=\frac{\nu}{2}\langle V\rangle_n=\frac{\nu}{\nu+2}E_n \tag{2}$$

两式合并,可得

$$\frac{\partial E_n}{\partial n}=\frac{2\nu}{(\nu+2)\left(n+\frac{1}{2}\right)}E_n \tag{3}$$

解之,即得

$$E_n=C(\nu)\left(n+\frac{1}{2}\right)^{2\nu/(2+\nu)},\quad n=0,1,2,\cdots \tag{4}$$

其中 $C(\nu)$ 为积分常数,它应具有能量的量纲.

本题特征能量的量纲构造式应该由 $\hbar$、m、λ 唯一地决定,为

$$E\sim\lambda^{2/(\nu+2)}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{\nu/(\nu+2)} \tag{5}$$

因此,E_n 必可表示成

$$E_n=A(\nu)\left(n+\frac{1}{2}\right)^{2\nu/(\nu+2)}\lambda^{2/(\nu+2)}\left(\frac{\hbar}{2m}\right)^{\nu/(\nu+2)} \tag{6}$$

其中 $A(\nu)$ 为无量纲纯数(ν 的函数).

16.4 质量为 m 的粒子,在势场

$$V(x)=\lambda\mid x\mid^{\nu},\quad \lambda,\nu>0$$

中作一维运动,试根据量子化条件

$$\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m(E-V)}\,\mathrm{d}x=\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi\hbar$$

求准经典近似下的能级公式.

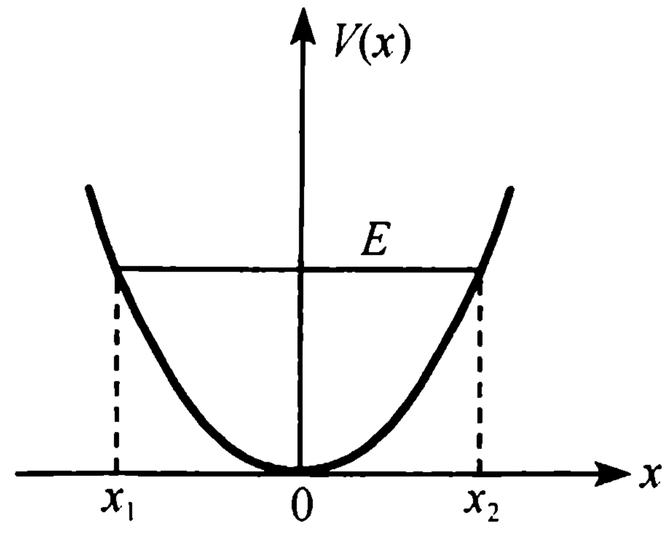


图 16.4

解 经典转折点 x_1、x_2 满足关系

$$x_1=-x_2,\quad x_2=\left(\frac{E}{\lambda}\right)^{1/\nu}>0 \tag{1}$$

量子化条件可以改写成

$$\int_0^{x_2}\sqrt{2m(E-\lambda x^\nu)}\,\mathrm{d}x=\frac{1}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi\hbar,\quad n=0,1,2,\cdots \tag{2}$$

作变换

$$\frac{\lambda}{E}x^\nu=\sin^2\theta \tag{3}$$

利用公式

$$\int_0^{\pi/2}(\sin\theta)^k\,\mathrm{d}\theta=\frac{\sqrt{\pi}\Gamma\left(\frac{k+1}{2}\right)}{2\Gamma\left(1+\frac{k}{2}\right)},\quad k>-1$$

即可求出

$$\int_0^{x_2}\sqrt{1-\frac{\lambda}{E}x^\nu}\,\mathrm{d}x=\frac{2}{\nu}\left(\frac{E}{\lambda}\right)^{1/\nu}\int_0^{\pi/2}(\sin\theta)^{\frac{2}{\nu}-1}\cos^2\theta\mathrm{d}\theta=\frac{\left(\frac{E}{\lambda}\right)^{1/\nu}\sqrt{\pi}\Gamma\left(\frac{1}{\nu}\right)}{2\nu\Gamma\left(\frac{3}{2}+\frac{1}{\nu}\right)} \tag{4}$$

代入式(2),即得能级公式

$$\boxed{E_n=\lambda^{2/(\nu+2)}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{\nu/(\nu+2)}\left[\frac{\sqrt{\pi}\nu\Gamma\left(\frac{3}{2}+\frac{1}{\nu}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{\nu}\right)}\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]^{2\nu/(\nu+2)}} \tag{5}$$

其形式和上题所得结果一致.

当 $\nu=1$,式(5)给出$\left[\text{注意 }\Gamma(1)=1,\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)=\sqrt{\pi}\right]$

$$E_n=\left(\frac{\lambda^2\hbar^2}{2m}\right)^{1/3}\left[\frac{3\pi}{4}\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]^{2/3},\quad n=0,1,2,\cdots \tag{6}$$

当 $\nu=2$,令 $\lambda=m\omega^2/2$,就是一维谐振子,式(5)给出

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\quad n=0,1,2,\cdots \tag{7}$$

恰好和精确解相同.

16.5 试将一维问题的量子化条件推广应用于中心力问题中的 s 态,并就

$$V(r)=\lambda r^{\nu},\quad \lambda,\nu>0 \tag{1}$$

的情形,求准经典条件下 s 态的能级公式.

解 粒子在中心力场中运动时,(H,l^2,l_z)的共同本征函数可以表示成

$$\psi=R(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{1}{r}u(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) \tag{2}$$

$u(r)$满足径向方程

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}u''+\left[E-V(r)-l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u=0 \tag{3}$$

对于 s 态,$l=0$,离心势能等于 0,上式成为

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}u''+[E-V(r)]u=0 \tag{3'}$$

边界条件为

$$u(0)=0,\quad u(\infty)=0 \tag{4}$$

易见 $u(r)$相当于一维问题中的能量本征函数 $\psi(x)$[边界条件为 $\psi(0)=0,\psi(\infty)=0$],确切说,$u(r)$相当于一维问题中 $V(x)$为偶函数时能量本征态中的奇宇称态.后者在准经典近似下的量子化条件为

$$\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2\mu[E-V(x)]}\mathrm{d}x=\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi\hbar\quad n=1,3,5,\cdots \tag{5}$$

x_1、x_2 为经典转折点,$x_1=-x_2<0$.令

$$n=2n'+1,\quad \text{则}\quad n'=0,1,2,\cdots$$

再将 n'重新写成 n,式(5)可以写成

$$\int_0^{x_2}\cdot\sqrt{2\mu[E-V(x)]}\mathrm{d}x=\left(n+\frac{3}{4}\right)\pi\hbar\quad n=0,1,2,\cdots \tag{5'}$$

推广到中心力场的 s 态($l=0$),量子化条件可以写成

$$\boxed{\int_0^{r_c}\sqrt{2\mu[E-V(r)]}\mathrm{d}r=\left(n_r+\frac{3}{4}\right)\pi\hbar\qquad n_r=0,1,2,\cdots} \tag{6}$$

n_r 为 s 态能级编号数,即径向量子数,r_c 为经典转折点,满足

$$V(r_c)=E \tag{7}$$

对于中心力场式(1),式(6)左端和题 16.4 式(2)左端相当,因此,题 16.4 所得

能级公式中将$\frac{1}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)$换成$\left(n_r+\frac{3}{4}\right)$，即得本题所求能级：

$$\boxed{E_n=\lambda^{2/(\nu+2)}\left(\frac{\hbar^2}{2\mu}\right)^{\nu/(\nu+2)}\left[\frac{\sqrt{\pi}2\nu\Gamma\left(\frac{3}{2}+\frac{1}{\nu}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{\nu}\right)}\left(n_r+\frac{3}{4}\right)\right]^{2\nu/(\nu+2)}\quad n_r=0,1,2,\cdots} \tag{8}$$

例如三维各向同性谐振子，

$$\nu=2,\quad \lambda=\frac{1}{2}\mu\omega^2$$

上式给出准经典近似下的 s 态($l=0$)能级为

$$E_n=\left(2n_r+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega,\quad n_r=0,1,2,\cdots \tag{9}$$

能级的精确解为

$$E_{n_r,l}=\left(2n_r+l+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega,\quad n_r,l=0,1,2,\cdots \tag{10}$$

l 为角量子数，n_r 为径向量子数①.

16.6　质量为 μ 的粒子在线性中心势场

$$V(r)=\lambda r,\quad \lambda>0 \tag{1}$$

中运动，求 s 态($l=0$)能级的准经典近似公式，并和精确解作比较.

解　s 态能级的准经典近似见上题的式(8)，$\nu=1$. 结果为

$$E_n=\left(\frac{\hbar^2\lambda^2}{2\mu}\right)^{1/3}\left[\frac{3\pi}{2}\left(n+\frac{3}{4}\right)\right]^{2/3}$$

$$n=0,1,2,\cdots \tag{2}$$

s 态能级的精确解为(参看 9.2 题，注意两题中能量本征方程的相似性.)

$$E_n=\left(\frac{\hbar^2\lambda^2}{2\mu}\right)^{1/3}x_n \tag{3}$$

x_n 为 Airy 函数的零点，满足

$$J_{1/3}\left(\frac{2}{3}x^{3/2}\right)+J_{-1/3}\left(\frac{2}{3}x^{3/2}\right)=0 \tag{4}$$

---

① 本题和以下各题，参看 C. Quigg and J. L. Rosner. Physics Reports, 1997, **56**: 167.

J_ν 为第一类 Bessel 函数. 经数值计算,式(2)和(3)给出的结果极其接近,如下表所示:

n	x_n	$\left[\frac{3\pi}{2}\left(n+\frac{3}{4}\right)\right]^{2/3}$	相对偏差(%)
0	2.33811	2.32025	0.7639
1	4.08795	4.08181	0.1502
2	5.52056	5.51716	0.0616
3	6.78671	6.78445	0.0333
4	7.94413	7.94249	0.0206
5	9.02265	9.02137	0.0142
6	10.04017	10.03914	0.0103
7	11.00852	11.00767	0.0077
8	11.93602	11.93528	0.0062
9	12.82878	12.82814	0.0050

由表可以看出,当量子数 n 增大,能级的准经典近似值与精确值的相对偏差逐渐减小. 这是 Bohr 对应原理的具体表现.

16.7 粒子在中心力场中运动,考虑准经典近似下的 s 态($l=0$). 定义经典径向动量

$$p(r)=[2\mu(E-V(r))]^{1/2},\quad r<r_c \tag{1}$$

r_c 为经典转折点,满足

$$V(r_c)=E,\quad \text{即}\quad p(r_c)=0 \tag{2}$$

由于粒子主要出现在 $r<r_c$ 范围内,如略去波函数中的振荡因子,则在 $r-r+\mathrm{d}r$ 内发现粒子的概率可以近似地取为

$$\frac{\mathrm{d}r}{p(r)}\Big/\int_0^{r_c}\frac{\mathrm{d}r}{p(r)} \tag{3}$$

试证明

$$\boxed{\int_0^{r_c}\frac{\mathrm{d}r}{p(r)}=\frac{\pi\hbar}{\mu}\Big/\frac{\partial E}{\partial n}} \tag{4}$$

证 准经典条件下 s 态的量子化条件(见题 16.5)可以表示为(n_r 简写成 n)

$$\int_0^{r_c}p(r)\mathrm{d}r=(n+\alpha)\pi\hbar,\quad n=0,1,2,\cdots \tag{5}$$

α 和 n 无关. 上式对 n 求导,即得

$$\pi\hbar = p(r_c)\frac{\partial r_c}{\partial n} + \int_0^{r_c}\frac{\partial p(r)}{\partial n}\mathrm{d}r = 0 + \int_0^{r_c}\frac{\partial E}{\partial n}\frac{\partial p(r)}{\partial E}\mathrm{d}r = \mu\frac{\partial E}{\partial n}\int_0^{r_c}\frac{\mathrm{d}r}{p(r)}$$

因此

$$\int_0^{r_c}\frac{\mathrm{d}r}{p(r)} = \frac{\pi\hbar}{\mu}\Big/\frac{\partial E}{\partial n}$$

此即式(4).

如式(4)左端的积分容易计算,则可以利用此式求能级.

16.8　对于中心力场的 s 态($l=0$),粒子距力心的平均距离的准经典近似公式可以表示成

$$\langle r\rangle \approx \int_0^{r_c}\frac{r\mathrm{d}r}{p(r)}\Big/\int_0^{r_c}\frac{\mathrm{d}r}{p(r)} \tag{1}$$

$p(r)$为经典径向动量,r_c 为经典转折点(见上题). 试对类氢离子($V=-Ze^2/r$,即$\nu=-1,\lambda=-Ze^2$)计算$\langle r\rangle$,并和精确值比较.

解　本题 λ、$E<0$,作变换

$$r = \frac{\lambda}{E}\sin^2\xi \tag{2}$$

则 $p(r)$可以表示成

$$p(r) = \sqrt{2\mu(E-V)} = \sqrt{2\mu\mid E\mid\left(\frac{\lambda}{Er}-1\right)} = \sqrt{2\mu\mid E\mid}\cot\xi \tag{3}$$

因此

$$\int_0^{r}\frac{\mathrm{d}r}{p(r)} = \frac{2\lambda}{E\sqrt{2\mu\mid E\mid}}\int_0^{\pi/2}\sin^2\xi\mathrm{d}\xi = \frac{\pi\lambda}{2E\sqrt{2\mu\mid E\mid}} \tag{4}$$

$$\int_0^{r_c}\frac{r\mathrm{d}r}{p(r)} = \frac{2\lambda^2}{E^2\sqrt{2\mu\mid E\mid}}\int_0^{\pi/2}\sin^4\xi\mathrm{d}\xi = \frac{3\pi\lambda^2}{8E^2\sqrt{2\mu\mid E\mid}} \tag{5}$$

代入式(1),即得

$$\langle r\rangle \approx \frac{3\lambda}{4E} = \frac{3Ze^2}{4\mid E\mid} \tag{6}$$

$\langle r\rangle$的精确值已在题 5.9 求出,为

$$\langle r\rangle_{nlm} = \frac{1}{2}[3n^2 - l(l+1)]\frac{a_0}{Z},\quad a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \tag{7}$$

取 $l=0$,并利用能级公式

$$E_n = -\frac{Z^2 e^2}{2n^2 a_0}$$

即得

$$\langle r\rangle_{n00} = \frac{3n^2 a_0}{2Z} = \frac{3Ze^2}{4\,|\,E_n\,|} \tag{8}$$

恰好和式(6)一致. 注意能级的准经典近似也和精确解一致.

16.9 用准经典近似公式

$$\langle r\rangle \approx \int_0^{r_c} \frac{r\mathrm{d}r}{p(r)} \Big/ \int_0^{r_c} \frac{\mathrm{d}r}{p(r)} \tag{1}$$

计算三维各向同性谐振子 s 态各能级的$\langle r\rangle$,并和精确值比较.

解 将谐振子势场写成

$$V(r) = \lambda r^2, \quad \lambda = \frac{1}{2}\mu\omega^2 \tag{2}$$

作变换

$$r = \sqrt{E/\lambda}\sin\xi \tag{3}$$

则

$$p(r) = \sqrt{2\mu[E - V(r)]} = \sqrt{2\mu E}\cos\xi \tag{4}$$

因此

$$\int_0^{r_c} \frac{\mathrm{d}r}{p(r)} = \frac{1}{\sqrt{2\mu\lambda}}\int_0^{\pi/2}\mathrm{d}\xi = \frac{\pi}{2\sqrt{2\mu\lambda}} \tag{5}$$

$$\int_0^{r_c} \frac{r\mathrm{d}r}{p(r)} = \frac{E}{\lambda\sqrt{2\mu E}}\int_0^{\pi/2}\sin\xi\mathrm{d}\xi = \sqrt{\frac{E}{2\mu\lambda^2}} \tag{6}$$

代入式(1),即得 s 态各能级$\langle r\rangle$的准经典近似公式:

$$\langle r\rangle \approx \frac{2}{\pi}\sqrt{\frac{E}{\lambda}} = \frac{4}{\pi}\sqrt{\left(n_r + \frac{3}{4}\right)\frac{\hbar}{\mu\omega}} \tag{7}$$

其中利用了 s 态($l=0$)能级公式

$$E = \left(2n_r + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega, \quad n_r = 0,1,2,\cdots \tag{8}$$

利用题 5.7 得到的公式

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right\rangle = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu}\,|\,\psi(0)\,|^2 \quad (l=0) \tag{9}$$

容易求得 s 态$\langle r\rangle$的精确值为①

$$\langle r\rangle=\frac{2\pi\hbar^2}{\mu^2\omega^2}\mid\psi(0)\mid^2=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\frac{(2n_r+1)!!}{(2n_r)!!}\sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}$$

$$=\frac{4}{\pi}\frac{\Gamma\left(n_r+\frac{3}{2}\right)}{n_r!}\sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}\tag{10}$$

式(7)和(10)的比较如下表所示：

n_r	0	1	2	3	4
$\frac{4}{\pi}\sqrt{n_r+\frac{3}{4}}$	1.1027	1.6843	2.1114	2.4656	2.7750
$\frac{4}{\pi}\frac{\Gamma(n_r+3/2)}{n_r!}$	1.1284	1.6926	2.1157	2.4683	2.7769
相对偏差(%)	2.28	0.49	0.20	0.11	0.068

由表可见，量子数 n_r 越大，准经典近似值与精确值的偏差越小.

16.10　质量为 μ 的粒子在中心势场 $V(r)$中运动，设

$$V(0)=0$$

对于准经典近似下的 s 态，求 $|\psi(0)|^2$ 的近似值.

解　s 态 $|\psi(0)|^2$ 的准确公式为(见题 5.7)

$$\mid\psi(0)\mid^2=\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\left\langle\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right\rangle\tag{1}$$

在准经典近似下，按照 16.7 题的分析，应有

$$\left\langle\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right\rangle\approx\int_0^{r_c}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\frac{\mathrm{d}r}{p(r)}\Big/\int_0^{r_c}\frac{\mathrm{d}r}{p(r)}\tag{2}$$

其中 $p(r)$为 s 态经典径向动量，即

$$p(r)=\sqrt{2\mu[E-V(r)]}\tag{3}$$

因此

$$\int_0^{r_c}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\frac{\mathrm{d}r}{p(r)}=\int_0^{r_c}\frac{\mathrm{d}V}{\sqrt{2\mu[E-V(r)]}}=-\left[\frac{2}{\mu}(E-V)\right]^{1/2}\Big|_{r=0}^{r=r_c}=\sqrt{2\frac{E}{\mu}}\tag{4}$$

计算中利用了

---

① $\psi(0)=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}R(0)$，$R(r)$的函数形式，参见曾谨言. 量子力学. 卷Ⅰ. 北京：科学出版社，1997. §6.4.

$$V(r_c) = E, \quad V(0) = 0$$

在题 16.7 中已经证明

$$\int_0^{r_c} \frac{\mathrm{d}r}{p(r)} = \frac{\pi\hbar}{\mu} \Big/ \frac{\partial E}{\partial n} \tag{5}$$

将式(4)、(5)代入式(2),得到

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right\rangle \approx \frac{\sqrt{2\mu E}}{\pi\hbar} \frac{\partial E}{\partial n} \tag{6}$$

再代入式(1),即得

$$|\psi(0)|^2 \approx \frac{1}{4\pi^2}\left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{E}\,\frac{\partial E}{\partial n} \quad (l=0) \tag{7}$$

各式中 E 即 E_n. 推导过程中用到了条件 $V(0)=0$,故式(6)、(7)只适用于 $r=0$ 不是奇点的势场. 对于 $V=\lambda r^\nu$ 型的势场,相当于 λ、$\nu>0$ 的情形.

对于三维各向同性谐振子,式(6)给出

$$\langle r \rangle = \frac{4}{\pi}\sqrt{\left(n+\frac{3}{4}\right)\frac{\hbar}{\mu\omega}} \tag{8}$$

这正是上题式(7). 由本题式(7)得出的 $|\psi(0)|^2$ 则与精确值基本相符,略有偏差(见上题).

对于线性中心势场 $V=\lambda r$,精确公式(1)给出

$$|\psi(0)|^2 = \frac{\lambda\mu}{2\pi\hbar^2} \tag{9}$$

准经典近似公式(7)恰好给出同样的结果.(能级公式见题 16.6.)

16.11 原子核发生 α 衰变时,α 粒子(电荷 $2e$)受到的作用势可以近似表示为

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r<R \\ \beta/r, & r>R \end{cases}$$

其中 $\beta=2(Z-2)e^2$,Z 是衰变前原子核的原子序数,R 是"核半径". $r<R$ 区域为核力,$r>R$ 区域为 Coulomb 力. 试计算 α 粒子对 Coulomb 势垒的穿透概率,进而求出原子核 α 衰变的半衰期.

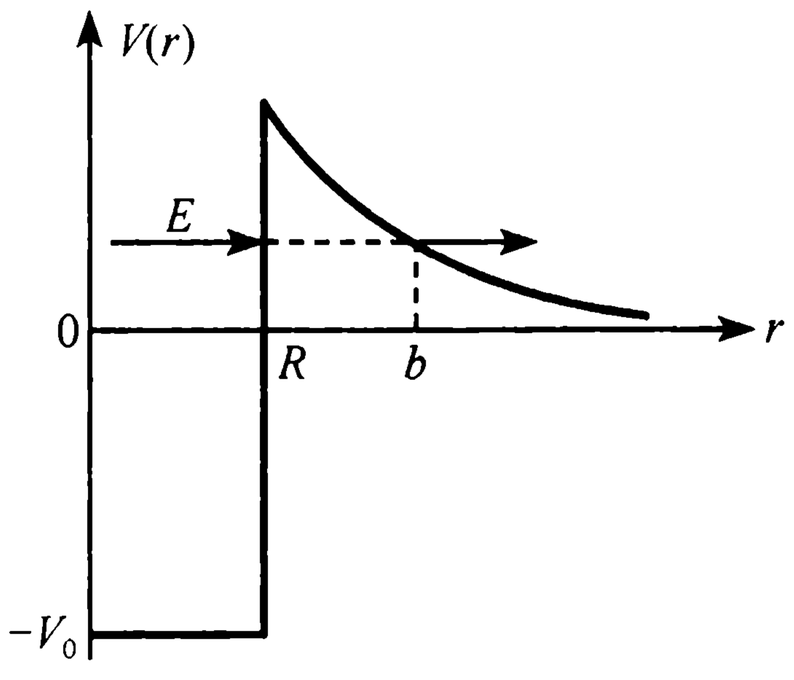


图 16.11

解 α 粒子撞击 Coulomb 势垒时,穿透概率约为

$$D \approx \exp\left[-\frac{2\sqrt{2\mu}}{\hbar}\int_R^b \sqrt{V(r)-E}\mathrm{d}r\right] \tag{1}$$

其中 μ 为 α 粒子质量，b 为经典转折点，满足

$$E = V(b) = \beta/b \tag{2}$$

式(1)中的积分不难求出. 作变换

$$\sin\theta = \sqrt{r/b} \tag{3}$$

则

$$\begin{aligned}\int_R^b \sqrt{V(r)-E}\mathrm{d}r &= \int_R^b \sqrt{\frac{\beta}{r}-E}\mathrm{d}r = \sqrt{\beta}\int_R^b \sqrt{\frac{1}{r}-\frac{1}{b}}\mathrm{d}r \\ &= \sqrt{b\beta}\int_{\theta_0}^{\pi/2}(1+\cos 2\theta)\mathrm{d}\theta \\ &= \sqrt{b\beta}\left[\left(\frac{\pi}{2}-\theta_0\right)-\sin\theta_0\cos\theta_0\right]\end{aligned}$$

其中

$$\sin\theta_0 = \sqrt{R/b}, \quad \cos\theta_0 = \sqrt{1-R/b}$$

$$\frac{\pi}{2}-\theta_0 = \arccos\sqrt{R/b}, \quad R/b = RE/\beta$$

因此穿透概率为

$$D \approx \exp\left[-\frac{2\beta}{\hbar}\sqrt{\frac{2\mu}{E}}\left(\arccos\sqrt{\frac{RE}{\beta}}-\sqrt{\frac{RE}{\beta}\left(1-\frac{RE}{\beta}\right)}\right)\right] \tag{4}$$

其中 $\beta=2(Z-2)e^2$，E 为 α 粒子逸出核外时的动能，即实验室中测得的 α 粒子动能. “核半径”R 可以按照经验公式

$$R \approx A^{1/3}\times 1.4\mathrm{fm} \quad (1\mathrm{fm}=10^{-13}\mathrm{cm}) \tag{5}$$

计算，A 为核的质量数(核子总数).

设 α 粒子在核内($r<R$)的速度为 v，则单位时间内撞击 Coulomb 势垒的次数为 $\nu\sim\frac{v}{2R}$，因此

$$\text{衰变常数}\ \lambda = \nu D \approx \frac{v}{2R}D \tag{6}$$

$$\text{半衰期}\ T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda} = \frac{0.693}{\lambda} \tag{7}$$

原子核中核子的平均动能约为 20MeV，相当于 $v\sim 0.2c$(c 为光速)，α 粒子的速度 v 大致也是这个数量级.

例如$^{238}U(Z=92)$核放射 $E=4.27\text{MeV}$ 的 α 粒子,由式(4)～(7)算出以下结果:

$$R\approx 8.7\text{fm}$$

$$\arccos\sqrt{\frac{RE}{\beta}}-\sqrt{\frac{RE}{\beta}\left(1-\frac{RE}{\beta}\right)}=0.833$$

$$\frac{2\beta}{\hbar}\sqrt{\frac{2\mu}{E}}=4(Z-2)\frac{e^2}{\hbar c}\sqrt{\frac{2\mu c^2}{E}}=109.8$$

$$D\approx e^{-91.5}=1.9\times 10^{-40}$$

$$\lambda\approx\frac{v}{2R}D\approx\frac{c}{10R}D\approx 6.5\times 10^{-19}/\text{s}$$

$$T_{1/2}=\frac{0.693}{\lambda}\approx 1.1\times 10^{18}\text{s}\approx 3.4\times 10^{10}\text{ 年}$$

半衰期 $T_{1/2}$的实验值为 4.47×10^9 年.理论值和实验值基本符合.

又如$^{222}Rn(Z=86)$核放射 $E=5.58\text{MeV}$ 的 α 粒子,半衰期 $T_{1/2}$(实验)为 3.824 天,而由式(4)～(7)算出 $T_{1/2}\approx$17.3 天,二者大致相符.

第十七章　二次量子化

17.1　考虑一个玻色子体系，其单粒子态记为 α、β、…，各态中粒子数记为 n_α，n_β，…($n_\alpha, n_\beta = 0,1,2,\cdots$)，粒子数表象中归一化的本征态记为 $|n_\alpha \cdots\rangle$. 以 a_α^+ 和 a_α 表示 α 态的产生和湮没算符(即粒子数 n_α 的升、降算符)，a_α 和 a_α^+ 满足对易式

$$[a_\alpha, a_\alpha^+] \equiv a_0 a_\alpha^+ - a_\alpha^+ a_\alpha = 1 \tag{1}$$

(a) 证明

$$\boxed{a_\alpha^+ \mid n_\alpha\rangle = \sqrt{n_\alpha + 1} \mid n_\alpha + 1\rangle} \tag{2}$$

$$\boxed{a_\alpha \mid n_\alpha\rangle = \sqrt{n_\alpha} \mid n_\alpha - 1\rangle} \tag{3}$$

(b) 令 $\hat{n}_\alpha = a_\alpha^+ a_\alpha$，证明 $\hat{n}_\alpha |n_\alpha\rangle = n_\alpha |n_\alpha\rangle$.

(c) 证明

$$\boxed{|n_\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_\alpha!}} (a_\alpha^+)^{n_\alpha} |0\rangle. \quad n_\alpha = 0,1,2,\cdots} \tag{4}$$

证　为了方便，下标 α 略去. 由产生、湮没算符的物理意义，可令

$$a^+ \mid n\rangle = \nu(n) \mid n+1\rangle \tag{5a}$$

$$a \mid n\rangle = \lambda(n) \mid n-1\rangle \tag{5b}$$

$\lambda(n)$和 $\nu(n)$为粒子数 n(即 n_α)的函数，待定. 适当选择各 $|n\rangle$($n=0,1,2\cdots$)的相因子，总可以使 $\lambda(n)$、$\nu(n)$为非负实数. 以下求 $\lambda(n)$，$\nu(n)$. 首先，由于粒子数不能取负值，应有

$$a \mid 0\rangle = 0 \tag{6}$$

因此

$$\lambda(0) = 0 \tag{7}$$

其次，将基本对易式(1)在“真空态”$|0\rangle$下求平均值，可得

$$\begin{aligned}\langle 0 \mid [a, a^+] \mid 0\rangle &= \langle 0 \mid aa^+ \mid 0\rangle - \langle 0 \mid a^+ a \mid 0\rangle \\ &= \langle 0 \mid aa^+ \mid 0\rangle = 1\end{aligned}$$

而由式(5a)则有

$$\begin{aligned}\langle 0 \mid aa^+ \mid 0\rangle &= |\, a^+ \mid 0\rangle \,|^2 = [\nu(0)]^2 \langle 1 \mid 1\rangle \\ &= [\nu(0)]^2\end{aligned}$$

因此

$$[\nu(0)]^2 = 1, \text{即}\ \nu(0) = 1 \tag{8}$$

再来计算$|\ n\rangle$态下aa^+和a^+a的平均值. 由式(5a)可得

$$\begin{aligned}\langle n\ |\ aa^+\ |\ n\rangle &= |\ a^+\ |\ n\rangle\ |^2 \\ &= [\nu(n)]^2\langle n+1\ |\ n+1\rangle = [\nu(n)]^2\end{aligned} \tag{9}$$

另一方面,交替利用式(5a)、(5b)则得

$$\begin{aligned}\langle n\ |\ aa^+\ |\ n\rangle &= \langle n\ |\ a\nu(n)\ |\ n+1\rangle \\ &= \nu(n)\lambda(n+1)\langle n\ |\ n\rangle = \nu(n)\lambda(n+1)\end{aligned}$$

所以

$$\lambda(n+1) = \nu(n) \tag{10}$$

类似地,可得

$$\begin{aligned}\langle n\ |\ a^+a\ |\ n\rangle &= |\ \lambda(n)\ |\ n-1\rangle\ |^2 \\ &= [\lambda(n)]^2 = [\nu(n-1)]^2\end{aligned} \tag{11}$$

式(9) 减式(11),并利用基本对易式(1),即得

$$[\nu(n)]^2 - [\nu(n-1)]^2 = 1 \tag{12}$$

上式中逐次令$n=1,2,3,\cdots$,并利用式(8),即得

$$[\nu(n)]^2 = n+1, \quad \nu(n) = \sqrt{n+1} \tag{13}$$

再利用式(10),即得

$$\lambda(n) = \sqrt{n} \tag{14}$$

至此,已经证明

$$a^+\ |\ n\rangle = \sqrt{n+1}\ |\ n+1\rangle \tag{15}$$

$$a\ |\ n\rangle = \sqrt{n}\ |\ n-1\rangle \tag{16}$$

这就是式(2)和式(3). 由此立即可得

$$\boxed{\hat{n}\ |\ n\rangle = a^+a\ |\ n\rangle = n\ |\ n\rangle} \tag{17}$$

亦即$\hat{n}=a^+a$为粒子数算符.

重复利用式(15),易得

$$\begin{aligned}(a^+)^n\ |\ 0\rangle &= (a^+)^{n-1}\ |\ 1\rangle = \sqrt{2}(a^+)^{n-2}\ |\ 2\rangle \\ &= \cdots = \sqrt{2}\cdots\sqrt{n-1}a^+\ |\ n-1\rangle \\ &= \sqrt{n!}\ |\ n\rangle\end{aligned}$$

所以

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n |0\rangle, \quad n = 0,1,2,\cdots \tag{18}$$

此即式(4).

17.2　同上题,计算$[\hat{n},(a^+)^k]$和$[\hat{n},a^k]$,$k=1,2,3,\cdots$

解　利用基本对易式$[a,a^+]=1$,易得

$$[\hat{n},a^+] = [a^+ a,a^+] = a^+ [a,a^+] = a^+ \tag{1}$$

$$[\hat{n},(a^+)^2] = [\hat{n},a^+]a^+ + a^+ [\hat{n},a^+] = 2(a^+)^2 \tag{2}$$

依次类推,即得

$$\begin{aligned}[\hat{n},(a^+)^k] &= (a^+)^{k-1}[\hat{n},a^+] + [\hat{n},(a^+)^{k-1}]a^+ \\ &= (a^+)^k + [\hat{n},(a^+)^{k-1}]a^+ \\ &= (a^+)^k + \{(a^+)^{k-1} + [\hat{n},(a^+)^{k-2}]a^+\}a^+ \\ &= 2(a^+)^k + [\hat{n},(a^+)^{k-2}](a^+)^2 \\ &= \cdots = k(a^+)^k, \quad k = 1,2,\cdots \end{aligned} \tag{3}$$

上式取共轭,即得

$$ka^k = [a^k,\hat{n}] = -[\hat{n},a^k]$$

亦即

$$[\hat{n},a^k] = -ka^k, \quad k = 1,2,\cdots \tag{4}$$

结论:

$$\boxed{[\hat{n},(a^+)^k] = k(a^+)^k, \quad [\hat{n},a^k] = -ka^k \quad k = 1,2,\cdots}$$

17.3　设有两个独立的谐振子(即两类声子)组成一个体系,以n_1、n_2分别表示二者的量子数(声子数),以a_1^+、a_1、a_2^+、a_2表示量子数升、降算符(即两类声子的产生、湮没算符),$\hat{n}_1 = a_1^+ a_1$和$\hat{n}_2 = a_2^+ a_2$表示粒子数算符.粒子数表象中的归一化本征态记为$|n_1 n_2\rangle$.令

$$a = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, \quad a^+ = (a_1^+ a_2^+)$$

$$J = \frac{1}{2}a^+ \sigma a \quad (\sigma \text{ 为 Pauli 矩阵})$$

即令

$$J_x=\frac{1}{2}(a_1^+a_2^+)\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{bmatrix}a_1\\ a_2\end{bmatrix}=\frac{1}{2}(a_1^+a_2+a_2^+a_1)$$

$$J_y=\frac{1}{2}(a_1^+a_2^+)\begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{pmatrix}\begin{bmatrix}a_1\\ a_2\end{bmatrix}=\frac{1}{2\mathrm{i}}(a_1^+a_2-a_2^+a_1) \tag{1}$$

$$J_z=\frac{1}{2}(a_1^+a_2^+)\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{bmatrix}a_1\\ a_2\end{bmatrix}=\frac{1}{2}(a_1^+a_1-a_2^+a_2)=\frac{1}{2}(\hat{n}_1-\hat{n}_2)$$

再令

$$\boxed{\begin{aligned}J_+&=J_x+\mathrm{i}J_y=a_1^+a_2\\ J_-&=J_x-\mathrm{i}J_y=a_2^+a_1=(J_+)^+\end{aligned}} \tag{2}$$

试证明这样定义的算符满足角动量算符的全部代数性质,并求出 J^2、J_z 的本征值和共同本征态①.

解 容易看出 J_x、J_y、J_z 均为厄米算符. 利用 Bose 子算符的基本对易式

$$[a_\alpha,a_\beta]=[a_\alpha^+,a_\beta^+]=0,\quad [a_\beta,a_\beta^+]=\delta_{\alpha\beta}$$

$$[\hat{n}_\alpha,a_\beta]=-a_\alpha\delta_{\alpha\beta},\qquad [\hat{n}_\alpha,a_\beta^+]=a_\alpha^+\delta_{\alpha\beta}$$

即得

$$[J_z,J_+]=\frac{1}{2}[\hat{n}_1,a_1^+a_2]-\frac{1}{2}[\hat{n}_2,a_1^+a_2]$$

$$=a_1^+a_2=J_+ \tag{3}$$

上式取共轭,得到

$$[J_-,J_z]=-[J_z,J_-]=J_- \tag{4}$$

将式(3)、(4)相加、相减,并利用

$$J_x=\frac{1}{2}(J_++J_-),\quad J_y=\frac{1}{2\mathrm{i}}[J_+-J_-]$$

即得

$$[J_y,J_z]=\mathrm{i}J_x,\quad [J_z,J_x]=\mathrm{i}J_y \tag{5a}$$

再直接计算 J_+、J_- 的对易式,得到

$$[J_+,J_-]=[a_1^+a_2,a_2^+a_1]$$

$$=a_1^+[a_2,a_2^+]a_1+a_2^+[a_1^+,a_1]a_2$$

$$=a_1^+a_1-a_2^+a_2=2J_z \tag{6}$$

---

① 这种理论形式,称为角动量的 Schwinger 表象. 参阅 J. Schwinger. Quantum Theory of Angular Momentum. New York: Academic Press, 1965.

由于

$$[J_+, J_-] = [J_x + \mathrm{i}J_y, J_x - \mathrm{i}J_y] = -2\mathrm{i}[J_x, J_y]$$

所以式(6)亦即

$$[J_x, J_y] = \mathrm{i}J_z \tag{5b}$$

式(5a)和(5b)就是角动量算符 $\boldsymbol{J}$ 的基本对易式. 由此易证

$$[\boldsymbol{J}^2, \boldsymbol{J}] = 0 \tag{7}$$

式(3)至(7)包含了角动量的全部代数性质.

$\boldsymbol{J}^2$ 的具体表示式为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{J}^2 &= J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 = J_+ J_- + J_z^2 - J_z \\ &= a_1^+ a_2 a_2^+ a_1 + \frac{1}{4}(\hat{n}_1 - \hat{n}_2)^2 - \frac{1}{2}(\hat{n}_1 - \hat{n}_2)\end{aligned}$$

其中

$$a_1^+ a_2 a_2^+ a_1 = a_1^+ (\hat{n}_2 + 1) a_1 = \hat{n}_1 \hat{n}_2 + \hat{n}_1$$

因此

$$\boxed{\boldsymbol{J}^2 = \frac{\hat{n}}{2}\left(\frac{\hat{n}}{2} + 1\right)} \tag{8}$$

$$\boxed{\hat{n} = \hat{n}_1 + \hat{n}_2 = a_1^+ a_1 + a_2^+ a_2} \tag{9}$$

$\hat{n}$ 为总粒子数算符.

由于 $\hat{n}_1$、$\hat{n}_2$ 可对易，显然$(\boldsymbol{J}^2, J_z)$的共同本征态就是粒子数表象中的基矢 $|n_1 n_2\rangle$，本征值分别为

$$\boxed{\boldsymbol{J}^2 = \frac{1}{2}(n_1 + n_2)\left[\frac{1}{2}(n_1 + n_2) + 1\right] = j(j+1)} \tag{10}$$

$$\boxed{J_z = \frac{1}{2}(n_1 - n_2) = m} \tag{11}$$

n_1、n_2、n 和 j 的取值为

$$\begin{aligned}&n_1, n_2 = 0, 1, 2, \cdots \\ &n = n_1 + n_2 = 0, 1, 2, \cdots \\ &j = \frac{n}{2} = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \cdots\end{aligned} \tag{12}$$

给定 j 值后，(n_1, n_2)共有$(n+1)$种可能组合，所以

$$m = \frac{1}{2}(n_1 - n_2)$$

共有$(n+1)=(2j+1)$种可能取值.

按照角动量理论的习惯,$(\boldsymbol{J}^2, J_z)$的共同本征态记为$|jm\rangle$,在本题中就是$|n_1 n_2\rangle$.利用公式

$$\begin{aligned} a_\alpha |\, n_\alpha\rangle &= \sqrt{n_\alpha}\,|\, n_\alpha - 1\rangle, \\ a_\alpha^+ |\, n_\alpha\rangle &= \sqrt{n_\alpha + 1}\,|\, n_\alpha + 1\rangle, \end{aligned} \qquad (\alpha = 1,2)$$

容易求得

$$\begin{aligned} J_+ |\, jm\rangle &= a_1^+ a_2 \,|\, n_1 n_2\rangle \\ &= \sqrt{(n_1+1)n_2}\,|\, n_1+1, n_2-1\rangle \\ &= \sqrt{(j+m+1)(j-m)}\,|\, j, m+1\rangle \qquad (13a) \\ J_- |\, jm\rangle &= a_2^+ a_1 \,|\, n_1 n_2\rangle \\ &= \sqrt{n_1(n_2+1)}\,|\, n_1-1, n_2+1\rangle \\ &= \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\,|\, j, m-1\rangle \qquad (13b) \end{aligned}$$

这些结果和角动量理论完全一致.注意$\boldsymbol{J}$的定义(1)中,任何一项均为一个产生算符和一个湮没算符的乘积,它们作用于$|n_1 n_2\rangle$的结果,总粒子数n均不变,因此j不变.

17.4 同上题,试利用产生、湮没算符a_1^+、a_1、a_2^+、a_2构造出量子数j的升、降算符.

解 用产生、湮没算符作用于$|n_1 n_2\rangle$态[即$\boldsymbol{J}^2, J_z$的共同本征态$|jm\rangle$,$j=\frac{1}{2}(n_1+n_2)$,$m=\frac{1}{2}(n_1-n_2)$],其结果为

a_1——使n_1减1,n_2不变,即使j减1/2,m减1/2

a_2——使n_2减1,n_1不变,即使j减1/2,m增1/2

a_1^+——使n_1增1,n_2不变,即使j增1/2,m增1/2

a_2^+——使n_2增1,n_1不变,即使j增1/2,m减1/2

因此,如令

$$K_+ = a_1^+ a_2^+, \quad K_- = (K_+)^+ = a_1 a_2, \qquad (1)$$

则K_+使j增1,K_-使j减1.二者均对m无影响.计算结果如下:

$$\begin{aligned} K_+ \,|\, jm\rangle &= a_1^+ a_2^+ \,|\, n_1 n_2\rangle \\ &= \sqrt{(n_1+1)(n_2+1)}\,|\, n_1+1, n_2+1\rangle \\ &= \sqrt{(j+m+1)(j-m+1)}\,|\, j+1, m\rangle \qquad (2) \end{aligned}$$

$$K_-\,|jm\rangle = a_1 a_2\,|n_1 n_2\rangle$$
$$= \sqrt{n_1 n_2}\,|n_1-1, n_2-1\rangle$$
$$= \sqrt{(j+m)(j-m)}\,|j-1, m\rangle \tag{3}$$

注意，$K_\pm$ 独立于 $\boldsymbol{J}$，不能表示成 $\boldsymbol{J}$ 的函数，$\boldsymbol{J}$、$J_\pm$ | $\boldsymbol{J}^2$ 均与总粒子数算符 $\hat{n}=\hat{n}_1+\hat{n}_2$，对易，但 $K_\pm$ 与 $\hat{n}$ 不对易.

17.5　以 a^+ 和 a 表示 Fermi 子体系的某个单粒子态的产生和湮没算符，满足基本对易式

$$\boxed{[a, a^+]_+ \equiv aa^+ + a^+ a = 1} \tag{1}$$
$$\boxed{a^2 = 0, \quad (a^+)^2 = 0} \tag{2}$$

以 $\hat{n}=a^+ a$ 表示该单粒子态上的粒子数算符，求 $\hat{n}$ 的本征值，并计算对易式$[\hat{n}, a^+]$、$[\hat{n}, a]$.

解　利用基本对易式(1)、(2)，易得

$$\hat{n}^2 = a^+ aa^+ a = a^+ a(1-aa^+)$$
$$= a^+ a - a^- a^2 a^+ = a^+ a = \hat{n}$$

亦即

$$\hat{n}(\hat{n}-1) = 0 \tag{3}$$

毫无疑问，这是算符 $\hat{n}$ 所能满足的最简单的代数方程，所以 $\hat{n}$ 的本征值为(参看题 4.24)

$$n = 1, 0 \tag{4}$$

这结果表明，Fermi 子体系的任何一种单粒子态最多只能容纳 1 个粒子，这正是 Panli 原理.

利用对易式(1)、(2)，容易求得

$$[\hat{n}, a^+] = \hat{n}a^+ - a^+\hat{n} = a^+ aa^+ - a^+ a^+ a$$
$$= a^+(1-a^+ a) = a^+ - a^+ a^+ a = a^+ \tag{5}$$

上式取共轭，可得

$$[a, \hat{n}] = -[\hat{n}, a] = a \tag{6}$$

Bose 子也有类似的对易式(见题 17.2).

17.6　某 Fermi 子体系的每个单粒子能级都是二重简并的，(例如在轴对称势场中运动的粒子，就是如此.)属于单粒子能级 ε_ν 的两个简并态用 ν、$\bar{\nu}$ 标记，相应的

产生、湮没算符记为 a_ν^+、a_ν、$a_{\bar{\nu}}^+$、$a_{\bar{\nu}}$. 定义

$$S_\nu^+ = a_\nu^+ a_{\bar{\nu}}^+, \quad S_\nu = (S_\nu^+)^+ = a_{\bar{\nu}} a_\nu \tag{1}$$

$$\hat{n}_\nu = a_\nu^+ a_\nu + a_{\bar{\nu}}^+ a_{\bar{\nu}} \tag{2}$$

$S_\nu^+(S_\nu)$是能级 ε_ν 上产生(湮没)一对粒子的算符,$\hat{n}_\nu$ 是能级 ε_ν 上的粒子数算符.

证明

$$[S_\mu, S_\nu^+] = (1 - \hat{n}_\nu)\delta_{\mu\nu} \tag{3}$$

$$[\hat{n}_\mu, S_\nu^+] = 2S_\nu^+ \delta_{\mu\nu} \tag{4a}$$

$$[\hat{n}_\mu, S_\nu] = -2S_\nu \delta_{\mu\nu} \tag{4b}$$

证 由 Fermi 子算符基本对易式

$$\begin{aligned} [a_\mu, a_\nu^+]_+ &= \delta_{\mu\nu} \\ [a_\mu, a_\nu]_+ &= [a_\mu^+, a_\nu^+]_+ = 0 \end{aligned} \tag{5}$$

易知,任何两个属于不同单粒子态($\mu \neq \nu$)的产生,湮没算符是反对易的. 因此,$\mu \neq \nu$,S_μ 与 S_ν^+ 可对易,式(3)成立. 同样的结论也适用于式(4).

以下讨论 $\mu = \nu$ 的情形. 利用恒等式

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

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

并利用式(5),可得

$$\begin{aligned} [S_\nu, S_\nu^+] &= [a_{\bar{\nu}} a_\nu, a_\nu^+ a_{\bar{\nu}}^+] \\ &= [a_{\bar{\nu}} a_\nu, a_\nu^+] a_{\bar{\nu}}^+ + a_\nu^+ [a_{\bar{\nu}} a_\nu, a_{\bar{\nu}}^+] \\ &= a_{\bar{\nu}} [a_\nu, a_\nu^+]_+ a_{\bar{\nu}}^+ - a_\nu^+ [a_{\bar{\nu}}, a_{\bar{\nu}}^+]_+ a_\nu \\ &= a_{\bar{\nu}} a_{\bar{\nu}}^+ - a_\nu^+ a_\nu \\ &= 1 - a_{\bar{\nu}}^+ a_{\bar{\nu}} - a_\nu^+ a_\nu = 1 - \hat{n}_\nu \end{aligned}$$

此即式(3). 类似地,

$$\begin{aligned} [\hat{n}_\nu, S_\nu^+] &= [a_\nu^+ a_\nu, a_\nu^+ a_{\bar{\nu}}^+] + [a_{\bar{\nu}}^+ a_{\bar{\nu}}, a_\nu^+ a_{\bar{\nu}}^+] \\ &= [a_\nu^+ a_\nu, a_\nu^+] a_\nu^+ + a_\nu^+ [a_\nu^+ a_{\bar{\nu}}, a_{\bar{\nu}}^+] \\ &= a_\nu^+ [a_\nu, a_\nu^+]_+ a_{\bar{\nu}}^+ + a_\nu^+ a_{\bar{\nu}}^+ [a_{\bar{\nu}}, a_{\bar{\nu}}^+]_+ \\ &= 2a_\nu^+ a_{\bar{\nu}}^+ = 2S_\nu^+ \end{aligned}$$

此即式(4a). 上式取共轭,即得

$$[S_\nu, \hat{n}_\nu] = 2S_\nu \quad \text{即} \quad [\hat{n}_\nu, S_\nu] = -2S_\nu$$

此即式(4b).

17.7 同上题,设体系由两个 Fermi 子组成,粒子间有“对力”(pairing force)

作用，体系 Hamilton 量表示成

$$H=\sum_{\nu}\varepsilon_{\nu}(a_{\nu}^{+}a_{\nu}+a_{\bar{\nu}}^{+}a_{\bar{\nu}})-G\sum_{\mu,\nu}a_{\mu}^{+}a_{\bar{\mu}}^{+}a_{\bar{\nu}}a_{\nu}$$
$$=\sum_{\nu}\varepsilon_{\nu}\hat{n}_{\nu}-G\sum_{\mu,\nu}S_{\mu}^{+}S_{\nu} \tag{1}$$

求体系的能级公式.

解　分两种情况讨论.

(a) 两个粒子“不配对”，分别处于不同能级 ε_{μ}、$\varepsilon_{\nu}(\mu\neq\nu)$. 体系状态的一般形式为

$$|\mu,\nu\rangle=a_{\mu}^{+}a_{\nu}^{+}|0\rangle,\quad \mu\neq\nu \tag{2}$$

$|0\rangle$表示真空态(规定其能量为 0). 这种情况下，显然有

$$a_{\mu}^{+}a_{\bar{\mu}}^{+}a_{\bar{\nu}}a_{\nu}|\mu,\nu\rangle=0$$

因此“对力”不起作用，体系能级为

$$E=\varepsilon_{\mu}+\varepsilon_{\nu}$$

(b) 两个粒子“配对”. 例如

$$|\nu,\bar{\nu}\rangle=a_{\nu}^{+}a_{\bar{\nu}}^{+}|0\rangle \tag{3}$$

则

$$a_{\mu}^{+}a_{\bar{\mu}}^{+}a_{\bar{\nu}}a_{\nu}|\nu,\bar{\nu}\rangle=|\mu,\bar{\mu}\rangle \tag{4}$$

H 的本征态的一般形式为

$$\sum_{\lambda}C_{\lambda}|\lambda,\bar{\lambda}\rangle=\sum_{\lambda}C_{\lambda}a_{\lambda}^{+}a_{\bar{\lambda}}^{+}|0\rangle\equiv A^{+}|0\rangle \tag{5}$$

满足能量本征方程

$$HA^{+}|0\rangle=EA^{+}|0\rangle \tag{6}$$

式(5)中 C_{λ} 为待定系统(即粒子数表象中的波函数). 利用上题证明的公式，可得

$$[H,A^{+}]=\sum_{\mu,\lambda}\varepsilon_{\nu}C_{\lambda}[\hat{n}_{\nu},S_{\lambda}^{+}]-G\sum_{\mu,\nu,\lambda}C_{\lambda}[S_{\mu}^{+}S_{\nu},S_{\lambda}^{+}]$$
$$=2\sum_{\nu}\varepsilon_{\nu}C_{\nu}S_{\nu}^{+}-G\sum_{\mu,\nu}C_{\nu}S_{\mu}^{+}(1-\hat{n}_{\nu}) \tag{7}$$

由于 $H|0\rangle=0$，所以

$$H\sum_{\lambda}C_{\lambda}|\lambda,\bar{\lambda}\rangle=HA^{+}|0\rangle=[H,A^{+}]|0\rangle$$
$$=2\sum_{\nu}\varepsilon_{\nu}C_{\nu}S_{\nu}^{+}|0\rangle-G\sum_{\mu,\nu}C_{\nu}S_{\mu}^{+}(1-\hat{n}_{\nu})|0\rangle$$

$$= 2\sum_{\nu}\varepsilon_{\nu}C_{\nu} \mid \nu,\bar{\nu}\rangle - G\sum_{\mu,\nu}C_{\nu} \mid \mu,\bar{\mu}\rangle$$

$$= E\sum_{\nu}C_{\nu} \mid \nu,\bar{\nu}\rangle \tag{8}$$

以$\langle\lambda,\bar{\lambda}|$左乘上式(取内积),得到

$$(E-2\varepsilon_{\lambda})C_{\lambda}+G\sum_{\nu}C_{\nu}=0, \quad \lambda=1,2,\cdots \tag{9}$$

也可以写成

$$\sum_{\nu}[G+(E-2\varepsilon_{\nu})\delta_{\nu\lambda}]C_{\nu}=0, \quad \lambda=1,2,\cdots \tag{9'}$$

此即确定能级和波函数(C_{ν})的线性方程组. 上式存在非零解(C_{ν} 不全为 0)的条件为

$$\det \mid G+(E-2\varepsilon_{\nu})\delta_{\nu\lambda} \mid =0 \tag{10}$$

此即能级方程. 为方便起见,令

$$x_{\nu}=\frac{1}{G}(E-2\varepsilon_{\nu}) \tag{11}$$

式(10)可以化成

$$\det \mid 1+x_{\nu}\delta_{\nu\lambda} \mid =0 \tag{10'}$$

可以证明(见本题末附注)式(10′)可以化简成

$$\sum_{\nu}\frac{1}{x_{\nu}}=-1 \tag{12}$$

亦即

$$\boxed{\sum_{\nu}\frac{1}{E-2\varepsilon_{\nu}}=-\frac{1}{G}} \tag{12'}$$

体系能级可由此式解出(一般要用数值解法或近似解法),记为 $E_i, i=1,2,3,\cdots$. 将每个 E_i 代入式(9),就可以求出各个 C_{λ} 为

$$C_{i\lambda}=-G\sum_{\nu}C_{\nu}/(E_i-2\varepsilon_{\lambda})=C/(E_i-2\varepsilon_{\lambda})$$

$$\lambda,i=1,2,3,\cdots$$

C 为归一化常数. 利用归一化条件

$$\sum_{\lambda} \mid C_{i\lambda} \mid^2=1, \quad i=1,2,3,\cdots$$

即可求出

$$C_{i\lambda}=\frac{1}{E_i-2\varepsilon_{\lambda}}\left[\sum_{\nu}(E_i-2\varepsilon_{\nu})^{-2}\right]^{-1/2} \tag{13}$$

附注　式(12)的证明如下. 将式(10′)明显写出，即

$$\begin{vmatrix} 1+x_1 & 1 & 1 & \cdots \\ 1 & 1+x_2 & 1 & \cdots \\ 1 & 1 & 1+x_3 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} = 0 \tag{10′}$$

令 $\Delta(n)$表示 n 阶行列式，$\Delta(n-1)$表示其$(n-1)$阶子行列式，即

$$\Delta(n) = \begin{vmatrix} 1+x_1 & 1 & 1\cdots 1 \\ 1 & 1+x_2 & 1\cdots 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots\ \ \vdots \\ 1 & 1 & 1\cdots 1+x_n \end{vmatrix}$$

$$\Delta(n-1) = \begin{vmatrix} 1+x_2 & 1\cdots 1 \\ 1 & \ddots\ \ \vdots \\ \vdots & \\ 1 & \cdots\cdots 1+x_n \end{vmatrix}$$

$\Delta(n)$中第一行减第二行，变成

$$\Delta(n) = \begin{vmatrix} x_1 & -x_2 & 0 & 0\cdots 0 \\ 1 & 1+x_2 & 1 & 1\cdots 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & \cdots & 1+x_n \end{vmatrix}$$

$$= x_1\Delta(n-1) + x_2 \begin{vmatrix} 1 & 1 & \cdots 1 \\ 1 & 1+x_3 \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots\ \ \vdots \\ 1 & 1 & \cdots\ \ 1+x_n \end{vmatrix}$$

$$= x_1\Delta(n-1) + x_2 \begin{vmatrix} 0 & -x_3 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 1+x_3 & 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \vdots \\ 1 & 1 & \cdots & & 1+x_n \end{vmatrix}$$

$$= x_1\Delta(n-1) + x_2x_3 \begin{vmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 1+x_4 \cdots & & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & \cdots & 1+x_n \end{vmatrix} = \cdots$$

$$= x_1\Delta(n-1) + x_2x_3\cdots x_n$$

亦即

$$\frac{\Delta(n)}{x_1x_2\cdots x_n}=\frac{\Delta(n-1)}{x_2x_3\cdots x_n}+\frac{1}{x_1}$$

反复利用此式,可得

$$\begin{aligned}\frac{\Delta(n)}{x_1x_2\cdots x_n}&=\frac{\Delta(n-1)}{x_2x_3\cdots x_n}+\frac{1}{x_1}\\&=\frac{\Delta(n-2)}{x_3x_4\cdots x_n}+\frac{1}{x_1}+\frac{1}{x_2}\\&=\cdots=\frac{\Delta(2)}{x_{n-1}x_n}+\frac{1}{x_1}+\frac{1}{x_2}+\cdots+\frac{1}{x_{n-2}}\end{aligned}$$

其中

$$\Delta(2)=\begin{vmatrix}1+x_{n-1} & 1\\ 1 & 1+x_n\end{vmatrix}=x_{n-1}+x_n+x_{n-1}x_n$$

所以

$$\frac{\Delta(n)}{x_1x_2\cdots x_n}=1+\frac{1}{x_1}+\frac{1}{x_2}+\cdots+\frac{1}{x_n}$$

令 n 包括全部能级编号,并按照式(10′)令 $\Delta(n)\to 0$,即得

$$1+\sum_\nu\frac{1}{x_\nu}=0$$

此即式(12).

17.8 设 Fermi 子体系在中心力场中运动,单粒子能级与粒子的总角动量有关,记为 ε_j,其简并度为 $(2j+1)$,相应于单粒子态,$|jm\rangle=a_{jm}^+|0\rangle$,$m=\pm j$,$\pm(j-1),\cdots,\pm\frac{1}{2}$. $|0\rangle$表示真空态:a_{jm}^+为$|jm\rangle$态上 Fermi 子产生算符. 考虑能级 ε_j 上一对 Fermi 子角动量耦合为 0 的态,记为(耦合表象,$J=M=0$)$|jj00\rangle$. 试将 $|jj00\rangle$用单粒子态的产生、湮没算符表示出来.

解 Fermi 子产生、湮没算符有下列基本性质:

$$a_{jm}^+|0\rangle=|jm\rangle,\quad a_{jm}|jm\rangle=|0\rangle \tag{1}$$

$$[a_{jm},a_{jm'}^+]_+=a_{jm}a_{jm'}^++a_{jm'}^+a_{jm}=\delta_{mm'} \tag{2}$$

$$[a_{jm},a_{jm'}]_+=0,\quad [a_{jm}^+,a_{jm'}^+]_+=0$$

当$|jm\rangle$和$|jm'\rangle$态各有一个 Fermi 子时,体系状态为

$$a_{jm}^+a_{jm'}^+|0\rangle=|jm,jm'\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|jm\rangle_1|jm'\rangle_2-|jm\rangle_2|jm'\rangle_1) \tag{3}$$

按照角动量耦合理论，$|jj00\rangle$态在无耦合表象中的表示式(参看题 6.15)为

$$|jj00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2j+1}}\sum_m (-1)^{j-m}|jm\rangle_1|j,-m\rangle_2 \tag{4}$$

由于 j,m 均为半奇数，当 $m<0$，如令 $m=-m'$，就有

$$\begin{aligned}(-1)^{j-m}|jm\rangle_1|j,-m\rangle_2 &= (-1)^{j+m'}|j,-m'\rangle_1|jm'\rangle_2\\ &= -(-1)^{j-m'}|j,-m'\rangle_1|jm'\rangle_2\end{aligned}$$

因此式(4)又可写成

$$|jj00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2j+1}}\sum_{m>0}(-1)^{j-m}(|jm\rangle_1|j,-m\rangle_2 - |jm\rangle_2|j,-m\rangle_1) \tag{4'}$$

再利用式(3)，上式可以进一步写成

$$|jj00\rangle = \frac{1}{\sqrt{\Omega_j}}\sum_{m>0}(-1)^{j-m}a^+_{jm}a^+_{j-m}|0\rangle \tag{5}$$

其中

$$\Omega_j = j+\frac{1}{2}$$

为能级 ε_j 上 $m>0$ 的状态数，即能容纳的粒子对数.

$|jm\rangle = a^+_{jm}|0\rangle$态的时间反演态为

$$|j\bar{m}\rangle = (-1)^{j-m}|j,-m\rangle = (-1)^{j-m}a^+_{j-m}|0\rangle \tag{6}$$

将这个态上的产生、湮没算符记为 $a^+_{j\bar{m}}$、a_{jm}，则

$$a^+_{j\bar{m}} = (-1)^{j-m}a^+_{j-m},\quad a_{jm} = (-1)^{j-m}a_{j-m} \tag{7}$$

这样，式(5)可以写成

$$|jj00\rangle = \frac{1}{\sqrt{\Omega_j}}\sum_{m>0}a^+_{jm}a^+_{j\bar{m}}|0\rangle = C^+_j|0\rangle \tag{8}$$

其中

$$\boxed{C^+_j = \frac{1}{\sqrt{\Omega_j}}\sum_{m>0}a^+_{jm}a^+_{j\bar{m}}} \tag{9}$$

C^+_j 是能级 ε_j 上角动量耦合为 0 的 Fermi 子对的产生算符. 式(8)称为“配对态”.

17.9　同上题，令

$$s_{m+} = a^+_{jm}a^+_{j\bar{m}} = (-1)^{j-m}a^+_{jm}a^+_{j-m}\quad (m>0,\text{下同})$$

$$s_{m-}=(s_{m+})^{+}=a_{j\bar{m}}a_{jm}=(-1)^{j-m}a_{j-m}a_{jm}$$
$$s_{m0}=\frac{1}{2}(a_{jm}^{+}a_{jm}+a_{j\bar{m}}^{+}a_{j\bar{m}}-1)=\frac{1}{2}(a_{jm}^{+}a_{jm}+a_{j-m}^{+}a_{j-m}-1) \tag{1}$$

证明

$$[s_{m+},s_{m-}]=2s_{m0} \tag{2}$$
$$[s_{m0},s_{m+}]=s_{m+},\quad [s_{m0},s_{m-}]=-s_{m-} \tag{3}$$

并与角动量的对易式比较.

证 利用 Fermi 子产生、湮没算符的基本对易式

$$[a_\alpha,a_\beta^{+}]_{+}=\delta_{\alpha\beta},\quad [a_\alpha,a_\beta]_{+}=[a_\alpha^{+},a_\beta^{+}]_{+}=0$$
$$[a_\alpha^{+}a_\alpha,a_\beta^{+}]=a_\alpha^{+}\delta_{\alpha\beta}$$

及恒等式

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

容易算出

$$\begin{aligned}[s_{m+},s_{m-}]&=(-1)^{2j-2m}[a_{jm}^{+}a_{j-m}^{+},a_{j-m}a_{jm}]\\&=[a_{jm}^{+}a_{j-m}^{+},a_{j-m}]a_{jm}+a_{j-m}[a_{jm}^{+}a_{j-m}^{+},a_{jm}]\\&=a_{jm}^{+}[a_{j-m}^{+},a_{j-m}]_{+}a_{jm}-a_{j-m}[a_{jm}^{+},a_{jm}]_{+}a_{j-m}^{+}\\&=a_{jm}^{+}a_{jm}-a_{j-m}a_{j-m}^{+}\\&=a_{jm}^{+}a_{jm}+a_{j-m}^{+}a_{j-m}-1=2s_{m0}\end{aligned}$$

此即式(2).类似地可得

$$\begin{aligned}[s_{m0},s_{m+}]&=(-1)^{j-m}\frac{1}{2}[a_{jm}^{+}a_{jm}+a_{j-m}^{+}a_{j-m},a_{jm}^{+}a_{j-m}^{+}]\\&=(-1)^{j-m}\frac{1}{2}\{[a_{jm}^{+}a_{jm},a_{jm}^{+}]a_{j-m}^{+}+a_{jm}^{+}[a_{j-m}^{+}a_{j-m},a_{j-m}^{+}]\}\\&=(-1)^{j-m}a_{jm}^{+}a_{j-m}^{+}=s_{m+}\end{aligned}$$

此即式(3)中第一式.再取共轭,即得第二式.证毕.

式(2)和(3)完全类似于角动量的对易式

$$[J_+,J_-]=2J_z,\quad [J_z,J_\pm]=\pm J_\pm$$

所以(s_{m+},s_{m-},s_{m0})相当于(J_+,J_-,J_z),因此称为准自旋(quasispin)①.

现在讨论 s_{m0} 的本征值.由定义式(1)易知:如已有 Fermi 子对占据$|jm\rangle$、$|j\bar{m}\rangle$态,则 $s_{m0}=1/2$;如$|jm\rangle$、$|j\bar{m}\rangle$态中没有粒子,则

---

① 参看 A. K. Kerman. Annals of Physics, 1961, **12**: 300.

$$s_{m0} = -\frac{1}{2}$$

所以，当能级 ϵ_j 上粒子成对出现时，这种准自旋相当于自旋 1/2. 如仅 $|jm\rangle$ 态中有一个粒子，$|j\bar{m}\rangle$ 态中没有粒子，则 $s_{m0}=0$，这种情况下的准自旋相当于自旋 0.

相应于不同 m 的准自旋算符显然是互相对易的. 如令

$$S_+ = \sum_{m>0} s_{m+}, \quad S_- = \sum_{m>0} s_{m-}, \quad S_0 = \sum_{m>0} s_{m0} \tag{4}$$

利用式(2)、(3)易证

$$[S_+, S_-] = 2S_0, \quad [S_0, S_\pm] = \pm S_\pm \tag{5}$$

如再令

$$S_\pm = S_x \pm iS_y, \quad S_0 = S_z \tag{6}$$

即得

$$S \times S = iS \tag{7}$$

即 $S=(S_x, S_y, S_z)$ 也是准自旋.

17.10　同题 17.8，设能级 ϵ_j（为了方便，取 $\epsilon_j=0$）上有 N 个粒子，粒子间有“对力”(airing force)作用，总 Hamilton 量为

$$H = -G\sum_{m>0} a^+_{jm}a^+_{j\bar{m}}a_{j\bar{m}'}a_{jm}, \quad G>0 \tag{1}$$

其中 $a^+_{jm}a^+_{j\bar{m}}$ 是“对产生算符”(pair creation operator)，$a_{j\bar{m}}a_{jm}$ 是“对湮没算符”. $a^+_{j\bar{m}}|0\rangle$ 是 $a^+_{jm}|0\rangle$ 的时间反演态.

试求这 N 个粒子体系的能谱.

解　利用能级 ϵ_j 上总粒子数算符

$$\hat{N}_j = \sum_m a^+_m a_m = \sum_{m>0}(a^+_m a_m + a^+_{\bar{m}}a_{\bar{m}}) \tag{2}$$

和准自旋算符(见上题)

$$S_+ = \sum_{m>0} s_{m+} = \sum_{m>0} a^+_m a^+_{\bar{m}} \tag{3}$$

$$S_- = \sum_{m>0} s_{m-} = \sum_{m>0} a_{\bar{m}}a_m = (S_+)^+$$

$$S_0 = \sum_{m>0} s_{m0} = \sum_{m>0} \frac{1}{2}(a^+_m a_m + a^+_{\bar{m}}a_{\bar{m}} - 1) = \frac{1}{2}(\hat{N}_j - \Omega) \tag{4}$$

$$S_\pm = S_x \pm iS_y, \quad S_0 = S_z \tag{5}$$

(以上各算符中，略去了下标 j.)Hamilton 量可以写成

$$H = -GS_+S_- = -\frac{1}{2}G(S^2 - S_0^2 + S_0) \tag{6}$$

粒子数 N 给定后,$\boldsymbol{S}^2$,S_0 的本征值为

$$\boldsymbol{S}^2 = S(S+1), \quad S_0 = \frac{1}{2}(N-\Omega) \tag{7}$$

其中 $\Omega=j+1/2$.

根据 Pauli 原理,粒子数 N 不能超过 $2\Omega=2j+1$. 当 $N=2\Omega$,能级 ϵ_j 上各 $|jm\rangle$ 态均已填满粒子,各 s_{m0} 均等于 1/2,各准自旋互相平行,总 S、S_0 均取最大值

$$S_{\max} = (S_0)_{\max} = \Omega/2 \tag{8}$$

根据角动量理论,$S \geqslant |S_0|$,故 S 的取值范围是

$$\frac{\Omega}{2} \geqslant S \geqslant \frac{1}{2}(N-\Omega) \tag{9}$$

引入量子数 ν(seniority 数)以代替 S,即令

$$\nu = \Omega - 2S, \quad S = \frac{1}{2}(\Omega-\nu) \tag{10}$$

则利用式(6)和(7),即可写出能谱公式:

$$E=-G\left[S(S+1)-\frac{1}{4}(N-\Omega)^2+\frac{1}{2}(N-\Omega)\right] \tag{11}$$

$$=-G\left[\frac{\Omega-\nu}{2}\left(\frac{\Omega-\nu}{2}+1\right)-\frac{\Omega-N}{2}\left(\frac{\Omega-N}{2}+1\right)\right]$$

$$=-\frac{G}{4}(N-\nu)(2\Omega+2-N-\nu) = E_\nu^{(N)} \tag{12}$$

当 N 为偶数,$\nu=0,2,4,\cdots,N$

当 N 为奇数,$\nu=1,3,5,\cdots,N$

N 为偶数时,基态和第一激发态能级为

$$E_0^{(N)} = -\frac{G}{4}N(2\Omega+2-N)$$

$$E_2^{(N)} = -\frac{G}{4}(N-2)(2\Omega-N)$$

间距为

$$\boxed{E_2^{(N)} - E_0^{(N)} = \Omega G} \tag{13}$$

这个能级间距与粒子数 N 无关,称为能隙(energy gap).

17.11 同上题,求 H 与 S_+ 的对易式,分别就 $N=2$、4 的情况求能级公式,再进而求出 N 为偶数时能级的一般公式.

解 利用题 17.9 得到的公式

$$[S_+,S_-]=2S_0$$

容易求出

$$\begin{aligned}[H,S_+]&=-G[S_+S_-,S_+]=GS_+[S_+,S_-]\\&=2GS_+S_0=-GS_+(\Omega-\hat{N})\end{aligned}\tag{1}$$

注意 S_+ 即题 17.8 中 $\sqrt{\Omega_j}C_j^+$.

(a) 粒子数 $N=2$.

将式(1)作用于真空态 $|0\rangle$，由于 $H|0\rangle=0$，故得

$$HS_+|0\rangle=-GS_+(\Omega-\hat{N})|0\rangle=-\Omega GS_+|0\rangle\tag{2}$$

这表明 $S_+|0\rangle$ 是 H 的本征态，本征值为 $(-\Omega G)$.

另一方面，由 H 的定义[见上题式(1)]可知，H 的对角矩阵元之和为

$$\mathrm{Tr}H=-\Omega G\tag{3}$$

($m=m'$ 项贡献 1，$m\neq m'$ 项贡献 0.)由于 $(-H)$ 是正定的，H 的本征值只能取 0 和负数. $\mathrm{Tr}H$ 应等于 H 的各本征值之和. 由此可知，除本征值 $(-\Omega G)$ 以外，H 的其他本征值均为 0，相应的本征态记为 $B_i|0\rangle$，即

$$HB_i|0\rangle=0.\quad i=1,2,\cdots,(\Omega-1)\tag{4}$$

这样，$N=2$ 时共有 2 个能级，$E=-\Omega G,0$.

(b) 粒子数 $N=4$.

将式(1)作用于 $S_+|0\rangle$ 态，并利用式(2)，可得

$$\begin{aligned}H(S_+)^2|0\rangle&=S_+HS_+|0\rangle-GS_+(\Omega-\hat{N})S_+|0\rangle\\&=-[\Omega G+(\Omega-2)G](S_+)^2|0\rangle\\&=-(2\Omega-2)G(S_+)^2|0\rangle\end{aligned}\tag{5}$$

这表明 $(S_+)^2|0\rangle$ 是 H 的本征态，本征值为 $-(2\Omega-2)G$.

将式(1)作用于 $B_i|0\rangle$ 态，并利用式(4)，则得

$$\begin{aligned}HS_+B_i|0\rangle&=-GS_+(\Omega-\hat{N})B_i|0\rangle\\&=-(\Omega-2)GS_+B_i|0\rangle\end{aligned}\tag{6}$$

这表明 $S_+B_i|0\rangle$ 是 H 的本征态，本征值为 $-(\Omega-2)G$.

以上两条能级(注意第二条能级的简并度为 $\Omega-1$)对于 $\mathrm{Tr}H$ 的贡献为

$$-(2\Omega-2)G-(\Omega-1)(\Omega-2)G=-\Omega(\Omega-1)G$$

$N=4$ 时共有 $\Omega(\Omega-1)/2$ 种配对态，每种对于 $\mathrm{Tr}H$ 贡献 $(-2G)$，所以

$$\mathrm{Tr}H=-\Omega(\Omega-1)G$$

由此可见，除了以上两条能级外，还应有

$$\frac{1}{2}\Omega(\Omega-1)-\Omega=\frac{1}{2}\Omega(\Omega-3)$$

种配对态的能级为 0. 总之,$N=4$ 时共有 3 条能级,

$$E=-(2\Omega-2)G,\quad -(\Omega-2)G,\quad 0 \tag{7}$$

例如,$N=4$,$j=9/2$,$\Omega=5$,能级及其简并度如图 17.11 所示.

E	状态	简并度
0		$\frac{1}{2}\Omega(\Omega-3)=5$
$-3G$	$S_+B_1\|0\rangle$	$\Omega-1=4$
$-8G$	$(S_+)^2\|0\rangle$	1

图 17.11

(c) 粒子数 $N=2k$.

依次类推,$N=2k$ 时,共有$(k+1)$条能级,记为 $E_\nu^{(N)}$,其中 $\nu=0,2,4,\cdots,N$,称为 seniority 数. 基态能级为 $E_0^{(N)}$,最高能级为 $E_N^{(N)}=0$. 以下求 $E_\nu^{(N)}$.

以$|E_\nu^{(N-2)}\rangle$表示属于能级 $E_\nu^{(N-2)}$(粒子数 $N-2$)的任何一个能量本征态,将式(1)作用之,得到

$$\begin{aligned} ES_+|E_\nu^{(N-2)}\rangle &=\{S_+H-GS_+(\Omega-\hat{N})\}|E_\nu^{(N-2)}\rangle \\ &=\{E_\nu^{(N-2)}-(\Omega+2-N)G\}S_+|E_\nu^{(N-2)}\rangle \end{aligned} \tag{8}$$

这表明 $S_+|E_\nu^{(N-2)}\rangle$是 H 的本征态,本征值为

$$E_\nu^{(N)}=E_\nu^{(N-2)}-(\Omega+2-N)G \tag{9}$$

反复利用此式,并注意 $E_\nu^{(\nu)}=0$,即得

$$E_\nu^{(N)}=-G[(\Omega+2-N)+(\Omega+4-N)+\cdots+(\Omega+N-\nu-N)]$$

上式为等差级数,共$(N-\nu)/2$ 项,其和为

$$\boxed{E_\nu^{(N)}=-\frac{1}{4}G(N-\nu)(2\Omega+2-N-\nu)} \tag{10}$$

这和上题所得结果完全符合.

基态$(S_+)^{N/2}|0\rangle$,能级

$$E_0^{(N)}=-\frac{G}{4}N(2\Omega+2-N)$$

第一激发能级

$$E_2^{(N)}=-\frac{G}{4}(N-2)(2\Omega-N)$$

能隙

$$E_2^{(N)} - E_0^{(N)} = \Omega G$$

最高能级($\nu=N$ 或 $\nu=2\Omega+2-N$),$E=0$,对力无贡献.

17.12　同 17.8 题,引入能级 ϵ_j 上总粒子数算符

$$\hat{N}_j = \sum_{m>0}(a_{jm}^+ a_{jm} + a_{j-m}^+ a_{j-m})$$

$$= \sum_{m>0}(a_{jm}^+ a_{jm} + a_{j\bar{m}}^+ a_{j\bar{m}}) \tag{1}$$

计算$[\hat{N}_j, C_j^+]$、$[C_j, C_j^+]$、$[C_j^+ C_j, C_j^+]$,并将 C_j^+,C_j 与玻色子的产生、湮没算符作比较.

解　由 17.8 题,C_j^+、C_j 的定义为

$$C_j^+ = \frac{1}{\sqrt{\Omega_j}} \sum_{m>0} (-1)^{j-m} a_{jm}^+ a_{j-m}^+ = \frac{1}{\sqrt{\Omega_j}} \sum_{m>0} a_{jm}^+ a_{j\bar{m}}^+ \tag{2a}$$

$$C_j = \frac{1}{\sqrt{\Omega_j}} \sum_{m>0} (-1)^{j-m} a_{j-m} a_{jm} = \frac{1}{\sqrt{\Omega_j}} \sum_{m>0} a_{j\bar{m}} a_{jm} \tag{2b}$$

利用费密子产生、湮没算符的基本对易式和恒等式

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

不难算出以下结果:

$$[\hat{N}_j, C_j^+] = \frac{1}{\sqrt{\Omega_j}} \sum_{m>0}\sum_{m'>0} [a_{jm}^+ a_{jm} + a_{j\bar{m}}^+ a_{j\bar{m}}, a_{jm'}^+ a_{j\bar{m}'}^+]$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\Omega_j}} \sum_{m>0} \{ [a_{jm}^+ a_{jm}, a_{jm}^+] a_{j\bar{m}}^+ + a_{jm}^+ [a_{j\bar{m}}^+ a_{\bar{m}}, a_{j\bar{m}}^+] \}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\Omega_j}} \sum_{m>0} 2 a_{jm}^+ a_{j\bar{m}}^+ = 2C_j^+ \tag{3}$$

(注意,$m \neq m'$ 时,$a_{jm}^+ a_{jm}$ 和 $a_{j\bar{m}}^+ a_{j\bar{m}}$ 均与 $a_{jm'}^+ a_{j\bar{m}'}^+$ 对易.)

$$[C_j, C_j^+] = \frac{1}{\Omega_j} \sum_{m>0}\sum_{m'>0} [a_{j\bar{m}} a_{jm}, a_{jm'}^+, a_{j\bar{m}'}^+]$$

$$= \frac{1}{\Omega_j} \sum_{m>0} \{ a_{jm}^+ [a_{j\bar{m}} a_{jm}, a_{j\bar{m}}^+] + [a_{j\bar{m}} a_{jm}, a_{jm}^+] a_{j\bar{m}}^+ \}$$

$$= \frac{1}{\Omega_j} \sum_{m>0} \{ - a_{jm}^+ [a_{j\bar{m}}, a_{j\bar{m}}^+]_+ a_{jm} + a_{j\bar{m}} [a_{jm}, a_{jm}^+]_+ a_{j\bar{m}}^+ \}$$

$$= \frac{1}{\Omega_j} \sum_{m>0} \{ - a_{jm}^+ a_{jm} + a_{j\bar{m}} a_{j\bar{m}}^+ \}$$

$$= \frac{1}{\Omega_j}\sum_{m>0}\{1-(a_{jm}^{+}a_{jm}+a_{j\bar{m}}^{+}a_{j\bar{m}})\}$$

$$= 1-\frac{1}{\Omega_j}\hat{N}_j \tag{4}$$

亦即

$$C_jC_j^{+} = C_j^{+}C_j + 1 - \frac{1}{\Omega_j}\hat{N}_j \tag{4'}$$

利用式(3)、(4),易得

$$[C_j^{+}C_j, C_j^{+}] = C_j^{+}\left(1-\frac{1}{\Omega_j}\hat{N}_j\right) \tag{5}$$

$$[C_j^{+}C_j, (C_j^{+})^2] = 2(C_j^{+})^2\left(1-\frac{1}{\Omega_j}-\frac{1}{\Omega_j}\hat{N}_j\right) \tag{6}$$

C_j^{+}, C_j 是能级 ε_j 上角动量耦合为 0 的一对 Fermi 子的产生、湮没算符. 能否将这对 Fermi 子看成一个 Bose 子呢? 亦即 C_j^{+}, C_j 是否相当于 Bose 子的产生、湮没算符? 式(4)表明,只有当 $N_j \ll \Omega_j$ 时(能级简并度很大,而粒子数又很小)才可以近似地这样看. 这种条件在实际的原子或原子核中是很难成立的,这反映出在原子结构和原子核结构中 Pauli 原理是十分重要的.

将式(4')作用于真空态$|0\rangle$,得到

$$\langle 0 \mid C_jC_j^{+} \mid 0\rangle = \langle 0 \mid \left(C_j^{+}C_j + 1 - \frac{1}{\Omega_j}\hat{N}_j\right) \mid 0\rangle$$

$$= \langle 0 \mid 0\rangle = 1 \tag{7}$$

这表明 $C_j^{+}|0\rangle$是归一化的一对 Fermi 子的波函数.

利用式(3),可得

$$\hat{N}_jC_j^{+} \mid 0\rangle = (C_j^{+}\hat{N}_j + 2C_j^{+}) \mid 0\rangle = 2C_j^{+} \mid 0\rangle$$

$$\hat{N}_j(C_j^{+})^2 \mid 0\rangle = (C_j^{+}\hat{N}_j + 2C_j^{+})C_j^{+} \mid 0\rangle = 4(C_j^{+})^2 \mid 0\rangle$$

$$\vdots$$

$$\hat{N}_j(C_j^{+})^k \mid 0\rangle = (C_j^{+}\hat{N}_j + 2C_j^{+})(C_j^{+})^{k-1} \mid 0\rangle = 2k(C_j^{+})^k \mid 0\rangle \tag{8}$$

以上结果表明,$(C_j^{+})^k|0\rangle$是能级 ε_j 上 k 对 Fermi 子的波函数(未归一化). 式(8)限于 $k \leqslant \Omega_j$;如 $k > \Omega_j$,则$(C_j^{+})^k|0\rangle = 0$,读者试自证明之.

这里特别讨论一下两对 Fermi 子的情形. 利用式(4')和(8),可得

$$\langle 0 \mid (C_j)^2(C_j^{+})^2 \mid 0\rangle = \langle 0 \mid C_j\left(C_j^{+}C_j + 1 - \frac{1}{\Omega_j}\hat{N}_j\right)C_j^{+} \mid 0\rangle$$

$$= 1 - \frac{2}{\Omega_j} + \langle 0 \mid (C_jC_j^{+})^2 \mid 0\rangle = 2 - \frac{2}{\Omega_j}$$

所以,归一化的两对 Fermi 子波函数为

$$\frac{1}{\sqrt{2(1-1/\Omega_j)}}(C_j^+)^2 \mid 0\rangle \tag{9}$$

当 $j=5/2$，上式就是 $\frac{\sqrt{3}}{2}(C_j^+)^2|0\rangle$. 作为对照，归一化的两个 Bose 子的波函数为 $\frac{1}{\sqrt{2!}}(B^+)^2|0\rangle$.（$B^+$ 为 Bose 子产生算符.）上述讨论在计算矩阵元时也很重要，它反映了 Pauli 原理的重要性.

17.13　同上题，设 ε_j 能级上有 k 对 Fermi 子（$k\leqslant\Omega_j$），证明归一化的波函数可以表示成

$$\left[k!\prod_{i=0}^{k-1}\left(1-\frac{i}{\Omega_j}\right)\right]^{-1/2}(C_j^+)^k \mid 0\rangle$$

证　上题已经证明

$$\langle 0 \mid C_jC_j^+ \mid 0\rangle = 1 \tag{1}$$

现在需要证明

$$\langle 0 \mid (C_j)^k(C_j^+)^k \mid 0\rangle = k!\prod_{i=0}^{k-1}\left(1-\frac{i}{\Omega_j}\right) \tag{2}$$

利用上题证明的公式

$$C_jC_j^+ = C_j^+C_j + 1 - \frac{1}{\Omega_j}\hat{N}_j \tag{3}$$

可得

$$\begin{aligned}
C_j(C_j^+)^k &= C_j^+C_j(C_j^+)^{k-1} + \left(1-\frac{1}{\Omega_j}\hat{N}_j\right)(C_j^+)^{k-1} \\
&= (C_j^+)^2C_j(C_j^+)^{k-2} + C_j^+\left(1-\frac{1}{\Omega_j}\hat{N}_j\right)(C_j^+)^{k-2} + \left(1-\frac{1}{\Omega_j}\hat{N}_j\right)(C_j^+)^{k-1} \\
&= \cdots = (C_j^+)^kC_j + (C_j^+)^{k-1}\left(1-\frac{1}{\Omega_j}\hat{N}_j\right) + (C_j^+)^{k-2}\left(1-\frac{1}{\Omega_j}\hat{N}_j\right)C_j^+ \\
&\quad + \cdots + C_j^+\left(1-\frac{1}{\Omega_j}\hat{N}_j\right)(C_j^+)^{k-2} + \left(1-\frac{1}{\Omega_j}\hat{N}_j\right)(C_j^+)^{k-1}
\end{aligned}$$

将上式作用于真空态 $|0\rangle$，利用 $C_j|0\rangle=0$ 及上题式(8)，第一项贡献为 0，其他各项中 $\hat{N}_j$ 分别变成本征值，

$$\hat{N}_j = 0,2,4,\cdots,2(k-1)$$

因此得到

$$C_j(C_j^+)^k \mid 0\rangle = \left[1+\left(1-\frac{2}{\Omega_j}\right)+\left(1-\frac{4}{\Omega_j}\right)+\cdots+\left(1-\frac{2k-2}{\Omega_j}\right)\right](C_j^+)^{k-1} \mid 0\rangle$$

$$= k\left(1-\frac{k-1}{\Omega_j}\right)(C_j^+)^{k-1} \mid 0\rangle \tag{4}$$

由此立刻得到

$$\langle 0 \mid (C_j)^k (C_j^+)^k \mid 0\rangle = k\left(1-\frac{k-1}{\Omega_i}\right)\langle 0 \mid (C_j)^{k-1}(C_j^+)^{k-1} \mid 0\rangle \tag{5}$$

利用此式依次递推,并在最后利用式(1),即得式(2). 证毕.

作为对照,处于相同单粒子态的 k 个 Bose 子,其归一化波函数为

$$\frac{1}{\sqrt{k!}}(B^+)^k \mid 0\rangle$$

B^+ 为 Bose 子产生算符.

第十八章　相对论量子力学

18.1　试证明自由粒子(自旋为 0)的 Klein-Gordon 方程

$$-\hbar\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi=(-\hbar^2c^2\nabla^2+m^2c^4)\psi \tag{1}$$

可以表示成类似于 Schrödinger 方程的形式：

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi=\hat{H}\Psi \tag{2}$$

其中

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}(\tau_3+\mathrm{i}\tau_2)\nabla^2+mc^2\tau_3 \tag{3}$$

Ψ 是重新定义的二分量波函数，$\tau_i(i=1,2,3)$是 Pauli 矩阵

$$\tau_1=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\quad \tau_2=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix},\quad \tau_3=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$$

试找出 Ψ 和 ψ 的关系，并通过 Ψ 来表示连续性方程中的 ρ、j.

证　设 $\Psi=\begin{pmatrix}\varphi\\\chi\end{pmatrix}$，则式(2)化成

$$\begin{aligned}\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-mc^2\right)\varphi&=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2(\varphi+\chi)\\ \left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}+mc^2\right)\chi&=\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2(\varphi+\chi)\end{aligned} \tag{4}$$

而式(1)显然可以表示成

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\pm mc^2\right)\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\mp mc^2\right)\psi=-\hbar^2c^2\nabla^2\psi \tag{5}$$

除以 $2mc^2$，即得

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-mc^2\right)\left(1+\frac{\mathrm{i}\hbar}{mc^2}\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi&=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi\\ \frac{1}{2}\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}+mc^2\right)\left(1-\frac{\mathrm{i}\hbar}{mc^2}\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi&=\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi\end{aligned} \tag{6}$$

如式(1)和(2)等价，则式(6)和(4)等价，显然这是可能的，只要令

$$\varphi=\frac{1}{2}\left(1+\frac{\mathrm{i}\hbar}{mc^2}\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi$$
$$\chi=\frac{1}{2}\left(1-\frac{\mathrm{i}\hbar}{mc^2}\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi \tag{7}$$

亦即令

$$\psi=\varphi+\chi,\quad \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=mc^2(\varphi-\chi) \tag{8}$$

式(6)就和式(4)等价.

由 Klein-Gordon 方程(1)导出的连续性方程为①

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0 \tag{9}$$

其中

$$\rho=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2mc^2}\left(\psi^*\frac{\partial}{\partial t}\psi-\psi\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\right) \tag{10}$$

$$\boldsymbol{j}=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*) \tag{11}$$

将式(8)代入式(10)、(11),可得

$$\rho=\varphi^*\varphi-\chi^*\chi=\Psi^+\tau_3\Psi \tag{12}$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{j}&=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}(\varphi^*\nabla\varphi+\chi^*\nabla\chi+\varphi^*\nabla\chi+\chi^*\nabla\varphi)+\text{c. c.}\\&=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}[\Psi^+(1+\tau_1)\nabla\Psi-(\nabla\Psi^+)(1+\tau_1)\Psi]\end{aligned} \tag{13}$$

式(12)和(13)就是用 Ψ 来表示的 ρ 和 $\boldsymbol{j}$ 的公式,如再乘以粒子电荷 q,则 $q\rho$ 和 $q\boldsymbol{j}$ 可以解释为电荷密度和电流密度.式(9)乘 q 后可以理解成电荷守恒定律的表现形式.二分量波函数

$$\Psi=\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}$$

的意义则是 φ 表示粒子的正电荷态,χ 表示粒子的负电荷态.

如定义速度算符

$$\begin{aligned}\boldsymbol{v}&=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{r}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{r},H]=\frac{1}{2\mathrm{i}\hbar m}(\tau_3+\mathrm{i}\tau_2)[\boldsymbol{r},\boldsymbol{p}^2]\\&=\frac{\hbar}{\mathrm{i}m}(\tau_3+\mathrm{i}\tau_2)\nabla\end{aligned} \tag{14}$$

---

① 参看曾谨言.量子力学.卷Ⅱ.北京:科学出版社,1997. p343.

则电流密度可以表示成

$$j_e = ej = \frac{e}{2}\Psi\tau_3 \boldsymbol{v}\Psi + \text{c. c.} \tag{15}$$

讨论　式(3)中$(\tau_3+\mathrm{i}\tau_2)^+=(\tau_3-\mathrm{i}\tau_2)$,因此

$$H^+=-(\tau_3-\mathrm{i}\tau_2)\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+mc^2\tau_3 \neq H$$

从表面上看,似乎未能保证 H 的 Hermite 性;与此相关,必然导致$\int \Psi^+\Psi \mathrm{d}^3x$不守恒,因此似乎也不能保证电荷守恒.其实不然.首先,既有连续性方程(9),当然就能保证电荷守恒,只是其表现形式不是$\int \Psi^+\Psi \mathrm{d}^3x=1$,而是

$$\int\rho \mathrm{d}^3x = \int\Psi^+\tau_3\Psi \mathrm{d}^3x = 1 \tag{16}$$

在一般的 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = H\psi$$

中,$H^+=H$,两个波函数,ψ、ϕ 的"标积"定义为

$$(\psi,\phi) = \int\psi^+\phi \mathrm{d}^3x$$

波函数的归一化条件为

$$\int\psi^+\psi \mathrm{d}^3x = (\psi,\psi) = 1$$

它保证概率守恒和电荷守恒.现在,如定义波函数 Ψ、Φ 的"标积"为

$$(\Psi,\Phi) \equiv \int\Psi^+\tau_3\Phi \mathrm{d}^3x \tag{17}$$

则式(16)就是波函数的归一化条件,即

$$(\Psi,\Psi) = \int\Psi\tau_3\Psi = 1 \tag{16'}$$

在一般的量子力学中,算符 $\hat{O}$ 的厄米性条件是

$$(\psi,\hat{O}\phi) = (\hat{O}\psi,\phi)$$

亦即

$$\int\psi^+\hat{O}\phi \mathrm{d}^3x = \int(\hat{O}\psi)^+\phi \mathrm{d}^3x = \int\psi^+\hat{O}^+\phi \mathrm{d}^3x$$

亦即 $\hat{O}=\hat{O}^+$.现在,在标积新的定义下,算符的厄米性条件仍可写成

$$(\Psi,\hat{O}\Phi)=(\hat{O}\Psi,\Phi) \tag{18}$$

亦即

$$\int\Psi^{+}\tau_3\hat{O}\Phi\,\mathrm{d}^3x=\int(\hat{O}\Psi)^{+}\tau_3\Phi\,\mathrm{d}^3x=\int\Psi^{+}\hat{O}^{+}\tau_3\Phi\,\mathrm{d}^3x$$

亦即

$$\tau_3\hat{O}=\hat{O}^{+}\tau_3$$

亦即

$$\hat{O}^{+}=\tau_3\hat{O}\tau_3,\quad \text{或}\ \hat{O}=\tau_3\hat{O}^{+}\tau_3 \tag{19}$$

此即算符的厄米性条件. 由于

$$\tau_3(\tau_3+\mathrm{i}\tau_2)^{+}\tau_3=\tau_3(\tau_3-\mathrm{i}\tau_2)\tau_3=\tau_3+\mathrm{i}\tau_2$$

容易验证,由式(3)定义的 $\hat{H}$ 是满足厄米性条件(19)的. 因此,可以保证 $\hat{H}$ 的本征值为实数等性质.

18.2 将上题推广到带电粒子在电磁场中运动.

解 自旋为 0 电荷为 q 的粒子在电磁场中运动时,K-G 方程应推广成

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-q\phi\right)^2\psi=c^2\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\psi+m^2c^4\psi \tag{1}$$

其中 $\boldsymbol{p}=-\mathrm{i}\hbar\nabla$是正则动量算符,$\phi$ 和 $\boldsymbol{A}$ 是电磁场的标势和矢势. 上式相当于自由粒子的 K-G 方程中作下列替换:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\to\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-q\phi$$

$$\boldsymbol{p}\to\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}$$

式(1)可以写成

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-q\phi\pm mc^2\right)\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-q\phi\mp mc^2\right)\psi=c^2\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\psi$$

除以 $2mc^2$,成为

$$\frac{1}{2}\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-q\phi\pm mc^2\right)\left(\frac{\mathrm{i}\hbar}{mc^2}\frac{\partial}{\partial t}-\frac{q\phi}{mc^2}\mp1\right)\psi=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\psi \tag{2}$$

如令

$$\begin{cases}\psi=\varphi+\chi\\ \left(\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}-q\phi\right)\psi=mc^2(\varphi-\chi)\end{cases} \tag{3}$$

亦即

$$\begin{cases} \varphi = \dfrac{1}{2}\left(1 + \dfrac{\mathrm{i}\hbar}{mc^2}\dfrac{\partial}{\partial t} - \dfrac{q\phi}{mc^2}\right)\psi \\ \chi = \dfrac{1}{2}\left(1 - \dfrac{\mathrm{i}\hbar}{mc^2}\dfrac{\partial}{\partial t} + \dfrac{q\phi}{mc^2}\right)\psi \end{cases} \tag{4}$$

则式(2)可以写成

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\phi - mc^2\right)\varphi = \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2(\varphi + \chi)$$

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\phi + mc^2\right)\chi = -\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2(\varphi + \chi) \tag{5}$$

如定义二分量波函数

$$\Psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \tag{6}$$

并引入 Pauli 矩阵 τ_1、τ_2、τ_3，方程(5)就可以表示成 Schrödinger 方程的形式：

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = \hat{H}\Psi \tag{7}$$

其中

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\tau_3 + \mathrm{i}\tau_2)\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + q\phi + mc^2\tau_3 \tag{8}$$

下面建立连续性方程. 以 $\Psi^+\tau_3$ 左乘式(7)，得到

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\hbar\Psi^+\tau_3\frac{\partial}{\partial t}\Psi &= \frac{1}{2m}\Psi^+(1+\tau_1)\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\Psi + q\phi\Psi^+\tau_3\Psi + mc^2\Psi^+\Psi \\ &= \frac{1}{2m}\Psi^+(1+\tau_1)\left\{-\hbar^2\nabla^2\Psi + \frac{q^2}{c^2}\boldsymbol{A}^2\Psi\right. \\ &\quad \left. + \mathrm{i}\hbar\frac{q}{c}[\boldsymbol{A}\cdot(\nabla\Psi) + \nabla\cdot(\boldsymbol{A}\Psi)]\right\} \\ &\quad + q\phi\Psi^+\tau_3\Psi + mc^2\Psi^+\Psi \end{aligned}$$

上式取共轭，成为

$$\begin{aligned} -\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t}\Psi^+\right)\tau_3\Psi &= q\phi\Psi^+\tau_3\Psi + mc^2\Psi^+\Psi + \frac{1}{2m}\left\{-\hbar^2(\nabla^2\Psi^+) + \frac{q^2}{c^2}\boldsymbol{A}^2\Psi^+\right. \\ &\quad \left. - \mathrm{i}\hbar\frac{q}{c}[\boldsymbol{A}\cdot(\nabla\Psi^+) + \nabla\cdot(\boldsymbol{A}\Psi^+)]\right\}(1+\tau_1)\Psi \end{aligned}$$

二式相减，得到

$$
\begin{aligned}
&\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^{+}\tau_3\Psi)\\
=&-\frac{\hbar^2}{2m}[\Psi^{+}(1+\tau_1)\nabla^2\Psi-(\nabla^2\Psi^{+})(1+\tau_1)\Psi]\\
&+\frac{\mathrm{i}\hbar q}{2mc}\{\Psi^{+}(1+\tau_1)[\boldsymbol{A}\cdot(\nabla\Psi)+\nabla\cdot(\boldsymbol{A}\Psi)]\\
&+[\boldsymbol{A}\cdot(\nabla\Psi^{+})+\nabla\cdot(\Psi^{+}\boldsymbol{A})](1+\tau_1)\Psi\}\\
=&-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\cdot[\Psi^{+}(1+\tau_1)\nabla\Psi-(\nabla\Psi^{+})(1+\tau_1)\Psi]\\
&+\frac{\mathrm{i}\hbar q}{mc}\nabla\cdot[\Psi^{+}(1+\tau_1)\boldsymbol{A}\Psi]
\end{aligned}
$$

上式即连续性方程

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_e+\nabla\cdot\boldsymbol{j}_e=0 \tag{9}$$

其中

$$\rho_e=q\Psi^{+}\tau_3\Psi=q(\varphi^{*}\varphi-\chi^{*}\chi) \tag{10}$$

$$\boldsymbol{j}_e=-\mathrm{i}\hbar\frac{q}{2m}[\Psi^{+}(1+\tau_1)\nabla\Psi-(\nabla\Psi^{+})(1+\tau_1)\Psi]-\frac{q^2}{mc}\Psi^{+}(1+\tau_1)\boldsymbol{A}\Psi$$

$$=\frac{q}{2m}\Psi^{+}(1+\tau_1)\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\Psi+\text{c. c.} \tag{11}$$

ρ_e 可以解释成电荷密度,$\boldsymbol{j}_e$ 为电流密度. 如引入速度算符

$$\boldsymbol{v}=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{r},H]=\frac{1}{m}(\tau_3+\mathrm{i}\tau_2)\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right) \tag{12}$$

$\boldsymbol{j}_e$ 可以表示成

$$\boldsymbol{j}_e=\frac{q}{2}\Psi^{+}\tau_3\boldsymbol{v}\Psi+\text{c. c.}=q\mathrm{Re}(\Psi^{+}\tau_3\boldsymbol{v}\Psi) \tag{13}$$

二分量波函数 $\Psi=\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}$ 的意义已在上题说明,φ 表示粒子的正电荷(q)态,χ 表示负电荷($-q$)态.

如果用方程(1)中的波函数 ψ 来表示,式(10)和(11)变成

$$\rho_e=\frac{q}{2mc^2}\psi^{*}\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-q\phi\right)\psi+\text{c. c.} \tag{14}$$

$$\boldsymbol{j}_e=\frac{q}{2m}\psi^{*}\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\psi+\text{c. c.} \tag{15}$$

这两个公式也可以直接由方程(1)导出.

如写成协变形式,连续性方程(9)可以表示成

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu} j_\mu = 0 \tag{16}$$

式(14)、(15)可以合并表示成

$$j_\mu = \frac{q}{2m}\psi^* \left(p_\mu - \frac{q}{c}A_\mu\right)\psi + \text{c. c.} \tag{17}$$

其中

$$x_\mu = (\boldsymbol{x}, \mathrm{i}ct), \quad A_\mu = (\boldsymbol{A}, \mathrm{i}\phi), \quad j_\mu = (\boldsymbol{j}_e, \mathrm{i}c\rho_e)$$
$$p_\mu = -\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial x_\mu} = \left(-\mathrm{i}\hbar\nabla, -\frac{\hbar}{c}\frac{\partial}{\partial t}\right) = \left(\boldsymbol{p}, \frac{\mathrm{i}}{c}E\right) \tag{18}$$

18.3　π^-介子在原子核(视为质量无限大的点电荷 Ze)的 Coulomb 场作用下运动,形成介原子. 在轨道半径远大于核半径的情形下,核力的影响可以忽略不计. 试求 π 介原子的能级公式.

解　π^-介子所受 Coulomb 作用势为

$$V(r) = -Ze^2/r \tag{1}$$

π^-介子自旋为 0,波函数应该满足 K-G 方程. 定态 K-G 方程为

$$(E-V)^2\psi = (c^2\boldsymbol{p}^2 + m^2c^4)\psi = (m^2c^4 - \hbar^2c^2\nabla^2)\psi \tag{2}$$

即

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{E}{mc^2}V - \frac{V^2}{2mc^2}\right)\psi = \left(\frac{E^2}{2mc^2} - \frac{1}{2}mc^2\right)\psi \tag{2'}$$

其中 m 为 π^-介子质量,E 为总能(包含静止质量所相应的 mc^2 在内). 由于 $V(r)$为中心势,轨道角动量 $\boldsymbol{l}$ 守恒,取 ψ 为守恒量完全集$(E, \boldsymbol{l}^2, l_z)$的共同本征态,则 ψ 可以表示成

$$\psi = R(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{u(r)}{r}\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) \tag{3}$$

代入式(2′),得到径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2} + \left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} - \frac{Z^2e^4}{2mc^2r^2} - \frac{E}{mc^2}\frac{Ze^2}{r}\right]u = \left(\frac{E^2}{2mc^2} - \frac{1}{2}mc^2\right)u \tag{4}$$

上式和非相对论的类氢离子的径向方程结构相似,后者为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2} + \left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r}\right]u = Eu \tag{5}$$

式(4)和(5)中的参量有如下对应关系：

式(5)	式(4)
E	$\frac{E^2}{2mc^2}-\frac{1}{2}mc^2$
Ze^2	$\frac{Ze^2E}{mc^2}$
$l(l+1)$	$l(l+1)-Z^2\alpha^2\equiv l'(l'+1)$

其中 $\alpha=\frac{e^2}{\hbar c}$ 为精细结构常数. l' 和 l 的关系也可以写成

$$\left(l'+\frac{1}{2}\right)^2=\left(l+\frac{1}{2}\right)^2-Z^2\alpha^2$$

即

$$l'=\left[\left(l+\frac{1}{2}\right)^2-Z^2\alpha^2\right]^{1/2}-\frac{1}{2} \tag{6}$$

众所周知，由式(5)得到能量本征值为

$$E=E_n=-\frac{mZ^2e^4}{2n^2\hbar^2},\quad n=n_r+l+1$$

其中 n_r 为径向量子数，n_r 和 l 互相独立. 利用上述参数对应关系，易见式(4)中能级 E_{nl} 满足关系

$$\frac{1}{2mc^2}(E_{nl})^2-\frac{1}{2}mc^2=-\frac{m}{2\hbar^2(n')^2}\left(\frac{Ze^2E_{nl}}{mc^2}\right)^2 \tag{7}$$

其中

$$\boxed{n'=n_r+l'+1} \tag{8}$$

由式(7)容易解出

$$\boxed{\begin{aligned}E_{nl}&=mc^2\left[1+\left(\frac{Z\alpha}{n'}\right)^2\right]^{-1/2}\\&=mc^2\left[1+\frac{Z^2\alpha^2}{\left\{n_r+\frac{1}{2}+\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2-Z^2\alpha^2}\right\}^2}\right]^{-1/2}\end{aligned}} \tag{9}$$

此即所求能级公式.

由于 $\alpha=e^2/\hbar c\approx 1/137$，如

$$Z\alpha\ll l+\frac{1}{2}$$

可将式(6)和(9)展开成 α 的幂级数,得到

$$l' \approx l - \frac{Z^2\alpha^2}{2l+1} \tag{10}$$

$$n' = n_r + l' + 1 \approx n_r + l + 1 - \frac{Z^2\alpha^2}{2l+1} = n - \frac{Z^2\alpha^2}{2l+1} \tag{11}$$

$$\begin{aligned} E_{nl} &= mc^2\left[1+\left(\frac{Z\alpha}{n'}\right)^2\right]^{-1/2} \\ &\approx mc^2\left[1-\frac{1}{2}\left(\frac{Z\alpha}{n'}\right)^2+\frac{3}{8}\left(\frac{Z\alpha}{n'}\right)^4\right] \\ &\approx mc^2\left[1-\frac{Z^2\alpha^2}{2n^2}-\left(\frac{n}{l+\frac{1}{2}}-\frac{3}{4}\right)\frac{Z^4\alpha^4}{2n^4}\right] \end{aligned} \tag{12}$$

其中

$$n = n_r + l + 1 = 1,2,3,\cdots, \quad n_r, l = 0,1,2,\cdots$$

式(12)中第一项为粒子的静能,第二项相当于非相对论类氢离子的能级 E_n,第三项为相对论效应,相当于能级的精细结构. 能级 E_{nl} 与磁量子数(l_z 的量子数)无关,故能级 E_{nl} 的简并度为$(2l+1)$. 给定 n 后,l 的可能取值为

$$l = 0,1,2,\cdots,(n-1)$$

共 n 种取值,所以对应同一个 n 值的 E_{nl} 共包含 n 个能级,其高低次序和 l 的大小次序一致. 这组能级的总裂距为

$$\Delta E_n = E_{n,n-1} - E_{n0} \approx \frac{n-1}{\left(n-\frac{1}{2}\right)n^3} mc^2 Z^4\alpha^4 \tag{13}$$

其值约为由 Dirac 方程求得的相应裂距的 2 倍(参看题 18.9).

18.4　对于自由电子,求$(H, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{p})$的共同本征函数.

解　自由电子的 Hamilton 算符为

$$H = c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p} + mc^2\beta = c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\begin{bmatrix}0 & I\\ I & 0\end{bmatrix} + mc^2\begin{bmatrix}I & 0\\ 0 & -I\end{bmatrix} \tag{1}$$

其中 $\boldsymbol{p} = -\mathrm{i}\hbar\nabla$为动量算符,$I$ 为二阶单位矩阵,$\boldsymbol{\sigma}$ 为 Pauli 矩阵,

$$\sigma_x = \begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{bmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{bmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix} \tag{2}$$

$\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Sigma}$ 为自旋角动量算符,$\boldsymbol{\Sigma}$ 的定义为

$$\boldsymbol{\Sigma}=\boldsymbol{\sigma}\begin{bmatrix}I & 0\\ 0 & I\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{\sigma} & 0\\ 0 & \boldsymbol{\sigma}\end{bmatrix} \tag{3}$$

因此

$$\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{p}=\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\begin{bmatrix}I & 0\\ 0 & I\end{bmatrix} \tag{4}$$

由式(1)、(4)显然可见,(H、$\boldsymbol{p}$,$\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{p}$)互相对易,是守恒量完全集.

动量 $\boldsymbol{p}$ 的本征值写成

$$\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k}=(\hbar k_1,\hbar k_2,\hbar k_3) \tag{5}$$

由于(参看题 6.19)

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})^2=\boldsymbol{p}^2$$

$$(\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{p})^2=(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})^2\begin{bmatrix}I & 0\\ 0 & I\end{bmatrix}=\boldsymbol{p}^2\begin{bmatrix}I & 0\\ 0 & I\end{bmatrix}$$

所以 $\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{p}$ 的本征值为

$$\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{p}=\pm\hbar\,|\,\boldsymbol{k}\,|=\pm\hbar k \tag{6}$$

(H,$\boldsymbol{p}$,$\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{p}$)的共同本征函数显然可以表示成

$$\psi=\begin{pmatrix}u_1\\ u_2\\ u_3\\ u_4\end{pmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}=\begin{bmatrix}\varphi\\ \chi\end{bmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{7}$$

其中

$$\varphi=\begin{pmatrix}u_1\\ u_2\end{pmatrix},\quad \chi=\begin{pmatrix}u_3\\ u_4\end{pmatrix} \tag{8}$$

式(7)已经满足动量本征方程

$$\boldsymbol{p}\psi=\hbar\boldsymbol{k}\psi$$

将式(7)再代入 $\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{p}$ 的本征方程

$$\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{p}\psi=\lambda\psi,\quad \lambda=\pm\hbar k \tag{9}$$

可得

$$\begin{cases}\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{k}\varphi=\lambda\varphi\\ \hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{k}\chi=\lambda\chi\end{cases} \tag{10}$$

φ 和 χ 各自满足同样的方程，所以 φ 和 χ 只相差一个常系数. 先求 φ. 式(10)中，$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{k}$ 是二阶矩阵，具体表达式为

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{k}=\begin{pmatrix} k_3 & k_1-\mathrm{i}k_2 \\ k_1+\mathrm{i}k_2 & -k_3 \end{pmatrix} \tag{11}$$

因此式(10)的第一式即

$$\begin{bmatrix} k_3-\dfrac{\lambda}{\hbar} & k_1-\mathrm{i}k_2 \\ k_1+\mathrm{i}k_2 & -k_3-\dfrac{\lambda}{\hbar} \end{bmatrix}\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}=0$$

其解为

$$\lambda=\hbar k,\quad \frac{u_1}{u_2}=\frac{k+k_3}{k_1+\mathrm{i}k_2}=\frac{k_1-\mathrm{i}k_2}{k-k_3} \tag{12a}$$

$$\lambda=-\hbar k,\quad \frac{u_1}{u_2}=-\frac{k-k_2}{k_1+\mathrm{i}k_2}=-\frac{k_1-\mathrm{i}k_2}{k+k_3} \tag{12b}$$

再将式(7)代入能量本征方程 $H\psi=E\psi$，得到

$$\begin{cases}(E-mc^2)\varphi-c\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{k}\chi=0\\ -c\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{k}\varphi+(E+mc^2)\chi=0\end{cases} \tag{13}$$

上式存在非平庸解(φ,χ 不全为 0)的条件为

$$\begin{vmatrix} E-mc^2 & -c\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{k} \\ -\hbar c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{k} & E+mc^2 \end{vmatrix}=0 \tag{14}$$

即

$$E^2-m^2c^4-c^2\hbar^2k^2=0 \tag{14'}$$

因此，能量本征值为

$$E=\pm\sqrt{m^2c^4+c^2\hbar^2k^2}=E_\pm \tag{15}$$

其中 E_+ 相当于经典关系 $E=\sqrt{m^2c^4+c^2p^2}$，而 $E_-=-E_+$.

当 $E=E_\pm$，式(13)给出 φ 与 χ 关系如下：

$$\boxed{\begin{aligned}&\chi=\frac{c\hbar}{E+mc^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{k}\varphi\\ &\text{或}\quad \varphi=\frac{c\hbar}{E-mc^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{k}\chi\end{aligned}} \tag{16}$$

对于 $E=E_+$ 和 $E=E_-$，上式中 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{k}$ 均可取本征值 $\pm k$.

给定动量本征值 $\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k}$ 后，由式(12)和(15)，(16)就可得出($H,\boldsymbol{p},\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{p}$)的共同本征函数，共 4 种，如下所示(均未归一化).

(a) $\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k}, E=E_+, \boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{p}=\hbar k$

$$\psi=\begin{pmatrix} k+k_3 \\ k_1+\mathrm{i}k_2 \\ c\hbar k(k+k_3)/(mc^2+E_+) \\ c\hbar k(k_1+\mathrm{i}k_2)/(mc^2+E_+) \end{pmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$

或

$$\psi=\begin{pmatrix} k_1-\mathrm{i}k_2 \\ k-k_3 \\ c\hbar k(k_1-\mathrm{i}k_2)/(mc^2+E_+) \\ c\hbar k(k-k_3)/(mc^2+E_+) \end{pmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$

(b) $\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k}, E=E_+, \boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{p}=-\hbar k$

$$\psi=\begin{pmatrix} -(k-k_3) \\ k_1+\mathrm{i}k_2 \\ c\hbar k(k-k_3)/(mc^2+E_+) \\ -c\hbar k(k_1+\mathrm{i}k_2)/(mc^2+E_+) \end{pmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$

或

$$\psi=\begin{pmatrix} k_1-\mathrm{i}k_2 \\ -(k+k_3) \\ -c\hbar k(k_1-\mathrm{i}k_2)/(mc^2+E_+) \\ c\hbar k(k+k_3)/(mc^2+E_+) \end{pmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$

(c) $\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k}, E=E_-, \boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{p}=\hbar k$

$$\psi=\begin{pmatrix} -c\hbar k(k+k_3)/(mc^2+|E|) \\ -c\hbar k(k_1+\mathrm{i}k_2)/(mc^2+|E|) \\ k+k_3 \\ k_1+\mathrm{i}k_2 \end{pmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$

或

$$\psi=\begin{pmatrix}-c\hbar k(k_1-\mathrm{i}k_2)/(mc^2+|E|)\\-c\hbar k(k-k_3)/(mc^2+|E|)\\k_1-\mathrm{i}k_2\\k-k_3\end{pmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$

(d) $\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k}$, $E=E_-$, $\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{p}=-\hbar k$

$$\psi=\begin{pmatrix}-c\hbar k(k-k_3)/(mc^2+|E|)\\c\hbar k(k_1+\mathrm{i}k_2)/(mc^2+|E|)\\-(k-k_3)\\k_1+\mathrm{i}k_2\end{pmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$

或

$$\psi=\begin{pmatrix}c\hbar k(k_1-\mathrm{i}k_2)/(mc^2+|E|)\\-c\hbar k(k-k_3)/(mc^2+|E|)\\k_1-\mathrm{i}k_2\\-(k-k_3)\end{pmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$

注意，$E=E_+$ 时，ψ 中前两个分量(φ)为大分量，后两个分量(χ)为小分量；其中大分量相当于非相对论情形下 $\boldsymbol{p}$ 和 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}$ 的共同本征函数.

$E=E_-$ 时，ψ 中 φ 为小分量，χ 为大分量.

如 $\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k}$ 指向(θ,φ)方向，则以上各式中

$$k\pm k_3=k(1\pm\cos\theta),\quad k_1\pm\mathrm{i}k_2=k\sin\theta\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\varphi}\tag{17}$$

特别是式(12)可以表示成

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}=\lambda=\hbar k,\quad \frac{u_1}{u_2}=\frac{1+\cos\theta}{\sin\theta\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}}=\frac{\cos\dfrac{\theta}{2}}{\sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}}\tag{18}$$

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}=\lambda=-\hbar k,\quad \frac{u_1}{u_2}=-\frac{\sin\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}}{1+\cos\theta}=-\frac{\sin\dfrac{\theta}{2}}{\cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}}$$

请将这结果和题 6.12 参照比较.

18.5　对于满足 Dirac 方程的粒子，求总角动量 $\boldsymbol{J}^2$，J_z 以及 $\hat{K}$、α_r 的共同本征函数.

解　以 $\boldsymbol{l}$ 表示轨道角动量算符，$\boldsymbol{\sigma}$ 表示 2×2Pauli 矩阵. 在 Pauli-Dirac 表象中，

各算符为

$$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{l}+\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Sigma}=\boldsymbol{l}+\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\boldsymbol{\sigma} & 0\\ 0 & \boldsymbol{\sigma}\end{pmatrix} \tag{1}$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{J}^2&=\boldsymbol{l}^2+\frac{3}{4}\hbar^2+\hbar\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{l}\\ &=\boldsymbol{l}^2+\frac{3}{4}\hbar^2+\hbar\begin{pmatrix}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l} & 0\\ 0 & \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}\end{pmatrix}\end{aligned} \tag{2}$$

$$\hbar\hat{K}=\beta(\hbar+\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{l})=\begin{pmatrix}\hbar+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l} & 0\\ 0 & -\hbar-\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}\end{pmatrix} \tag{3}$$

$$\alpha_r=\frac{1}{r}\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{r}=\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\begin{pmatrix}0 & \boldsymbol{\sigma}\\ \boldsymbol{\sigma} & 0\end{pmatrix}=\frac{1}{r}\begin{pmatrix}0 & \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}\\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r} & 0\end{pmatrix} \tag{4}$$

不难证明,$\boldsymbol{J}$、$\hat{K}$、α_r 互相对易,因此 $\boldsymbol{J}^2$、J_z、$\hat{K}$、α_r 互相对易. 设它们的共同本征函数为

$$\psi=\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix},\quad \varphi=\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix},\quad \chi=\begin{pmatrix}\psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix} \tag{5}$$

算符 $\boldsymbol{J}$、$\hat{K}$ 的宇称为偶,α_r 的宇称为奇,$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}$ 的宇称亦为奇,由于

$$\alpha_r\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}=\frac{1}{r}\begin{pmatrix}0 & \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}\\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}=\frac{1}{r}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}\begin{pmatrix}\chi\\ \varphi\end{pmatrix} \tag{6}$$

因此,φ 和 χ 的宇称应该相反,显然,φ 和 χ 可由题 6.33 中的 $\phi^A_{jm_j}$ 和 $\phi^B_{jm_j}$ 构成,它们是

$$\phi^A_{jm_j}=\frac{1}{\sqrt{2l+1}}\begin{pmatrix}\sqrt{l+m+1}\,\mathrm{Y}_{lm}\\ \sqrt{l-m}\,\mathrm{Y}_{lm+1}\end{pmatrix} \tag{7a}$$

$$\phi^B_{jm_j}=\frac{1}{\sqrt{2l+3}}\begin{pmatrix}-\sqrt{l-m+1}\,\mathrm{Y}_{l+1m}\\ \sqrt{l+m+2}\,\mathrm{Y}_{l+1m+1}\end{pmatrix} \tag{7b}$$

二者均为($\boldsymbol{J}^2$,J_z)的二分量本征函数,本征值为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{J}^2&=j(j+1)\hbar^2,\quad j=l+\frac{1}{2}\\ J_z&=m_j\hbar,\quad m_j=m+\frac{1}{2}\end{aligned} \tag{8}$$

它们也是 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}$ 的本征函数，即

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}\phi^{A}_{jm_j} &= l\hbar\phi^{A}_{jm_j} = \left(j-\frac{1}{2}\right)\hbar\phi^{A}_{jm_j}\\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}\phi^{B}_{jm_j} &= -(l+2)\hbar\phi^{B}_{jm_j} = -\left(j+\frac{3}{2}\right)\hbar\phi^{B}_{jm_j}\end{aligned} \tag{9}$$

因此，如取

$$\psi = \begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}C_1\phi^{A}_{jm_j}\\ C_2\phi^{B}_{jm_j}\end{pmatrix}$$

就有

$$\hat{K}\psi = \left(j+\frac{1}{2}\right)\psi$$

利用题 6.33 结果，还可得到

$$\alpha_r\psi = \sigma_r\begin{pmatrix}\chi\\ \varphi\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}C_2\sigma_r\phi^{B}_{jm_j}\\ C_1\sigma_r\phi^{A}_{jm_j}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-C_2\phi^{A}_{jm_j}\\ -C_1\phi^{B}_{jm_j}\end{pmatrix}$$

如取 $C_1=C_2=1$，就有 $\alpha_r\psi=-\psi$

如取 $C_1=-C_2=1$，就有 $\alpha_r\psi=\psi$

类似地，如取

$$\psi = \begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}C_1\phi^{B}_{jm_j}\\ C_2\phi^{A}_{jm_j}\end{pmatrix}$$

就有

$$\hat{K}\psi = -\left(j+\frac{1}{2}\right)\psi$$

当 $C_1=C_2=1$，就有 $\alpha_r\psi=-\psi$

当 $C_1=-C_2=1$，就有 $\alpha_r\psi=\psi$

总结一下，$(\boldsymbol{J}^2, J_z, \hat{K}, \alpha_r)$ 的共同本征函数有以下几种类型：

1.
$$\begin{aligned}&\varphi=\phi^{A}_{jm_j},\quad \chi=\phi^{B}_{jm_j}\\ &\hat{K}=j+\frac{1}{2},\quad \alpha_r=-1\end{aligned} \tag{10}$$

2.
$$\begin{aligned}&\varphi=\phi^{A}_{jm_j},\quad \chi=-\phi^{B}_{jm_j}\\ &\hat{K}=j+\frac{1}{2},\quad \alpha_r=1\end{aligned} \tag{11}$$

3.
$$\varphi=\phi^{B}_{jm_j},\quad \chi=\phi^{A}_{jm_j} \tag{12}$$
$$\hat{K}=-\left(j+\frac{1}{2}\right),\quad \alpha_r=-1$$

4.
$$\varphi=\phi^{B}_{jm_j},\quad \chi=-\phi^{A}_{jm_j} \tag{13}$$
$$\hat{K}=-\left(j+\frac{1}{2}\right),\quad \alpha_r=1$$

以上四种波函数,$\boldsymbol{J}^2$ 本征值均为 $j(j+1)\hbar^2$,J_z 本征值均为 $m_j\hbar$. 如再考虑波函数的径向部分,φ 和 χ 还可以乘一个共同的径向波函数 $R(r)$.

如不管 α_r,则$(\boldsymbol{J}^2,J_z,\hat{K})$的共同本征函数只需分成两种类型:

a
$$\psi=\begin{pmatrix}\phi^{A}_{jm_j}f(r)\\ \phi^{B}_{jm_j}g(r)\end{pmatrix},\quad \hat{K}=j+\frac{1}{2} \tag{14}$$

b
$$\psi=\begin{pmatrix}\phi^{B}_{jm_j}f(r)\\ \phi^{A}_{jm_j}g(r)\end{pmatrix},\quad \hat{K}=-\left(j+\frac{1}{2}\right) \tag{15}$$

$f(r)$和 $g(r)$是任意径向函数,前者属于 φ,后者属于 χ.

18.6 电子在原子核(电荷 Ze)的 Coulomb 场中运动,求束缚态能级($0<E<mc^2$)以及$(H,\hat{K},\boldsymbol{J}^2,J_z)$的共同本征函数.

解 Hamilton 算符为
$$H=c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+mc^2\beta-\frac{Ze^2}{r} \tag{1}$$
其中
$$\boldsymbol{p}=-\mathrm{i}\hbar\nabla$$
$$\boldsymbol{\alpha}=\begin{pmatrix}0 & \boldsymbol{\sigma}\\ \boldsymbol{\sigma} & 0\end{pmatrix},\quad \beta=\begin{pmatrix}I & 0\\ 0 & -I\end{pmatrix} \tag{2}$$
$\boldsymbol{\sigma}$ 和 I 为二阶 Pauli 矩阵和单位矩阵. 令
$$\alpha_r=\boldsymbol{\alpha}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}=\boldsymbol{\sigma}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\begin{pmatrix}0 & I\\ I & 0\end{pmatrix}=\sigma_r\begin{pmatrix}0 & I\\ I & 0\end{pmatrix} \tag{3}$$
$$\hbar\hat{K}=\beta(\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{l}+\hbar)=(\hbar+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l})\begin{pmatrix}I & 0\\ 0 & -I\end{pmatrix} \tag{4}$$
其中 $\boldsymbol{l}$ 为轨道角动量算符,$\hbar\boldsymbol{\Sigma}/2$ 为自旋角动量算符,即

$$\boldsymbol{\Sigma}=\boldsymbol{\sigma}\begin{pmatrix}I & 0\\ 0 & I\end{pmatrix} \tag{5}$$

利用 $\boldsymbol{\alpha}$、β、$\boldsymbol{\Sigma}$ 的代数关系，可将式(1)化成①

$$H=c\alpha_r\hat{p}_r+\mathrm{i}\hbar c\,\frac{1}{r}\alpha_r\hat{K}\beta+mc^2\beta-\frac{Ze^2}{r} \tag{6}$$

其中 $\hat{p}_r$ 为径向动量算符，

$$\hat{p}_r=\frac{1}{r}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}-\mathrm{i}\hbar)=-\mathrm{i}\hbar\left(\frac{1}{r}+\frac{\partial}{\partial r}\right) \tag{7}$$

如再定义总角动量算符

$$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{l}+\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Sigma}=\left(\boldsymbol{l}+\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}\right)\begin{pmatrix}I & 0\\ 0 & I\end{pmatrix} \tag{8}$$

可以证明 H、$\hat{K}$、$\boldsymbol{J}^2$、J_z 互相对易. 它们的本征值为

$$\boxed{\begin{aligned}&\boldsymbol{J}^2=j(j+1)\hbar^2,\quad j=\frac{1}{2},\frac{3}{2},\cdots\\ &J_z=m_j\hbar,\quad m_j=j,j-1,\cdots,(-j)\\ &\hat{K}=K=\pm\left(j+\frac{1}{2}\right)=\pm1,\pm2,\cdots\end{aligned}} \tag{9}$$

$H=E$，待定.

根据上题，$(H、\hat{K}、\boldsymbol{J}^2、J_z)$的共同本征函数可分两种类型：

(a)　　$K=j+\frac{1}{2}$

$$\psi=\begin{bmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \psi_3\\ \psi_4\end{bmatrix}=\begin{pmatrix}\phi^A_{jm_j}f(r)\\ \phi^B_{jm_j}g(r)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\phi^A_{jm_j}\ \dfrac{F(r)}{r}\\ \mathrm{i}\phi^B_{jm_j}\ \dfrac{G(r)}{r}\end{pmatrix} \tag{10a}$$

(b)　　$K=-\left(j+\frac{1}{2}\right)$

$$\psi=\begin{bmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \psi_3\\ \psi_4\end{bmatrix}=\begin{pmatrix}\phi^B_{jm_j}f(r)\\ \phi^A_{jm_j}g(r)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\phi^B_{jm_j}\ \dfrac{F(r)}{r}\\ \mathrm{i}\phi^A_{jm_j}\ \dfrac{G(r)}{r}\end{pmatrix} \tag{10b}$$

---

① 参看曾谨言. 量子力学. 卷Ⅱ. 北京：科学出版社，1997. §9.5.

其中令

$$f(r)=\frac{F(r)}{r},\quad g(r)=\mathrm{i}\frac{G(r)}{r} \tag{11}$$

是为了运算方便. $\phi^{A}_{jm_j}$ 和 $\phi^{B}_{jm_j}$ 是二分量的($\boldsymbol{J}^2$, J_z)的本征函数(θ,φ 的函数,与 r 无关). 利用题 6.33 得到的结果

$$\sigma_r\phi^{A}_{jm_j}=-\phi^{B}_{jm_j},\quad \sigma_r\phi^{B}_{jm_j}=-\phi^{A}_{jm_j} \tag{12}$$

容易验证以下各式[以式(10a)中的波函数为例,式(10b)的结果类似.]

$$\alpha_r\begin{pmatrix}\phi^{A}_{jm_j}F(r)\\ \mathrm{i}\phi^{B}_{jm_j}G(r)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-\mathrm{i}\phi^{A}_{jm_j}G(r)\\ -\phi^{B}_{jm_j}F(r)\end{pmatrix}$$

$$\alpha_r\beta\begin{pmatrix}\phi^{A}_{jm_j}F(r)\\ \mathrm{i}\phi^{B}_{jm_j}G(r)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\mathrm{i}\phi^{A}_{jm_j}G(r)\\ -\phi^{B}_{jm_j}F(r)\end{pmatrix}$$

这些结果等价于不考虑波函数的(θ,φ)部分而令

$$\alpha_r\begin{pmatrix}F(r)\\ G(r)\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}-\mathrm{i}G(r)\\ \mathrm{i}F(r)\end{pmatrix},\text{即 }\alpha_r\to\begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{pmatrix}$$

将式(10)代入能量本征方程

$$H\psi=E\psi$$

并利用公式

$$\hat{p}_r\frac{F(r)}{r}=-\mathrm{i}\hbar\frac{1}{r}\frac{dF}{dr}$$

即得 $\boldsymbol{F}(r)$、$G(r)$的联立方程:

$$\begin{cases}\dfrac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}r}-\dfrac{K}{r}F=\left(\dfrac{mc^2+E}{\hbar c}+\dfrac{\alpha Z}{r}\right)G & \text{(13a)}\\[2ex] \dfrac{\mathrm{d}G}{\mathrm{d}r}+\dfrac{K}{r}G=\left(\dfrac{mc^2-E}{\hbar c}-\dfrac{\alpha Z}{r}\right)F & \text{(13b)}\end{cases}$$

其中 $\alpha=e^2/\hbar c\approx 1/137$,为精细结构常数.

下面先研究在奇点 $r=0,\infty$附近 F 和 G 的行为.

$r\to\infty$,式(13)可近似取为

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}r}\approx\frac{mc^2+E}{\hbar c}G,\quad \frac{\mathrm{d}G}{\mathrm{d}r}\approx\frac{mc^2-E}{\hbar c}F$$

因此,

$$\frac{\mathrm{d}^2F}{\mathrm{d}r^2}\approx\frac{m^2c^4-E^2}{\hbar^2c^2}F$$

$$\frac{\mathrm{d}^2G}{\mathrm{d}r^2}\approx\frac{m^2c^4-E^2}{\hbar^2c^2}G$$

可见，物理上允许的 F、G 的渐近行为是

$$r\to\infty,\quad F、G\sim \mathrm{e}^{-\frac{\sqrt{m^2c^4-E^2}}{\hbar c}r} \tag{14}$$

$r\to0$，由式(13)易见 F、G 应属同级大小，即

$$F\to C_1r^s,\quad G\to C_2r^s \tag{15}$$

代入式(13)，得到

$$\begin{cases}(s-K)C_1-\alpha ZC_2=0\\ \alpha ZC_1+(s+K)C_2=0\end{cases} \tag{16}$$

C_1、C_2 不能全为 0，因此必须

$$\begin{vmatrix}s-K & -\alpha Z\\ \alpha Z & s+K\end{vmatrix}=0$$

由此解出

$$s=\pm\sqrt{K^2-\alpha^2Z^2}$$

为了保证电子在 $r\sim0$ 附近出现概率是有限的，当 $r\to0$，$(F^2+G^2)r$ 必须$\to0$，即 $s>-\frac{1}{2}$；为了保证势能$(-Ze^2/r)$平均值是有限值，当 $r\to0$，(F^2+G^2)必须$\to0$，即 $s>0$. 因此 s 应取正值：

$$\boxed{s=\sqrt{K^2-\alpha^2Z^2}=\sqrt{\left(j+\frac{1}{2}\right)^2-\alpha^2Z^2}} \tag{17}$$

引入无量纲变量

$$\rho=2r\frac{\sqrt{m^2c^4-E^2}}{\hbar c} \tag{18}$$

根据以上分析，可令

$$\begin{aligned}F(r)&=\sqrt{mc^2+E}[u(\rho)+v(\rho)]\rho^s\mathrm{e}^{-\rho/2}\\ G(r)&=\sqrt{mc^2-E}[u(\rho)-v(\rho)]\rho^s\mathrm{e}^{-\rho/2}\end{aligned} \tag{19}$$

其中 u、v 均可表示成 ρ 的正幂级数. 引入这个变换后，可将式(13)变成合流超几何方程. 将式(18)、(19)代入式(13)，并将二式合并，经过化简，得到

$$\rho v'+(s-\alpha Z\lambda E)v=(K+\alpha Z\lambda mc^2)u \tag{20a}$$

$$\rho u'+[(s+\alpha Z\lambda E)-\rho]u=(K-\alpha Z\lambda mc^2)v \tag{20b}$$

其中

$$\lambda = (m^2c^4 - E^2)^{-1/2} \tag{21}$$

将式(20a)再微分一次,并利用式(20a)和(20b)消去 u,可得 v 的二阶微分方程. 如微分式(20b)并消去 v,可得 u 的方程. 结果是

$$\rho v'' + (2s+1-\rho)v' - (s-\alpha Z\lambda E)v = 0 \tag{22a}$$

$$\rho u'' + (2s+1-\rho)u' - (s+1-\alpha Z\lambda E)u = 0 \tag{22b}$$

这正是合流超几何方程,这种方程的标准形式是

$$\rho W'' + (c-\rho)W' - aW = 0 \tag{23}$$

当 c 不是负整数时,式(23)的两个独立解为

$$W_1 = F(a,c,\rho) \equiv 1 + \frac{a}{c}\rho + \frac{a(a+1)}{2!c(c+1)}\rho^2 + \frac{a(a+1)(a+2)}{3!c(c+1)(c+2)}\rho^3 + \cdots,$$

$$W_2 = \rho^{1-c}F(a-c+1,2-c,\rho)$$

式(22a)相当于 $a=s-\alpha Z\lambda E, c=2s+1$,符合物理要求的解为 W_1,即

$$v = F(s-\alpha Z\lambda E, 2s+1, \rho) \tag{24}$$

[式(22a)的另一解,即 W_2,当 $\rho\to 0$ 时,$W_2\to\rho^{-2s}$,结果导致 $F,G\to\rho^{-s}$,相当于 s 取负值的解,应予舍弃.]

当合流超几何级数 $F(a,c,\rho)$ 为无穷级数时,其渐近行为和 e^{ρ} 相似,即 $v\sim e^{\rho}$,结果导致 $F,G\sim e^{\rho/2}$,为了避免 $\rho\to\infty$ 处,F,G 发散,由式(24)表示的 $v(\rho)$ 必须中断成 n' 次多项式,$n'=0,1,2\cdots$,其条件是

$$s-\alpha Z\lambda E = s - \frac{\alpha ZE}{\sqrt{m^2c^4-E^2}} = -n' \tag{25}$$

由此容易解出

$$E = mc^2\left[1+\frac{\alpha^2Z^2}{(s+n')^2}\right]^{-\frac{1}{2}}, \quad n' = 0,1,2,\cdots \tag{26}$$

式(24)可以重新表示成

$$v(\rho) = F(-n', 2s+1, \rho) \tag{24'}$$

代入式(20a),并利用递推公式

$$\rho\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}F(a,c,\rho) = aF(a+1,c,\rho) - aF(a,c,\rho)$$

即得

$$\left[K+(s+n')\frac{mc^2}{E}\right]u=-n'F(1-n',2s+1,\rho) \tag{27}$$

只要左端的常数因子不为 0，用它除上式，即得 $u(\rho)$，这和式(22b)所给结果一致. 注意 $n'=0$ 时 $u=0$，而 n' 为正整数时，u 为 $(n'-1)$ 次多项式.

讨论　1°　能级 E 取决于量子数 j 和 n'，后者即径向量子数，将式(17)代入式(26)，即得

$$\boxed{E=mc^2\left\{1+\left[\frac{\alpha Z}{n'+\sqrt{\left(j+\frac{1}{2}\right)^2-\alpha^2Z^2}}\right]^2\right\}^{-1/2}} \tag{28}$$

可以记为 $E_{n'j}$ 或 E_{nj}，n 为“主量子数”，即

$$\boxed{n=n'+|K|=n'+j+\frac{1}{2}} \tag{29}$$

当给定 n 后，j 和 n' 的不同组合给出一组数值很接近的能级，它们的差异是由于公式中 α^2Z^2 的存在而造成的，这就是能级的精细结构. n、n'、j 的取值为

$$\boxed{\begin{aligned}&n=1,2,3,\cdots\\&n'=0,1,\cdots,n-1\\&j=n-\frac{1}{2},n-\frac{3}{2},\cdots,\frac{1}{2}\end{aligned}} \tag{30}$$

2°　波函数取决于四个量子数：n'(或 n)、j、m_j、K. 当 $n'\neq0$，$u(\rho)$、$v(\rho)$ 可由式(24′)、(27)决定，这时与每个 j 值相应，K 有两种值，即 $K=\pm\left(j+\frac{1}{2}\right)$，$m_j$ 则有 $(2j+1)$ 种取值. 因此能级 E_{nj} $(n'\neq0)$ 的简并度为 $(4j+2)$.

当 $n'=0$，由式(25)、(26)易得

$$\alpha Z\lambda E=s,\quad \alpha Z\lambda mc^2=|K|=j+\frac{1}{2}$$

如 K 取正值，即 $K=j+\frac{1}{2}$，只需取

$$v=1,\quad u=0 \tag{31}$$

即可满足式(20)及(22). 但如 K 取负值，即

$$K=-\left(j+\frac{1}{2}\right)$$

这时，式(31)之选择已经不能符合式(20b). 但如 $u\neq0$，它的函数形式只能由式

(22b)决定,即

$$u \sim F(1,2s+1,\rho)$$

这是无穷级数,当 $\rho\to\infty$,$u\sim e^{\rho}$,不合物理要求.

由此可知,$n'=0$ 时,K 必须取正值,$K=j+\frac{1}{2}$,亦即 $j=n-\frac{1}{2}$(最大值)时,能级 E_{nj} 的简并度为 $(2j+1)=2n$.

3° 主量子数 n 对应的状态总数为

$$N_n = 2n + \sum_{|K|=1}^{n-1} 4 \mid K \mid = 2n^2 \tag{32}$$

这个结果和非相对论的 Schrödinger 理论(计及自旋自由度)给出的结果一致.

4° 波函数 ψ 的 4 个分量中,前两个分量(即含有 F 的分量)为大分量,后两个分量(即含有 G 的分量)为小分量. 大分量相当于非相对论近似下的波函数,因此 $F(r)/r$ 相当于非相对论近似下的径向波函数. 大分量所含球谐函数(Y_{lm})的阶 l,常被用作谱项的标记. 由式(10)可知

$$K = j+\frac{1}{2}, \quad l = j-\frac{1}{2}$$

$$K = -\left(j+\frac{1}{2}\right), \quad l = j+\frac{1}{2}$$

故正 K 值相当于非相对论近似下 $\boldsymbol{l}$,s"平行"的情况,负 K 值相当于 $\boldsymbol{l}$,$\boldsymbol{s}$"反平行"的情况.

以 $n=3$ 为例,各量子数的组合及谱项表记如下:

n	n'	j	K	l	谱项
3	0	5/2	3	2	$3d_{5/2}$
3	1	3/2	−2	2	$3d_{3/2}$
3	1	3/2	2	1	$3p_{3/2}$
3	2	1/2	−1	1	$3p_{1/2}$
3	2	1/2	1	0	$3s_{1/2}$

基态:$n=1$,$n'=0$,$j=\frac{1}{2}$,$K=1$,$l=0$,谱项 $1s_{1/2}$.

18.7 证明在非相对论极限下,Dirac 方程的一级近似即为 Pauli 方程.

解 电子在电磁场中运动时,Dirac 方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = H\psi \tag{1}$$

其中

$$H = c\alpha \cdot \left(\boldsymbol{p} + \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right) - e\phi + mc^2\beta \tag{2}$$

其中 $\boldsymbol{A}$、ϕ 为电磁场的矢势和标势. α、β 为 4×4 矩阵：

$$\beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \quad \alpha = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \tag{3}$$

I 为 2×2 单位矩阵，$\boldsymbol{\sigma}$ 为 2×2Pauli 矩阵.

式(1)中，ψ 为 4 分量波函数. 令

$$\psi = \begin{bmatrix} \varphi \\ \chi \end{bmatrix} \mathrm{e}^{mc^2 t/\mathrm{i}\hbar} \tag{4}$$

φ 和 χ 均为 2 分量波函数. 上式中列入因子 $\mathrm{e}^{mc^2 t/\mathrm{i}\hbar}$，是为了从能量中去掉静止质量项 mc^2. 将式(4)代入式(1)，得到

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t}\varphi = c\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\boldsymbol{p} + \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\chi - e\phi\varphi \tag{5a}$$

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t}\chi = c\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\boldsymbol{p} + \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi - e\phi\chi - 2mc^2\chi \tag{5b}$$

由于能量中已经不包含静止质量项，在非相对论极限下，各算符代表的数量级为

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sim E \sim mv^2$$

$$e\phi \sim E \sim mv^2$$

$$c\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\boldsymbol{p} + \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right) \sim cmv \sim mv^2 \cdot \frac{c}{v}$$

由此可见，φ 是波函数 ψ 的“大分量”，χ 为“小分量”，其数量级比为

$$\chi/\varphi \sim v/c$$

作为一级近似，可略去式(5b)两项小项，而取

$$\boxed{\chi \approx \frac{1}{2mc}\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\boldsymbol{p} + \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi} \tag{6}$$

代入式(5a)，即得

$$\boxed{\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t}\varphi = \frac{1}{2m}\left[\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\boldsymbol{p} + \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\right]^2 \varphi - e\phi\varphi} \tag{7}$$

利用公式

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{a})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{b}) = \boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} + \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b})$$

可得

$$\left[\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\right]^2=\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\left[\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\times\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\right]$$

$$=\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+\frac{\mathrm{i}e}{c}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{p})$$

$$=\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+\frac{e\hbar}{c}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\nabla\times\boldsymbol{A})$$

$$=\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+\frac{e\hbar}{c}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}\tag{8}$$

$\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$ 为磁场,代入式(7),即得

$$\boxed{\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\varphi-e\phi\varphi+\frac{e\hbar}{2mc}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})\varphi}\tag{9}$$

此即 Pauli 方程. 上式中最后一项代表电子的内禀磁矩

$$\boldsymbol{\mu}_s=-\frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}=-\frac{e}{mc}\boldsymbol{s}\tag{10}$$

和外磁场的作用.

18.8 试从描述电子在电磁场中运动的 Dirac 方程出发,导出反映概率守恒的连续性方程,并求其在非相对论极限下的表现形式,和从 Pauli 方程得到的结果比较.

解 电子在电磁场中运动时,Dirac 方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=\left[c\boldsymbol{\alpha}\cdot\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)+mc^2\beta-e\phi\right]\psi\tag{1}$$

左乘 ψ^+,并将算符 $\boldsymbol{p}$ 明显写出,得到

$$\mathrm{i}\hbar\psi^+\frac{\partial}{\partial t}\psi=-\mathrm{i}\hbar c\psi^+\boldsymbol{\alpha}\cdot(\nabla\psi)+\psi^+(e\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{A}+mc^2\beta-e\phi)\psi$$

取共轭,即得

$$-\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial\psi^+}{\partial t}\right)\psi=\mathrm{i}\hbar c(\nabla\psi^+)\cdot\boldsymbol{\alpha}\psi+\psi^+(e\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{\alpha}+mc^2\beta-e\phi)\psi$$

两式相减,即得

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi^+\psi)=-\mathrm{i}\hbar c[\psi^+\boldsymbol{\alpha}\cdot(\nabla\psi)+(\nabla\psi^+)\cdot\boldsymbol{\alpha}\psi]$$

$$=-\mathrm{i}\hbar c\,\nabla\cdot(\psi^+\boldsymbol{\alpha}\psi)$$

亦即

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}+\nabla\cdot \boldsymbol{j}=0 \tag{2}$$

其中

$$\rho=\psi^{+}\psi,\quad \boldsymbol{j}=c\psi^{+}\boldsymbol{\alpha}\psi \tag{3}$$

ρ 为概率密度，$\boldsymbol{j}$ 为概率流密度. 式(2)、(3)形式上和自由电子的公式相同.

令

$$\psi=\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}mc^{2}t/\hbar} \tag{4}$$

则

$$\rho=\varphi^{+}\varphi+\chi^{+}\chi \tag{5}$$

$$\boldsymbol{j}=c(\varphi^{+}\boldsymbol{\sigma}\chi+\chi^{+}\boldsymbol{\sigma}\varphi) \tag{6}$$

其中 $\boldsymbol{\sigma}$ 为 2 阶 Pauli 矩阵，φ 及 χ 均为 2 分量波函数，φ 是 ψ 的大分量，χ 是 ψ 的小分量. 在非相对论极限下(见上题)，

$$\chi\approx\frac{1}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi \tag{7}$$

χ 的数量级为 φ 的 v/c 倍，因此，如略去 v^{2}/c^{2} 项，式(5)中可以略去$\chi^{+}\chi$，而成为

$$\rho\approx\varphi^{+}\varphi \tag{8}$$

将式(7)代入式(6)，有

$$c\varphi^{+}\boldsymbol{\sigma}\chi=\frac{1}{2m}\left[\varphi^{+}\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\varphi+\frac{e}{c}\varphi^{+}\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\varphi\right]$$

$$=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\varphi^{+}\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla)\varphi+\frac{e}{2mc}\varphi^{+}\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\varphi$$

由于∇和 $\boldsymbol{A}$ 均与 σ 对易，根据题 6.21，有下列公式：

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})=\boldsymbol{A}-\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{A}$$

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla)=\nabla-\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\times\nabla$$

因此

$$c\varphi^{+}\boldsymbol{\sigma}\chi=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\varphi^{+}(\nabla\varphi)-\frac{\hbar}{2m}\varphi^{+}\boldsymbol{\sigma}\times(\nabla\varphi)+\frac{e}{2mc}\varphi^{+}\boldsymbol{A}\varphi-\frac{\mathrm{i}e}{2mc}\varphi^{+}\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{A}\varphi \tag{9}$$

上式取共轭，即得

$$c\chi^{+}\boldsymbol{\sigma}\varphi=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}(\nabla\varphi^{+})\varphi+\frac{\hbar}{2m}(\nabla\varphi^{+})\times\boldsymbol{\sigma}\varphi+\frac{e}{2mc}\varphi^{+}\boldsymbol{A}\varphi+\frac{\mathrm{i}e}{2mc}\varphi^{+}\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{A}\varphi \tag{9'}$$

将式(9)、(9′)代入式(6),并注意到

$$\boldsymbol{\sigma}\times(\nabla\varphi)=-\nabla\times(\boldsymbol{\sigma}\varphi)$$

即得

$$\begin{aligned}\boldsymbol{j}&=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}[(\nabla\varphi^{+})\varphi-\varphi^{+}(\nabla\varphi)]+\frac{e}{mc}\varphi^{+}\boldsymbol{A}\varphi\\&\quad+\frac{\hbar}{2m}[(\nabla\varphi^{+})\times(\boldsymbol{\sigma}\varphi)+\varphi^{+}(\nabla\times\boldsymbol{\sigma}\varphi)]\\&=\frac{1}{2m}\left[\varphi^{+}\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi+\text{c. c.}\right]+\frac{\hbar}{2m}\nabla\times(\varphi^{+}\boldsymbol{\sigma}\varphi)\\&=\mathrm{Re}\left[\frac{1}{m}\varphi^{+}\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi\right]+\frac{\hbar}{2m}\nabla\times(\varphi^{+}\boldsymbol{\sigma}\varphi)\end{aligned}\tag{10}$$

如再乘以$(-e)$(电子电荷),即得电流密度公式:

$$\boxed{\begin{aligned}\boldsymbol{j}_{e}&=-\frac{e}{2m}\left[\varphi^{+}\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi+\text{c. c.}\right]-\frac{e\hbar}{2m}\nabla\times(\varphi^{+}\boldsymbol{\sigma}\varphi)\\&=\mathrm{Re}\left[-\frac{e}{m}\varphi^{+}\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\varphi\right]+c\nabla\times(\varphi^{+}\boldsymbol{\mu}\varphi)\end{aligned}}\tag{11}$$

其中$\frac{1}{m}\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)$是非相对论极限下的速度算符,而

$$\boxed{\boldsymbol{\mu}=-\frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}=-\frac{e}{mc}\boldsymbol{s}}\tag{12}$$

是电子的内禀磁矩.式(11)中$\varphi^{+}\boldsymbol{\mu}\varphi$相当于经典电动力学中的磁化强度(磁矩密度),$c\nabla\times(\varphi^{+}\boldsymbol{\mu}\varphi)$相当于磁化电流密度.

如所周知,如果从 Pauli 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^{2}\varphi-e\phi\varphi+\frac{e\hbar}{2mc}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})\varphi$$

出发建立连续性方程,所得电流密度刚好等于式(11)中第一项,由此可见,Dirac 方程所包含的物理内容比 Pauli 方程更丰富,更全面.

18.9 求定态 Dirac 方程在非相对论极限下的二级近似,确定电子在中心力场中运动时 Hamilton 算符的具体形式.

解 电子在中心力场中运动,可取矢势$\boldsymbol{A}=0$,而

$$\phi=\phi(r),\quad -e\phi(r)=V(r)\tag{1}$$

定态 Dirac 方程为

$$[c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+mc^{2}\beta+V(r)]\psi=E\psi\tag{2}$$

令

$$E = mc^2 + E', \quad \psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \tag{3}$$

式(2)成为

$$c\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{p}\chi = (E' - V)\varphi \tag{4a}$$

$$c\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{p}\varphi = (2mc^2 + E' - V)\chi \tag{4b}$$

φ 为波函数的大分量，χ 为小分量. 将式(4b)写成

$$\chi = (2mc^2 + E' - V)^{-1} c\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{p}\varphi$$

代入式(4a)，得到

$$\frac{1}{2m}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{p})\left(1 + \frac{E' - V}{2mc^2}\right)^{-1}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{p})\varphi = (E' - V)\varphi \tag{5}$$

至此是严格的. 作为非相对论极限下的一级近似，取

$$\left(1 + \frac{E' - V}{2mc^2}\right)^{-1} \sim 1$$

再利用公式$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{p})^2 = \boldsymbol{p}^2$，即得定态 Schrödinger 方程

$$\left(\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2 + V\right)\varphi \approx E'\varphi \tag{6}$$

作为二级近似，取

$$\left(1 + \frac{E' - V}{2mc^2}\right)^{-1} \approx 1 + \frac{V - E'}{2mc^2} \tag{7}$$

这时式(5)变成

$$\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V - E'\right)\varphi + \frac{1}{4m^2c^2}[(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{p})V(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{p}) - E'\boldsymbol{p}^2]\varphi = 0 \tag{8}$$

其中

$$V\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{p} = \boldsymbol{\sigma} \cdot (V\boldsymbol{p}) = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{p})V + \mathrm{i}\hbar\boldsymbol{\sigma}(\nabla V) \tag{9}$$

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{p})V(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{p}) &= (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{p})^2 V + \mathrm{i}\hbar(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{p})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla V) \\ &= \boldsymbol{p}^2 V + \mathrm{i}\hbar\{\boldsymbol{p} \cdot (\nabla V) + \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma} \cdot [\boldsymbol{p} \times (\nabla V)]\} \\ &= \boldsymbol{p}^2 V + \mathrm{i}\hbar\left\{(\nabla V) \cdot \boldsymbol{p} - \mathrm{i}\hbar(\nabla^2 V) + \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma} \cdot \left[\boldsymbol{p} \times \left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right)\right]\right\} \\ &= \boldsymbol{p}^2 V + \hbar^2\left(\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\frac{\partial}{\partial r} + \nabla^2 V\right) + \hbar\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{l}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\end{aligned} \tag{10}$$

其中 $\boldsymbol{l} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$ 为轨道角动量算符. 将式(10)代入式(8)，得到

$$\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V-E'\right)\varphi+\frac{1}{4m^2c^2}\boldsymbol{p}^2(V-E')\varphi$$
$$+\frac{1}{4m^2c^2}\left[\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}+\hbar^2\nabla^2V+\hbar^2\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\frac{\partial}{\partial r}\right]\varphi=0 \tag{11}$$

和式(6)比较,上式中后两项是与 c 有关的修正项,代表自旋及相对论效应,对于第二项,可再用式(6)作近似,从而得到

$$\boxed{\left[\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(r)-\frac{\boldsymbol{p}^4}{8m^3c^2}+\frac{\hbar}{4m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}+\frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\left(\nabla^2V+\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\frac{\partial}{\partial r}\right)\right]\varphi=E'\varphi} \tag{12}$$

其中第三项为动能的相对论修正,第四项为自旋轨道耦合作用. 第五、六项没有经典解释.

上式虽然可以解出能级,但左端最后一项不是厄米算符,所以上式还不能作为 Hamilton 算符的非相对论近似.

问题的关键首先在于:非相对论近似下的波函数 Ψ(两个分量)是否即是 Dirac 波函数 ψ 的"大分量" φ? 作为波函数,应保证总概率守恒,即

$$\langle\Psi\mid\Psi\rangle=\langle\psi\mid\psi\rangle=\langle\varphi\mid\varphi\rangle+\langle\chi\mid\chi\rangle \tag{13}$$

准确到 v^2/c^2,可取

$$\langle\chi\mid\chi\rangle\approx\left\langle\varphi\left|\left(\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{2mc}\right)^2\right|\varphi\right\rangle=\left\langle\varphi\left|\frac{\boldsymbol{p}^2}{4m^2c^2}\right|\varphi\right\rangle$$
$$\langle\psi\mid\psi\rangle\approx\left\langle\varphi\left|\left(1+\frac{\boldsymbol{p}^2}{4m^2c^2}\right)\right|\varphi\right\rangle \tag{14}$$

由此可见,非相对论近似波函数 Ψ 和 Dirac 波函数的大分量 φ 是有区别的,关系为(作为一种可能的选择)

$$\Psi\approx\left(1+\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right)\varphi,\quad\varphi\approx\left(1-\frac{\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}\right)\Psi \tag{15}$$

将式(15)代入式(12),略去 $1/c^4$ 项,即得 Ψ 满足的方程:

$$\left[\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V-\left(\frac{1}{8}+\frac{1}{16}\right)\frac{\boldsymbol{p}^4}{m^3c^2}+\frac{(E'-V)\boldsymbol{p}^2}{8m^2c^2}+\frac{\hbar}{4m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}\right.$$
$$\left.+\frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\left(\nabla^2V+\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\frac{\partial}{\partial r}\right)\right]\Psi=E'\Psi \tag{16}$$

利用公式

$$[V,\boldsymbol{p}^2]=[V,\boldsymbol{p}]\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\cdot[V,\boldsymbol{p}]$$
$$=\mathrm{i}\hbar(\nabla V)\cdot\boldsymbol{p}+\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}\cdot(\nabla V)$$

$$= \hbar^2(\nabla^2 V) + 2\hbar^2 \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\frac{\partial}{\partial r} \tag{17}$$

并取

$$\frac{\boldsymbol{p}^2}{m^2c^2}(E' - V)\Psi \approx \frac{\boldsymbol{p}^4}{2m^3c^2}\Psi$$

式(16)可以化成

$$\boxed{\left[\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V - \frac{\boldsymbol{p}^4}{8m^3c^2} + \frac{\hbar}{4m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l} + \frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla^2 V\right]\Psi = E'\Psi} \tag{18}$$

这正是我们希望得到的非相对论极限下的定态波动方程，左端括弧中五项即是Hamilton算符的表达式，注意它是厄米的. 后面三项是相对论修正和自旋效应，数量级相同，为前两项的 v^2/c^2 倍，这三项决定能级的精细结构①.

如引入自旋角动量算符 $\boldsymbol{s}=\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$，可将自旋轨道耦合能写成

$$\frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{l} = \xi(r)\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{l} \tag{19}$$

如电子在原子核的 Coulomb 场中运动，$V=-Ze^2/r$，则

$$\zeta(r) = \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} = \frac{Ze^2}{2m^2c^2r^3} \tag{20}$$

$$\frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla^2 V = -\frac{\hbar^2 Ze^2}{8m^2c^2}\nabla^2\frac{1}{r} = \frac{\pi Ze^2\hbar^2}{2m^2c^2}\delta(\boldsymbol{r}) \tag{21}$$

后一项称为“接触作用势”. 这是一种相对论量子效应，没有经典对应. 注意，除 s 态($l=0$)外，“接触”势实际上不起作用. 自旋轨道耦合能则与此相反，它对 s 态不起作用，仅对 $l\neq 0$ 的态有意义.

18.10　同上题，用微扰论计算类氢离子能级的精细结构，并和由 Dirac 方程得到的能级公式作比较.

解　根据上题，Hamilton 算符可以写成

$$H = H_0 + H' \tag{1}$$

其中

$$H_0 = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} \tag{2}$$

---

① 参看 A. A. Соколов 等. 量子力学原理及其应用. 上海：上海科学技术出版社，1983. § 19.

$$H'=-\frac{\boldsymbol{p}^4}{8m^3c^2}+\frac{Ze^2}{2m^2c^2}\frac{1}{r^3}\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{l}+\frac{\pi Ze^2\hbar^2}{2m^2c^2}\delta(\boldsymbol{r})$$
$$=H_{mv}+H_{sl}+H_D \tag{3}$$

("接触"作用势也称 Darwin 项.)H'可以当作微扰.

以 $\boldsymbol{s}$、$\boldsymbol{l}$、$\boldsymbol{J}$ 表示电子的自旋、轨道、总角动量. 如以$(H_0,\boldsymbol{l}^2,\boldsymbol{J}^2,J_z)$的共同本征态 Ψ_{nljm_j} 作为微扰论的零级波函数,零级近似能量仅取决于主量子数 n,而与 l、j、m_j 无关.

$$E_n^{(0)}=-\frac{mc^2Z^2\alpha^2}{2n^2},\quad n=1,2,3,\cdots \tag{4}$$

其中

$$\alpha=\frac{e^2}{\hbar c}\approx\frac{1}{137}(\text{精细结构常数})$$

能级 $E_n^{(0)}$ 的简并度为 $2n^2$.

由于 H'和$(\boldsymbol{l}^2、\boldsymbol{J}^2,J_z)$对易,在同能级各简并态之间,$H'$只有对角矩阵元才可能不等于 0. 因此能级的一级微扰修正等于 H'在 Ψ_{nljm_j} 态中的平均值. 下面分别计算 H'中三项的平均值. Ψ_{nljm_j} 可以表示成

$$\Psi_{nljm_j}=R_{nl}(r)\phi_{ljm_j}(\theta,\varphi,s_z) \tag{5}$$

其中 ϕ_{ljm_j} 为$(\boldsymbol{l}^2,\boldsymbol{J}^2,J_z)$的共同本征态.

$\langle H_{mv}\rangle$的计算见题 11.12,它仅和 n、l 有关,结果为

$$\langle H_{mv}\rangle_{nljm_j}=-mc^2Z^4\alpha^4\frac{1}{2n^4}\left(\frac{n}{l+\frac{1}{2}}-\frac{3}{4}\right) \tag{6}$$

自旋-轨道耦合能的计算见题 5.8,结果为($l\neq0$ 时)

$$\langle H_{sl}\rangle_{nljm_j}=\frac{Ze^2}{2m^2c^2}\frac{\hbar^2}{2}\left[j(j+1)-l(l+1)-\frac{3}{4}\right]\langle r^{-3}\rangle$$
$$=mc^2Z^4\alpha^4\frac{1}{4n^3l\left(l+\frac{1}{2}\right)(l+1)}\times\begin{cases}l, & j=l+\frac{1}{2}\\ -(l+1), & j=l-\frac{1}{2}\end{cases} \tag{7}$$

"接触"势的平均值为

$$\langle H_D\rangle_{nljm_j}=\frac{\pi Ze^2\hbar^2}{2m^2c^2}\langle nljm_j\mid\delta(\boldsymbol{r})\mid nljm_j\rangle$$
$$=\begin{cases}\frac{\pi Ze^2\hbar^2}{2m^2c^2}\mid\psi_{n00}(0)\mid^2, & l=0\\ 0, & l\neq0\end{cases} \tag{8}$$

再利用题 5.7 和 5.8 结果，可得

$$\langle H_D\rangle_{l=0}=\frac{Z^2e^4}{4mc^2}\langle r^{-2}\rangle=mc^2Z^4\alpha^4\frac{1}{2n^3} \tag{9}$$

注意，$l=0$ 时，$\langle H_{sl}\rangle=0$，式(7)仅当 $l>0$ 才成立. 但如将式(7)形式地推广到 $l=0$ 的情形$\left(\text{取 } j=l+\frac{1}{2}=\frac{1}{2}\right)$，刚好就是式(9). 在这个意义上，可以将“接触”势形式地当作 $l=0$ 时的自旋轨道耦合能. 总之，对于 $l=0,1,2,\cdots$，均有以下结果：

$$\langle H_{sl}+H_D\rangle_{nljm_j}=mc^2Z^4\alpha^4\frac{1}{4n^3\left(j+\frac{1}{2}\right)}\times\begin{cases}\dfrac{1}{j}, & j=l+\dfrac{1}{2}\\[2ex] -\dfrac{1}{j+1}, & j=l-\dfrac{1}{2}\end{cases} \tag{10}$$

将式(6)中的 l 改用 j 来表示，式(6)可以改写成

$$\langle H_{mv}\rangle_{nljm_j}=mc^2Z^4\alpha^4\left[\frac{3}{8n^4}-\frac{1}{2n^3}\times\begin{cases}\dfrac{1}{j}, & j=l+\dfrac{1}{2}\\[2ex] \dfrac{1}{j+1}, & j=l-\dfrac{1}{2}\end{cases}\right] \tag{6'}$$

将式(10)、(6′)相加，即得

$$\begin{aligned}\langle H'\rangle_{nljm_j}&=mc^2Z^4\alpha^4\left[\frac{3}{8n^4}-\frac{1}{n^3(2j+1)}\right]\\&=-mc^2Z^4\alpha^4\frac{1}{2n^4}\left(\frac{n}{j+1/2}-\frac{3}{4}\right)\end{aligned} \tag{11}$$

此即能级的一级微扰修正. 和 $E_n^{(0)}$ 相加，即得

$$\boxed{\begin{aligned}E_{nj}&=E_n^{(0)}+\langle H'\rangle\\&=-mc^2\frac{Z^2\alpha^2}{2n^2}\cdot\left[1+\frac{Z^2\alpha^2}{n^2}\left(\frac{n}{j+1/2}-\frac{3}{4}\right)\right]\end{aligned}} \tag{12}$$

能级的 j 简并已经消除，l 和 m_j 简并依然存在. 给定 n 后，

$$j+\frac{1}{2}=1,2,\cdots,n$$

共 n 种取值，故 $E_n^{(0)}$ 分裂成 n 条能级，j 大者在上，j 小者在下，这组能级的总裂距为

$$\Delta E_n=E_{n,n-\frac{1}{2}}-E_{n,\frac{1}{2}}=\frac{mc^2Z^4\alpha^4(n-1)}{2n^4} \tag{13}$$

这已为实验证实.

由 Dirac 方程求得的能级精确解为($E>0$)①

$$E_{nj}=mc^2\left\{1+\frac{Z^2\alpha^2}{\left[n'+\sqrt{\left(j+\frac{1}{2}\right)^2-Z^2\alpha^2}\right]^2}\right\}^{-1/2} \tag{14}$$

$$n=n'+j+\frac{1}{2}=1,2,3\cdots,\qquad n'=0,1,2,\cdots$$

如将式(14)按 α 的幂次展开,并减去 mc^2,所得结果到 α^4 为止和式(12)完全一致.

18.11 对于自旋 $\hbar/2$ 的三维各向同性揩振子,试计算能级的相对论-自旋修正.

解 谐振子的运动应满足 Dirac 方程,Hamilton 算符为

$$H=c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+mc^2\beta+V(r) \tag{1}$$

其中

$$V(r)=\frac{1}{2}m\omega^2r^2 \tag{2}$$

根据题 18.9,在非相对论近似下,H 可以化成

$$H=H_0+H' \tag{3}$$

其中

$$H_0=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(r)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\frac{1}{2}m\omega^2r^2 \tag{4}$$

$$H'=-\frac{\boldsymbol{p}^4}{8m^3c^2}+\frac{\hbar}{4m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}+\frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla^2V(r) \tag{5}$$

将式(2)代入式(5),即得

$$\begin{aligned}H'&=-\frac{\boldsymbol{p}^4}{8m^3c^2}+\frac{\hbar\omega^2}{4mc^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}+\frac{3\hbar^2\omega^2}{8mc^2}\\&=H_{mv}+H_{sl}+\frac{3\hbar^2\omega^2}{8mc^2}\end{aligned} \tag{6}$$

其中第一项为动能的相对论修正,第二项为自旋-轨道耦合能,最后的常数项是对零点能的相对论修正. H'可以视为微扰.

能级的零级近似为 H_0 的本征值:

---

① 参看曾谨言. 量子力学. 卷Ⅱ. 北京:科学出版社,1997. §9.5.

$$E_N^{(0)} = \left(N+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega, \quad N=0,1,2,\cdots \tag{7}$$

如取零级波函数为$(H_0, \boldsymbol{l}^2, \boldsymbol{J}^2, J_z)$的共同本征函数$\psi_{Nljm_j}$，则$H'$已经“对角化”，$H'$的平均值就是能级的一级微扰修正.

计算H_{mv}的平均值时，可以利用能量本征方程

$$H_0\psi_N = E_N^{(0)}\psi_N$$

即

$$\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\psi_N = [E_N^{(0)} - V(r)]\psi_N$$

因此

$$\langle H_{mv}\rangle = -\frac{1}{2mc^2}\left\langle \frac{\boldsymbol{p}^4}{4m^2}\cdot\right\rangle$$

$$= -\frac{1}{2mc^2}\langle\psi_N \mid (E_N^{(0)} - V)^2 \mid \psi_N\rangle$$

$$= -\frac{1}{2mc^2}[E_N^{(0)2} - 2E_N^{(0)}\langle V\rangle + \langle V^2\rangle]$$

对于谐振子，$\langle V\rangle = \frac{1}{2}E_N^{(0)}$，因此

$$\langle H_{mv}\rangle = -\frac{1}{2mc^2}\langle V^2\rangle = -\frac{m\omega^4}{8c^2}\langle r^4\rangle$$

根据题 5.11 的计算，

$$\langle r^4\rangle = \frac{1}{8}[3(2\dot{N}+3)^2 - (2l+3)(2l-1)]\frac{\hbar^2}{m^2\omega^2}$$

因此

$$\langle H_{mv}\rangle = -\frac{1}{64}[3(2N+3)^2 - (2l+3)(2l-1)]\frac{\hbar^2\omega^2}{mc^2} \tag{8}$$

上述ψ_{Nljm_j}也是$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}$的本征函数，本征值为

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l} = \begin{cases} l\hbar, & j = l+\frac{1}{2} \\ -(l+1)\hbar, & j = l-\frac{1}{2}, l\neq 0 \end{cases}$$

因此，自旋轨道耦合能为

$$\langle H_{sl}\rangle = \frac{\hbar^2\omega^2}{4mc^2}\times\begin{cases} l, & j = l+\frac{1}{2} \\ -(l+1), & j = l-\frac{1}{2}, l\neq 0 \end{cases} \tag{9}$$

式(8)加式(9),再加$\frac{3\hbar\omega^2}{8mc^2}$,就是能级的相对论-自旋修正.

对于基态$\left(N=l=0,j=\frac{1}{2}\right)$,能级修正为$-\frac{3}{32}\frac{\hbar^2\omega^2}{mc^2}$.

18.12 氢原子由能级E_{nj}跃迁至$E_{n'j'}(n'<n)$,求自发跃迁速率公式及选择定则.(只考虑电偶极跃迁.)

解 在非相对论问题中,电子和光波的电偶极作用取为

$$H'=e\mathscr{E}(t)\cdot\boldsymbol{r} \tag{1}$$

由$\psi_n\to\psi_{n'}$自发跃迁速率为①

$$A_{n\to n'}=\frac{4}{3}\frac{e^2\omega^3}{\hbar c^3}\mid\boldsymbol{r}_{n'n}\mid^2 \tag{2}$$

其中$\omega=(E_n-E_{n'})/\hbar$.

按照相对论的Dirac方程,光波(频率ω)对电子的作用势为

$$H'=e\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{A}(t) \tag{3}$$

光波的电、磁场为

$$\mathscr{E}(t)=-\frac{1}{c}\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}=\frac{\mathrm{i}\omega}{c}\boldsymbol{A},\quad \boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$$

因此,式(3)可以写成

$$H'=\frac{ec}{\mathrm{i}\omega}\mathscr{E}(t)\cdot\boldsymbol{\alpha} \tag{3'}$$

和式(1)相比,相当于式(1)中作下列替换:

$$\boldsymbol{r}\to\frac{c}{\mathrm{i}\omega}\boldsymbol{\alpha}$$

因此,自发跃迁速率公式可在式(2)中作同样替换而得出,

$$A_{n\to n'}=\frac{4e^2\omega}{3\hbar c}\mid\boldsymbol{\alpha}_{n'n}\mid^2 \tag{4}$$

如再利用公式

$$H=c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+mc^2\beta+V(r)$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{r}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{r},H]=c\boldsymbol{\alpha} \tag{5}$$

则

---

① 参看曾谨言.量子力学.卷Ⅰ.北京:科学出版社,1997. §12.3.3.

$$c\boldsymbol{\alpha}_{n'n}=\left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\right)_{n'n}=\mathrm{i}\omega_{n'n}\boldsymbol{r}_{n'n}=-\mathrm{i}\omega\boldsymbol{r}_{n'n} \tag{6}$$

因此式(2)和(4)等价.

如以$(H,\hat{K},\boldsymbol{J}^2,J_z)$的共同本征函数$\psi_{nKjm_j}$作为束缚态波函数(见18.6题),利用式(2)或(4),以及题13.7结果,容易求得选择定则为

(a) K,K' 同号

$$\Delta j=\pm1,\quad \Delta K=\pm1,\quad \Delta m_j=0,\pm1 \tag{7}$$

(b) K,K' 异号

$$\Delta j=0,\quad \Delta|K|=0,\quad \Delta m_j=0,\pm1 \tag{8}$$

前者相应于题13.7中$\phi^A\to\phi^A$和$\phi^B\to\phi^B$型,后者相应于题13.7中$\phi^A\to\phi^B$和$\phi^B\to\phi^A$型.