物理学核心课程习题精讲系列

量子力学习题解答

柯善哲　沈　瑞　江兴方 / 主编

科学出版社

物理学核心课程习题精讲系列

量子力学习题解答

柯善哲　沈　瑞　江兴方　主编



科学出版社

北京

内 容 简 介

本书是柯善哲等所编《量子力学》(2005 年，科学出版社)的习题解答，由于有些章节习题较少，进行了适当地补充. 这些习题主要是南京大学物理学系量子力学教学中使用的，其内容包括量子力学的实验基础、量子力学的基本概念、量子力学的数学表述、单粒子问题、含时问题的近似方法、定态问题的近似方法、自旋、多粒子系的量子力学、散射等.

本书可作为大学本科物理类专业和应用物理类专业量子力学课程的教学参考书.

图书在版编目（CIP）数据

量子力学习题解答 / 柯善哲，沈瑞，江兴方主编. —北京：科学出版社，2020.3

物理学核心课程习题精讲系列

ISBN 978-7-03-062099-6

Ⅰ. ①量… Ⅱ. ①柯…②沈…③江… Ⅲ. ①量子力学-高等学校-题解 Ⅳ. ①O413.1-44

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2019）第 181061 号

责任编辑：昌 盛 龙嫚嫚 / 责任校对：杨聪敏

责任印制：张 伟 / 封面设计：华路天然

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

北京捷迅佳彩印刷有限公司 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2020 年 3 月第 一 版 开本：720×1000 B5

2020 年 3 月第一次印刷 印张：22

字数：444 000

定价：69.00 元

（如有印装质量问题，我社负责调换）

前　言

本书主要是对柯善哲、肖福康、江兴方合编的《量子力学》(普通高等教育“十一五”国家级规划教材)书中的习题作解答. 这些习题原是南京大学的量子力学教学中所使用和长期积累的. 所有参加过该课程教学的老师, 不管是主讲还是辅导, 都对本书的形成和发展作过贡献, 所以这本习题解答真正是集体智慧的结晶. 特别是这些习题的选定和解答, 大部分经过当时课程组长蔡建华教授的审查. 历届做习题的学生所提的意见, 也提高了本书的质量.

我们认为, 独立做习题是学习的重要环节, 对于培养创新能力十分重要, 不可或缺, 决不能以看习题解答代替自己做习题, 所以, 以往我们并不赞成给学生看习题解答, 就是怕有些学生会抄题解来代替独立做作业. 但在教学实践中, 我们也察觉到即使给学生上了习题课, 仍有不少学生在做量子力学习题时有困难, 成为其负担过重的主要原因. 当前, 由于课时较紧, 习题课和讨论课已经难以合理安排, 甚至在课堂上举例也有时间上的困难, 在这种情况下, 让学生自学习题解答辅导书, 作为教学过程中的一个环节, 似乎是有必要的, 在此基础上, 再进入独立做习题, 可能困难会减少一些, 收获可能会大一些. 这是我们编写《量子力学习题解答》的动机, 这种认识是否正确, 有待于实践的检验.

本书第一章量子力学的实验基础、第二章量子力学的基本概念、第三章量子力学的数学表述、第四章单粒子问题、第五章含时问题的近似方法由柯善哲教授解答, 第六章定态问题的近似方法、第七章自旋、第八章多粒子系的量子力学由沈瑞教授解答, 第九章散射由江兴方教授和柯善哲教授合作解答, 全书由于顺利教授、吴盛骏教授审校.

我们再次强调, 衷心希望同学们不要以抄习题解答来代替独立完成作业.

由于编解者水平有限, 错误和不妥在所难免, 敬请专家和读者不吝赐教.

柯善哲　谨识

2018 年 1 月 17 日

量子力学与量子计算机

量子计算机是一种以量子力学为基本原理的新型计算架构，在模拟复杂量子体系以及开展高效并行计算等方面，有着重要的应用价值和光明的发展前景. 量子力学课程正是设计量子计算机的基础. 这里我们特别针对量子计算机基本特点作简要介绍，以期为正在学习量子力学的同学展示量子力学的作用和用途，引领大家学好量子力学.

为什么要发展量子计算机？从 1970 年到 2005 年，正如摩尔定律预测的那样，每 18 个月集成电路上可容纳的元器件数目约增加 1 倍，计算机性能也相应地提升 1 倍，但是在 2005 年以后，这种趋势开始放缓，极其微小的集成电路面临着散热等问题的考验. 如果按这个趋势继续发展，当集成电路的尺寸接近于原子尺度时，电子的运动不再遵循经典物理学规律，不确定性关系和量子噪声等一系列量子现象将彻底让经典计算模型不再可靠. **因此，通过缩小单个器件尺寸来提高计算机性能的方式已经没法持续下去，我们迫切需要一种全新的计算构架方式.** 传统的计算机全名是电子计算机，其运算的基本数据单位是比特. 作为一种全新的计算构架，量子计算机则是以量子比特作为基本单位，一个量子比特是具有 2 维希尔伯特子空间的一个量子自由度，可以由一个微观粒子或宏观量子体系来实现. 1 个量子比特可以同时处于多个状态，而传统的电子计算机中的比特只能处于 0 和 1 的一种状态. 量子计算机可以对众多量子比特的叠加态并行操作. 通过对量子比特大量自由度进行精确控制，量子计算机在计算性能上突破了经典计算机的瓶颈. 量子计算机在大数因数分解和线性方程组求解等问题上可以实现比目前最好的经典算法更有效的量子算法，使得计算的时间复杂度呈指数下降. 当前广泛使用的 RSA 经典加密体系就是基于大数因数分解这个经典难题，但可以被量子计算机轻易破解. 量子计算机在遍历搜索等问题上也有着经典计算机无可比拟的优越性. 如何制造实现量子计算原理的物理设备，乃至实现超越传统计算机的计算能力，成为当前量子计算机领域的重要问题. 2017 年年底美国 IBM 公司宣布推出全球首款 50 个物理量子比特的量子计算机原型机，量子计算机已经越来越接近实用的临界点，量子计算机领域成为当前科学研究的一个热点领域.

实现量子计算机代替传统的电子计算机还需要经过艰难的历程，还需要克服环境噪声，比特错误、可容错的普适量子纠缠等等一系列问题. 当一系列技术问题逐步被解决之后，我们有可能制造出强大的量子计算机，并将利用这一新型手段革命性地改变我们的认识自然和模拟计算的能力.

目　录

前言
量子力学与量子计算机
第一章　量子力学的实验基础 …… 1
第二章　量子力学的基本概念 …… 45
第三章　量子力学的数学表述 …… 82
第四章　单粒子问题 …… 160
第五章　含时问题的近似方法 …… 188
第六章　定态问题的近似方法 …… 223
第七章　自旋 …… 254
第八章　多粒子系的量子力学 …… 286
第九章　散射 …… 304

第一章　量子力学的实验基础

量子力学的实验基础在于确认微观客体具有波粒二象性，一方面它们按波动方式运动传播，在适当的条件下产生干涉、衍射图样；另一方面它们按粒子方式和其他物质相互作用.

1.1　若自由电子的动能为 3eV(电子伏特)，求其德布罗意波长.

分析　电子的多晶衍射等实验证明了电子具有波动性，利用德布罗意关系可以求出德布罗意波长.

解　德布罗意关系

$$E=\hbar\omega\ ,\quad p=\hbar k=h\frac{2\pi}{\lambda}\ , \tag{1.1-1}$$

所以

$$\lambda=\frac{h}{p}. \tag{1.1-2}$$

题设自由粒子的动能为 $T=3\text{eV}$，因动能不大，可用非相对论动能公式 $T=\dfrac{p^2}{2\mu}$，μ 为电子静质量，则 $p=\sqrt{2\mu T}$，代入式(1.1-2)得

$$\lambda=\frac{h}{\sqrt{2\mu T}}=\frac{6.62\times10^{-27}\,\text{erg}\cdot\text{s}}{\sqrt{2\times9.1\times10^{-28}\,\text{g}\times3\times1.6\times10^{-12}\,\text{erg}}}=7.1\text{Å}\qquad\text{(cmgs 制)}$$

$$\lambda=\frac{h}{\sqrt{2\mu T}}=\frac{6.62\times10^{-34}\,\text{J}\cdot\text{s}}{\sqrt{2\times9.1\times10^{-31}\,\text{kg}\times3\times1.6\times10^{-19}\,\text{J}}}$$

$$=\frac{6.62\times10^{-34}\,\text{kg}\cdot\text{m}\cdot\text{m}\cdot\text{s}^{-2}\cdot\text{s}}{\sqrt{2\times9.1\times10^{-31}\,\text{kg}\times3\times1.6\times10^{-19}\,\text{kg}\cdot\text{m}\cdot\text{m}\cdot\text{s}^{-2}}}$$

$$=7.1\times10^{-10}\,\text{m}=0.71\text{nm}\qquad\text{(kgms 制)}$$

答　该自由电子的德布罗意波长为 0.71nm.

1.2　两光子在一定条件下可以转化为正、负电子对. 如果两光子能量相等，若要实现这种转化，问光子的波长是多少?

分析　圆频率为 ω 的光子 $\hbar\tilde{\omega}$，有一份能量 $E=\hbar\omega$. 能量 E 与动量 p 的关系为

$$E^2=p^2c^2+\mu^2c^4. \tag{1.2-1}$$

式中，μ 为粒子的静止质量.

解　相同能量的两个光子 $\hbar\tilde{\omega}$，在一定条件下转化为正、负电子对，

$$\hbar\tilde{\omega}+\hbar\tilde{\omega}\rightarrow e^{+}+e^{-}. \tag{1.2-2}$$

该过程能量守恒，有 $2\hbar\omega=\sqrt{p_{e^+}^2c^2+\mu^2c^4}+\sqrt{p_{e^-}^2c^2+\mu^2c^4}$，当 $p_{e^+}=p_{e^-}=0$ 时，光子的最低能量为 $\hbar\omega_{\min}=\mu c^2$，即光子的最小圆频率为 $\omega_{\min}=\dfrac{\mu c^2}{\hbar}$，相应的最大的波长为

$$\lambda_{\max}=\frac{2\pi c}{\omega_{\min}}=\frac{2\pi c\hbar}{\mu c^2}=\frac{h}{\mu c}=2.4\times10^{-2}\text{Å}=0.002\,4\text{nm}.$$

$\lambda_{\max}$ 在数值上等于康普顿波长.

答　光子的波长就是康普顿波长为 0.002 4nm.

1.3　钾和钨的光电效应红限 $\lambda_{红限}$ 分别为 6 000Å 和 2 700Å，它们的脱出功分别是多少？

分析　光电效应方程为

$$h\omega=T+\Phi. \tag{1.3-1}$$

式中 T 是动能. 6 000Å = 600nm，2 700Å = 270nm；光的频率与波长的乘积为光速.

解　脱出功 $\Phi=\hbar\omega_{\min}=\dfrac{2\pi c\hbar}{\lambda_{红限}}=\dfrac{ch}{\lambda_{红限}}$，式中 $\omega_{\min}$ 是 $\lambda_{红限}$ 相应的圆频率.

对于钾，$\Phi_K=\dfrac{3\times10^{10}\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}\times6.62\times10^{-27}\text{erg}\cdot\text{s}}{6\,000\times10^{-8}\text{cm}}=3.3\times10^{12}\text{erg}=3.3\times10^{5}\text{J}$；

对于钨，$\Phi_W=\dfrac{3\times10^{10}\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}\times6.62\times10^{-27}\text{erg}\cdot\text{s}}{2\,700\times10^{-8}\text{cm}}=7.3\times10^{12}\text{erg}=7.3\times10^{5}\text{J}$.

答　钾和钨的脱出功分别是 3.3×10^5J 和 7.3×10^5J.

1.4　求波长为 5 000Å 的绿光光子的质量、动量和能量.

分析　由光波长就可以求得光频率、能量、动量，利用能量 E 与动量大小 p 的关系就可以求出等价的质量.

解　波长为 5 000Å 的绿光光子的圆频率为

$$\omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi c}{\lambda} = \frac{6.28\times 3\times 10^{10}\,\mathrm{cm\cdot s^{-1}}}{5\,000\times 10^{-8}\,\mathrm{cm}} = 3.77\times 10^{15}\,\mathrm{s^{-1}}\ ;$$

相应的能量

$$E = \hbar\omega = 6.63\times 10^{-27}\,\mathrm{erg\cdot s}\times 3.77\times 10^{15}\,\mathrm{s^{-1}} = 3.96\times 10^{-12}\,\mathrm{erg} = 3.96\times 10^{-19}\,\mathrm{J}\ ;$$

光子的质量

$$\mu = \frac{E}{c^2} = \frac{\hbar\omega}{c^2} = \frac{3.96\times 10^{-12}\,\mathrm{erg}}{(3\times 10^{10}\,\mathrm{cm\cdot s^{-1}})^2} = \frac{3.96\times 10^{-19}\,\mathrm{kg\cdot m\cdot m\cdot s^{-2}}}{(3\times 10^{8}\,\mathrm{m\cdot s^{-1}})^2} = 4.4\times 10^{-36}\,\mathrm{kg}\ ;$$

光子的动量大小

$$p = \mu c = \frac{\hbar\omega}{c} = \frac{3.96\times 10^{-12}\,\mathrm{erg}}{3\times 10^{10}\,\mathrm{cm\cdot s^{-1}}} = \frac{3.96\times 10^{-19}\,\mathrm{kg\cdot m\cdot m\cdot s^{-2}}}{3\times 10^{8}\,\mathrm{m\cdot s^{-1}}} = 1.32\times 10^{-27}\,\mathrm{kg\cdot m\cdot s^{-1}}.$$

答　波长为 5 000Å 的绿光光子的质量为 $4.4\times 10^{-36}\,\mathrm{kg}$，动量为 $1.32\times 10^{-27}\,\mathrm{kg\cdot m\cdot s^{-1}}$，能量为 $3.96\times 10^{-19}\,\mathrm{J}$.

1.5　电子辐射的光波平均波长为 1.2×10^{4}Å，求每秒钟内 100W 灯泡辐射的光子数.

分析　电功率 $P = 100\,\mathrm{W}$，除以一个光子的能量 $\hbar\omega$，就得到每秒辐射的光子数.

解　光波长为 1.2×10^{4}Å 相应的圆频率

$$\omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi c}{\lambda} = \frac{6.28\times 3\times 10^{10}\,\mathrm{cm\cdot s^{-1}}}{1.2\times 10^{4}\times 10^{-8}\,\mathrm{cm}} = 1.57\times 10^{15}\,\mathrm{s^{-1}}\ ;$$

每秒钟内 100W 灯泡辐射的光子数

$$n = \frac{100\,\mathrm{W}}{\hbar\omega} = \frac{100\times 10^{7}\,\mathrm{erg\cdot s^{-1}}}{1.05\times 10^{-27}\,\mathrm{erg\cdot s}\times 1.57\times 10^{15}\,\mathrm{s^{-1}}} = 6.08\times 10^{20}\,\mathrm{s^{-1}}.$$

答　每秒钟内 100W 灯泡辐射的光子数为 6.08×10^{20} 个.

1.6　在康普顿效应中，假设光子的散射角为 $\frac{\pi}{2}$，求反冲电子的动能.

分析　康普顿效应示意图如图 1.6-1 所示，入射的光子方向为 $\boldsymbol{n}_0$，与散射的方向 $\boldsymbol{n}$ 成散射角 θ，散射过程满足

动量守恒：$\boldsymbol{p} = \frac{\hbar\omega_0}{c}\boldsymbol{n}_0 - \frac{\hbar\omega}{c}\boldsymbol{n}$，即 $\begin{cases} \frac{\hbar\omega_0}{c} = \frac{\hbar\omega}{c}\cos\theta + \mu v\cos\varphi \\ \frac{\hbar\omega}{c}\sin\theta = \mu v\sin\varphi \end{cases}$；　(1.6-1)

能量守恒：$\hbar\omega_0 + \mu_0 c^2 = \hbar\omega + \mu c^2$，　(1.6-2)

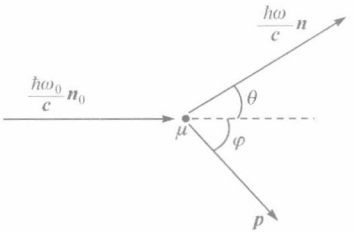

图 1.6-1　康普顿效应示意图

式中 μ_0 为电子的静止质量，$p=\mu v$，入射的光子波长为 $\lambda_0=\dfrac{2\pi c}{\omega_0}$，散射的光子波长为 $\lambda=\dfrac{2\pi c}{\omega}$，它们之间的光程差为

$$\Delta\lambda=\lambda-\lambda_0=\frac{h}{\mu_0 c}(1-\cos\theta). \tag{1.6-3}$$

解 1　利用式(1.6-3)，当 $\theta=\dfrac{\pi}{2}$ 时，$\lambda=\lambda_0+\dfrac{h}{\mu_0 c}$，由式(1.6-2)，得反冲电子的动能为

$$T=\mu c^2-\mu_0 c^2=\hbar\omega_0-\hbar\omega=\hbar\omega_0-\frac{\hbar 2\pi c}{\lambda}=\hbar\omega_0-\frac{hc}{\lambda_0+\dfrac{h}{\mu_0 c}}=h\omega_0-\frac{hc^2\mu_0}{\lambda_0\mu_0 c+h},$$

式中 $\omega_0=\dfrac{2\pi c}{\lambda_0}$，$\lambda_0=\dfrac{2\pi c}{\omega_0}$，

$$T=\hbar\omega_0-\frac{hc\mu_0 c}{\dfrac{2\pi c}{\omega_0}\mu_0 c+h}=\hbar\omega_0-\frac{\hbar\mu_0 c^2\omega_0}{\mu_0 c^2+\hbar\omega_0}$$

$$=\frac{\hbar\omega_0(\mu_0 c^2+\hbar\omega_0)-\hbar\mu_0 c^2\omega_0}{\mu_0 c^2+\hbar\omega_0}=\frac{\hbar^2\omega_0^2}{\hbar\omega_0+\mu_0 c^2}. \tag{1.6-4}$$

解 2　由题意，康普顿效应散射示意图如图 1.6-2 所示.

散射过程遵守

能量守恒：$\sqrt{c^2p^2+\mu_0^2c^4}=\mu_0c^2+\hbar\omega_0-\hbar\omega$；　(1.6-5)

动量守恒：$\boldsymbol{p}=\dfrac{\hbar\omega_0}{c}\boldsymbol{n}_0-\dfrac{\hbar\omega}{c}\boldsymbol{n}$；　(1.6-6)

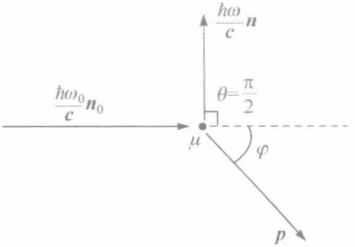

图 1.6-2　题设康普顿散射

注意　$p=\mu v=\dfrac{\mu_0 v}{\sqrt{1-\dfrac{v^2}{c^2}}}$，则

$$\sqrt{c^2p^2+\mu_0^2c^4}=\sqrt{c^2\left(\frac{\mu_0 v}{\sqrt{1-\dfrac{v^2}{c^2}}}\right)^2+\mu_0^2c^4}=\sqrt{\frac{\mu_0^2c^2v^2}{1-\dfrac{v^2}{c^2}}+\mu_0^2c^4}$$

$$=\sqrt{\frac{\mu_0^2c^2v^2+\mu_0^2c^4-\mu_0^2c^4\dfrac{v^2}{c^2}}{1-\dfrac{v^2}{c^2}}}=\sqrt{\frac{\mu_0^2c^4}{1-\dfrac{v^2}{c^2}}}=\frac{\mu_0c^2}{\sqrt{1-\dfrac{v^2}{c^2}}}=\mu c^2\ ,$$

故式(1.6-5)与式(1.6-2)完全一样.

由题意 $\boldsymbol{n}_0$ 方向与 $\boldsymbol{n}$ 方向垂直，故 $p^2=\boldsymbol{p}^2=\left(\dfrac{\hbar\omega_0}{c}\right)^2+\left(\dfrac{\hbar\omega}{c}\right)^2$，所以

$$\sqrt{c^2\left[\left(\frac{\hbar\omega_0}{c}\right)^2+\left(\frac{\hbar\omega}{c}\right)^2\right]+\mu_0^2c^4}=\mu_0c^2+\hbar\omega_0-\hbar\omega\ ,$$

$$c^2\left[\left(\frac{\hbar\omega_0}{c}\right)^2+\left(\frac{\hbar\omega}{c}\right)^2\right]+\mu_0^2c^4=(\mu_0c^2+\hbar\omega_0-\hbar\omega)^2\ ,$$

$$\begin{aligned}(\hbar\omega_0)^2+(\hbar\omega)^2+\mu_0^2c^4&=(\hbar\omega_0-\hbar\omega)^2+(\mu_0c^2)^2+2\mu_0c^2(\hbar\omega_0-\hbar\omega)\\&=(\hbar\omega_0)^2+(\hbar\omega)^2-2\hbar^2\omega_0\omega+(\mu_0c^2)^2+2\mu_0c^2(\hbar\omega_0-\hbar\omega)\ ,\end{aligned}$$

$\hbar\omega_0\omega=\mu_0c^2(\omega_0-\omega)$，$(\hbar\omega_0+\mu_0c^2)\omega=\mu_0c^2\omega_0$，即 $\omega=\dfrac{\mu_0c^2\omega_0}{\hbar\omega_0+\mu_0c^2}$，代入式(1.6-5)得反冲电子的动能为

$$T=\sqrt{c^2p^2+\mu_0^2c^4}-\mu_0c^2=\hbar\omega_0-\hbar\omega=\hbar\omega_0-\hbar\frac{\mu_0c^2\omega_0}{\hbar\omega_0+\mu_0c^2}$$

$$=\frac{\hbar\omega_0(\hbar\omega_0+\mu_0c^2)-\mu_0c^2\hbar\omega_0}{\hbar\omega_0+\mu_0c^2},$$

$$T=\frac{\hbar^2\omega_0^2}{\hbar\omega_0+\mu_0c^2}\ . \tag{1.6-7}$$

答　假设光子的散射角为 $\dfrac{\pi}{2}$，则反冲电子的动能为 $T=\dfrac{\hbar^2\omega_0^2}{\hbar\omega_0+\mu_0c^2}$.

1.7　在康普顿散射实验中，求反冲电子动量 $\boldsymbol{p}$ 与入射光子动量 $\hbar\boldsymbol{k}_0$ 之间的夹角 φ 与光子散射角 θ 之间的关系.

分析　康普顿效应示意图如图 1.7-1 所示，入射光子动量 $\hbar\boldsymbol{k}_0$ 的方向为 $\boldsymbol{n}_0$ 方向，$\hbar\boldsymbol{k}_0$ 的大小 $\hbar k_0=\hbar\dfrac{2\pi}{\lambda_0}=\hbar\omega_0$，入射光子的方向 $\boldsymbol{n}_0$ 与散射的方

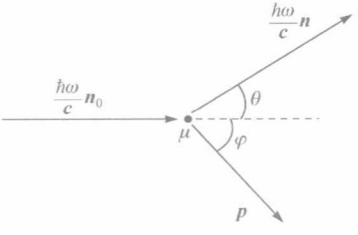

图 1.7-1　康普顿效应示意图

向 $\boldsymbol{n}$ 成散射角 θ，散射过程满足

$$\text{动量守恒：}\ \boldsymbol{p}=\frac{\hbar\omega_0}{c}\boldsymbol{n}_0-\frac{\hbar\omega}{c}\boldsymbol{n}\ ,\ \text{即}\begin{cases}\dfrac{\hbar\omega_0}{c}=\dfrac{\hbar\omega}{c}\cos\theta+p\cos\varphi\\[2ex]\dfrac{\hbar\omega}{c}\sin\theta=p\sin\varphi\end{cases};\tag{1.7-1}$$

$$\text{能量守恒：}\ \hbar\omega_0-\hbar\omega+\mu_0c^2=\sqrt{c^2p^2+\mu_0^2c^4}\ ,\tag{1.7-2}$$

式中 μ_0 为电子的静止质量. 由式(1.7-1)和式(1.7-2)即可求得反冲电子动量 $\boldsymbol{p}$ 与入射光子动量 $\hbar\boldsymbol{k}_0$ 之间的夹角 φ 与光子散射角 θ 之间的关系.

解　由式(1.7-2)得 $c^2p^2+\mu_0^2c^4=(\hbar\omega_0-\hbar\omega)^2+(\mu_0c^2)^2+2\mu_0c^2(\hbar\omega_0-\hbar\omega)$，

$$p^2=\left(\frac{\hbar\omega_0}{c}\right)^2+\left(\frac{\hbar\omega}{c}\right)^2-\frac{2\hbar^2\omega_0\omega}{c^2}+2\hbar\mu_0(\omega_0-\omega)\ ,\tag{1.7-3}$$

由式(1.7-1)得

$$p^2=\left(\frac{\hbar\omega_0}{c}-\frac{\hbar\omega}{c}\cos\theta\right)^2+\left(\frac{\hbar\omega}{c}\sin\theta\right)^2=\left(\frac{\hbar\omega_0}{c}\right)^2+\left(\frac{\hbar\omega}{c}\right)^2-2\frac{\hbar^2\omega_0\omega}{c^2}\cos\theta\ ,\tag{1.7-4}$$

比较式(1.7-3)和式(1.7-4)，得 $\mu_0(\omega_0-\omega)=\dfrac{\hbar\omega_0\omega}{c^2}(1-\cos\theta)$，$\dfrac{\omega_0-\omega}{\omega_0\omega}=\dfrac{1}{\omega}-\dfrac{1}{\omega_0}=\dfrac{\hbar}{\mu_0c^2}(1-\cos\theta)$，

$$\omega=\frac{\omega_0}{1+2\dfrac{\hbar\omega_0}{\mu_0c^2}\sin^2\dfrac{\theta}{2}}.\tag{1.7-5}$$

由式(1.7-1)得 $\cos\varphi=\dfrac{\dfrac{\hbar\omega_0}{c}-\dfrac{\hbar\omega}{c}\cos\theta}{p}$，$\sin\varphi=\dfrac{\dfrac{\hbar\omega}{c}\sin\theta}{p}$，$\cot\varphi=\dfrac{\dfrac{\hbar\omega_0}{c}-\dfrac{\hbar\omega}{c}\cos\theta}{\dfrac{\hbar\omega}{c}\sin\theta}$，

由式(1.7-5)代入得

$$\cot\varphi=\frac{1+2\dfrac{\hbar\omega_0}{\mu_0c^2}\sin^2\dfrac{\theta}{2}-\cos\theta}{\sin\theta}=\frac{2\left(1+\dfrac{\hbar\omega_0}{\mu_0c^2}\right)\sin^2\dfrac{\theta}{2}}{2\sin\dfrac{\theta}{2}\cos\dfrac{\theta}{2}}=\left(1+\frac{\hbar\omega_0}{\mu_0c^2}\right)\tan\frac{\theta}{2}$$

$$=\left(1+\frac{h}{\mu_0c\dfrac{c}{\nu_0}}\right)\tan\frac{\theta}{2}=\left(1+\frac{\lambda_c}{\lambda_0}\right)\tan\frac{\theta}{2}$$

式中 $\lambda_c=\dfrac{h}{\mu_0 c}$ 为康普顿波长，λ_0 为入射光波长.

答　反冲电子动量 $\boldsymbol{p}$ 与入射光子动量 $\hbar\boldsymbol{k}_0$ 之间的夹角 φ 与光子散射角 θ 之间的关系为 $\cot\varphi=\left(1+\dfrac{\lambda_c}{\lambda_0}\right)\tan\dfrac{\theta}{2}$.

1.8　用相对论力学公式证明康普顿效应中散射光与入射光波长差的公式.

分析　相对论力学公式中能量 E 和动量 p 的关系是 $E^2=p^2c^2+\mu_0^2c^4$，不难证明 $\dfrac{\mu_0c^2}{\sqrt{1-\dfrac{v^2}{c^2}}}=\sqrt{p^2c^2+\mu_0^2c^4}$. 即

$$\sqrt{p^2c^2+\mu_0^2c^4}=\sqrt{\left(\frac{\mu_0 v}{\sqrt{1-\dfrac{v^2}{c^2}}}\right)^2c^2+\mu_0^2c^4}=\sqrt{\frac{\mu_0^2c^2v^2+\mu_0^2c^4-\mu_0^2c^4\dfrac{v^2}{c^2}}{1-\dfrac{v^2}{c^2}}}$$

$$=\sqrt{\frac{\mu_0^2c^4}{1-\dfrac{v^2}{c^2}}}=\frac{\mu_0c^2}{\sqrt{1-\dfrac{v^2}{c^2}}}.$$

证明　康普顿效应示意图如图 1.8-1 所示，入射光子的方向 $\boldsymbol{n}_0$ 与散射的方向 $\boldsymbol{n}$ 成散射角 θ，散射过程满足

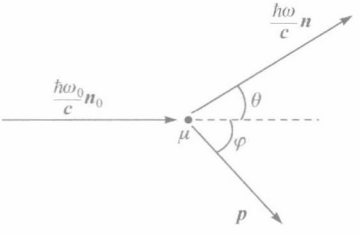

图 1.8-1　康普顿效应示意图

动量守恒：$\boldsymbol{p}=\dfrac{\hbar\omega_0}{c}\boldsymbol{n}_0-\dfrac{\hbar\omega}{c}\boldsymbol{n}$，即

$$\begin{cases}\dfrac{\hbar\omega_0}{c}=\dfrac{\hbar\omega}{c}\cos\theta+p\cos\varphi\\[2ex]\dfrac{\hbar\omega}{c}\sin\theta=p\sin\varphi\end{cases};\qquad(1.8\text{-}1)$$

能量守恒：$\hbar\omega_0-\hbar\omega+\mu_0c^2=\sqrt{c^2p^2+\mu_0^2c^4}$，　(1.8-2)

式中 μ_0 为电子的静止质量.

由式(1.8-2)得 $c^2p^2+\mu_0^2c^4=(\hbar\omega_0-\hbar\omega)^2+(\mu_0c^2)^2+2\mu_0c^2(\hbar\omega_0-\hbar\omega)$，

$$p^2=\left(\frac{\hbar\omega_0}{c}\right)^2+\left(\frac{\hbar\omega}{c}\right)^2-\frac{2\hbar^2\omega_0\omega}{c^2}+2\hbar\mu_0(\omega_0-\omega),\qquad(1.8\text{-}3)$$

由式(1.8-1) $\frac{\hbar\omega_0}{c}=\frac{\hbar\omega}{c}\cos\theta+p\cos\varphi$，$\frac{\hbar\omega}{c}\sin\theta=p\sin\varphi$，得

$$p^2=\left(\frac{\hbar\omega_0}{c}-\frac{\hbar\omega}{c}\cos\theta\right)^2+\left(\frac{\hbar\omega}{c}\sin\theta\right)^2=\left(\frac{\hbar\omega_0}{c}\right)^2+\left(\frac{\hbar\omega}{c}\right)^2-2\frac{\hbar^2\omega_0\omega}{c^2}\cos\theta. \quad (1.8\text{-}4)$$

比较式(1.8-3)和式(1.8-4)，得

$$\mu_0(\omega_0-\omega)=\frac{\hbar\omega_0\omega}{c^2}(1-\cos\theta)，\quad \frac{\omega_0-\omega}{\omega_0\omega}=\frac{1}{\omega}-\frac{1}{\omega_0}=\frac{\lambda}{2\pi c}-\frac{\lambda_0}{2\pi c}=\frac{\hbar}{\mu_0c^2}(1-\cos\theta)，$$

即

$$\lambda-\lambda_0=\frac{2\pi c\hbar}{\mu_0c^2}(1-\cos\theta)=\frac{h}{\mu_0c}(1-\cos\theta)=\frac{2h}{\mu_0c}\sin^2\frac{\theta}{2}=2\lambda_c\sin^2\frac{\theta}{2}.$$

式中 $\lambda_c=\frac{h}{\mu_0c}$ 为电子的康普顿波长.

证毕.

1.9　由光子概念求出圆频率为 ω，能流密度为 P 的光束，作用于法线与光的入射方向成 φ 角的完全反射面或完全黑面上的光压，并利用以上结果设计显示光压实验.

分析　能流密度即单位时间内通过与传播方向垂直的单位面积上的能量. 圆频率为 ω 的光子有能量 $\hbar\omega$. 能量密度为 P 的光束，单位时间内通过垂直流动方向，单位面积的光子数为

$$n=\frac{P}{\hbar\omega}. \quad (1.9\text{-}1)$$

解　一个光子以掠射角 θ 照射在完全反射面上时，如图 1.9-1(a)所示，其动量的变化为

$$\Delta p=2\frac{\hbar\omega}{c}\sin\theta，\quad (1.9\text{-}2)$$

因此反射面受到冲击. 如图 1.9-1(b)所示，$\mathrm{d}s'=\mathrm{d}s\sin\theta$，则单位时间内光照在单位反射面积 $\mathrm{d}s=1$ 上的光子数为



图 1.9-1　(a) 光子反射；(b) 斜入射光子

$$n' = n\sin\theta = \frac{P}{\hbar\omega}\sin\theta\,, \tag{1.9-3}$$

于是单位时间内光照射在单位完全反射面上的动量变化(光压)为

$$f = 2\frac{\hbar\omega}{c}\sin\theta\cdot n' = 2\frac{\hbar\omega}{c}\sin\theta\frac{P}{\hbar\omega}\sin\theta = 2\frac{P\sin^2\theta}{c} = 2\frac{P\cos^2\varphi}{c}\,. \tag{1.9-4}$$

如果反射面是理想黑体面，即不反射，则一个光子的吸收在垂直于黑体面上的动量变化为 $\frac{P}{\hbar\omega}\sin\theta$，这时光压为

$$f = \frac{\hbar\omega}{c}\sin\theta\cdot n' = \frac{P}{c}\sin^2\theta = \frac{P}{c}\cos^2\varphi\,. \tag{1.9-5}$$

设计一个实验装置，在一薄片的中部安装一个转轴，而薄片的一边为完全反射面，另一边为理想黑面，薄片的反面则刚好相反，完全反射面的反面是理想黑面，理想黑面的反面是完全反射面，用强度为 P 的激光照射，则薄片因力矩而转动，由此可见，光有压力.

答　圆频率为 ω，能流密度为 P 的光束，作用于法线与光的入射方向成 φ 角的完全反射面和完全黑面上的光压分别为 $2\frac{P\cos^2\varphi}{c}$ 和 $\frac{P\cos^2\varphi}{c}$.

1.10　从能量和动量必须同时守恒，证明下列过程是不可能发生的(用相对论公式)：

(1) 一个有一定动量的自由电子辐射一个光子，同时改变它的动量和减小它的动能；

(2) 一个有一定动量的自由电子吸收一个向它射来的光子，同时改变它的动量和增加它的动能.

分析　在微观世界中，同样遵循动量守恒定律和能量守恒定律.

证明　(1) 假设自由电子的动量为 $\boldsymbol{p}_0$，能辐射光子 $\hbar\tilde{\omega}$，辐射角为 θ，而电子的动量相应地由 $\boldsymbol{p}_0$ 变成 $\boldsymbol{p}$，$\boldsymbol{p}_0$ 和 $\boldsymbol{p}$ 之间的夹角为 φ，如图 1.10-1 所示，该过程满足守恒定律

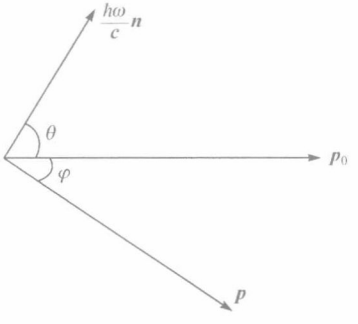

图 1.10-1　自由电子辐射光子

能量守恒：$\sqrt{c^2p_0^2+\mu_0^2c^4}-\hbar\omega=\sqrt{c^2p^2+\mu_0^2c^4}$，　(1.10-1)

动量守恒：$\boldsymbol{p}_0-\frac{\hbar\omega}{c}\boldsymbol{n}=\boldsymbol{p}$.　(1.10-2)

由式(1.10-1)两边平方后得 $c^2p_0^2+\mu_0^2c^4+(\hbar\omega)^2-2\hbar\omega\sqrt{c^2p_0^2+\mu_0^2c^4}=c^2p^2+\mu_0^2c^4$，$c^2p_0^2+(\hbar\omega)^2-2\hbar\omega\sqrt{c^2p_0^2+\mu_0^2c^4}=c^2p^2$，即

$$p^2=\frac{c^2p_0^2+(\hbar\omega)^2-2\hbar\omega\sqrt{c^2p_0^2+\mu_0^2c^4}}{c^2}. \tag{1.10-3}$$

由式(1.10-2)分解成两个方向 $p_0=\frac{\hbar\omega}{c}\cos\theta+p\cos\varphi$，$\frac{\hbar\omega}{c}\sin\theta=p\sin\varphi$，得

$$p^2=\left(p_0-\frac{\hbar\omega}{c}\cos\theta\right)^2+\left(\frac{\hbar\omega}{c}\sin\theta\right)^2=p_0^2-2p_0\frac{\hbar\omega}{c}\cos\theta+\left(\frac{\hbar\omega}{c}\right)^2. \tag{1.10-4}$$

由式(1.10-3)和式(1.10-4)得 $\frac{\sqrt{c^2p_0^2+\mu_0^2c^4}}{c}=p_0\cos\theta$，则

$$\cos\theta=\frac{\sqrt{p_0^2+\mu_0^2c^2}}{p_0}=\sqrt{1+\left(\frac{\mu_0c}{p_0}\right)^2}>1. \tag{1.10-5}$$

显然式(1.10-5)是不合理的，表明假设不真，即自由电子不能辐射光子.

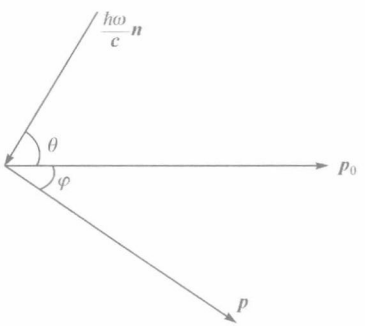

图 1.10-2　自由电子吸收光子

(2) 假设一个动量为 $\boldsymbol{p}_0$ 的自由电子能吸收一个向它射来的光子 $\hbar\tilde{\omega}$，如图 1.10-2 所示，其中 $\frac{\hbar\omega}{c}\boldsymbol{n}$ 和 $\boldsymbol{p}_0$ 成 θ 角，吸收光子后，电子的动量为 $\boldsymbol{p}$，$\boldsymbol{p}_0$ 和 $\boldsymbol{p}$ 之间的夹角为 φ，该过程满足守恒定律

能量守恒：$\hbar\omega+\sqrt{c^2p_0^2+\mu_0^2c^4}=\sqrt{c^2p^2+\mu_0^2c^4}$，　(1.10-6)

动量守恒：$\frac{\hbar\omega}{c}\boldsymbol{n}+\boldsymbol{p}_0=\boldsymbol{p}$.　(1.10-7)

由式(1.10-6)两边平方后得 $c^2p_0^2+\mu_0^2c^4+(\hbar\omega)^2+2\hbar\omega\sqrt{c^2p_0^2+\mu_0^2c^4}=c^2p^2+\mu_0^2c^4$，$c^2p_0^2+(\hbar\omega)^2+2\hbar\omega\sqrt{c^2p_0^2+\mu_0^2c^4}=c^2p^2$，即

$$p^2=\frac{c^2p_0^2+(\hbar\omega)^2+2\hbar\omega\sqrt{c^2p_0^2+\mu_0^2c^4}}{c^2}. \tag{1.10-8}$$

由式(1.10-7)分解成两个方向 $p_0=-\frac{\hbar\omega}{c}\cos\theta+p\cos\varphi$，$\frac{\hbar\omega}{c}\sin\theta=p\sin\varphi$，得

$$p^2=\left(p_0+\frac{\hbar\omega}{c}\cos\theta\right)^2+\left(\frac{\hbar\omega}{c}\sin\theta\right)^2=p_0^2+2p_0\frac{\hbar\omega}{c}\cos\theta+\left(\frac{\hbar\omega}{c}\right)^2. \tag{1.10-9}$$

由式(1.10-8)和式(1.10-9)得 $\frac{c^2p_0^2+(\hbar\omega)^2+2\hbar\omega\sqrt{c^2p_0^2+\mu_0^2c^4}}{c^2}=p_0^2+2p_0\frac{\hbar\omega}{c}\cos\theta+\left(\frac{\hbar\omega}{c}\right)^2$，$\frac{\sqrt{c^2p_0^2+\mu_0^2c^4}}{c}=p_0\cos\theta$，则

$$\cos\theta=\frac{\sqrt{p_0^2+\mu_0^2c^2}}{p_0}=\sqrt{1+\left(\frac{\mu_0c}{p_0}\right)^2}>1. \tag{1.10-10}$$

显然式(1.10-10)是不合理的，表明假设不真，即自由电子不能吸收光子.

证毕.

1.11　以速度 v 运动的原子，从能量为 E 的激发态跃迁到能量为 E_0 的基态，同时辐射光子. 根据能量及动量守恒定律，考虑到辐射光子时原子会反冲，求光子的频率表示式. 设原子质量为无限大(即忽略反冲)时光子的频率为 $\omega_0=\frac{E-E_0}{\hbar}$.

分析　由于原子的速度一般比光速 c 小得多，本题采用非相对论公式.

解　设原子质量为 M，则辐射前原子的动量 $\boldsymbol{p}=M\boldsymbol{v}$. 若辐射光子的圆频率为 ω，原子的反冲动量为 $\boldsymbol{p}'$，辐射光子和原子速度 $\boldsymbol{v}$ 的夹角为 θ，如图 1.11-1 所示.

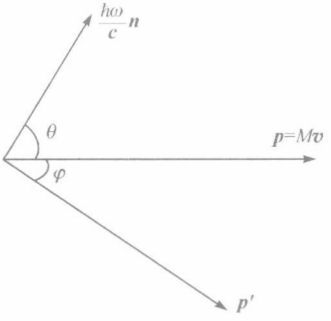

图 1.11-1　原子辐射光子

原子辐射光子的过程满足守恒定律

能量守恒：$\frac{p^2}{2M}+E=\frac{p'^2}{2M}+E_0+\hbar\omega$，　(1.11-1)

动量守恒：$\boldsymbol{p}=\frac{\hbar\omega}{c}\boldsymbol{n}+\boldsymbol{p}'$，　(1.11-2)

式中 $\boldsymbol{p}=M\boldsymbol{v}$，$\boldsymbol{p}'=M\boldsymbol{v}'$，由式(1.11-2)分解为两个方向 $Mv=\frac{\hbar\omega}{c}\cos\theta+Mv'\cos\varphi$，$\frac{\hbar\omega}{c}\sin\theta=Mv'\sin\varphi$，得 $(Mv')^2=(Mv)^2+\left(\frac{\hbar\omega}{c}\right)^2-2Mv\frac{\hbar\omega}{c}\cos\theta$，代入式(1.11-1)得

$$\frac{p^2}{2M}+E=\frac{p^2+\left(\frac{\hbar\omega}{c}\right)^2-2p\frac{\hbar\omega}{c}\cos\theta}{2M}+E_0+\hbar\omega,$$

$$E=\frac{\left(\frac{\hbar\omega}{c}\right)^2-2Mv\frac{\hbar\omega}{c}\cos\theta}{2M}+E_0+\hbar\omega,$$

$$E-E_0=\hbar\omega_0=\hbar\omega\left[\frac{\hbar\omega}{2Mc^2}-\frac{v\cos\theta}{c}+1\right].$$

由于$\frac{\hbar\omega}{2Mc^2}\approx\frac{1\text{eV}}{2\times10^4\times0.51\text{MeV}}\approx10^{-10}\ll1$，故$\frac{\hbar\omega}{2Mc^2}-\frac{v\cos\theta}{c}+1\approx1-\frac{v\cos\theta}{c}$，所以

$$\omega=\frac{\omega_0}{1-\frac{v\cos\theta}{c}}.$$

答　光子的频率为$\omega=\frac{\omega_0}{1-\frac{v\cos\theta}{c}}$.

1.12　说明在真空中德布罗意波也有色散(即不同波长平面波的相速不等)，并求色散公式(即相速与波长的关系). (1) 非相对论情形；(2) 相对论情形.

分析　粒子在真空中的能量仅动能一项. 动能并非与动量 p 成正比，$E=T\neq kp$，那么不同波长德布罗意波的相速$\frac{E}{p}$不相等，有色散.

解　(1) 非相对论情形

$$E=\frac{p^2}{2\mu},\tag{1.12-1}$$

式中，μ 是微观粒子的静止质量. 相速$u=\frac{E}{p}=\frac{p}{2\mu}=\frac{\hbar k}{2\mu}=\frac{h}{2\mu}\frac{2\pi}{\lambda}$，可见相速与 λ 成反比.

(2) 相对论情形

$$E=\sqrt{c^2p^2+\mu^2c^4},\tag{1.12-2}$$

相速$u=\frac{E}{p}=\sqrt{c^2+\frac{\mu^2c^4}{p^2}}=\sqrt{c^2+\frac{\mu^2c^4}{h^2}\lambda^2}$，可见相速与 λ 成非线性关系.

答　(1) 非相对论情形相速与波长 λ 成反比，色散公式$u=\frac{h}{2\mu}\frac{2\pi}{\lambda}$；(2) 相对论情形相速与波长 λ 成非线性关系，色散公式$u=\sqrt{c^2+\frac{\mu^2c^4}{h^2}\lambda^2}$.

1.13　用雷利速度公式$V_g=u-\lambda\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\lambda}$，$u$ 为相速，以及 1.12 题的结果，分别证明德布罗意波的群速V_g即为与德布罗意波相联系的粒子的运动速度V.

分析　1.12 题的结果是，对于非相对论情形色散公式 $u=\dfrac{\hbar}{2\mu}\dfrac{2\pi}{\lambda}$；对于相对论情形色散公式 $u=\sqrt{c^2+\dfrac{\mu^2c^4}{h^2}\lambda^2}$，代入 $V_g=u-\lambda\dfrac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\lambda}$ 即可证明.

证明　(1) 对于非相对论情形，$V_g=u-\lambda\dfrac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\lambda}=\dfrac{\hbar}{2\mu}\dfrac{2\pi}{\lambda}-\lambda\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\left(\dfrac{\hbar}{2\mu}\dfrac{2\pi}{\lambda}\right)$，

$$V_g=\frac{\hbar}{2\mu}\frac{2\pi}{\lambda}+\lambda\frac{\hbar}{2\mu}\frac{2\pi}{\lambda^2}=\frac{p}{\mu}=V.$$

(2) 对于相对论情形，$V_g=u-\lambda\dfrac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\lambda}=\sqrt{c^2+\dfrac{\mu^2c^4}{h^2}\lambda^2}-\lambda\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\left(\sqrt{c^2+\dfrac{\mu^2c^4}{h^2}\lambda^2}\right)$，

$$V_g=\sqrt{c^2+\frac{\mu^2c^4}{h^2}\lambda^2}-\frac{\dfrac{\mu^2c^4}{h^2}\lambda^2}{\sqrt{c^2+\dfrac{\mu^2c^4}{h^2}\lambda^2}}=\frac{c^2+\dfrac{\mu^2c^4}{h^2}\lambda^2-\dfrac{\mu^2c^4}{h^2}\lambda^2}{\sqrt{c^2+\dfrac{\mu^2c^4}{h^2}\lambda^2}}=\frac{c^2}{\sqrt{c^2+\dfrac{\mu^2c^4}{h^2}\lambda^2}}$$

$$=\frac{c^2}{\dfrac{1}{p}\sqrt{c^2p^2+\dfrac{\mu^2c^4}{h^2}p^2\lambda^2}}=\frac{c^2}{\dfrac{E}{p}}=\frac{p}{\mu}=V.$$

证毕.

1.14　求氢原子的游离能.

分析　所谓氢原子的游离能，就是将氢原子从基态 $n=1$ 跃迁到 $n=\infty$，外力所做的功. 玻尔对氢原子作出三条假设，第一是定态不辐射假设，即氢原子与核外电子的库仑力提供向心力

$$\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0r^2}=\mu\frac{v^2}{r}. \tag{1.14-1}$$

第二是跃迁假设，氢原子从较低能级 E_i 吸收圆频率为 ω 的光子跃迁到 E_f，则满足

$$\hbar\omega=E_f-E_i. \tag{1.14-2}$$

反之从高能级 E_f 跃迁到低能级 E_i，则放出圆频率为 ω 的光子；第三角动量量子化假设，即角动量满足

$$\mu vr=n\hbar. \tag{1.14-3}$$

由式(1.14-1)和式(1.14-3)即可得 $\mu v^2r=\dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}$，$\mu vr=n\hbar$，则

$v=\dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 n\hbar}$，$r=\dfrac{n\hbar}{\mu v}=\dfrac{4\pi\varepsilon_0(n\hbar)^2}{\mu e^2}$，核外电子绕核转动的动能为 $E_{\mathrm{k}}=\dfrac{1}{2}\mu v^2=\dfrac{1}{2}\mu\left(\dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 n\hbar}\right)^2$，势能为 $E_{\mathrm{p}}=-\dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}=-\dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\dfrac{4\pi\varepsilon_0(n\hbar)^2}{\mu e^2}}=-\mu\left(\dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 n\hbar}\right)^2$，动能与势能之和为

$$E=E_{\mathrm{k}}+E_{\mathrm{p}}=\frac{1}{2}\mu\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 n\hbar}\right)^2-\mu\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 n\hbar}\right)^2=-\frac{1}{2}\mu\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 n\hbar}\right)^2. \tag{1.14-4}$$

解 1　由式(1.14-4)对于基态 $n=1$，即

$$E_1=-\frac{1}{2}\times 9.1\times10^{-31}\mathrm{kg}\left(\frac{9\times10^9\mathrm{kg\cdot m\cdot s^{-2}\cdot m^2\cdot C^2}\times(1.6\times10^{-19}\mathrm{C})^2\times6.28}{6.62\times10^{-34}\mathrm{J\cdot s}}\right)^2,$$

$$E_1=-2.17\times10^{-18}\mathrm{J}=-13.6\mathrm{eV}.$$

从基态跃迁到 $n=\infty$，即氢原子的游离能为 $E_\infty-E_1=13.6\mathrm{eV}$.

解 2　已知氢原子的能级公式 $E_n=-\dfrac{e^2}{2a_0}\dfrac{1}{n^2}$，$n=1,2,3,\cdots$，氢原子的游离能是从 $n=1$ 的基态跃迁到 $n=\infty$ 的零能量态，氢原子的游离能为 $E_\infty-E_1=\dfrac{e^2}{2a_0}$.

注意取 cm·g·s 单位制，有 $e=3\times1.6\times10^{-10}\mathrm{esu}$，$a_0=0.53\times10^{-8}\mathrm{cm}$，$1\mathrm{eV}=1.6\times10^{-12}\mathrm{erg}$，则

$$E_\infty-E_1=\frac{e^2}{2a_0}=\frac{(3\times1.6\times10^{-10}\mathrm{esu})^2}{2\times0.53\times10^{-8}\mathrm{cm}\times1.6\times10^{-12}\mathrm{erg\cdot eV^{-1}}}=13.6\mathrm{eV}.$$

答　氢原子的游离能为13.6eV.

1.15　若 $\mathrm{H_a}$ 和 $\mathrm{D_a}$ 分别是氢和氘的巴耳末系的第一条谱线，求 $\mathrm{H_a}$ 和 $\mathrm{D_a}$ 两光谱线的波长差是多少？如果 $\mathrm{H_a}$ 和 $\mathrm{D_a}$ 的波长分别为 6 562.80Å 和 6 561.01Å，确定氘和氢的质量比.

分析　题中给出的波长或者实验测量结果有 6 位有效数字，则计算也应有 6 位有效数字. 才能与实验相比较. 对于氢原子(H)，原子核有一个质子 p，电子和核的折合质量

$$\mu_{\mathrm{H}}=\frac{\mu_{\mathrm{e}}\mu_{\mathrm{p}}}{\mu_{\mathrm{e}}+\mu_{\mathrm{p}}}=\frac{\mu_{\mathrm{e}}}{1+\dfrac{\mu_{\mathrm{e}}}{\mu_{\mathrm{p}}}}. \tag{1.15-1}$$

对于氘原子(D)，原子核有一个质子 p 和一个中子 n，核质量为 $\mu_N=\mu_p+\mu_n$，电子和核的折合质量

$$\mu_D=\frac{\mu_e(\mu_p+\mu_n)}{\mu_e+\mu_p+\mu_n}=\frac{\mu_e}{1+\dfrac{\mu_e}{\mu_p+\mu_n}}. \tag{1.15-2}$$

正因为 μ_H 和 μ_D 不同，导致了氢和氘相应谱线的波长有差别.

解　对于氢原子，由式(1.15-1)代入能级

$$E_n^{(H)}=-\frac{e^2}{2\dfrac{\hbar^2}{\mu_H e^2}}\frac{1}{n^2},\quad n=1,2,3,\cdots \tag{1.15-3}$$

对于氘原子，由式(1.15-2)代入能级

$$E_n^{(D)}=-\frac{e^2}{2\dfrac{\hbar^2}{\mu_D e^2}}\frac{1}{n^2},\quad n=1,2,3,\cdots \tag{1.15-4}$$

巴耳末线系的第一条是由 $n=3\to n=2$ 能级的跃迁所产生的，因此 H_a 的波长满足

$$-\frac{e^2}{2\dfrac{\hbar^2}{\mu_H e^2}}\left(\frac{1}{3^2}-\frac{1}{2^2}\right)=\hbar\omega=\frac{2\pi\hbar c}{\lambda_H},$$

D_a 的波长满足 $-\dfrac{e^2}{2\dfrac{\hbar^2}{\mu_D e^2}}\left(\dfrac{1}{3^2}-\dfrac{1}{2^2}\right)=\hbar\omega=\dfrac{2\pi\hbar c}{\lambda_D}$，计算得

$$\lambda_H=36\times\frac{4\pi\hbar^3 c}{5e^4\mu_H}=\frac{0.601379\times10^{-31}}{\mu_H},\quad \lambda_D=36\times\frac{4\pi\hbar^3 c}{5e^4\mu_D}=\frac{0.601379\times10^{-31}}{\mu_D}, \tag{1.15-5}$$

查表得

$\mu_e=9.109\,389\,7\times10^{-28}\,\mathrm{g}$，$\mu_p=1.672\,623\,1\times10^{-24}\,\mathrm{g}$，$\mu_n=1.674\,928\,6\times10^{-24}\,\mathrm{g}$，代入式(1.15-1)得

$$\mu_H=\frac{\mu_e\mu_p}{\mu_e+\mu_p}=\frac{\mu_e}{1+\dfrac{\mu_e}{\mu_p}}=\frac{9.109\,389\,7\times10^{-28}\,\mathrm{g}}{1+\dfrac{9.109\,389\,7\times10^{-28}\,\mathrm{g}}{1.672\,623\,1\times10^{-24}\,\mathrm{g}}}$$

$$=\frac{9.109\,389\,7\times10^{-28}\,\mathrm{g}}{1.000\,544\,6}=9.104\,43\times10^{-28}\,\mathrm{g};$$

代入式(1.15-2)得

$$\mu_{\mathrm{D}}=\frac{\mu_{\mathrm{e}}}{1+\dfrac{\mu_{\mathrm{e}}}{\mu_{\mathrm{p}}+\mu_{\mathrm{n}}}}=\frac{9.109\,389\,7\times10^{-28}\mathrm{g}}{1+\dfrac{9.109\,389\,7\times10^{-28}\mathrm{g}}{1.672\,623\,1\times10^{-24}\mathrm{g}+1.674\,928\,6\times10^{-24}\mathrm{g}}}=9.106\,91\times10^{-28}\mathrm{g}.$$

代入式(1.15-5)中，计算得

$$\lambda_{\mathrm{H}}=36\times\frac{4\pi\hbar^3c}{5e^4\mu_{\mathrm{H}}}=\frac{0.601379\times10^{-31}\mathrm{g}\cdot\text{Å}}{9.104\,43\times10^{-28}\mathrm{g}}=6616.32\text{Å},$$

$$\lambda_{\mathrm{D}}=36\times\frac{4\pi\hbar^3c}{5e^4\mu_{\mathrm{D}}}=\frac{0.601379\times10^{-31}\mathrm{g}\cdot\text{Å}}{9.106\,91\times10^{-28}\mathrm{g}}=6603.55\text{Å},$$

$$\Delta\lambda=\lambda_{\mathrm{H}}-\lambda_{\mathrm{D}}=12.77\text{Å}.$$

由题意，结合式(1.15-5)，$\lambda_{\mathrm{H}}=\dfrac{0.601379\times10^{-31}}{\mu_{\mathrm{H}}}=6\,562.80\text{Å}$，

$\lambda_{\mathrm{D}}=\dfrac{0.601379\times10^{-31}}{\mu_{\mathrm{D}}}=6\,561.01\text{Å}$，故

$$\frac{\mu_{\mathrm{D}}}{\mu_{\mathrm{H}}}=\frac{6\,562.80\text{Å}}{6\,561.01\text{Å}}=\frac{\dfrac{\mu_{\mathrm{e}}}{1+\dfrac{\mu_{\mathrm{e}}}{\mu_{\mathrm{p}}+\mu_{\mathrm{n}}}}}{\dfrac{\mu_{\mathrm{e}}}{1+\dfrac{\mu_{\mathrm{e}}}{\mu_{\mathrm{p}}}}}=\frac{1+\dfrac{\mu_{\mathrm{e}}}{\mu_{\mathrm{p}}}}{1+\dfrac{\mu_{\mathrm{e}}}{\mu_{\mathrm{p}}+\mu_{\mathrm{n}}}}=\frac{\mu_{\mathrm{p}}+\mu_{\mathrm{e}}}{\mu_{\mathrm{p}}+\mu_{\mathrm{n}}+\mu_{\mathrm{e}}}\frac{\mu_{\mathrm{p}}+\mu_{\mathrm{n}}}{\mu_{\mathrm{p}}}=1.000\,27,$$

令 $\mu_{\mathrm{p}}+\mu_{\mathrm{n}}=x\mu_{\mathrm{p}}$，则上式变为

$$\frac{\mu_{\mathrm{p}}+\mu_{\mathrm{e}}}{x\mu_{\mathrm{p}}+\mu_{\mathrm{e}}}\frac{x\mu_{\mathrm{p}}}{\mu_{\mathrm{p}}}=1.000\,27,\quad x\frac{\mu_{\mathrm{p}}+\mu_{\mathrm{e}}}{x\mu_{\mathrm{p}}+\mu_{\mathrm{e}}}=1.000\,27,$$

$$x\frac{1.672\,623\,1\times10^{-24}\mathrm{g}+9.109\,389\,7\times10^{-28}\mathrm{g}}{x\times1.672\,623\,1\times10^{-24}\mathrm{g}+9.109\,389\,7\times10^{-28}\mathrm{g}}=1.000\,27,$$

$$\frac{1837.153x}{1836.153x+1}=1.000\,27,$$

则

$$x=1.983\,72.$$

答　$\mathrm{H_a}$ 和 $\mathrm{D_a}$ 两光谱线的波长差是 $\Delta\lambda=12.77$Å；氘和氢的质量比 1.983 72.

1.16　设氢原子半径为 0.5Å，用经典物理计算电子从半径为 0.5Å 的圆形轨道跌落到核所需要的时间是多少？

分析　一个以加速度 w 运动的电荷，通过连续的辐射，在每秒钟内的损失能量为

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t}=-\frac{3e^2}{2c^3}w^2\,, \tag{1.16-1}$$

式中e是电荷的带电量.

解　设电子绕核作半径为a的圆周运动，能量为

$$E=\frac{1}{2}\mu v^2-\frac{e^2}{a}\,, \tag{1.16-2}$$

式中v和a还由运动方程相联系

$$\frac{e^2}{a^2}=\mu w=\mu\frac{v^2}{a}\rightarrow \mu v^2=\frac{e^2}{a}\,. \tag{1.16-3}$$

将式(1.16-3)代入式(1.16-2)得

$$E=-\frac{e^2}{2a}\,, \tag{1.16-4}$$

式中负号“–”表示系统是由为库仑吸引力形成的束缚系统. 在经典力学中，a和E是连续变化的，已知$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t}=-\frac{3e^2}{2c^3}w^2$，$E=-\frac{e^2}{2a}$，$w=\frac{v^2}{a}=\frac{1}{a}\frac{e^2}{\mu a}=\frac{e^2}{\mu a^2}$，故

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(-\frac{e^2}{2a}\right)=\frac{e^2}{2a^2}\frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t}=-\frac{3e^2}{2c^3}w^2=-\frac{3e^2}{2c^3}\left(\frac{e^2}{\mu a^2}\right)^2\,,$$

即$\frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t}=-\frac{3e^2}{2c^3}\left(\frac{e^2}{\mu a^2}\right)^2\frac{2a^2}{e^2}=-\frac{3}{c^3}\left(\frac{e^2}{\mu a}\right)^2=-\frac{3e^4}{c^3\mu^2a^2}$，$a^2\mathrm{d}a=-\frac{3e^4}{c^3\mu^2}\mathrm{d}t$，积分得

$$\frac{1}{3}a^3=-\frac{3e^4}{c^3\mu^2}t+c_1\,,$$

当$t=0$时，$a=0.5\text{Å}$，故$c_1=\frac{1}{24}\times10^{-24}\mathrm{cm}^3$；

当$t=t$时，$a=0$，故

$$t=\frac{\frac{1}{24}\times10^{-24}\mathrm{cm}^3}{3\times(1.6\times10^{-19}\times3\times10^9\,\mathrm{esu})^4}\times(3\times10^{10}\,\mathrm{cm\cdot s^{-1}})^3\times(9.1\times10^{-28}\mathrm{g})^2=5.85\times10^{-12}\mathrm{s}\,.$$

按经典物理，原子的寿命只有5.85×10^{-12}s，但孤立的原子实际上是稳定的，所以经典物理不能解释原子的稳定性.

答　用经典物理计算电子从半径为0.5Å的圆形轨道跌落到核所需要的时间是5.85×10^{-12}s，不能解释原子的稳定性.

1.17　问在玻尔轨道上运动的电子的速度，每秒绕核转几圈?

分析　利用玻尔第三条假设，即可求出基态轨道上的电子的运动速度，求出每秒转的圈数.

解　量子条件：$L=n\hbar=\mu v a$，式中 $a=n^2a_0$，$a_0=0.529\text{Å}$，所以 $v=\dfrac{n\hbar}{\mu a}$，对于基态 $n=1$，

$$v=\frac{\hbar}{\mu a}=\frac{1.05\times10^{-27}\,\text{erg}\cdot\text{s}}{9.1\times10^{-28}\,\text{g}\times0.529\times10^{-8}\,\text{cm}}=2.181\times10^{8}\,\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}.$$

电子每秒绕核转的周数

$$N=\frac{v}{2\pi a}=\frac{n\hbar}{2\pi\mu a^2}=\frac{\hbar}{2\pi\mu a_0^2}\frac{1}{n^3}=\frac{1.05\times10^{-27}\,\text{erg}\cdot\text{s}}{6.28\times9.1\times10^{-28}\,\text{g}\times(0.529\times10^{-8}\,\text{cm})^2}$$

$$=6.566\times10^{15}\frac{1}{n^3}\text{s}^{-1}.$$

答　在玻尔轨道上运动的电子的速度 $2.181\times10^{8}\,\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}$，每秒绕 6.566×10^{15} 圈.

1.18　用玻尔模型证明氢原子磁矩为 $\dfrac{-en\hbar}{2\mu c}$，式中 n 为主量子数，$\tau_0=\dfrac{-e\hbar}{2\mu c}$ 称为玻尔磁子.

分析　利用玻尔第三条假设，即可求出基态轨道上的电子的运动速度，求出每秒转的圈数.

证明　选择 cm·g·s 单位制，设电子的轨道半径为 a，则原子磁矩为 $\tau=\dfrac{is}{c}$，$i=-e\dfrac{v}{2\pi a}$，$s=\pi a^2$，于是

$$\tau=\frac{-e\dfrac{v}{2\pi a}\pi a^2}{c}=-e\frac{v\mu a}{2\mu c}=-e\frac{L}{2\mu c},$$

由角动量量子化条件 $L=n\hbar$，则氢原子磁矩

$$\tau=-e\frac{L}{2\mu c}=-e\frac{n\hbar}{2\mu c}=n\left(-\frac{e\hbar}{2\mu c}\right)=n\tau_0.$$

证毕.

1.19　索末菲推广玻尔量子化条件为 $\int p_i\mathrm{d}q_i=n_i2\pi\hbar$，$\int p_i\mathrm{d}q_i=n_i=1,2,3,\cdots$，$p_i$ 和 q_i 分别为系统的广义动量和广义坐标，n_i 为整数，积分对运动的一个周期进行. 用索末菲量子化条件求简谐振动粒子的能级.

分析　利用谐振子动能和势能，以及量子化条件，计算简谐振动粒子的能级.

解　一维谐振子的能量守恒

$$E=\frac{p^2}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2. \tag{1.19-1}$$

当 $x=\pm a$ 时，$p=0$，$E=\frac{1}{2}\mu\omega^2a^2$. (1.19-2)

量子化条件：$n2\pi h=\oint p\mathrm{d}x=\int_{-a}^{a}p\mathrm{d}x+\int_{a}^{-a}p\mathrm{d}x$，$n=1,2,3,\cdots$

考虑到式(1.19-1)

$$n2\pi h=\int_{-a}^{a}\sqrt{2\mu}\sqrt{E-\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2}\,\mathrm{d}x+\int_{a}^{-a}-\sqrt{2\mu}\sqrt{E-\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2}\,\mathrm{d}x. \tag{1.19-3}$$

式(1.19-3)中考虑了从 $-a\to a$ 动量 p 为正，则从 $a\to -a$ 动量 p 为负，再由式(1.19-2)得 $2E=\mu\omega^2a^2$，故式(1.19-3)变化为

$$\begin{aligned}n2\pi h&=2\sqrt{2\mu}\int_{-a}^{a}\sqrt{E-\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2}\,\mathrm{d}x=4\sqrt{2\mu}\int_{0}^{a}\sqrt{E-\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2}\,\mathrm{d}x\\&=4\sqrt{2\mu}\int_{0}^{a}\sqrt{\frac{1}{2}\mu\omega^2a^2-\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2}\,\mathrm{d}x\\&=4\mu\omega\int_{0}^{a}\sqrt{a^2-x^2}\,\mathrm{d}x.\end{aligned}$$

令 $x=a\cos t$，$\mathrm{d}x=-a\sin t\mathrm{d}t$. 当 $x=a$ 时，$t=0$；当 $x=0$ 时，$t=\frac{\pi}{2}$. 则 $\sqrt{a^2-x^2}=a\sin t$，

$$\begin{aligned}n2\pi h&=4\mu\omega\int_{0}^{a}\sqrt{a^2-x^2}\,\mathrm{d}x=4\mu\omega\int_{t=\frac{\pi}{2}}^{t=0}a\sin t[-a\sin t\mathrm{d}t]=4\mu\omega a^2\int_{t=\frac{\pi}{2}}^{t=0}\sin t[-\sin t\mathrm{d}t]\\&=4\mu\omega a^2\int_{t=0}^{t=\frac{\pi}{2}}\sin^2t\mathrm{d}t=2\mu\omega a^2\int_{t=0}^{t=\frac{\pi}{2}}(1-\cos2t)\mathrm{d}t=2\mu\omega a^2\left[\frac{\pi}{2}-\frac{1}{2}\sin(2t)\Big|_0^{\frac{\pi}{2}}\right]\\&=2\pi\mu\omega a^2=2\pi\frac{E}{\omega},\end{aligned}$$

式中 $E=\frac{1}{2}\mu\omega^2a^2$. 即

$$E=n\hbar\omega,\quad n=1,2,3,\cdots \tag{1.19-4}$$

相邻两能级之差为 $\hbar\omega$.

答　简谐振动粒子的能级为 $n\hbar\omega$，相邻两能级之差为 $\hbar\omega$.

1.20　用索末菲量子化条件求一个做一维运动而被关闭在两刚性墙之间的粒子的能级.

分析　假设刚性墙的距离为 a，以及量子化条件，计算被关闭在两刚性墙之间的粒子的能级.

解　刚性墙的势 $V=\infty$，粒子不能透入，如图 1.20-1 所示，能量 E 守恒.

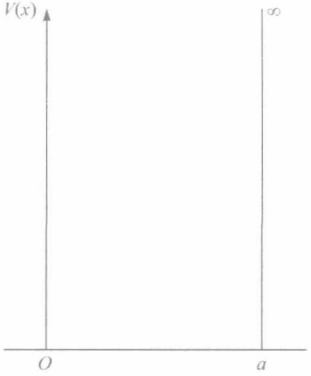

图 1.20-1　刚性墙

$$E=\frac{p^2}{2\mu}+V(x)\,, \tag{1.20-1}$$

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

由量子化条件，注意从 $0\to a$ 时，动量为正；$a\to 0$ 时，动量为负. 则有

$$n2\pi\hbar=\int_0^a\sqrt{2\mu E}\,\mathrm{d}x-\int_a^0\sqrt{2\mu E}\,\mathrm{d}x=2\sqrt{2\mu}\int_0^a\sqrt{E}\,\mathrm{d}x$$

$$=2\sqrt{2\mu}\sqrt{E}a\,,\ \text{即}$$

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

答　被关闭在两刚性墙之间的粒子的能级为 $E=\dfrac{1}{2\mu}\left(\dfrac{n\pi\hbar}{a}\right)^2$.

1.21　一个 μ^- 子(质量为电子的 207 倍，电荷也为 $-e$)取代原子中的一个电子而组成 μ^- 原子，试解释 μ^- 子从 $n\leqslant 4$ 的能级向低能级跃迁而发射的光谱频率，不会因原子的外层电子是否全部被剥而改变. 假如 τ^- 子(质量为电子的 3 487 倍)取代了一个电子，类似结果又如何?

分析　一个 μ^- 子取代原子中的一个电子而组成 μ^- 原子；一个 τ^- 子取代原子中的一个电子而组成 τ^- 原子.

解　设原子核有 Z 个质子，n 个中子，其质量为 $\mu_{\mathrm{N}}=A\mu_{\mathrm{p}}$，$A=Z+n$，在 μ^- 原子中，μ^- 子的质量 $\mu_{\mu^-}=207\mu_{\mathrm{e}}$，$\mu^-$ 子对原子核的折合质量为 $\mu=\dfrac{\mu_{\mu^-}\mu_{\mathrm{N}}}{\mu_{\mu^-}+\mu_{\mathrm{N}}}$，$\mu^-$ 子受原子核的吸引力 $F=\dfrac{Ze^2}{a^2}$，不考虑 μ^- 子和电子 e 之间的相互作用，则 μ^- 子受原子核作用的能级

$$E_n=\frac{-e^2}{2a_0^{\mu}}\frac{Z^2}{n^2},\quad n=1,2,3,\cdots, \tag{1.21-1}$$

其中 $a_0^{\mu}=\dfrac{\hbar^2}{\mu e^2}=\dfrac{\hbar^2}{\dfrac{\mu_{\mu^-}\mu_{\mathrm{N}}}{\mu_{\mu^-}+\mu_{\mathrm{N}}}e^2}$，$a_n^{\mu}=n^2\dfrac{a_0^{\mu}}{Z}$，原子中 $n\geqslant 1$ 能态的电子轨道的半径

$$a_n^{\mu}=\frac{n^2}{Z^*}\frac{\hbar^2}{\dfrac{\mu_{\mu^-}\mu_{\mathrm{N}}}{\mu_{\mu^-}+\mu_{\mathrm{N}}}e^2}, \tag{1.21-2}$$

式中，Z^*为有效正电荷数. 考虑到μ^-子的半径小，μ^-子对电子有屏蔽作用，则$Z^*=Z-1$. 对于$n=1$的电子轨道

$$a_1^{\mathrm{e}}=\frac{1}{Z-1}\frac{\hbar^2}{\dfrac{\mu_{\mathrm{e}}\times 1836A\mu_{\mathrm{e}}}{\mu_{\mathrm{e}}+1836A\mu_{\mathrm{e}}}e^2}=\frac{1+1836A}{1836A(Z-1)}\frac{\hbar^2}{\mu_{\mathrm{e}}e^2}. \tag{1.21-3}$$

若μ^-原子的$a_n^{\mu}<a_1^{\mathrm{e}}$，$n=1,2,3,4$，则原子中电子云应分布在$\mu^-$原子的外层，有无电子不影响$\mu^-$原子中$n=4,3,2,1$能级的高低，即不影响能级跃迁而发射的光谱频率.

下面证明$a_n^{\mu}<a_1^{\mathrm{e}}$，$n=1,2,3,4$.

假设$a_{n'}^{\mu}=a_1^{\mathrm{e}}$，即$\dfrac{n'^2}{Z}\dfrac{\hbar^2}{\dfrac{\mu_{\mu}\mu_{\mathrm{N}}}{\mu_{\mu}+\mu_{\mathrm{N}}}e^2}=\dfrac{1}{Z-1}\dfrac{\hbar^2}{\dfrac{\mu_{\mathrm{e}}\mu_{\mathrm{N}}}{\mu_{\mathrm{e}}+\mu_{\mathrm{N}}}e^2}$，也就是$n'^2\dfrac{\mu_{\mu}\mu_{\mathrm{N}}}{\mu_{\mu}+\mu_{\mathrm{N}}}=\dfrac{\mu_{\mathrm{e}}\mu_{\mathrm{N}}}{\mu_{\mathrm{e}}+\mu_{\mathrm{N}}}\dfrac{Z}{Z-1}$，即

$$n'^2=\frac{\mu_{\mathrm{N}}}{\mu_{\mathrm{e}}}\frac{\mu_{\mathrm{e}}+\mu_{\mathrm{N}}}{\mu_{\mu}+\mu_{\mathrm{N}}}\frac{Z}{Z-1}>\frac{207\times(1+1836A)}{207+1836A}.$$

要μ^-子绕原子核转，则核质量$1836A\mu_{\mathrm{e}}$应远大于μ^-子的质量$207\mu_{\mathrm{e}}$，为了简单起见，可设$A=1$，因1836比207大得多，$n'^2>\dfrac{207\times 1837}{2\,043}=186.12$，所以$n'>\sqrt{186.12}=13.64$，因此$n=1,2,3,4$的$\mu^-$原子的$a_n^{\mu}$均小于$a_1^{\mathrm{e}}$.

对于τ^-子(质量为电子的3 487倍)取代了一个电子，形成τ^-原子，要使τ^-子绕原子核旋转，则核的质量$A\mu_{\mathrm{p}}$应远远大于μ_{τ}. 证明如下：

假设$a_{n'}^{\tau}=a_1^{\mathrm{e}}$，即$\dfrac{n'^2}{Z}\dfrac{\hbar^2}{\dfrac{\mu_{\tau}\mu_{\mathrm{N}}}{\mu_{\tau}+\mu_{\mathrm{N}}}e^2}=\dfrac{1}{Z-1}\dfrac{\hbar^2}{\dfrac{\mu_{\mathrm{e}}\mu_{\mathrm{N}}}{\mu_{\mathrm{e}}+\mu_{\mathrm{N}}}e^2}$，也就是$n'^2\dfrac{\mu_{\tau}\mu_{\mathrm{N}}}{\mu_{\tau}+\mu_{\mathrm{N}}}=\dfrac{\mu_{\mathrm{e}}\mu_{\mathrm{N}}}{\mu_{\mathrm{e}}+\mu_{\mathrm{N}}}\dfrac{Z}{Z-1}$，即

$$n'^2>\frac{\mu_{\tau}}{\mu_{\mathrm{e}}}\frac{\mu_{\mathrm{e}}+\mu_{\mathrm{N}}}{\mu_{\tau}+\mu_{\mathrm{N}}}=\frac{3\,487\times(1+1836A)}{3\,487+1836A}$$，设$A=10$，则$n'>\sqrt{\dfrac{3\,487\times 18\,361}{3\,487+18\,360}}=54.13$. 因此，$\tau^-$原子的$n=1,2,3,\cdots,54$的$\tau^-$原子均有$a_n^{\tau}<a_1^{\mathrm{e}}$. 即不管外层电子

是否全部被剥离，并不改变 τ^- 原子 $n=1,2,3,\cdots,54$ 的能级跃迁而辐射的光谱频率.

答　(1) $n=1,2,3,4$ 的 μ^- 原子的 a_n^{μ} 均小于 a_1^{e}，即 μ^- 子从 $n\leqslant 4$ 的能级向低能级跃迁而发射的光谱频率，不会因原子的外层电子是否全部被剥而改变；(2) $n=1,2,3,\cdots,54$ 的 τ^- 原子均有 $a_n^{\tau}<a_1^{e}$. 即不管外层电子是否全部被剥离，并不改变 τ^- 原子 $n=1,2,3,\cdots,54$ 的能级跃迁而辐射的光谱频率.

1.22　计算介原子的第一玻尔轨道半径.

分析　介原子为一个 μ^- 子与质子构成的类似于氢原子的系统.

解　$a_0^{\mu}=\dfrac{\hbar^2}{\mu e^2}$，式中 $\mu=\dfrac{\mu_{\mu}\mu_{p}}{\mu_{\mu}+\mu_{p}}$，$\mu_{\mu}=207\mu_{e}$，$\mu_{p}=1840\mu_{e}$，故

$$\mu=\frac{207\times 1840}{207+1840}\mu_{e}=186.07\mu_{e}.$$

$$a_0^{\mu}=\frac{\hbar^2}{\mu e^2}=\frac{\hbar^2}{186.07\mu_{e}e^2}=0.005\,374\frac{\hbar^2}{\mu_{e}e^2}$$，由于 $\dfrac{\hbar^2}{\mu_{e}e^2}=0.529\text{Å}$，所以

$$a_0^{\mu}=0.005\,374\times 0.529\text{Å}=0.002\,84\text{Å}.$$

答　介原子的第一玻尔轨道半径为 0.002 84Å，小于氢原子第一玻尔轨道半径.

1.23　利用相对论公式，分别求出动能为 10^3eV、10^5eV、10^{10}eV 的电子的德布罗意波长(电子静止能量为 $0.5\times 10^6\text{eV}$)，并讨论电子动能大到什么量级时，需要考虑相对论修正. 如果要造一个能分辨固体原子的电子显微镜，需要多大的加速电压?

分析　德布罗意波长

$$\lambda=\frac{h}{p}=\frac{h}{\mu v}=\frac{h}{\mu_0 v}\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}\,,\tag{1.23-1}$$

电子的动能

$$T=\mu c^2-\mu_0 c^2=\frac{\mu_0 c^2}{\sqrt{1-\dfrac{v^2}{c^2}}}-\mu_0 c^2\,,\tag{1.23-2}$$

式中 μ_0 为电子静止质量，μ 为电子运动时的质量. 相对论动量与能量关系

$$E^2=c^2p^2+\mu_0^2c^4\,,\tag{1.23-3}$$

解　根据相对论动量与能量关系 $E=T+\mu_0c^2=\sqrt{c^2p^2+\mu_0^2c^4}$，即 c^2p^2+

$\mu_0^2c^4=(T+\mu_0c^2)^2$，

$$p=\sqrt{\frac{(T+\mu_0c^2)^2-\mu_0^2c^4}{c^2}}=\sqrt{\frac{T^2+2T\mu_0c^2}{c^2}}=\frac{h}{\lambda}=2\pi\frac{\hbar}{\lambda}. \tag{1.23-4}$$

当$T^2\ll 2T\mu_0c^2$时，$p=\sqrt{2T\mu_0}$，回到了经典的$T=\dfrac{p^2}{2\mu_0}$，因此T^2和$2T\mu_0c^2$两项的比较决定了是否要考虑相对论效应. 由式(1.23-4)得

$$\lambda=\frac{2\pi c\hbar}{\sqrt{T^2+2T\mu_0c^2}}, \tag{1.23-5}$$

式中$\mu_0c^2=0.5\times10^6\text{eV}$，$1\text{eV}=1.6\times10^{-12}\text{erg}$，$c=3\times10^{10}\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}$，$\hbar=1.05\times10^{-27}\text{erg}\cdot\text{s}$，

(1) 当$T_1=10^3\text{eV}$时，

$$\lambda_1=\frac{6.28\times3\times10^{10}\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}\times1.05\times10^{-27}\text{erg}\cdot\text{s}}{\sqrt{10^6+2\times10^3\times0.5\times10^6}\times1.6\times10^{-12}\text{erg}}=3.908\times10^{-9}\text{cm}=0.039\,08\text{nm};$$

(2) 当$T_2=10^5\text{eV}$时，

$$\lambda_2=\frac{6.28\times3\times10^{10}\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}\times1.05\times10^{-27}\text{erg}\cdot\text{s}}{\sqrt{10^{10}+2\times10^5\times0.5\times10^6}\times1.6\times10^{-12}\text{erg}}=3.728\times10^{-10}\text{cm}=0.003\,728\text{nm};$$

(3) 当$T_3=10^{10}\text{eV}$时，

$$\lambda_3=\frac{6.28\times3\times10^{10}\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}\times1.05\times10^{-27}\text{erg}\cdot\text{s}}{\sqrt{10^{20}+2\times10^{10}\times0.5\times10^6}\times1.6\times10^{-12}\text{erg}}=1.236\,3\times10^{-14}\text{cm}=1.236\,3\times10^{-7}\text{nm};$$

因$10^{20}\gg10^{16}$，相对论修正占优势. 固体中的原子间距是10^{-8}cm量级，要电子的德布罗意波长达到10^{-8}cm量级，即$\lambda=\dfrac{2\pi c\hbar}{\sqrt{T^2+2T\mu_0c^2}}=10^{-8}\text{cm}$，

$$\frac{6.28\times3\times10^{10}\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}\times1.05\times10^{-27}\text{erg}\cdot\text{s}}{\sqrt{T^2+2T\times0.5\times10^6}\times1.6\times10^{-12}\text{erg}}=10^{-8}\text{cm},$$

$$\sqrt{T^2+2T\times0.5\times10^6}=\frac{6.28\times3\times10^{10}\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}\times1.05\times10^{-27}\text{erg}\cdot\text{s}}{10^{-8}\text{cm}\times1.6\times10^{-12}\text{erg}},$$

$$T^2+10^6T=\left(\frac{6.28\times3\times1.05}{1.6}\right)^2\times10^6,$$

$$T^2+10^6T=152.8623\times10^6,$$

$T=\dfrac{-10^6\pm\sqrt{10^{12}+4\times152.8623\times10^6}}{2}$，考虑到动能$T>0$，故

$$T=\frac{-10^6+\sqrt{10^{12}+4\times152.8623\times10^6}}{2}=152.839(\text{eV}).$$

$T=152.839\text{eV}$ 与电子的静止能量 $0.5\times10^6\text{eV}$ 相比为万分之三. 如果计算误差允许 2%，则电子的加速电压小于 10^4V 即可.

答　动能为 10^3eV 、10^5eV 、10^{10}eV 的电子的德布罗意波长分别为 0.039 08nm 、0.003 728nm 、$1.236\,3\times10^{-7}\text{nm}$. 如果计算误差只允许小于万分之三，则电子的加速电压应小于 152.839 V，才能使用非相对论公式计算德布罗意波长；如果计算误差允许小于 2%，则电子的加速电压应小于 10^4V，才能使用非相对论公式计算德布罗意波长.

1.24　与真空相比，电子在金属中有势能 $-eV_0$，其中 V_0 为金属的电势，可视作常数，求由真空到金属，电子德布罗意波的折射率.

分析　由几何光学中的最小光程原理(费马原理)和经典力学中有最小作用原理(莫培督原理)相比较得到金属与真空折射率之比.

解　几何光学中的最小光程(费马)原理

$$\delta\int_A^B\frac{\mathrm{d}s}{c/n}=0\,,\tag{1.24-1}$$

相应地，在经典力学中有最小作用原理(莫培督原理)

$$\delta\int_A^B p\mathrm{d}s=0\,,\tag{1.24-2}$$

式中，$p=\sqrt{2\mu[E-V(x)]}$，故 $n(x)\propto\sqrt{2\mu[E-V(x)]}$，所以折射率

$$n=\frac{n_{\text{金属}}}{n_{\text{真空}}}=\frac{\sqrt{2\mu[E+eV_0]}}{\sqrt{2\mu E}}\,,\tag{1.24-3}$$

式中 $V_{\text{金属}}=-eV_0$，$V_{\text{真空}}=0$，设电子在真空中的能量 E 由加速电势转换而来，记 $E=eV$，故

$$n=\frac{n_{\text{金属}}}{n_{\text{真空}}}=\frac{\sqrt{2\mu[eV+eV_0]}}{\sqrt{2\mu eV}}=\sqrt{1+\frac{V_0}{V}}\,.\tag{1.24-4}$$

答　电子德布罗意波的折射率为 $n=\dfrac{n_{\text{金属}}}{n_{\text{真空}}}=\sqrt{1+\dfrac{V_0}{V}}$.

1.25　电子和光子各有波长 2Å，分别求出它们的(1) 动量；(2) 总能量；(3) 动能. 问电子的德布罗意波的相速是多少?

分析　由于电子和光子各有波长 2Å，由题 1.24 的结论，可以采用非相对论

情形进行计算. 动量 $p=\dfrac{h}{\lambda}$，动能 $T=\dfrac{p^2}{2\mu}$ (电子)，总能量 $E=\dfrac{hc}{\lambda}$ (光子)，$E=\sqrt{c^2p^2+\mu_0^2c^4}\approx T+\mu_0c^2$ (电子).

解　(1) 对于电子，其德布罗意波长为 2Å，则

(a) 动量 $p=\dfrac{h}{\lambda}=\dfrac{6.62\times10^{-27}\text{erg}\cdot\text{s}}{2\times10^{-8}\text{cm}}=3.31\times10^{-19}\text{g}\cdot\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}$.

(b) 总能量 $E=\dfrac{p^2}{2\mu}+V=\dfrac{(3.31\times10^{-19}\text{g}\cdot\text{cm}\cdot\text{s}^{-1})^2}{2\times9.1\times10^{-28}\text{g}}=0.598\times10^{-10}\text{erg}=0.598\times10^{-17}\text{J}$，式中 V 为势能，对于动量不变的自由空间来说 $V=0$.

(c) 动能 $T=\dfrac{p^2}{2\mu}=\dfrac{(3.31\times10^{-19}\text{g}\cdot\text{cm}\cdot\text{s}^{-1})^2}{2\times9.1\times10^{-28}\text{g}}=0.598\times10^{-10}\text{erg}=0.598\times10^{-17}\text{J}$.

电子的德布罗意波的相速

$$u=\frac{E}{p}=\frac{0.598\times10^{-10}\text{erg}}{3.31\times10^{-19}\text{g}\cdot\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}}=0.181\times10^{9}\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}=1.81\times10^{6}\text{m}\cdot\text{s}^{-1}.$$

(2) 对于光子，根据爱因斯坦关系 $E=\hbar\omega=\dfrac{hc}{\lambda}$，$p=\dfrac{\hbar2\pi}{\lambda}=\dfrac{h}{\lambda}$，求得

(a) 动量 $p=\dfrac{h}{\lambda}=\dfrac{6.62\times10^{-27}\text{erg}\cdot\text{s}}{2\times10^{-8}\text{cm}}=3.31\times10^{-19}\text{g}\cdot\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}$.

(b) 总能量 $E=\dfrac{hc}{\lambda}=\dfrac{6.62\times10^{-27}\text{erg}\cdot\text{s}\times3\times10^{10}\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}}{2\times10^{-8}\text{cm}}=9.93\times10^{-9}\text{erg}=9.93\times10^{-16}\text{J}$.

(c) 动能即总能量 $E=9.93\times10^{-9}\text{erg}=9.93\times10^{-16}\text{J}$.

答　电子的动量 $p=3.31\times10^{-19}\text{g}\cdot\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}$，电子的总能量 $E=0.598\times10^{-17}\text{J}$，电子的动能 $T=0.598\times10^{-17}\text{J}$. 电子的德布罗意波的相速 $u=1.81\times10^{6}\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$；光子的动量 $p=3.31\times10^{-19}\text{g}\cdot\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}$，光子的总能量和动能都是 $9.93\times10^{-16}\text{J}$.

1.26　热中子有平均动能 $\dfrac{3}{2}kT$，$T=300\text{K}$，(1) 它的能量是多少？(2) 相应的德布罗意波长和频率分别是多少？

分析　平均动能 $\dfrac{3}{2}kT$，式中 $k=1.38\times10^{-23}\text{J}\cdot\text{K}^{-1}$ 为玻尔兹曼常量；能量 $E=\dfrac{p^2}{2\mu_n}=\dfrac{1}{2\mu_n}\left(\dfrac{h}{\lambda}\right)^2$，可求出波长

$$\lambda=\sqrt{\frac{h^2}{2\mu_n E}}\ , \tag{1.26-1}$$

能量 $E=\dfrac{\mu_n v^2}{2}=\dfrac{\mu_n}{2}(\nu\lambda)^2=\dfrac{\mu_n}{2}\nu^2\dfrac{h^2}{2\mu_n E}$，求出

$$\nu=\frac{2E}{h}. \tag{1.26-2}$$

解　(1) $E=\dfrac{3}{2}kT=1.5\times1.38\times10^{-23}\,\mathrm{J\cdot K^{-1}}\times300\mathrm{K}=6.21\times10^{-21}\mathrm{J}=6.21\times10^{-14}\mathrm{erg}$.

(2) 由式(1.26-1)，中子的质量 $\mu_n=1.674\,9\times10^{-27}\mathrm{kg}$，得

$$\lambda=\sqrt{\frac{h^2}{2\mu_n E}}=\frac{6.62\times10^{-34}\,\mathrm{J\cdot s}}{\sqrt{2\times1.674\,9\times10^{-27}\mathrm{kg}\times6.21\times10^{-21}\mathrm{J}}}=1.451\times10^{-10}\mathrm{m}\ ;$$

由式(1.26-2)计算德布罗意波的频率

$$\nu=\frac{2E}{h}=\frac{2\times6.21\times10^{-21}\mathrm{J}}{6.62\times10^{-34}\,\mathrm{J\cdot s}}=1.876\times10^{13}\mathrm{s^{-1}}.$$

答　热中子的能量是 $6.21\times10^{-21}\mathrm{J}$；相应的德布罗意波长为 $1.451\times10^{-10}\mathrm{m}$，频率为 $1.876\times10^{13}\mathrm{s^{-1}}$.

1.27　对于波长 4 910Å 的光，从受照射表面发射光电子的截止电势 $V_c=0.71\mathrm{V}$，当光的波长改变时，截止电势 V_c 改变为 1.43V，问对应的入射光的波长是多少?

分析　由光电效应方程

$$\hbar\omega=T+\Phi\ , \tag{1.27-1}$$

式中动能 $T=eV_c$，V_c 就是截止电势(压). $\hbar\omega=\dfrac{hc}{\lambda}$，不同波长的入射光相应的截止电势 V_c 则不同.

解　由 $\hbar\omega=T+\Phi$，得到当反向截止电势的大小等于光电子的动能时，光电流截止，则

$$\Phi=\hbar\frac{2\pi c}{\lambda}-eV_c=\frac{hc}{\lambda}-eV_c\ , \tag{1.27-2}$$

注意，$1\mathrm{eV}=1.6\times10^{-12}\mathrm{erg}$，由题意知入射光的波长为 4 910Å，截止电势 $V_c=0.71\mathrm{V}$，则

$$\Phi=\frac{hc}{\lambda}-eV_c=\frac{6.62\times10^{-27}\,\mathrm{erg\cdot s}\times3\times10^{10}\,\mathrm{cm\cdot s^{-1}}}{4\,910\times10^{-8}\mathrm{cm}}-1.6\times10^{-12}\times0.71\mathrm{erg}$$

$$=2.90\times10^{-12}\mathrm{erg},$$

当截止电势 $V_c=1.43\text{V}$ 时，

$$\Phi=\frac{hc}{\lambda}-eV_c=\frac{6.62\times10^{-27}\text{erg}\cdot\text{s}\times3\times10^{10}\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}}{\lambda}-1.6\times10^{-12}\times1.43\text{erg}$$

$$=2.90\times10^{-12}\text{erg},$$

$$\lambda=\frac{6.62\times10^{-27}\text{erg}\cdot\text{s}\times3\times10^{10}\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}}{1.6\times10^{-12}\times1.43\text{erg}+2.90\times10^{-12}\text{erg}}=3.828\times10^{-5}\text{cm}=3\ 828\text{Å}=382.8\text{nm}.$$

答　截止电势 V_c 为1.43V 所对应的入射光的波长为 382.8nm .

1.28　光照射在 AgBr 的照相版上，使 AgBr 分子分解所需要的最小能量为 10^{-12}erg，求使照相版感光的截止波长. 距100W 灯泡(1%变成光能)10cm 处放上照相版，设 AgBr 分子的直径为 2Å，用经典理论估计使照相版感光需要多长曝光时间？和你的经验一致吗？

分析　本题来源于日常生活中的拍照过程，只不过目前很少使用胶片成像，大多用数码相机了，只是在医院里 CT 成像等还出胶片.

光子能量 $E=\hbar\omega=\dfrac{hc}{\lambda}$；点光源光强 $I=\dfrac{P}{4\pi r^2}\times\eta$，式中 P 为光源的功率，r 为离光源的距离，η 为发光效率.

解　设光的圆频率为 ω，若该光能够使 AgBr 分子分解而感光，则

$$E_{\min}=10^{-12}\text{erg}\leqslant\hbar\omega=h\frac{c}{\lambda},$$

即

$$\lambda\leqslant\frac{hc}{E_{\min}}=\frac{6.62\times10^{-27}\text{erg}\cdot\text{s}\times3\times10^{10}\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}}{10^{-12}\text{erg}}=1.98\times10^{-4}\text{cm}=19800\text{Å},$$

将灯泡近似看作为一个点光源，离灯泡 10m 处的光强为

$$I=\frac{P}{4\pi r^2}\times\eta=\frac{10^7\text{erg}\cdot\text{s}^{-1}}{4\times3.14\times(10\times100\text{cm})^2}=\frac{10^7\text{erg}\cdot\text{s}^{-1}}{4\times3.14\times(10\times100\text{cm})^2},$$

AgBr 分子每秒吸收的能量

$$IA=I\pi\left(\frac{2\times10^{-8}\text{cm}}{2}\right)^2=\frac{10^7\text{erg}\cdot\text{s}^{-1}}{4\times3.14\times(10\times100\text{cm})^2}\times3.14\times\left(\frac{2\times10^{-8}\text{cm}}{2}\right)^2,$$

已知使 AgBr 分子分解所需的最小能量为 $E_{\min}=10^{-12}\text{erg}$，则曝光时间

$$t=\frac{E_{\min}}{IA}=\frac{10^{-12}\text{erg}}{\dfrac{10^7\text{erg}\cdot\text{s}^{-1}}{4\times3.14\times(10\times100\text{cm})^2}\times3.14\times\left(\dfrac{2\times10^{-8}\text{cm}}{2}\right)^2}=4\,000\text{s}.$$

实际上，曝光时间只需要10^{-2}s，所以经典理论磁到困难，光和物质相互作用，要考虑光的粒子性.

答　使照相版感光需要曝光时间4 000s，与经验不一致，说明光和物质相互作用，要考虑光的粒子性.

1.29　如果两束波长不同的光束有相同的强度(能流密度)，证明光子流的密度与波长的比值相等.

分析　光子流可以看作是电场和磁场传播，电场强度$\boldsymbol{E}$的方向、磁场强度$\boldsymbol{H}$的方向、光子流传播的方向$\boldsymbol{u}$，形成右手螺旋关系. 设两光束的波长分别为λ_1和λ_2，则光子动量分别为$p_1=\dfrac{h}{\lambda_1}$和$p_2=\dfrac{h}{\lambda_2}$，每束光的能量密度$I=\dfrac{E^2+H^2}{8\pi}$，设

$$\boldsymbol{E}=\boldsymbol{E}_0\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}-Et)},\quad \boldsymbol{H}=\boldsymbol{H}_0\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}-Et)},$$

式中振幅$\boldsymbol{E}_0$和$\boldsymbol{H}_0$都与$\boldsymbol{x}$和t无关，则

$$I=\frac{E_0^2+H_0^2}{8\pi} \tag{1.29-1}$$

为能量密度.

证明　由题意，两束波长不同的光束有相同的强度，记$I(\lambda_1)c=I(\lambda_2)c$，则

$$E_0^2(\lambda_1)+H_0^2(\lambda_1)=E_0^2(\lambda_2)+H_0^2(\lambda_2). \tag{1.29-2}$$

由于圆频率为ω的光的光子有能量$\hbar\omega$，则

$$I'=\frac{I}{\hbar\omega}=\frac{E_0^2+H_0^2}{8\pi\hbar}\frac{1}{\omega}=\frac{E_0^2+H_0^2}{8\pi\hbar}\frac{1}{2\pi\dfrac{c}{\lambda}} \tag{1.29-3}$$

为光子密度，而光子流密度

$$j=I'c=\frac{(E_0^2+H_0^2)\lambda}{8\pi\hbar\times 2\pi}, \tag{1.29-4}$$

故

$$\frac{j}{\lambda}=\frac{E_0^2+H_0^2}{16\pi^2\hbar}. \tag{1.29-5}$$

与时空坐标t和$\boldsymbol{x}$无关，由于两束波长不同的光束有相同的能流密度，则$E_0^2+H_0^2$也和λ无关，所以

$$\frac{j_1}{\lambda_1}=\frac{j_2}{\lambda_2}. \tag{1.29-6}$$

证毕.

1.30　如果一个原子静止并处于基态，另一个原子有动能 T，但也处在基态，若 $T<2E$，E 是原子的第一激发能. 证明两原子的碰撞只能是弹性的.

分析　该碰撞为弹性碰撞，满足动量守恒和动能守恒.

证明　在实验室坐标系来看，设第 2 个原子静止，而第 1 个原子以速度 v_1 撞向第 2 个原子，如图 1.30-1 所示.



图 1.30-1　原子以 v_1 撞向原子 2

设两个原子质量相等，都是 μ，在实验室看两个原子的质心以 $\frac{v_1}{2}$ 运动，则在两个原子的质心坐标系来看，原子 1 以 $\frac{v_1}{2}$ 运动，原子 2 以 $-\frac{v_1}{2}$ 运动，如果碰撞后粒子 2 被激发到第 1 激发态，则对于非弹性碰撞有

$$\text{能量守恒：}\ \frac{\mu}{2}\left(\frac{v_1}{2}\right)^2+\frac{\mu}{2}\left(-\frac{v_1}{2}\right)^2=\frac{\mu}{2}v_{11}^2+\frac{\mu}{2}v_{21}^2+E\,, \tag{1.30-1}$$

$$\text{动量守恒：}\ \mu\left(\frac{v_1}{2}\right)+\mu\left(-\frac{v_1}{2}\right)=\mu v_{11}+\mu v_{21}\,, \tag{1.30-2}$$

即 $v_{11}+v_{21}=0$，得 $v_{11}^2=v_{21}^2$，代入式(1.30-1)后得 $\frac{\mu}{4}v_1^2=\mu v_{11}^2+E$，即

$$T=\frac{\mu}{2}v_1^2=2\mu v_{11}^2+2E\,. \tag{1.30-3}$$

显然，如果 $T<2E$，则式(1.30-3)不能满足，即假定发生非弹性碰撞不真，也就是说，当 $T<2E$ 时，只能发生弹性碰撞.

证毕.

1.31　在透明介质中，光的速度是 $\frac{c}{n}<c$，式中 n 是透明介质的折射率，c 是真空中的光速，静止质量为 μ_0 的自由带电粒子以速度 $v>\frac{c}{n}$ 穿过介质，证明在此情形带电粒子能发射光子，且光子的发射方向限制在以粒子速度方向为轴的圆锥内，问圆锥的半顶角及光子的最小波长各为多少?

分析　带电粒子辐射过程满足动量守恒和动能守恒条件.

证明　设光的圆频率为 ω，则光子的能量 $E=\hbar\omega$，光在介质中的速度 $c'=\frac{c}{n}$，则光子在介质中的动量

$$p_{光}=\hbar k=\hbar\frac{2\pi}{c'/\nu}=\frac{\hbar\omega}{c'}=n\frac{\hbar\omega}{c}\,, \tag{1.31-1}$$

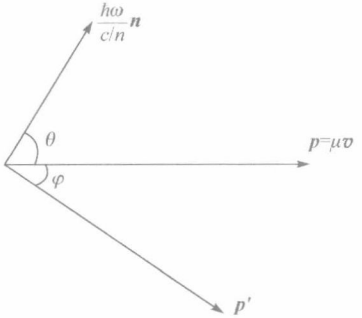

图 1.31-1　散射图

设带电粒子辐射前的动量为 $\boldsymbol{p}=\mu\boldsymbol{v}$，辐射光子后的动量为 $\boldsymbol{p}'$，如图 1.31-1 所示.

辐射过程满足守恒定律

动量守恒：$\boldsymbol{p}=\boldsymbol{p}'+\boldsymbol{p}_{光}$，　(1.31-2)

能量守恒：$\sqrt{c^2p^2+\mu_0^2c^4}-\hbar\omega=\sqrt{c^2p'^2+\mu_0^2c^4}$，　(1.31-3)

式(1.31-2)分解成垂直的两个方向得 $p=p_{光}\cos\theta+p'\cos\varphi$，$p_{光}\sin\theta=p'\sin\varphi$，故

$$p'^2=p^2+p_{光}^2-2pp_{光}\cos\theta=p^2+\left(\frac{\hbar\omega}{c/n}\right)^2-2p\frac{\hbar\omega}{c/n}\cos\theta,\tag{1.31-4}$$

由式(1.31-3)得

$$c^2p'^2+\mu_0^2c^4=c^2p^2+\mu_0^2c^4+(\hbar\omega)^2-2\hbar\omega\sqrt{c^2p^2+\mu_0^2c^4}\,,$$

$$c^2p'^2=c^2p^2+(n\hbar\omega)^2-2pcn\hbar\omega\cos\theta\,,$$

$$(n\hbar\omega)^2-2pcn\hbar\omega\cos\theta=(\hbar\omega)^2-2\hbar\omega\sqrt{c^2p^2+\mu_0^2c^4}\,,$$

$$\cos\theta=\frac{(n\hbar\omega)^2-(\hbar\omega)^2+2\hbar\omega\sqrt{c^2p^2+\mu_0^2c^4}}{2pcn\hbar\omega}=\frac{(n^2-1)\hbar\omega+2\sqrt{c^2p^2+\mu_0^2c^4}}{2pcn}.\tag{1.31-5}$$

要使 $\cos\theta\leqslant1$，才能辐射光子，为此必须有 $2pcn\geqslant(n^2-1)\hbar\omega+2\sqrt{c^2p^2+\mu_0^2c^4}$，即

$$2cn\mu v\geqslant(n^2-1)\hbar\omega+2\mu c^2\,,$$

$$v\geqslant\frac{(n^2-1)\hbar\omega}{2cn\mu}+\frac{c}{n}\,,\tag{1.31-6}$$

其中 μ 为带电粒子的动质量.

由式(1.31-6)得 $\omega\leqslant\dfrac{2cn\mu\left(v-\dfrac{c}{n}\right)}{(n^2-1)\hbar}$，光子的最小波长为

$$\lambda\geqslant\frac{2\pi\dfrac{c}{n}}{\omega}=\frac{2\pi\dfrac{c}{n}}{\dfrac{2cn\mu\left(v-\dfrac{c}{n}\right)}{(n^2-1)\hbar}}=\frac{\pi(n^2-1)\hbar}{n\mu(vn-c)}.$$

当 $v>\dfrac{c}{n}$ 时，带电粒子的动质量变大，此时 $\dfrac{\hbar\omega}{\mu c}$ 是小量，$\cos\theta$ 变为

$$\cos\theta=\frac{(n^2-1)\hbar\omega+2\mu c^2}{2pcn}>\frac{c}{nv}=\cos\theta_0.$$

所以，$\theta<\theta_0$，θ_0为圆锥半顶角.

答　圆锥的半顶角为$\theta_0=\arccos\dfrac{c}{nv}$，光子的最小波长为$\dfrac{\pi(n^2-1)\hbar}{n\mu(vn-c)}$.

1.32　白光照射氢原子气体，通过气体后有哪些波长或者频率成分的光，强度减弱?

分析　氢原子光谱线可分为拉曼线系、巴耳末线系、布拉开线系等，其中可见光的谱线属于巴耳末线系，波长分别为6 563Å、4 861Å、4 341Å、4 102Å等. 这些光谱线波可以用$\lambda=\dfrac{hc}{\Delta E}$获得，式中$\Delta E=|E_i-E_f|$为两能级之差，$f=2$，$i=3,4,5,6,\cdots$，能级$E_n=-\dfrac{13.6\text{eV}}{n^2}$，$n=1,2,3,\cdots$.

解　白光波长范围为3 600～7 600Å，其中圆频率等于$\dfrac{\Delta E}{\hbar}$成分的光，强度减弱，其中ΔE为氢原子的能级差，以氢原子处于基态为例，白光中频率等于氢光谱拉曼线系频率成分的光，强度减弱，因为这些频率的光子使氢原子从基态激发到激发态，从而被吸收了.

答　白光中波长为6 563Å、4 861Å、4 341Å、4 102Å的光，强度减弱.

1.33　超导态金属中电子能级如图1.33-1所示，最下面是基态，以上相隔Δ是整片密集而几乎连续的能级. 电磁波照射在超导金属时，被吸收的频率特性如何？考虑温度为$T=0\text{K}$和$T>0\text{K}$的两种情形.

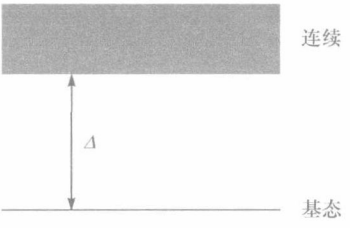

图1.33-1　超导态金属

分析　从高能级向低能级跃迁放出光子，从低能级向高能级跃迁吸收光子，光子的圆频率$\omega=\dfrac{\Delta}{\hbar}$，式中$\Delta$为两能级之差.

解　当$T=0\text{K}$时，电子都处于基态能级，电磁波照射在超导态金属时，圆频率$\omega\geqslant\dfrac{\Delta}{\hbar}$的光被吸收，使得电子从基态跃迁到连续谱能级；若$\omega<\dfrac{\Delta}{\hbar}$电磁波不能被吸收. 当$T>0\text{K}$时，电子按$\text{e}^{-\frac{E}{kT}}$统计分布，除了电子分布在基态为主外，还有少数电子分布在能量连续的状态. 加上电磁波后，$\hbar\omega<\Delta$的电磁波不能引起处在

基态的电子跃迁到连续谱状态，但可引起外在连续谱状态的电子向更高能态跃迁. 当 $\hbar\omega \geqslant \Delta$ 时，不但引起处在基态的电子跃迁，也可引起处在连续谱上的电子跃迁，也就是 $\hbar\omega \geqslant \Delta$ 的电磁波被吸收的概率较大.

答　$\hbar\omega \geqslant \Delta$ 的电磁波被吸收的概率较大，$\hbar\omega < \Delta$ 的电磁波不能引起处在基态的电子跃迁到连续谱状态.

1.34　求正负电子组成的电子偶素的束缚态能级. 如果 μ^+ 和 μ^- 组成的束缚态，其能级又如何?

分析　对于电子偶素，折合质量 $\mu = \dfrac{\mu_e}{2}$，其束缚能级

$$E_n = -\frac{e^2}{2\dfrac{\hbar^2}{\mu e^2}}\frac{1}{n^2} = -\frac{e^2}{4\dfrac{\hbar^2}{\mu_e e^2}}\frac{1}{n^2} = -\frac{\mu_e e^4}{4\hbar^2 n^2}. \tag{1.34-1}$$

解　正负电子组成的电子偶素的束缚态能级 $E_n = -\dfrac{\mu_e e^4}{4\hbar^2 n^2}$；如果 μ^+ 和 μ^- 组成的束缚态，折合质量 $\mu = \dfrac{\mu_\mu}{2} = \dfrac{207}{2}\mu_e$，其束缚态能级

$$E_n = -\frac{e^2}{2\dfrac{\hbar^2}{\mu e^2}}\frac{1}{n^2} = -\frac{e^2}{\dfrac{4}{207}\dfrac{\hbar^2}{\mu_e e^2}}\frac{1}{n^2} = -\frac{207\mu_e e^4}{4\hbar^2 n^2}. \tag{1.34-2}$$

答　正负电子组成的电子偶素的束缚态能级 $-\dfrac{\mu_e e^4}{4\hbar^2 n^2}$；$\mu^+$ 和 μ^- 组成的束缚态，其能级为 $-\dfrac{207\mu_e e^4}{4\hbar^2 n^2}$.

1.35　在 X 射线管中，电子从阴极出发经几万伏高压加速后打在对阴极(阳极)上而骤然停止，同时发射 X 射线(韧致辐射). 所发射的 X 射线的频率特性如何?

分析　经几万伏高压加速后的电子能量全部转化为光子能量，有

$$eV = \hbar\omega. \tag{1.35-1}$$

解　韧致辐射的 X 射线频谱是有短波极限的连续谱. 经几万伏高压加速后的电子能量 T_e 如果全部转化为光子能量，则

$$T_e = eV = \hbar\omega_{\max} = h\frac{c}{\lambda_{\min}},$$

即

$$\lambda_{\min}=\frac{hc}{eV}$$

为短波极限波长. 若 $T_e=\hbar\omega+E$，E 是传递给对阴极的能量，则 $\omega<\omega_{\max}$，即 $\lambda>\lambda_{\min}$.

答　所发射的 X 射线的圆频率 $\omega<\dfrac{eV}{\hbar}$.

1.36　在光电效应实验中，用不同波长的单色光照射，测出对应的截止电压 V_0，如表 1.36-1 所示.

表 1.36-1　单色光波长与截止电压关系

λ / Å	2536	3132	3650	4047
V / V	1.93	0.98	0.50	0.14

由此定出普朗克常量 h 来.

分析　爱因斯坦光电效应方程为

$$h\nu=T+\Phi. \tag{1.36-1}$$

式中，ν 为入射光子的频率，与波长 λ 的关系是 $\nu=\dfrac{c}{\lambda}$.

解 1　由频率与波长 λ 的关系 $\nu=\dfrac{c}{\lambda}$ 和由 V_0 / V 可得 eV_0 / eV，

$$\nu_1=\frac{c}{\lambda_1}=\frac{3\times10^{10}\,\mathrm{cm\cdot s^{-1}}}{2\,536\times10^{8}\,\mathrm{cm}}=11.83\times10^{14}\,\mathrm{s^{-1}},\quad \nu_2=\frac{c}{\lambda_2}=\frac{3\times10^{10}\,\mathrm{cm\cdot s^{-1}}}{3\,132\times10^{8}\,\mathrm{cm}}=9.58\times10^{14}\,\mathrm{s^{-1}},$$

$$\nu_3=\frac{c}{\lambda_3}=\frac{3\times10^{10}\,\mathrm{cm\cdot s^{-1}}}{3\,650\times10^{8}\,\mathrm{cm}}=8.22\times10^{14}\,\mathrm{s^{-1}},\quad \nu_4=\frac{c}{\lambda_4}=\frac{3\times10^{10}\,\mathrm{cm\cdot s^{-1}}}{4\,047\times10^{8}\,\mathrm{cm}}=7.41\times10^{14}\,\mathrm{s^{-1}}.$$

由 $eV_0=T=h\nu-\Phi$，如表 1.36-2 所示.

表 1.36-2　动能与入射光频率的关系

T / eV	0.14	0.5	0.98	1.93
$\nu/10^{14}\,\mathrm{s^{-1}}$	7.41	8.22	9.58	11.83

$\Delta T=h\Delta\nu$，则 $h=\dfrac{\Delta T}{\Delta\nu}$，故

$$h_1=\frac{0.50\mathrm{eV}-0.14\mathrm{eV}}{(8.22-7.41)\times10^{14}\,\mathrm{s^{-1}}}=\frac{0.36\mathrm{eV}\times1.6\times10^{-12}\,\mathrm{erg/eV}}{(8.22-7.41)\times10^{14}\,\mathrm{s^{-1}}}$$

$$=7.1\times10^{-27}\,\mathrm{erg\cdot s}=7.1\times10^{-34}\,\mathrm{J\cdot s},$$

$$h_2=\frac{0.98\text{eV}-0.50\text{eV}}{(9.58-8.22)\times10^{-14}\text{s}^{-1}}=\frac{0.48\text{eV}\times1.6\times10^{-12}\text{erg/eV}}{1.36\times10^{-14}\text{s}^{-1}}$$
$$=5.65\times10^{-27}\text{erg}\cdot\text{s}=5.65\times10^{-34}\text{J}\cdot\text{s},$$
$$h_3=\frac{1.95\text{eV}-0.98\text{eV}}{(11.83-9.58)\times10^{-14}\text{s}^{-1}}=\frac{0.97\text{eV}\times1.6\times10^{-12}\text{erg/eV}}{2.25\times10^{-14}\text{s}^{-1}}$$
$$=6.89\times10^{-27}\text{erg}\cdot\text{s}=6.89\times10^{-34}\text{J}\cdot\text{s},$$
$$h=\frac{h_1+h_2+h_3}{3}=6.55\times10^{-27}\text{erg}\cdot\text{s}=6.55\times10^{-34}\text{J}\cdot\text{s}.$$

解 2　先将动能的单位由 eV 转化为 J，如表 1.36-3 所示.

表 1.36-3　动能与入射光频率的关系

$T/10^{-19}$J	0.224	0.8	1.568	3.088
$\nu/10^{14}\text{s}^{-1}$	7.41	8.22	9.58	11.83

利用最小二乘法求普朗克常量 h，方法是 $T=h\nu-\Phi$，转化为 $y=kx+b$，即 $T\to y$，$h\to k$，$\nu\to x$，$-\Phi\to b$，显然

$x_1=7.41\times10^{14}$，$x_2=8.22\times10^{14}$，$x_3=9.58\times10^{14}$，$x_4=11.83\times10^{14}$，单位为 s^{-1}；

$y_1=0.224\times10^{-19}$，$y_2=0.80\times10^{-19}$，$y_3=1.568\times10^{-19}$，$y_4=3.12\times10^{-19}$，单位为 J；

令 $\delta=\sum_{i=1}^{4}(y_i-kx_i-b)^2$，则

$$\frac{\partial}{\partial k}\delta=\frac{\partial}{\partial k}\sum_{i=1}^{4}(y_i-kx_i-b)^2=\sum_{i=1}^{4}2(y_i-kx_i-b)(-x_i)=0,\tag{1.36-2}$$

$$\frac{\partial}{\partial b}\delta=\frac{\partial}{\partial b}\sum_{i=1}^{4}(y_i-kx_i-b)^2=-\sum_{i=1}^{4}2(y_i-kx_i-b)=0,\tag{1.36-3}$$

由式(1.36-2)得

$$\sum_{i=1}^{4}y_ix_i-k\sum_{i=1}^{4}x_i^2-b\sum_{i=1}^{4}x_i=0,\tag{1.36-4}$$

由式(1.36-3)得

$$\sum_{i=1}^{4}y_i-k\sum_{i=1}^{4}x_i-4b=0,\tag{1.36-5}$$

$b=\dfrac{\sum_{i=1}^{4}y_i-k\sum_{i=1}^{4}x_i}{4}$ 代入式(1.36-4)得 $\sum_{i=1}^{4}y_ix_i-k\sum_{i=1}^{4}x_i^2-\dfrac{\sum_{i=1}^{4}y_i-k\sum_{i=1}^{4}x_i}{4}\sum_{i=1}^{4}x_i=0$，

$$4\sum_{i=1}^{4}y_ix_i-4k\sum_{i=1}^{4}x_i^2-\sum_{i=1}^{4}y_i\sum_{i=1}^{4}x_i+k\left(\sum_{i=1}^{4}x_i\right)^2=0,$$

$$k=\frac{\sum_{i=1}^{4}y_i\sum_{i=1}^{4}x_i-4\sum_{i=1}^{4}y_ix_i}{\left(\sum_{i=1}^{4}x_i\right)^2-4\sum_{i=1}^{4}x_i^2}, \tag{1.36-6}$$

$$b=\frac{\sum_{i=1}^{4}y_ix_i\sum_{i=1}^{4}x_i-\sum_{i=1}^{4}y_i\sum_{i=1}^{4}x_i^2}{\left(\sum_{i=1}^{4}x_i\right)^2-4\sum_{i=1}^{4}x_i^2}, \tag{1.36-7}$$

则

$$k=\frac{\sum_{i=1}^{4}y_i\sum_{i=1}^{4}x_i-4\sum_{i=1}^{4}y_ix_i}{\left(\sum_{i=1}^{4}x_i\right)^2-4\sum_{i=1}^{4}x_i^2}=6.414\times10^{-34},$$

$$b=\frac{\sum_{i=1}^{4}y_ix_i\sum_{i=1}^{4}x_i-\sum_{i=1}^{4}y_i\sum_{i=1}^{4}x_i^2}{\left(\sum_{i=1}^{4}x_i\right)^2-4\sum_{i=1}^{4}x_i^2}=-4.5198\times10^{-19}.$$

可见，普朗克常量 $h=6.414\times10^{-34}\,\mathrm{J\cdot s}$.

答　普朗克常量 $h=6.414\times10^{-34}\,\mathrm{J\cdot s}$.

1.37　在康普顿效应中，如果入射光的波长为 0.708Å，试回答下列问题：

(1) 如果散射角为 30°，则波长的改变为多少？

(2) 相应的电子的反冲角为多少？

(3) 反冲电子的动能 T 为多少？

分析　康普顿效应示意图如图 1.37-1 所示，入射的光子方向为 $\boldsymbol{n}_0$ 与散射的方向 $\boldsymbol{n}$ 成散射角 θ，散射过程满足

动量守恒：$\boldsymbol{p}=\dfrac{\hbar\omega_0}{c}\boldsymbol{n}_0-\dfrac{\hbar\omega}{c}\boldsymbol{n}$，即 $\begin{cases}\dfrac{\hbar\omega_0}{c}=\dfrac{\hbar\omega}{c}\cos\theta+\mu v\cos\varphi\\ \dfrac{\hbar\omega}{c}\sin\theta=\mu v\sin\varphi\end{cases}$；　(1.37-1)

能量守恒：$\hbar\omega_0+\mu_0c^2=\hbar\omega+\sqrt{c^2p^2+\mu_0^2c^4}$，　(1.37-2)

式中 μ_0 为电子的静止质量，$p=\mu v$，入射的光子波长为 $\lambda_0=\dfrac{2\pi c}{\omega_0}$，散射的光子波长为 $\lambda=\dfrac{2\pi c}{\omega}$，它们之间的光程差为

$$\Delta\lambda=\lambda-\lambda_0=\frac{h}{\mu_0c}(1-\cos\theta). \tag{1.37-3}$$

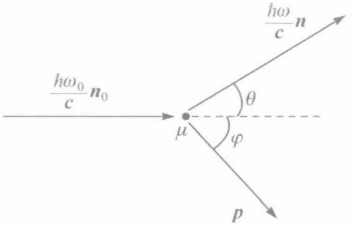

图 1.37-1　康普顿效应示意图

解　(1) 波长增加 $\Delta\lambda=2\lambda_c\sin^2\dfrac{\theta}{2}$，式中 $\lambda_c=\dfrac{h}{\mu_0c}=0.024$Å 为康普顿波长，$\mu_0$ 是电子的静止质量. 由题意 $\theta=30°$，$\sin15°=0.258\,87$，即

$$\Delta\lambda=2\times0.024\text{Å}\times(0.258\,87)^2=0.003\,217\text{Å};$$

(2) 电子反冲角 φ.

由式(1.37-1)得

$$\tan\varphi=\frac{\dfrac{\hbar\omega}{c}\sin\theta}{\dfrac{\hbar\omega_0}{c}-\dfrac{\hbar\omega}{c}\cos\theta}=\frac{\omega\sin\theta}{\omega_0-\omega\cos\theta}, \tag{1.37-4}$$

以及

$$p^2=\left(\frac{\hbar\omega_0}{c}\right)^2+\left(\frac{\hbar\omega}{c}\right)^2-2\frac{\hbar^2\omega\omega_0}{c^2}\cos\theta, \tag{1.37-5}$$

由(1.37-2)得

$$p^2=\frac{(\hbar\omega_0)^2+(\hbar\omega)^2-2\hbar^2\omega_0\omega}{c^2}+2(\hbar\omega_0-\hbar\omega)\mu_0, \tag{1.37-6}$$

由式(1.37-5)和式(1.37-6)得

$$\frac{\hbar\omega\omega_0}{c^2}(1-\cos\theta)=(\omega_0-\omega)\mu_0,\quad \omega\left[\frac{\hbar\omega_0}{c^2}(1-\cos\theta)+\mu_0\right]=\omega_0\mu_0,$$

$$\omega=\frac{\omega_0\mu_0}{\dfrac{\hbar\omega_0}{c^2}(1-\cos\theta)+\mu_0}. \tag{1.37-7}$$

将式(1.37-7)代入式(1.37-4)，得

$$\tan\varphi=\frac{\dfrac{\hbar\omega}{c}\sin\theta}{\dfrac{\hbar\omega_0}{c}-\dfrac{\hbar\omega}{c}\cos\theta}=\frac{\dfrac{\omega_0\mu_0}{\dfrac{\hbar\omega_0}{c^2}(1-\cos\theta)+\mu_0}\sin\theta}{\omega_0-\dfrac{\omega_0\mu_0}{\dfrac{\hbar\omega_0}{c^2}(1-\cos\theta)+\mu_0}\cos\theta}$$

$$=\frac{\mu_0\sin\theta}{\left[\dfrac{\hbar\omega_0}{c^2}(1-\cos\theta)+\mu_0\right]-\mu_0\cos\theta}=\frac{\cos\dfrac{\theta}{2}}{\left(\dfrac{\hbar\omega_0}{\mu_0c^2}+1\right)\sin\dfrac{\theta}{2}}=\frac{\cot\dfrac{\theta}{2}}{\dfrac{\hbar\omega_0}{\mu_0c^2}+1}.$$

题设 $\lambda_0=0.708\text{Å}$，$\omega_0=\dfrac{2\pi c}{\lambda_0}$，$\theta=30°$，故

$$\tan\varphi=\frac{\cot\dfrac{\theta}{2}}{\dfrac{\hbar\omega_0}{\mu_0c^2}+1}=\frac{\cot15°}{\dfrac{1.05\times10^{-34}\,\text{J}\cdot\text{s}\times6.28}{9.1\times10^{-31}\,\text{kg}\times0.708\times10^{-10}\,\text{m}\times3\times10^{8}\,\text{m}\cdot\text{s}^{-1}}+1}=3.6104,$$

$$\varphi=74°34'.$$

(3) 反冲电子的动能 $T=\sqrt{c^2p^2+\mu_0^2c^4}-\mu_0c^2=\hbar\omega_0-\hbar\omega=\hbar\omega_0-h\dfrac{\omega_0\mu_0}{\dfrac{\hbar\omega_0}{c^2}(1-\cos\theta)+\mu_0}$，

$$T=h\frac{2\pi c}{\lambda_0}-h\frac{\dfrac{2\pi c}{\lambda_0}\mu_0}{\hbar\dfrac{2\pi c}{\lambda_0}(1-\cos\theta)+\mu_0}=h\frac{2\pi c}{\lambda_0}-h\frac{\dfrac{2\pi c}{\lambda_0}\mu_0}{\hbar\dfrac{2\pi}{\lambda_0c}(1-\cos\theta)+\mu_0}$$

$$=\frac{hc}{\lambda_0}-\frac{\dfrac{hc}{\lambda_0}\mu_0}{\dfrac{h}{\lambda_0c}(1-\cos\theta)+\mu_0}=\frac{hc}{\lambda_0}\left[1-\frac{\mu_0}{\dfrac{h}{\lambda_0c}(1-\cos\theta)+\mu_0}\right]$$

$$=\frac{hc}{\lambda_0}\left[\frac{h(1-\cos30°)}{h(1-\cos30°)+\mu_0\lambda_0c}\right]=\frac{6.62\times10^{-34}\,\text{J}\cdot\text{s}\times3\times10^{8}\,\text{m}\cdot\text{s}^{-1}}{0.708\times10^{-10}\,\text{m}}$$

$$\times\left[\frac{6.62\times10^{-34}\,\text{J}\cdot\text{s}\times(1-\cos30°)}{6.62\times10^{-34}\,\text{J}\cdot\text{s}\times(1-\cos30°)+9.1\times10^{-31}\,\text{kg}\times0.708\times10^{-10}\,\text{m}\times3\times10^{8}\,\text{m}\cdot\text{s}^{-1}}\right]$$

$$=1.280\,01\times10^{-17}\,\text{J}.$$

答　(1) 波长的改变为 $\Delta\lambda=0.003\ 217\text{Å}$；(2) 电子反冲角 $\varphi=74°34'$；(3) 反

冲电子的动能为$1.280\,01\times10^{-17}$J.

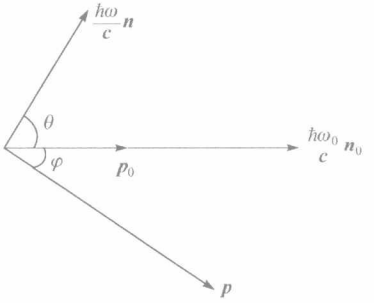

图 1.38-1　康普顿效应示意图

1.38　在康普顿散射实验中，如果电子不静止，而是有动量$\boldsymbol{p}_0$，方向与入射光的方向相一致，这时的波长改变公式应如何表示？若入射光子能量为2eV，电子的动能为2×10^{10}eV，运动方向与入射光相反，求散射光子的最大能量.

分析　设入射光子的能量为$\hbar\omega_0$，散射角为θ，初始时电子有动量$\boldsymbol{p}_0$，散射后为$\boldsymbol{p}$，$\boldsymbol{p}$和入射方向成φ角，如图 1.38-1 所示.

解　散射过程满足守恒定律.

动量守恒：$$\frac{\hbar\omega_0}{c}\boldsymbol{n}_0+\boldsymbol{p}_0=\frac{\hbar\omega}{c}\boldsymbol{n}+\boldsymbol{p}\ , \tag{1.38-1}$$

能量守恒：$$\hbar\omega_0+\sqrt{c^2p_0^2+\mu_0^2c^4}=\hbar\omega+\sqrt{c^2p^2+\mu_0^2c^4}\ , \tag{1.38-2}$$

由式(1.38-1)分解成两个垂直的方向，

$$p_0+\frac{\hbar\omega_0}{c}=\frac{\hbar\omega}{c}\cos\theta+p\cos\varphi\ ,\quad \frac{\hbar\omega}{c}\sin\theta=p\sin\varphi\ ,$$

得

$$\begin{aligned}p^2&=\left(p_0+\frac{\hbar\omega_0}{c}-\frac{\hbar\omega}{c}\cos\theta\right)^2+\left(\frac{\hbar\omega}{c}\sin\theta\right)^2\\&=\left(p_0+\frac{\hbar\omega_0}{c}\right)^2+\left(\frac{\hbar\omega}{c}\right)^2-2\frac{\hbar\omega}{c}\cos\theta\left(p_0+\frac{\hbar\omega_0}{c}\right)\\&=p_0^2+\left(\frac{\hbar\omega_0}{c}\right)^2+2p_0\frac{\hbar\omega_0}{c}+\left(\frac{\hbar\omega}{c}\right)^2-2\frac{\hbar\omega}{c}\cos\theta\left(p_0+\frac{\hbar\omega_0}{c}\right),\end{aligned}$$

即

$$c^2p^2=c^2p_0^2+(\hbar\omega_0)^2+2p_0c\hbar\omega_0+(\hbar\omega)^2-2c\hbar\omega\cos\theta\left(p_0+\frac{\hbar\omega_0}{c}\right), \tag{1.38-3}$$

由式(1.38-2)得

$$\begin{aligned}c^2p^2+\mu_0^2c^4&=(\hbar\omega_0-\hbar\omega+\sqrt{c^2p_0^2+\mu_0^2c^4})^2\\&=(\hbar\omega_0-\hbar\omega)^2+c^2p_0^2+\mu_0^2c^4+2(\hbar\omega_0-\hbar\omega)\sqrt{c^2p_0^2+\mu_0^2c^4}\\&=(\hbar\omega_0)^2+(\hbar\omega)^2-2\hbar^2\omega_0\omega+c^2p_0^2+\mu_0^2c^4+2(\hbar\omega_0-\hbar\omega)\sqrt{c^2p_0^2+\mu_0^2c^4},\end{aligned}$$

即

$$c^2p^2=(\hbar\omega_0)^2+(\hbar\omega)^2-2\hbar^2\omega_0\omega+c^2p_0^2+2(\hbar\omega_0-\hbar\omega)\sqrt{c^2p_0^2+\mu_0^2c^4}\,. \tag{1.38-4}$$

比较式(1.38-3)和式(1.38-4)得

$$c^2p_0^2+(\hbar\omega_0)^2+2p_0c\hbar\omega_0+(\hbar\omega)^2-2c\hbar\omega\cos\theta\left(p_0+\frac{\hbar\omega_0}{c}\right)$$
$$=(\hbar\omega_0)^2+(\hbar\omega)^2-2\hbar^2\omega_0\omega+c^2p_0^2+2(\hbar\omega_0-\hbar\omega)\sqrt{c^2p_0^2+\mu_0^2c^4},$$

即

$$2p_0c\hbar\omega_0-2c\hbar\omega\cos\theta\left(p_0+\frac{\hbar\omega_0}{c}\right)=-2\hbar^2\omega_0\omega+2(\hbar\omega_0-\hbar\omega)\sqrt{c^2p_0^2+\mu_0^2c^4}\,,$$

$$\omega\left[2\hbar^2\omega_0-2c\hbar\cos\theta\left(p_0+\frac{\hbar\omega_0}{c}\right)+2\hbar\sqrt{c^2p_0^2+\mu_0^2c^4}\right]=2\hbar\omega_0\sqrt{c^2p_0^2+\mu_0^2c^4}-2p_0c\hbar\omega_0\,,$$

$$\omega=\frac{2\hbar\omega_0\sqrt{c^2p_0^2+\mu_0^2c^4}-2p_0c\hbar\omega_0}{2\hbar^2\omega_0-2c\hbar\cos\theta\left(p_0+\frac{\hbar\omega_0}{c}\right)+2\hbar\sqrt{c^2p_0^2+\mu_0^2c^4}}\,, \tag{1.38-5}$$

$$\lambda=\frac{2\pi c}{\omega}=\frac{2\pi c}{\dfrac{2\hbar\omega_0\sqrt{c^2p_0^2+\mu_0^2c^4}-2p_0c\hbar\omega_0}{2\hbar^2\omega_0-2c\hbar\cos\theta\left(p_0+\dfrac{\hbar\omega_0}{c}\right)+2\hbar\sqrt{c^2p_0^2+\mu_0^2c^4}}}$$
$$=\frac{2\pi c\left[2\hbar^2\omega_0-2c\hbar\cos\theta\left(p_0+\dfrac{\hbar\omega_0}{c}\right)+2\hbar\sqrt{c^2p_0^2+\mu_0^2c^4}\right]}{2\hbar\omega_0\sqrt{c^2p_0^2+\mu_0^2c^4}-2p_0c\hbar\omega_0},$$

$$\Delta\lambda=\lambda-\lambda_0=\frac{2\pi c}{\omega}-\frac{2\pi c}{\omega_0}$$
$$=\frac{2\pi c\left[2\hbar^2\omega_0-2c\hbar\cos\theta\left(p_0+\dfrac{\hbar\omega_0}{c}\right)+2\hbar\sqrt{c^2p_0^2+\mu_0^2c^4}\right]}{2\hbar\omega_0\sqrt{c^2p_0^2+\mu_0^2c^4}-2p_0c\hbar\omega_0}-\frac{2\pi c}{\omega_0}$$
$$=\frac{2\pi c}{\omega_0}\left[\frac{2\hbar^2\omega_0-2c\hbar\cos\theta\left(p_0+\dfrac{\hbar\omega_0}{c}\right)+2\hbar\sqrt{c^2p_0^2+\mu_0^2c^4}}{2\hbar\sqrt{c^2p_0^2+\mu_0^2c^4}-2p_0c\hbar}-1\right]$$
$$=\frac{2\pi c}{\omega_0}\left[\frac{2\hbar^2\omega_0-2c\hbar\cos\theta\left(p_0+\dfrac{\hbar\omega_0}{c}\right)+2p_0c\hbar}{2\hbar\sqrt{c^2p_0^2+\mu_0^2c^4}-2p_0c\hbar}\right]$$

$$=\frac{2\pi c}{\omega_0}\left[\frac{2\hbar^2\omega_0-2c\hbar\cos\theta p_0-2c\hbar\cos\theta\dfrac{\hbar\omega_0}{c}+2p_0c\hbar}{2\hbar\sqrt{c^2p_0^2+\mu_0^2c^4}-2p_0c\hbar}\right]$$

$$=\frac{2\pi c}{\omega_0}\left[\frac{(\hbar\omega_0+p_0c)(1-\cos\theta)}{\sqrt{c^2p_0^2+\mu_0^2c^4}-p_0c}\right].$$

若电子初始的运动方向与入射光相反，则 $-p_0\to p_0$，式(1.38-5)修改成

$$\omega_1=\frac{2\hbar\omega_0\sqrt{c^2p_0^2+\mu_0^2c^4}+2p_0c\hbar\omega_0}{2\hbar^2\omega_0-2c\hbar\cos\theta\left(-p_0+\dfrac{\hbar\omega_0}{c}\right)+2\hbar\sqrt{c^2p_0^2+\mu_0^2c^4}}$$

$$=\frac{\omega_0\left[\sqrt{p_0^2+\mu_0^2c^2}+p_0\right]}{\dfrac{\hbar\omega_0}{c}-\cos\theta\left(-p_0+\dfrac{\hbar\omega_0}{c}\right)+\sqrt{p_0^2+\mu_0^2c^2}},\tag{1.38-6}$$

式中，当 $\theta=0$ 时，$\cos\theta=1$，$\omega_{1\max}=\dfrac{\omega_0\left[\sqrt{p_0^2+\mu_0^2c^2}+p_0\right]}{p_0+\sqrt{p_0^2+\mu_0^2c^2}}=\omega_0$，散射光子的最大能量为

$$\hbar\omega_{1\max}=\hbar\omega_0=2\text{eV}.$$

答　波长改变公式为 $\Delta\lambda=\dfrac{2\pi c}{\omega_0}\left[\dfrac{(\hbar\omega_0+p_0c)(1-\cos\theta)}{\sqrt{c^2p_0^2+\mu_0^2c^4}-p_0c}\right]$；若入射光子能量为 2eV，电子的动能为 2×10^{10}eV，运动方向与入射光相反，则散射光子的最大能量为 2eV.

1.39　高速运动的粒子，其德布罗意波长与能量之间的关系式是什么？

分析　相对论能量与动量的关系为 $E^2=c^2p^2+\mu_0^2c^4$；波长与动量的关系为 $\lambda=\dfrac{h}{p}$.

解　由 $\lambda=\dfrac{h}{p}$，p 和 E 之间的关系是 $E=\sqrt{c^2p^2+\mu_0^2c^4}$，即

$$E^2-\mu_0^2c^4=c^2p^2,\quad p=\frac{1}{c}\sqrt{E^2-\mu_0^2c^4},$$

故 $\lambda=\dfrac{hc}{\sqrt{E^2-\mu_0^2c^4}}$，$E=\mu_0c^2+T$，$T$ 为动能，

$$\lambda=\frac{hc}{\sqrt{(\mu_0c^2+T)^2-\mu_0^2c^4}}=\frac{hc}{\sqrt{T^2+2T\mu_0c^2}}.$$

答　德布罗意波长与能量之间的关系是 $\lambda=\dfrac{hc}{\sqrt{E^2-\mu_0^2c^4}}$，德布罗意波长与动能之间的关系是 $\lambda=\dfrac{hc}{\sqrt{T^2+2T\mu_0c^2}}$.

1.40　如果用波长为 3 500Å 的光束来做光电效应实验，发现当光波波长改变 500Å 时，截止电压要增加 0.59V，如果普朗克常量已知，试问电子的电量是多少？

分析　光电效应方程

$$h\nu=T+\Phi,\tag{1.40-1}$$

式中，Φ 为脱出功，决定于电极的性质，与入射光的波长无关，T 为溢出电子的最大动能.

解　光电效应方程中，$T=eV_c$，式中 V_c 为截止电压，因此当入射光波长改变时，有相应的频率改变 $\Delta\nu$，$h\Delta\nu=e\Delta V_c$，已知 $\Delta V_c=0.59\text{V}$，用 cm·g·s 单位制，则

$$\nu_1=\frac{c}{\lambda_1}=\frac{3\times10^{10}\text{m}\cdot\text{s}^{-1}}{3\,500\times10^{-8}\text{cm}}=0.857\times10^{15}\text{s}^{-1};\ \nu_2=\frac{c}{\lambda_2}=\frac{3\times10^{10}\text{m}\cdot\text{s}^{-1}}{3\,000\times10^{-8}\text{cm}}=1\times10^{15}\text{s}^{-1},$$

则

$$\Delta\nu=\nu_2-\nu_1=1.43\times10^{14}\text{s}^{-1}.$$

$$e=h\frac{\Delta\nu}{\Delta V_c}=6.62\times10^{-34}\text{J}\cdot\text{s}\times\frac{1.43\times10^{14}\text{s}^{-1}}{0.59\text{V}}=1.6\times10^{-19}\text{C}.$$

答　电子的电量为 $1.6\times10^{-19}\text{C}$.

1.41　“一米”被定义为 ^{86}Kr 的橙黄色辐射波长的 1 650 763.73 倍，这种辐射的一个光子所具有的能量是多少？

分析　光子能量 $E=h\nu$，频率与波长关系为 $\nu=\dfrac{c}{\lambda}$.

解　^{86}Kr 的橙黄色辐射波长 $\lambda=\dfrac{1\,\text{m}}{1\,650\,763.73}=6\,057\,804\times10^{-13}\text{m}$，频率为

$\nu=\dfrac{c}{\lambda}=\dfrac{3\times10^{8}\text{m}\cdot\text{s}^{-1}}{6\,057\,804\times10^{-13}\text{m}}=4.952\times10^{14}\text{s}^{-1}$，所具有的能量

$$E = h\nu = 6.62\times10^{-34}\,\mathrm{J\cdot s}\times4.952\times10^{14}\,\mathrm{s^{-1}}$$
$$= 6.62\times10^{-34}\,\mathrm{J\cdot s}\times4.952\times10^{14}\,\mathrm{s^{-1}} = 3.278\times10^{-19}\,\mathrm{J}.$$

答　所具有的能量为$3.278\times10^{-19}\,\mathrm{J}$.

1.42　一个光子的能量等于一个电子的静止能量，问这光子的频率、波长和动量各是多少？在电磁波谱中属于何种射线？

分析　光子的能量等于一个电子的静止能量，即

$$h\nu = \mu_0 c^2\,, \tag{1.42-1}$$

式中μ_0为电子的静止质量. 波长与频率之间关系为

$$\lambda = \frac{c}{\nu}\,, \tag{1.42-2}$$

动量为

$$p = \hbar\frac{2\pi}{\lambda} = \frac{h}{\lambda}. \tag{1.42-3}$$

解　由式(1.42-1)得

$$\nu = \frac{\mu_0 c^2}{h} = \frac{9.1\times10^{-31}\,\mathrm{kg}\times(3\times10^{8}\,\mathrm{m\cdot s^{-1}})^2}{6.62\times10^{-34}\,\mathrm{J\cdot s}} = 1.237\,16\times10^{20}\,\mathrm{s^{-1}}.$$

由式(1.42-2)得

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{3\times10^{8}\,\mathrm{m\cdot s^{-1}}}{1.237\,16\times10^{20}\,\mathrm{s^{-1}}} = 2.424\,91\times10^{-12}\,\mathrm{m}.$$

由式(1.42-3)得

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{6.62\times10^{-34}\,\mathrm{J\cdot s}}{2.424\,91\times10^{-12}\,\mathrm{m}} = 2.73\times10^{-22}\,\mathrm{kg\cdot m\cdot s^{-1}}.$$

答　光子的频率为$1.237\,16\times10^{20}\,\mathrm{s^{-1}}$，波长为$2.424\,91\times10^{-12}\,\mathrm{m}$，动量为$2.73\times10^{-22}\,\mathrm{kg\cdot m\cdot s^{-1}}$. 属于γ射线.

1.43　用动能为12.5eV的电子去激发基态氢原子，受激发的氢原子向低能级跃迁时，会出现哪些波长的光谱线？

分析　动能$T=12.5\mathrm{eV}$的电子碰撞处在基态的氢原子，由于氢原子的质量μ_{H}比电子的质量μ_{e}大得多，$\mu_{\mathrm{H}}=1836\mu_{\mathrm{e}}$，所以电子的碰撞不会增加氢原子的整体动能，但会激发氢原子的内部能量(非弹性碰撞).

解　氢原子内部的最大能量增加为

$$E_n = E_1 + T = -13.6\mathrm{eV} + 12.5\mathrm{eV} = -1.1\mathrm{eV}.$$

由于 $E_n=-\dfrac{13.6\text{eV}}{n^2}$，所以 $13.6=1.1n^2$，$n=\sqrt{\dfrac{13.6}{1.1}}=3.516$，即 $3<n<4$. 非弹性碰撞不能使氢原子激发到 E_4，但可以激发到 E_3，故受激的氢原子的最高激发态是 E_3 态，可以发生自发跃迁：$E_3\to E_2$，$E_2\to E_1$，$E_3\to E_1$. 其中 $E_1=-13.6\text{eV}$，$E_2=-\dfrac{13.6\text{eV}}{2^2}$，$E_3=-\dfrac{13.6\text{eV}}{3^2}$，

$$E_3\to E_2:\quad h\nu_1=h\frac{c}{\lambda_1}=-\frac{13.6\text{eV}}{3^2}-\left(-\frac{13.6\text{eV}}{2^2}\right)=\frac{5}{36}\times13.6\text{eV},$$

$$\lambda_1=\frac{hc}{\frac{5}{36}\times13.6\text{eV}}=\frac{6.62\times10^{-34}\text{J}\cdot\text{s}\times3\times10^{8}\text{m}\cdot\text{s}^{-1}}{\frac{5}{36}\times13.6\times1.6\times10^{-19}\text{J}}=6\,571\text{Å};$$

$$E_2\to E_1:\quad h\nu_2=h\frac{c}{\lambda_2}=-\frac{13.6\text{eV}}{2^2}-\left(-\frac{13.6\text{eV}}{1^2}\right)=\frac{3}{4}\times13.6\text{eV},$$

$$\lambda_2=\frac{hc}{\frac{3}{4}\times13.6\text{eV}}=\frac{6.62\times10^{-34}\text{J}\cdot\text{s}\times3\times10^{8}\text{m}\cdot\text{s}^{-1}}{\frac{3}{4}\times13.6\times1.6\times10^{-19}\text{J}}=1\,217\text{Å};$$

$$E_3\to E_1:\quad h\nu_3=h\frac{c}{\lambda_3}=-\frac{13.6\text{eV}}{3^2}-\left(-\frac{13.6\text{eV}}{1^2}\right)=\frac{8}{9}\times13.6\text{eV},$$

$$\lambda_3=\frac{hc}{\frac{8}{9}\times13.6\text{eV}}=\frac{6.62\times10^{-34}\text{J}\cdot\text{s}\times3\times10^{8}\text{m}\cdot\text{s}^{-1}}{\frac{8}{9}\times13.6\times1.6\times10^{-19}\text{J}}=1\,027\text{Å}.$$

答　自发跃迁有 $E_3\to E_2$，$E_2\to E_1$，$E_3\to E_1$ 共 3 条，波长分别为 6 571Å、1 217Å、1 027Å.

1.44　证明如果氢原子中的电子从 $n+1$ 轨道跃迁到 n 轨道，发射光子的频率，在 $n\gg1$ 时就是电子绕第 n 玻尔轨道的频率.

分析　氢原子能级

$$E_n=\frac{E_1}{n^2},\tag{1.44-1}$$

氢原子轨道半径

$$a_n=a_1n^2.\tag{1.44-2}$$

证明　$a_n=a_0n^2$，$a_0=\dfrac{\hbar^2}{\mu e^2}$，$E_n=-\dfrac{e^2}{2a_0}\dfrac{1}{n^2}$，

$$E_{n+1}-E_n=-\frac{e^2}{2a_0}\left[\frac{1}{(n+1)^2}-\frac{1}{n^2}\right]=\hbar\omega,$$

$$\omega=-\frac{1}{\hbar}\frac{e^2}{2a_0}\left[\frac{1}{(n+1)^2}-\frac{1}{n^2}\right]=-\frac{1}{\hbar}\frac{e^2}{2a_0(n+1)^2}\left[1-\frac{(n+1)^2}{n^2}\right],$$

当 $n\gg1$ 时，$\dfrac{(n+1)^2}{n^2}\approx1+\dfrac{2}{n}$，故

$$\omega=\frac{1}{\hbar}\frac{e^2}{2a_0(n+1)^2}\frac{2}{n}\approx\frac{1}{\hbar}\frac{e^2}{a_0n^3}=\frac{\hbar}{a_0^2\mu n^3}. \tag{1.44-3}$$

电子在第 n 玻尔轨道上运动的频率为

$$\nu=\frac{v_n}{2\pi a_n},\quad \omega=2\pi\nu=\frac{v_n}{a_n},$$

由于 $L_n=a_nv_n\mu=n\hbar$，$v_n=\dfrac{n\hbar}{a_n\mu}$，则

$$\omega=2\pi\nu=\frac{v_n}{a_n}=\frac{1}{a_n}\frac{n\hbar}{a_n\mu}=\frac{n\hbar}{a_0^2n^4\mu}=\frac{\hbar}{a_0^2\mu n^3}. \tag{1.44-4}$$

式(1.44-4)与式(1.44-3)一样，即氢原子中的电子从 $n+1$ 轨道跃迁到 n 轨道，发射光子的频率，在 $n\gg1$ 时就是电子绕第 n 玻尔轨道的频率.

证毕.

1.45　μ^- 子的质量是电子质量的 207 倍，电量与电子相同，一个 μ^- 子被一个质子俘获所形成的 μ^- 子原子的电离能为多少?

分析　求 μ^- 子原子的电离能，可以类比氢原子的电离能，计算将 μ^- 子与一个质子形成的 μ^- 子原子的折合质量，即可.

解　$\mu_{\mu^-}=207\mu_e$，$\mu_p=1836\mu_e$，μ^- 子和一个质子的折合质量

$$\mu=\frac{\mu_{\mu^-}\mu_p}{\mu_{\mu^-}+\mu_p}=\frac{207\times1836}{207+1836}\mu_e=195.8\mu_e.$$

$E_n=-\dfrac{e^2}{2a_0}\dfrac{1}{n^2}$，式中 $a_0=\dfrac{\hbar^2}{\mu e^2}$，故

$$E_n=-\frac{e^2}{2\dfrac{\hbar^2}{\mu e^2}}\frac{1}{n^2}=-\frac{e^2}{2\dfrac{\hbar^2}{195.8\mu_e e^2}}\frac{1}{n^2}=-\frac{195.8}{n^2}\times13.6\text{eV}.$$

μ^- 子原子的电离能为

$$W=-E_1=\frac{195.8}{1^2}\times13.6\text{eV}=\frac{195.8}{1^2}\times13.6\text{eV}=2662.88\text{eV}=2662.88\times1.6\times10^{-12}\text{erg}$$

$$=4.26\times10^{-9}\text{erg}=4.26\times10^{-16}\text{J}.$$

答　μ^- 子原子的电离能为 4.26×10^{-16} J.

第二章　量子力学的基本概念

2.1　中微子的静止质量为零，$E=cp$，令

$$\Phi(p)=\Phi_0 \mathrm{e}^{-\frac{(p-p_0)^2}{2(\Delta p)^2}}. \tag{2.1-1}$$

讨论中微子的一维高斯波包$\Phi(p)$.

分析　由题给的动量函数，计算波函数的平方为高斯分布，分析波包是否弥散.

解　由式(2.1-1)得$|\Phi(p)|^2=\Phi_0^2 \mathrm{e}^{-\frac{(p-p_0)^2}{(\Delta p)^2}}$，可见$\Delta p$是动量的不确定度.

$$\psi(x,t)=\int_{-\infty}^{\infty}\Phi(p)\frac{\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(px-Et)}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{d}p=\frac{\Phi_0}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\Phi(p)\mathrm{e}^{-\frac{p^2+p_0^2-2pp_0}{2(\Delta p)^2}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p(x-ct)}\mathrm{d}p$$

$$=\frac{\Phi_0\Delta p}{\sqrt{\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{(\Delta p)^2}{2\hbar^2}(x-ct)^2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_0(x-ct)}.$$

$$|\psi(x,t)|^2=\frac{\Phi_0^2(\Delta p)^2}{\hbar}\mathrm{e}^{-\frac{(\Delta p)^2}{\hbar^2}(x-ct)^2}.$$

这是高斯分布，$x=ct$，$|\psi(x,t)|^2$最大为$\frac{\Phi_0^2(\Delta p)^2}{\hbar}$，分布的宽度满足$\Delta p\Delta x=\frac{\hbar}{2}$，不确定关系成立. 由于波包最大值的位置在$x=ct$，所以波包的群速为$c$，由$E=cp$，可知$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}p}=c=\frac{E}{p}$，即群速等于相速，所以波包$|\psi(x,t)|^2$的形状不变，即波包不弥散.

答　波包$|\psi(x,t)|^2$的形状不变，即波包不弥散.

2.2　求波函数$\psi(r,\theta,\varphi)=c\mathrm{e}^{-\frac{r^2}{a^2}}\sin\theta\sin\varphi$的归一化系数$c$，其中$(r,\theta,\varphi)$为位矢$\boldsymbol{x}$的球坐标，并在$\psi(r,\theta,\varphi)$状态下，求$\frac{e^2}{r^2}$的平均值.

分析　波函数必须满足单值、连续和有限，即

$$\int \psi^* \psi \mathrm{d}^3 x = 1 . \tag{2.2-1}$$

解　利用式(2.2-1)求归一化系数，

$$\int \psi^* \psi \mathrm{d}^3 x = c^2 \int_{r=0}^{\infty} \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \mathrm{e}^{-\frac{2r^2}{a^2}} \sin^2\theta \sin^2\varphi \, r^2 \mathrm{d}r \sin\theta \mathrm{d}\theta \mathrm{d}\varphi$$

$$= c^2 \int_{r=0}^{\infty} \mathrm{e}^{-\frac{2r^2}{a^2}} r^2 \mathrm{d}r \int_{\theta=0}^{\pi} \sin^3\theta \mathrm{d}\theta \int_{\varphi=0}^{2\pi} \sin^2\varphi \, \mathrm{d}\varphi$$

$$= -c^2 \int_{r=0}^{\infty} \mathrm{e}^{-\frac{2r^2}{a^2}} \frac{r}{2\left(-\frac{2}{a^2}\right)} \mathrm{d}\left(-\frac{2r^2}{a^2}\right) \int_{\theta=0}^{\pi} (1-\cos^2\theta) \mathrm{d}\cos\theta \int_{\varphi=0}^{2\pi} \frac{1-\cos 2\varphi}{2} \mathrm{d}\varphi$$

$$= \frac{-c^2\pi}{-\frac{4}{a^2}} \left[r\mathrm{e}^{-\frac{2r^2}{a^2}} \Big|_0^{\infty} - \int_0^{\infty} \mathrm{e}^{-\frac{2r^2}{a^2}} \mathrm{d}r \right] \left[\cos\theta \Big|_0^{\pi} - \frac{1}{3}\cos^3\theta \Big|_0^{\pi} \right] = \frac{c^2 a^2 \pi}{4\sqrt{\frac{2}{a^2}}} \left(\frac{4}{3} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \right) = 1,$$

故 $\dfrac{c^2 a^3 \pi^{\frac{3}{2}}}{6\sqrt{2}} = 1$，$c = \dfrac{6^{\frac{1}{2}} \times 2^{\frac{1}{4}}}{a^{\frac{3}{2}} \pi^{\frac{3}{4}}}$．$\psi(r,\theta,\varphi) = \dfrac{6^{\frac{1}{2}} \times 2^{\frac{1}{4}}}{a^{\frac{3}{2}} \pi^{\frac{3}{4}}} \mathrm{e}^{-\frac{r^2}{a^2}} \sin\theta \sin\varphi$．

再求 $\dfrac{e^2}{r^2}$ 的平均值，方法是，$|\psi(r,\theta,\varphi)|^2 = \dfrac{6\sqrt{2}}{a^3 \pi^{\frac{3}{2}}} \mathrm{e}^{-\frac{2r^2}{a^2}} \sin^2\theta \sin^2\varphi$，则

$$\left\langle \frac{e^2}{r^2} \right\rangle = \frac{6\sqrt{2}}{a^3 \pi^{\frac{3}{2}}} \int_{r=0}^{\infty} \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \frac{e^2}{r^2} \mathrm{e}^{-\frac{2r^2}{a^2}} \sin^2\theta \sin^2\varphi \, r^2 \sin\theta \mathrm{d}r \mathrm{d}\theta \mathrm{d}\varphi$$

$$= \frac{6\sqrt{2}e^2}{a^3 \pi^{\frac{3}{2}}} \int_{r=0}^{\infty} \mathrm{e}^{-\frac{2r^2}{a^2}} \mathrm{d}r \int_{\theta=0}^{\pi} \sin^3\theta \mathrm{d}\theta \int_{\varphi=0}^{2\pi} \sin^2\varphi \mathrm{d}\varphi$$

$$= -\frac{6\sqrt{2}e^2}{a^3 \pi^{\frac{3}{2}}} \frac{1}{\sqrt{\frac{2}{a^2}}} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \int_{\theta=0}^{\pi} (1-\cos^2\theta) \mathrm{d}\cos\theta \int_{\varphi=0}^{2\pi} \frac{1-\cos 2\varphi}{2} \mathrm{d}\varphi$$

$$= -\frac{6\sqrt{2}e^2}{a^3 \pi^{\frac{3}{2}}} \frac{1}{\sqrt{\frac{2}{a^2}}} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \int_{\theta=0}^{\pi} (1-\cos^2\theta) \mathrm{d}\cos\theta \int_{\varphi=0}^{2\pi} \frac{1-\cos 2\varphi}{2} \mathrm{d}\varphi$$

$$= -\frac{3e^2}{a^2} \left[\cos \Big|_0^{\pi} - \frac{1}{3}\cos^3\theta \Big|_0^{\pi} \right] = \frac{4e^2}{a^2} .$$

答　归一化系数 c 为 $\dfrac{6^{\frac{1}{2}}\times 2^{\frac{1}{4}}}{a^{\frac{3}{2}}\pi^{\frac{3}{4}}}$，$\dfrac{e^2}{r^2}$ 的平均值为 $\dfrac{4e^2}{a^2}$.

2.3　如果系统处于在态 $\psi(x)=\begin{cases}Axe^{-\lambda x}, & x\geqslant 0\\ 0, & x<0\end{cases}$，求归一化常数 A、平均位置 $\langle x\rangle$、动量分布的概率辐 $\Phi(p)$ 以及动量平均值 $\langle p\rangle$.

分析　利用归一化条件

$$\int\psi^*\psi\mathrm{d}^3x=1. \tag{2.3-1}$$

即可求出归一化常数，

$$\langle x\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}x\psi^*\psi\mathrm{d}x\,, \tag{2.3-2}$$

$$\Phi(p)=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*{}_p(x)\psi(x)\mathrm{d}x\,, \tag{2.3-3}$$

$$\langle p\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\Phi^*(p)p\Phi(p)\mathrm{d}p\,. \tag{2.3-4}$$

解　由式(2.3-1)得 $\int_0^{\infty}A^2x^2e^{-2\lambda x}\mathrm{d}x=1$，$\dfrac{A^2}{-2\lambda}\int_0^{\infty}x^2\mathrm{d}e^{-2\lambda x}=1$，$\dfrac{A^2}{-2\lambda}\left[x^2e^{-2\lambda x}\Big|_0^{\infty}-\int_0^{\infty}e^{-2\lambda x}2x\mathrm{d}x\right]=1$，$\dfrac{A^2}{2\lambda(-2\lambda)}\int_0^{\infty}2x\mathrm{d}e^{-2\lambda x}=1$，$\dfrac{A^2}{\lambda(-2\lambda)}\left[xe^{-2\lambda x}\Big|_0^{\infty}-\int_0^{\infty}e^{-2\lambda x}\mathrm{d}x\right]=1$，$\dfrac{A^2}{\lambda(2\lambda)(-2\lambda)}e^{-2\lambda x}\Big|_0^{\infty}=1$，$A=2\sqrt{\lambda^3}$.

由式(2.3-2)得

$$\begin{aligned}\langle x\rangle&=\int_0^{\infty}xA^2x^2e^{-2\lambda x}\mathrm{d}x=4\lambda^3\int_0^{\infty}x^3e^{-2\lambda x}\mathrm{d}x=\frac{4\lambda^3}{-2\lambda}\int_0^{\infty}x^3\mathrm{d}e^{-2\lambda x}\\&=\frac{4\lambda^3}{-2\lambda}\left[x^3e^{-2\lambda x}\Big|_0^{\infty}-\int_0^{\infty}e^{-2\lambda x}3x^2\mathrm{d}x\right]\\&=\frac{6\lambda^2}{(-2\lambda)}\int_0^{\infty}x^2\mathrm{d}e^{-2\lambda x}=\frac{6\lambda^2}{(-2\lambda)}\left[x^2e^{-2\lambda x}\Big|_0^{\infty}-\int_0^{\infty}e^{-2\lambda x}2x\mathrm{d}x\right]=\frac{6\lambda}{(-2\lambda)}\left[\int_0^{\infty}x\mathrm{d}e^{-2\lambda x}\right]\\&=\frac{6\lambda}{(-2\lambda)}\left[xe^{-2\lambda x}\Big|_0^{\infty}-\int_0^{\infty}e^{-2\lambda x}\mathrm{d}x\right]=\frac{3}{(-2\lambda)}\left[\int_0^{\infty}\mathrm{d}e^{-2\lambda x}\right]=\frac{3}{(-2\lambda)}e^{-2\lambda x}\Big|_0^{\infty}=\frac{3}{2\lambda}.\end{aligned}$$

求动量分布的概率辐 $\Phi(p)$，由 $\psi(x)=\int_{-\infty}^{\infty}\Phi(p)\psi_p(x)\mathrm{d}p$，其中 $\psi_p(x)=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}$，则

$$\Phi(p)=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_p(x)\psi(x)\mathrm{d}x=\int_0^{\infty}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}2\sqrt{\lambda^3}x\mathrm{e}^{-\lambda x}\mathrm{d}x$$

$$=\frac{\sqrt{2\lambda^3}}{\sqrt{\pi\hbar}}\frac{1}{-\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p+\lambda\right)}\int_0^{\infty}x\mathrm{d}\mathrm{e}^{-x\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p+\lambda\right)}$$

$$=\frac{\sqrt{2\lambda^3}}{\sqrt{\pi\hbar}}\frac{1}{-\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p+\lambda\right)}\left[x\mathrm{e}^{-x\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p+\lambda\right)}\Big|_0^{\infty}-\int_0^{\infty}\mathrm{e}^{-x\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p+\lambda\right)}\mathrm{d}x\right]$$

$$=\frac{\sqrt{2\lambda^3}}{\sqrt{\pi\hbar}}\frac{1}{-\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p+\lambda\right)^2}\mathrm{e}^{-x\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p+\lambda\right)}\Big|_0^{\infty}=\frac{\sqrt{2\lambda^3}}{\sqrt{\pi\hbar}}\frac{1}{\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p+\lambda\right)^2}.$$

动量平均值

$$\langle p\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\Phi^*(p)p\Phi(p)\mathrm{d}x=\frac{2\lambda^3}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{p\mathrm{d}p}{\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p+\lambda\right)^2\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p+\lambda\right)^2}$$

$$=\frac{\lambda^3\hbar}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\frac{p^2}{\hbar^2}}{\left[\left(\frac{p}{\hbar}\right)^2+\lambda^2\right]^2}=-\frac{\lambda^3\hbar}{\pi}\frac{1}{\left(\frac{p}{\hbar}\right)^2+\lambda^2}\Bigg|_{p=-\infty}^{\infty}=0.$$

答　归一化常数 A 为 $2\sqrt{\lambda^3}$；平均位置 $\langle x\rangle$ 为 $\frac{3}{2\lambda}$；动量分布的概率辐 $\Phi(p)$ 为 $\frac{\sqrt{2\lambda^3}}{\sqrt{\pi\hbar}}\frac{1}{\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p+\lambda\right)^2}$；动量平均值 $\langle p\rangle$ 为 0.

2.4　证明

$$\langle x\rangle=\int\psi^*(x,t)x\psi(x,t)\mathrm{d}x=\int\Phi^*(p,t)\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\Phi(p,t)\mathrm{d}p\,.$$

分析　从 $\psi(x,t)=\int\Phi(p,t)\psi_p(x)\mathrm{d}p$ 出发，$\psi_p(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}$，计算 $\langle x\rangle$，变换后完成等式证明.

证明　由 $\psi(x,t)=\int\Phi(p,t)\psi_p(x)\mathrm{d}p$，式中 $\psi_p(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}$，则根据德布罗

意波的统计诠释，粒子落在 x 附近范围内的概率为

$$P(x,t)\mathrm{d}x=\psi^*(x,t)\psi(x,t)\mathrm{d}x\ ,$$

式中，$\psi^*(x,t)=\int\Phi^*(p_1,t)\psi^*{}_{p_1}(x)\mathrm{d}p_1$，则

$$\begin{aligned}\langle x\rangle&=\int\psi^*(x,t)x\psi(x,t)\mathrm{d}x=\int\left[\int\Phi^*(p_1,t)\psi^*{}_{p_1}(x)\mathrm{d}p_1\right]x\left[\int\Phi(p,t)\psi_p(x)\mathrm{d}p\right]\mathrm{d}x\\&=\int\left\{\int\Phi^*(p_1,t)\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_1x}\right]\mathrm{d}p_1\right\}x\left\{\int\Phi(p,t)\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\right]\mathrm{d}p\right\}\mathrm{d}x\\&=\int\Phi^*(p_1,t)\mathrm{d}p_1\int\Phi(p,t)\mathrm{d}p\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p_1}\delta(p-p_1)\\&=\int\Phi^*(p_1,t)\mathrm{d}p_1\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p_1}\int\Phi(p,t)\mathrm{d}p\delta(p-p_1)\\&=\int\Phi^*(p_1,t)\mathrm{d}p_1\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p_1}\Phi(p_1,t)=\int\Phi^*(p,t)\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}\Phi(p,t)\mathrm{d}p.\end{aligned}$$

在 p 表象中，$\hat{x}=\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}$.

证毕.

2.5　当一维谐振子处于第一激发态时，求动能和势能的平均值以及概率最大的位置.

分析　从一维谐振子处于第一激发态的波函数出发，即可求出动能和势能的平均值，利用一阶导数为零，二阶导数小于零，即可确定概率最大的位置.

解　第一激发态的波函数

$$\psi_1(x)=\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}\mathrm{H}_1(\xi)\ ,\tag{2.5-1}$$

式中，$\xi=\sqrt{\dfrac{\mu\omega}{\hbar}}x$，$\mathrm{H}_1(\xi)=\sqrt[4]{\dfrac{4}{\pi}}\xi$，

$$\langle T\rangle=\left\langle\frac{-\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\right\rangle=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mu\omega}{\hbar}\left\langle\psi_1\left|\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}\right|\psi_1\right\rangle=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mu\omega}{\hbar}\int\psi^*{}_1(x)\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}\psi_1(x)\mathrm{d}x\ .$$

因为 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\psi_n=\sqrt{\dfrac{n}{2}}\psi_{n-1}-\sqrt{\dfrac{n+1}{2}}\psi_{n+1}$，则 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\psi_1=\sqrt{\dfrac{1}{2}}\psi_0-\psi_2$，$\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}\psi_1=\sqrt{\dfrac{1}{2}}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\psi_0-\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\psi_2$，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\psi_0=-\sqrt{\frac{1}{2}}\psi_1,\quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\psi_2=\psi_1-\sqrt{\frac{3}{2}}\psi_3,$$

所以

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}\psi_1(x)=\sqrt{\frac{1}{2}}\left(-\sqrt{\frac{1}{2}}\psi_1\right)-\left(\psi_1-\sqrt{\frac{3}{2}}\psi_3\right)=-\frac{\psi_1}{2}-\psi_1+\sqrt{\frac{3}{2}}\psi_3=-\frac{3\psi_1}{2}+\sqrt{\frac{3}{2}}\psi_3,$$

$$\langle T\rangle=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mu\omega}{\hbar}\int\psi^*{}_1(x)\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}\psi_1(x)\mathrm{d}x=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mu\omega}{\hbar}\left(-\frac{3}{2}\right)=\frac{3\hbar\omega}{4}.$$

又因为

$$\left\langle\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2\right\rangle+\langle T\rangle=E,$$

$$\left\langle\psi_1\left|\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2\right|\psi_1\right\rangle=E_1-\frac{3}{4}\hbar\omega=\left(1+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega-\frac{3}{4}\hbar\omega=\frac{3}{4}\hbar\omega.$$

计算概率最大位置的方法是，$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_1^2(x)=0$，$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_1^2(x)<0$.

$$\psi_1^2(x)=\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\mathrm{e}^{-\xi^2}\mathrm{H}_1(\xi),$$

式中 $\xi=\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}x$，$\mathrm{H}_1(\xi)=\sqrt{\frac{4}{\pi}}\frac{\mu\omega}{\hbar}x^2$，则

$$\psi_1^2(x)=\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{\mu\omega}{\hbar}x^2}\sqrt{\frac{4}{\pi}}\frac{\mu\omega}{\hbar}x^2=\sqrt{\frac{4}{\pi}}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)^{\frac{3}{2}}x^2\mathrm{e}^{-\frac{\mu\omega}{\hbar}x^2}.$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_1^2(x)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[\sqrt{\frac{4}{\pi}}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)^{\frac{3}{2}}x^2\mathrm{e}^{-\frac{\mu\omega}{\hbar}x^2}\right]$$

$$=\sqrt{\frac{4}{\pi}}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)^{\frac{3}{2}}\left[2x\mathrm{e}^{-\frac{\mu\omega}{\hbar}x^2}-\frac{\mu\omega}{\hbar}2x\cdot x^2\mathrm{e}^{-\frac{\mu\omega}{\hbar}x^2}\right]=0,$$

其解为 $x_1=0$，$x_2=\infty$，$x_3=\pm\sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}$，分别代入计算二阶导数

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_1^2(x)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left\{\sqrt{\frac{4}{\pi}}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)^{\frac{3}{2}}\left[2x\mathrm{e}^{-\frac{\mu\omega}{\hbar}x^2}-\frac{\mu\omega}{\hbar}2x\cdot x^2\mathrm{e}^{-\frac{\mu\omega}{\hbar}x^2}\right]\right\}$$

$$=2\sqrt{\frac{4}{\pi}}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)^{\frac{3}{2}}\left\{\mathrm{e}^{-\frac{\mu\omega}{\hbar}x^2}+2x^2\left(-\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)\mathrm{e}^{-\frac{\mu\omega}{\hbar}x^2}-\frac{\mu\omega}{\hbar}\left[3x^2\mathrm{e}^{-\frac{\mu\omega}{\hbar}x^2}+2x^4\left(-\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)\mathrm{e}^{-\frac{\mu\omega}{\hbar}x^2}\right\}\right.$$

(2.5-2)

当 $x_1=0$ 时，式(2.5-2)为 $\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_1^2(x)=2\sqrt{\dfrac{4}{\pi}}\left(\dfrac{\mu\omega}{\hbar}\right)^{\frac{3}{2}}>0$.

当 $x_2=\infty$ 时，式(2.5-2)为 $\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_1^2(x)=0$.

当 $x_3=\pm\sqrt{\dfrac{\hbar}{\mu\omega}}$ 时，式(2.5-2)为

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_1^2(x)&=2\sqrt{\frac{4}{\pi}}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)^{\frac{3}{2}}\left\{\mathrm{e}^{-\frac{\mu\omega}{\hbar}x^2}+2x^2\left(-\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)\mathrm{e}^{-\frac{\mu\omega}{\hbar}x^2}\right.\\&\quad\left.-\frac{\mu\omega}{\hbar}\left[3x^2\mathrm{e}^{-\frac{\mu\omega}{\hbar}x^2}+2x^4\left(-\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)\mathrm{e}^{-\frac{\mu\omega}{\hbar}x^2}\right]\right\}\\&=2\sqrt{\frac{4}{\pi}}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)^{\frac{3}{2}}\left\{\mathrm{e}^{-\frac{\mu\omega}{\hbar}\frac{\hbar}{\mu\omega}}+2\frac{\hbar}{\mu\omega}\left(-\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)\mathrm{e}^{-\frac{\mu\omega}{\hbar}\frac{\hbar}{\mu\omega}}\right.\\&\quad\left.-\frac{\mu\omega}{\hbar}\left[3\frac{\hbar}{\mu\omega}\mathrm{e}^{-\frac{\mu\omega}{\hbar}\frac{\hbar}{\mu\omega}}+2\left(\frac{\hbar}{\mu\omega}\right)^2\left(-\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)\mathrm{e}^{-\frac{\mu\omega}{\hbar}\frac{\hbar}{\mu\omega}}\right]\right\}\\&=2\sqrt{\frac{4}{\pi}}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)^{\frac{3}{2}}\left\{\frac{1}{\mathrm{e}}-\frac{2}{\mathrm{e}}-\left[\frac{3}{\mathrm{e}}-\frac{2}{\mathrm{e}}\right]\right\}=2\sqrt{\frac{4}{\pi}}\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)^{\frac{3}{2}}\left\{-\frac{2}{\mathrm{e}}\right\}<0.\end{aligned}$$

可见，当 $x_3=\pm\sqrt{\dfrac{\hbar}{\mu\omega}}$ 时，$\psi_{1\max}^2(x)=\sqrt{\dfrac{4}{\pi}}\left(\dfrac{\mu\omega}{\hbar}\right)^{\frac{3}{2}}\dfrac{\hbar}{\mu\omega}\mathrm{e}^{-\frac{\mu\omega}{\hbar}\frac{\hbar}{\mu\omega}}=\dfrac{2}{\mathrm{e}}\sqrt{\dfrac{\mu\omega}{\pi\hbar}}$.

答　动能的平均值为 $\dfrac{3\hbar\omega}{4}$；势能的平均值为 $\dfrac{3}{4}\hbar\omega$；概率最大的位置为 $x=\pm\sqrt{\dfrac{\hbar}{\mu\omega}}$，最大概率为 $\dfrac{2}{\mathrm{e}}\sqrt{\dfrac{\mu\omega}{\pi\hbar}}$.

2.6　已知 $V(x)=\begin{cases}\infty, & x<b, x>c\\ 0, & b\leqslant x\leqslant c\end{cases}$，求解 $\hat{H}=\hat{T}+V(x)$ 的本征态.

分析　从已知的函数 $V(x)=\begin{cases}\infty, & x<0, x>a\\ 0, & 0\leqslant x\leqslant a\end{cases}$ 出发，从其本征值与本征函数演化而得到题给的 $\hat{H}=\hat{T}+V(x)$ 的本征值与本征函数.

解　已知 $V(x)=\begin{cases}\infty, & x<0, x>a\\ 0, & 0\leqslant x\leqslant a\end{cases}$ 时，$\hat{H}=\hat{T}+V(x)$ 的本征值问题有解答.

$$E_n=\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2,\quad \psi_n(x)=\begin{cases}0, & x<0,x>a\\ \sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi x}{a}, & 0\leqslant x\leqslant a\end{cases},\tag{2.6-1}$$

作坐标变换 $x_1=x-b$，则

$$V(x_1)=\begin{cases}\infty, & x_1<0,x_1>c-b\\ 0, & 0\leqslant x_1\leqslant c-b\end{cases}$$，于是有

$$E_n=\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{n\pi}{c-b}\right)^2,\quad \psi_n(x_1)=\begin{cases}0, & x_1<0,x_1>c-b\\ \sqrt{\dfrac{2}{c-b}}\sin\dfrac{n\pi x_1}{c-b}, & 0\leqslant x_1\leqslant c-b\end{cases},$$

$$\psi_n(x)=\begin{cases}0, & x<b,x>c\\ \sqrt{\dfrac{2}{c-b}}\sin\dfrac{n\pi(x-b)}{c-b}, & b\leqslant x\leqslant c\end{cases}.$$

答　$V(x)=\begin{cases}\infty, & x<b,x>c\\ 0, & b\leqslant x\leqslant c\end{cases}$ 情形下 $\hat{H}=\hat{T}+V(x)$ 的本征值为 $E_n=\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\left(\dfrac{n\pi}{c-b}\right)^2$，本征函数为 $\psi_n(x)=\begin{cases}0, & x<b,x>c\\ \sqrt{\dfrac{2}{c-b}}\sin\dfrac{n\pi(x-b)}{c-b}, & b\leqslant x\leqslant c\end{cases}$.

2.7　求解三维定态问题，如 $V(x,y,z)=\begin{cases}0, & 0<x,y,z<a\\ \infty, & \text{其他}\end{cases}$.

分析　由薛定谔方程，将波函数分离变量，利用边界条件，确定波函数与本征值.

解　势能为 ∞ 处，波函数为零，势能为零处，可用分离变量方法求解，

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2}+\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2}\right)\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z),$$

令 $\psi(x,y,z)=\psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$，则

$$\frac{1}{\psi_1(x)}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_1(x)+\frac{1}{\psi_2(x)}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2}\psi_2(x)+\frac{1}{\psi_3(x)}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2}\psi_3(x)=-\frac{2\mu}{\hbar^2}E=-\frac{2\mu}{\hbar^2}(E_1+E_2+E_3),$$

边界条件为 $\psi_1(0)=\psi_1(a)=0$，$\psi_2(0)=\psi_2(a)=0$，$\psi_3(0)=\psi_3(a)=0$，解得

$$\psi(x,y,z)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{8}{a^3}}\sin\dfrac{n_1\pi x}{a}\sin\dfrac{n_2\pi y}{a}\sin\dfrac{n_3\pi z}{a}, & 0<x,y,z<a\\ 0, & \text{其他}\end{cases},$$

$$E_{n_1n_2n_3}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2\mu a^2}(n_1^2+n_2^2+n_3^2)\ ,\quad n_i=1,2,3,\cdots\ ,\quad i=1,2,3,\cdots .$$

答　波函数为 $\psi(x,y,z)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{8}{a^3}}\sin\dfrac{n_1\pi x}{a}\sin\dfrac{n_2\pi y}{a}\sin\dfrac{n_3\pi z}{a}, & 0<x,y,z<a\\ 0, & \text{其他}\end{cases}$，本征值为

$$E_{n_1n_2n_3}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2\mu a^2}(n_1^2+n_2^2+n_3^2)\ .$$

2.8　求解二维无限深势阱中的定态问题，取平面极坐标系，$V(\rho,\varphi)=\begin{cases}0, & \rho\leqslant a\\ \infty, & \rho>a\end{cases}$.

分析　由极坐标下的薛定谔方程，通过分离变量，确定定态波函数.

解　在 $\rho>a$ 区域，$V=\infty$，波函数为零；在 $\rho\leqslant a$ 区域，$V=0$，可分离变量求解. 取极坐标系，二维的 ∇^2 为

$$\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\ ,$$

当 $\rho\leqslant a$ 时，

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi(\rho,\varphi)=E\psi(\rho,\varphi)\ ,\quad E>0\ ,$$

$$\nabla^2\psi(\rho,\varphi)=-\frac{2\mu E}{\hbar^2}\psi(\rho,\varphi)=-k^2\psi(\rho,\varphi)\ ,\quad E=\frac{\hbar^2k^2}{2\mu}\ ,$$

令 $\psi(\rho,\varphi)=R(\rho)\Phi(\varphi)$，

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}R(\rho)+\frac{1}{\rho}\frac{\partial R(\rho)}{\partial\rho}\right]\Phi(\varphi)+\frac{R(\rho)}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\Phi(\varphi)=-k^2R(\rho)\Phi(\varphi)\ ,$$

以 $\dfrac{\rho^2}{R(\rho)\Phi(\varphi)}$ 遍乘各项，得

$$\frac{\rho^2}{R(\rho)}\left[\frac{\mathrm{d}^2R(\rho)}{\mathrm{d}\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{dR(\rho)}{d\rho}\right]+k^2\rho^2=-\frac{\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varphi^2}\Phi(\varphi)}{\Phi(\varphi)}=\lambda\ ,$$

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varphi^2}\Phi(\varphi)+\lambda\Phi(\varphi)=0\ ,\tag{2.8-1}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}R+\frac{1}{\rho}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}R+\left(k^2-\frac{\lambda}{\rho^2}\right)R=0\ , \tag{2.8-2}$$

由式(2.8-1)，令 $\lambda=m^2$，得

$$\Phi(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\ ,\quad m=0,\pm1,\pm2,\cdots\ , \tag{2.8-3}$$

由式(2.8-2)以及 $\lambda=m^2$，得 m 阶贝塞尔方程，其解

$$R=c_1\mathrm{J}_{|m|}(k\rho)+c_2\mathrm{N}_{|m|}(k\rho)\ ,$$

$R(0)$ 应有限，但诺依曼函数在 $\rho=0$ 处发散，所以取 $c_2=0$，于是

$$R(\rho)=c_1\mathrm{J}_{|m|}(k\rho)\ , \tag{2.8-4}$$

又 $\rho=a$，$R(a)=0$，所以 $\mathrm{J}_{|m|}(ka)=0$，$k_n=\dfrac{1}{a}x^n_{|m|}$，$n=0,1,2,\cdots$，其中 $x^n_{|m|}$ 是 $|m|$ 阶贝塞尔函数的第 n 个根，所以 $E_{n|m|}=\dfrac{\hbar^2}{2\mu}k_n^2=\dfrac{\hbar^2}{2\mu a^2}(x^n_{|m|})^2$，

$$\psi_{n,m}(\rho,\varphi)=\begin{cases}N\mathrm{J}_{|m|}\left(\dfrac{x^n_{|m|}}{a}\rho\right)\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}, & \rho\leqslant a\\ 0, & \rho>a\end{cases},$$

其中 N 是归一化常数.

答　定态波函数为 $\psi_{n,m}(\rho,\varphi)=\begin{cases}N\mathrm{J}_{|m|}\left(\dfrac{x^n_{|m|}}{a}\rho\right)\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}, & \rho\leqslant a\\ 0, & \rho>a\end{cases}$.

2.9　粒子处于一维势场 $V(x)=\dfrac{1}{2}kx^2+\lambda x$ 之中，其中 k 和 λ 为正的实常数，求解定态问题.

分析　将一维势场进行配方，形成含有 x 的项与常数项，代入定态方程，求出波函数与本征值.

解　令 $k=\mu\omega^2$，则

$$V(x)=\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2+\lambda x=\frac{1}{2}\mu\omega^2\left[x^2+\frac{2\lambda}{\mu\omega^2}x+\left(\frac{\lambda}{\mu\omega^2}\right)^2-\left(\frac{\lambda}{\mu\omega^2}\right)^2\right]$$

$$=\frac{1}{2}\mu\omega^2\left[\left(x+\frac{\lambda}{\mu\omega^2}\right)^2-\left(\frac{\lambda}{\mu\omega^2}\right)^2\right],$$

定态方程为

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\right]\psi(x)=E\psi(x)\,,$$

令 $x+\dfrac{\lambda}{\mu\omega^2}=x_1$，则

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x_1^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x_1^2\right]\psi(x_1)=\left[E+\frac{1}{2}\frac{\lambda^2}{\mu\omega^2}\right]\psi(x_1)\,,$$

其解为

$$\psi_n(x_1)=\psi_n\left(x+\frac{\lambda}{\mu\omega^2}\right)=\psi_n\left(x+\frac{\lambda}{k}\right),$$

这是以 $x+\dfrac{\lambda}{k}$ 为变量的一维谐振子的波函数，相应的能量为

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\sqrt{\frac{k}{\mu}}-\frac{\lambda^2}{2k}\,,\quad n=0,1,2,\cdots.$$

答　定态波函数为 $\psi_n\left(x+\dfrac{\lambda}{k}\right)$，以 $x+\dfrac{\lambda}{k}$ 为变量的一维谐振子的波函数，相应的能量为

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\sqrt{\frac{k}{\mu}}-\frac{\lambda^2}{2k}\,,\quad n=0,1,2,\cdots.$$

2.10　粒子处于三维势场 $V(x,y,z)=\dfrac{k}{2}(x^2+y^2+z^2)$ 中，求解定态问题，并讨论能级的简并度.

分析　由于三维势场 $V(x,y,z)$ 中不出现 x,y,z 的交叉项，故可分离变量求解.

解　将波函数分解成

$\psi(x,y,z)=\psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$，$\psi_i$，$i=1,2,3$ 都是一维谐振子的定态波函数，所以

$$\psi_{nlm}(x,y,z)=\psi_n(x)\psi_l(y)\psi_m(z)\,,\quad E_{nlm}=\left(n+l+m+\frac{3}{2}\right)\hbar\sqrt{\frac{k}{\mu}}\,,\quad n,l,m=1,2,3\,.$$

如果记 $N=n+l+m$，则 n 和 l 可以取值的范围如表 2.10-1 所示.

表 2.10-1　n 和 l 可以取值的范围

n	0	1	2	…	N
l	$0,1,2,\cdots,N$	$0,1,2,\cdots,N-1$	$0,1,2,\cdots,N-2$	…	0
l 个数	$N+1$	N	$N-1$	…	1

n 和 l 都取定后，由于 $N=n+l+m$ 的约束，m 只能有一种取法，故 $E=N\hbar\sqrt{\dfrac{k}{\mu}}$ 的简并度为

$$f=\sum_{i=1}^{N} i=\frac{1+N+1}{2}(N+1)=\frac{1}{2}(N+2)(N+1).$$

答　波函数为 $\psi_{nlm}(x,y,z)=\psi_n(x)\psi_l(y)\psi_m(z)$，每个因子都是一维谐振子的定态波函数，本征值为 $E_{nlm}=\left(n+l+m+\dfrac{3}{2}\right)\hbar\sqrt{\dfrac{k}{\mu}}$，$E=(n+l+m)\hbar\sqrt{\dfrac{k}{\mu}}$ 的简并度为

$$f=\sum_{i=1}^{N} i=\frac{1+N+1}{2}(N+1)=\frac{1}{2}(N+2)(N+1).$$

2.11　粒子处于一维势场 $V(x)=\begin{cases}\infty, & x<0\\ \dfrac{1}{2}kx^2, & x\geqslant 0\end{cases}$ 中，求解定态问题，并求基态能量.

分析　在 $x\geqslant 0$ 的区域，$V(x)=\dfrac{1}{2}kx^2$ 是简谐振子势，波函数就是谐振子的波函数 $\psi_n(x)$.

解　在 $x<0$ 的区域，由于 $V=\infty$，$\psi(x)=0$. 由于 $\psi(x)$ 的连续性，在 $x=0$ 处，$\psi(x)=0$. 在 $x>0$ 的区域，$V(x)=\dfrac{1}{2}kx^2$ 是简谐振子势，波函数就是谐振子的波函数 $\psi_n(x)$，当 n 是偶数时，$\psi_n(0)\neq 0$，不符合边界条件 $\psi(0)=0$ 的要求. 仅当 n 是奇数时，$\psi_{2n+1}(0)=0$. 基态是 $n=1$ 的态，$\psi_1(x)$ 是基态波函数，

$$\psi_{\mathrm{g}}(x)=\begin{cases}0, & x<0\\ \psi_1(x), & x\geqslant 0\end{cases},\ \text{基态能量}\ E_{\mathrm{g}}=\frac{3}{2}\hbar\sqrt{\frac{k}{\mu}}.$$

答　基态波函数为 $\psi_{\mathrm{g}}(x)=\begin{cases}0, & x<0\\ \psi_1(x), & x\geqslant 0\end{cases}$，基态能量 $E_{\mathrm{g}}=\dfrac{3}{2}\hbar\sqrt{\dfrac{k}{\mu}}$.

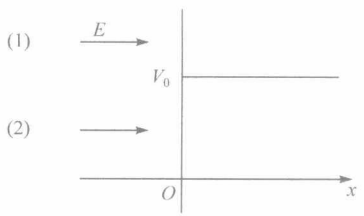

图 2.12-1　一维势场示意图

2.12　如图 2.12-1 所示，一维势场 $V(x)=\begin{cases}0, & x\leqslant 0\\ V_0, & x>0\end{cases}$，$V_0$ 为正常数，设粒子取能量为 E，从负 x 方向射向正 x 方向. (1) 如 $E>V_0$，求反射系数和透射系数；(2) 如果 $E<V_0$，求反射系数.

分析　分段求解波函数，利用波函数在 $x=0$ 处，ψ 和 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi$ 连续，确定反射系数和透射系数.

解　(1) $E>V_0$ 时，

$$x<0,\quad V(x)=0,$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_1(x)=E\psi_1(x)\rightarrow\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_1(x)=-\frac{2\mu}{\hbar^2}E\psi_1(x)=-k_1^2\psi_1(x),$$

$$\psi_1(x)=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1x}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1x}.$$

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

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_2(x)=(E-V_0)\psi_2(x)=-k_2^2\psi_2(x),\quad k_2^2=\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-V_0),$$

$$\psi_2(x)=C\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_2x}+D\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_2x}.$$

在 $x>0$，$V(x)=V_0$ 不受力的作用，没有反射波，故 $D=0$，$\psi_2(x)=C\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_2x}$.

在 $x=0$ 的势能不连续点，ψ 和 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi$ 连续，$\psi_1(0)=\psi_2(0)$，$A+B=C$；$\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_1\big|_0=\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_2\big|_0$，$A-B=\dfrac{k_2}{k_1}C$，解得

$$A=\frac{1}{2}\left(1+\frac{k_2}{k_1}\right)C,\quad B=\frac{1}{2}\left(1-\frac{k_2}{k_1}\right)C.$$

反射系数

$$R=\frac{|B|^2\dfrac{k_1\hbar}{\mu}}{|A|^2\dfrac{k_1\hbar}{\mu}}=\frac{(k_1-k_2)^2}{(k_1+k_2)^2}.$$

透射系数

$$T=\frac{|C|^2\dfrac{k_2\hbar}{\mu}}{|A|^2\dfrac{k_1\hbar}{\mu}}=\frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2},\quad R+T=1.$$

(2) $E<V_0$ 时，

在 $x<0$ 区域，$V(x)=0$，$-\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_3(x)=E\psi_3(x)$，令 $\dfrac{2\mu E}{\hbar^2}=k^2$，则 $\psi_3(x)=A'\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+B'\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$.

在 $x>0$ 区域，$V(x)=V_0$，$-\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_4(x)=(E-V_0)\psi_4(x)$，即

$\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_4(x)=\dfrac{2\mu}{\hbar^2}(V_0-E)\psi_4(x)=\alpha^2\psi_4(x)$，则$\psi_4(x)=C'\mathrm{e}^{-\alpha x}+D'\mathrm{e}^{\alpha x}$.

由于$\psi_4(\infty)=0$，则$D'=0$，$\psi_4(x)=C'\mathrm{e}^{-\alpha x}$.

连接条件：在$x=0$处，ψ和$\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi$连续，有

$A'+B'=C'$，$A'-B'=-\dfrac{\alpha}{\mathrm{i}k}C'=\mathrm{i}\dfrac{\alpha}{k}C'$，解得

$A'=\dfrac{1}{2}\left(1+\dfrac{\alpha}{k}\mathrm{i}\right)C'$，$B'=\dfrac{1}{2}\left(1-\dfrac{\alpha}{k}i\right)C'$，反射系数$R=\dfrac{|B'|^2\dfrac{k\hbar}{\mu}}{|A'|^2\dfrac{k\hbar}{\mu}}=\dfrac{k^2+\alpha^2}{k^2+\alpha^2}=1$，

透射系数$T=1-R=0$.

答　(1) 当$E>V_0$时，反射系数为$R=\dfrac{|B|^2\dfrac{k_1\hbar}{\mu}}{|A|^2\dfrac{k_1\hbar}{\mu}}=\dfrac{(k_1-k_2)^2}{(k_1+k_2)^2}$，透射系数为

$T=\dfrac{|C|^2\dfrac{k_2\hbar}{\mu}}{|A|^2\dfrac{k_1\hbar}{\mu}}=\dfrac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2}$；(2) 当$E<V_0$时，反射系数为1.

2.13　如图 2.13-1 所示，一维势场$V(x)=\begin{cases}\infty, & x<0\\ -V_0, & 0\leqslant x\leqslant a\\ 0, & x>a\end{cases}$，求解一维定态问题. (1) $E>0$，粒子向负x方向射来；(2) $-V_0<E<0$，解束缚态问题.

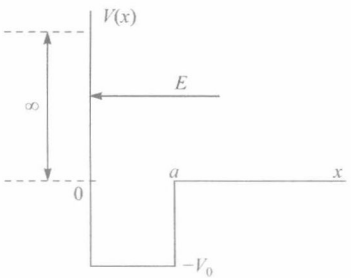

图 2.13-1　深势阱

分析　分段列出定态薛定谔方程求解，利用边界函数连续、导数连续确定系数.

解　(1) $E>0$情形，粒子向$-x$方向分区列方程求解.

(a) $x<0$，$V=\infty$，$\psi(x)=0$.

(b) $0\leqslant x\leqslant a$，$V(x)=-V_0$，$-\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x)=(E+V_0)\psi(x)$，$\psi(x)=C\sin k_1x+D\cos k_1x$，$k_1^2=\dfrac{2\mu}{\hbar^2}(E+V_0)$，因$\psi(0)=0$，$D=0$，故

$$\psi(x)=C\sin k_1 x\,. \tag{2.13-1}$$

(c) $x>a$，$V(x)=0$，$-\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x)=E\psi \rightarrow \dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x)=-k^2\psi$，$k^2=\dfrac{2\mu}{\hbar^2}E$，

$$\psi(x)=A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}+B\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\,, \tag{2.13-2}$$

在 $x=a$ 处，ψ 和 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi$ 连续. 有 $C\sin k_1 a = A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}+B\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}$，$C\dfrac{\mathrm{i}k_1}{k}\cos k_1 a = A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}-B\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}$，即

$$A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}=\frac{C}{2}\left[\sin k_1 a+\mathrm{i}\frac{k_1}{k}\cos k_1 a\right],$$

$$B\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}=\frac{C}{2}\left[\sin k_1 a-\mathrm{i}\frac{k_1}{k}\cos k_1 a\right].$$

反射系数

$$R=\frac{|B|^2\dfrac{k\hbar}{\mu}}{|A|^2\dfrac{k\hbar}{\mu}}=1\,.$$

(2) $-V_0<E<0$.

(a) $x<0$，$V=\infty$，$\psi(x)=0$.

(b) $0\leqslant x\leqslant a$，$V=-V_0$，$\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}=-\dfrac{2\mu}{\hbar^2}(E+V_0)\psi=-k_1^2\psi$，$\psi(x)=C\sin k_1 x+D\cos k_1 x$，

由 $\psi(0)=0$，得 $D=0$，

$$\psi=C\sin k_1 x\,. \tag{2.13-3}$$

(c) $x>a$，$V(x)=0$，

$-\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi=E\psi$，$E<0$，即 $\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi=-\dfrac{2\mu E}{\hbar^2}\psi=\alpha^2\psi$，

$$\psi(x)=F\mathrm{e}^{-\alpha x}+G\mathrm{e}^{\alpha x}\,. \tag{2.13-4}$$

因 $\psi(\infty)=0$，故 $G=0$，

$$\psi(x)=F\mathrm{e}^{-\alpha x}\,. \tag{2.13-5}$$

在 $x=a$ 处，ψ 和 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi$ 连续. $F\mathrm{e}^{-\alpha a}-C\sin k_1 a=0$，$-\alpha F\mathrm{e}^{-\alpha x}-k_1 C\cos k_1 a=0$，线性齐次方程有解的条件是系数行列式为零.

$$\begin{vmatrix}\mathrm{e}^{-\alpha a} & -\sin k_1 a\\ -\alpha\mathrm{e}^{-\alpha a} & -k_1\cos k_1 a\end{vmatrix}=0\,. \tag{2.13-6}$$

其中，$\alpha^2=-\frac{2\mu}{\hbar^2}E$，$k_1^2=\frac{2\mu}{\hbar^2}(E+V_0)$，由式(2.13-6)得到$k_1\cos k_1a+\alpha\sin k_1a=0$，即

$$\begin{cases}k_1a\cot(k_1a)=-\alpha a\\ \alpha^2a^2+k_1^2a^2=\frac{2\mu}{\hbar^2}V_0a^2\end{cases}$$，令$\eta=\alpha a$，$\xi=k_1a$，有$$\begin{cases}\eta=-\xi\cot(\xi)\\ \eta^2+\xi^2=\frac{2\mu}{\hbar^2}V_0a^2\end{cases}$$，

利用 MATLAB 编制程序，并利用 Visio 补全曲线，程序如下：

```
x1=0:0.01:2.7;y1=x1.*cot(x1);y2=sqrt((5.*3.14./4).^2-x1.^2);
x2=3.8:0.01:5.5;y3=x2.*cot(x2);y4=sqrt((5.*3.14./4).^2-x2.
^2);plot(x1,-y1,x1,y2,x2,-y3,x2,y4)
```

绘制的图像如图 2.13-2 所示.

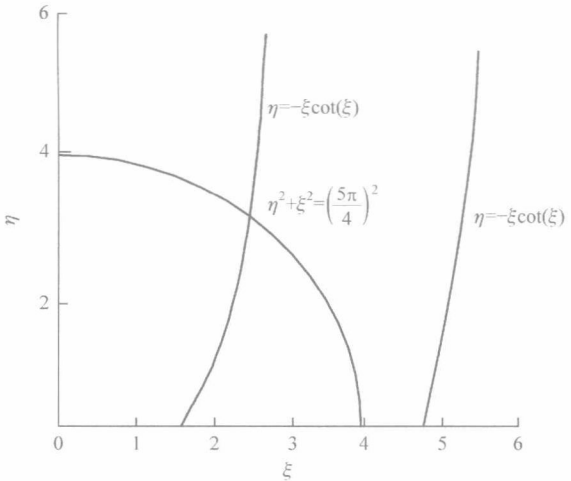

图 2.13-2　绘制的图像 1

由于 cot(ξ) 函数当$\xi=\pi$附近趋向无穷大，故没有画出，1/4 圆弧方程为$\eta^2+\xi^2=\left(\frac{5\pi}{4}\right)^2$.

设两条曲线交点纵坐标值$\eta=\alpha a$，得到$\alpha=\frac{\eta}{a}$，$E=\frac{-\hbar^2}{2\mu}\alpha^2=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\eta}{a}\right)^2$.

进一步地利用 MATLAB 编制程序：

```
x1=2.462:0.001:2.464;y1=x1.*cot(x1);y2=sqrt((5.*3.14./4).^
2-x1.^2); plot(x1,-y1,x1,y2)
```

绘制的图像如图 2.13-3 所示，交点坐标为(2.4632, 3.056)即交点纵坐标值为

$\eta=3.056$.

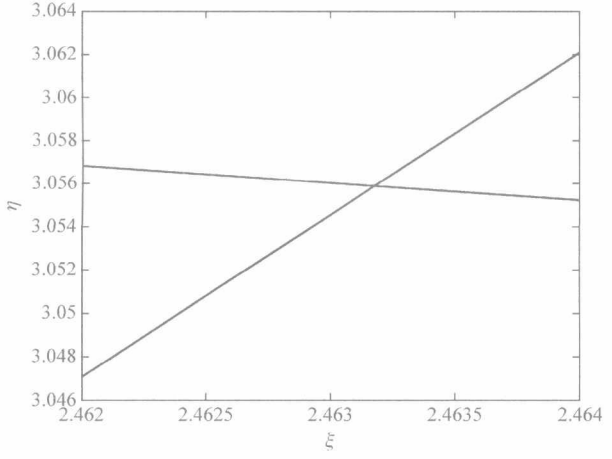

图 2.13-3　绘制的图像 2

答　(1) $E>0$ 情形，$\psi(x)=\begin{cases}0, & x<0\\ C\sin k_1x, & 0\leqslant x\leqslant a\\ Ae^{-ikx}+Be^{ikx}, & x>a\end{cases}$，反射系数 $R=\dfrac{|B|^2\dfrac{k\hbar}{\mu}}{|A|^2\dfrac{k\hbar}{\mu}}=1$.

(2) $-V_0<E<0$ 情形，$\psi(x)=\begin{cases}0, & x<0\\ C\sin k_1x, & 0\leqslant x\leqslant a\\ Fe^{-\alpha x}, & x>a\end{cases}$，$\eta=-\xi\cot(\xi)$ 与 $\eta^2+\xi^2=\left(\dfrac{5\pi}{4}\right)^2$ 的交点坐标为($\xi=2.463\,2,\eta=3.056$).

2.14　在准经典近似下，确定粒子穿透概率，$V(x)=\begin{cases}0, & x\leqslant 0\\ V_0-e\varepsilon x, & x>0\end{cases}$.

分析　势函数 $V(x)$ 如图 2.14-1 所示，$E<V_0$，粒子从左边入射，由 $E=V_0-e\varepsilon a$，得

$$a=\frac{V_0-E}{e\varepsilon}.$$

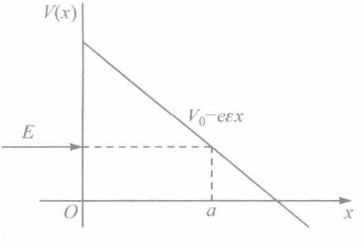

图 2.14-1　势函数

解　根据准经典近似，穿透势垒的概率

$$T=\mathrm{e}^{-\frac{2}{\hbar}\int_0^a\sqrt{2\mu[V(x)-E]}\mathrm{d}x}=\mathrm{e}^{-\frac{2}{\hbar}\int_0^a\sqrt{2\mu(V_0-e\varepsilon x-E)}\mathrm{d}x}=\mathrm{e}^{-\frac{4\sqrt{2\mu}\sqrt{(V_0-E)^3}-\sqrt{(V_0-E-e\varepsilon a)^3}}{3\quad e\varepsilon\hbar}},$$

式中
$$-\frac{2}{\hbar}\int_0^a\sqrt{2\mu(V_0-e\varepsilon x-E)}\mathrm{d}x=-\frac{2\sqrt{2\mu}}{\hbar}\int_0^a\sqrt{V_0-E-e\varepsilon x}\mathrm{d}x. \tag{2.14-1}$$

令 $\sqrt{V_0-E-e\varepsilon x}=t$，则 $V_0-E-e\varepsilon x=t^2$，$x=\dfrac{V_0-E-t^2}{e\varepsilon}$，$\mathrm{d}x=\dfrac{-2t}{e\varepsilon}\mathrm{d}t$.

当 $x=0$，$t=\sqrt{V_0-E}$；当 $x=a$，$t=\sqrt{V_0-E-e\varepsilon a}$；则式(2.14-1)为

$$-\frac{2}{\hbar}\int_0^a\sqrt{2\mu(V_0-e\varepsilon x-E)}\mathrm{d}x=-\frac{2\sqrt{2\mu}}{\hbar}\int_{\sqrt{V_0-E}}^{\sqrt{V_0-E-e\varepsilon a}}t\left(\frac{-2t}{e\varepsilon}\mathrm{d}t\right)=-\frac{2\sqrt{2\mu}}{\hbar e\varepsilon}\left(-\frac{2}{3}t^3\right)\Bigg|_{\sqrt{V_0-E}}^{\sqrt{V_0-E-e\varepsilon a}}$$

$$=-\frac{4\sqrt{2\mu}}{3\hbar e\varepsilon}\left(\sqrt{(V_0-E)^3}-\sqrt{(V_0-E-e\varepsilon a)^3}\right).$$

答　粒子穿透概率为 $\mathrm{e}^{-\frac{4\sqrt{2\mu}\sqrt{(V_0-E)^3}-\sqrt{(V_0-E-e\varepsilon a)^3}}{3\quad e\varepsilon\hbar}}$.

2.15　对于在一维势场 $V(x)=\begin{cases}\infty, & x<0,x>a\\ 0, & 0\leqslant x\leqslant a\end{cases}$ 中运动的粒子，试证：

(1) $\left\langle(\Delta x)^2\right\rangle=\left\langle(x-\langle x\rangle)^2\right\rangle=\dfrac{a^2}{12}\left(1-\dfrac{6}{n^2\pi^2}\right)$；

(2) 当 n 很大时，上面的结果与相应的经典结果一致，并检验是否满足不确定关系？

分析　$\left\langle(\Delta x)^2\right\rangle=\left\langle(x-\langle x\rangle)^2\right\rangle=\left\langle x^2\right\rangle-2\langle x\rangle^2+\langle x\rangle^2=\left\langle x^2\right\rangle-\langle x\rangle^2$.

证明　在势场 $V(x)=\begin{cases}\infty, & x<0,x>a\\ 0, & 0\leqslant x\leqslant a\end{cases}$ 中，量子态 $\psi_n(x)=\begin{cases}0, & x<0,x>a\\ \sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi x}{a}, & 0\leqslant x\leqslant a\end{cases}$，

而相应的能量 $E_n=\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\left(\dfrac{n\pi}{a}\right)^2$.

(1) $(\Delta x)^2=\left\langle x^2\right\rangle-\langle x\rangle^2$，式中

$$\langle x\rangle=\frac{2}{a}\int_0^a\mathrm{d}x\sin\frac{n\pi x}{a}x\sin\frac{n\pi x}{a}=\frac{2}{a}\int_0^a\mathrm{d}x\,x\frac{1-\cos\dfrac{2n\pi x}{a}}{2}$$

$$=\frac{1}{a}\left[\int_0^a x\mathrm{d}x-\int_0^a x\cos\frac{2n\pi x}{a}\mathrm{d}x\right]=\frac{1}{a}\left[\frac{x^2}{2}\Bigg|_0^a-\frac{1}{\dfrac{2n\pi}{a}}\int_0^a x\mathrm{d}\sin\frac{2n\pi x}{a}\right]$$

$$=\frac{a}{2}-\frac{1}{2n\pi}\left[x\sin\frac{2n\pi x}{a}\bigg|_0^a-\int_0^a\sin\frac{2n\pi x}{a}\mathrm{d}x\right]$$

$$=\frac{a}{2}+\frac{1}{2n\pi}\int_0^a\sin\frac{2n\pi x}{a}\mathrm{d}x=\frac{a}{2}-\frac{1}{2n\pi}\frac{1}{\frac{2n\pi}{a}}\cos\frac{2n\pi x}{a}\bigg|_0^a=\frac{a}{2}.$$

$$\left\langle x^2\right\rangle=\frac{2}{a}\int_0^a\mathrm{d}x\sin\frac{n\pi x}{a}x^2\sin\frac{n\pi x}{a}=\frac{2}{a}\int_0^a\mathrm{d}x\,x^2\frac{1-\cos\frac{2n\pi x}{a}}{2}$$

$$=\frac{1}{a}\left[\int_0^a x^2\mathrm{d}x-\int_0^a x^2\cos\frac{2n\pi x}{a}\mathrm{d}x\right]=\frac{1}{a}\left[\frac{x^3}{3}\bigg|_0^a-\frac{1}{\frac{2n\pi}{a}}\int_0^a x^2\mathrm{d}\sin\frac{2n\pi x}{a}\right]$$

$$=\frac{a^2}{3}-\frac{1}{2n\pi}\left[x^2\sin\frac{2n\pi x}{a}\bigg|_0^a-\int_0^a 2x\sin\frac{2n\pi x}{a}\mathrm{d}x\right]=\frac{a^2}{3}+\frac{1}{n\pi}\int_0^a x\sin\frac{2n\pi x}{a}\mathrm{d}x$$

$$=\frac{a^2}{3}-\frac{1}{n\pi}\frac{1}{\frac{2n\pi}{a}}\int_0^a x\mathrm{d}\cos\frac{2n\pi x}{a}=\frac{a^2}{3}-\frac{1}{n\pi}\frac{1}{\frac{2n\pi}{a}}\left[x\cos\frac{2n\pi x}{a}\bigg|_0^a-\int_0^a\cos\frac{2n\pi x}{a}\mathrm{d}x\right]$$

$$=\frac{a^2}{3}-\frac{a^2}{2(n\pi)^2}+\frac{1}{n\pi}\frac{1}{\left(\frac{2n\pi}{a}\right)^2}\sin\frac{2n\pi x}{a}\bigg|_0^a=\frac{a^2}{3}-\frac{a^2}{2(n\pi)^2}.$$

$$\left\langle(\Delta x)^2\right\rangle=\left\langle x^2\right\rangle-\left\langle x\right\rangle^2=\frac{a^2}{3}-\frac{a^2}{2(n\pi)^2}-\left(\frac{a}{2}\right)^2=\frac{a^2}{12}-\frac{a^2}{2(n\pi)^2}=\frac{a^2}{12}\left(1-\frac{6}{n^2\pi^2}\right).$$

证毕.

(2) 当n很大时，$\left\langle(\Delta x)^2\right\rangle=\frac{a^2}{12}$. 这和经典物理结果一致，按经典物理，粒子可等概率分布在0到a之间，故$\left\langle x\right\rangle=\frac{1}{a}\int_0^a x\mathrm{d}x=\frac{a}{2}$. $\left\langle x^2\right\rangle=\frac{1}{a}\int_0^a x^2\mathrm{d}x=\frac{a^2}{3}$.

$$\left\langle(\Delta x)^2\right\rangle=\left\langle x^2\right\rangle-\left\langle x\right\rangle^2=\frac{a^3}{3}-\left(\frac{a}{2}\right)^2=\frac{a^2}{12}.$$

按经典物理：若粒子有动量P，从$x=0$运动到$x=a$，其间由于势能为零，不受力场作用，动量P是恒量. 粒子到达$x=a$，由于势能为∞，粒子又不可透入，以动量$-P$弹回，直到$x=0$，$-P$保持不变，在$x=0$，又全反射，以P向$x=a$运动，以此类推. 所以

$$\left\langle P\right\rangle=\frac{1}{2}[P+(-P)]=0\,,\quad\left\langle P^2\right\rangle=P^2.$$

因此，$\left\langle (\Delta P)^2 \right\rangle = P^2$. 由于 P 可以任意的，所以不满足不确定关系，在经典物理中，不存在不确定关系.

答　当 n 很大时，$\left\langle (\Delta x)^2 \right\rangle = \left\langle (x - \langle x \rangle)^2 \right\rangle = \dfrac{a^2}{12}\left(1 - \dfrac{6}{n^2\pi^2}\right) \to \dfrac{a^2}{12}$ 与相应的经典结果一致，但不满足不确定关系.

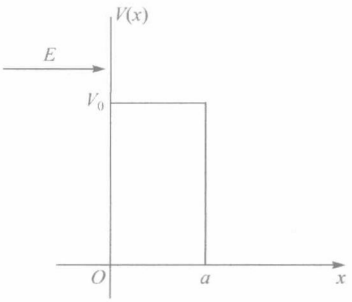

图 2.16-1　势垒

2.16　在如图 2.16-1 所示的一维方形势垒的定态问题中，求解 $E > V_0$ 的情形.

分析　由题意，一维势垒

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

解　(a)　$x < 0, x > a$，

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x) + k^2\psi(x) = 0\ ,\quad k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2} > 0\ ;$$

(b)　$0 \leqslant x \leqslant a$，

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x) + k_1^2\psi(x) = 0\ ,\quad k_1^2 = \frac{2\mu(E - V_0)}{\hbar^2} > 0\ ;$$

对于 $x < 0$ 的解为

$$\psi(x) = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\ , \tag{2.16-1}$$

对于 $0 \leqslant x \leqslant a$ 的解为

$$\psi(x) = C\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1 x} + D\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1 x}\ , \tag{2.16-2}$$

对于 $x > a$ 的解为

$$\psi(x) = F\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}. \tag{2.16-3}$$

在 $x = 0$ 处，$\psi(x)$ 连续，　$A + B = C + D$，　(2.16-4)

$\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi(x)$ 连续，　$A - B = \dfrac{\mathrm{i}k_1}{\mathrm{i}k}(C - D)$；　(2.16-5)

在 $x = a$ 处，$\psi(x)$ 连续，　$F\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} = C\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1 a} + D\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1 a}$，　(2.16-6)

$\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi(x)$ 连续，　$\mathrm{i}kF\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} = \mathrm{i}k_1(C\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1 a} - D\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1 a})$. (2.16-7)

解得

$$A = \frac{1}{2}\left[C\left(1 + \frac{k_1}{k}\right) + D\left(1 - \frac{k_1}{k}\right)\right], \tag{2.16-8}$$

$$B=\frac{1}{2}\left[C\left(1-\frac{k_1}{k}\right)+D\left(1+\frac{k_1}{k}\right)\right], \tag{2.16-9}$$

$$C=\frac{1+\dfrac{k}{k_1}}{2\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1a}}F\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}, \tag{2.16-10}$$

$$D=\frac{1-\dfrac{k}{k_1}}{2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1a}}F\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}. \tag{2.16-11}$$

将式(2.16-10)和式(2.16-11)代入式(2.16-8)和式(2.16-9)，得

$$A=\frac{1}{2}\left[\frac{1+\dfrac{k}{k_1}}{2\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1a}}F\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}\left(1+\frac{k_1}{k}\right)+\frac{1-\dfrac{k}{k_1}}{2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1a}}F\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}\left(1-\frac{k_1}{k}\right)\right]$$

$$=\frac{F}{4kk_1}[(k_1+k)^2\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k-k_1)a}-(k-k_1)^2\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k+k_1)a}],$$

$$B=\frac{1}{2}\left[\frac{1+\dfrac{k}{k_1}}{2\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1a}}F\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}\left(1-\frac{k_1}{k}\right)+\frac{1-\dfrac{k}{k_1}}{2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1a}}F\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}\left(1+\frac{k_1}{k}\right)\right]$$

$$=\frac{F(k^2-k_1^2)}{4kk_1}[\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k-k_1)a}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k+k_1)a}]=-\frac{F(k^2-k_1^2)\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}}{2kk_1}\mathrm{i}\sin(k_1a).$$

若 $\sin(k_1a)=0$，则 $B=0$，即 $k_1a=n\pi$，$n=0,1,2,\cdots$，也就是 $\dfrac{2\pi}{\lambda_1}a=n\pi$，$\dfrac{2}{\lambda_1}a=n$ 为共振透射条件，这时无反射效应.

答　对于 $E>V_0$ 的情形，满足 $\sqrt{\dfrac{2\mu(E-V_0)}{\hbar^2}}a=n\pi$，$k=\sqrt{\dfrac{2\mu E}{\hbar^2}}$，$k_1=\sqrt{\dfrac{2\mu(E-V_0)}{\hbar^2}}$ 时，

对于 $x<0$，$\psi(x)=\dfrac{F}{4kk_1}[(k_1+k)^2\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k-k_1)a}-(k-k_1)^2\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k+k_1)a}]\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$，

对于 $0\leqslant x\leqslant a$，$\psi(x)=\dfrac{F}{2k_1}[(k+k_1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k-k_1)a}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1x}-(k-k_1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k+k_1)a}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1x}]$，

对于 $x>a$，$\psi(x)=F\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$.

2.17　质量为 μ 的粒子以非相对论动能 E 从势阱

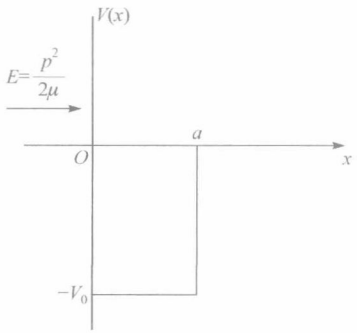

图 2.17-1　势阱

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

左方入射，如图 2.17-1 所示，其中 V_0 是正实数，问粒子穿过势阱的概率是多少？E 取什么数值时，穿透系数等于 1？

分析　根据势阱函数分段列方程，求解后利用连续性确定系数关系.

解　势能分段为常数，故可分段列方程求解.

$x<0$ 情形，$-\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x)=E\psi(x)$，解为

$$\psi(x)=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx},\quad E=\frac{\hbar^2k^2}{2\mu};\tag{2.17-1}$$

$0\leqslant x\leqslant a$ 情形，$-\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x)=(E+V_0)\psi(x)$，令 $k_1^2=\dfrac{2\mu}{\hbar^2}(E+V_0)$ 解为

$$\psi(x)=C\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1x}+D\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1x};\tag{2.17-2}$$

$x>a$ 情形，$-\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x)=E\psi(x)$，解为

$$\psi(x)=F\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+G\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}.\tag{2.17-3}$$

因为 $x>a$ 区域中粒子不受力作用，不存在反射效应，所以 $G=0$，进一步利用连续性条件来确定系数.

在 $x=0$ 处，$\psi(x)$ 连续，　$A+B=C+D$，　(2.17-4)

$\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi(x)$ 连续，　$A-B=\dfrac{\mathrm{i}k_1}{\mathrm{i}k}(C-D)$，　(2.17-5)

解得

$$A=\frac{1}{2}\left[C\left(1+\frac{k_1}{k}\right)+D\left(1-\frac{k_1}{k}\right)\right],\tag{2.17-6}$$

$$B=\frac{1}{2}\left[C\left(1-\frac{k_1}{k}\right)+D\left(1+\frac{k_1}{k}\right)\right].\tag{2.17-7}$$

在 $x=a$ 处，$\psi(x)$ 连续，　$F\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}=C\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1a}+D\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1a}$，　(2.17-8)

$\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi(x)$ 连续，　$\mathrm{i}kF\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}=\mathrm{i}k_1(C\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1a}-D\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1a})$，　(2.17-9)

解得

$$C=\frac{1+\dfrac{k}{k_1}}{2\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1a}}F\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}\,, \tag{2.17-10}$$

$$D=\frac{1-\dfrac{k}{k_1}}{2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1a}}F\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}\,. \tag{2.17-11}$$

将式(2.17-10)和式(2.17-11)代入式(2.17-6)和式(2.17-7)，得

$$A=\frac{1}{2}\left[\frac{1+\dfrac{k}{k_1}}{2\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1a}}F\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}\left(1+\frac{k_1}{k}\right)+\frac{1-\dfrac{k}{k_1}}{2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1a}}F\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}\left(1-\frac{k_1}{k}\right)\right]$$

$$=\frac{F}{4kk_1}[(k_1+k)^2\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k-k_1)a}-(k-k_1)^2\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k+k_1)a}]\,,$$

$$B=\frac{1}{2}\left[\frac{1+\dfrac{k}{k_1}}{2\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1a}}F\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}\left(1-\frac{k_1}{k}\right)+\frac{1-\dfrac{k}{k_1}}{2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1a}}F\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}\left(1+\frac{k_1}{k}\right)\right]=\frac{F(k^2-k_1^2)}{4kk_1}[\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k-k_1)a}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k+k_1)a}]$$

$$=-\frac{F(k^2-k_1^2)\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}}{2kk_1}\mathrm{i}\sin(k_1a).$$

穿透系数

$$T=\frac{|F|^2}{|A|^2}=\frac{(4kk_1)^2}{|(k_1+k)^2\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k-k_1)a}-(k-k_1)^2\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k+k_1)a}|^2}$$

$$=\frac{16k^2k_1^2}{|\{(k+k_1)^2[\cos(k-k_1)a+\mathrm{i}\sin(k-k_1)a]-(k-k_1)^2[\cos(k+k_1)a+\mathrm{i}\sin(k+k_1)a]\}|^2}$$

$$=\frac{16k^2k_1^2}{|\{(k+k_1)^2[\cos(k-k_1)a+\mathrm{i}\sin(k-k_1)a]-(k-k_1)^2[\cos(k+k_1)a+\mathrm{i}\sin(k+k_1)a]\}|^2}$$

$$=\frac{16k^2k_1^2}{[(k+k_1)^2\cos(k-k_1)a-(k-k_1)^2\cos(k+k_1)a]^2+[(k+k_1)^2\sin(k-k_1)a-(k-k_1)^2\sin(k+k_1)a]^2}$$

$$=\frac{16k^2k_1^2}{(k+k_1)^4+(k-k_1)^4-2(k+k_1)^2(k-k_1)^2\cos(2k_1a)}$$

$$=\frac{16k^2k_1^2}{(k+k_1)^4+(k-k_1)^4-2(k+k_1)^2(k-k_1)^2[1-2\sin^2(k_1a)]}$$

$$=\frac{16k^2k_1^2}{[(k+k_1)^2-(k-k_1)^2]^2+4(k+k_1)^2(k-k_1)^2\sin^2(k_1a)}$$

$$=\frac{4k^2k_1^2}{4k^2k_1^2+(k+k_1)^2(k-k_1)^2\sin^2(k_1a)}.$$

当 $k_1 a = n2\pi$ 时，$T = \dfrac{|F|^2}{|A|^2} = 1$，即发生共振穿透.

答　穿透系数为 $T = \dfrac{4k^2 k_1^2}{4k^2 k_1^2 + (k+k_1)^2 (k-k_1)^2 \sin^2(k_1 a)}$，当 $k_1 a = n2\pi$ 时，$T = \dfrac{|F|^2}{|A|^2} = 1$，即发生共振穿透.

2.18　求解在一维势场 $V(x) = -g\delta(x)$ 作用下的束缚态问题，其中 g 为正实常数.

分析　势场 $V(x) = -g\delta(x) = -g\begin{cases} 0, & x \neq 0 \\ \infty, & x = 0 \end{cases}$，且满足 $\int_{-a}^{a} \delta(x)\mathrm{d}x = 1$.

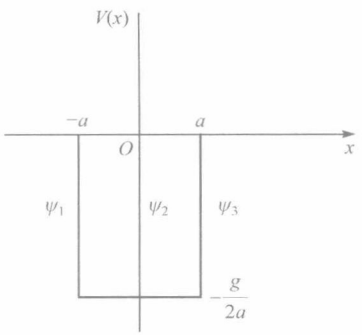

图 2.18-1　对称势阱

将 $\delta(x)$ 看作 $V(x) = \begin{cases} 0, & |x| > a \\ -\dfrac{g}{2a}, & |x| \leqslant a \end{cases}$，在 $\int V(x)\mathrm{d}x = -g$ 条件下，$a \to 0$ 的极限，如图 2.18-1 所示，由于 $V(x)$ 分段为常数，可分段求解.

解　设在 $x < -a$ 区域，波函数为 ψ_1；

在 $-a \leqslant x \leqslant a$ 区域，$V(\pm\infty) = 0$，对应于束缚态，$E < V(\pm\infty) = 0$.

在 $x < -a$ 和 $x > a$ 的区域，波函数满足方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x) = E\psi(x), \tag{2.18-1}$$

令 $-\dfrac{2\mu}{\hbar^2}E = \alpha^2 > 0$，解为 $\psi(x) \propto \mathrm{e}^{\pm\alpha x}$.

考虑到边界条件，$\psi_1(-\infty) = 0$，$\psi_3(\infty) = 0$，则

当 $x < -a$ 时，
$$\psi_1 = C_1 \mathrm{e}^{\alpha x}, \tag{2.18-2}$$

当 $x > a$ 时，
$$\psi_3 = C_3 \mathrm{e}^{-\alpha x}, \tag{2.18-3}$$

当 $a \to 0$ 时，有 $\psi_1(0) = \psi_3(0) = \psi_2(0)$，即
$$C_1 = C_3 = C = \psi_2(0). \tag{2.18-4}$$

对于 $-a \leqslant x \leqslant a$ 区域，由于 $\delta(x)$ 在 $x = 0^{\pm}$，有无穷跳跃，所以在 $x = 0$ 区域，$\psi(x)$ 连续，而 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi$ 不连续. 那么 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi$ 在 $x = 0$ 处应如何变化？根据定态薛定谔方程有

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_2(x) + \frac{2\mu}{\hbar^2}g\delta(x)\psi_2(x) = \alpha^2\psi_2(x). \tag{2.18-5}$$

对方程式(2.18-4)左右积分，积分区间为$[-a,a]$，得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_2(x)\Big|_{-a}^{a}+\frac{2\mu}{\hbar^2}g\psi_2(0)=\alpha^2\psi_2(0)2a\to 0. \tag{2.18-6}$$

考虑到$x=\pm a$，$a\neq 0$处$\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi$连续(注意先令$a\neq 0$，再令$a\to 0$)，有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_2(x)\Big|_{a}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_3(x)\Big|_{a}=-C\alpha\mathrm{e}^{-\alpha a}\xrightarrow{a\to 0}-C\alpha, \tag{2.18-7}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_2(x)\Big|_{-a}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_1(x)\Big|_{-a}=C\alpha\mathrm{e}^{-\alpha a}\xrightarrow{a\to 0}C\alpha. \tag{2.18-8}$$

当$a\to 0$时，由式(2.18-4)得$\psi_2(0)=C$，将式(2.18-7)、式(2.18-8)代入式(2.18-6)得

$$-C\alpha-C\alpha+\frac{2\mu}{\hbar^2}gC=0，\text{即}\ \alpha=\frac{\mu}{\hbar^2}g,$$

于是

$$E=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\alpha^2=-\frac{\mu}{2\hbar^2}g^2\qquad(\text{一个束缚态}), \tag{2.18-9}$$

相应的波函数

$$\psi(x)=\begin{cases}C\mathrm{e}^{\frac{\mu g x}{\hbar^2}}, & x<0\\ C\mathrm{e}^{-\frac{\mu g x}{\hbar^2}}, & x>0\end{cases}. \tag{2.18-10}$$

由归一化性质$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x)|^2\,\mathrm{d}x=1$，$C^2\left[\int_{-\infty}^{0}\mathrm{e}^{\frac{2\mu g x}{\hbar^2}}\mathrm{d}x+\int_{0}^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{2\mu g x}{\hbar^2}}\mathrm{d}x\right]=1$，

$$C^2\left[\frac{1}{\frac{2\mu g}{\hbar^2}}\mathrm{e}^{\frac{2\mu g x}{\hbar^2}}\Big|_{-\infty}^{0}+\frac{1}{-\frac{2\mu g}{\hbar^2}}\mathrm{e}^{-\frac{2\mu g x}{\hbar^2}}\Big|_{0}^{\infty}\right]=1,$$

$$C^2\left[\frac{1}{\frac{2\mu g}{\hbar^2}}+\frac{1}{\frac{2\mu g}{\hbar^2}}\right]=1，\quad C=\pm\sqrt{\frac{\mu g}{\hbar^2}}.$$

答　能量$E=-\dfrac{\mu}{2\hbar^2}g^2$，波函数为$\psi(x)=\begin{cases}\pm\sqrt{\dfrac{\mu g}{\hbar^2}}\mathrm{e}^{\frac{\mu g x}{\hbar^2}}, & x<0\\ \pm\sqrt{\dfrac{\mu g}{\hbar^2}}\mathrm{e}^{-\frac{\mu g x}{\hbar^2}}, & x>0\end{cases}$.

2.19　粒子从左向右射向一维势垒 $V(x)=g\delta(x)$，g 为正常数，求透射系数和反射系数.

分析　由题意 $V(\pm\infty)=0$，$E>0$ 为自由态. $V(x)=g\delta(x)$ 可看作为

$$V(x)=\begin{cases}0, & x<-a, x>a\\ \dfrac{g}{2a}, & -a\leqslant x\leqslant a\end{cases}$$，当 $a\to 0$ 时的极限情况.

解　如图 2.19-1 所示，势能分段为常数，故分段进行求解.

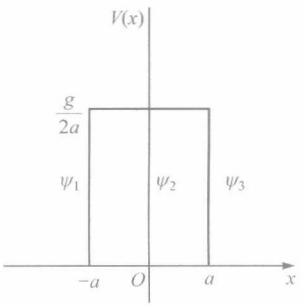

图 2.19-1　对称势垒

在 $x<-a$ 区域，$V=0$，$-\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_1(x)=E\psi_1(x)$，

$$\psi_1(x)=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}, \tag{2.19-1}$$

式中，$k=\sqrt{\dfrac{2\mu E}{\hbar^2}}$.

在 $x>a$ 区域，$V=0$，$-\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_3(x)=E\psi_3(x)$，

$$\psi_3(x)=C\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+D\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}=C\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}, \tag{2.19-2}$$

式中，由于在 $x>a$ 区域，不存在作用力，故不存在反射波，$D=0$.

在 $-a\leqslant x\leqslant a$ 区域，$V=0$，

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_2(x)=[E-g\delta(x)]\psi_2(x). \tag{2.19-3}$$

对式(2.19-3)作积分，积分区间 $[-a,a]$，再令 $a\to 0$，得

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_2(a)-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_2(-a)\right]=g\psi_2(x), \tag{2.19-4}$$

式中，应用了 $E\psi_2(x)2a\to 0$.

当 $a\to 0$ 时，

$$\psi(x)=\begin{cases}A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}, & x<0\\ C\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}, & x>0\end{cases}. \tag{2.19-5}$$

在 $x=0$ 处，$\psi(x)$ 连续，有

$$A+B=C. \tag{2.19-6}$$

应用式(2.19-5)，式(2.19-4)简化为

$$\mathrm{i}k[C-(A-B)]=\frac{2\mu}{\hbar^2}gC, \tag{2.19-7}$$

即

$$A-B=\frac{1}{\mathrm{i}k}\left(\mathrm{i}k-\frac{2\mu}{\hbar^2}g\right)C=\left(1+\mathrm{i}\frac{2\mu}{\hbar^2 k}g\right)C\,, \tag{2.19-8}$$

由式(2.19-6)和式(2.19-8)，解得

$$A=\frac{1}{2}\left(2+\mathrm{i}\frac{2\mu}{\hbar^2 k}g\right)C=\left(1+\mathrm{i}\frac{\mu}{\hbar^2 k}g\right)C\,,\quad B=-\mathrm{i}\frac{\mu}{\hbar^2 k}gC\,,$$

透射系数 $T=\dfrac{|C|^2}{|A|^2}=\dfrac{|C|^2}{\left|\left(1+\mathrm{i}\dfrac{\mu}{\hbar^2 k}g\right)C\right|^2}=\dfrac{1}{1+\left(\dfrac{\mu}{\hbar^2 k}g\right)^2}=\dfrac{(\hbar^2 k)^2}{(\hbar^2 k)^2+(\mu g)^2}$，

反射系数 $R=1-T=1-\dfrac{1}{1+\left(\dfrac{\mu}{\hbar^2 k}g\right)^2}=\dfrac{\left(\dfrac{\mu}{\hbar^2 k}g\right)^2}{1+\left(\dfrac{\mu}{\hbar^2 k}g\right)^2}=\dfrac{(\mu g)^2}{(\hbar^2 k)^2+(\mu g)^2}$.

答　透射系数为 $\dfrac{(\hbar^2 k)^2}{(\hbar^2 k)^2+(\mu g)^2}$，反射系数为 $\dfrac{(\mu g)^2}{(\hbar^2 k)^2+(\mu g)^2}$.

2.20　已知线性谐振子的基态和第一激发态为

$$\psi_0(x)=\sqrt[4]{\frac{\alpha^2}{\pi}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}\,,\quad \psi_1(x)=\sqrt[4]{\frac{4\alpha^6}{\pi}}x\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}\,,\quad \alpha=\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\,,$$

分别求这两个态的概率最大的位置.

分析　已知基态函数 $\psi_0(x)=\sqrt[4]{\dfrac{\alpha^2}{\pi}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$，则 $\psi_0^2(x)=\sqrt{\dfrac{\alpha^2}{\pi}}\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2}$；第一激发态函数 $\psi_1^2(x)=\sqrt{\dfrac{4\alpha^6}{\pi}}x^2\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2}$. 分别对 x 求一阶导数为零，二阶导数小于零，即可求出概率最大的位置.

利用 MATLAB 编制程序绘制 $\dfrac{\psi_0(x)}{A}$-αx、$\left[\dfrac{\psi_0(x)}{A}\right]^2$-$\alpha x$、$\dfrac{\psi_1(x)}{B}$-$\alpha x$、$\left[\dfrac{\psi_1(x)}{B}\right]^2$-$\alpha x$，分别如图 2.20-1、图 2.20-2、图 2.20-3、图 2.20-4 所示，式中 $A=\sqrt[4]{\dfrac{\alpha^2}{\pi}}$，$B=\sqrt[4]{\dfrac{4\alpha^2}{\pi}}$.

```
x1=0:0.01:5;y0=exp(-x1.^2/2);y1=x1.*exp(-x1.^2/2);plot(x1,y0)
x1=0:0.01:5;y0=exp(-x1.^2/2);y1=x1.*exp(-x1.^2/2);plot(x1,y0.^2)
x1=0:0.01:5;y0=exp(-x1.^2/2);y1=x1.*exp(-x1.^2/2);plot(x1,y1)
```

```
x1=0:0.01:5;y0=exp(-x1.^2/2);y1=x1.*exp(-x1.^2/2);plot(x1,
y1.^2)
```

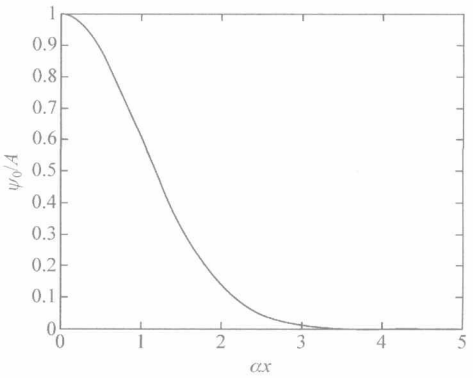

图 2.20-1　$\frac{\psi_0(x)}{A}$-αx

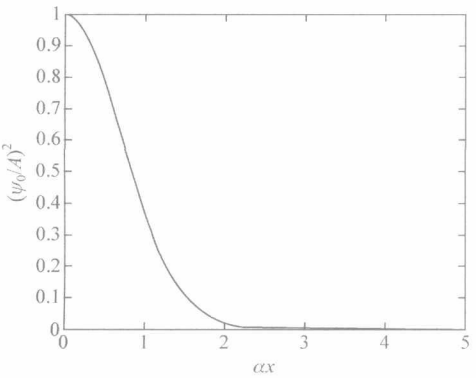

图 2.20-2　$\left[\frac{\psi_0(x)}{A}\right]^2$-$\alpha x$

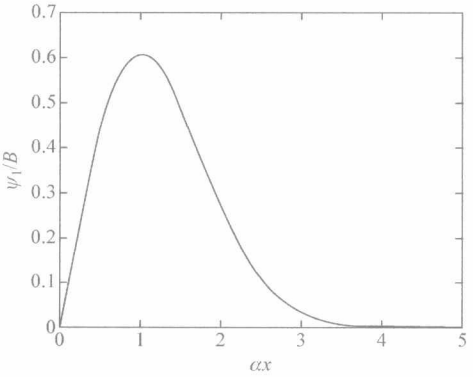

图 2.20-3　$\frac{\psi_1(x)}{B}$-αx

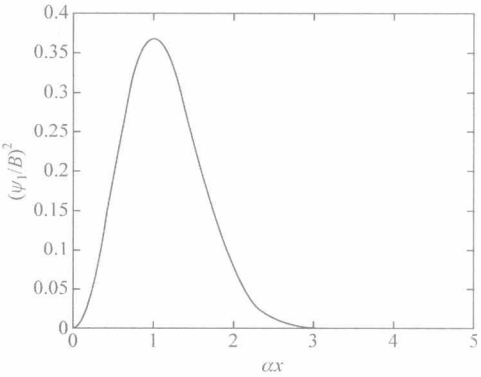

图 2.20-4　$\left[\frac{\psi_1(x)}{B}\right]^2$-$\alpha x$

解　对于基态

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_0^2(x)=(-\alpha^2)2x\sqrt{\frac{\alpha^2}{\pi}}\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2}=0\ ,\quad x_1=0\ ,\quad x_2=\infty\ ,$$

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_0^2(x)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[(-\alpha^2)2x\sqrt{\frac{\alpha^2}{\pi}}\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2}\right]=(-\alpha^2)\left[2\sqrt{\frac{\alpha^2}{\pi}}\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2}+4x^2(-\alpha^2)\sqrt{\frac{\alpha^2}{\pi}}\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2}\right],\tag{2.20-1}$$

当 $x_1=0$，式(2.20-1) $\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_0^2(x)=(-\alpha^2)2\sqrt{\frac{\alpha^2}{\pi}}<0$，$\psi_{0\max}(x)=\sqrt[4]{\frac{\alpha^2}{\pi}}$；

当 $x_2=\infty$，式(2.20-1) $\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_0^2(x)=(-\alpha^2)2\sqrt{\dfrac{\alpha^2}{\pi}}=0$，没有极大值.

对于第一激发态

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_1^2(x)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[\sqrt{\frac{4\alpha^6}{\pi}}x^2\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2}\right]=\sqrt{\frac{4\alpha^6}{\pi}}\left[2x\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2}+(-\alpha^2)2x^3\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2}\right]=0,$$

$$x_1=0,\quad x_2=\infty,\quad x_3=\pm\frac{1}{\alpha},$$

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_1^2(x)&=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left\{2\sqrt{\frac{4\alpha^6}{\pi}}\left[(x-\alpha^2x^3)\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2}\right]\right\}\\&=2\sqrt{\frac{4\alpha^6}{\pi}}[(1-3\alpha^2x^2)\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2}+(x-\alpha^2x^3)(-\alpha^2)2x\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2}].\end{aligned}\tag{2.20-2}$$

当 $x_1=0$，式(2.20-2) $\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_1^2(x)=2\sqrt{\dfrac{4\alpha^6}{\pi}}>0$，$\psi_{0\min}(x)=0$；

当 $x_2=\infty$，式(2.20-2) $\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_1^2(x)=(-\alpha^2)2\sqrt{\dfrac{\alpha^2}{\pi}}=0$，没有极大值；

当 $x_3=\pm\dfrac{1}{\alpha}$，式(2.20-2)

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_1^2(x)&=2\sqrt{\frac{4\alpha^6}{\pi}}\left[\left(1-3\alpha^2\frac{1}{\alpha^2}\right)\mathrm{e}^{-\alpha^2\frac{1}{\alpha^2}}-2\alpha^2\left(\frac{1}{\alpha^2}-\alpha^2\frac{1}{\alpha^4}\right)\mathrm{e}^{-\alpha^2\frac{1}{\alpha^2}}\right]\\&=2\sqrt{\frac{4\alpha^6}{\pi}}\left(-\frac{2}{\mathrm{e}}\right)<0.\end{aligned}$$

$\alpha=\sqrt{\dfrac{\hbar}{\mu\omega}}$，取得极大值为 $\psi_{1\max}(x)=\dfrac{1}{\sqrt{\mathrm{e}}}\sqrt[4]{\dfrac{4\alpha^2}{\pi}}=\dfrac{\sqrt{2\alpha}}{\sqrt{\mathrm{e}}}\sqrt[4]{\dfrac{1}{\pi}}$.

答　基态概率最大的位置在 $x=0$ 处，$\psi_{0\max}(x)=\sqrt[4]{\dfrac{\alpha^2}{\pi}}$；第一激发态，当 $\dfrac{5-\sqrt{17}}{4}<\alpha<\dfrac{5+\sqrt{17}}{4}$ 时，概率最大的位置在 $\sqrt{\dfrac{1}{\alpha}}=\sqrt{\dfrac{\mu\omega}{\hbar}}$，$\psi_{1\max}(x)=\dfrac{\sqrt{2\alpha}}{\sqrt{\mathrm{e}}}\sqrt[4]{\dfrac{1}{\pi}}$.

2.21　已知氢原子基态波函数为 $\psi_{\mathrm{g}}(r)=\dfrac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}$，问电子在 $r=a_0$ 球外出现的概率有多大？径向概率密度最大在什么位置？

分析　氢原子基态波函数为 $\psi_g(r)=\dfrac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}e^{-\frac{r}{a_0}}$，电子出现在 r 处的概率为

$$P=\int_{\varphi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi}\int_{r}^{\infty}\psi_g^2(r)r^2\mathrm{d}r\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi=4\pi\int_{r}^{\infty}\frac{e^{-\frac{2r}{a_0}}}{\pi a_0^3}r^2\mathrm{d}r\,. \tag{2.21-1}$$

利用 MATLAB 编制程序绘制 $\dfrac{\psi_g(r)}{A}$-$\dfrac{r}{a_0}$、$\left[\dfrac{\psi_g(r)}{A}\right]^2$-$\dfrac{r}{a_0}$，分别如图 2.21-1、图 2.21-2 所示，式中 $A=\dfrac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}$.

```
x1=0:0.01:5;y=exp(-x1);y1=y.^2;plot(x1,y)
x1=0:0.01:5;y=exp(-x1);y1=y.^2;plot(x1,y1)
```

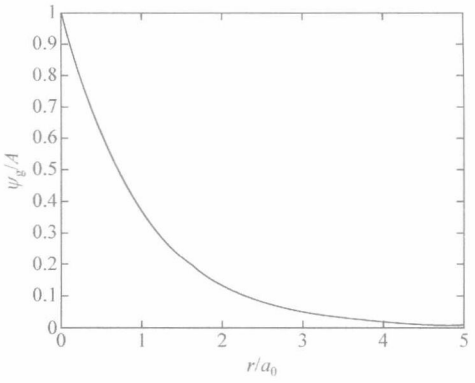

图 2.21-1　$\dfrac{\psi_g(r)}{A}$-$\dfrac{r}{a_0}$

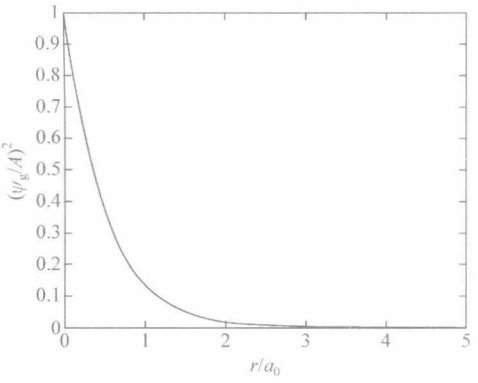

图 2.21-2　$\left[\dfrac{\psi_g(r)}{A}\right]^2$-$\dfrac{r}{a_0}$

解　电子在 $r=a_0$ 球外出现的概率为

$$P_0=4\pi\int_{a_0}^{\infty}\frac{e^{-\frac{2r}{a_0}}}{\pi a_0^3}r^2\mathrm{d}r=\frac{4}{a_0^3}\left(\frac{1}{-\frac{2}{a_0}}\right)\int_{a_0}^{\infty}r^2\mathrm{d}e^{-\frac{2r}{a_0}}=-\frac{2}{a_0^2}\left[r^2e^{-\frac{2r}{a_0}}\Big|_{a_0}^{\infty}-\int_{a_0}^{\infty}2e^{-\frac{2r}{a_0}}r\mathrm{d}r\right]$$

$$=\frac{2}{a_0^2}\left[\frac{a_0^2}{e^2}+\frac{1}{-\frac{2}{a_0}}\int_{a_0}^{\infty}2r\mathrm{d}e^{-\frac{2r}{a_0}}\right]=\frac{2}{a_0^2}\left\{\frac{a_0^2}{e^2}+\frac{1}{-\frac{2}{a_0}}\left[2re^{-\frac{2r}{a_0}}\Big|_{a_0}^{\infty}-\int_{a_0}^{\infty}2e^{-\frac{2r}{a_0}}\mathrm{d}r\right]\right\}$$

$$=\frac{2}{a_0^2}\left\{\frac{a_0^2}{e^2}+\frac{1}{-\frac{2}{a_0}}\left[-2\frac{a_0}{e^2}-\frac{2}{-\frac{2}{a_0}}e^{-\frac{2r}{a_0}}\Big|_{a_0}^{\infty}\right]\right\}=\frac{5}{e^2}$$

因 $\psi_g^2(r)=\frac{1}{\pi a_0^3}e^{-\frac{2r}{a_0}}$，则

$$\frac{d}{dr}[\psi_g^2(r)r^2]=\frac{d}{dr}\left[\frac{1}{\pi a_0^3}e^{-\frac{2r}{a_0}}r^2\right]=\frac{1}{\pi a_0^3}\left[2re^{-\frac{2r}{a_0}}+r^2\left(-\frac{2}{a_0}\right)e^{-\frac{2r}{a_0}}\right]=0,$$

解得

$$r_1=0,\quad r_2=\infty,\quad r_3=a_0.$$

$$\frac{d^2}{dr^2}[\psi_g^2(r)r^2]=\frac{d}{dr}\left\{\frac{2}{\pi a_0^3}\left(r-\frac{r^2}{a_0}\right)e^{-\frac{2r}{a_0}}\right\}=\frac{2}{\pi a_0^3}\left[\left(1-\frac{2r}{a_0}\right)e^{-\frac{2r}{a_0}}+\left(-\frac{2}{a_0}\right)\left(r-\frac{r^2}{a_0}\right)e^{-\frac{2r}{a_0}}\right].$$

(2.21-2)

当 $r_1=0$ 时，式(2.21-2) $\frac{d^2}{dr^2}[\psi_g^2(r)r^2]=\frac{2}{\pi a_0^3}\left[\left(1-\frac{2r}{a_0}\right)e^{-\frac{2r}{a_0}}+\left(-\frac{2}{a_0}\right)\left(r-\frac{r^2}{a_0}\right)e^{-\frac{2r}{a_0}}\right]$

>0，取得极小值 $\psi_{g\min}(r)=\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}$.

当 $r_2=\infty$ 时，式(2.21-2) $\frac{d^2}{dr^2}[\psi_g^2(r)r^2]=\frac{2}{\pi a_0^3}\left[\left(1-\frac{2r}{a_0}\right)e^{-\frac{2r}{a_0}}+\left(-\frac{2}{a_0}\right)\left(r-\frac{r^2}{a_0}\right)e^{-\frac{2r}{a_0}}\right]$

$=0$，没有极值.

当 $r_3=a_0$ 时，式(2.21-2) $\frac{d^2}{dr^2}[\psi_g^2(r)r^2]=-\frac{2}{\pi a_0^3e^2}<0$，极大值为 $\psi_{g\max}(r)=\frac{1}{e\sqrt{\pi a_0^3}}$.

答　在 $r=a_0$ 球外出现的概率为 $\frac{5}{e^2}$，径向概率密度最大在 $r=a_0$ 处，最大概率为 $\frac{1}{e\sqrt{\pi a_0^3}}$.

2.22　已知一维无限深势阱中的定态为

$$\psi_n(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi x}{a}, & 0\leqslant x\leqslant a\\ 0, & x<0, x>a\end{cases}$$

问处于基态的粒子出现在0到$\dfrac{a}{3}$间的概率有多大？如果处于第一激发态，情形如何？

分析　$\psi_n(x)$态粒子处于区间$[a_1,a_2]$的概率为$P_{a_1\sim a_2}=\int_{a_1}^{a_2}|\psi_n(x)|^2\,\mathrm{d}x$，当$n=1$为基态，当$n=2$为第一激发态.

解　在$\psi_n(x)$态，粒子处于0到$\dfrac{a}{3}$间的概率有

$$P_n=\int_0^{\frac{a}{3}}\mathrm{d}x\frac{2}{a}\sin^2\frac{n\pi}{a}x=\frac{2}{a}\int_0^{\frac{a}{3}}\mathrm{d}x\frac{1}{2}\left(1-\cos\frac{2n\pi}{a}x\right)=\frac{2}{a}\left[\frac{1}{2}\frac{a}{3}+\frac{\sin\dfrac{2n\pi}{a}x}{\dfrac{2n\pi}{a}}\Bigg|_0^{\frac{a}{3}}\right]=\frac{1}{3}+\frac{\sin\dfrac{2n\pi}{3}}{2n\pi}.$$

对于基态，$n=1$，

$$P_1=\frac{1}{3}+\frac{\sin\dfrac{2\pi}{3}}{2\pi}=\frac{1}{3}+\frac{1}{2\pi}\frac{\sqrt{3}}{2}=0.4712.$$

第一激发态，$n=2$，

$$P_2=\frac{1}{3}+\frac{\sin\dfrac{4\pi}{3}}{4\pi}=\frac{1}{3}-\frac{1}{4\pi}\frac{\sqrt{3}}{2}=0.2644.$$

答　处于基态的粒子出现在0到$\dfrac{a}{3}$间的概率为0.4712，处于第一激发态的概率为0.2644.

2.23　一维自由粒子的状态为$\psi(x)=N\left(\sin^2 kx+\dfrac{1}{2}\cos kx\right)$，求粒子的动量平均值和动能平均值.

分析　粒子的动量平均值为$\langle p\rangle=\dfrac{1}{L}\int_0^L\psi^*(x)\psi(x)\hbar k\mathrm{d}x$，动能平均值为$\left\langle\dfrac{p^2}{2\mu}\right\rangle=\dfrac{1}{L}\int_0^L\psi^*(x)\psi(x)\dfrac{p^2}{2\mu}\mathrm{d}x$，再考虑正交性$\int_0^L\psi_k^*(x)\psi_{k_1}(x)\mathrm{d}x=\dfrac{1}{L}\int_0^L\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_1-k)x}\mathrm{d}x=\delta_{k_1k}$进行计算.

解　设一维自由粒子在$0\sim L$的空间运动，而$L\gg\lambda$，λ为德布罗意波长，将

$0\sim L$ 空间延拓，满足周期性边界条件，则归一化可在 $0\sim L$ 中进行，

$$\psi_p(x)=\frac{1}{\sqrt{L}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}px}\ ,\quad \hat{p}\psi_p(x)=p\psi_p(x)\ ,\quad \frac{\hat{p}^2}{2\mu}\psi_p(x)=\frac{p^2}{2\mu}\psi_p(x)=\frac{\hbar^2k^2}{2\mu}\psi_p(x)\ ,\quad p=\hbar k\ .$$

由 $\psi_p(x)=\psi_p(x+L)$，得 $p=\dfrac{n\hbar}{L}$，$n=0,\pm1,\pm2,\cdots$，将 $\psi_p(x)$ 写成

$$\psi_k(x)=\frac{1}{\sqrt{L}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\ ,$$

其中，$k=n\dfrac{2\pi}{L}$，$n=0,\pm1,\pm2,\cdots$，$\psi_k(x)$ 有正交性，

$$\int_0^L\psi_k^*(x)\psi_{k_1}(x)\mathrm{d}x=\frac{1}{L}\int_0^L\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_1-k)x}\mathrm{d}x=\delta_{k_1k}\ .$$

将题中的 $\psi(x)$ 看成 $\psi_k(x)$ 的叠加，注意，$\sin^2kx=\dfrac{1}{2}(1-\cos2kx)$，则

$$\psi(x)=\frac{N}{2}(1-\cos2kx+\cos kx)=\frac{N\sqrt{L}}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{L}}-\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}2kx}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2kx}}{2\sqrt{L}}+\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}}{2\sqrt{L}}\right).$$

在 $\psi(x)$ 态，测得 $P=0$ 的概率为 $\left[\dfrac{N\sqrt{L}}{2}\dfrac{1}{\sqrt{C}}\right]^2\to\dfrac{1}{2}$；

测得 $P=2k\hbar$ 的概率为 $\dfrac{1}{4}\left[\dfrac{N\sqrt{L}}{2}\dfrac{1}{\sqrt{C}}\right]^2\to\dfrac{1}{8}$；

测得 $P=-2k\hbar$ 的概率为 $\dfrac{1}{4}\left[\dfrac{N\sqrt{L}}{2}\dfrac{1}{\sqrt{C}}\right]^2\to\dfrac{1}{8}$；

测得 $P=k\hbar$ 的概率为 $\dfrac{1}{4}\left[\dfrac{N\sqrt{L}}{2}\dfrac{1}{\sqrt{C}}\right]^2\to\dfrac{1}{8}$；

测得 $P=-k\hbar$ 的概率为 $\dfrac{1}{4}\left[\dfrac{N\sqrt{L}}{2}\dfrac{1}{\sqrt{C}}\right]^2\to\dfrac{1}{8}$；故 $C=\left(1+\dfrac{1}{4}+\dfrac{1}{4}+\dfrac{1}{4}+\dfrac{1}{4}\right)\left(\dfrac{N\sqrt{L}}{2}\right)^2=2\left(\dfrac{N\sqrt{L}}{2}\right)^2$，所以

$$\langle P\rangle=0\times\frac{1}{2}+2k\hbar\times\frac{1}{8}-2k\hbar\times\frac{1}{8}+k\hbar\times\frac{1}{8}-k\hbar\times\frac{1}{8}=0\ ,\ \text{而}$$

$$\left\langle\frac{p^2}{2\mu}\right\rangle=0\times\frac{1}{2}+\frac{(2k\hbar)^2}{2\mu}\times\frac{1}{8}+\frac{(-2k\hbar)^2}{2\mu}\times\frac{1}{8}+\frac{(k\hbar)^2}{2\mu}\times\frac{1}{8}+\frac{(-k\hbar)^2}{2\mu}\times\frac{1}{8}$$

$$=\frac{(k\hbar)^2}{4\mu}+\frac{(k\hbar)^2}{4\mu}+\frac{(k\hbar)^2}{16\mu}+\frac{(k\hbar)^2}{16\mu}=\frac{5(k\hbar)^2}{8\mu}.$$

答　粒子的动量平均值为 0；动能平均值为 $\dfrac{5(k\hbar)^2}{8\mu}$.

2.24　如果粒子在一维势阱 $V(x)=-g\delta(x)$ 中运动，而处于束缚态，求粒子的动能和势能的平均值.

分析　由题 2.18 解得，粒子在一维势阱 $V(x)=-g\delta(x)$ 中运动的能量 $E=-\dfrac{\mu}{2\hbar^2}g^2$，波函数为 $\psi(x)=\begin{cases}\pm\sqrt{\dfrac{\mu g}{\hbar^2}}\mathrm{e}^{\frac{\mu g x}{\hbar^2}}, & x<0\\ \pm\sqrt{\dfrac{\mu g}{\hbar^2}}\mathrm{e}^{-\frac{\mu g x}{\hbar^2}}, & x>0\end{cases}$.

解　取波函数为“+”的一支，$\psi(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{\mu g}{\hbar^2}}\mathrm{e}^{\frac{\mu g x}{\hbar^2}}, & x<0\\ \sqrt{\dfrac{\mu g}{\hbar^2}}\mathrm{e}^{-\frac{\mu g x}{\hbar^2}}, & x>0\end{cases}$. 势能的平均值为

$$\langle V\rangle=\frac{\mu g}{\hbar^2}\left[\int_{-\infty}^{0^-}-g\delta(x)\mathrm{e}^{\frac{2\mu g x}{\hbar^2}}\mathrm{d}x+\int_{0^-}^{\infty}-g\delta(x)\mathrm{e}^{-\frac{2\mu g x}{\hbar^2}}\mathrm{d}x\right]=0-\frac{\mu g^2}{\hbar^2}=-\frac{\mu g^2}{\hbar^2}.$$

$E=-\dfrac{\mu g^2}{2\hbar^2}=\langle V\rangle+\langle T\rangle$，则 $\langle T\rangle=-\dfrac{\mu g^2}{2\hbar^2}-\langle V\rangle=-\dfrac{\mu g^2}{2\hbar^2}+\dfrac{\mu g^2}{\hbar^2}=\dfrac{\mu g^2}{2\hbar^2}$.

若取波函数为“−”的一支，结果不变.

答　粒子的动能平均值为 $\dfrac{\mu g^2}{2\hbar^2}$，粒子的势能平均值为 $-\dfrac{\mu g^2}{\hbar^2}$.

2.25　一维谐振子处于能量本征态 $\psi_n(x)$，对应的本征值为 $E_n=\left(n+\dfrac{1}{2}\right)\hbar\omega$，分别求出 $\langle x\rangle$、$\langle x^2\rangle$、$\langle p\rangle$、$\langle p^2\rangle$ 及 $\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p)^2\rangle$.

分析　一维谐振子处于能量本征态 $\psi_n(x)$，可以利用本征态函数的递推关系与正交性，分别计算 $\langle x\rangle$、$\langle x^2\rangle$、$\langle p\rangle$、$\langle p^2\rangle$ 及 $\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p)^2\rangle$.

解　一维谐振子 $\hat{H}=\dfrac{\hat{p}^2}{2\mu}+\dfrac{1}{2}\mu\omega^2x^2$，$\hat{H}\psi_n(x)=E_n\psi_n(x)$，$E_n=\left(n+\dfrac{1}{2}\right)\hbar\omega$，由于 $V(x)=\dfrac{1}{2}\mu\omega^2x^2$，对于 $x\to-x$ 的变换是对称的，$\psi_n(x)$ 有确定的宇称，$\psi_n(-x)=(-1)^n\psi_n(x)$.

对于一维束缚态，$\hat{H}$ 的本征函数 $\psi_n(x)$ 是实函数，故

$\langle x\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(x)x\psi_n(x)\mathrm{d}x=0$，式中因为被积函数$\psi_n^2(x)x$是奇函数；

$\langle p\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(x)\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_n(x)\mathrm{d}x=0$，式中因为被积函数$\psi_n(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_n(x)$是奇函数；

$\langle x^2\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n(x)x^2\psi_n(x)\mathrm{d}x$，注意令$x=\sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}\xi$，则$x^2\psi_n(x)=\frac{\hbar}{\mu\omega}\xi^2\psi_n$，

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

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

$$=\frac{\hbar}{\mu\omega}\sqrt{\frac{n}{2}}\left[\sqrt{\frac{n-1}{2}}\psi_{n-2}+\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n+1}\right]+\frac{\hbar}{\mu\omega}\sqrt{\frac{n+1}{2}}\left[\sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_n+\sqrt{\frac{n+2}{2}}\psi_{n+2}\right]$$

因$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n\psi_m\mathrm{d}x=\delta_{nm}$，所以

$$\langle x^2\rangle=\frac{\hbar}{\mu\omega}\frac{n}{2}+\frac{\hbar}{\mu\omega}\frac{n+1}{2}=\frac{\hbar}{\mu\omega}\left(n+\frac{1}{2}\right).$$

$\langle p^2\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n\hat{p}^2\psi_n\mathrm{d}x$，式中$\hat{p}=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}=\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}=-\mathrm{i}\sqrt{\mu\omega\hbar}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}$，$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\psi_n=\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}-\sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}$，

$$\hat{p}^2\psi_n=-\mu\omega\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\psi_n=-\mu\omega\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left[\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}-\sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}\right]$$

$$=-\mu\omega\hbar\left[\sqrt{\frac{n}{2}}\left(\sqrt{\frac{n-1}{2}}\psi_{n-2}-\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_n\right)-\sqrt{\frac{n+1}{2}}\left(\sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_n-\sqrt{\frac{n+2}{2}}\psi_{n+2}\right)\right],$$

$$\langle p^2\rangle=-\mu\omega\hbar\left[-\frac{n}{2}-\frac{n+1}{2}\right]=\mu\omega\hbar\left(n+\frac{1}{2}\right),$$

$$\langle(\Delta x)^2\rangle=\langle x^2\rangle-\langle x\rangle^2=\frac{\hbar}{\mu\omega}\left(n+\frac{1}{2}\right),$$

$$\langle(\Delta p)^2\rangle=\langle p^2\rangle-\langle p\rangle^2=\mu\omega\hbar\left(n+\frac{1}{2}\right),$$

$$\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p)^2\rangle=\hbar^2\left(n+\frac{1}{2}\right)^2.$$

答　$\langle x\rangle=0$，$\langle x^2\rangle=\frac{\hbar}{\mu\omega}\left(n+\frac{1}{2}\right)$，$\langle p\rangle=0$，$\langle p^2\rangle=\mu\omega\hbar\left(n+\frac{1}{2}\right)$，

$$\left\langle (\Delta x)^2 \right\rangle \left\langle (\Delta p)^2 \right\rangle = \hbar^2 \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 .$$

2.26　如果 $t=0$ 时，一维谐振子处于态

$$\psi(x,0) = \sqrt{\frac{1}{2}}\psi_0(x) + \sqrt{\frac{1}{5}}\psi_1(x) + C\psi(x) ,$$

式中 C 为待定常数，求常数 C、测量能量的可能值及相应的概率、能量的平均值、t 时刻的状态 $\psi(x,t)$.

分析　一维谐振子的态应是归一化的，$\langle \psi(0) | \psi(0) \rangle = 1$，而且一维谐振子的本征态是正交归一的，$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{nm}$.

解　由 $\langle \psi(0) | \psi(0) \rangle = \left(\sqrt{\frac{1}{2}} \right)^2 + \left(\sqrt{\frac{1}{5}} \right)^2 + C^2 = 1$，即

$$\frac{1}{2} + \frac{1}{5} + C^2 = 1 , \quad C = \sqrt{\frac{3}{10}} .$$

在 ψ_n 态，测能量 $E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right)\hbar\omega$. 由于 $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2$，$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$，

$$\psi_n(x,t) = \psi_n(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n t} .$$

t 时刻的波函数 $\psi(x,t)$ 可按诸 $\psi_n(x,t)$ 展开，$\psi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \psi_n(x,t)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n t}$，

$$\psi(x,0) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \psi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{2}}\psi_0(x) + \sqrt{\frac{1}{5}}\psi_1(x) + \sqrt{\frac{3}{10}}\psi_2(x) ,$$

故 $C_0 = \sqrt{\frac{1}{2}}$，$C_1 = \sqrt{\frac{1}{5}}$，$C_2 = \sqrt{\frac{3}{10}}$，其他 $C_n = 0$.

t 时刻的波函数 $\psi(x,t)$ 为

$$\psi(x,t) = \sqrt{\frac{1}{2}}\psi_0(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_0 t} + \sqrt{\frac{1}{5}}\psi_1(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_1 t} + \sqrt{\frac{3}{10}}\psi_2(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_2 t} .$$

在 $\psi(x,t)$ 态，可测到

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega ，\text{概率为} \left| \sqrt{\frac{1}{2}} \right|^2 = \frac{1}{2} ;$$

$$E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega ，\text{概率为} \left| \sqrt{\frac{1}{5}} \right|^2 = \frac{1}{5} ;$$

$$E_2=\frac{5}{2}\hbar\omega\text{，概率为}\left|\sqrt{\frac{3}{10}}\right|^2=\frac{3}{10}\text{；}$$

能量的平均值为

$$\langle E\rangle=\frac{1}{2}\times\frac{1}{2}\hbar\omega+\frac{1}{5}\times\frac{3}{2}\hbar\omega+\frac{3}{10}\times\frac{5}{2}\hbar\omega=\frac{13}{10}\hbar\omega\,.$$

答　常数$C=\sqrt{\frac{3}{10}}$，测量能量的可能值$E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega$的概率为$\frac{1}{2}$，$E_1=\frac{3}{2}\hbar\omega$的概率为$\frac{1}{5}$，$E_2=\frac{1}{2}\hbar\omega$的概率为$\frac{3}{10}$，能量的平均值为$\frac{13}{10}\hbar\omega$，$t$时刻的状态

$$\psi(x,t)=\sqrt{\frac{1}{2}}\psi_0(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_0t}+\sqrt{\frac{1}{5}}\psi_1(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_1t}+\sqrt{\frac{3}{10}}\psi_2(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_2t}\,.$$

第三章　量子力学的数学表述

3.1　讨论下列一维的算符是否厄米算符？(1) $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$，(2) i，(3) ln，(4) 开方 $\sqrt{\ }$，(5) 宇称算符 $\hat{p}$，(6) $\hat{x}$，(7) $\hat{p}_x=\dfrac{h}{\mathrm{i}}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$.

分析　一维厄米算符 $\hat{A}$ 满足

$$\int\psi^*(x)\hat{A}\varphi(x)\mathrm{d}x=\int\varphi(x)[\hat{A}\psi(x)]^*\mathrm{d}x\,, \tag{3.1-1}$$

式中 $\varphi(x)$ 和 $\psi(x)$ 是任意的波函数，否则 $\hat{A}$ 不是厄米算符.

解　(1) $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ 不是厄米算符，因为

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\varphi(x)\mathrm{d}x\xrightarrow{\text{分部积分}}\psi^*(x)\varphi(x)\Big|_{-\infty}^{\infty}-\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi^*(x)\mathrm{d}x$$

$$\neq\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(x)\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi(x)\right]^*\mathrm{d}x.$$

(2) i 不是厄米算符，因为

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\mathrm{i}\varphi(x)\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(x)\mathrm{i}\psi^*(x)\mathrm{d}x=-\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(x)[\mathrm{i}\psi(x)]^*\mathrm{d}x\neq\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(x)[\mathrm{i}\psi(x)]^*\mathrm{d}x\,.$$

(3) ln 不是厄米算符，因为

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\ln\varphi(x)\mathrm{d}x\neq\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(x)[\ln\psi(x)]^*\mathrm{d}x\,.$$

(4) $\sqrt{\ }$ 不是厄米算符，因为

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\sqrt{\varphi(x)}\mathrm{d}x\neq\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(x)[\sqrt{\psi(x)}]^*\mathrm{d}x\,.$$

(5) 宇称算符 $\hat{p}$ 是厄米算符，因为

$\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\hat{p}\varphi(x)\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\varphi(-x)\mathrm{d}x$，作 $x\to-x$ 变换，$\hat{p}^*=-\hat{p}$，有

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\hat{p}\varphi(x)\mathrm{d}x=\int_{\infty}^{-\infty}\varphi(x)\psi^*(-x)\mathrm{d}x=\int_{\infty}^{-\infty}\varphi(x)\hat{p}\psi^*(x)\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(x)[\hat{p}\psi(x)]^*\mathrm{d}x\,.$$

(6) $\hat{x}$ 是厄米算符，因为

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\hat{x}\varphi(x)\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)x\varphi(x)\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(x)x\psi^*(x)\mathrm{d}x$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(x)\hat{x}\psi^*(x)\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(x)[\hat{x}\psi(x)]^*\mathrm{d}x.$$

(7) $\hat{p}_x=\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ 是厄米算符，因为

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\varphi(x)\mathrm{d}x\xrightarrow{\text{分部积分}}\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\varphi(x)\psi^*(x)\Big|_{-\infty}^{\infty}-\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(x)\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi^*(x)\mathrm{d}x$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(x)\left[\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi(x)\right]^*\mathrm{d}x.$$

值得注意的是，如果波函数不可归一化，则 $\psi(\pm\infty)\neq 0$，$\hat{p}_x=\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ 不是厄米算符.

答　$\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$、i、ln、开方$\sqrt{\ }$不是厄米算符，宇称算符 $\hat{p}$、$\hat{x}$、$\hat{p}_x=\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ 是厄米算符，但如果波函数不可归一化，则 $\psi(\pm\infty)\neq 0$，$\hat{p}_x=\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ 不是厄米算符.

3.2　讨论宇称算符是否可以代表物理量.

分析　力学量是线性厄米算符. 线性厄米算符使得叠加原理成立，厄米算符确保平均值是实数，而且保证一组完全集合力学量算符的本征值组是实的，且本征函数系是完备的. 于是，任意波函数 ψ 可按一组完全集合共同的本征函数系展开，这使得可以同时测量一组完全集力学量.

解　轨道宇称算符 $\hat{p}$，$\hat{p}\psi(\boldsymbol{x})=\psi(-\boldsymbol{x})$，则

$$\hat{p}[a\psi(\boldsymbol{x})+b\varphi(\boldsymbol{x})]=a\psi(-\boldsymbol{x})+b\varphi(-\boldsymbol{x})=a\hat{p}\psi(\boldsymbol{x})+b\hat{p}\varphi(\boldsymbol{x}),$$

所以 $\hat{p}$ 是线性算符. 在题 3.1(5)中已证明 $\hat{p}$ 是厄米算符，所以线性厄米算符 $\hat{p}$ 符合力学量算符的要求，可以代表物理量. $\hat{p}$ 对波函数的作用结果，表征系统的态在空间反演变换 $\boldsymbol{x}\to-\boldsymbol{x}$ 下的性质.

答　可以代表物理量.

3.3　证明算符关系式：

(1) $[\hat{A}+\hat{B},\hat{C}]=[\hat{A},\hat{C}]+[\hat{B},\hat{C}]$；

(2) $[\hat{A}\hat{B},\hat{C}]=\hat{A}[\hat{B},\hat{C}]+[\hat{A},\hat{C}]\hat{B}$；

(3) $[\hat{A},\hat{B}\hat{C}]=\hat{B}[\hat{A},\hat{C}]+[\hat{A},\hat{B}]\hat{C}$；

分析　利用对易式 $[\hat{A},\hat{B}]=\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}$.

证明　(1) $[\hat{A}+\hat{B},\hat{C}]=(\hat{A}+\hat{B})\hat{C}-\hat{C}(\hat{A}+\hat{B})=\hat{A}\hat{C}-\hat{C}\hat{A}+\hat{B}\hat{C}-\hat{C}\hat{B}=[\hat{A},\hat{C}]+[\hat{B},\hat{C}]$；

(2) $[\hat{A}\hat{B},\hat{C}]=\hat{A}\hat{B}\hat{C}-\hat{C}\hat{A}\hat{B}=\hat{A}\hat{B}\hat{C}-\hat{A}\hat{C}\hat{B}+\hat{A}\hat{C}\hat{B}-\hat{C}\hat{A}\hat{B}=\hat{A}[\hat{B},\hat{C}]+[\hat{A},\hat{C}]\hat{B}$；

(3) $[\hat{A},\hat{B}\hat{C}]=\hat{A}\hat{B}\hat{C}-\hat{B}\hat{C}\hat{A}=\hat{B}\hat{A}\hat{C}-\hat{B}\hat{C}\hat{A}+\hat{A}\hat{B}\hat{C}-\hat{B}\hat{A}\hat{C}=\hat{B}[\hat{A},\hat{C}]+[\hat{A},\hat{B}]\hat{C}$.

证毕.

3.4　证明算符关系式：$[\hat{p}_k,\hat{x}_l]=\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\delta_{kl}$，$[\hat{p}_x,f(x,y)]=\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\partial}{\partial x}f(x,y)$，并求出对易式$[\hat{L}_z,\hat{\mathrm{e}}^x]=?$其中$\hat{L}_z$是$z$方向的角动量算符.

分析　$\hat{p}_x=\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$，$\hat{L}_z=x\hat{p}_y-y\hat{p}_x$.

解　(1) 当 $k\neq l$ 时，$[\hat{p}_k,\hat{x}_l]\psi=\hat{p}_k\hat{x}_l\psi-\hat{x}_l\hat{p}_k\psi=\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\partial}{\partial x_k}(x_l\psi)-x_l\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\partial}{\partial x_k}\psi=x_l\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\partial}{\partial x_k}\psi-x_l\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\partial}{\partial x_k}\psi=0$，即$[\hat{p}_k,\hat{x}_l]=0$.

当 $k=l$ 时，$[\hat{p}_k,\hat{x}_k]\psi=\hat{p}_k\hat{x}_k\psi-\hat{x}_k\hat{p}_k\psi=\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\partial}{\partial x_k}(x_k\psi)-x_k\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\partial}{\partial x_k}\psi=\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\psi+x_k\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\partial}{\partial x_k}\psi-x_k\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\partial}{\partial x_k}\psi=\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\psi$，即$[\hat{p}_k,\hat{x}_l]=\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}$.

所以$[\hat{p}_k,\hat{x}_l]=\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\delta_{kl}$.

(2) $[\hat{p}_x,f(x,y)]\psi=\hat{p}_xf(x,y)]\psi-f(x,y)\hat{p}_x\psi=\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\partial}{\partial x}[f(x,y)\psi]-f(x,y)\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\partial}{\partial x}\psi=\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\left[\dfrac{\partial}{\partial x}f(x,y)\right]\psi$，所以，$[\hat{p}_x,f(x,y)]=\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\left[\dfrac{\partial}{\partial x}f(x,y)\right]$. 证毕.

(3) $[\hat{L}_z,\mathrm{e}^{\hat{x}}]=[x\hat{p}_y-y\hat{p}_x,\mathrm{e}^{\hat{x}}]=[x\hat{p}_y,\mathrm{e}^{\hat{x}}]-[y\hat{p}_x,\mathrm{e}^{\hat{x}}]=x\hat{p}_y\mathrm{e}^{\hat{x}}-\mathrm{e}^{\hat{x}}x\hat{p}_y-y\hat{p}_x\mathrm{e}^{\hat{x}}+\mathrm{e}^{\hat{x}}y\hat{p}_x=-y\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\mathrm{e}^{\hat{x}}$.

答　对易式$[\hat{L}_z,\mathrm{e}^{\hat{x}}]=-y\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\mathrm{e}^x=\mathrm{i}\hbar y\mathrm{e}^x$.

3.5　讨论下列等式是否成立：

(1) $(\hat{A}+\hat{B})^2=\hat{A}^2+2\hat{A}\hat{B}+\hat{B}^2$；

(2) $\mathrm{e}^{\hat{A}}\cdot\mathrm{e}^{\hat{B}}=\mathrm{e}^{\hat{A}+\hat{B}}$.

分析　算符的非对易性，算符 $\hat{A}$ 与算符 $\hat{B}$，一般情况下是非对易的，即 $[\hat{A},\hat{B}]=\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}\neq 0$；如果 $\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}=0$，即 $\hat{A}\hat{B}=\hat{B}\hat{A}$，称为算符 $\hat{A}$ 与算符 $\hat{B}$ 可对易.

解　(1) $(\hat{A}+\hat{B})^2=\hat{A}^2+\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}+\hat{B}^2$，当算符 $\hat{A}$ 与算符 $\hat{B}$ 不可对易时，即 $\hat{A}\hat{B}\neq\hat{B}\hat{A}$，则 $(\hat{A}+\hat{B})^2=\hat{A}^2+2\hat{A}\hat{B}+\hat{B}^2$ 不成立；而当 $[\hat{A},\hat{B}]=0$，即算符 $\hat{A}$ 与算符 $\hat{B}$ 可对易时，$(\hat{A}+\hat{B})^2=\hat{A}^2+2\hat{A}\hat{B}+\hat{B}^2$ 成立.

(2) $\mathrm{e}^{\hat{A}}\cdot\mathrm{e}^{\hat{B}}=\left[1+\hat{A}+\frac{1}{2!}\hat{A}^2+\frac{1}{3!}\hat{A}^3+\cdots\right]\left[1+\hat{B}+\frac{1}{2!}\hat{B}^2+\frac{1}{3!}\hat{B}^3+\cdots\right]$，

等式右边，$\hat{A}$ 总是在 $\hat{B}$ 的左边，而

$$\mathrm{e}^{\hat{A}+\hat{B}}=1+(\hat{A}+\hat{B})+\frac{1}{2!}(\hat{A}+\hat{B})^2+\frac{1}{3!}(\hat{A}+\hat{B})^3+\cdots,$$

式中有 $(\hat{A}+\hat{B})^2=\hat{A}^2+\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}+\hat{B}^2$，在 $\hat{B}\hat{A}$ 项中，$\hat{A}$ 在 $\hat{B}$ 的右边. 所以，$\mathrm{e}^{\hat{A}}\cdot\mathrm{e}^{\hat{B}}\neq\mathrm{e}^{\hat{A}+\hat{B}}$；只有当 $[\hat{A},\hat{B}]=0$，即算符 $\hat{A}$ 与算符 $\hat{B}$ 可对易时，$\mathrm{e}^{\hat{A}}\cdot\mathrm{e}^{\hat{B}}=\mathrm{e}^{\hat{A}+\hat{B}}$ 成立.

3.6　证明：

(1) $\hat{\boldsymbol{L}}=\hat{\boldsymbol{x}}\times\hat{\boldsymbol{p}}$ 是线性厄米算符；

(2) $\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{L}}=\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{L}}$，即 $[\hat{L}_1,\hat{L}_2]=\mathrm{i}\hbar\hat{L}_3$，1, 2, 3 可以轮换；

(3) $[\hat{L}^2,\hat{\boldsymbol{L}}]=0$；

(4) 令 $\hat{L}_{\pm}=\hat{L}_x\pm\mathrm{i}\hat{L}_y$，求 $[\hat{L}_{\pm},\hat{L}_z]=?$

分析　角动量矢量

$$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{p}=\begin{vmatrix}\boldsymbol{i}&\boldsymbol{j}&\boldsymbol{k}\\x_1&x_2&x_3\\p_1&p_2&p_3\end{vmatrix}=\boldsymbol{i}\begin{vmatrix}x_2&x_3\\p_2&p_3\end{vmatrix}-\boldsymbol{j}\begin{vmatrix}x_1&x_3\\p_1&p_3\end{vmatrix}+\boldsymbol{k}\begin{vmatrix}x_1&x_2\\p_1&p_2\end{vmatrix}$$

$$=\boldsymbol{i}(x_2p_3-x_3p_2)-\boldsymbol{j}(x_1p_3-x_3p_1)+\boldsymbol{k}(x_1p_2-x_2p_1)$$

若满足 $\hat{A}^+=\hat{A}$，则称 $\hat{A}$ 是厄米算符. $(\hat{A}\hat{B})^+=\hat{B}^+\hat{A}^+$.

证明　(1) 由 $\hat{\boldsymbol{L}}=\hat{\boldsymbol{x}}\times\hat{\boldsymbol{p}}$，则 $\hat{L}_1=\hat{x}_2\hat{p}_3-\hat{x}_3\hat{p}_2$，1, 2, 3 可以轮换，因为 $\hat{x}_2$、$\hat{x}_3$、$\hat{p}_2$、$\hat{p}_3$ 是线性算符，所以 $\hat{x}_2\hat{p}_3[C_1\psi_1(x)+C_2\psi_2(x)]=\hat{x}_2[C_1\hat{p}_3\psi_1(x)+C_2\hat{p}_3\psi_2(x)]=C_1\hat{x}_2\hat{p}_3\psi_1(x)+C_2\hat{x}_2\hat{p}_3\psi_2(x)$.

所以 $\hat{x}_2\hat{p}_3$ 是线性算符. 同理可以证明 x_3p_2 也是线性算符，所以 $\hat{L}_1=\hat{x}_2\hat{p}_3-\hat{x}_3\hat{p}_2$ 是线性的. 同理可证明，$\hat{L}_2=\hat{x}_3\hat{p}_1-\hat{x}_1\hat{p}_3$ 和 $\hat{L}_3=\hat{x}_1\hat{p}_2-\hat{x}_2\hat{p}_1$ 也是线性算符.

由于 $\hat{p}$ 和 $\hat{x}$ 都是厄米算符，则有 $\hat{p}_i^+=\hat{p}_i$，$\hat{x}_i^+=\hat{x}_i$，$\hat{L}_1=\hat{x}_2\hat{p}_3-\hat{x}_3\hat{p}_2$，则

$\hat{L}_1^+ = \hat{p}_3^+\hat{x}_2^+ - \hat{p}_2^+\hat{x}_3^+ = \hat{p}_3\hat{x}_2 - \hat{p}_2\hat{x}_3 = \hat{x}_2\hat{p}_3 - \hat{x}_3\hat{p}_2 = \hat{L}_1$. 同理，可证明 $\hat{L}_2^+ = \hat{L}_2$， $\hat{L}_3^+ = \hat{L}_3$. 所以， $\hat{\boldsymbol{L}} = \hat{\boldsymbol{x}} \times \hat{\boldsymbol{p}}$ 是线性厄米算符.

证毕.

(2) 要证明 $\hat{\boldsymbol{L}} \times \hat{\boldsymbol{L}} = \mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{L}}$，即要证明 $[\hat{L}_1, \hat{L}_2] = \hat{L}_1\hat{L}_2 - \hat{L}_2\hat{L}_1 = \mathrm{i}\hbar\hat{L}_3$，1, 2, 3 可以轮换.

由于 $\hat{L}_1 = \hat{x}_2\hat{p}_3 - \hat{x}_3\hat{p}_2$， $\hat{L}_2 = \hat{x}_3\hat{p}_1 - \hat{x}_1\hat{p}_3$， $\hat{L}_3 = \hat{x}_1\hat{p}_2 - \hat{x}_2\hat{p}_1$，所以

$$\begin{aligned}[\hat{L}_1, \hat{L}_2] &= [\hat{x}_2\hat{p}_3 - \hat{x}_3\hat{p}_2, \hat{x}_3\hat{p}_1 - \hat{x}_1\hat{p}_3] = [\hat{x}_2\hat{p}_3, \hat{x}_3\hat{p}_1] - [\hat{x}_2\hat{p}_3, \hat{x}_1\hat{p}_3] - \\ &\quad [\hat{x}_3\hat{p}_2, \hat{x}_3\hat{p}_1] + [\hat{x}_3\hat{p}_2, \hat{x}_1\hat{p}_3] \\ &= [\hat{x}_2\hat{p}_3, \hat{x}_3\hat{p}_1] - [\hat{x}_2, \hat{x}_1]\hat{p}_3 - \hat{x}_3[\hat{p}_2, \hat{p}_1] + [\hat{x}_3\hat{p}_2, \hat{x}_1\hat{p}_3] \\ &= [\hat{x}_2\hat{p}_3, \hat{x}_3\hat{p}_1] + [\hat{x}_3\hat{p}_2, \hat{x}_1\hat{p}_3] \\ &= \hat{x}_2[\hat{p}_3, \hat{x}_3]\hat{p}_1 + \hat{x}_1[\hat{x}_3, \hat{p}_3]\hat{p}_2 = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\hat{x}_2\hat{p}_1 - \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\hat{x}_1\hat{p}_2 = \mathrm{i}\hbar(\hat{x}_2\hat{p}_1 - \hat{x}_1\hat{p}_2) = \mathrm{i}\hbar\hat{L}_3\end{aligned}$$

证毕.

(3) 要证明 $[\hat{L}^2, \hat{\boldsymbol{L}}] = 0$，即证明 $[\hat{L}^2, \hat{L}_i] = 0$， 1, 2, 3 可以轮换，以 $i = 3$ 为例，因为

$$\begin{aligned}[\hat{L}^2, \hat{L}_3] &= [\hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + \hat{L}_3^2, \hat{L}_3] = [\hat{L}_1^2, \hat{L}_3] + [\hat{L}_2^2, \hat{L}_3] \\ &= \hat{L}_1[\hat{L}_1, \hat{L}_3] + [\hat{L}_1, \hat{L}_3]\hat{L}_1 + \hat{L}_2[\hat{L}_2, \hat{L}_3] + [\hat{L}_2, \hat{L}_3]\hat{L}_2 \\ &= \hat{L}_1(-\mathrm{i}\hbar\hat{L}_2) + (-\mathrm{i}\hbar\hat{L}_2)\hat{L}_1 + \hat{L}_2(\mathrm{i}\hbar\hat{L}_1) + (\mathrm{i}\hbar\hat{L}_1)\hat{L}_2 = 0\end{aligned}$$

同理也可以证明 $[\hat{L}^2, \hat{L}_1] = 0$ 和 $[\hat{L}^2, \hat{L}_2] = 0$.

证毕.

(4) 令 $\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm \mathrm{i}\hat{L}_y$，先求 $[\hat{L}_+, \hat{L}_z]$，记 $\hat{L}_x = \hat{L}_1$， $\hat{L}_y = \hat{L}_2$， $\hat{L}_z = \hat{L}_3$，则

$[\hat{L}_x + \mathrm{i}\hat{L}_y, \hat{L}_z] = [\hat{L}_1 + \mathrm{i}\hat{L}_2, \hat{L}_3] = [\hat{L}_1, \hat{L}_3] + \mathrm{i}[\hat{L}_2, \hat{L}_3] = -\mathrm{i}\hbar\hat{L}_2 + \mathrm{ii}\hbar\hat{L}_1 = -\hbar[\hat{L}_1 - \mathrm{i}\hat{L}_2] = -\hbar\hat{L}_+$；后求 $[\hat{L}_-, \hat{L}_z]$，$[\hat{L}_x - \mathrm{i}\hat{L}_y, \hat{L}_z] = [\hat{L}_1, \hat{L}_3] - \mathrm{i}[\hat{L}_2, \hat{L}_3] = -\mathrm{i}\hbar\hat{L}_2 - \mathrm{ii}\hbar\hat{L}_1 = \hbar[\hat{L}_1 - \mathrm{i}\hat{L}_2] = \hbar\hat{L}_-$.

答　$[\hat{L}_\pm, \hat{L}_z] = \hbar\hat{L}_\pm$.

3.7　已知算符 $\hat{F}$ 和 $\hat{G}$ 都是线性厄米算符，问下列算符是否是厄米算符？

(1) $\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}$；(2) $\hat{F}\hat{G} + \hat{G}\hat{F}$；(3) $\mathrm{i}(\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F})$.

分析　算符 $\hat{F}$ 和 $\hat{G}$ 都是线性厄米算符，即 $\hat{F}^+ = \hat{F}$， $\hat{G}^+ = \hat{G}$.

解　(1) $(\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F})^+ = \hat{G}^+\hat{F}^+ - \hat{F}^+\hat{G}^+ = \hat{G}\hat{F} - \hat{F}\hat{G} = -(\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}) \neq \hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}$，故 $\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}$ 不是厄米算符.

(2) $(\hat{F}\hat{G}+\hat{G}\hat{F})^{+}=\hat{G}^{+}\hat{F}^{+}+\hat{F}^{+}\hat{G}^{+}=\hat{G}\hat{F}+\hat{F}\hat{G}=\hat{F}\hat{G}+\hat{G}\hat{F}$，故 $\hat{F}\hat{G}+\hat{G}\hat{F}$ 是厄米算符.

(3) $[\mathrm{i}(\hat{F}\hat{G}-\hat{G}\hat{F})]^{+}=(\hat{F}\hat{G}-\hat{G}\hat{F})^{+}\mathrm{i}^{+}=-\mathrm{i}(\hat{F}\hat{G}-\hat{G}\hat{F})^{+}=-\mathrm{i}(\hat{G}\hat{F}-\hat{F}\hat{G})=\mathrm{i}(\hat{F}\hat{G}-\hat{G}\hat{F})$，故 $\mathrm{i}(\hat{F}\hat{G}-\hat{G}\hat{F})$ 是厄米算符.

答　$\hat{F}\hat{G}-\hat{G}\hat{F}$ 不是厄米算符，$\hat{F}\hat{G}+\hat{G}\hat{F}$ 是厄米算符，$\mathrm{i}(\hat{F}\hat{G}-\hat{G}\hat{F})$ 是厄米算符.

3.8　证明厄米算符平方的平均值非负.

分析　设 $\hat{F}$ 是厄米算符，则 $\hat{F}^{+}=\hat{F}$.

证明　$\left\langle\hat{F}^{2}\right\rangle=\int\mathrm{d}^{3}x\psi^{*}\hat{F}\hat{F}\psi=\int\mathrm{d}^{3}x\psi^{*}\hat{F}^{+}(\hat{F}\psi)=\int\mathrm{d}^{3}x(\hat{F}\psi)(\hat{F}\psi)^{*}=\int\mathrm{d}^{3}x|\hat{F}\psi|^{2}>0$.

证毕.

3.9　试写出 Δl_x 和 Δl_y 的不确定关系，在 Y_0^0 态，$\Delta l_x\cdot\Delta l_y=$？这与 $\hat{l}_x$ 和 $\hat{l}_y$ 的不可对易性有矛盾吗？

分析　题 3.6 证明了

$$[\hat{L}_x,\hat{L}_y]=\mathrm{i}\hbar\hat{L}_z. \tag{3.9-1}$$

解　由式(3.9-1)，$\Delta l_x\cdot\Delta l_y\geqslant\frac{1}{2}\left|\left\langle[\hat{L}_x,\hat{L}_y]\right\rangle\right|=\frac{\hbar}{2}\left|\left\langle\hat{L}_z\right\rangle\right|$.

在任意态 ψ，$\left\langle\psi|\hat{L}_z|\psi\right\rangle\neq0$，$\Delta l_x$ 和 Δl_y 都不能为零，但在 Y_0^0 态，$\left\langle\mathrm{Y}_0^0|\hat{L}_z|\mathrm{Y}_0^0\right\rangle=0$，不确定关系退化为

$$\Delta l_x\cdot\Delta l_y\geqslant0. \tag{3.9-2}$$

实际上，在 Y_0^0 态，式(3.9-2)的不确定关系取等于号，这意味着在 Y_0^0 态，$\hat{l}_x$ 和 $\hat{l}_y$ 都可以准确测定，这与 $\hat{l}_x$ 和 $\hat{l}_y$ 的不可对易性没有矛盾. $[\hat{L}_x,\hat{L}_y]=\mathrm{i}\hbar\hat{L}_z\neq0$，表明 $\hat{l}_x$ 和 $\hat{l}_y$ 没有共同的本征函数系，但并不限定 l_x 和 l_y 不可能有一个共同的本征函数. 实际上 Y_0^0 既是 $\hat{L}_z$ 有零本征值的本征函数，也是 $\hat{l}_x$ 和 $\hat{l}_y$ 有零本征值的上函数.

答　Δl_x 和 Δl_y 的不确定关系为 $\Delta l_x\cdot\Delta l_y\geqslant\frac{\hbar}{2}\left|\left\langle\hat{L}_z\right\rangle\right|$. 在 Y_0^0 态，$\Delta l_x\cdot\Delta l_y\geqslant0$，这与 $\hat{l}_x$ 和 $\hat{l}_y$ 的不可对易性没有矛盾.

3.10　用不确定关系 $\Delta x\cdot\Delta p\geqslant\frac{\hbar}{2}$，估计一维谐振子的最低能量.

分析　一维谐振子的能量在经典力学中有

$$E=\frac{p^2}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2. \tag{3.10-1}$$

考虑不确定关系，一维谐振子的能量不能为零，否则动量和位置都为零，违背不确定关系 .

解　对于零点振动，$p\approx\Delta p$，$x\approx\Delta x$，$\Delta p=\dfrac{\hbar}{2}\dfrac{1}{\Delta x}$，

$$\Delta E=\frac{(\Delta p)^2}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega^2(\Delta x)^2=\frac{1}{2\mu}\left(\frac{\hbar}{2}\frac{1}{\Delta x}\right)^2+\frac{1}{2}\mu\omega^2(\Delta x)^2, \tag{3.10-2}$$

Δx 应使 ΔE 最低，$\dfrac{\partial}{\partial\Delta x}\Delta E=\dfrac{1}{2\mu}\left(\dfrac{\hbar}{2}\right)^2\dfrac{-2}{(\Delta x)^3}+\dfrac{1}{2}\mu\omega^2 2\Delta x=0$，即

$$\Delta x=\sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}. \tag{3.10-3}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial(\Delta x)^2}\Delta E=\frac{\partial}{\partial(\Delta x)}\left[\frac{1}{2\mu}\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2\frac{-2}{(\Delta x)^3}+\frac{1}{2}\mu\omega^2 2\Delta x\right]=\frac{1}{2\mu}\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2\frac{6}{(\Delta x)^4}+\mu\omega^2. \tag{3.10-4}$$

将式(3.10-3)代入式(3.10-4)得，$\dfrac{\partial^2}{\partial(\Delta x)^2}\Delta E>0$，故

$$\Delta E_{\min}=\frac{1}{2\mu}\left(\frac{\hbar}{2}\frac{1}{\Delta x}\right)^2+\frac{1}{2}\mu\omega^2(\Delta x)^2=\frac{1}{2\mu}\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2\frac{1}{\dfrac{\hbar}{2\mu\omega}}+\frac{1}{2}\mu\omega^2\frac{\hbar}{2\mu\omega}$$

$$=\frac{2\mu\omega\hbar}{8\mu}+\frac{1}{4}\hbar\omega=\frac{1}{2}\hbar\omega.$$

答　一维谐振子的最低能量为 $\dfrac{1}{2}\hbar\omega$.

3.11　用不确定关系估计氢原子的基态能量.

分析　根据经典力学，氢原子的能量

$$E=\frac{p^2}{2\mu}-\frac{e^2}{r}. \tag{3.11-1}$$

解　电子在有心力场中运动时，由于角动量守恒，在一个平面内. 设其为 x-y 平面，则

$$E=\frac{p_x^2+p_y^2}{2\mu}-\frac{e^2}{\sqrt{x^2+y^2}}, \tag{3.11-2}$$

考虑不确定关系，$\Delta p_x=\dfrac{\hbar}{2\Delta x}$，$\Delta p_y=\dfrac{\hbar}{2\Delta y}$，则

$$\Delta E=\frac{1}{2\mu}\left[\left(\frac{\hbar}{2\Delta x}\right)^2+\left(\frac{\hbar}{2\Delta y}\right)^2\right]-\frac{e^2}{\sqrt{(\Delta x)^2+(\Delta y)^2}}, \tag{3.11-3}$$

设平面轨道为圆轨道，则根据圆对称性，有 $(\Delta x)^2=(\Delta y)^2$，于是

$$\Delta E=\frac{1}{2\mu}\left(\frac{\hbar}{2\Delta x}\right)^2\times 2-\frac{e^2}{\sqrt{2}\Delta x}, \tag{3.11-4}$$

Δx 取值应使 ΔE 最小，则 $\dfrac{\partial}{\partial\lambda}\Delta E=\dfrac{\hbar^2}{4\mu}\dfrac{-2}{(\Delta x)^3}+\dfrac{e^2}{\sqrt{2}(\Delta x)^2}=0$，即

$$\Delta x=\frac{\hbar^2}{\sqrt{2}\mu e^2}=\frac{a_0}{\sqrt{2}}, \tag{3.11-5}$$

将式(3.11-5)代入式(3.11-4)，得最低能量即基态能量为

$$\Delta E=\frac{\hbar^2}{4\mu}\frac{2}{a_0^2}-\frac{e^2}{a_0}=-\frac{e^2}{2a_0}, \tag{3.11-6}$$

这和氢原子的量子力学理论结果一致.

答　氢原子的基态能量为 $-\dfrac{e^2}{2a_0}$，和氢原子的量子力学理论结果一致.

3.12　一维算符 $\hat{p}+\lambda\hat{x}$ 是否是厄米算符？其中 λ 是实常数，求算符 $\hat{p}+\lambda\hat{x}$ 的本征值，在 $\hat{p}+\lambda\hat{x}$ 的本征态，即 $\hat{p}+\lambda\hat{x}$ 有确定值与不确定关系有无矛盾？

分析　已知 $\hat{p}^+=\hat{p}$，$\hat{x}^+=\hat{x}$，$\lambda^*=\lambda$，则 $(\hat{p}+\lambda\hat{x})^+=\hat{p}^++\lambda\hat{x}^+=\hat{p}+\lambda\hat{x}$，故 $\hat{p}+\lambda\hat{x}$ 是厄米算符.

解　设 $(\hat{p}+\lambda\hat{x})\psi_a(x)=a\psi_a(x)$，$\hat{p}=\dfrac{\hbar}{i}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$，即有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_a(x)=\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(a-\lambda x)\psi_a(x), \tag{3.12-1}$$

解得

$$\psi_a(x)=C\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(ax-\frac{\lambda}{2}x^2\right)}, \tag{3.12-2}$$

式中 a 连续可变，常数 C 由连续谱问题的规格化来定，

$$\int\psi_a^*(x)\psi_{a_1}(x)=\delta(a-a_1)=C^2\int\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(a_1-a)}\mathrm{d}x=C^2 2\pi\delta\left(\frac{a_1-a}{\hbar}\right)=C^2 2\pi\hbar\delta(a_1-a).$$

所以，$C=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$.

在 $\hat{p}+\lambda\hat{x}$ 的本征态，

$$\psi_a(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(ax-\frac{\lambda}{2}x^2\right)}. \tag{3.12-3}$$

能准确测量 $p+\lambda x$ 的结果为 a，但不能测准 p 和 x，因为 $\psi_a(x)$ 可按 $\hat{p}$ 的本征态

$$\psi_{p_1}(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_1x}$$

展开，也可以按 $\hat{x}$ 的本征态 $\delta(x-x_0)$（x_0 为本征值)展开，

$$\psi_a(x)=\int\Phi(p_1)\psi(p_1)\mathrm{d}p_1\ , \tag{3.12-4}$$

式中，$\Phi(p_1)=\int\psi_{p_1}^{*}\psi_a(x)\mathrm{d}x$，故

$$\psi_a(x)=\int C(x_0)\delta(x-x_0)\mathrm{d}x_0\ , \tag{3.12-5}$$

式中，$C(x_0)=\int\delta(x-x_0)\psi_a(x)\mathrm{d}x$.

在 $\psi_a(x)$ 态，测动量为 p_1 的概率密度为 $|\Phi(p_1)|^2$；在 $\psi_a(x)$ 态，测位置为 x_0 的概率密度为 $|C(x_0)|^2$，所以在 $\psi_a(x)$ 态不能测准 p_1 和 x_0，即 $\hat{p}+\lambda\hat{x}$ 有确定值 a 与不确定关系没有矛盾. 在 $\psi_a(x)$ 态同样存在测 p_1 和 x_0 的不确定关系.

答　一维算符 $\hat{p}+\lambda\hat{x}$ 是厄米算符，算符 $\hat{p}+\lambda\hat{x}$ 的本征值为 a，$\hat{p}+\lambda\hat{x}$ 有确定值与不确定关系没有矛盾.

3.13　求轨道宇称算符 $\hat{P}$ 的本征值和本征函数，证明轨道宇称算符 $\hat{P}$ 和动量算符 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 是反对易的，即 $\hat{P}\hat{\boldsymbol{p}}+\hat{\boldsymbol{p}}\hat{P}=0$，当状态为动量算符的本征态时，宇称有确定值吗?

分析　轨道宇称算符 $\hat{P}$ 作用后，实现空间反演，即 $\boldsymbol{x}\to-\boldsymbol{x}$.

解　已知

$$\hat{P}\psi(\boldsymbol{x})=\psi(-\boldsymbol{x}). \tag{3.13-1}$$

设 $\hat{P}$ 的本征函数为 $\psi_\lambda(\boldsymbol{x})$，即有

$$\hat{P}\psi_\lambda(\boldsymbol{x})=\lambda\psi_\lambda(\boldsymbol{x})\ , \tag{3.13-2}$$

于是

$$\psi_\lambda(-\boldsymbol{x})=\lambda\psi_\lambda(\boldsymbol{x}). \tag{3.13-3}$$

要确定 λ 的值，将 $\hat{P}$ 作用到式(3.13-3)的两边，得

$$\hat{P}\psi_\lambda(-\boldsymbol{x})=\lambda\hat{P}\psi_\lambda(\boldsymbol{x})=\lambda^2\psi_\lambda(\boldsymbol{x})\ , \tag{3.13-4}$$

即 $\psi_\lambda(\boldsymbol{x})=\lambda^2\psi_\lambda(\boldsymbol{x})$，$\lambda^2=1$，$\lambda=\pm1$，代入式(3.13-2)，$\hat{P}\psi_\pm(\boldsymbol{x})=\pm\psi_\pm(\boldsymbol{x})$，即

$$\psi_\pm(-\boldsymbol{x})=\pm\psi_\pm(\boldsymbol{x}).$$

当 $\lambda=1$ 时，$\psi_+(-\boldsymbol{x})=\psi_+(\boldsymbol{x})$ 为偶函数；

当 $\lambda=-1$ 时，$\psi_-(-\boldsymbol{x})=-\psi_-(\boldsymbol{x})$ 为奇函数.

下面证明 $\hat{P}\hat{\boldsymbol{p}}+\hat{\boldsymbol{p}}\hat{P}=0$.

$\hat{P}\hat{p}\psi(\boldsymbol{x})=\hat{P}\left[\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla_x\psi(\boldsymbol{x})\right]=\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla_{-x}\psi(-\boldsymbol{x})=-\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla_x\psi(\boldsymbol{x})=-\hat{\boldsymbol{p}}\hat{P}\psi(\boldsymbol{x})$，故 $(\hat{P}\hat{\boldsymbol{p}}+\hat{\boldsymbol{p}}\hat{P})\psi(\boldsymbol{x})=0$，由于 $\psi(\boldsymbol{x})$ 是任意的，所以 $\hat{P}\hat{\boldsymbol{p}}+\hat{\boldsymbol{p}}\hat{P}=0$.

动量算符 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 的本征值函数满足

$$\hat{\boldsymbol{p}}\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{p}\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{x}),\tag{3.13-5}$$

解得

$$\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{x})=\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}=\left(\cos\frac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}{\hbar}+\mathrm{i}\sin\frac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}{\hbar}\right),\tag{3.13-6}$$

当空间反演时，$\boldsymbol{x}\to-\boldsymbol{x}$，

$$\psi_{\boldsymbol{p}}(-\boldsymbol{x})=\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}=\left(\cos\frac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}{\hbar}-\mathrm{i}\sin\frac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}{\hbar}\right)\neq\pm\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{x}),\tag{3.13-7}$$

所以，对于动量的本征态，没有确定的宇称.

答　轨道宇称算符 $\hat{P}$ 的本征值为 $\lambda=\pm1$，本征函数为 $\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{x})=\left(\cos\dfrac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}{\hbar}+\mathrm{i}\sin\dfrac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}{\hbar}\right)$，对于动量的本征态，没有确定的宇称.

3.14　求宇称算符 $\hat{P}$ 和轨道角动量算符 $\hat{\boldsymbol{L}}$ 的对易关系，在角动量的本征态中，宇称有确定的值吗？

分析　宇称算符 $\hat{P}$ 和轨道角动量算符 $\hat{\boldsymbol{L}}$ 的对易关系，即 $[\hat{P},\hat{\boldsymbol{L}}]=0$.

解　先求宇称算符 $\hat{P}$ 和轨道角动量算符 $\hat{\boldsymbol{L}}$ 的 $[\hat{P},\hat{\boldsymbol{L}}]$ 作用于波函数 $\psi(\boldsymbol{x})$

$$\begin{aligned}[\hat{P},\hat{\boldsymbol{L}}]\psi(\boldsymbol{x})&=[\hat{P},\hat{\boldsymbol{x}}\times\hat{\boldsymbol{p}}]\psi(\boldsymbol{x})=\hat{P}\hat{\boldsymbol{x}}\times\hat{\boldsymbol{p}}]\psi(\boldsymbol{x})-\hat{\boldsymbol{x}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\hat{P}\psi(\boldsymbol{x})\\&=\hat{P}\left[\hat{\boldsymbol{x}}\times\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla_x\psi(\boldsymbol{x})\right]-\hat{\boldsymbol{x}}\times\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla_{-x}\psi(-\boldsymbol{x})=0.\end{aligned}$$

即 $[\hat{P},\hat{\boldsymbol{L}}]=0$.

设 $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ 和 $\hat{L}_3$ 共同的本征态为 Y_l^m，$\hat{\boldsymbol{L}}^2\mathrm{Y}_l^m(\theta,\varphi)=l(l+1)\hbar^2\mathrm{Y}_l^m(\theta,\varphi)$，$\hat{L}_3\mathrm{Y}_l^m(\theta,\varphi)=m\hbar\mathrm{Y}_l^m(\theta,\varphi)$，

$$Y_l^m(\theta,\varphi)=\left[\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}\right]P_l^{|m|}(\cos\theta)e^{im\varphi}\ ,\quad l=0,1,2,\cdots,\quad m=0,\pm1,\pm2,\cdots,\pm l\ .$$

空间反演 $\boldsymbol{x}\to-\boldsymbol{x}$ 时，$r\to r$，$\theta=\pi-\theta$，即 $\cos\theta\to\cos(\pi-\theta)=-\cos\theta$，$\varphi\to\pi+\varphi$，

$$e^{im\varphi}\to e^{im\pi}e^{im\varphi}=(-1)^m e^{im\varphi}\ ,\quad Y_l^m(\theta,\varphi)\to Y_l^m(\pi-\theta,\pi+\varphi)=(-1)^l Y_l^m(\theta,\varphi)\ .$$

在 $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ 和 $\hat{L}_3$ 共同的本征态 $Y_l^m(\theta,\varphi)$，宇称的确定的值 $(-1)^l$.

答　角动量的本征态中，宇称有确定的值 $(-1)^l$.

3.15　证明：在属于离散谱的定态中，动量的平均值 $\langle\boldsymbol{p}\rangle$ 必定为零.

分析　动量 $\boldsymbol{p}=\mu\boldsymbol{v}=\mu\dfrac{d\boldsymbol{x}}{dt}$，则 $\hat{\boldsymbol{p}}=\mu\hat{\boldsymbol{v}}=\mu\dfrac{d\hat{\boldsymbol{x}}}{dt}$.

证明　已知 $\hat{H}|\psi_n\rangle=E_n|\psi_n\rangle$，$E_n$ 离散取值 $\langle\psi_n|\hat{H}=\langle<\psi_n|E_n$，

$$\langle\psi_n|\hat{\boldsymbol{p}}|\psi_n\rangle=\left\langle\psi_n\left|\mu\frac{d\hat{\boldsymbol{x}}}{dt}\right|\psi_n\right\rangle=\left\langle\psi_n\left|\frac{1}{i\hbar}[\hat{\boldsymbol{x}},\hat{H}]\right|\psi_n\right\rangle=\frac{\mu}{i\hbar}\left\{\langle\psi_n|\hat{\boldsymbol{x}}\hat{H}-\hat{H}\hat{\boldsymbol{x}}|\psi_n\rangle\right\}$$

$$=\frac{\mu}{i\hbar}\left\{\langle\psi_n|\hat{\boldsymbol{x}}E_n-E_n\hat{\boldsymbol{x}}|\psi_n\rangle\right\}=\frac{\mu}{i\hbar}\left\{\langle\psi_n|\hat{\boldsymbol{x}}|\psi_n\rangle-\langle\psi_n|\hat{\boldsymbol{x}}|\psi_n\rangle\right\}$$

对于有离散谱的束缚定态 $|\psi_n\rangle$，$\langle\psi_n|\hat{\boldsymbol{x}}|\psi_n\rangle$ 有限，故 $\langle\psi_n|\hat{\boldsymbol{p}}|\psi_n\rangle=0$.

证毕.

3.16　设算符 $\hat{K}=\hat{L}\hat{M}$，且 $\hat{L}\hat{M}-\hat{M}\hat{L}=1$，证明：如果 ψ 是 $\hat{K}$ 的本征函数，对应的本征值为 K，那么 $\psi_1=\hat{L}\psi$ 也是 $\hat{K}$ 的本征函数，对应的本征值为 $K-1$；$\psi_2=\hat{M}\psi$ 也是 $\hat{K}$ 的本征函数，对应的本征值为 $K+1$.

分析　已知 $\hat{K}=\hat{L}\hat{M}$，且 $\hat{L}\hat{M}-\hat{M}\hat{L}=1$，$\hat{K}\psi=K\psi$.

证明　设 $\psi_1=\hat{L}\psi$，$\psi_2=\hat{M}\psi$，则有

$$\hat{K}\psi_1=\hat{K}\hat{L}\psi=\hat{L}\hat{M}\hat{L}\psi=\hat{L}(\hat{L}\hat{M}-1)\psi=\hat{L}(\hat{K}-1)\psi=(K-1)\hat{L}\psi=(K-1)\psi_1\ ,$$

即 $\psi_1=\hat{L}\psi$ 也是 $\hat{K}$ 的本征函数，相应的本征值为 $K-1$；

$$\hat{K}\psi_2=\hat{K}\hat{M}\psi=\hat{L}\hat{M}\hat{M}\psi=(\hat{M}\hat{L}+1)\hat{M}\psi=\hat{M}\hat{L}\hat{M}\psi+\hat{M}\psi$$
$$=\hat{M}\hat{K}\psi+\hat{M}\psi=(K+1)\hat{M}\psi=(K+1)\psi_2,$$

即 $\psi_2=\hat{M}\psi$ 也是 $\hat{K}$ 的本征函数，相应的本征值为 $K+1$.

证毕.

3.17　在什么条件之下，带电量为 e 的粒子，在磁场中的哈密顿量 $\hat{H}=$

$\frac{1}{2\mu}\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+e\varphi$ 可以化成 $\hat{H}=\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2\mu}-\frac{e}{\mu c}\boldsymbol{A}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\frac{e^2}{2\mu c^2}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{A}+e\varphi$？

分析　$\hat{\boldsymbol{p}}=\hat{p}_1\boldsymbol{i}+\hat{p}_2\boldsymbol{j}+\hat{p}_3\boldsymbol{k}$，$\hat{p}_1=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x_1}$，$\hat{p}_2=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x_2}$，$\hat{p}_3=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x_3}$，$\boldsymbol{A}=A_1\boldsymbol{i}+A_2\boldsymbol{j}+A_3\boldsymbol{k}$，故

$\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{A}=\hat{p}_1A_1+\hat{p}_2A_2+\hat{p}_3A_3$，$\boldsymbol{A}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}=A_1\hat{p}_1+A_2\hat{p}_2+A_3\hat{p}_3$，$\hat{p}_1A_1-A_1\hat{p}_1=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x_1}A_1$，故

$$\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla\cdot\boldsymbol{A}.$$

解

$$\hat{H}=\frac{1}{2\mu}\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\cdot\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)+e\varphi=\frac{1}{2\mu}\left[\hat{\boldsymbol{p}}^2-\frac{e}{c}\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{A}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\frac{e^2}{c^2}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{A}\right]+e\varphi$$

$$=\frac{1}{2\mu}\hat{\boldsymbol{p}}^2-\frac{1}{2\mu c}(\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})+\frac{e^2}{2\mu c^2}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{A}+e\varphi,$$

式中，$\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{A}=\hat{p}_1A_1+\hat{p}_2A_2+\hat{p}_3A_3$，$\hat{p}_jA_j-A_j\hat{p}_j=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial A_j}{\partial x_j}$，$\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla\cdot\boldsymbol{A}$，

$$\hat{H}=\frac{1}{2\mu}\hat{\boldsymbol{p}}^2-\frac{1}{2\mu c}\left(2\boldsymbol{A}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla\cdot\boldsymbol{A}\right)+\frac{e^2}{2\mu c^2}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{A}+e\varphi. \tag{3.17-1}$$

当 $\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0$ 时，式(3.17-1)写成

$$\hat{H}=\frac{1}{2\mu}\hat{\boldsymbol{p}}^2-\frac{1}{\mu c}\boldsymbol{A}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\frac{e^2}{2\mu c^2}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{A}+e\varphi.$$

答　在 $\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0$ 条件下，带电量为 e 的粒子，在磁场中的哈密顿量 $\hat{H}=\frac{1}{2\mu}\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+e\varphi$ 可以化成 $\hat{H}=\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2\mu}-\frac{e}{\mu c}\boldsymbol{A}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\frac{e^2}{2\mu c^2}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{A}+e\varphi$.

3.18　求对易式 $[\hat{p}_x,\mathrm{e}^{\mathrm{i}cx}]$，证明：如果 p_0 是算符 $\hat{p}_x$ 的本征值，则 $p_0+c\hbar$ 也是 $\hat{p}_x$ 的本征值，其中 c 是实常数.

分析　$[\hat{p}_x,\mathrm{e}^{\mathrm{i}cx}]=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\mathrm{e}^{\mathrm{i}cx}=c\hbar\mathrm{e}^{\mathrm{i}cx}$.

证明　设 $\hat{p}_x\psi_{p_0}(x)=p_0\psi_{p_0}(x)$，则 $\psi_{p_0}(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_0x}$，由于 $\hat{p}_x\mathrm{e}^{\mathrm{i}cx}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}cx}\hat{p}_x=c\hbar\mathrm{e}^{\mathrm{i}cx}$，得到

$$\hat{p}_x\mathrm{e}^{\mathrm{i}cx}\psi_{p_0}(x)-\mathrm{e}^{\mathrm{i}cx}\hat{p}_x\psi_{p_0}(x)=c\hbar\mathrm{e}^{\mathrm{i}cx}\psi_{p_0}(x),$$

即

$$\hat{p}_x \frac{\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p_0+c\hbar)x}}{\sqrt{2\pi\hbar}} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}cx} p_0 \psi_{p_0}(x) + \frac{c\hbar \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p_0+c\hbar)x}}{\sqrt{2\pi\hbar}} = (p_0 + c\hbar) \frac{\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p_0+c\hbar)x}}{\sqrt{2\pi\hbar}},$$

所以 $p_0 + c\hbar$ 也是 $\hat{p}_x$ 的本征值，相应的本征函数为

$$\psi_{p_0+c\hbar}(x) = \frac{\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p_0+c\hbar)x}}{\sqrt{2\pi\hbar}}.$$

证毕.

3.19　设 $\hat{A}$ 是运动积分，ψ 非定态，试问 $\langle \hat{A} \rangle$ 是否随时间改变？又如 $\hat{A}$ 非运动积分，ψ 为定态，试问 $\langle \hat{A} \rangle$ 是否随时间改变？

分析　若 $\hat{A}$ 是运动积分，则 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{A} = \frac{\partial}{\partial t}\hat{A} + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{A}, \hat{H}] = 0$，而 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \hat{A} \rangle = \left\langle \frac{\partial}{\partial t}\hat{A} \right\rangle$.

当 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{A} = 0$ 时，不管 $|\psi\rangle$ 如何，总有 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \hat{A} \rangle = 0$，即使 $|\psi\rangle$ 为非定态，$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \hat{A} \rangle$ 也为零，即 $\langle \hat{A} \rangle$ 不随时间 t 改变.

解　若 $\hat{A}$ 为非运动积分，则 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{A} = \frac{\partial}{\partial t}\hat{A} + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{A}, \hat{H}] \neq 0$，若 $\hat{A}$ 不含 t，$\frac{\partial}{\partial t}\hat{A} = 0$，则 $[\hat{A}, \hat{H}] \neq 0$.

若 $|\psi\rangle$ 为定态，则 $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$，$\langle\psi|\hat{H} = \langle\psi|E$，则

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\psi|\hat{A}\hat{H} - \hat{H}\hat{A}|\psi\rangle = \frac{E}{\mathrm{i}\hbar}\left[\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle - \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle\right].$$

如果 $|\psi\rangle$ 相应的 E 属于离散谱，则 $\psi(\pm\infty) = 0$，$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ 有限，$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = 0$，$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ 不随时间 t 变化. 其实这时

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \int \mathrm{d}^3x \left[\psi(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}\right]^* \hat{A}\left[\psi(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}\right] = \int \mathrm{d}^3x \psi^*(\boldsymbol{x})\hat{A}\psi(\boldsymbol{x}),$$

不含时，若 $\frac{\partial}{\partial t}\hat{A} \neq 0$，即使 $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$，而 $|\psi\rangle$ 为定态，但

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \left\langle\psi\left|\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right|\psi\right\rangle \neq 0,$$

则 $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ 随时间 t 变化，其实 $\frac{\partial}{\partial t}\hat{A} = 0$，$\hat{A}$ 是 t 的函数，即使 $|\psi(\boldsymbol{x},t)|^2 = |\psi(\boldsymbol{x})|^2$ 不随 t 变，由于 $\hat{A}(t)$，$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ 仍随 t 变.

答　ψ 为非定态，则 $\langle\hat{A}\rangle$ 不随时间 t 改变；ψ 为定态，则 $<\hat{A}>$ 随时间 t 改变.

3.20　证明一维束定态的概率流密度为零.

分析　连续性方程为

$$\frac{\partial D}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0\,, \tag{3.20-1}$$

其中，$P=\psi^*(\boldsymbol{x},t)\psi(\boldsymbol{x},t)$ 为概率密度，而概率流密度为

$$\boldsymbol{j}=\frac{\hbar}{2\mu_i}(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)\,, \tag{3.20-2}$$

一维情形，波函数为 $\psi(x,t)$，连续性方程为

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}=-\frac{\partial}{\partial x}j(x)\,. \tag{3.20-3}$$

证明　对于一维束缚定态，$P=\left[\psi(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}\right]^*\left[\psi(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}\right]=|\psi(x)|^2$ 与 t 无关，$\frac{\partial\rho}{\partial t}=0$，所以 $\frac{\partial j(x)}{\partial x}=0$，$j(x)=C$ 为常数.

对于一维束缚态，$\psi(x)\xrightarrow{x\to\pm\infty}0$，则 $j(x)=\frac{\hbar}{2\mu_i}\left[\psi^*(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi(x)-\psi(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi^*(x)\right]$.

当 $x\to\pm\infty$，$j(\pm\infty)=0$，所以 $j(x)=0$.

证毕.

3.21　求 $\psi_1=\frac{1}{r}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}$ 和 $\psi_2=\frac{1}{r}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}$ 的概率流密度.

分析　概率流密度为

$$\boldsymbol{j}=\frac{\hbar}{2\mu_i}[\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*]\,, \tag{3.21-1}$$

由于波函数只与径向 r 有关，则有

$$j_r=\frac{\hbar}{2\mu_i}[\psi^*\nabla_r\psi-\psi\nabla_r\psi^*]\,, \tag{3.21-2}$$

式中 ∇ 在球坐标中的径向分量为 $\nabla_r=\frac{\partial}{\partial r}$，则

$$j_r=\frac{\hbar}{2\mu_i}[\psi^*\frac{\partial}{\partial r}\psi-\psi\frac{\partial}{\partial r}\psi^*]\,. \tag{3.21-3}$$

证明　对于ψ_1，

$$j_r^{(1)}=\frac{\hbar}{2\mu_i}\left[\psi_1^*(r)\frac{\partial}{\partial r}\psi_1(r)-\psi_1(r)\frac{\partial}{\partial r}\psi_1^*(r)\right]$$

$$=\frac{\hbar}{2\mu_i}\left[\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{r}\left(\frac{\mathrm{i}k\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}-\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r^2}\right)-\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}\left(-\frac{\mathrm{i}k\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{r}-\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{r^2}\right)\right]$$

$$=\frac{\hbar}{2\mu_i}\left[\frac{\mathrm{i}k}{r^2}-\frac{1}{r^3}+\frac{\mathrm{i}k}{r^2}+\frac{1}{r^3}\right]=\frac{\hbar k}{\mu r^2}=\frac{\hbar k}{\mu}\left|\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}\right|^2=\frac{\hbar k}{\mu}|\psi_1(r)|^2$$

$$j_r^{(2)}=\frac{\hbar}{2\mu_i}\left[\psi_2^*(r)\frac{\partial}{\partial r}\psi_2(r)-\psi_2(r)\frac{\partial}{\partial r}\psi_2^*(r)\right]$$

$$=\frac{\hbar}{2\mu_i}\left[\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}\left(\frac{-\mathrm{i}k\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}-\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{r^2}\right)-\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{r}\left(-\frac{\mathrm{i}k\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}-\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r^2}\right)\right]$$

$$=\frac{\hbar}{2\mu_i}\left[\frac{-\mathrm{i}k}{r^2}-\frac{1}{r^3}-\frac{\mathrm{i}k}{r^2}+\frac{1}{r^3}\right]=\frac{\hbar k}{\mu r^2}\frac{-2\mathrm{i}k}{r^2}=-\frac{\hbar k}{\mu r^2}=-\frac{\hbar k}{\mu}\left|\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}\right|^2=-\frac{\hbar k}{\mu}|\psi_1(r)|^2$$

可见对于ψ_1和ψ_2，概率流密度都等于概率密度乘以速度.

证毕.

3.22　设$\hat{H}=\frac{1}{2\mu}\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2-e\varphi$，求算符$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{\boldsymbol{p}}$.

分析　由海森伯方程$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{A}=\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{A},\hat{H}]$，$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{A}\rangle=\left\langle\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{A}\right\rangle$.

解　对于$\hat{\boldsymbol{p}}$，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{\boldsymbol{p}}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{\boldsymbol{p}},\hat{H}],$$

式中，

$$[\hat{\boldsymbol{p}},\hat{H}]=\left[\hat{\boldsymbol{p}},\frac{e}{2\mu c}(\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})+\frac{e^2}{2\mu c^2}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{A}-e\varphi\right]$$

$$=\frac{e}{2\mu c}\{\hat{\boldsymbol{p}}\cdot[\hat{\boldsymbol{p}},\boldsymbol{A}]+[\hat{\boldsymbol{p}},\boldsymbol{A}]\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\}+\frac{e^2}{2\mu c^2}[\hat{\boldsymbol{p}},\boldsymbol{A}^2]-e[\hat{\boldsymbol{p}},\varphi].$$

$$[\hat{\boldsymbol{p}},\boldsymbol{A}]=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left[\frac{\partial}{\partial x_1}\boldsymbol{e}_1+\frac{\partial}{\partial x_2}\boldsymbol{e}_2+\frac{\partial}{\partial x_3}\boldsymbol{e}_3,\boldsymbol{A}\right]=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial x_1}\boldsymbol{e}_1+\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial x_2}\boldsymbol{e}_2+\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial x_3}\boldsymbol{e}_3\right)=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla\boldsymbol{A}.$$

故$[\hat{\boldsymbol{p}},\boldsymbol{A}^2]=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla\boldsymbol{A}^2$.　$[\hat{\boldsymbol{p}},\varphi]=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla\varphi$.

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{\boldsymbol{p}}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\frac{e}{2\mu c}\frac{\hbar}{\mathrm{i}}(\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\nabla\boldsymbol{A}+\nabla\boldsymbol{A}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})+\frac{e^2}{2\mu c^2}\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla\boldsymbol{A}^2\right]-e\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla\varphi.$$

答　算符 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{\boldsymbol{p}}=\dfrac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\dfrac{e}{2\mu c}\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}(\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\nabla\boldsymbol{A}+\nabla\boldsymbol{A}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})+\dfrac{e^2}{2\mu c^2}\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla\boldsymbol{A}^2\right]-e\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla\varphi$.

3.23　在一维无限深势阱 $V(x)=\begin{cases}0, & |x|\leqslant\dfrac{a}{2}\\ \infty, & |x|>\dfrac{a}{2}\end{cases}$ 中运动的粒子，如果状态为 $\psi_1^{(0)}(x)=\dfrac{4}{\sqrt{a}}\sin\dfrac{\pi x}{a}\cos^2\dfrac{\pi x}{a}$，求粒子能量的可能测量值及相应的概率. 如果状态为 $\psi_2^{(0)}(x)=\dfrac{4}{\sqrt{a}}\sin^2\dfrac{\pi x}{a}\cos\dfrac{\pi x}{a}$，情况如何?

分析　在一维无限深势阱 $V(x)$ 中运动的粒子，其相应哈密顿 $\hat{H}=\hat{T}+V(x)$ 的本征值

$$E_n=\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2,$$

相应的本征函数为

$$\psi_n(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi}{a}\left(x+\dfrac{a}{2}\right), & -\dfrac{a}{2}\leqslant x\leqslant\dfrac{a}{2}\\ 0, & x<-\dfrac{a}{2},x>\dfrac{a}{2}\end{cases},\quad n=1,2,\cdots.$$

解　由 $\hat{H}=T+V(x)$，式中

$$V(x)=\begin{cases}0, & -\dfrac{a}{2}\leqslant x\leqslant\dfrac{a}{2}\\ \infty, & x<-\dfrac{a}{2},x>\dfrac{a}{2}\end{cases}$$

的本征函数

$$V(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi x}{a}, & -\dfrac{a}{2}\leqslant x\leqslant\dfrac{a}{2}\\ 0, & x<-\dfrac{a}{2},x>\dfrac{a}{2}\end{cases}$$

作 $x_1=x-\left(-\dfrac{a}{2}\right)=x+\dfrac{a}{2}$ 的变换就行，由于集合 $\{\psi_n(x)\}$ 是完备的，则

$$\psi_1^{(0)}(x)=\sum_{n=1}^{\infty}C_n\psi_n(x)\,,$$

式中

$$C_n=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*(x)\psi_1^{(0)}(x)\mathrm{d}x=\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}\left(x+\frac{a}{2}\right)\frac{4}{\sqrt{a}}\sin\frac{\pi x}{a}\cos^2\frac{\pi x}{a}\mathrm{d}x$$

$$=\frac{4\sqrt{2}}{a}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}\sin\frac{n\pi}{a}\left(x+\frac{a}{2}\right)\sin\frac{\pi x}{a}\cos^2\frac{\pi x}{a}\mathrm{d}x$$

式中因子 $\sin\dfrac{n\pi}{a}\left(x+\dfrac{a}{2}\right)=\sin\dfrac{n\pi}{a}x\cos\dfrac{n\pi}{2}+\cos\dfrac{n\pi}{a}x\sin\dfrac{n\pi}{2}$，

当 $n=2k+1$ 为奇数，$\cos\dfrac{n\pi}{2}=0$，$k=0,1,\cdots$

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

$$=\cos\frac{(2k+1)\pi}{a}x\left[\sin k\pi\cos\frac{\pi}{2}+\cos k\pi\sin\frac{\pi}{2}\right]$$

$$=(-1)^k\cos\frac{(2k+1)\pi}{a}x$$

$C_{2k+1}=\dfrac{4\sqrt{2}(-1)^k}{a}\displaystyle\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}\mathrm{d}x\cos\frac{(2k+1)\pi}{a}x\sin\frac{\pi x}{a}\cos^2\frac{\pi x}{a}=0$，$k=0,1,\cdots$，因为被积函数是奇函数，故在对称区间内的积分值为零.

当 $n=2k$ 为偶数，$\sin\dfrac{n\pi}{2}=0$，$k=0,1,\cdots$

$$\sin\frac{n\pi}{a}\left(x+\frac{a}{2}\right)=\sin\frac{2k\pi}{a}x\cos\frac{2k\pi}{2}=(-1)^k\sin\frac{2k\pi}{a}x.$$

$$C_{2k}=\frac{4\sqrt{2}(-1)^k}{a}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}\mathrm{d}x\sin\frac{2k\pi}{a}x\sin\frac{\pi x}{a}\cos^2\frac{\pi x}{a}\,,\quad k=0,1,\cdots,$$

利用三角学中积化和差公式

$$\sin\alpha\cos\beta=\frac{1}{2}[\sin(\alpha+\beta)+\sin(\alpha-\beta)]\,,$$

$$\sin\frac{2k\pi}{a}x\cos\frac{\pi}{a}x=\frac{1}{2}\left[\sin\frac{(2k+1)\pi}{a}x+\sin\frac{(2k-1)\pi}{a}x\right]\cdot\sin\frac{\pi}{a}x\cos\frac{\pi}{a}x=\frac{1}{2}\sin\frac{2\pi}{a}x.$$

所以 $C_{2k}=\dfrac{\sqrt{2}(-1)^k}{a}\displaystyle\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}\mathrm{d}x\left[\sin\frac{(2k+1)\pi}{a}x\sin\frac{2\pi x}{a}+\sin\frac{(2k-1)\pi}{a}x\sin\frac{2\pi x}{a}\right]$.

又因为 $\sin\alpha\sin\beta=\frac{1}{2}[\cos(\alpha+\beta)-\cos(\alpha-\beta)]$，则

$$\sin\frac{(2k+1)\pi}{a}x\sin\frac{2\pi x}{a}=\frac{1}{2}\left[\cos\frac{(2k-1)\pi x}{a}-\sin\frac{(2k+3)\pi x}{a}\right],$$

$$\sin\frac{(2k-1)\pi}{a}x\sin\frac{2\pi x}{a}=\frac{1}{2}\left[\cos\frac{(2k-3)\pi x}{a}-\sin\frac{(2k+1)\pi x}{a}\right],$$

$$C_{2k}=\frac{(-1)^k}{\sqrt{2}a}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}\mathrm{d}x\left[\cos\frac{(2k-1)\pi x}{a}-\cos\frac{(2k+3)\pi x}{a}+\cos\frac{(2k-3)\pi x}{a}-\cos\frac{(2k+1)\pi x}{a}\right]$$

$$=\frac{\sqrt{2}(-1)^k}{a}\int_0^{\frac{a}{2}}\mathrm{d}x\left[\cos\frac{(2k-1)\pi x}{a}-\cos\frac{(2k+3)\pi x}{a}+\cos\frac{(2k-3)\pi x}{a}-\cos\frac{(2k+1)\pi x}{a}\right]$$

$$=\frac{\sqrt{2}(-1)^k}{a}\left[\frac{\sin\frac{(2k-1)\pi x}{a}}{\frac{(2k-1)\pi}{a}}\Bigg|_0^{\frac{a}{2}}-\frac{\sin\frac{(2k+3)\pi x}{a}}{\frac{(2k+3)\pi}{a}}\Bigg|_0^{\frac{a}{2}}+\frac{\sin\frac{(2k-3)\pi x}{a}}{\frac{(2k-3)\pi}{a}}\Bigg|_0^{\frac{a}{2}}-\frac{\sin\frac{(2k+1)\pi x}{a}}{\frac{(2k+1)\pi}{a}}\Bigg|_0^{\frac{a}{2}}\right]$$

$$=\frac{\sqrt{2}(-1)^k}{\pi}\left[\frac{(-1)^{k+1}}{2k-1}-\frac{(-1)^{k+1}}{2k+3}+\frac{(-1)^k}{2k-3}-\frac{(-1)^k}{2k+1}\right]$$

$$=\frac{\sqrt{2}}{\pi}\left[\frac{-1}{2k-1}-\frac{-1}{2k+3}+\frac{1}{2k-3}-\frac{1}{2k+1}\right]$$

$$=\frac{\sqrt{2}}{\pi}\left[\frac{-4k}{4k^2-1}+\frac{4k}{4k^2-9}\right]=\frac{\sqrt{2}}{\pi}\frac{32k}{(4k^2-1)(4k^2-9)},$$

$$|P_{2k}|^2=|C_{2k}|^2=\left[\frac{\sqrt{2}}{\pi}\frac{32k}{(4k^2-1)(4k^2-9)}\right]^2=\frac{2\,048k^2}{\pi^2[(4k^2-1)(4k^2-9)]^2}.$$

对于 ψ_2：

$\psi_2^{(0)}(x)=\sum_{n=1}^{\infty}D_n\psi_n(x)$，测得 E_n 的概率为 $|D_n|^2$.

$$D_n=\int\psi_n^*(x)\psi_2^{(0)}(x)\mathrm{d}x=\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}\mathrm{d}x\left[\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi\left(x+\frac{a}{2}\right)}{a}\frac{4}{\sqrt{a}}\sin^2\frac{\pi x}{a}\cos\frac{\pi x}{a}\right],$$

式中因子 $\sin\frac{n\pi\left(x+\frac{a}{2}\right)}{a}=\sin\frac{n\pi x}{a}\cos\frac{n\pi}{2}+\cos n\frac{n\pi x}{a}\sin\frac{n\pi}{2}$.

当 $n=2k$ 为偶数时，$\sin\dfrac{n\pi}{2}=0$，$\sin\dfrac{n\pi\left(x+\dfrac{a}{2}\right)}{a}=(-1)^k\sin\dfrac{2k\pi x}{a}$，

$$D_{2k}=\frac{4\sqrt{2}}{a}(-1)^k\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}\mathrm{d}x\left[\sin\frac{2k\pi x}{a}\sin^2\frac{\pi x}{a}\cos\frac{\pi x}{a}\right]=0.$$

因为奇函数在对称区间的积分为零.

当 $n=2k+1$ 为奇数时，$\cos\dfrac{n\pi}{2}=0$，$\sin\dfrac{n\pi\left(x+\dfrac{a}{2}\right)}{a}=(-1)^k\cos\dfrac{(2k+1)\pi x}{a}$，

$$\begin{aligned}
D_{2k+1}&=\frac{4\sqrt{2}}{a}(-1)^k\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}\mathrm{d}x\left[\cos\frac{(2k+1)\pi x}{a}\sin^2\frac{\pi x}{a}\cos\frac{\pi x}{a}\right]\\
&=\frac{4\sqrt{2}}{a}(-1)^k\frac{1}{4}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}\mathrm{d}x\left[\sin\frac{(2k+2)\pi x}{a}-\sin\frac{2k\pi x}{a}\right]\sin\frac{2\pi x}{a}\Bigg]\\
&=\frac{\sqrt{2}}{a}(-1)^k\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}\mathrm{d}x\frac{1}{2}\left[\cos\frac{2k\pi x}{a}-\cos\frac{(2k+4)\pi x}{a}-\cos\frac{(2k-2)\pi x}{a}+\cos\frac{(2k+2)\pi x}{a}\right]\\
&=\frac{\sqrt{2}}{a}(-1)^k\int_{0}^{\frac{a}{2}}\mathrm{d}x\left[\cos\frac{2k\pi x}{a}-\cos\frac{(2k+4)\pi x}{a}-\cos\frac{(2k-2)\pi x}{a}+\cos\frac{(2k+2)\pi x}{a}\right]\\
&=\frac{\sqrt{2}}{a}(-1)^k\left[\frac{\sin\dfrac{2k\pi x}{a}}{\dfrac{2k\pi}{a}}\Bigg|_0^{\frac{a}{2}}-\frac{\sin\dfrac{(2k+4)\pi x}{a}}{\dfrac{(2k+4)\pi}{a}}\Bigg|_0^{\frac{a}{2}}-\frac{\sin\dfrac{(2k-2)\pi x}{a}}{\dfrac{(2k-2)\pi}{a}}\Bigg|_0^{\frac{a}{2}}+\frac{\sin\dfrac{(2k+2)\pi x}{a}}{\dfrac{(2k+2)\pi}{a}}\Bigg|_0^{\frac{a}{2}}\right],
\end{aligned}$$

式中，
$$\begin{cases}
\text{当}k=0\text{时，}D_1=\dfrac{\sqrt{2}}{a\dfrac{2}{a}}(-1)^k\left[\dfrac{\sin\dfrac{2k\pi}{2}}{\dfrac{2k\pi}{2}}\right]=\dfrac{\sqrt{2}}{2};\\
\text{当}k=1\text{时，}D_3=\dfrac{\sqrt{2}}{a}(-1)^k\left[-\dfrac{\sin\dfrac{(2k-2)\pi x}{a}}{\dfrac{(2k-2)\pi}{a}}\Bigg|_0^{\frac{a}{2}}\right]=\dfrac{\sqrt{2}}{2};\\
\text{当}k\neq0,\ k\neq1\text{时，}D_{2k+1}=0.
\end{cases}$$

答　状态为 $\psi_1^{(0)}(x)=\dfrac{4}{\sqrt{a}}\sin\dfrac{\pi x}{a}\cos^2\dfrac{\pi x}{a}$ 时，粒子能量的可能测量值为 $E_n=$

$\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2$，相应的概率为 $|P_{2k}|^2=\frac{2\,048k^2}{\pi^2[(4k^2-1)(4k^2-9)]^2}$. 如果状态为 $\psi_2^{(0)}(x)=\frac{4}{\sqrt{a}}\sin^2\frac{\pi x}{a}\cos\frac{\pi x}{a}$，粒子能量的可能测量值为 $E_n=\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2$，相应 $\psi_2^{(0)}(x)=\sum_{n=1}^{\infty}D_n\psi_n(x)$ 的概率为 $|P_{n=0}|^2=|P_{n=1}|^2=\frac{1}{2}$，其他都为零.

3.24　在一维无限深势阱

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

中粒子的状态用波函数

$$\psi(x)=\begin{cases}Ax(x-a), & 0\leqslant x\leqslant a\\ 0, & x<0, x>a\end{cases}$$

描述，其中 A 是归一化常数.

(1) 求粒子取能量 $E_n=\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2$ 的概率 P_n；(2) 求能量的平均值及涨落.

分析　哈密顿算符 $\hat{H}=\hat{T}+V(x)$，$\hat{H}\psi_n(x)=E_n\psi_n(x)$，$n=1,2,\cdots$，$E_n=\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2$，

$$\psi_n(x)=\begin{cases}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x, & 0\leqslant x\leqslant a\\ 0, & x<0, x>a\end{cases}$$

由于集合 $\{\psi_n(x)\}$ 完备，所以 $\psi(x)=\sum_n C_n\psi_n(x)$，$C_n=\int\psi_n^*(x)\psi(x)\mathrm{d}x$，在 $\psi_n(x)$ 态，测到 E_n 的概率为 $P_n=|C_n|^2$，$\psi(x)$ 的归一化系数 A 满足

$$1=A^2\int_0^a\mathrm{d}x[x^2(x-a)^2]=A^2\int_0^a\mathrm{d}x[x^2(x^2-2ax+a^2)]$$

$$=A^2\left[\frac{a^5}{5}+a^2\frac{a^3}{3}-2a\frac{a^4}{4}\right]=\frac{A^2a^5}{30},$$

则 $A=\frac{\sqrt{30}}{a^{5/2}}$.

解　(1) 求测得 E_n 的概率 P_n

$$C_n=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*\psi(x)\mathrm{d}x=A\sqrt{\frac{2}{a}}\int_0^a x(x-a)\sin\frac{n\pi x}{a}\mathrm{d}x=\frac{\sqrt{60}}{a^3}\int_0^a(x^2-ax)\sin\frac{n\pi x}{a}\mathrm{d}x\ ,$$

用分部积分法

$$\int_0^a x^2\sin\frac{n\pi x}{a}\mathrm{d}x=-\frac{1}{\frac{n\pi}{a}}\int_0^a x^2\mathrm{d}\cos\frac{n\pi x}{a}=-\frac{1}{\frac{n\pi}{a}}\left[x^2\cos\frac{n\pi x}{a}\bigg|_0^a-\int_0^a\cos\frac{n\pi x}{a}2x\mathrm{d}x\right]$$

$$=-\frac{a^3}{n\pi}(-1)^n+\frac{2a}{n\pi}\left[\int_0^a\cos\frac{n\pi x}{a}x\mathrm{d}x\right]$$

$$=-\frac{a^3}{n\pi}(-1)^n+\frac{2a}{n\pi}\frac{1}{\frac{n\pi}{a}}\left[\int_0^a x\mathrm{d}\sin\frac{n\pi x}{a}\right]$$

$$=-\frac{a^3}{n\pi}(-1)^n+\frac{2a}{n\pi}\frac{1}{\frac{n\pi}{a}}\left[x\sin\frac{n\pi x}{a}\bigg|_0^a-\int_0^a\sin\frac{n\pi x}{a}\mathrm{d}x\right]$$

$$=-\frac{a^3}{n\pi}(-1)^n+\frac{2a}{n\pi}\frac{1}{\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2}\cos\frac{n\pi x}{a}\bigg|_0^a\Bigg]$$

$$=-\frac{a^3}{n\pi}(-1)^n+\frac{2a}{n\pi}\frac{1}{\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2}[(-1)^n-1],$$

$$\int_0^a x\sin\frac{n\pi x}{a}\mathrm{d}x=-\frac{1}{\frac{n\pi}{a}}\int_0^a x\mathrm{d}\cos\frac{n\pi x}{a}=-\frac{1}{\frac{n\pi}{a}}\left[x\cos\frac{n\pi x}{a}\bigg|_0^a-\int_0^a\cos\frac{n\pi x}{a}\mathrm{d}x\right]$$

$$=-\frac{a^2}{n\pi}(-1)^n+\frac{a}{n\pi}\frac{1}{\frac{n\pi}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}\bigg|_0^a=(-1)^{n+1}\frac{a^2}{n\pi},$$

则

$$C_n=\frac{\sqrt{60}}{a^3}\left\{-\frac{a^3}{n\pi}(-1)^n+\frac{2a}{n\pi}\frac{1}{\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2}[(-1)^n-1]-(-1)^{n+1}\frac{a^3}{n\pi}\right\}$$

$$=\frac{\sqrt{60}}{a^3}\frac{2a}{n\pi}\frac{1}{\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2}[(-1)^n-1]=\frac{4\sqrt{15}}{(n\pi)^3}[(-1)^n-1].$$

若 $n=2k$ 为偶数，则 $C_{2k}=0$；

若 $n=2k+1$ 为奇数，则 $C_{2k+1}=-\dfrac{8\sqrt{15}}{(2k+1)^3\pi^3}$. 即 $P_{2k+1}=|C_{2k+1}|^2=\dfrac{960}{(2k+1)^6\pi^6}$.

(2) 求能量的平均值及涨落

能量平均值

$$\langle E\rangle=\sum_n E_n|C_n|^2=\sum_n\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2\frac{60\times4}{(n\pi)^6}[(-1)^n-1]^2=\frac{\hbar^2}{2\mu}\sum_{k=0}\left[\frac{(2k+1)\pi}{a}\right]^2\frac{960}{((2k+1)\pi)^6}$$

$$=\frac{960\hbar^2}{2\mu a^2\pi^4}\sum_{k=0}\frac{1}{(2k+1)^4}=\frac{960\hbar^2}{2\mu a^2\pi^4}\frac{\pi^4}{96}=\frac{5\hbar^2}{\mu a^2}=\frac{10E_1}{\pi^2},$$

式中，$\displaystyle\sum_{k=0}\frac{1}{(2k+1)^4}=\frac{\pi^4}{96}$，$E_1=\dfrac{\hbar^2\pi^2}{2\mu a^2}$.

$$\left\langle(\Delta E)^2\right\rangle=\left\langle E^2\right\rangle-\langle E\rangle^2=\sum_n E_n^2|C_n|^2-\left(\frac{5\hbar^2}{\mu a^2}\right)^2$$

$$=\sum_{k=0}^{\infty}\left[\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{(2k+1)\pi}{a}\right)^2\right]^2\frac{960}{(2k+1)^6\pi^6}-\left(\frac{5\hbar^2}{\mu a^2}\right)^2$$

$$=\left(\frac{\hbar^2}{2\mu}\right)^2\frac{1}{a^4\pi^2}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{960}{(2k+1)^2}-\left(\frac{5\hbar^2}{\mu a^2}\right)^2=\frac{960\hbar^4}{4\mu^2a^4}\frac{1}{8}-\left(\frac{5\hbar^2}{\mu a^2}\right)^2$$

$$=\frac{30\hbar^4}{\mu^2a^4}-25\frac{\hbar^4}{\mu^2a^4}=\frac{5\hbar^4}{\mu^2a^4}.$$

答　(1) 粒子取能量 $E_n=\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\left(\dfrac{n\pi}{a}\right)^2$ 的概率 $P_{2k+1}=|C_{2k+1}|^2=\dfrac{960}{(2k+1)^6\pi^6}$；(2) 能量的平均值为 $\dfrac{960\hbar^2}{2\mu a^2\pi^4}\dfrac{\pi^4}{96}$，涨落为 $\left\langle(\Delta E)^2\right\rangle=\dfrac{5\hbar^4}{\mu^2a^4}$.

3.25　一维自由运动的粒子，在 $t=0$ 时波函数为 $\psi(x,0)=\delta(x)$，求概率密度 $|\psi(x,t)|^2$.

分析　已知

$$\psi_p(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}px}\tag{3.25-1}$$

是

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2\mu}\tag{3.25-2}$$

的本征函数，即

$$\hat{H}\psi_p(x)=\frac{p^2}{2\mu}\psi_p(x)\,,\quad E_p=\frac{p^2}{2\mu}\,, \tag{3.25-3}$$

属于连续谱.

解　一维自由粒子的格林函数

$$\begin{aligned}\mathrm{i}G(x,t,y,t_0)&=\int \mathrm{d}p\psi(x)\psi_p(y)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p^2}{2\mu}(t-t_0)}=\frac{1}{2\pi\hbar}\int \mathrm{d}p\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p(x-y)}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p^2}{2\mu}(t-t_0)}\\&=\frac{1}{2\pi\hbar}\int \mathrm{d}p\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2\mu\hbar}(t-t_0)\left\{p^2-\frac{\mu p(x-y)}{t-t_0}+\left[\frac{\mu(x-y)}{t-t_0}\right]^2-\left[\frac{\mu(x-y)}{t-t_0}\right]^2\right\}}\\&=\frac{1}{2\pi\hbar}\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\frac{t-t_0}{2\mu\hbar}}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2\mu\hbar}(t-t_0)\left[\frac{\mu(x-y)}{t-t_0}\right]^2}=\frac{\sqrt{\mu}}{\sqrt{2\pi\hbar(t-t_0)}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2\hbar}\frac{\mu(x-y)^2}{t-t_0}}\end{aligned}\,, \tag{3.25-4}$$

当 $t_0=0$ 时，$\psi(x,0)=\delta(x)$，则

$$\psi(x,t)=\mathrm{i}\int \mathrm{d}yG(x,t,y,t_0)\delta(y)=\frac{\sqrt{\mu}}{\sqrt{2\pi\hbar(t-t_0)}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2\hbar}\frac{\mu(x-y)^2}{t-t_0}}\,.\ |\psi(x,t)|^2=\frac{\mu}{2\pi\hbar t}\,.$$

讨论：

(1) 从 $\psi(x,0)=\delta(x)$ 到 $\psi(x,t)$ 存在波包弥散；

(2) 由于初始态 $\psi(x,0)=\delta(x)$ 不可归一化，所以 $\psi(x,t)$ 也不可归一化；

(3) 从 $t=0$ 时的 $|\psi(x,0)|^2=\delta^2(x)$ 到 $t=0^+$ 时的 $|\psi(x,0^+)|^2=\frac{\mu}{2\pi\hbar 0^+}$，可见波函数的变化很快，这限制了把 $\psi(x,t)$ 理解为实际的场的可能性.

答　概率密度为 $|\psi(x,t)|^2=\frac{\mu}{2\pi\hbar t}$.

3.26　设粒子在势场 $V(\boldsymbol{x})$ 中运动，证明：

(1) 能量平均值为 $E=\int \mathrm{d}^3x w=\int \mathrm{d}^3x\left[\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi+\psi^*V(x)\psi\right]$，式中 w 为能量密度；

(2) 能量守恒公式 $\frac{\partial w}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{S}=0$，式中 $\boldsymbol{S}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\nabla\psi+\frac{\partial\psi}{\partial t}\nabla\psi^*\right)$ 为能流密度.

分析　利用薛定谔方程，$\hat{\boldsymbol{p}}=p_1\boldsymbol{i}+p_2\boldsymbol{j}+p_3\boldsymbol{k}$，$p_1=\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\partial}{\partial x_1}$，$p_2=\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\partial}{\partial x_2}$，$p_3=\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\partial}{\partial x_3}$进行计算和证明.

解　(1) $\psi(\boldsymbol{x},t)$满足薛定谔方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x},t)=\left[\frac{\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}}{2\mu}+V(\boldsymbol{x})\right]\psi(\boldsymbol{x},t)\,, \tag{3.26-1}$$

由于$\hat{\boldsymbol{p}}=\hat{\boldsymbol{p}}^{+}$，则有

$$\int \mathrm{d}^3x\psi^*(\boldsymbol{x},t)\hat{\boldsymbol{p}}^{+}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\psi(\boldsymbol{x},t)=\int \mathrm{d}^3x(\hat{\boldsymbol{p}}\psi)\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}\psi)^*=\int \mathrm{d}^3x\hbar^2\nabla\psi^*(\boldsymbol{x},t)\cdot\nabla\psi(\boldsymbol{x},t)\,,$$

所以能量平均值

$$E=\int \mathrm{d}^3x\psi^*\left[\frac{\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}}{2\mu}+V(\boldsymbol{x})\right]\psi\,, \tag{3.26-2}$$

$$E=\int \mathrm{d}^3x\left[\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla\psi^*(\boldsymbol{x},t)\cdot\nabla\psi(\boldsymbol{x},t)+\psi^*(\boldsymbol{x},t)V(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x},t)\right]=\int \mathrm{d}^3x w\,, \tag{3.26-3}$$

式中$w=\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\nabla\psi^*(\boldsymbol{x},t)\cdot\nabla\psi(\boldsymbol{x},t)+\psi^*(\boldsymbol{x},t)V(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x},t)$.

(2) 证明$\dfrac{\partial w}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{S}=0$成立.

已知，$w=\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\nabla\psi^*(\boldsymbol{x},t)\cdot\nabla\psi(\boldsymbol{x},t)+\psi^*(\boldsymbol{x},t)V(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x},t)$，则

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}w=&\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\left(\nabla\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\right)\cdot\nabla\psi+(\nabla\psi^*)\left(\nabla\frac{\partial}{\partial t}\psi\right)\right]\\&+\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(\boldsymbol{x},t)V(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x},t)+\psi^*(\boldsymbol{x},t)V(\boldsymbol{x})\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x},t)\\=&\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\left(\nabla\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\right)\cdot\nabla\psi+(\nabla\psi^*)\left(\nabla\frac{\partial}{\partial t}\psi\right)\right]\\&+\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(\boldsymbol{x},t)V(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x},t)+\psi^*(\boldsymbol{x},t)V(\boldsymbol{x})\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x},t)\\=&\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\nabla\cdot\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\nabla\psi\right)-\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\nabla^2\psi+\nabla\cdot\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi\nabla\psi^*\right)-\frac{\partial}{\partial t}\nabla^2\psi^*\right]\\&+\frac{\partial}{\partial t}\psi^*V(\boldsymbol{x})\psi+\psi^*V(\boldsymbol{x})\frac{\partial}{\partial t}\psi\end{aligned}$$

$$=\nabla\cdot\left\{\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\nabla\psi+\frac{\partial}{\partial t}\psi\nabla\psi^*\right)\right\}$$

$$+\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(\boldsymbol{x})\right]\psi+\frac{\partial}{\partial t}\psi\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(\boldsymbol{x})\right]\psi^*,$$

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

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

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

证毕.

3.27　设 $\Psi_1(\boldsymbol{x},t)$ 和 $\Psi_2(\boldsymbol{x},t)$ 是薛定谔方程的两个解，证明积分 $\int\Psi_1^*(\boldsymbol{x},t)\Psi_2(\boldsymbol{x},t)\mathrm{d}^3x$ 与时间无关.

分析　要证明 $\int\Psi_1^*(\boldsymbol{x},t)\Psi_2(\boldsymbol{x},t)\mathrm{d}^3x$ 与时间无关，只要证明

$$\frac{\partial}{\partial t}\int\Psi_1^*(\boldsymbol{x},t)\Psi_2(\boldsymbol{x},t)\mathrm{d}^3x=0$$

即可.

证明　设 $P(t)=\int\mathrm{d}^3x[\Psi_1^*(\boldsymbol{x},t)\Psi_2(\boldsymbol{x},t)]$，则

$$\frac{\partial}{\partial t}P(t)=\int\mathrm{d}^3x\left[\frac{\partial}{\partial t}\Psi_1^*(\boldsymbol{x},t)\Psi_2(\boldsymbol{x},t)+\Psi_1^*(\boldsymbol{x},t)\frac{\partial}{\partial t}\Psi_2(\boldsymbol{x},t)\right]$$

$$=\int\mathrm{d}^3x\left[-\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(\hat{H}\Psi_1)^*\Psi_2+\Psi_1^*\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\hat{H}\Psi_2\right].$$

由于 $\hat{H}^+=\hat{H}$ 是厄米算符，

$$\int\mathrm{d}^3x\Psi_1^*(\boldsymbol{x},t)\hat{H}\Psi_2(\boldsymbol{x},t)=\int\mathrm{d}^3x\Psi_2(\boldsymbol{x},t)[\hat{H}\Psi_1(\boldsymbol{x},t)]^*.$$

所以 $\dfrac{\partial}{\partial t}P(t)=0$，即 $\int\mathrm{d}^3x[\Psi_1^*(\boldsymbol{x},t)\Psi_2(\boldsymbol{x},t)]$ 与 t 无关.

讨论：此题证明，应用了 $\hat{H}^+=\hat{H}$，但对于自由态，$\hat{\boldsymbol{p}}$ 不是厄米的，$\hat{H}$ 也不是厄米的，此题结论不真.

证毕.

3.28　设 $Y_l^m(\theta,\varphi)$ 为球函数，若系统处于 $\psi = C_1 Y_1^1 + C_2 Y_1^0$，求

(1) L^2 的可能测量值及平均值；

(2) L_3 的可能测量值及相应的概率.

分析　已知 $\int Y_l^{m*} Y_{l_1}^{m_1} \mathrm{d}\Omega = \delta_{ll_1}\delta_{mm_1}$，由 $\langle\psi|\psi\rangle = 1$，则 $|C_1|^2 + |C_2|^2 = 1$.

解　(1) 因为 $\hat{L}^2 Y_l^m = \hbar l(l+1) Y_l^m$，所以 Y_1^1 和 Y_1^0 都是 $\hat{L}^2$ 的本征函数，对应的本征值均为 $2\hbar^2$，$\hat{L}^2 Y_1^1 = 2\hbar^2 Y_1^1$，$\hat{L}^2 Y_1^0 = 2\hbar^2 Y_1^0$，所以 $\hat{L}^2[C_1 Y_1^1 + C_2 Y_1^0] = 2\hbar^2[C_1 Y_1^1 + C_2 Y_1^0]$，在 $C_1 Y_1^1 + C_2 Y_1^0$ 态，测量 $\hat{L}^2$ 得到准确值 $2\hbar^2$，故平均值也是 $2\hbar^2$.

(2) 因为 $\hat{L}_3 Y_l^m = m\hbar Y_l^m$，故在 $\psi = C_1 Y_1^1 + C_2 Y_1^0$ 态测 L_3 的可能值分别为 $\hbar$ 和 0，相应的概率分别为 $|C_1|^2$ 和 $|C_2|^2$.

答　(1) L^2 的可能测量值为 $2\hbar^2$，平均值为 $2\hbar^2$；

(2) 测 L_3 的可能值分别为 $\hbar$ 和 0，相应的概率分别为 $|C_1|^2$ 和 $|C_2|^2$.

3.29　求解 $\hat{L}_3 = \dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\partial}{\partial\varphi}$ 的本征函数与本征值.

分析　$\hat{L}_3$ 的本征值问题：

$$\hat{L}_3\psi(\varphi) = L_3\psi(\varphi) \to \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial\psi(\varphi)}{\partial\varphi} = L_3\psi(\varphi)\,, \tag{3.29-1}$$

解得 $\psi(\varphi) = C\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}L_3\varphi}$.

解　由 $\psi(\varphi)$ 的单值性：$\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$，得到 $\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}L_3\varphi} = 1$，即

$\dfrac{L_3}{\hbar} = m$，$m = 0, \pm1, \pm2, \cdots$，$L_3 = m\hbar$ 属于离散谱，故

$$\psi_m(\varphi) = C\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\,, \tag{3.29-2}$$

式中，C 为归一化系数. 由于 $\psi_m(\varphi) = \psi_m(\varphi + 2\pi)$，各周期的物理情况完全相同，则 $0 \sim 2\pi$ 内粒子数不变，若有一个粒子出去，必有一个粒子进入，故可在 $0 \sim 2\pi$ 内归一化.

$$1 = \int_0^{2\pi} |\psi_m(\varphi)|^2 \,\mathrm{d}\varphi = C^2 2\pi\,,\quad C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,,\quad \psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\,.$$

答　$\hat{L}_3 = \dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\partial}{\partial\varphi}$ 的本征函数为 $\psi_m(\varphi) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}$，$\hat{L}_3$ 本征值 $m\hbar$.

3.30　证明：

(1) $\hat{T}_a = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}}$ 为平移 $\boldsymbol{a}$ 的算符；

(2) $\hat{R}(\boldsymbol{n},\alpha) = \mathrm{e}^{\frac{\alpha}{\mathrm{i}\hbar}\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}}$ 为绕 $\boldsymbol{n}$ 转 α 的转动算符；

(3) $\mathrm{e}^{\hat{L}}\hat{A}\mathrm{e}^{-\hat{L}} = \hat{A} + [\hat{L},\hat{A}] + \frac{1}{2!}[\hat{L},[\hat{L},\hat{A}]] + \cdots$；

(4) 如果 $[\hat{A},\hat{B}]$ 与 $\hat{B}$ 和 $\hat{A}$ 均对易，则 $\mathrm{e}^{\hat{A}}\cdot\mathrm{e}^{\hat{B}} = \mathrm{e}^{\hat{A}+\hat{B}}\mathrm{e}^{\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]}$.

分析　平移和旋转是两个基本的操作；$[\hat{A},\hat{B}]$ 与 $\hat{B}$ 和 $\hat{A}$ 均对易，说明

$$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0,\quad \hat{A}[\hat{A},\hat{B}] - [\hat{A},\hat{B}]\hat{A} = 0,\quad \hat{B}[\hat{A},\hat{B}] - [\hat{A},\hat{B}]\hat{B} = 0,$$

$$\mathrm{e}^{x} = 1 + x + \frac{1}{2!}x^2 + \frac{1}{3!}x^3 + \cdots.$$

证明　(1) 在位置空间，平移 $\boldsymbol{a}$ 的操作，$\hat{T}_a\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x} + \boldsymbol{a}$，若将平移 $\boldsymbol{a}$ 的操作映射到量子态空间(所有波函数 $\psi(\boldsymbol{x})$ 集合成的线性闭包)，有平移 $\boldsymbol{a}$ 的算符 $\hat{T}_a$，设根据 $\hat{T}_a\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x} + \boldsymbol{a}$，将 $\boldsymbol{x}$ 处分布的粒子平移到 $\boldsymbol{x} + \boldsymbol{a}$ 处，由于粒子分布变化，波函数(量子态)也有了变化，此种变化，定义了 $\hat{T}_a$ 的作用，粒子平移后，$\boldsymbol{x}$ 处的粒子分布是原 $\boldsymbol{x} - \boldsymbol{a}$ 处的粒子搬过来的，故有

$$\begin{aligned}\hat{T}_a\psi(\boldsymbol{x}) = \psi_1(\boldsymbol{x}) = \psi(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{a}) &= \psi(\boldsymbol{x}) - \boldsymbol{a}\cdot\nabla\psi(\boldsymbol{x}) + \frac{1}{2!}(\boldsymbol{a}\cdot\nabla)^2\psi(\boldsymbol{x}) + \cdots \\ &= \left[1 - \boldsymbol{a}\cdot\nabla + \frac{1}{2!}(\boldsymbol{a}\cdot\nabla)^2 + \cdots\right]\psi(\boldsymbol{x}) = \mathrm{e}^{-a\cdot\nabla}\psi(\boldsymbol{x}) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{p}}\psi(\boldsymbol{x}),\end{aligned} \tag{3.30-1}$$

所以 $\hat{T}_a = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{p}}$.

(2) 为了求绕单位矢量 $\boldsymbol{n}$ 转 α 角的转动算符 $\hat{R}(\boldsymbol{n},\alpha)$，先证明绕 z 轴转 α 角的转动算符 $\hat{R}(\boldsymbol{z}_0,\alpha) = \mathrm{e}^{\frac{\alpha}{\mathrm{i}\hbar}\boldsymbol{z}_0\cdot\hat{\boldsymbol{L}}}$，其中 $\boldsymbol{z}_0$ 是 z 轴上的单位矢量，$\hat{\boldsymbol{L}}$ 是轨道角动量算符. 在位置空间绕 $\boldsymbol{z}_0$ 转 α 角的操作，又绕 $\boldsymbol{z}_0$ 转 φ 角，转角增加到 $\varphi + \alpha$. 若相应地把分布在 φ 处的粒子都搬到 $\varphi + \alpha$，则粒子分布的变化定义了量子态空间的转动算符 $\hat{R}(\boldsymbol{z}_0,\alpha)$ 的作用：设 $\psi_{L_z}(\varphi)$ 是 L_z 不变时 φ 处的波函数，则

$$\hat{R}(\boldsymbol{z}_0,\alpha)\psi_{L_z}(\varphi) = \psi_{1L_z}(\varphi) = \psi_{L_z}(\varphi-\alpha),$$

因为绕 $\boldsymbol{z}_0$ 转过 α 角后，φ 处的粒子是原 $\varphi - \alpha$ 处的粒子搬过来的，将 $\psi_{L_z}(\varphi-\alpha)$ 在 φ 处展开，得到

$$\begin{aligned}\hat{R}(z_0,\alpha)\psi_{L_z}(\varphi)&=\psi_{L_z}(\varphi-\alpha)\\&=\psi_{L_z}(\varphi)-\alpha\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi_{L_z}(\varphi)+\frac{1}{2!}\left(-\alpha\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)^2\psi_{L_z}(\varphi)+\cdots\\&=\left[1-\alpha\frac{\partial}{\partial\varphi}+\frac{1}{2!}\left(\alpha\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)^2+\cdots\right]\psi_{L_z}(\varphi)=\mathrm{e}^{-\alpha\frac{\partial}{\partial\varphi}}\psi_{L_z}(\varphi)\\&=\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\alpha\hat{L}_z}\psi_{L_z}(\varphi)=\mathrm{e}^{\frac{\alpha}{\mathrm{i}\hbar}z_0\cdot\hat{L}}\psi_{L_z}(\varphi),\end{aligned}\tag{3.30-2}$$

所以，$\hat{R}(z_0,\alpha)=\mathrm{e}^{\frac{\alpha}{\mathrm{i}\hbar}z_0\cdot\hat{L}}$.

设 $\hat{R}(z_0,\alpha)$ 是位置空间中绕任意单位矢量 $\boldsymbol{n}$ 转 α 角的操作. 它使绕 $\boldsymbol{n}$ 方向的转角 φ 增加到 $\varphi+\alpha$，映射到量子态空间，有 $\hat{R}(\boldsymbol{n},\alpha)$ 算符，映射方法为，相应于 $\hat{R}(\boldsymbol{n},\alpha)$ 的作用，将分布在 φ 处的粒子都搬到 $\varphi+\alpha$ 处. 转动后 φ 处的粒子是原来 $\varphi-\alpha$ 处的粒子搬来的. $\hat{R}(\boldsymbol{n},\alpha)$ 的作用，有性质

$$\hat{R}(\boldsymbol{n},\alpha)\psi_{L_n}(\varphi)=\psi_{L_n}(\varphi-\alpha),\tag{3.30-3}$$

将式(3.30-3)的右边 $\psi_{L_n}(\varphi-\alpha)$ 在 φ 处展开成幂级数，注意到 $\hat{L}_n=\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\partial}{\partial\varphi}$，得到

$$\hat{R}(\boldsymbol{n},\alpha)=\mathrm{e}^{\frac{\alpha}{\mathrm{i}\hbar}\hat{L}_n}=\mathrm{e}^{\frac{\alpha}{\mathrm{i}\hbar}\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}},\tag{3.30-4}$$

(3) 证明 $\mathrm{e}^{\hat{L}}\hat{A}\mathrm{e}^{-\hat{L}}=\hat{A}+[\hat{L},\hat{A}]+\dfrac{1}{2!}[\hat{L},[\hat{L},\hat{A}]]+\cdots$,

设 $\hat{S}(\lambda)=\mathrm{e}^{\lambda\hat{L}}\hat{A}\mathrm{e}^{-\lambda\hat{L}}$，在 $\lambda=0$ 展开，$\hat{S}(\lambda)=\hat{S}(0)+\left.\dfrac{\partial\hat{S}}{\partial\lambda}\right|_{\lambda=0}\lambda+\dfrac{1}{2!}\left.\dfrac{\partial^2\hat{S}}{\partial\lambda^2}\right|_{\lambda=0}\lambda^2+\cdots$,

注意　$\hat{S}(0)=\hat{A}$，$\hat{S}(1)=\mathrm{e}^{\hat{L}}\hat{A}\mathrm{e}^{-\hat{L}}$，$\hat{S}(1)=\hat{A}+\left.\dfrac{\partial\hat{S}}{\partial\lambda}\right|_{\lambda=0}+\dfrac{1}{2!}\left.\dfrac{\partial^2\hat{S}}{\partial\lambda^2}\right|_{\lambda=0}+\cdots$,

$$\frac{\partial\hat{S}}{\partial\lambda}=\hat{L}\hat{S}(\lambda)-\hat{S}(\lambda)\hat{L},\quad\left.\frac{\partial\hat{S}}{\partial\lambda}\right|_{\lambda=0}=\hat{L}\hat{A}-\hat{A}\hat{L}=[\hat{L},\hat{A}],$$

$$\frac{\partial^2\hat{S}}{\partial\lambda^2}=\hat{L}\frac{\partial\hat{S}}{\partial\lambda}-\frac{\partial\hat{S}}{\partial\lambda}\hat{L},\quad\left.\frac{\partial^2\hat{S}}{\partial\lambda^2}\right|_{\lambda=0}=\hat{L}[\hat{L},\hat{A}]-[\hat{L},\hat{A}]\hat{L}=[\hat{L},[\hat{L},\hat{A}]],$$

依次类推，得

$$\mathrm{e}^{\hat{L}}\hat{A}\mathrm{e}^{-\hat{L}}=\hat{A}+[\hat{L},\hat{A}]+\frac{1}{2!}[\hat{L},[\hat{L},\hat{A}]]+\cdots.$$

(4) 如果 $[\hat{A},\hat{B}]$ 与 $\hat{B}$ 和 $\hat{A}$ 均对易，则 $\mathrm{e}^{\hat{A}}\cdot\mathrm{e}^{\hat{B}}=\mathrm{e}^{\hat{A}+\hat{B}}\mathrm{e}^{\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]}$,

令 $\hat{f}(\lambda)=\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\mathrm{e}^{-\lambda(\hat{A}+\hat{B})}$，则 $\hat{f}(0)=1$，

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

$$=\hat{A}\hat{f}(\lambda)-\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\hat{A}\mathrm{e}^{-\lambda(\hat{A}+\hat{B})}=\hat{A}\hat{f}(\lambda)-\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\hat{A}\mathrm{e}^{-\lambda\hat{B}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\mathrm{e}^{-\lambda(\hat{A}+\hat{B})}.$$

注意　$\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\hat{A}\mathrm{e}^{-\lambda\hat{B}}=\hat{A}+\lambda[\hat{B},\hat{A}]+\frac{1}{2!}[\hat{B},[\hat{B},\hat{A}]]+\cdots$，因为 $[\hat{B},[\hat{B},\hat{A}]]=0$，所以 $\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\hat{A}\mathrm{e}^{-\lambda\hat{B}}=\hat{A}+\lambda[\hat{B},\hat{A}]$，则有 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\hat{f}(\lambda)=\hat{A}\hat{f}(\lambda)-\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\{\hat{A}+\lambda[\hat{B},\hat{A}]\}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\mathrm{e}^{\lambda(\hat{A}+\hat{B})}$，因为 $[\hat{B},\hat{A}]$ 和 $\hat{A}$ 对易，所以 $[\hat{B},\hat{A}]$ 也和 $\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}$ 对易，即 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\hat{f}(\lambda)=\lambda[\hat{A},\hat{B}]\hat{f}(\lambda)$，对 λ 积分，$\int_{f(0)}^{f(\lambda)}\frac{\mathrm{d}}{\hat{f}(\lambda)}\hat{f}(\lambda)=\int_0^{\lambda}\lambda[\hat{A},\hat{B}]\mathrm{d}\lambda$，$\ln\frac{f(\lambda)}{f(0)}=\frac{\lambda^2}{2}[\hat{A},\hat{B}]$，取 $f(0)=1$，则 $f(\lambda)=\mathrm{e}^{\frac{\lambda^2}{2}[\hat{A},\hat{B}]}$，$\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\mathrm{e}^{-\lambda(\hat{A}+\hat{B})}=\mathrm{e}^{\frac{\lambda^2}{2}[\hat{A},\hat{B}]}$，两边乘以 $\mathrm{e}^{\lambda(\hat{A}+\hat{B})}$，则 $\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}=\mathrm{e}^{\frac{\lambda^2}{2}[\hat{A},\hat{B}]}\mathrm{e}^{\lambda(\hat{A}+\hat{B})}$，再令 $\lambda=1$，有 $\mathrm{e}^{\hat{A}}\mathrm{e}^{\hat{B}}=\mathrm{e}^{\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]}\mathrm{e}^{(\hat{A}+\hat{B})}$，因为 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 都和 $[\hat{A},\hat{B}]$ 对易，所以 $\mathrm{e}^{\hat{A}}\mathrm{e}^{\hat{B}}=\mathrm{e}^{\hat{A}+\hat{B}+\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]}$.

证毕.

3.31　求定轴刚体转子的能级和波函数.

分析　设定轴为 z 轴，则 $\hat{H}=\frac{1}{2I}\hat{L}_z^2$，因为 $\hat{L}_z=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\varphi}$，则 $\hat{H}=\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$，$I$ 为转动惯量.

解　设波函数为 $\psi(\varphi)$，则 $\frac{\partial}{\partial\varphi}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi}$，$\hat{H}\psi(\varphi)=E\psi(\varphi)$，$\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varphi^2}\psi(\varphi)=E\psi(\varphi)$，因为转动的能量非负，所以 $E\geqslant 0$，$k^2=\frac{2I}{\hbar^2}E\geqslant 0$，

$$\psi(\varphi)=C\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\varphi},$$

式中 C 为归一化系数，由于波函数的单值性(周期性)：

$\psi(\varphi)=\psi(\varphi+2\pi)$，$\mathrm{e}^{\mathrm{i}k2\pi}=1$，则 $k=m$，$m=0,\pm1,\pm2,\cdots$，$E_m=\frac{\hbar^2}{2I}m^2$，对 $\pm m$ 简并.

由于能谱 E_m 是离散的，$\langle\psi(\varphi)|\psi(\varphi)\rangle=1$.

由于单值性条件，φ 的取值范围可限于 $0\sim2\pi$，因为 $0\sim2\pi$ 之间的粒子数不变，若有一个粒子跑出 $0\sim2\pi$ 范围，由于周期性，则必有一个粒子跑进 $0\sim2\pi$ 范围，归一化条件

$$C^2\int_0^{2\pi}[\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\varphi}]^*\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\varphi}\mathrm{d}\varphi=C^2 2\pi=1\,,\quad C=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,.$$

总之，$\psi_m(\varphi)=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}$，$E_m=\dfrac{\hbar^2}{2I}m^2$.

答　定轴刚体转子的能级为 $E_m=\dfrac{\hbar^2}{2I}m^2$，波函数为 $\psi_m(\varphi)=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}$.

3.32　求一维谐振子基态按动量的概率分布.

分析　已知一维谐振子的基态波函数

$$\psi_0(x)=\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}x^2}\,,\tag{3.32-1}$$

而一维动量的本征函数为

$$\psi_p(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\,.\tag{3.32-2}$$

解　将 $\psi_0(x)$ 作傅里叶积分展开

$$\psi_0(x)=\int\mathrm{d}p\Phi(p)\frac{\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,,\tag{3.32-3}$$

则 $\Phi(p)$ 就是在 $\psi_0(x)$ 态测得动量 p 的概率幅，$\psi_0(x)$ 的傅里叶积分变换系数 $\Phi(p)$ 为

$$\begin{aligned}\Phi(p)&=\int\mathrm{d}x\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\psi_0(x)=\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}\left(x^2+\frac{2\mathrm{i}}{\mu\omega}px\right)}\\&=\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}\left[x^2+\frac{2\mathrm{i}}{\mu\omega}px+\left(\frac{\mathrm{i}p}{\mu\omega}\right)^2-\left(\frac{\mathrm{i}p}{\mu\omega}\right)^2\right]}\\&=\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{p^2}{2\hbar\mu\omega}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}\left(x+\frac{\mathrm{i}p}{\mu\omega}\right)^2}\\&=\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{p^2}{2\hbar\mu\omega}}\sqrt{\frac{\pi}{\frac{\mu\omega}{2\hbar}}}=\sqrt[4]{\frac{1}{\pi\hbar\mu\omega}}\mathrm{e}^{-\frac{p^2}{2\hbar\mu\omega}},\end{aligned}$$

$$|\Phi(p)|^2=\sqrt{\frac{1}{\pi\hbar\mu\omega}}\mathrm{e}^{-\frac{p^2}{\hbar\mu\omega}}\,.$$

这是在一维谐振子的基态，测量动量的概率.

答　一维谐振子基态按动量的概率分布为 $\sqrt{\frac{1}{\pi\hbar\mu\omega}}\mathrm{e}^{-\frac{p^2}{\hbar\mu\omega}}$.

3.33　对于定态，计算平均值 $\langle\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\rangle$，并由海森伯方程 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\rangle=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle[\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}},\hat{H}]\rangle=0$，证明位力定理：$2\langle\hat{T}\rangle=\langle\boldsymbol{r}\cdot\nabla V\rangle$.

分析　利用哈密顿 $\hat{H}=\frac{\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}}{2\mu}+V(\boldsymbol{x})=\frac{1}{2\mu}\sum_i\hat{p}_i\hat{p}_i+V(\boldsymbol{x})$ 以及算符 $\hat{x}_j=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\hat{p}_j}$ 进行证明.

证明　由哈密顿 $\hat{H}=\frac{\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}}{2\mu}+V(\boldsymbol{x})=\frac{1}{2\mu}\sum_i\hat{p}_i\hat{p}_i+V(\boldsymbol{x})$，$\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}=\sum_j\hat{x}_j\hat{p}_j$，所以

$[\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}},\hat{H}]=\frac{1}{2\mu}\sum_i\sum_j[\hat{x}_j\hat{p}_j,\hat{p}_i\hat{p}_i]+\sum_j[\hat{x}_j\hat{p}_j,V(\boldsymbol{x})]$，而 $[\hat{x}_j\hat{p}_j,\hat{p}_i\hat{p}_i]=\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\hat{p}_i}{\partial\hat{p}_j}\right)\hat{p}_j=2\mathrm{i}\hbar\hat{p}_i\delta_{ij}\hat{p}_j=2\mathrm{i}\hbar\hat{p}_i^2\delta_{ij}$，$\frac{1}{2\mu}\sum_i\sum_j[\hat{x}_j\hat{p}_j,\hat{p}_i\hat{p}_i]=\mathrm{i}\hbar 2\hat{T}$，$\sum_j[\hat{x}_j\hat{p}_j,V(\boldsymbol{x})]=\sum_j x_j\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial V}{\partial x_j}=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\boldsymbol{r}\cdot\nabla V$，所以

$$\mathrm{i}\hbar\langle 2\hat{T}\rangle+\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\langle\boldsymbol{r}\cdot\nabla V\rangle=0,$$

即

$$2\langle\hat{T}\rangle=\langle\boldsymbol{r}\cdot\nabla V\rangle.$$

证毕.

3.34　带电粒子在威耳逊云室中的轨迹是一串小雾滴，雾滴的线度约为1μm，当观察能量为1keV的电子径迹时，其动量与经典力学动量的相对偏差不小于多少?

分析　利用不确定关系 $\Delta x\Delta p\geqslant\frac{\hbar}{2}$ 进行计算.

解　已知雾滴的线度约为1μm，则 $\Delta x\approx 1\mu\mathrm{m}=10^{-4}\mathrm{cm}$，根据不确定关系

$$\Delta p\geqslant\frac{\hbar}{2\Delta x}=\frac{1.05\times10^{-27}\,\mathrm{erg\cdot s}}{2\times10^{-4}\,\mathrm{cm}}=5.25\times10^{-22}\,\mathrm{g\cdot cm\cdot s^{-1}}=5.25\times10^{-27}\,\mathrm{kg\cdot m\cdot s^{-1}},$$

$$E=1\mathrm{keV}=10^3\times1.6\times10^{-12}\,\mathrm{erg}=1.6\times10^{-9}\,\mathrm{erg}=1.6\times10^{-16}\,\mathrm{J},$$

$$E=\frac{p^2}{2\mu},\quad p^2=2\mu E=2\times9.1\times10^{-28}\text{g}\times1.6\times10^{-9}\text{erg}=2.9\times10^{-36}(\text{g}\cdot\text{cm}\cdot\text{s}^{-1})^2,$$

$$p=\sqrt{2.9\times10^{-36}}\,\text{g}\cdot\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}.$$

$$\frac{\Delta p}{p}=\frac{5.25\times10^{-22}\,\text{g}\cdot\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}}{\sqrt{2.9\times10^{-36}}\,\text{g}\cdot\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}}=3\times10^{-4}.$$

答　动量与经典力学动量的相对偏差不小于3×10^{-4}.

3.35　在一维对称无限深方势阱中，已知势阱宽度为$2a$，试用不确定关系估计零点能量.

分析　利用不确定关系$\Delta x\Delta p\geqslant\frac{\hbar}{2}$进行计算.

解　因位置不确定量$\Delta x=2a$，则动量不确定量

$$\Delta p\geqslant\frac{\hbar}{2\Delta x}=\frac{\hbar}{4a},\quad E=\frac{p^2}{2\mu},\quad E_g=\frac{(\Delta p)^2_{\min}}{2\mu}=\frac{\hbar^2}{32\mu a^2}.$$

答　零点能量为$\frac{\hbar^2}{32\mu a^2}$.

3.36　假定对粒子的动量测定可精确到千分之一，试确定这种粒子位置的最小不确定量. 如果(1) 粒子的质量为5×10^{-6}g，速度为$2\times10^2\,\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}$；(2) 速度为$1.8\times10^{10}\,\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}$的电子.

分析　利用不确定关系$\Delta x\Delta p\geqslant\frac{\hbar}{2}$进行计算.

解　(1) $m=5\times10^{-6}$g，$v=2\times10^2\,\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}$，则$p=mv=10^{-3}\,\text{g}\cdot\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}$，

$\Delta p=10^{-3}p=10^{-6}\,\text{g}\cdot\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}$，$\Delta x\geqslant\frac{\hbar}{2\Delta p}=\frac{1.05\times10^{-27}\,\text{erg}\cdot\text{s}}{2\times10^{-6}\,\text{g}\cdot\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}}=5\times10^{-22}\,\text{cm}$，

粒子位置的最小不确定量为5×10^{-22}cm.

(2) 电子的质量$\mu=9.1\times10^{-28}$g，速度$v=1.8\times10^{10}\,\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}$，则动量

$$p=\mu v=9.1\times10^{-28}\,\text{g}\times1.8\times10^{10}\,\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}=1.638\times10^{-17}\,\text{g}\cdot\text{cm}\cdot\text{s}^{-1},$$

$$\Delta p=10^{-3}p=1.638\times10^{-20}\,\text{g}\cdot\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}.$$

$$\Delta x\geqslant\frac{\hbar}{2\Delta p}=\frac{1.05\times10^{-27}\,\text{erg}\cdot\text{s}}{2\times1.64\times10^{-20}\,\text{g}\cdot\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}}=3.2\times10^{-8}\,\text{cm}.$$

电子位置的最小不确定量为3.2×10^{-8}cm.

答　(1) 粒子的质量为 $5\times10^{-6}\,\mathrm{g}$，速度为 $2\times10^{2}\,\mathrm{cm\cdot s^{-1}}$，粒子位置的最小不确定量为 $5\times10^{-22}\,\mathrm{cm}$；(2) 速度为 $1.8\times10^{10}\,\mathrm{cm\cdot s^{-1}}$ 的电子，位置的最小不确定量为 $3.2\times10^{-8}\,\mathrm{cm}$.

3.37　假定有一粒子的动量不确定量就等于它的动量，试求这粒子位置的最小不确定量与它的德布罗意波长的关系.

分析　利用不关确定关系 $\Delta x\Delta p\geqslant\dfrac{\hbar}{2}$.

解　已知 $\Delta p=p=\hbar\dfrac{2\pi}{\lambda}$，$\Delta x\geqslant\dfrac{\hbar}{2\Delta p}=\dfrac{\hbar}{2\hbar\dfrac{2\pi}{\lambda}}=\dfrac{\lambda}{4\pi}$，$(\Delta x)_{\min}=\dfrac{\lambda}{4\pi}$.

答　粒子位置的最小不确定量与它的德布罗意波长的关系为 $\dfrac{\lambda}{4\pi}$.

3.38　一维自由运动粒子，在 $t=0$ 时状态为一高斯型波包 $\Psi(x,0)=N\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2a^2}}$，求在 $t>0$ 时，

(1) 粒子的状态 $\Psi(x,t)$；(2) 粒子坐标的概率密度分布；(3) 粒子动量的概率密度分布；(4) 坐标和动量的平均值；(5) 概率流密度.

分析　$\Psi(x,t)$ 满足 $-\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\Psi(x,t)=\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)$，$\Psi(x,t)=\psi(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}$，

$-\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x)=E\psi(x)=\dfrac{p^2}{2\mu}\psi(x)$，$\psi_p(x)=C\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}$，由 $\int\mathrm{d}x\psi_p^*(x)\psi_{p_1}(x)=\delta(p-p_1)$，得

$$\psi_p(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}.$$

$$\Psi(x,t)=\int\mathrm{d}p\Phi(p)\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(px-\frac{p^2t}{2\mu}\right)},\quad \Psi(x,0)=\int\mathrm{d}p\Phi(p)\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}.$$

解　(1) 已知 $\Psi(x,0)=N\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2a}}$，由 $\langle\Psi(0)|\Psi(0)\rangle=1$，得 $N=\dfrac{1}{\sqrt[4]{\pi a^2}}$，

$$\Psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt[4]{\pi a^2}}\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2a}}.$$

$$\Phi(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{i}{\hbar}px}\Psi(x,0)dx=\frac{1}{\sqrt[4]{\pi a^2}\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{1}{2a^2}\left[x^2+2a^2\frac{i}{\hbar}px+\left(a^2\frac{i}{\hbar}p\right)^2-\left(a^2\frac{i}{\hbar}p\right)^2\right]}dx$$

$$=\frac{1}{\sqrt[4]{\pi a^2}\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-\frac{1}{2a^2}\left(a^2\frac{1}{\hbar}p\right)^2}\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\frac{1}{2a^2}}}=\frac{\sqrt{a}}{\sqrt[4]{\pi\hbar^2}}e^{-\frac{a^2p^2}{2\hbar^2}},$$

(3.38-1)

$$\Psi(x,t)=\frac{\sqrt{a}}{\sqrt[4]{\pi\hbar^2}}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}dpe^{-\frac{a^2p^2}{2\hbar^2}}e^{\frac{i}{\hbar}\left(px-\frac{p^2}{2\mu}t\right)}=\frac{\sqrt{a}}{\hbar\sqrt[4]{\pi}}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dpe^{-p^2\left[\frac{a^2}{2\hbar^2}+i\frac{t}{2\mu\hbar}\right]}e^{\frac{i}{\hbar}px}.$$

式中，积分

$$I=\int_{-\infty}^{\infty}dpe^{-\frac{\left(a^2+i\frac{\hbar}{\mu}t\right)}{2\hbar^2}\left[p^2+2\frac{\hbar^2}{a^2+i\frac{\hbar}{\mu}t}\frac{i}{\hbar}px+\left(\frac{i\hbar x}{a^2+i\frac{\hbar}{\mu}t}\right)^2-\left(\frac{i\hbar x}{a^2+i\frac{\hbar}{\mu}t}\right)^2\right]}=\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\frac{\left(a^2+i\frac{\hbar}{\mu}t\right)}{2\hbar^2}}}e^{\frac{\left(a^2+i\frac{\hbar}{\mu}t\right)}{2\hbar^2}\left(\frac{\hbar x}{a^2+i\frac{\hbar}{\mu}t}\right)^2}$$

$$=\frac{\sqrt{2\hbar^2\pi}}{\sqrt{a^2+i\frac{\hbar}{\mu}t}}e^{-\frac{x^2}{2\left(a^2+i\frac{\hbar}{\mu}t\right)}},$$

则

$$\Psi(x,t)=\frac{\sqrt{a}}{\hbar\sqrt[4]{\pi}}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{\sqrt{2\hbar^2\pi}}{\sqrt{a^2+i\frac{\hbar}{\mu}t}}e^{-\frac{x^2}{2\left(a^2+i\frac{\hbar}{\mu}t\right)}}=\frac{\sqrt{a}}{\sqrt[4]{\pi}\sqrt{a^2+i\frac{\hbar}{\mu}t}}e^{-\frac{x^2}{2\left(a^2+i\frac{\hbar}{\mu}t\right)}}.\qquad(3.38\text{-}2)$$

(2) 粒子坐标的概率密度分布

$$P(x,t)=\frac{a}{\sqrt{\pi\left(a^4+\frac{\hbar^2t^2}{\mu^2}\right)}}e^{-\frac{a^2x^2}{\left(a^4+\frac{\hbar^2}{\mu^2}t^2\right)}}.\qquad(3.38\text{-}3)$$

(3) 粒子动量的概率密度分布

在式(3.38-1)中已算出，

$$\Phi(p)=\frac{\sqrt{a}}{\sqrt[4]{\pi\hbar^2}}\mathrm{e}^{-\frac{a^2p^2}{2\hbar^2}}\quad,\quad \Phi(p,t)=\Phi(p)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p^2}{2\mu}t}\quad,\quad \text{所以},\quad |\Phi(p,t)|^2=|\Phi(p)|^2=\frac{a}{\hbar\sqrt{\pi}}\mathrm{e}^{-\frac{a^2p^2}{\hbar^2}}.$$

(4) 坐标和动量的平均值

$$\langle x\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}P(x,t)x\mathrm{d}x=\frac{a}{\sqrt{\pi\left(a^4+\dfrac{\hbar^2t^2}{\mu^2}\right)}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x x\mathrm{e}^{-\frac{a^2x^2}{a^4+\frac{\hbar^2t^2}{\mu^2}}}=0.$$

因为奇函数在对称区间的积分为零.

$$\langle p\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}p|\Phi(p,t)|^2\,\mathrm{d}p=\int_{-\infty}^{\infty}\left[\frac{a}{\hbar\sqrt{\pi}}\mathrm{e}^{-\frac{a^2p^2}{\hbar^2}}p\right]\mathrm{d}p=0.$$

(5) 概率流密度

一维运动的概率流密度

$$j_x=\frac{\hbar}{2\mu\mathrm{i}}\left(\Psi^*\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Psi-\Psi\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Psi^*\right)=\frac{\hbar}{2\mu\mathrm{i}}\Psi^*\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Psi+\text{c.c.}$$

式中，c.c. 表示前式的共轭.

已知 $\Psi(x,t)=\sqrt[4]{\dfrac{a^2}{\pi}}\dfrac{1}{\sqrt{a^2+\mathrm{i}\dfrac{\hbar}{\mu}t}}\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2\left(a^2+\mathrm{i}\frac{\hbar}{\mu}t\right)}}$，则有

$$j_x=\frac{\hbar}{2\mu\mathrm{i}}\left\{\sqrt[4]{\frac{a^2}{\pi}}\frac{1}{\sqrt{a^2-\mathrm{i}\frac{\hbar}{\mu}t}}\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2\left(a^2-\mathrm{i}\frac{\hbar}{\mu}t\right)}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[\sqrt[4]{\frac{a^2}{\pi}}\frac{1}{\sqrt{a^2+\mathrm{i}\frac{\hbar}{\mu}t}}\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2\left(a^2+\mathrm{i}\frac{\hbar}{\mu}t\right)}}\right]+\text{c.c.}\right.$$

$$=\frac{\hbar}{2\mu\mathrm{i}}\left[\sqrt{\frac{a^2}{\pi}}\frac{1}{\sqrt{a^4+\left(\dfrac{\hbar}{\mu}t\right)^2}}\frac{-2x}{2\left(a^2+\mathrm{i}\dfrac{\hbar}{\mu}t\right)}\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2}\left(\frac{1}{a^2-\mathrm{i}\frac{\hbar}{\mu}t}+\frac{1}{a^2+\mathrm{i}\frac{\hbar}{\mu}t}\right)}\right]+\text{c.c.}$$

$$=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2\mu}\left[\sqrt{\frac{a^2}{\pi}}\frac{1}{\sqrt{a^4+\left(\frac{\hbar}{\mu}t\right)^2}}\frac{x}{\left(a^2+\mathrm{i}\frac{\hbar}{\mu}t\right)}\mathrm{e}^{\frac{a^2x^2}{a^4+\left(\frac{\hbar}{\mu}t\right)^2}}+\text{c.c.}\right]$$

$$=\frac{\mathrm{i}\hbar x}{2\mu}\left[\sqrt{\frac{a^2}{\pi}}\frac{1}{\sqrt{a^4+\left(\frac{\hbar}{\mu}t\right)^2}}\frac{a^2-\mathrm{i}\frac{\hbar}{\mu}t}{a^4+\left(\frac{\hbar}{\mu}t\right)^2}\mathrm{e}^{\frac{a^2x^2}{a^4+\left(\frac{\hbar}{\mu}t\right)^2}}+\text{c.c.}\right]$$

$$=\frac{\hbar x}{2\mu}\left[\sqrt{\frac{a^2}{\pi}}\frac{1}{\sqrt{a^4+\left(\frac{\hbar}{\mu}t\right)^2}}\frac{\frac{\hbar}{\mu}t}{a^4+\left(\frac{\hbar}{\mu}t\right)^2}\mathrm{e}^{\frac{a^2x^2}{a^4+(\frac{\hbar}{\mu}t)^2}}\times 2\right]$$

$$=\frac{\hbar^2xat}{\mu^2\sqrt{\pi}}\frac{1}{\left[a^4+\left(\frac{\hbar}{\mu}t\right)^2\right]^{\frac{3}{2}}}\mathrm{e}^{\frac{a^2x^2}{a^4+\left(\frac{\hbar}{\mu}t\right)^2}}.$$

答　(1) 粒子的状态 $\Psi(x,t)=\dfrac{\sqrt{a}}{\sqrt[4]{\pi}\sqrt{a^2+\mathrm{i}\frac{\hbar}{\mu}t}}\mathrm{e}^{\frac{x^2}{2\left(a^2+\mathrm{i}\frac{\hbar}{\mu}t\right)}}$；(2) 粒子坐标的概率密度分布 $P(x,t)=\dfrac{a}{\sqrt{\pi\left(a^4+\frac{\hbar^2t^2}{\mu^2}\right)}}\mathrm{e}^{\frac{a^2x^2}{\left(a^4+\frac{\hbar^2}{\mu^2}t^2\right)}}$；(3) 粒子动量的概率密度分布 $|\Phi(p,t)|^2=\dfrac{a}{\hbar\sqrt{\pi}}\mathrm{e}^{\frac{a^2p^2}{\hbar^2}}$；(4) 坐标和动量的平均值都为 0；(5) 概率流密度为 $j_x=\dfrac{\hbar^2xat}{\mu^2\sqrt{\pi}}\dfrac{1}{\left[a^4+\left(\frac{\hbar}{\mu}t\right)^2\right]^{\frac{3}{2}}}\mathrm{e}^{\frac{a^2x^2}{a^4+\left(\frac{\hbar}{\mu}t\right)^2}}$.

3.39　如果类氢原子的哈密顿量 $H=\sqrt{c^2p^2+\mu_0^2c^4}-\mu_0c^2-\dfrac{Ze^2}{r}$，试应用不确定关系估计它的基态能.

分析　利用类氢原子的球对称性，得 $x_1\approx x_2\approx x_3$，$p_1\approx p_2\approx p_3$，$\Delta x_1=\Delta x_2=\Delta x_3$，$\Delta p_1=\Delta p_2=\Delta p_3$ 则 $\sqrt{x_1^2+x_2^2+x_3^2}=\sqrt{3}\Delta x_1$，$p^2=p_1^2+p_2^2+p_3^2=3(\Delta p_1)^2$.

解　已知

$$H=\sqrt{c^2p^2+\mu_0^2c^4}-\mu_0c^2-\frac{Ze^2}{\sqrt{x_1^2+x_2^2+x_3^2}}, \tag{3.39-1}$$

由于自由空间有球对称性，可以估计 $x_1\approx x_2\approx x_3$，$p_1\approx p_2\approx p_3$，在原子核的库仑势作用下，价电子作某个平面的圆周运动，可看作平面上两个相互垂直的谐振动的合成. 对于基态的零点振动，可估计：$\Delta p_i\approx p_i$，$\Delta p_1=\Delta p_2=\Delta p_3$，于是对基态，

$$H=\sqrt{3c^2(\Delta p_1)^2+\mu_0^2c^4}-\mu_0c^2-\frac{Ze^2}{\sqrt{3}\Delta x_1}. \tag{3.39-2}$$

考虑到不确定关系：$\Delta p_i\geqslant\dfrac{\hbar}{2\Delta x_i}$，$i=1,2,3,\cdots$，至少 $\Delta p_i=\dfrac{\hbar}{2\Delta x_i}$，故有

$$H=\sqrt{3c^2\left(\frac{\hbar}{2\Delta x_1}\right)^2+\mu_0^2c^4}-\mu_0c^2-\frac{Ze^2}{\sqrt{3}\Delta x_1},$$

使 H 最小的 Δx_1 满足

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}(\Delta x_1)}H=\frac{3c^2\left(\dfrac{\hbar}{2}\right)^2(-2)\dfrac{1}{(\Delta x_1)^3}}{2\sqrt{3c^2\left(\dfrac{\hbar}{2\Delta x_1}\right)^2+\mu_0^2c^4}}+\frac{Ze^2}{\sqrt{3}(\Delta x_1)^2}=0,\quad \frac{\left[3c^2\left(\dfrac{\hbar}{2}\right)^2\right]^2}{3c^2\left(\dfrac{\hbar}{2\Delta x_1}\right)^2+\mu_0^2c^4}=\frac{[Ze^2\Delta x_1]^2}{3},$$

$$(\Delta x_1)^2=\frac{27\hbar^4}{16(Ze^2)^2\mu_0^2}-\frac{3\hbar^2}{4\mu_0^2c^2}. \tag{3.39-3}$$

$$H_{\min}=\sqrt{\frac{3\hbar^2c^2}{4}\frac{1}{\dfrac{27\hbar^4}{16(Ze^2)^2\mu_0^2}-\dfrac{3\hbar^2}{4\mu_0^2c^2}}+\mu_0^2c^4}-\mu_0c^2-\frac{Ze^2}{\sqrt{3\left[\dfrac{27\hbar^4}{16(Ze^2)^2\mu_0^2}-\dfrac{3\hbar^2}{4\mu_0^2c^2}\right]}}.$$

答　基态能为 $H_{\min}=\sqrt{\dfrac{3\hbar^2c^2}{4}\dfrac{1}{\dfrac{27\hbar^4}{16(Ze^2)^2\mu_0^2}-\dfrac{3\hbar^2}{4\mu_0^2c^2}}+\mu_0^2c^4}-\mu_0c^2-$

$$\frac{Ze^2}{\sqrt{3\left[\dfrac{27\hbar^4}{16(Ze^2)^2\mu_0^2}-\dfrac{3\hbar^2}{4\mu_0^2c^2}\right]}}.$$

3.40　求解二维各向同性谐振子的能级和定态波函数.

分析　从二维各向同性谐振子哈密顿量计算能级的简并度，用极坐标系计算系统能级与波函数.

解　(1) 采用平面直角坐标系，哈密顿量

$$\hat{H}=\frac{1}{2\mu}[\hat{p}_1^2+\hat{p}_2^2]+\frac{1}{2}\mu\omega^2[x_1^2+x_2^2], \tag{3.40-1}$$

$$\hat{H}\psi(x_1,x_2)=E\psi(x_1,x_2).$$

由于 $\hat{H}$ 中不存在 x_1 和 x_2 的纠缠项，令 $E=E_1+E_2$，可用分离变量法求解两个独立的谐振子

$$\hat{H}_1=\frac{1}{2\mu}\hat{p}_1^2+\frac{1}{2}\mu\omega^2x_1^2,\quad \hat{H}_2=\frac{1}{2\mu}\hat{p}_2^2+\frac{1}{2}\mu\omega^2x_2^2, \tag{3.40-2}$$

$$\hat{H}_1\psi^{(1)}(x_1)=E_1\psi^{(1)}(x_1),\quad \hat{H}_1\psi^{(2)}(x_2)=E_1\psi^{(2)}(x_2), \tag{3.40-3}$$

$$\psi(x_1,x_2)=\psi^{(1)}(x_1)\psi^{(2)}(x_2)=\psi_{n_1}^{(1)}(x_1)\psi_{n_2}^{(2)}(x_2), \tag{3.40-4}$$

$$E_1=E_{n_1}=\hbar\omega\left(n_1+\frac{1}{2}\right),\quad E_2=E_{n_2}=\hbar\omega\left(n_2+\frac{1}{2}\right), \tag{3.40-5}$$

$$\psi_n(x)=\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\frac{\mu\omega}{\hbar}x^2}H_n\left(\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}x\right), \tag{3.40-6}$$

$$E=\hbar\omega(n_1+n_2+1). \tag{3.40-7}$$

令 $n_1+n_2=n$，$E_n=\hbar\omega(n+1)$ 的简并度为 $f=n+1$，因为 n_1 可以取 $0,1,2,\cdots,n$ 共有 $n+1$ 种取法.

(2) 取平面极坐标 (ρ,φ)

$$\hat{H}=\frac{-\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right)+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}\right]+\frac{1}{2}\mu\omega^2\rho^2, \tag{3.40-8}$$

$$\hat{L}_3=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\rho}, \tag{3.40-9}$$

由于 $[\hat{L}_3,\hat{H}]=0$，$\hat{H}$ 和 $\hat{L}_3$ 有共同的本征函数系. 已知 $\hat{L}_3\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}=m\hbar\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}$，所以

$$\psi(\rho,\varphi)=R(\rho)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\ ,\quad m=0,\pm1,\pm2,\cdots \tag{3.40-10}$$

将$\psi(\rho,\varphi)$代入$\hat{H}\psi(\rho,\varphi)=E\psi(\rho,\varphi)$，得到

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{m^2}{\rho^2}\right]R(\rho)+\frac{1}{2}\mu\omega^2\rho^2R(\rho)=ER(\rho)\ , \tag{3.40-11}$$

即

$$\frac{\mathrm{d}^2R}{\mathrm{d}\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}\rho}+\left[\frac{2\mu}{\hbar^2}E-\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)^2\rho^2-\frac{m^2}{\rho^2}\right]R=0\ , \tag{3.40-12}$$

对于一维束缚态，$R(\rho)$是实函数，由归一化条件

$$\int_0^\infty R^2(\rho)\rho\mathrm{d}\rho=1\ , \tag{3.40-13}$$

要求

$$R(\rho)\sqrt{\rho}\xrightarrow{\rho\to0}0\ ,\quad R(\rho)\sqrt{\rho}\xrightarrow{\rho\to\infty}0\ , \tag{3.40-14}$$

为了便于用幂级数方法求解方程(3.40-12)引进量纲为一的距离t和量纲为一的能量ε，且

$$t=\alpha\rho\ ,\quad E=\varepsilon\hbar\omega\ ,$$

式中系数α待定，但其量纲为长度的倒数，用$\frac{1}{\alpha^2}$乘以方程式(3.40-13)，并取$\alpha=\sqrt{\frac{\mu\alpha}{\hbar}}$，使方程简化，得到

$$\frac{\mathrm{d}^2R(t)}{\mathrm{d}t^2}+\frac{1}{t}\frac{\mathrm{d}R(t)}{\mathrm{d}t}+\left(2\varepsilon-t^2-\frac{m^2}{t^2}\right)R(t)=0\ , \tag{3.40-15}$$

$t\to\infty$是以上方程的本性奇点，作$y=\frac{1}{t}$的变换，不难判断$y=0$是方程的本性奇点，所以$t\to\infty$时，方程的通解肯定是发散的，能否有一个收敛的特解，需要研究$t\to\infty$时方程的渐近性质，渐近方程为

$$\frac{\mathrm{d}^2R(t)}{\mathrm{d}t^2}-t^2R(t)=0\ , \tag{3.40-16}$$

不难验证其近似解为$\mathrm{e}^{\pm\frac{1}{2}t^2}$，的确

$$\frac{\mathrm{d}^2\mathrm{e}^{\pm\frac{1}{2}t^2}}{\mathrm{d}t^2}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\pm\mathrm{e}^{\pm\frac{1}{2}t^2}t\right]=\mathrm{e}^{\pm\frac{1}{2}t^2}(\pm t)^2\pm\mathrm{e}^{\pm\frac{1}{2}t^2}=\mathrm{e}^{\pm\frac{1}{2}t^2}(t^2-1)\ , \tag{3.40-17}$$

当$t\to\infty$时，式(3.40-16)变成$\dfrac{\mathrm{d}^2\mathrm{e}^{\pm\frac{1}{2}t^2}}{\mathrm{d}t^2}=t^2\mathrm{e}^{\pm\frac{1}{2}t^2}$，收敛则取$\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}t^2}$因子，对$t$的整个区间作变换，有

$$R(t)=\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}t^2}G(t)\,, \tag{3.40-18}$$

归一化条件变成

$$\frac{1}{\alpha^2}\int_0^\infty \mathrm{e}^{-t^2}G^2(t)t\mathrm{d}t=1\,, \tag{3.40-19}$$

将式(3.40-18)代入式(3.40-15)，得到$G(t)$满足的方程为

$$\frac{\mathrm{d}^2G}{\mathrm{d}t^2}+\left(\frac{1}{t}-2t\right)\frac{\mathrm{d}G}{\mathrm{d}t}+\left(2\varepsilon-2-\frac{m^2}{t^2}\right)G(t)=0\,, \tag{3.40-20}$$

因$t=0$是式(3.40-20)的正则奇点，令

$$G(t)=t^su(t)=t^s\sum_{j=0}^{\infty}a_jt_j\,, \tag{3.40-21}$$

则s满足指标方程，

$$s(s-1)+s-m^2=0\,,$$

其根为$s=\pm m$，取s大的值，则$s=|m|$，

$$G(t)=t^{|m|}u(t)\,, \tag{3.40-22}$$

将式(3.40-22)代入式(3.40-20)，得到$u(t)$满足方程

$$\frac{\mathrm{d}^2[t^{|m|}u(t)]}{\mathrm{d}t^2}+\left(\frac{1}{t}-2t\right)\frac{\mathrm{d}[t^{|m|}u(t)]}{\mathrm{d}t}+\left(2\varepsilon-2-\frac{m^2}{t^2}\right)[t^{|m|}u(t)]=0\,,$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left\{|m|t^{|m|-1}u(t)+t^{|m|}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}u(t)\right\}+\left(\frac{1}{t}-2t\right)\left\{|m|t^{|m|-1}u(t)+t^{|m|}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}u(t)\right\}$$
$$+\left(2\varepsilon-2-\frac{m^2}{t^2}\right)[t^{|m|}u(t)]=0,$$

$$|m|(|m|-1)t^{|m|-2}u(t)+2|m|t^{|m|-1}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}u(t)+t^{|m|}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}u(t)$$
$$+\left(\frac{1}{t}-2t\right)\left\{|m|t^{|m|-1}u(t)+t^{|m|}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}u(t)\right\}+\left(2\varepsilon-2-\frac{m^2}{t^2}\right)[t^{|m|}u(t)]=0,$$

$$\frac{|m|(|m|-1)}{t^2}u(t)+\frac{2|m|}{t}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}u(t)+\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}u(t)+\left(\frac{1}{t}-2t\right)\frac{|m|}{t}u(t)+\left(\frac{1}{t}-2t\right)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}u(t)$$
$$+\left(2\varepsilon-2-\frac{m^2}{t^2}\right)u(t)=0,$$

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}u(t)+\left(\frac{2|m|+1}{t}-2t\right)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}u(t)+2(\varepsilon-1-|m|)u(t)=0\ , \tag{3.40-23}$$

令 $t=\sqrt{\xi}$，则 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}u(t)=\dfrac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}t}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}=2t\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}=2\sqrt{\xi}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}$，$\dfrac{1}{t}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}=2\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}$，

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}=2\sqrt{\xi}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left(2\sqrt{\xi}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)=4\xi\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}+2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\ ,$$

将这些等式代入式(3.40-23)，得

$$\xi\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}u(t)+(|m|+1-\xi)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}u(t)-\frac{1}{2}(|m|+1-\varepsilon)u(t)=0\ , \tag{3.40-24}$$

由于 $\xi=0$ 是式(3.40-24)的正则奇点，令

$$u(\xi)=\xi^s F(\xi)=\xi^s\sum_{j=0}^{\infty}a_j\xi^j\ , \tag{3.40-25}$$

则 s 满足指标方程

$$s(s-1)+(|m|+1)s=0\ ,$$

其根为 $s=0,-|m|$，为保证 $\xi=0$ 时 $u(\xi)$ 的收敛性，应取 $s=0$，将

$$u(\xi)=\sum_{j=0}^{\infty}a_j\xi^j\ ,$$

代入方程(3.40-24)，得

$$a_{j+1}=\frac{j+\dfrac{1}{2}(|m|+1-\varepsilon)}{j^2+(|m|+2)j+|m|+1}a_j\ , \tag{3.40-26}$$

由 $\lim\limits_{j\to\infty}\dfrac{a_{j+1}}{a_j}\to\dfrac{1}{j}$，可知 $\xi\to\infty$ 时，$u(\xi)\to\mathrm{e}^{\xi}$，于是 $\xi\to\infty$，$R=\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi}\xi^{\frac{|m|}{2}}u(\xi)$ 不趋向于零，除非 $u(\xi)$ 退化为 n_r 次多项式，由式(3.40-26)得 $\varepsilon=2n_r+|m|+1$，即

$$E=\hbar\omega(2n_r+|m|+1)=\hbar\omega(N+1)\ , \tag{3.40-27}$$

式中 $N=2n_r+|m|$. 将式(3.40-24)与拉盖尔方程

$$\rho\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}\mathrm{L}_{n_r}^{\mu}+(\mu+1-\rho)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\mathrm{L}_{n_r}^{\mu}+n_r\mathrm{L}_{n_r}^{\mu}=0\ ,$$

作对比，可见 $\mu=|m|$，$n_r=\dfrac{1}{2}(\varepsilon-|m|-1)$，$n_r=0,1,2,\cdots$，即 $u=\mathrm{L}_{n_r}^{|m|}$ 是关联拉盖尔多项式，可将 (N,m) 作为决定状态的量子数，现在讨论 N 确定时，能级的简并度.

当 $N=0$ 时，必有 $n_r=0$，$|m|=0$，即 $m=0$，简并度 $f=1=N+1$；

当 $N=1$ 时，必有 $n_r=0$，$|m|=1$，即 $m=\pm1$，简并度 $f=2=N+1$；

当 $N=2$ 时，n_r 可取 0 或者 1，则 $|m|=2$ 或者 0，即 $m=\pm2$ 或者 0，简并度 $f=3=N+1$；

当 N 为偶数时，n_r 可取 $0,1,\cdots,\dfrac{N-2}{2},\dfrac{N}{2}$，则 $|m|$ 相应地可取 $N,N-2,\cdots,2,0$，即 m 相应地可取 $\pm N,\pm(N-2),\pm(N-4),\cdots,\pm2,0$，简并度 $f=\dfrac{N}{2}\times2+1=N+1$；

当 N 为奇数时，n_r 可取 $0,1,\cdots,\dfrac{N-1}{2}$，则 $|m|$ 相应地可取 $N,N-2,\cdots,1$，即 m 相应地可取 $\pm N,\pm(N-2),\pm(N-4),\cdots,\pm1$，简并度 $f=\left(\dfrac{N-1}{2}+1\right)\times2=N+1$.

总之，不管 N 是奇数还偶数，简并度 $f=N+1$，这和在直角坐标系中求解的结果一样，最后的结果写成

$$E_{n_r,m}=\hbar\omega(2n_r+|m|+1)=(N+1)\hbar\omega\,, \tag{3.40-28}$$

$$\psi_{n_r,m}=C_{n_r,m}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi}\xi^{\frac{|m|}{2}}\mathrm{L}_{n_r}^{|m|}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}}{\sqrt{2\pi}}\,, \tag{3.40-29}$$

式中，$\xi=(\alpha\rho)^2$，$\alpha=\sqrt{\dfrac{\mu\omega}{\hbar}}$，$C_{n_r,m}$ 是归一化系数，满足

$$C_{n_r,m}^2\int_0^\infty\mathrm{e}^{-\xi}\xi^{|m|}\mathrm{L}_{n_r}^{|m|}(\xi)\mathrm{L}_{n_r}^{|m|}(\xi)\rho\mathrm{d}\rho=1\,, \tag{3.40-30}$$

在蔡建华编《量子力学》附录①中有

$$\int_0^\infty\mathrm{d}\rho\rho^\mu\mathrm{e}^{-\rho}\mathrm{L}_{n_r}^{\mu}(\rho)\mathrm{L}_{n_{1r}}^{\mu}(\rho)=\frac{[(\mu+n_r)!]^3}{n_{1r}}\delta_{n_r,n_{1r}}\,, \tag{3.40-31}$$

在式(3.40-30)中，$\rho\mathrm{d}\rho-\dfrac{1}{2}\mathrm{d}\rho^2=\dfrac{1}{2\alpha^2}\mathrm{d}\xi$，$|m|=\mu$，则

$$C_{n_r,m}^2\frac{1}{2\alpha^2}\frac{[(|m|+n_r)!]^3}{n_r!}=1$$

即

$$C_{n_r,m}=\sqrt{\frac{2\alpha^2n_r!}{[(|m|+n_r)!]^3}}\,.$$

答　二维各向同性谐振子的能级为 $(N+1)\hbar\omega$，定态波函数为

$$\psi_{n_r,m}=\sqrt{\frac{2\alpha^2n_r!}{[(|m|+n_r)!]^3}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi}\xi^{\frac{|m|}{2}}\mathrm{L}_{n_r}^{|m|}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}}{\sqrt{2\pi}}\,.$$

3.41　粒子在势场 $V(\rho)=-\dfrac{Ze^2}{\rho}$ 中运动(二维类氢原子问题)，求束缚能级和本征波函数及其简并度.

分析　对于二维类氢原子问题采用平面极坐标系求解薛定谔方程，求出径向波函数，确定本征值与简并度.

解　采用平面极坐标系 (ρ,φ)

$$V(\rho)=-\frac{Ze^2}{\rho},\quad \rho=\sqrt{x^2+y^2}\ , \tag{3.41-1}$$

$$\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2},\quad \hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)-\frac{Ze^2}{\rho}, \tag{3.41-2}$$

$$\hat{H}\psi(\rho,\varphi)=E\psi(\rho,\varphi)\ , \tag{3.41-3}$$

对束缚态 $E<0$，$\rho\to\infty$，$\psi(\rho,\varphi)\to 0$，参阅蔡建华编，《量子力学》第二版，北京：高等教育出版社，1999，附录式(Ⅴ.13)，考虑到 $\hat{L}_3=\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\partial}{\partial\varphi}$，则有

$$[\hat{L}_3,\hat{H}]=0\ , \tag{3.41-4}$$

这意味着 $\hat{H}$ 和 $\hat{L}_3$ 有共同的本征函数系，已知

$$\hat{L}_3\Phi_m(\varphi)=m\hbar\Phi_m(\varphi)\ ,\quad \Phi_m(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\ ,\quad m=0,\pm1,\pm2,\cdots, \tag{3.41-5}$$

则有

$$\psi(\rho,\varphi)=R(\rho)\psi(\varphi)\ , \tag{3.41-6}$$

将式(3.41-6)代入式(3.41-3)，得到 $R(\rho)$ 满足的方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}-\frac{m^2}{\rho^2}\right)R(\rho)-\frac{2e^2}{\rho}R(\rho)=ER(\rho)\ ,\quad E<0\ , \tag{3.41-7}$$

由于一维束缚态的波函数是实的，归一化条件为

$$\int_0^\infty R(\rho)R(\rho)\rho\mathrm{d}\rho=1\ , \tag{3.41-8}$$

这要求

$$\sqrt{\rho}R(\rho)\xrightarrow{\rho\to0}0\ ,\quad \sqrt{\rho}R(\rho)\xrightarrow{\rho\to\infty}0\ , \tag{3.41-9}$$

将 $R(s)=\dfrac{u(\rho)}{\sqrt{\rho}}$ 代入式(3.41-7)，得到 $u(\rho)$ 满足的方程

$$\hat{H}_{\mathrm{eff}}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}-\frac{m^2-\dfrac{1}{4}}{\rho^2}\right)-\frac{Ze^2}{\rho}\ , \tag{3.41-10}$$

式中 $\hat{H}_{\text{eff}}u(\rho)=Eu(\rho)$，$E<0$.

将式(3.41-8)和式(3.41-9)，改用$u(\rho)$来表示

$$\int_0^\infty u(\rho)u(\rho)\mathrm{d}\rho=1\ ,\quad u(\rho)\xrightarrow{\rho\to 0}0\ ,\quad u(\rho)\xrightarrow{\rho\to\infty}0\ .$$

为了便于对方程式(3.41-10)作幂级数求解，先引入量纲为一的变量$\xi=\alpha\rho$，

$\alpha=\sqrt{\dfrac{-8\mu E}{\hbar^2}}$，$E=-\dfrac{Z^2e^2}{2a_0}\varepsilon=-\dfrac{Z^2e^2}{2a_0}\dfrac{1}{n^2}$，

式中，$\varepsilon=\dfrac{1}{n^2}$是量纲为一的距离和能量，$a_0=\dfrac{\hbar^2}{\mu e^2}$是玻尔半径，用$\dfrac{1}{\alpha^2}$乘以方程式(3.41-10)，得

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}-\frac{m^2-\frac{1}{4}}{\xi^2}\right)u(\xi)+\left(\frac{n}{\xi}-\frac{1}{4}\right)u(\xi)=0\ ,\tag{3.41-11}$$

由于是方程的本性奇点，式(3.41-11)的通解在$\xi\to\infty$时必定是发散的，是否可能有一个特解在$\xi\to\infty$仍然是收敛的呢？为此，先研究$\xi\to\infty$时解的渐近行为：当$\xi\to\infty$时，渐近方程为

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}u(\xi)-\frac{1}{4}u(\xi)=0\ ,\tag{3.41-12}$$

其渐近解为

$$u(\xi)=\mathrm{e}^{\pm\frac{\xi}{2}}\ ,\tag{3.41-13}$$

丢掉在$\xi\to\infty$处发散的特解，取$u(\xi)=\mathrm{e}^{-\frac{\xi}{2}}$，对$\xi$的全部区间$0\leqslant\xi<\infty$作变换

$$u(\xi)=\mathrm{e}^{-\frac{\xi}{2}}F(\xi)\ ,\tag{3.41-14}$$

将式(3.41-14)代入式(3.41-11)，得到$F(\xi)$满足的方程

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}-\frac{m^2-\frac{1}{4}}{\xi^2}\right)\mathrm{e}^{-\frac{\xi}{2}}F(\xi)+\left(\frac{n}{\xi}-\frac{1}{4}\right)\mathrm{e}^{-\frac{\xi}{2}}F(\xi)=0\ ,$$

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}\left[\mathrm{e}^{-\frac{\xi}{2}}F(\xi)\right]-\frac{m^2-\frac{1}{4}}{\xi^2}\mathrm{e}^{-\frac{\xi}{2}}F(\xi)+\left(\frac{n}{\xi}-\frac{1}{4}\right)\mathrm{e}^{-\frac{\xi}{2}}F(\xi)=0\ ,$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left\{-\frac{1}{2}\mathrm{e}^{-\frac{\xi}{2}}F(\xi)+\mathrm{e}^{-\frac{\xi}{2}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}F(\xi)\right\}-\frac{m^2-\frac{1}{4}}{\xi^2}\mathrm{e}^{-\frac{\xi}{2}}F(\xi)+\left(\frac{n}{\xi}-\frac{1}{4}\right)\mathrm{e}^{-\frac{\xi}{2}}F(\xi)=0\ ,$$

$$\left(-\frac{1}{2}\right)^2 \mathrm{e}^{-\frac{\xi}{2}}F(\xi)-\mathrm{e}^{-\frac{\xi}{2}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}F(\xi)+\mathrm{e}^{-\frac{\xi}{2}}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}F(\xi)-\frac{m^2-\frac{1}{4}}{\xi^2}\mathrm{e}^{-\frac{\xi}{2}}F(\xi)$$
$$+\left(\frac{n}{\xi}-\frac{1}{4}\right)\mathrm{e}^{-\frac{\xi}{2}}F(\xi)=0,$$

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}F(\xi)-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}F(\xi)+\left[\frac{n}{\xi}-\frac{m^2-\frac{1}{4}}{\xi^2}\right]F(\xi)=0\,, \tag{3.41-15}$$

由于 $\xi=0$ 是方程式(3.41-15)的正则奇点，令

$$F(\xi)=\xi^s L(\xi)=\xi^s\sum_{j=0}^{\infty}a_j\xi^j-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}F(\xi)+\left[\frac{n}{\xi}-\frac{m^2-\frac{1}{4}}{\xi^2}\right]F(\xi)=0\,, \tag{3.41-16}$$

则 s 满足的指标方程为

$$s(s-1)+\frac{1}{4}-m^2=0\,, \tag{3.41-17}$$

其根为

$$s_1=\frac{1}{2}+|m|\,,\quad s_2=\frac{1}{2}-|m|\,, \tag{3.41-18}$$

因为 $s_1-s_2=2|m|$，两根这差为整数，故只能取大的根 $s_1=\frac{1}{2}+|m|$，否则 $\xi\to 0$ 时 $F(\xi)$ 将发散，将

$$F(\xi)=\xi^{\frac{1}{2}+|m|}L(\xi)\,, \tag{3.41-19}$$

代入式(3.41-15)得到 $L(\xi)$ 满足的方程

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}L+\left(\frac{1+2|m|}{\xi}-1\right)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}L+\left[\frac{n-\left(|m|+\frac{1}{2}\right)}{\xi}\right]L=0\,, \tag{3.41-20}$$

这是拉盖尔方程

$$\xi\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}L+(\mu+1-\xi)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}L+n_r L=0 \tag{3.41-21}$$

的一种特殊情形，其中 $\mu=2|m|$，$n_r=n-\left(|m|+\frac{1}{2}\right)$，将 $L=\sum_{j=0}^{\infty}a_j\xi^j$ 代入式(3.41-20)，比较 ξ^j 的系数，得

$$a_{j+1}=\frac{j-n_r}{(j+1)(j+\mu+1)}a_j\ , \tag{3.41-22}$$

当 $j\to\infty$，$\dfrac{a_{j+1}}{a_j}\to\dfrac{1}{j}$，这和 $\mathrm{e}^{\xi}=\sum_{j=0}^{\infty}\dfrac{1}{j!}\mathrm{e}^{j}$，当 $\xi\to\infty$ 时的收敛性质一致，即有 $L(\xi)\xrightarrow{\xi\to\infty}\mathrm{e}^{\xi}$，于是

$$u(\xi)=\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi}\xi^{\frac{1}{2}+|m|}L(\xi)\xrightarrow{\xi\to\infty}\infty\ , \tag{3.41-23}$$

即当 $L(\xi)$ 是无穷级数时，u 不能满足 $\xi\to\infty$ 的边界条件的要求，除非 $L(\xi)$ 退化为多项式，当 $n_r=j=n_\rho$ 时，$a_{j+1}=0$，$L(\xi)$ 为 n_ρ 次幂的多项式，这时 $n_r=n-\left(|m|+\dfrac{1}{2}\right)=n_\rho$，$n_\rho=0,1,2,\cdots$，即 $n=n_\rho+|m|+\dfrac{1}{2}$，那么

$$E_{n_\rho,|m|}=\frac{-Z^2e^2}{2a_0}\frac{1}{\left(n_\rho+|m|+\dfrac{1}{2}\right)^2}=-\frac{Z^2e^2}{2a_0}\frac{1}{\left(N+\dfrac{1}{2}\right)^2}\ , \tag{3.41-24}$$

这个 n_ρ 是二维氢原子的径向量子数，$E_{n_\rho,|m|}$ 对 $(\pm m)$ 为二度简并，当 $N=n_\rho+|m|$ 确定时，m 可取 $0,\pm1,\pm2,\cdots,\pm N$，共有 $2N+1$ 种取法，所以 $E_{n_\rho,|m|}$ 的简并度为 $2N+1$. 波函数 $\psi_{n_\rho,|m|}$ 为

$$\psi_{n_\rho,|m|}=C_{n_r,\mu}\frac{\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi}}{\sqrt{\rho}}\xi^{|m|+\frac{1}{2}}\mathrm{L}_{n_r}^{\mu}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}}{\sqrt{2\pi}}\ , \tag{3.41-25}$$

式中，$\mu=2|m|$，$n_r=n_\rho=0,1,2,\cdots$，$\xi=\alpha\rho$，而 $\alpha=\dfrac{2Z}{a_0}\dfrac{1}{n_\rho+|m|+\dfrac{1}{2}}$，归一化系数 $C_{n_r,\mu}$ 可应用公式[参阅蔡建华编，《量子力学》(第二版)，北京：高等教育出版社，1999. p308 中公式(Ⅴ.14)]

$$\int_0^\infty \mathrm{d}\rho\rho^{\mu+1}\mathrm{e}^{-\rho}\mathrm{L}_{n_r}^{\mu}(\rho)\mathrm{L}_{n_r}^{\mu}(\rho)=(\mu+2n_r+1)\frac{[(\mu+n_r)!]^3}{n_r!}\ , \tag{3.41-26}$$

并对照归一化公式

$$\int_0^\infty \rho R(\rho)R(\rho)\mathrm{d}\rho=1\ , \tag{3.41-27}$$

得到

$$C_{n_r,\mu}=\sqrt{\frac{\alpha(n_r)!}{(\mu+2n_r+1)[(\mu+n_r)!]^3}}\ . \tag{3.41-28}$$

注意　$\mu=2|m|$，$n_r=n_\rho$.

答　束缚能级为 $-\dfrac{Z^2e^2}{2a_0}\dfrac{1}{\left(N+\dfrac{1}{2}\right)^2}$，本征波函数为

$$\psi_{n_\rho,|m|}=\sqrt{\frac{\alpha(n_r)!}{(\mu+2n_r+1)[(\mu+n_r)!]^3}}\frac{\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi}}{\sqrt{\rho}}\xi^{|m|+\frac{1}{2}}\mathrm{L}_{n_r}^{\mu}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}}{\sqrt{2\pi}}$$，简并度为 $2N+1$.

3.42　粒子在无限深势阱 $V(x)=\begin{cases}0, & 0\leqslant x\leqslant a\\ \infty, & x<0, x>a\end{cases}$ 中运动，求坐标算符和动量算符 $\hat{x}$ 和 $\hat{p}$ 在该体系的能量表象中的矩阵元.

分析　利用薛定谔方程求解波函数，求解 $m\neq n$ 和 $m=n$ 时的坐标算符和动量算符 $\hat{x}$ 和 $\hat{p}$ 在能量表象中的矩阵元.

解　由哈密顿 $\hat{H}=-\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)$ 和无限深势阱 $V(x)=\begin{cases}0, & 0\leqslant x\leqslant a\\ \infty, & x<0, x>a\end{cases}$，$\hat{H}\psi_n=E_n\psi_n$，解得

$$E_n=\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2,\quad n=1,2,3,\cdots,\quad \psi_n(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi x}{a}, & 0\leqslant x\leqslant a\\ 0, & x<0, x>a\end{cases},$$

(1)　$m\neq n$，坐标的矩阵元

$$x_{mn}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^*(x)x\psi_n(x)\mathrm{d}x=\frac{2}{a}\int_0^{\alpha}\left(\sin\frac{m\pi x}{a}\right)x\left(\sin\frac{n\pi x}{a}\right)\mathrm{d}x,\tag{3.42-1}$$

因为 $\sin\dfrac{m\pi x}{a}\sin\dfrac{n\pi x}{a}=-\dfrac{1}{2}\left[\sin\dfrac{(m+n)\pi x}{a}-\sin\dfrac{(m-n)\pi x}{a}\right]$，所以

$$\begin{aligned}x_{mn}&=-\frac{1}{a}\int_0^a\mathrm{d}x x\sin\frac{(m+n)\pi x}{a}+\frac{1}{a}\int_0^a\mathrm{d}x x\sin\frac{(m-n)\pi x}{a}\\&=-\frac{1}{a}\left[-\frac{x\cos\dfrac{(m+n)\pi x}{a}}{\dfrac{(m+n)\pi}{a}}\bigg|_0^a+\frac{1}{\dfrac{(m+n)\pi}{a}}\int_0^a\mathrm{d}x\cos\frac{(m+n)\pi x}{a}\right]\\&\quad+\frac{1}{a}\left[-\frac{x\cos\dfrac{(m-n)\pi x}{a}}{\dfrac{(m-n)\pi}{a}}\bigg|_0^a+\frac{1}{\dfrac{(m-n)\pi}{a}}\int_0^a\mathrm{d}x\cos\frac{(m-n)\pi x}{a}\right]\\&=(-1)^{m-n}a\left[\frac{1}{(m+n)\pi}-\frac{1}{(m-n)\pi}\right]=\frac{(-1)^{m-n}a}{\pi}\cdot\frac{-2n}{m^2-n^2},\end{aligned}$$

式中，$(-1)^{m+n}=(-1)^{m-n+2n}=(-1)^{m-n}(-1)^{2n}=(-1)^{m-n}$，

当 $m-n$ 为奇数时，$x_{mn}=\dfrac{2na}{(m^2-n^2)\pi}$；

当 $m-n$ 为偶数时，$x_{mn}=-\dfrac{2na}{(m^2-n^2)\pi}$；

(2) 当 $m=n$，坐标的矩阵元

$$x_{nn}=\frac{2}{a}\int_0^a \mathrm{d}x x\sin^2\frac{n\pi x}{a}=\frac{2}{a}\int_0^a \mathrm{d}x x\frac{1-\cos\dfrac{2n\pi x}{a}}{2}=\frac{2}{a}\left[\int_0^a \frac{x}{2}\mathrm{d}x-\int_0^a x\frac{\cos\dfrac{2n\pi x}{a}}{2}\mathrm{d}x\right]$$

$$=\frac{1}{a}\left[\int_0^a x\mathrm{d}x-\int_0^a x\left(\cos\frac{2n\pi x}{a}\right)\mathrm{d}x\right]$$

$$=\frac{1}{a}\left[\frac{a^2}{2}-\frac{1}{2n\pi/a}\int_0^a x\mathrm{d}\sin\frac{2n\pi x}{a}\right]$$

$$=\frac{a}{2}-\frac{1}{2n\pi}\left[x\sin\frac{2n\pi x}{a}\bigg|_0^a-\int_0^a \sin\frac{2n\pi x}{a}\mathrm{d}x\right]$$

$$=\frac{a}{2}+\frac{1}{2n\pi}\int_0^a \sin\frac{2n\pi x}{a}\mathrm{d}x=\frac{a}{2}+\frac{1}{2n\pi}\frac{1}{2n\pi/a}\cos\frac{2n\pi x}{a}\bigg|_0^a=\frac{a}{2}$$

(3) 当 $m\neq n$，动量的矩阵元

$$p_{nn}=\frac{2}{a}\int_0^a \mathrm{d}x\sin\frac{m\pi x}{a}\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\sin\frac{n\pi x}{a}=\frac{2\hbar}{\mathrm{i}a}\frac{n\pi}{a}\int_0^a \mathrm{d}x\sin\frac{m\pi x}{a}\cos\frac{n\pi x}{a},\qquad (3.42\text{-}2)$$

因为 $\sin\dfrac{m\pi x}{a}\cos\dfrac{n\pi x}{a}=\dfrac{1}{2}\left[\sin\dfrac{(m+n)\pi x}{a}+\sin\dfrac{(m-n)\pi x}{a}\right]$，所以式(3.42-2)为

$$p_{nn}=\frac{2\hbar}{\mathrm{i}a}\frac{n\pi}{a}\frac{1}{2}\int_0^a\left[\sin\frac{(m+n)\pi x}{a}+\sin\frac{(m-n)\pi x}{a}\right]\mathrm{d}x$$

$$=-\frac{2\hbar}{\mathrm{i}a}\frac{n\pi}{a}\frac{1}{2}\left[\frac{\cos\dfrac{(m+n)\pi x}{a}}{\dfrac{(m+n)\pi}{a}}+\frac{\cos\dfrac{(m-n)\pi x}{a}}{\dfrac{(m-n)\pi}{a}}\right]\Bigg|_0^a$$

$$=-\frac{2\hbar}{\mathrm{i}a}\frac{n\pi}{a}\frac{1}{2}\left[\frac{(-1)^{m+n}-1}{\dfrac{(m+n)\pi}{a}}+\frac{(-1)^{m-n}-1}{\dfrac{(m-n)\pi}{a}}\right]=\frac{n\hbar}{\mathrm{i}a}[1-(-1)^{m-n}]\left[\frac{1}{m+n}+\frac{1}{m-n}\right]$$

$$=\frac{2mn\hbar}{\mathrm{i}a(m^2-n^2)}[1-(-1)^{m-n}].$$

(4) 当 $m=n$，动量的矩阵元

$$p_{mm}=\frac{2}{a}\int_0^a \mathrm{d}x\sin\frac{m\pi x}{a}\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\sin\frac{m\pi x}{a}=\frac{2\hbar}{\mathrm{i}a}\frac{m\pi}{a}\int_0^a \mathrm{d}x\sin\frac{m\pi x}{a}\cos\frac{m\pi x}{a}$$

$$=\frac{\hbar}{\mathrm{i}a}\frac{m\pi}{a}\int_0^a \sin\frac{2m\pi x}{a}\mathrm{d}x=\frac{\hbar}{\mathrm{i}a}\frac{m\pi}{a}\left.\frac{\cos\dfrac{2m\pi x}{a}}{\dfrac{2m\pi}{a}}\right|_0^a=0$$

答　当 $m\neq n$ 时，当 $m-n$ 为奇数时，$x_{mn}=\dfrac{2na}{(m^2-n^2)\pi}$，当 $m-n$ 为偶数时，$x_{mn}=-\dfrac{2na}{(m^2-n^2)\pi}$；当 $m=n$ 时，$x_{nn}=\dfrac{a}{2}$；当 $m\neq n$ 时，$p_{nn}=\dfrac{2mn\hbar}{\mathrm{i}a(m^2-n^2)}\left[1-(-1)^{m-n}\right]$，当 $m=n$ 时，$p_{mm}=0$.

3.43　在动量表象中求解一维线性谐振子的能量本征值问题.

分析　在动量表象中，利用 $\hat{x}=\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}$，确定一维线性谐振子的能量本征值及本征函数.

解　由哈密顿量

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2\,, \tag{3.43-1}$$

在动量表象中，$\hat{p}=p$，$\hat{x}=\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}$，$\hat{H}$ 的本征值方程为

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega^2\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}\right)^2\right]\Phi(p)=E\Phi(p)\,, \tag{3.43-2}$$

令 $\mu\omega^2=\dfrac{1}{\mu'}$，则 $\dfrac{1}{\mu}=\mu'\omega^2$，

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu'}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}p^2}+\frac{1}{2}\mu'\omega^2p^2\right]\Phi(p)=E\Phi(p)\,, \tag{3.43-3}$$

除了变量，这和一维谐振子在坐标表象中的定态方程一致，故有

$$\Phi_n(p)=\sqrt[4]{\frac{\mu'\omega}{\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{\mu'\omega}{\hbar}p^2}\mathrm{H}_n\left(\sqrt{\frac{\mu'\omega}{\hbar}}p\right),\quad E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\,, \tag{3.43-4}$$

将 $\mu'=\dfrac{1}{\mu\omega^2}$ 代入式(3.43-4)得

$$\Phi_n(p)=\sqrt[4]{\frac{1}{\hbar\mu\omega}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar\mu\omega}p^2}\mathrm{H}_n\left(\sqrt{\frac{1}{\hbar\mu\omega}}p\right),$$

其中 H_n 为 n 阶厄米多项式.

答　在动量表象中一维线性谐振子的能量本征值为 $\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$，本征函数为

$$\sqrt[4]{\frac{1}{\hbar\mu\omega}}\mathrm{e}^{\frac{1}{\hbar\mu\omega}p^2}\mathrm{H}_n\left(\sqrt{\frac{1}{\hbar\mu\omega}}p\right).$$

3.44　求一维谐振子的哈密顿算符在动量表象中的矩阵元.

分析　在动量表象中，利用 $\hat{x}=\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}$，求出 $\langle p'|\hat{H}|p\rangle$.

解　哈密顿

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2, \tag{3.44-1}$$

$$\hat{p}\psi_p(x)=p\psi_p(x),\quad \psi_p(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px},\quad \hat{x}=\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p},$$

$$\langle p'|\hat{H}|p\rangle=\left\langle p'\left|\frac{\hat{p}^2}{2\mu}\right|p\right\rangle-\frac{\hbar^2}{2}\mu\omega^2\left\langle p'\left|\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}p^2}\right|p\right\rangle=\left(\frac{p^2}{2\mu}-\frac{\hbar^2}{2}\mu\omega^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}p^2}\right)\delta(p'-p). \tag{3.44-2}$$

答　一维谐振子的哈密顿算符在动量表象中的矩阵元为 $\left(\frac{p^2}{2\mu}-\frac{\hbar^2}{2}\mu\omega^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}p^2}\right)\delta(p'-p)$.

3.45　求 $\hat{L}_x$ 和 $\hat{L}_x^2$ 在动量表象中的矩阵.

分析　利用 $y=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p_y}$，$z=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p_z}$，及 $\hat{L}_x=y\hat{p}_z-z\hat{p}_y$，计算 $\langle\boldsymbol{p}'|\hat{L}_x|\boldsymbol{p}\rangle$ 和 $\langle\boldsymbol{p}'|\hat{L}_x^2|\boldsymbol{p}\rangle$.

解　由 $\hat{L}_x=y\hat{p}_z-z\hat{p}_y$，动量表象中的基 $|p\rangle=\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}$，

$$\langle\boldsymbol{p}'|\hat{L}_x|\boldsymbol{p}\rangle=\left\langle\boldsymbol{p}'\left|p_z\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p_y}-p_y\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p_z}\right|\boldsymbol{p}\right\rangle=\mathrm{i}\hbar\left(p_z\frac{\partial}{\partial p_y}-p_y\frac{\partial}{\partial p_z}\right)\delta(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}).$$

$$\langle\boldsymbol{p}'|\hat{L}_x^2|\boldsymbol{p}\rangle=\langle\boldsymbol{p}'|(\hat{y}\hat{p}_z-\hat{z}\hat{p}_y)(\hat{y}\hat{p}_z-\hat{z}\hat{p}_y)|\boldsymbol{p}\rangle$$

$$=\langle\boldsymbol{p}'|\hat{y}\hat{p}_z\hat{y}\hat{p}_z-\hat{y}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_y-\hat{z}\hat{p}_y\hat{y}\hat{p}_z+\hat{z}\hat{p}_y\hat{z}\hat{p}_y|\boldsymbol{p}\rangle$$

$$=\langle\boldsymbol{p}'|\hat{p}_z^2\hat{y}^2+\hat{p}_y^2\hat{z}^2-\hat{p}_z\hat{y}\hat{p}_y\hat{z}-\hat{p}_y\hat{z}\hat{p}_z\hat{y}|\boldsymbol{p}\rangle$$

$$=\left\langle \boldsymbol{p}' \left| -\hbar^2 p_z^2 \frac{\partial^2}{\partial p_y^2} - \hbar^2 p_y^2 \frac{\partial^2}{\partial p_z^2} - \hat{p}_z \left(\hat{p}_y \hat{y} - \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \right) \hat{z} - \hat{p}_y \left(\hat{p}_z \hat{z} - \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \right) \hat{y} \right| \boldsymbol{p} \right\rangle$$

$$=\left(-\hbar^2 p_z^2 \frac{\partial^2}{\partial p_y^2} - \hbar^2 p_y^2 \frac{\partial^2}{\partial p_z^2} + 2\hbar^2 p_z p_y \frac{\partial^2}{\partial p_y \partial p_z} + \hbar^2 p_z \frac{\partial}{\partial p_z} + \hbar^2 p_y \frac{\partial}{\partial p_y} \right) \delta(\boldsymbol{p}' - \boldsymbol{p}).$$

答　$\hat{L}_x$ 在动量表象中的矩阵为 $\mathrm{i}\hbar\left(p_z \dfrac{\partial}{\partial p_z} - p_y \dfrac{\partial}{\partial p_z} \right) \delta(\boldsymbol{p}' - \boldsymbol{p})$.

$\hat{L}_x^2$ 在动量表象中的矩阵为 $\left(-\hbar^2 p_z^2 \dfrac{\partial^2}{\partial p_y^2} - \hbar^2 p_y^2 \dfrac{\partial^2}{\partial p_z^2} + 2\hbar^2 p_z p_y \dfrac{\partial^2}{\partial p_y \partial p_z} + \hbar^2 p_z \dfrac{\partial}{\partial p_z} + \right.$

$\left. \hbar^2 p_y \dfrac{\partial}{\partial p_y} \right) \delta(\boldsymbol{p}' - \boldsymbol{p})$.

3.46　已知在 L^2 和 L_3 的共同表象中，算符 $\hat{L}_x$ 和 $\hat{L}_y$ 的矩阵分别为

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{L}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & -\mathrm{i} & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & \mathrm{i} & 0 \end{bmatrix},$$

求它们的本征值和相应的归一化本征函数，并将矩阵 $\hat{L}_x$ 和 $\hat{L}_y$ 对角化.

分析　利用线性代数方法求 $\hat{L}_x$ 和 $\hat{L}_y$ 的本征值和相应的归一化本征函数，再对矩阵 $\hat{L}_x$ 和 $\hat{L}_y$ 进行对角化.

解　(1) 求 $\hat{L}_x$ 的本征值问题.

设 $\dfrac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{bmatrix} = \dfrac{\hbar}{\sqrt{2}} \lambda \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{bmatrix}$，$\hat{L}_x = \dfrac{\hbar}{\sqrt{2}} \lambda$，则

$$\begin{bmatrix} 0-\lambda & 1 & 0 \\ 1 & 0-\lambda & 1 \\ 0 & 1 & 0-\lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{bmatrix} = 0, \tag{3.46-1}$$

线性方程组有解条件

$$\det \begin{vmatrix} -\lambda & 1 & 0 \\ 1 & -\lambda & 1 \\ 0 & 1 & -\lambda \end{vmatrix} = 0, \quad -\lambda^3 + 2\lambda = 0, \quad \lambda = 0, \pm\sqrt{2},$$

当 $\lambda = \sqrt{2}$ 时，$\begin{bmatrix} -\sqrt{2} & 1 & 0 \\ 1 & -\sqrt{2} & 1 \\ 0 & 1 & -\sqrt{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{bmatrix} = 0$，解得 $\beta = \sqrt{2}\alpha = \sqrt{2}\gamma$，

$$\eta_{\sqrt{2}}^{(1)}=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\ \sqrt{2}\\ 1\end{bmatrix}, \tag{3.46-2}$$

当 $\lambda=0$ 时，$\begin{bmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\\ \gamma\end{bmatrix}=0$，解得 $\beta=0,\alpha=-\gamma$，

$$\eta_{0}^{(2)}=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\ 0\\ -1\end{bmatrix}, \tag{3.46-3}$$

当 $\lambda=-\sqrt{2}$ 时，$\begin{bmatrix}\sqrt{2}&1&0\\1&\sqrt{2}&1\\0&1&\sqrt{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\\ \gamma\end{bmatrix}=0$，解得 $\beta=-\sqrt{2}\alpha=-\sqrt{2}\gamma$，

$$\eta_{-\sqrt{2}}^{(3)}=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\ -\sqrt{2}\\ 1\end{bmatrix} \tag{3.46-4}$$

于是得到 L_x 的三个本征矢量，在 L^2 和 L_3 表象中的表示

$$\eta_{\hbar}^{(1)}=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\ \sqrt{2}\\ 1\end{bmatrix},\quad \eta_{0}^{(2)}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ 0\\ -1\end{bmatrix},\quad \eta_{-\hbar}^{(3)}=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\ -\sqrt{2}\\ 1\end{bmatrix}, \tag{3.46-5}$$

(2) 求 $\hat{L}_y$ 的本征值问题.

$$\hat{L}_y=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0&-\mathrm{i}&0\\ \mathrm{i}&0&-\mathrm{i}\\ 0&\mathrm{i}&0\end{bmatrix},$$

设
$$\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0&-\mathrm{i}&0\\ \mathrm{i}&0&-\mathrm{i}\\ 0&\mathrm{i}&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\\ \gamma\end{bmatrix}=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\lambda\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\\ \gamma\end{bmatrix},\quad \hat{L}_y=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\lambda, \tag{3.46-6}$$

由 $\det\begin{vmatrix}-\lambda&-\mathrm{i}&0\\ \mathrm{i}&-\lambda&-\mathrm{i}\\ 0&\mathrm{i}&-\lambda\end{vmatrix}=0$，$\lambda(\lambda^2-2)=0$ 得 $\lambda=0,\pm\sqrt{2}$.

当 $\lambda=\sqrt{2}$ 时，即 $L_y=\hbar$，有 $\begin{bmatrix}-\sqrt{2} & -\mathrm{i} & 0\\ \mathrm{i} & -\sqrt{2} & -\mathrm{i}\\ 0 & \mathrm{i} & -\sqrt{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\\ \gamma\end{bmatrix}=0$，$\beta=\mathrm{i}\sqrt{2}\alpha=-\mathrm{i}\sqrt{2}\gamma$ 解得

$$\xi_{\hbar}^{(1)}=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\ \mathrm{i}\sqrt{2}\\ -1\end{bmatrix};$$

当 $\lambda=0$ 时，即 $L_y=0$，有 $\begin{bmatrix}0 & -\mathrm{i} & 0\\ \mathrm{i} & 0 & -\mathrm{i}\\ 0 & \mathrm{i} & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\\ \gamma\end{bmatrix}=0$，$\beta=0$，$\alpha=\gamma$，解得

$$\xi_{0}^{(2)}=\sqrt{\frac{1}{2}}\begin{bmatrix}1\\ 0\\ -1\end{bmatrix};$$

当 $\lambda=-\sqrt{2}$ 时，即 $L_y=-\hbar$，有 $\begin{bmatrix}\sqrt{2} & -\mathrm{i} & 0\\ \mathrm{i} & \sqrt{2} & -\mathrm{i}\\ 0 & \mathrm{i} & \sqrt{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\\ \gamma\end{bmatrix}=0$，$\beta=-\mathrm{i}\sqrt{2}\alpha=\mathrm{i}\sqrt{2}\gamma$，解得

$$\xi_{-\hbar}^{(3)}=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\ -\sqrt{2}\mathrm{i}\\ -1\end{bmatrix},$$

总之，$\xi_{\hbar}^{(1)}=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\ \mathrm{i}\sqrt{2}\\ -1\end{bmatrix}$，$\xi_{0}^{(2)}=\sqrt{\frac{1}{2}}\begin{bmatrix}1\\ 0\\ -1\end{bmatrix}$，$\xi_{-\hbar}^{(3)}=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\ -\sqrt{2}\mathrm{i}\\ -1\end{bmatrix}$. (3.46-7)

(3) 将 $\hat{L}_x$ 和 $\hat{L}_y$ 矩阵对角化.

在 L^2 和 L_z 表象中，$\hat{A}$（$\hat{L}_x$ 或者 $\hat{L}_y$）的本征方程为

$$\hat{A}\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\\ \gamma\end{bmatrix}=a\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\\ \gamma\end{bmatrix}. \tag{3.46-8}$$

设从 L^2 和 L_3 为对角的表象转变到 $\hat{A}$ 为对角的表象的变换矩阵为 $\hat{U}$，则有 $\hat{U}\hat{U}^{+}=\hat{U}^{+}\hat{U}=1$，设 L^2 和 L_z 表象的基为 $\begin{bmatrix}1\\ 0\\ 0\end{bmatrix}$，$\begin{bmatrix}0\\ 1\\ 0\end{bmatrix}$，$\begin{bmatrix}0\\ 0\\ 1\end{bmatrix}$，将它们按 $\hat{A}$（$\hat{L}_x$ 或者 $\hat{L}_y$）

的本征矢组展开：

$$\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}_1=U_{11}\eta^{(1)}+U_{21}\eta^{(2)}+U_{31}\eta^{(3)},\quad \begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}_2=U_{12}\eta^{(1)}+U_{22}\eta^{(2)}+U_{32}\eta^{(3)},$$

$$\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}_3=U_{13}\eta^{(1)}+U_{23}\eta^{(2)}+U_{33}\eta^{(3)},$$

于是得到

$$U_{11}=\eta^{(1)+}\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}=\frac{1}{2},\ U_{21}=\eta^{(2)+}\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}},$$

$$U_{31}=\eta^{(3)+}\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}},\ U_{12}=\eta^{(1)+}\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}=\frac{\sqrt{2}}{2},$$

$$U_{22}=\eta^{(2)+}\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}=0,\ U_{32}=\eta^{(3)+}\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}=-\frac{\sqrt{2}}{2},$$

$$U_{13}=\eta^{(1)+}\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}=\frac{1}{2},\ U_{23}=\eta^{(2)+}\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}=-\frac{1}{\sqrt{2}},$$

$$U_{33}=\eta^{(3)+}\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}=\frac{1}{2}.$$

从 L^2 和 L_3 表象转换到 L_x 表象相应的 $\hat{U}$ 变换

$$\hat{U}=\begin{bmatrix}\frac{1}{2} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2}\\ \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2}\\ \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{2}\end{bmatrix},\ \text{则}\ \hat{U}^{+}=\begin{bmatrix}\frac{1}{2} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2}\\ \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2}\\ \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{2}\end{bmatrix}.$$

$\hat{L}_x$ 在 L_x 表象中的表示为

$$\hat{U}\hat{L}_x\hat{U}^{+}=\begin{bmatrix}\frac{1}{2}&\frac{1}{\sqrt{2}}&\frac{1}{2}\\ \frac{\sqrt{2}}{2}&0&-\frac{\sqrt{2}}{2}\\ \frac{1}{2}&-\frac{\sqrt{2}}{2}&\frac{1}{2}\end{bmatrix}\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{1}{2}&\frac{1}{\sqrt{2}}&\frac{1}{2}\\ \frac{\sqrt{2}}{2}&0&-\frac{\sqrt{2}}{2}\\ \frac{1}{2}&-\frac{\sqrt{2}}{2}&\frac{1}{2}\end{bmatrix}=\hbar\begin{bmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{bmatrix},\tag{3.46-9}$$

对角元素是 $\hat{L}_x$ 的本征值为 $\hbar, 0, -\hbar$.

将 L^2 和 L_3 表象的基 $\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}$，$\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}$，$\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}$，分别按 $\hat{L}_y$ 在 L^2 和 L_3 表象的本征矢 $\left(\xi^{(1)}=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\\sqrt{2}\mathrm{i}\\-1\end{bmatrix},\ \xi^{(2)}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\0\\1\end{bmatrix},\ \xi^{(3)}=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\-\sqrt{2}\mathrm{i}\\-1\end{bmatrix},\right)$ 展开，则

$$\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}_1=U_{11}\xi^{(1)}+U_{21}\xi^{(2)}+U_{31}\xi^{(3)},\quad \begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}_2=U_{12}\xi^{(1)}+U_{22}\xi^{(2)}+U_{32}\xi^{(3)},$$

$$\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}_3=U_{13}\xi^{(1)}+U_{23}\xi^{(2)}+U_{33}\xi^{(3)},$$

于是

$$U_{11}=\xi^{(1)+}\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\frac{1}{2}&\frac{\sqrt{2}}{2}\mathrm{i}&-\frac{1}{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}=\frac{1}{2},\ U_{21}=\xi^{(2)+}\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}&0&\frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}},$$

$$U_{31}=\xi^{(3)+}\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\frac{1}{2}&\frac{\sqrt{2}}{2}\mathrm{i}&-\frac{1}{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}=\frac{1}{2},$$

$$U_{12}=\xi^{(1)+}\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\frac{1}{2}&-\frac{\sqrt{2}}{2}\mathrm{i}&-\frac{1}{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}=\frac{\sqrt{2}}{2}\mathrm{i},$$

$$U_{22}=\xi^{(2)+}\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}&0&\frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}=0,$$

$$U_{32}=\xi^{(3)+}\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2}\mathrm{i} & -\frac{1}{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}=\frac{\sqrt{2}}{2}\mathrm{i}\,,$$

$$U_{13}=\xi^{(1)+}\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2}\mathrm{i} & -\frac{1}{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}=-\frac{1}{2}\,,$$

$$U_{23}=\xi^{(2)+}\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\,,$$

$$U_{33}=\xi^{(3)+}\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2}\mathrm{i} & -\frac{1}{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}=-\frac{1}{2}\,.$$

由此得到从 L^2 和 L_3 表象转换到 L_y 表象的变换矩阵为

$$\hat{U}=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1 & -\sqrt{2}\mathrm{i} & -1\\ \sqrt{2} & 0 & \sqrt{2}\\ 1 & \sqrt{2}\mathrm{i} & -1\end{bmatrix},\ \text{则有}\ \hat{U}^{+}=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1 & \sqrt{2} & 1\\ \sqrt{2}\mathrm{i} & 0 & -\sqrt{2}\mathrm{i}\\ -1 & \sqrt{2} & -1\end{bmatrix},$$

于是 $\hat{L}_y$ 在 L_y 表象的表示为

$$\hat{U}\hat{L}_y\hat{U}^{+}=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1 & -\mathrm{i} & -1\\ \sqrt{2} & 0 & \sqrt{2}\\ 1 & \sqrt{2}\mathrm{i} & -1\end{bmatrix}\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0 & -\mathrm{i} & 0\\ \mathrm{i} & 0 & -\mathrm{i}\\ 0 & \mathrm{i} & 0\end{bmatrix}\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1 & \sqrt{2} & 1\\ \sqrt{2}\mathrm{i} & 0 & -\sqrt{2}\mathrm{i}\\ -1 & \sqrt{2} & -1\end{bmatrix}=\hbar\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{bmatrix}.$$

答　L_x 的三个本征矢量，在 L^2 和 L_3 表象中的表示 $\eta_{\hbar}^{(1)}=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\ \sqrt{2}\\ 1\end{bmatrix}$，$\eta_{0}^{(2)}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ 0\\ -1\end{bmatrix}$，$\eta_{-\hbar}^{(3)}=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\ -\sqrt{2}\\ 1\end{bmatrix}$，本征值为 $\lambda=0,\pm\sqrt{2}$；L_y 的三个本征矢量，在 L^2 和 L_3 表象中的表示 $\xi_{\hbar}^{(1)}=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\ \mathrm{i}\sqrt{2}\\ -1\end{bmatrix}$，$\xi_{0}^{(2)}=\sqrt{\frac{1}{2}}\begin{bmatrix}1\\ 0\\ -1\end{bmatrix}$，$\xi_{-\hbar}^{(3)}=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\ -\sqrt{2}\mathrm{i}\\ -1\end{bmatrix}$，本征值为 $\lambda=0,\pm\sqrt{2}$.

矩阵 $\hat{L}_x$ 对角化为 $\hbar\begin{bmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{bmatrix}$，矩阵 $\hat{L}_y$ 对角化为 $\hbar\begin{bmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{bmatrix}$.

3.47　求连续性方程的矩阵表示.

分析　由连续性方程在 $\boldsymbol{x}$ 表象中，展开成无穷项级数之和，进行分析求解.

解　在 $\boldsymbol{x}$ 表象中，连续性方程

$$\frac{\partial P}{\partial t}=-\nabla\cdot\boldsymbol{j}\,, \tag{3.47-1}$$

其中，

$$P(\boldsymbol{x},t)=\psi^*(\boldsymbol{x},t)\psi(\boldsymbol{x},t)\,, \tag{3.47-2}$$

$$\boldsymbol{j}=\frac{\hbar}{2\mu\mathrm{i}}[\psi^*(\boldsymbol{x},t)\nabla\psi(\boldsymbol{x},t)-\psi(\boldsymbol{x},t)\nabla\psi^*(\boldsymbol{x},t)]. \tag{3.47-3}$$

设 $\hat{A}\psi_n(\boldsymbol{x})=a_n\psi_n(\boldsymbol{x})$，$[\psi_n(\boldsymbol{x})]$ 是完备的本征函数系，$\psi(\boldsymbol{x},t)$ 可按 $[\psi_n(\boldsymbol{x})]$ 展开

$$\psi(\boldsymbol{x},t)=\sum_{\boldsymbol{n}}C_n(t)\psi_n(\boldsymbol{x})\,,\quad <\psi_n\,|\,\psi_m>=\delta_{nm}\,, \tag{3.47-4}$$

$$\psi^*(\boldsymbol{x},t)=\sum_m C_m^*(t)\psi_m^*(\boldsymbol{x})\,.$$

将式(3.47-1)两边对 $\boldsymbol{x}$ 积分，

$$\frac{\partial}{\partial t}\int P\mathrm{d}^3x=\frac{\partial}{\partial t}\sum_m\sum_n C_m^*C_n\int\psi_m^*\psi_n\mathrm{d}^3x=\frac{\partial}{\partial t}\sum_n C_n^*C_n=\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}C_1^* & C_2^* & \cdots & C_n^* & \cdots\end{pmatrix}\begin{pmatrix}C_1\\C_2\\\vdots\\C_n\\\vdots\end{pmatrix},$$

$$\int\nabla\cdot\boldsymbol{j}\mathrm{d}^3x=\nabla\cdot\frac{\hbar}{2\mu\mathrm{i}}\sum_m\sum_n C_m^*\int\mathrm{d}^3x(\psi_m^*\nabla\psi_n-\psi_n\nabla\psi_m^*)C_n\,,$$

令 $J_{mn}=\int\mathrm{d}^3x\dfrac{\hbar}{2\mu\mathrm{i}}(\psi_m^*\nabla\psi_n-\psi_n\nabla\psi_m^*)$，则

$$\int\nabla\cdot\boldsymbol{j}\mathrm{d}^3x=\nabla\cdot\begin{pmatrix}C_1^* & C_2^* & \cdots & C_n^* & \cdots\end{pmatrix}\begin{bmatrix}J_{11}&J_{12}&\cdots&J_{1n}&\cdots\\J_{21}&J_{22}&\cdots&J_{2n}&\cdots\\\cdots&\cdots&\cdots&\cdots&\cdots\\J_{n1}&J_{n2}&\cdots&J_{nn}&\cdots\\\cdots&\cdots&\cdots&\cdots&\cdots\end{bmatrix}\begin{pmatrix}C_1\\C_2\\\vdots\\C_n\\\vdots\end{pmatrix}.$$

所以

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} C_1^* & C_2^* & \cdots & C_n^* & \cdots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \\ C_n \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$=-\nabla\cdot\begin{pmatrix} C_1^* & C_2^* & \cdots & C_n^* & \cdots \end{pmatrix}\begin{bmatrix} J_{11} & J_{12} & \cdots & J_{1n} & \cdots \\ J_{21} & J_{22} & \cdots & J_{2n} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ J_{n1} & J_{n2} & \cdots & J_{nn} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{bmatrix}\begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \\ C_n \\ \vdots \end{pmatrix}.$$

答　连续性方程的矩阵表示式为

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} C_1^* & C_2^* & \cdots & C_n^* & \cdots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \\ C_n \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$=-\nabla\cdot\begin{pmatrix} C_1^* & C_2^* & \cdots & C_n^* & \cdots \end{pmatrix}\begin{bmatrix} J_{11} & J_{12} & \cdots & J_{1n} & \cdots \\ J_{21} & J_{22} & \cdots & J_{2n} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ J_{n1} & J_{n2} & \cdots & J_{nn} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{bmatrix}\begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \\ C_n \\ \vdots \end{pmatrix}.$$

3.48　在 x 和 p 表象中，分别求解对易式 $[\hat{x}, \mathrm{e}^{\alpha\hat{p}_x}]$，$\alpha$ 为实常数.

分析　分别利用 $\hat{p}_x=\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$、$\hat{x}=\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p_x}$ 和 $\mathrm{e}^x=1+x+\dfrac{1}{2!}x^2+\dfrac{1}{3!}x^3+\cdots$，进行求解对易式 $[\hat{x}, \mathrm{e}^{\alpha\hat{p}_x}]$.

解　在 x 表象中，$\hat{x}\psi(x)=x\psi(x)$，$\hat{p}_x\psi(x)=\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi(x)$，

$$\mathrm{e}^{\alpha\hat{p}_x}=1+\alpha\hat{p}_x+\frac{1}{2!}\alpha^2\hat{p}_x^2+\cdots+\frac{1}{n!}\alpha^n\hat{p}_x^n+\cdots=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(\alpha\hat{p}_x)^n,$$

$$[\hat{x}, \hat{p}_x^n]=[\hat{x}, \hat{p}_x]\hat{p}_x^{n-1}+\hat{p}_x[\hat{x}, \hat{p}_x^{n-1}]=\mathrm{i}\hbar\,\hat{p}_x^{n-1}+\hat{p}_x[\hat{x}, \hat{p}_x]\hat{p}_x^{n-2}+\hat{p}_x^2[\hat{x}, \hat{p}_x^{n-2}]$$

$$=\mathrm{i}\hbar\,\hat{p}_x^{n-1}+\mathrm{i}\hbar\hat{p}_x^{n-1}+\hat{p}_x^2[\hat{x}, \hat{p}_x]\hat{p}_x^{n-3}+\hat{p}_x^3[\hat{x}, \hat{p}_x^{n-3}]=\cdots=n\,\mathrm{i}\hbar\hat{p}_x^{n-1}.$$

$$[\hat{x}, \mathrm{e}^{\alpha\hat{p}_x}] = \left[\hat{x}, \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(\alpha\hat{p}_x)^n\right] = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{\alpha^n \mathrm{i}\hbar}{(n-1)!}\hat{p}_x^{n-1} = \mathrm{i}\hbar\alpha\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(n-1)!}(\alpha\hat{p}_x)^{n-1}$$

$$= \mathrm{i}\hbar\alpha\sum_{n_1=0}^{\infty}\frac{1}{n_1!}(\alpha\hat{p}_x)^{n_1} = \mathrm{i}\hbar\alpha\mathrm{e}^{\alpha\hat{p}_x}.$$

在 p 表象中，$\hat{x} = \mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p_x}$，$\mathrm{e}^{\alpha\hat{p}_x} = \mathrm{e}^{\alpha p_x}$，

$$\mathrm{e}^{\alpha\hat{p}_x} = 1 + \alpha\hat{p}_x + \frac{1}{2!}\alpha^2\hat{p}_x^2 + \cdots + \frac{1}{n!}\alpha^n\hat{p}_x^n + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(\alpha\hat{p}_x)^n,$$

$$[\hat{x}, \mathrm{e}^{\alpha\hat{p}_x}] = \left[\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p_x}, \mathrm{e}^{\alpha\hat{p}_x}\right] = \mathrm{i}\hbar\alpha\mathrm{e}^{\alpha\hat{p}_x}.$$

答　在 x 表象中，对易式 $[\hat{x}, \mathrm{e}^{\alpha\hat{p}_x}] = \mathrm{i}\hbar\alpha\mathrm{e}^{\alpha\hat{p}_x}$；在 p 表象中，对易式 $[\hat{x}, \mathrm{e}^{\alpha\hat{p}_x}] = \mathrm{i}\hbar\alpha\mathrm{e}^{\alpha\hat{p}_x}$.

3.49　在 x 和 p_x 表象中，分别求解一维均匀电场中的带电粒子的能量本征值问题.

分析　考虑加电场能 $V(x) = -Q\varepsilon x$，分别在 x 和 p_x 表象中，求解薛定谔方程.

解　设电场 ε 在 x 方向，则

$$V(x) = -Q\varepsilon x, \tag{3.49-1}$$

如图 3.49-1 所示，

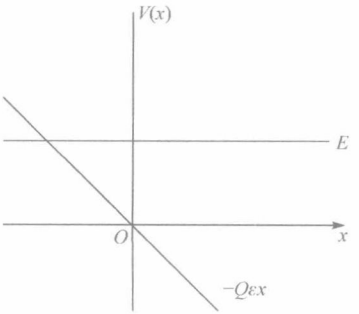

图 3.49-1　电场势

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} - Q\varepsilon x. \tag{3.49-2}$$

在电场力作用下，粒子可到达 $x = \infty$ 处，所以满足

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2\mu} - Q\varepsilon x\right)\psi(x) = E\psi(x) \tag{3.49-3}$$

的 $\psi(x)$ 是自由态，或者 $V(\infty) = -\infty$，所以 $E > -\infty$ 的粒子可达到 ∞ 处，故属于自由态问题，E 属于连续谱，但是粒子不能到达 $x = -\infty$ 处，因为 $V(-\infty) = \infty$，所以 $\psi(-\infty) = 0$.

(1) 用 x 表象求解，

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_E(x) - Q\varepsilon x\psi_E(x) = E\psi_E(x),$$

即

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_E(x)+\left(\frac{2\mu E}{\hbar^2}+\frac{2\mu Q\varepsilon x}{\hbar^2}\right)\psi_E(x)=0\,. \tag{3.49-4}$$

为了使方程(3.49-3)变得简单，便于幂级数求解，先令

$$E=\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{l}\right)^2\lambda\,, \tag{3.49-5}$$

特征长度l待定，λ是量纲为一的能量参数，于是方程式(3.49-3)成为

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x)+\left(\frac{\lambda}{l^2}+\frac{2\mu Q\varepsilon x}{\hbar^2}\right)\psi(x)=0\,, \tag{3.49-6}$$

已省略$\psi_E(x)$的下角标E，为了进一步简化方程式(3.49-5)，令

$$\frac{2\mu Q\varepsilon}{\hbar^2}=\frac{1}{l^3}\,, \tag{3.49-7}$$

则方程成为

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x)+\frac{1}{l^2}\left(\lambda+\frac{x}{l}\right)\psi(x)=0\,, \tag{3.49-8}$$

再令

$$\xi=\lambda+\frac{x}{l}\,, \tag{3.49-9}$$

由于$-\infty\leqslant x\leqslant\infty$，则$\xi$可分成$-\infty\leqslant\xi<0$，$0\leqslant\xi\leqslant\infty$，则方程成为

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}\psi(\xi)+\xi\psi(\xi)=0\,, \tag{3.49-10}$$

边界条件为

$$\psi(\xi=-\infty)=0\,, \tag{3.49-11}$$

这个方程经变换可以化为$\frac{1}{3}$阶的贝塞尔方程.

(a) 在$\xi\geqslant 0$区.

作变换

$$z=\frac{2}{3}\xi^{\frac{3}{2}}\,,\quad \psi=\xi^{\frac{1}{2}}u(\xi)\,, \tag{3.49-12}$$

则u满足$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}\left(\sqrt{\xi}u\right)+\xi^{\frac{3}{2}}u(\xi)=0$，即

$$\sqrt{\xi}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}u+\frac{1}{\sqrt{\xi}}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\xi}-\frac{1}{4\xi^{\frac{3}{2}}}u+\xi^{\frac{3}{2}}u(\xi)=0\,,$$

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}u+\frac{1}{\xi}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\xi}-\frac{1}{4\xi^2}u+\xi u(\xi)=0\,, \tag{3.49-13}$$

再令 $z=\frac{2}{3}\xi^{\frac{3}{2}}$，即 $\xi=\left(\frac{3}{2}z\right)^{\frac{2}{3}}$，则有 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}=\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}\xi}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}=\sqrt{\xi}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}=\sqrt[3]{\frac{3}{2}z}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}$，

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}=\sqrt[3]{\frac{3}{2}z}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left[\sqrt[3]{\frac{3}{2}z}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\right]=\sqrt[3]{\left(\frac{3}{2}z\right)^2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2}+\sqrt[3]{\frac{3}{2}z}\frac{1}{3z^{\frac{2}{3}}}\sqrt[3]{\frac{3}{2}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}$$

$$=\sqrt[3]{\left(\frac{3}{2}z\right)^2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2}+\frac{1}{2\left(\sqrt[3]{\frac{3}{2}z}\right)}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z},$$

式(3.49-13)变成

$$\sqrt[3]{\left(\frac{3}{2}z\right)^2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2}u+\frac{1}{2\sqrt[3]{\frac{3}{2}z}}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}z}+\frac{1}{\sqrt[3]{\left(\frac{3}{2}z\right)^2}}\sqrt[3]{\frac{3}{2}z}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}z}-\left[\frac{1}{4}\frac{1}{\sqrt[3]{\left(\frac{3}{2}z\right)^4}}-\sqrt[3]{\left(\frac{3}{2}z\right)^2}\right]u=0,$$

即

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2}u+\frac{1}{z}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}z}+\left(1-\frac{\left(\frac{1}{3}\right)^2}{z^2}\right)u=0,$$

这正好是 $\frac{1}{3}$ 阶的贝塞尔方程，所以

$$u(z)=\alpha\mathrm{H}^{(1)}_{1/3}(z)+\beta\mathrm{H}^{(2)}_{1/3}(z),$$

由于本题要求的是沿 x 正方向传播的行波，故只能取第一类汉克尔函数 $\mathrm{H}^{(1)}_{1/3}(z)$，所以

$$\psi(\xi)=\alpha\sqrt{\xi}\mathrm{H}^{(1)}_{1/3}\left(\frac{2}{3}\xi^{\frac{3}{2}}\right),\tag{3.49-14}$$

(b) 在 $\xi<0$ 区.

由于 $\xi=-|\xi|$，方程式(3.49-9)成为

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}|\xi|^2}\psi-|\xi|\psi=0\tag{3.49-15}$$

作变换

$$z=\frac{2}{3}|\xi|^{\frac{3}{2}},\ \text{即}\ |\xi|=\left(\frac{3}{2}z\right)^{\frac{2}{3}},\ \psi=\sqrt{\xi}u\,, \tag{3.49-16}$$

则有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}|\xi|}=\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}|\xi|}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}=\sqrt{\xi}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}=\sqrt[3]{\frac{3}{2}z}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\,, \tag{3.49-17}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}|\xi|^2}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}|\xi|}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}|\xi|}=\sqrt[3]{\frac{3}{2}z}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left[\sqrt[3]{\frac{3}{2}z}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\right]=\sqrt[3]{\left(\frac{3}{2}z\right)^2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2}+\frac{1}{3}\frac{3}{2\sqrt[3]{\frac{3}{2}z}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\,, \tag{3.49-18}$$

将式(3.49-16)的$\psi=\sqrt{\xi}u$代入式(3.49-15)，得到u满足的方程

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}|\xi|^2}(\sqrt{|\xi|}u)&=\sqrt{|\xi|}\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}|\xi|^2}+2\frac{\mathrm{d}\sqrt{|\xi|}}{\mathrm{d}|\xi|}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}|\xi|}+\frac{\mathrm{d}^2\sqrt{|\xi|}}{\mathrm{d}|\xi|^2}u\\&=\sqrt{|\xi|}\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}|\xi|^2}+\frac{1}{\sqrt{|\xi|}}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}|\xi|}-\frac{1}{4}\frac{1}{|\xi|^{\frac{3}{2}}}u-|\xi|^{\frac{3}{2}}u=0,\end{aligned}$$

即

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}|\xi|^2}+\frac{1}{|\xi|}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}|\xi|}-\frac{1}{4}\frac{u}{|\xi|^2}-|\xi|u=0\,. \tag{3.49-19}$$

将式(3.49-17)和式(3.49-18)用到式(3.49-19)中，得到

$$\sqrt[3]{\left(\frac{3}{2}z\right)^2}\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}z^2}+\frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt[3]{\frac{3}{2}z}}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}z}+\frac{1}{\sqrt[3]{\left(\frac{3}{2}z\right)^2}}\sqrt[3]{\frac{3}{2}z^4}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}z}-\left(\frac{1}{4}\frac{1}{\sqrt[3]{\left(\frac{3}{2}z\right)^4}}+\left(\frac{3}{2}z\right)^{\frac{2}{3}}\right)u=0\,,$$

即

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}z^2}+\left(\frac{1}{2\times\frac{3}{2}z}+\frac{1}{\frac{3}{2}}\right)\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}z}-\left(\frac{1}{4\left(\frac{3}{2}z\right)^2}+1\right)u=0\,,$$

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}z^2}+\frac{1}{z}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}z}-\left(1+\frac{\left(\frac{1}{3}\right)^2}{z^2}\right)u=0\,, \tag{3.49-20}$$

这是$\frac{1}{3}$阶改进型(虚宗量)贝塞尔方程.

下面从$\frac{1}{3}$阶贝塞尔方程

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}z^2}+\frac{1}{z}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}z}+\left(1-\frac{\left(\frac{1}{3}\right)^2}{z^2}\right)u=0\ , \tag{3.49-21}$$

出发，作$z\to \mathrm{i}z$变换，立刻得到方程(3.49-20). 方程式(3.49-21)的两个线性无关解为$\mathrm{I}_{1/3}(z)$和$\mathrm{K}_{1/3}(z)$，分别代表第一、第二类$\frac{1}{3}$阶改进型(虚宗量)贝塞尔方程.

由于$\psi(\xi=-\infty)=0$，$z=\frac{2}{3}|\xi|^{\frac{3}{2}}$，所以$\psi(z=\infty)=0$，由于

$$\mathrm{I}_\nu(z)\xrightarrow{z\to\infty}\frac{\mathrm{e}^z}{\sqrt{2\pi z}}\ ,\quad \mathrm{K}_\nu(z)\xrightarrow{z\to\infty}\sqrt{\frac{\pi}{2z}}\mathrm{e}^{-z}\ .$$

为了满足$\psi(z=\infty)=0$，只能取$\mathrm{K}_{1/3}(z)$，所以在$\xi<0$区，

$$u(z)=\mathrm{K}_{1/3}(z)\ ,\quad z=\frac{2}{3}\sqrt{|\xi|^3}\ ,\quad \psi=\sqrt{|\xi|}u=\sqrt{|\xi|}\mathrm{K}_{1/3}\left(\frac{2}{3}\sqrt{|\xi|^3}\right).$$

(2) 用p_x表象求解，

$$\left(\frac{p^2}{2\mu}-Q\varepsilon\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}\right)\Phi_E(p)=E\Phi_E(p)\ ,\ \text{即}\ -Q\varepsilon\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}\Phi_E(p)=\left(E-\frac{p^2}{2\mu}\right)\Phi_E(p)\ ,$$

$$-Q\varepsilon\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}\Phi_E(p)=\left(E-\frac{p^2}{2\mu}\right)\Phi_E(p)\ ,\quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}\Phi_E(p)=\frac{\mathrm{i}}{Q\varepsilon\hbar}\left(E-\frac{p^2}{2\mu}\right)\Phi_E(p)\ ,$$

解得$\Phi_E(p)=C\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar Q\varepsilon}\left(Ep-\frac{p^3}{6\mu}\right)}$. 由于$E$取连续谱，有

$$\int\Phi_E^*(p)\Phi_{E_1}(p)\mathrm{d}p=\delta(E-E_1)\ ,$$

得$C=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar Q\varepsilon}}$，故

$$\Phi_E(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar Q\varepsilon}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar Q\varepsilon}\left(Ep-\frac{p^3}{6\mu}\right)}\ .$$

答　一维均匀电场中的带电粒子的能量本征值为$E=\sqrt[3]{\frac{\hbar^4Q^2\varepsilon^2}{2\mu}}\lambda$，$\lambda$是量纲为

一的能量参数，本征函数在 x 表象中为 $\psi(\xi)=\begin{cases}\alpha\sqrt{\xi}\mathrm{H}_{1/3}^{(1)}\left(\dfrac{2}{3}\xi^{\frac{3}{2}}\right), & \xi\geqslant 0\\ \sqrt{|\xi|}\mathrm{K}_{1/3}\left(\dfrac{2}{3}\sqrt{|\xi|^3}\right), & \xi<0\end{cases}$；在 p_x 表象中为

$$\Phi_E(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar Q\varepsilon}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar Q\varepsilon}\left(Ep-\frac{p^3}{6\mu}\right)}.$$

3.50　在 p_x 表象中，求解一维 δ 吸引势 $V(x)=-g\delta(x)$

分析　在动量表象中，哈密顿

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2\mu}-g\delta(\hat{x}),\quad \hat{x}=\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p},\tag{3.50-1}$$

$$\delta(\hat{x})=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_1x}\mathrm{d}p_1.$$

解　定态方程在动量表象的表示为

$$\left[\frac{p^2}{2\mu}-\frac{g}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_1x\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}}\mathrm{d}p_1\right]\Phi(p)=E\Phi(p).\tag{3.50-2}$$

对于束缚态，$E<0$，式(3.50-2)中的积分项为

$$I=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-p_1\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}}\mathrm{d}p_1\Phi(p)=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p_1\Phi(p-p_1)=A,\tag{3.50-3}$$

则方程式(3.50-2)成为

$$\frac{p^2}{2\mu}\Phi(p)-\frac{g}{2\pi\hbar}A=E\Phi(p),\tag{3.50-4}$$

解得

$$\Phi(p)=\frac{gA}{2\pi\hbar}\frac{1}{\dfrac{p^2}{2\mu}-E}=\frac{2\mu gA}{2\pi\hbar}\frac{1}{p^2-2\mu E}.\tag{3.50-5}$$

将式(3.50-5)代入式(3.50-3)，有

$$A=\frac{2\mu gA}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}p_1}{(p-p_1)^2-2\mu E},\quad E<0,$$

即

$$1=\frac{\mu g}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}p}{p^2+2\mu|E|}. \tag{3.50-6}$$

根据复变函数的约当定理，式(3.50-6)积分可补上积分路径的大半圆，如图 3.50-1 所示，式(3.50-6)写成

$$1=\frac{\mu g}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}p}{(p-\mathrm{i}\sqrt{2\mu E})(p+\mathrm{i}\sqrt{2\mu E})}=\frac{\mu g}{\pi\hbar}2\pi\mathrm{i}\frac{1}{2\mathrm{i}\sqrt{2\mu|E|}}. \tag{3.50-7}$$

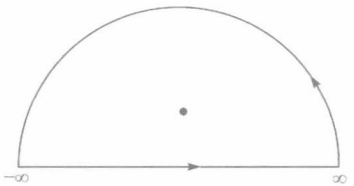

图 3.50-1　约当定理的应用

$$|E|=\frac{\mu g^2}{2\hbar}\to E=-\frac{\mu g^2}{2\hbar}, \tag{3.50-8}$$

再求波函数 $\Phi(p)$，根据式(3.50-5)，有

$$\Phi(p)=\frac{Ag}{2\pi\hbar}\frac{1}{\dfrac{p^2}{2\mu}+\dfrac{\mu g^2}{2\hbar^2}}=\frac{\mu Ag}{\pi\hbar}\frac{1}{p^2+\dfrac{\mu^2g^2}{\hbar^2}},$$

常数 A 由归一化条件确定，

$$\int_{-\infty}^{\infty}\Phi^2(p)\mathrm{d}p=1=A^2\left(\frac{\mu g}{\pi\hbar}\right)^2\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}p}{\left(p^2+\dfrac{\mu^2g^2}{\hbar^2}\right)^2}, \tag{3.50-9}$$

其中积分部分

$$I=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}p}{\left(p-\mathrm{i}\dfrac{\mu g}{\hbar}\right)^2\left(p+\mathrm{i}\dfrac{\mu g}{\hbar}\right)^2}. \tag{3.50-10}$$

可见 $p=\mathrm{i}\dfrac{\mu g}{\hbar}$ 是 2 阶极点，如何求留数？若 b 是 $m(\geqslant 2)$ 阶极点，

$$f(z)=\frac{a_{-m}}{(z-b)^m}+\frac{a_{-m+1}}{(z-b)^{m-n}}+\cdots+\frac{a_{-1}}{(z-b)}+a_0+a_1(z-b)+a_2(z-b)^2+\cdots, \tag{3.50-11}$$

将式(3.50-11)求导 $m-1$ 次，得

$$\frac{\mathrm{d}^{m-1}}{\mathrm{d}z^{m-1}}[(z-b)^m f(z)]=(m-1)!a_{-1}+m!a_0(z-b)+\cdots, \tag{3.50-12}$$

再令 $z\to b$，则所有 $(z-b)^m\to 0$，$a_{-1}=\dfrac{1}{(m-1)!}\left\{\dfrac{\mathrm{d}^{m-1}}{\mathrm{d}z^{m-1}}[(z-b)^m f(z)]\right\}_{z=b}$.

现在 $m=2$，$b=\mathrm{i}\dfrac{\mu g}{\hbar}$，$f(z)=\dfrac{1}{\left(z-\mathrm{i}\dfrac{\mu g}{\hbar}\right)^2\left(z+\mathrm{i}\dfrac{\mu g}{\hbar}\right)^2}$,

$$a_{-1}=\left\{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}[(z-b)^2 f(z)]\right\}_{z=b=\mathrm{i}\frac{\mu g}{\hbar}}=\left\{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left[\frac{1}{\left(z+\mathrm{i}\frac{\mu g}{\hbar}\right)^2}\right]\right\}_{z=\mathrm{i}\frac{\mu g}{\hbar}}$$

$$=\frac{-2}{\left(z+\mathrm{i}\frac{\mu g}{\hbar}\right)^3}\bigg|_{z=\mathrm{i}\frac{\mu g}{\hbar}}=\frac{-2}{\left(2\mathrm{i}\frac{\mu g}{\hbar}\right)^3}=\frac{1}{4\mathrm{i}\left(\frac{\mu g}{\hbar}\right)^3}.$$

$$I=2\pi\mathrm{i}a_{-1}=\frac{\pi}{2\left(\frac{\mu g}{\hbar}\right)^3}.$$

将 I 代入式(3.50-8)，得 $1=A^2\left(\frac{\mu g}{\pi\hbar}\right)^2\frac{\pi}{2\left(\frac{\mu g}{\hbar}\right)^3}=A^2\frac{1}{2\pi}\frac{\hbar}{\mu g}$，即 $A=\sqrt{\frac{2\pi\mu g}{\hbar}}$.

$$\Phi(p)=\sqrt{\frac{2\pi\mu g}{\hbar}}\frac{\mu g}{\pi\hbar}\frac{1}{p^2+\frac{\mu^2 g^2}{\hbar^2}}=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\left(\frac{\mu g}{\pi\hbar}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{1}{p^2+\frac{\mu^2 g^2}{\hbar^2}},\qquad(3.50\text{-}13)$$

将用 x 表象求得的(参见题 2.18 的解)

$$\psi(x)=\begin{cases}\sqrt{\frac{\mu g}{\hbar^2}}\mathrm{e}^{\frac{\mu g}{\hbar^2}x}, & x<0\\ \sqrt{\frac{\mu g}{\hbar^2}}\mathrm{e}^{-\frac{\mu g}{\hbar^2}x}, & x>0\end{cases}$$

作傅里叶积分展开

$$\psi(x)=\int\Phi(p)\frac{\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{d}p,$$

$$\Phi(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\psi(x)\mathrm{d}x=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\sqrt{\frac{\mu g}{\hbar^2}}\int\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px+\frac{\mu g x}{\hbar^2}}\mathrm{d}x+\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\sqrt{\frac{\mu g}{\hbar^2}}\int\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px-\frac{\mu g x}{\hbar^2}}\mathrm{d}x$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\sqrt{\frac{\mu g}{\hbar^2}}\left[\frac{\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px+\frac{\mu g x}{\hbar^2}}}{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p+\frac{\mu g}{\hbar^2}}\bigg|_{-\infty}^{0}+\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px-\frac{\mu g x}{\hbar^2}}}{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p-\frac{\mu g}{\hbar^2}}\bigg|_{0}^{\infty}\right]$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\sqrt{\frac{\mu g}{\hbar^2}}\left[\frac{1}{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p+\frac{\mu g}{\hbar^2}}+\frac{1}{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p+\frac{\mu g}{\hbar^2}}\right]$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\sqrt{\frac{\mu g}{\hbar^2}}\frac{2\frac{\mu g}{\hbar^2}}{\left(\frac{\mu g}{\hbar^2}\right)^2+\left(\frac{p}{\hbar}\right)^2}=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\sqrt{\left(\frac{\mu g}{\hbar}\right)^3}\frac{1}{p^2+\left(\frac{\mu g}{\hbar}\right)^2}.$$

这和在动量表象中的计算结果一致.

答　在 p_x 表象中，对于一维 δ 吸引势 $V(x)=-g\delta(x)$ 时波函数为

$$\psi(x)=\int\sqrt{\frac{2}{\pi}}\sqrt{\left(\frac{\mu g}{\hbar}\right)^3}\frac{1}{p^2+\left(\frac{\mu g}{\hbar}\right)^2}\frac{\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{d}p=\begin{cases}\sqrt{\frac{\mu g}{\hbar^2}}\mathrm{e}^{\frac{\mu g}{\hbar^2}x}, & x<0\\ \sqrt{\frac{\mu g}{\hbar^2}}\mathrm{e}^{-\frac{\mu g}{\hbar^2}x}, & x>0\end{cases}.$$

3.51　已知算符 $\hat{A}^2=0$，$\hat{A}\hat{A}^+ + \hat{A}^+\hat{A}=1$，$\hat{B}=\hat{A}^+\hat{A}$，证明 $\hat{B}^2=\hat{B}$，求在 B 表象中 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 矩阵表示，不考虑简并.

分析　由 $\hat{B}=\hat{A}^+\hat{A}$，得 $\hat{B}^2=\hat{A}^+\hat{A}\hat{A}^+\hat{A}$，由于 $\hat{A}\hat{A}^+=1-\hat{A}^+\hat{A}$，所以，

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

式中 $\hat{A}\hat{A}=\hat{A}^2=0$.

解　设 $\hat{B}|b_n\rangle=b_n|b_n\rangle$，则 $\hat{B}^2-\hat{B}=0$，而 $0=(\hat{B}^2-\hat{B})|b_n\rangle(b_n^2-b_n)|b_n\rangle$，即

$$b_n^2-b_n=0,\quad b_n=1,0.$$

$\hat{B}$ 在本身表象中的表示是对角矩阵，对角元素为 $\hat{B}$ 的本征值为 $1,0$，不考虑简并性，有

$$\hat{B}=\begin{vmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{vmatrix}.$$

设 $\hat{A}$ 在 B 表象中的矩阵为 $\hat{A}=\begin{vmatrix}a & b\\ c & d\end{vmatrix}$，则因为 $\hat{A}^2=0$，有

$$0=\hat{A}^2=\begin{vmatrix}a & b\\ c & d\end{vmatrix}\begin{vmatrix}a & b\\ c & d\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}a^2+bc & ab+bd\\ ca+dc & cb+d^2\end{vmatrix},$$

即

$$a^2+bc=0,\tag{3.51-1}$$

$$ab+bd=0\,,\tag{3.51-2}$$

$$ca+dc=0\,,\tag{3.51-3}$$

$$cb+d^2=0\,.\tag{3.51-4}$$

由式(3.51-1)、式(3.51-2)、式(3.51-3)、式(3.51-4)得 $a=d$，

$$\hat{A}=\begin{vmatrix}a & b\\ c & a\end{vmatrix},\quad \hat{A}^{+}=\begin{vmatrix}a^{*} & c^{*}\\ b^{*} & a^{*}\end{vmatrix}.$$

由 $\hat{B}=\hat{A}^{+}\hat{A}$，得

$$\begin{vmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}a^{*} & c^{*}\\ b^{*} & a^{*}\end{vmatrix}\begin{vmatrix}a & b\\ c & a\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}|a|^2+|c|^2 & a^{*}b+c^{*}a\\ b^{*}a+a^{*}c & |b|^2+|a|^2\end{vmatrix},$$

即有

$$|a|^2+|c|^2=1\,,\tag{3.51-5}$$

$$a^{*}b+c^{*}a=0\,,\tag{3.51-6}$$

$$b^{*}a+a^{*}c=0\,,\tag{3.51-7}$$

$$|b|^2+|a|^2=0\,.\tag{3.51-8}$$

由式(3.51-8)得 $|a|^2=0$，$|b|^2=0\ |\!\rightarrow a=0,b=0$．将 $|a|^2=0$ 代入式(3.51-5)得 $|c|^2=1$，于是 $c=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}$，故

$$\hat{A}=\begin{vmatrix}0 & 0\\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} & 0\end{vmatrix},\quad \hat{A}^{+}=\begin{vmatrix}0 & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\\ 0 & 0\end{vmatrix}.$$

答　在 B 表象中，$\hat{A}$ 矩阵表示为 $\hat{A}=\begin{vmatrix}0 & 0\\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} & 0\end{vmatrix}$，$\hat{B}$ 矩阵表示为 $\hat{B}=\begin{vmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{vmatrix}$.

3.52　设线性厄米算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 满足条件：$\hat{A}^2=\hat{B}^2=1$，$\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}=0$，且 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 均不简并，

(1) 在 A 表象中，求算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的矩阵表示；(2) 在 B 表象中，求算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的矩阵表示；(3) 在 A 表象中，求算符 $\hat{B}$ 的本征态；(4) 在 B 表象中，求算符 $\hat{A}$ 的本征态.

分析　利用线性厄米算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 满足条件：$\hat{A}^2=\hat{B}^2=1$，$\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}=0$，再加上题设的 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 均不简并条件，进行分析计算.

解　(1) 在 A 表象中，求算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的矩阵表示.

设 $\hat{A}|a_n\rangle=a_n|a_n\rangle$，由于 $\hat{A}^2=1$，则 $\hat{A}^2|a_n\rangle=a_n^2|a_n\rangle=1|a_n\rangle$，所以 $a_n^2=1$，

$a_n=\pm1$.

因 $\hat{A}$ 不简并，故在 A 表象中 $\hat{A}$ 为对角矩阵 $\hat{A}=\begin{vmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{vmatrix}$.

设 $\hat{B}$ 在 A 表象中为 $\hat{B}=\begin{vmatrix}a & b\\ c & d\end{vmatrix}$，$a,b,c,d$ 待求，由于 $\hat{B}$ 是厄米算符，$\hat{B}=\hat{B}^{+}$，所以

$\begin{vmatrix}a & b\\ c & d\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}a^* & c^*\\ b^* & d^*\end{vmatrix}$，可见 a 和 d 是实数，$b^*=c$，所以 $\hat{B}=\begin{vmatrix}a & b\\ b^* & d\end{vmatrix}$，由 $\hat{B}^2=1$，有

$\begin{vmatrix}a & b\\ b^* & d\end{vmatrix}\begin{vmatrix}a & b\\ b^* & d\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}a^2+b^*b & ab+bd\\ b^*a+db^* & |b|^2+|d|^2\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{vmatrix}$，得到

$b(a+d)=0$，$b^*(a+d)=0$，即 $d=-a$，$b=b^*$；

$a^2+|b|^2=1$，$d^2+|b|^2=1$，即 $a^2=d^2$.

于是 $\hat{B}=\begin{vmatrix}a & b\\ b^* & -a\end{vmatrix}$.

由 $\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}=0$，有 $\begin{vmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{vmatrix}\begin{vmatrix}a & b\\ b^* & -a\end{vmatrix}+\begin{vmatrix}a & b\\ b^* & -a\end{vmatrix}\begin{vmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}2a & 0\\ 0 & 2a\end{vmatrix}=0$，所以 $a=0$，$\hat{B}=\begin{vmatrix}0 & b\\ b^* & 0\end{vmatrix}$.

由 $\hat{B}^2=1$，$\begin{vmatrix}0 & b\\ b^* & 0\end{vmatrix}\begin{vmatrix}0 & b\\ b^* & 0\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}|b|^2 & 0\\ 0 & |b|^2\end{vmatrix}=1$，$|b|^2=1$.

令 $b=1$，$\hat{B}=\begin{vmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{vmatrix}$.

(2) 在 B 表象中，求算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的矩阵表示.

设 $\hat{B}|b_n\rangle=b_n|b_n\rangle$，由于 $\hat{B}^2=1$，$\hat{B}|b_n\rangle=b_n^2|b_n\rangle=1|b_n\rangle$，$b_n^2=1$，$b_n=\pm1$.

因 $\hat{B}$ 不简并，故在 B 表象，$\hat{B}$ 为对角矩阵，$\hat{B}=\begin{vmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{vmatrix}$.

设 $\hat{A}$ 在 B 表象中为 $\hat{A}=\begin{vmatrix}a & b\\ c & d\end{vmatrix}$，$a,b,c,d$ 待求.

由于 $\hat{A}$ 是厄米算符，$\hat{A}=\hat{A}^{+}$，所以 $\begin{vmatrix}a & b\\ c & d\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}a^* & c^*\\ b^* & d^*\end{vmatrix}$，可见 a 和 d 是实数，$b=c^*$，所以

$\hat{A}=\begin{vmatrix} a & b \\ b^* & d \end{vmatrix}$，由 $\hat{A}^2=1$，$\begin{vmatrix} a & b \\ b^* & d \end{vmatrix}\begin{vmatrix} a & b \\ b^* & d \end{vmatrix}=\begin{vmatrix} a^2+bb^* & ab+bd \\ b^*a+db^* & |b|^2+d^2 \end{vmatrix}=\begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}$，得到

$$b(a+d)=0,\quad b^*(a+d)=0\rightarrow d=-a;$$

$$a^2+|b|^2=1,\quad d^2+|b|^2=1\rightarrow d^2=a^2,$$

即 $\hat{A}=\begin{vmatrix} a & b \\ b^* & -a \end{vmatrix}$，由 $\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}=1$，得到

$$\begin{vmatrix} a & b \\ b^* & -a \end{vmatrix}\begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}+\begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}\begin{vmatrix} a & b \\ b^* & -a \end{vmatrix}=\begin{vmatrix} 2a & 0 \\ 0 & 2a \end{vmatrix}=\begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix},\quad a=0,\quad \hat{A}=\begin{vmatrix} 0 & b \\ b^* & 0 \end{vmatrix},\quad 由$$

$\hat{A}^2=1$，即

$$\begin{vmatrix} 0 & b \\ b^* & 0 \end{vmatrix}\begin{vmatrix} 0 & b \\ b^* & 0 \end{vmatrix}=\begin{vmatrix} |b|^2 & 0 \\ 0 & |b|^2 \end{vmatrix}=\begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix},\quad 得|b|^2=1,\quad 令b=1,\quad 得\hat{A}=\begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}.$$

讨论：由此可见，算符的形式由算符的代数性质决定，题设 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的代数性质是对称的，所以以上第(1) 部分和第(2) 部分的计算结果是对称的.

(3) 在 A 表象中，求 $\hat{B}$ 的本征态.

在 A 表象中，$\hat{B}=\begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}$，其本征方程为 $\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}=b\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$，由 $\det\begin{vmatrix} -b & 1 \\ 1 & -b \end{vmatrix}=0$，得 $b=\pm1$.

以 $b=1$ 代入方程，得 $\begin{bmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}=0$，解得 $\beta=\alpha$，$\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$；

以 $b=-1$ 代入方程，得 $\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}=0$，解得 $\beta=-\alpha$，$\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$.

(4) 在 B 表象中，求 $\hat{A}$ 的本征态.

在 B 表象中，$\hat{A}=\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$，其本征方程为 $\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}=a\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$，由 $\det\begin{vmatrix} -a & 1 \\ 1 & -a \end{vmatrix}=0$，得 $a=\pm1$.

以 $a=1$ 代入方程，得 $\begin{bmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}=0$，解得 $\beta=\alpha$，$\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$；

以 $a=-1$ 代入方程，得 $\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}=0$，解得 $\beta=-\alpha$，$\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$.

答　(1) 在 A 表象中，算符 $\hat{A}$ 为对角矩阵且 $\hat{A}=\begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}$，算符 $\hat{B}=\begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}$.

(2) 在 B 表象中，算符 $\hat{A}=\begin{vmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{vmatrix}$，算符 $\hat{B}=\begin{vmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{vmatrix}$.

(3) 在 A 表象中，求 $\hat{B}$ 的本征态为 $\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\end{bmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ 1\end{bmatrix}$ 和 $\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\end{bmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ -1\end{bmatrix}$.

(4) 在 B 表象中，求 $\hat{A}$ 的本征态为 $\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\end{bmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ 1\end{bmatrix}$ 和 $\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\end{bmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ -1\end{bmatrix}$.

3.53　设体系的哈密顿算符 $\hat{H}$ 及另一力学量 B 在能量表象中的矩阵表示分别为

$$\hat{H}=\hbar\omega\begin{vmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 2 & 0\\ 0 & 0 & 2\end{vmatrix},\quad \hat{B}=b\begin{vmatrix}0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{vmatrix},$$

其中 ω_0 和 b 为正实常数，设 $t=0$ 时，体系在能量表象中的表示为 $\psi(t=0)=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}\sqrt{2}\\ 1\\ 1\end{bmatrix}$，求 $t>0$ 时，(1) 体系在能量表象中的态表示；(2) 体系能量的可能测量值及相应的概率、平均值；(3) 力学量 B 的可能测量值及相应的概率、平均值；(4) $t>0$ 体系在 B 表象中的态表示.

分析　已知 $\hat{H}=\hbar\omega_0\begin{vmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 2 & 0\\ 0 & 0 & 2\end{vmatrix}$，$\hat{H}\begin{bmatrix}1\\ 0\\ 0\end{bmatrix}=\hbar\omega_0\begin{bmatrix}1\\ 0\\ 0\end{bmatrix}$，$\hat{H}\begin{bmatrix}0\\ 1\\ 0\end{bmatrix}=2\hbar\omega_0\begin{bmatrix}0\\ 1\\ 0\end{bmatrix}$，$\hat{H}\begin{bmatrix}0\\ 0\\ 1\end{bmatrix}=2\hbar\omega_0\begin{bmatrix}0\\ 0\\ 1\end{bmatrix}$，能量表象的基：$\xi^{(1)}_{\hbar\omega_0}=\begin{bmatrix}1\\ 0\\ 0\end{bmatrix}$，$\xi^{(2)}_{2\hbar\omega_0}=\begin{bmatrix}0\\ 1\\ 0\end{bmatrix}$，$\xi^{(3)}_{2\hbar\omega_0}=\begin{bmatrix}0\\ 0\\ 1\end{bmatrix}$.

已知 $\hat{B}$ 在能量表象中的矩阵 $\hat{B}=b\begin{vmatrix}0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{vmatrix}$，$\hat{B}$ 的本征矢量为

$$b\begin{bmatrix}0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\\ \gamma\end{bmatrix}=b\lambda\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\\ \gamma\end{bmatrix},$$

则

$$\begin{bmatrix}-\lambda & 1 & 0\\ 1 & -\lambda & 0\\ 0 & 0 & 1-\lambda\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\\ \gamma\end{bmatrix}=0,\tag{3.53-1}$$

由 $\det\begin{vmatrix}-\lambda & 1 & 0\\ 1 & -\lambda & 0\\ 0 & 0 & 1-\lambda\end{vmatrix}=0$，确定本征值 λ，

$\lambda^2(1-\lambda)-(1-\lambda)=(1-\lambda)(\lambda^2-1)=0$，得 $\lambda_1=1$ 二重简并，$\lambda_2=-1$，即 $\hat{B}$ 的本征值为 b 和 $-b$.

将 $\lambda_1=1$ 代入式(3.53-1)，有

$$\begin{bmatrix}-1 & 1 & 0\\ 1 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\\ \gamma\end{bmatrix}=0,\ \to\alpha=\beta,\gamma\text{ 任意},\ \eta_b^{(1)}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ 1\\ 0\end{bmatrix},\ \eta_b^{(2)}=\begin{bmatrix}0\\ 0\\ 1\end{bmatrix};$$

将 $\lambda_2=-1$ 代入式(3.53-1)，有

$$\begin{bmatrix}1 & 1 & 0\\ 1 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\\ \gamma\end{bmatrix}=0,\ \to\alpha=-\beta,\gamma=0,\ \eta_{-b}^{(3)}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ -1\\ 0\end{bmatrix}.$$

解　(1) $\psi(t)=C_1\begin{bmatrix}1\\ 0\\ 0\end{bmatrix}e^{-i\omega_0 t}+C_2\begin{bmatrix}0\\ 1\\ 0\end{bmatrix}e^{-i2\omega_0 t}+C_3\begin{bmatrix}0\\ 0\\ 1\end{bmatrix}e^{-i2\omega_0 t}$，已知

$$\psi(0)=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}\sqrt{2}\\ 1\\ 1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}C_1\\ 0\\ 0\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}0\\ C_2\\ 0\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}0\\ 0\\ C_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}C_1\\ C_2\\ C_3\end{bmatrix},$$

所以

$$C_1=\frac{\sqrt{2}}{2},\ C_2=\frac{1}{2},\ C_3=\frac{1}{2},$$

$$\psi(t)=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}\sqrt{2}e^{-i\omega_0 t}\\ e^{-i2\omega_0 t}\\ e^{-i2\omega_0 t}\end{bmatrix}.$$

(2) 体系能量可能测量值为 $\hbar\omega_0$ 和 $2\hbar\omega_0$，相应的概率分别为 $\left|\frac{\sqrt{2}}{2}\right|^2=\frac{1}{2}$ 和 $\left|\frac{1}{2}\right|^2+\left|\frac{1}{2}\right|^2=\frac{1}{2}$. 能量平均值为 $<E>=\frac{1}{2}\hbar\omega_0+\frac{1}{2}2\hbar\omega_0=\frac{3}{2}\hbar\omega_0$.

(3) 力学量 B 的测量.

已知 $\hat{B}$ 的三个本征矢量为 $\eta_b^{(1)}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ 1\\ 0\end{bmatrix}$，$\eta_b^{(2)}=\begin{bmatrix}0\\ 0\\ 1\end{bmatrix}$，$\eta_{-b}^{(3)}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ -1\\ 0\end{bmatrix}$，将 $\psi(t)$ 按

$\hat{B}$ 的三个本征矢量展开，$\psi(t)=\dfrac{1}{2}\begin{bmatrix}\sqrt{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}\\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\omega_0 t}\\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\omega_0 t}\end{bmatrix}=\alpha\eta_b^{(1)}+\beta\eta_b^{(2)}+\alpha\eta_{-b}^{(3)}$，利用 $\hat{B}$ 的三个本征矢量的正交归一性，得到

$$\alpha=\eta_b^{(1)+}\psi(t)=\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1 & 1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\sqrt{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}\\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\omega_0 t}\\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\omega_0 t}\end{bmatrix}=\frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\sqrt{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\omega_0 t}\right),$$

$$\beta=\eta_b^{(2)+}\psi(t)=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}0 & 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\sqrt{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}\\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\omega_0 t}\\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\omega_0 t}\end{bmatrix}=\frac{1}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\omega_0 t},$$

$$\gamma=\eta_{-b}^{(3)+}\psi(t)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & -1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\sqrt{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}\\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\omega_0 t}\\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\omega_0 t}\end{bmatrix}=\frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\sqrt{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\omega_0 t}\right),$$

所以测到 B 的值为 b 的相应概率为

$$|\alpha|^2+|\beta|^2=\left|\frac{1}{2\sqrt{2}}(\sqrt{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\omega_0 t})\right|^2+\frac{1}{4}=\frac{1}{8}[2+1+\sqrt{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}+\sqrt{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\omega_0 t}]+\frac{1}{4}$$

$$=\frac{5}{8}+\frac{\sqrt{2}}{8}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}+\frac{\sqrt{2}}{8}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t}=\frac{5}{8}+\frac{\sqrt{2}}{4}\cos\omega_0 t$$

测到 B 的值为 $-b$ 的相应的概率为

$$|\gamma|^2=\frac{1}{8}[2+1-\sqrt{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\omega_0 t}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\omega_0 t}\sqrt{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}]=\frac{3}{8}-\frac{\sqrt{2}}{4}\cos\omega_0 t,$$

$$\langle B\rangle=b\left(\frac{5}{8}+\frac{\sqrt{2}}{4}\cos\omega_0 t\right)-b\left(\frac{3}{8}-\frac{\sqrt{2}}{4}\cos\omega_0 t\right)=b\left(\frac{1}{4}+\frac{\sqrt{2}}{2}\cos\omega_0 t\right).$$

(4) $t>0$ 时，在 B 表象中的态表示.

要将在 H (能量)表象的态表示通过幺正变换 $\hat{U}$，转到 B 表象中的态表示，为此，先求幺正变换 $\hat{U}$，将 H 表象的基按 B 表象的基矢组展开：

$$\xi^{(1)}=\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}=\sum_{j=1}^{3}U_{j1}\eta^{(j)}=U_{11}\eta^{(1)}+U_{21}\eta^{(2)}+U_{31}\eta^{(3)},$$

$$\xi^{(2)}=\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}=\sum_{j=1}^{3}U_{j2}\eta^{(j)}=U_{12}\eta^{(1)}+U_{22}\eta^{(2)}+U_{32}\eta^{(3)},$$

$$\xi^{(3)}=\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}=\sum_{j=1}^{3}U_{j3}\eta^{(j)}=U_{13}\eta^{(1)}+U_{23}\eta^{(2)}+U_{33}\eta^{(3)},$$

$$U_{11}=\eta^{(1)+}\xi^{(1)}=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}},\quad U_{21}=\eta^{(2)+}\xi^{(1)}=\begin{bmatrix}0 & 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}=0,$$

$$U_{31}=\eta^{(3)+}\xi^{(1)}=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}},$$

$$U_{12}=\eta^{(1)+}\xi^{(2)}=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}},$$

$$U_{22}=\eta^{(2)+}\xi^{(2)}=\begin{bmatrix}0 & 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}=0,\quad U_{32}=\eta^{(3)+}\xi^{(2)}=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}=-\frac{1}{\sqrt{2}},$$

$$U_{13}=\eta^{(1)+}\xi^{(3)}=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}=0,\quad U_{23}=\eta^{(2)+}\xi^{(3)}=\begin{bmatrix}0 & 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}=1,$$

$$U_{33}=\eta^{(3)+}\xi^{(3)}=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}=1.$$

所以 $\hat{U}=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0\\0 & 0 & 1\\\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0\end{bmatrix}$.

$t>0$ 的态，在 B 表象中的表示为

$$\hat{U}\psi(t)=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0\\0 & 0 & 1\\\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\sqrt{2}e^{-i\omega_0 t}\\e^{-i2\omega_0 t}\\e^{-i2\omega_0 t}\end{bmatrix}\frac{1}{2}=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}e^{-i\omega_0 t}+\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i2\omega_0 t}\\e^{-i2\omega_0 t}\\e^{-i2\omega_0 t}-\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i2\omega_0 t}\end{bmatrix}.$$

答　(1) 体系在能量表象中的态表示为 $\psi(t)=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}\sqrt{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}\\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\omega_0 t}\\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\omega_0 t}\end{bmatrix}$；(2) 体系能量可能测量值为 $\hbar\omega_0$ 和 $2\hbar\omega_0$，相应的概率分别为 $\left|\frac{\sqrt{2}}{2}\right|^2=\frac{1}{2}$ 和 $\left|\frac{1}{2}\right|^2+\left|\frac{1}{2}\right|^2=\frac{1}{2}$，平均值为 $\langle E\rangle=\frac{1}{2}\hbar\omega_0+\frac{1}{2}2\hbar\omega_0=\frac{3}{2}\hbar\omega_0$；(3) 测到 B 的值为 b 的相应概率为 $\frac{5}{8}+\frac{\sqrt{2}}{4}\cos\omega_0 t$，测到 B 的值为 $-b$ 的相应的概率为 $\frac{3}{8}-\frac{\sqrt{2}}{4}\cos\omega_0 t$，平均值为 $b\left(\frac{1}{4}+\frac{\sqrt{2}}{2}\cos\omega_0 t\right)$；(4) $t>0$ 体系在 B 表象中的态表示为

$$\frac{1}{2}\begin{bmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}+\frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\omega_0 t}\\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\omega_0 t}\\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\omega_0 t}-\frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\omega_0 t}\end{bmatrix}.$$

3.54　设自然界中三种中微子 ν_e、ν_μ 和 ν_τ 之间互相转化是通过哈密顿算符 $\hat{H}=\hbar\omega_0\begin{bmatrix}0&1&1\\1&0&1\\1&1&0\end{bmatrix}$ 实现的，对应的三种中微子态表示为 $\psi_{\nu_e}=\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}$、$\psi_{\nu_\mu}=\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}$、$\psi_{\nu_\tau}=\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}$，如果 $t=0$ 时系统处于 ν_e 态，即 $|\psi(t=0)\rangle=\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}$，求 $t>0$ 的状态.

分析　$t=0$ 时系统处于纯 ν_e 态，出现的概率为 1.

解　设 t 时系统的态为

$$|\psi(t)\rangle=a(t)\psi_{\nu_e}+b(t)\psi_{\nu_\mu}+c(t)\psi_{\nu_\tau}=\begin{bmatrix}a(t)\\b(t)\\c(t)\end{bmatrix},\tag{3.54-1}$$

态的演化规律，即薛定谔方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix}a(t)\\b(t)\\c(t)\end{bmatrix}=\hbar\omega_0\begin{bmatrix}0&1&1\\1&0&1\\1&1&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a(t)\\b(t)\\c(t)\end{bmatrix}=\hbar\omega_0(A)\begin{bmatrix}a(t)\\b(t)\\c(t)\end{bmatrix},\tag{3.54-2}$$

其中矩阵 $(A)=\begin{bmatrix}0&1&1\\1&0&1\\1&1&0\end{bmatrix}$，相应的初始条件为

$$\begin{bmatrix}a(t)\\b(t)\\c(t)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}. \tag{3.54-3}$$

方程组(3.54-2)是 $a(t)$、$b(t)$、$c(t)$ 相互耦合在一起的，设通过一个线性变换 (S) 使方程组脱耦，

$$\begin{bmatrix}a(t)\\b(t)\\c(t)\end{bmatrix}=(S)\begin{bmatrix}x(t)\\y(t)\\z(t)\end{bmatrix}, \tag{3.54-4}$$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix}a(t)\\b(t)\\c(t)\end{bmatrix}=\mathrm{i}\hbar(S)\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix}x(t)\\y(t)\\z(t)\end{bmatrix}=\hbar\omega_0(A)(S)\begin{bmatrix}a(t)\\b(t)\\c(t)\end{bmatrix}, \tag{3.54-5}$$

以 (S) 的逆矩阵 $(S)^{-1}$ 乘以式(3.54-5)，得

$$\begin{bmatrix}\dot{x}(t)\\\dot{y}(t)\\\dot{z}(t)\end{bmatrix}=\frac{\omega_0}{\mathrm{i}}(S)^{-1}(A)(S)\begin{bmatrix}x(t)\\y(t)\\z(t)\end{bmatrix}. \tag{3.54-6}$$

选择适当的 (S) 矩阵，使 $(S)^{-1}(A)(S)$ 对角化，则 $x(t)$、$y(t)$、$z(t)$ 的方程各自分离成一阶常微分方程，选择 (S) 矩阵如下：

先求 $(A)=\begin{bmatrix}0&1&1\\1&0&1\\1&1&0\end{bmatrix}$ 的特征值方程，$(A)\begin{bmatrix}\alpha\\\beta\\\gamma\end{bmatrix}=\lambda\begin{bmatrix}\alpha\\\beta\\\gamma\end{bmatrix}$，

$$(A-\lambda I)\begin{bmatrix}\alpha\\\beta\\\gamma\end{bmatrix}=0,\ I\text{ 为单位矩阵}, \tag{3.54-7}$$

线性齐次方程组有解条件为其系数矩阵的行列式为零，则 $\det(A-\lambda I)=0$，即

$$\begin{vmatrix}-\lambda&1&1\\1&-\lambda&1\\1&1&-\lambda\end{vmatrix}=-\lambda^3+2+3\lambda=-(\lambda-2)(\lambda+1)^2=0,$$

解得 $\lambda_1=-1$(二重根)，$\lambda_2=2$.

将 $\lambda_1=-1$ 代入方程，得 $\nu_1=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\0\\-1\end{bmatrix}$，$\nu_2=\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{bmatrix}1\\-2\\1\end{bmatrix}$，

将 $\lambda_2=2$ 代入方程，得 $\nu_3=\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{bmatrix}1\\1\\1\end{bmatrix}$，故 (S) 矩阵为

$$(S)=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}}\\ 0 & -\frac{2}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}}\\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}}\end{bmatrix}, \tag{3.54-8}$$

由方程(3.54-6)得到

$$\dot{x}(t)=-\left(\frac{\omega_0}{\mathrm{i}}\right)x(t),\quad \dot{y}(t)=-\left(\frac{\omega_0}{\mathrm{i}}\right)y(t),\quad \dot{z}(t)=2\left(\frac{\omega_0}{\mathrm{i}}\right)z(t), \tag{3.54-9}$$

解得

$$x(t)=x_0\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t},\quad y(t)=y_0\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t},\quad z(t)=z_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\omega_0 t}, \tag{3.54-10}$$

将式(3.54-8)和式(3.54-10)代入式(3.54-4)，得

$$\begin{cases}a(t)=\frac{1}{\sqrt{2}}x_0\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t}+\frac{1}{\sqrt{6}}y_0\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t}+\frac{1}{\sqrt{3}}z_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\omega_0 t},\\ b(t)=-\frac{2}{\sqrt{6}}y_0\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t}+\frac{1}{\sqrt{3}}z_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\omega_0 t},\\ c(t)=-\frac{1}{\sqrt{2}}x_0\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t}+\frac{1}{\sqrt{6}}y_0\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t}+\frac{1}{\sqrt{3}}z_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\omega_0 t}.\end{cases} \tag{3.54-11}$$

由初始条件得 $a(0)=1$，$b(0)=0$，$c(0)=0$，得

$$\begin{cases}\frac{1}{\sqrt{2}}x_0+\frac{1}{\sqrt{6}}y_0+\frac{1}{\sqrt{3}}z_0=1,\\ -\frac{2}{\sqrt{6}}y_0+\frac{1}{\sqrt{3}}z_0=0,\\ -\frac{1}{\sqrt{2}}x_0+\frac{1}{\sqrt{6}}y_0+\frac{1}{\sqrt{3}}z_0=0.\end{cases} \tag{3.54-12}$$

从方程组(3.54-12)，解得 $x_0=\frac{1}{\sqrt{2}}$，$y_0=\frac{1}{\sqrt{6}}$，$z_0=\frac{1}{\sqrt{3}}$，故有

$$|\psi(t)\rangle=\begin{bmatrix}\frac{2}{3}e^{i\omega_0 t}+\frac{1}{3}e^{-i2\omega_0 t}\\ -\frac{1}{3}e^{i\omega_0 t}+\frac{1}{3}e^{-i2\omega_0 t}\\ -\frac{1}{3}e^{i\omega_0 t}+\frac{1}{3}e^{-i2\omega_0 t}\end{bmatrix},\tag{3.54-13}$$

讨论：当 $t=0$ 时，$|\psi(0)\rangle=\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}$，呈纯的 ν_e；

当 $t=\dfrac{\pi}{\omega_0}$ 时，$\left|\psi\left(\dfrac{\pi}{\omega_0}\right)\right\rangle=\begin{bmatrix}-\frac{1}{3}\\ \frac{2}{3}\\ \frac{2}{3}\end{bmatrix}$，$\nu_\mu$ 和 ν_τ 出现的概率为 $\dfrac{4}{9}$，ν_e 出现的概率为 $\dfrac{1}{9}$；

当 $t=\dfrac{2\pi}{\omega_0}$ 时，$\left|\psi\left(\dfrac{2\pi}{\omega_0}\right)\right\rangle=\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}$，又呈纯的 ν_e.

这样的周期变化，称为中微子振荡.

答　当 $t=\dfrac{\pi}{\omega_0}$ 时，ν_μ 和 ν_τ 出现的概率为 $\dfrac{4}{9}$，ν_e 出现的概率为 $\dfrac{1}{9}$；当 $t=\dfrac{2\pi}{\omega_0}$ 时，又呈纯的 ν_e 态，这样的周期变化，称为中微子振荡.

第四章　单粒子问题

4.1　证明在 L_z 具有完全确定值的态 ψ 中，$\hat{L}_x$ 和 $\hat{L}_y$ 的平均值等于零.

分析　设 $\hat{L}_z|m\rangle = m\hbar|m\rangle$，$m=0,1,2,\cdots$，在 $\hat{L}_z$ 的本征态 $|m\rangle$，L_z 有完全确定值 $m\hbar$.

证明　在 $|m\rangle$ 态，L_x 的平均值为 $\langle m|\hat{L}_x|m\rangle$，考虑到角动量算符的代数性质

$$\hat{L}_x = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{L}_y\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_y],$$

$$\langle m|\hat{L}_x|m\rangle = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle m|\hat{L}_y\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_y|m\rangle = \frac{m}{\mathrm{i}}\langle m|\hat{L}_y|m\rangle - \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle m|\hat{L}_z\hat{L}_y|m\rangle,$$

式中 $\langle m|\hat{L}_z\hat{L}_y|m\rangle = (\langle m|\hat{L}_z^{+})\hat{L}_y|m\rangle = m\hbar\langle m|\hat{L}_y|m\rangle$，所以

$$\langle m|\hat{L}_x|m\rangle = \frac{m}{\mathrm{i}}\langle m|\hat{L}_y|m\rangle - \frac{m}{\mathrm{i}}\langle m|\hat{L}_y|m\rangle = 0. \tag{4.1-1}$$

式中 $\langle m|\hat{L}_y|m\rangle$ 不是无穷大，由于 $\hat{L}_y = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{L}_z\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_z]$，故

$$\langle m|\hat{L}_y|m\rangle = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle m|\hat{L}_z\hat{L}_x - \hat{L}_x\hat{L}_z|m\rangle = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\{m\hbar\langle m|\hat{L}_x|m\rangle - m\hbar\langle m|\hat{L}_x|m\rangle\} = 0.$$

证毕.

4.2　证明：如果在某状态 ψ，$\hat{L}_z\psi = m\hbar\psi$，则相当于与 z 轴夹 θ 角的 z_1 轴，角动量的平均值

$$\langle L_{z_1}\rangle = m\hbar\cos\theta.$$

分析　由题 4.1 可得 $\langle m|\hat{L}_x|m\rangle$，$\langle m|\hat{L}_y|m\rangle$，又对于某状态 ψ，有 $\hat{L}_z\psi = m\hbar\psi$，$z_1$ 轴与 z 轴夹 θ 角.

证明　设 ψ 和 $\hat{L}_z$ 是在 x,y,z 坐标系的表示，而 z_1 轴上的单位矢量 $\boldsymbol{e}_{z_1}$ 在 x,y,z 坐标系中的分量为 $(\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$，则 $\hat{L}_z = \hat{\boldsymbol{L}}\cdot\boldsymbol{e}_{z_1} = \hat{L}_x\sin\theta\cos\varphi + \hat{L}_y\sin\theta\sin\varphi + \hat{L}_z\cos\theta$，注意到 $\langle m|\hat{L}_x|m\rangle$，$\langle m|\hat{L}_y|m\rangle$，则 $\langle m|\hat{L}_{z_1}|m\rangle = \langle m|\hat{L}_z|m\rangle\cos\theta = m\hbar\cos\theta$.

证毕.

4.3　在球坐标系中解三维自由粒子问题.

分析　自由粒子势能 $V=0$，定态薛定谔方程为 $-\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi=E\psi$，$E>0$，对于 $\boldsymbol{r}$ 取球坐标 (r,θ,φ)，$\nabla^2=\dfrac{1}{r^2}\dfrac{\partial}{\partial r}\left(r^2\dfrac{\partial}{\partial r}\right)+\dfrac{1}{r^2}\left[\dfrac{1}{\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial\theta}\right)+\dfrac{1}{\sin^2\theta}\dfrac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$.

解　令 $\psi=R(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$，其中 $R(r)$ 满足径向方程

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}R(r)+\frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}R(r)}{\mathrm{d}r}+\left\{\frac{2\mu}{\hbar^2}E-\frac{l(l+1)}{r^2}\right\}R(r)=0,$$

这是球贝塞尔方程.

令 $\dfrac{2\mu}{\hbar^2}E=k^2$，则

$R(r)=A\mathrm{j}_l(kr)+B\mathrm{n}_l(kr)$，或者 $R(r)=C\mathrm{h}_l^{\mathrm{I}}(kr)+D\mathrm{h}_l^{\mathrm{II}}(kr)$，

其中 j_l 和 n_l 分别是 l 阶的球贝塞尔和球诺依曼函数，而 $\mathrm{h}_l^{\mathrm{I}}$ 和 $\mathrm{h}_l^{\mathrm{II}}$ 分别是 l 阶的第一类和第二类的球汉克尔函数. $r=0$，$\mathrm{n}_l(kr)$ 发散，$R(r)=A\mathrm{j}_l(kr)$.

答　在球坐标系中，三维自由粒子是球对称的，故径向波函数 $R(r)=A\mathrm{j}_l(kr)+B\mathrm{n}_l(kr)$，或者 $R(r)=C\mathrm{h}_l^{\mathrm{I}}(kr)+D\mathrm{h}_l^{\mathrm{II}}(kr)$. 当 $r=0$ 时，$\mathrm{n}_l(kr)$ 发散，$R(r)=A\mathrm{j}_l(kr)$.

4.4　求解三维无限深势阱 $V(r)=\begin{cases}0, & r<a\\ \infty, & r\geqslant a\end{cases}$ 中粒子的定态问题.

分析　三维无限深势阱 $V(r)=\begin{cases}0, & r<a\\ \infty, & r\geqslant a\end{cases}$ 中粒子，其波函数具有球对称性，即与 (θ,φ) 无关.

解　在有心力场中，运动粒子的波函数

$$\psi(r,\theta,\varphi)=\frac{u(r)}{r}\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi),$$

式中 $u(r)$ 满足 $-\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}u+V(r)u(r)=Eu(r)$.

当 $r\geqslant a$ 时，$V(r)=\infty$，$u(r)=0$；

当 $r<a$ 时，$V(r)=0$，$\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}u(r)=-\dfrac{2\mu E}{\hbar^2}u=-k^2u$.

$$u(r)=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr},\quad \frac{u(r)}{r}=\frac{A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{r},$$

式中，$\dfrac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}$ 项因子为向外的球面波，$\dfrac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{r}$ 项因子为汇聚的球面波.

答　运动粒子径向波函数为 $\dfrac{u(r)}{r}=\dfrac{A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{r}$，$A$、$B$ 为常数.

4.5　证明：$\dfrac{1}{2}[\nabla^2,\boldsymbol{r}]=\nabla$，$\dfrac{1}{2}[\nabla^2,r]=\dfrac{1}{r}+\dfrac{\partial}{\partial r}$.

分析　前面的一个采用直角坐标系将 ∇^2 展开，后面一个采用球坐标系将 ∇^2 展开，进行证明.

证明　(1)

$$\frac{1}{2}[\nabla^2,\boldsymbol{r}]=\frac{1}{2}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2},x\boldsymbol{e}_1+y\boldsymbol{e}_2+z\boldsymbol{e}_3\right]$$

$$=\frac{1}{2}\left\{\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2},x\right]\boldsymbol{e}_1+\left[\frac{\partial^2}{\partial y^2},y\right]\boldsymbol{e}_2+\left[\frac{\partial^2}{\partial z^2},z\right]\boldsymbol{e}_3\right\},$$

式中，$\left[\dfrac{\partial^2}{\partial x^2},x\right]=\dfrac{\partial}{\partial x}\left[\dfrac{\partial}{\partial x},x\right]+\left[\dfrac{\partial}{\partial x},x\right]\dfrac{\partial}{\partial x}=2\dfrac{\partial}{\partial x}$，$\left[\dfrac{\partial^2}{\partial y^2},y\right]=\dfrac{\partial}{\partial y}\left[\dfrac{\partial}{\partial y},y\right]+\left[\dfrac{\partial}{\partial y},y\right]\dfrac{\partial}{\partial y}$

$=2\dfrac{\partial}{\partial y}$，$\left[\dfrac{\partial^2}{\partial z^2},z\right]=\dfrac{\partial}{\partial z}\left[\dfrac{\partial}{\partial z},z\right]+\left[\dfrac{\partial}{\partial z},z\right]\dfrac{\partial}{\partial z}=2\dfrac{\partial}{\partial z}$，则

$$\frac{1}{2}[\nabla^2,\boldsymbol{r}]=\frac{\partial}{\partial x}\boldsymbol{e}_1+\frac{\partial}{\partial y}\boldsymbol{e}_2+\frac{\partial}{\partial z}\boldsymbol{e}_3=\nabla.$$

(2) 又

$$\frac{1}{2}[\nabla^2,\boldsymbol{r}]=\frac{1}{2}\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\hat{\Omega}(\theta,\varphi)}{r^2},\boldsymbol{r}\right]=\frac{1}{2}\left\{\frac{\partial}{\partial r}\left[\frac{\partial}{\partial r},r\right]+\left[\frac{\partial}{\partial r},r\right]\frac{\partial}{\partial r}+\frac{2}{r}\left[\frac{\partial}{\partial r},r\right]\right\}$$

$$=\frac{1}{2}\left\{\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial}{\partial r}+\frac{2}{r}\right\}=\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}.$$

证毕.

4.6　求做定点运动的各向同性刚性分子的能级与波函数.

分析　由题意，波函数与径向无关.

解　系统的哈密顿算符 $\hat{H}=\dfrac{\hat{L}^2}{2I}$，$\hat{H}\psi_l(\theta,\varphi)=E_l\psi_l(\theta,\varphi)$，由于 $\hat{L}^2\mathrm{Y}_{lm}=l(l+1)\hbar^2\mathrm{Y}_{lm}$，则 $\hat{H}\mathrm{Y}_{lm}=\dfrac{l(l+1)\hbar^2}{2I}\mathrm{Y}_{lm}$，$\mathrm{Y}_{lm}$ 为球谐函数.

$E_l=\dfrac{l(l+1)\hbar^2}{2I}$，对 m 简并，即简并度 $f=2l+1$，

$$\psi_{lm}=\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}\mathrm{P}_l^{|m|}(\cos\theta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}.$$

答　做定点运动的各向同性刚性分子的能级为 $E_l=\dfrac{l(l+1)\hbar^2}{2I}$，波函数为

$$\psi_{lm}=\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}\mathrm{P}_l^{|m|}(\cos\theta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}.$$

4.7　氢原子处于态 $\psi=\sqrt{\dfrac{3}{5}}\psi_{100}+\sqrt{\dfrac{1}{5}}\psi_{321}+C\psi_{210}$ 中，其中 C 为待定常数，求待定常数 C；测量能量、角动量平方、角动量在 z 方向上的分量，各能测得哪些数值？相应的测量概率是多少？

分析　由于波函数具有单值、连续、有限，归一化条件可以写成 $\langle\psi|\psi\rangle=1$.

解　由归一化条件 $\langle\psi|\psi\rangle=1$，$\left|\sqrt{\dfrac{3}{5}}\right|^2+\left|\sqrt{\dfrac{1}{5}}\right|^2+C^2=1$，得到 $C=\sqrt{\dfrac{1}{5}}$.

在 ψ 态测能量，能测得

E_n：$E_1=-\dfrac{e^2}{2a_0}$，$E_3=-\dfrac{e^2}{2a_0}\dfrac{1}{9}$，$E_2=-\dfrac{e^2}{2a_0}\dfrac{1}{4}$，相应的概率为 $\dfrac{3}{5}$，$\dfrac{1}{5}$ 和 $\dfrac{1}{5}$.

在 ψ 态测角动量平方，能测到 $L^2=l(l+1)\hbar^2$，分别为 0，$6\hbar^2$ 和 $2\hbar^2$，相应的概率为 $\dfrac{3}{5}$，$\dfrac{1}{5}$ 和 $\dfrac{1}{5}$.

在 ψ 态测 L_3，能测到 $L_3=m\hbar$，分别为 0 和 $\hbar$，相应的概率为 $\dfrac{3}{5}+\dfrac{1}{5}=\dfrac{4}{5}$ 和 $\dfrac{1}{5}$.

答　$C=\sqrt{\dfrac{1}{5}}$；测量能量分别为 $-\dfrac{e^2}{2a_0}$、$-\dfrac{e^2}{2a_0}\dfrac{1}{9}$、$-\dfrac{e^2}{2a_0}\dfrac{1}{4}$，相应的概率为 $\dfrac{3}{5}$，$\dfrac{1}{5}$ 和 $\dfrac{1}{5}$；角动量平方分别为 0，$6\hbar^2$ 和 $2\hbar^2$，相应的概率为 $\dfrac{3}{5}$，$\dfrac{1}{5}$ 和 $\dfrac{1}{5}$；角动量在 z 方向上的分量分别为 0 和 $\hbar$，相应的概率为 $\dfrac{3}{5}+\dfrac{1}{5}=\dfrac{4}{5}$ 和 $\dfrac{1}{5}$.

4.8　对于有限深球势阱 $V(r)=\begin{cases}V_0, & r\geqslant a\\ 0, & r<a\end{cases}$ 给出有 n 个 $l=0$ 的束缚态的条件.

分析　由题意，深球势阱与 θ 和 φ 无关，波函数可看成是一维波函数.

解　对于粒子在有心力场中的运动 $\psi=\dfrac{u(r)}{r}\mathrm{Y}_{lm}$，本题中 $l=0$，$\mathrm{Y}_{00}=\dfrac{1}{\sqrt{4\pi}}$.

$u(r)$ 满足

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}u(r)+V(r)u(r)=Eu(r)\ ,\quad E>0\ ,$$

当 $r<a$ 时，$\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}u(r)=-\dfrac{2\mu}{\hbar^2}Eu(r)=-k^2u(r)$，

当 $r\geqslant a$ 时，$\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}u(r)=-\dfrac{2\mu}{\hbar^2}(E-V_0)u(r)=-\alpha^2u(r)$，

束缚态：当 $r\to\infty$ 时，$u(r)\to 0$，所以 $0<E<V_0$. 如图 4.8-1 所示，

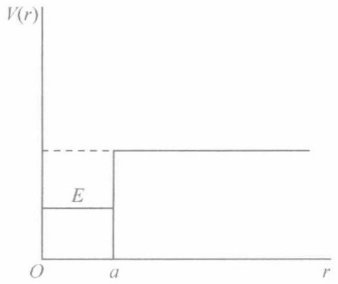

图 4.8-1　有限深球势阱

当 $r<a$ 时，$u(r)=A\sin kr+A_1\cos kr$，由于 $u(0)=0$，故 $A_1=0$，$u(r)=A\sin kr$；

当 $r\geqslant a$ 时，$u(r)=B\mathrm{e}^{-\alpha r}+B_1\mathrm{e}^{\alpha r}$，由于 $u(\infty)$ 为有限，故 $B_1=0$，$u(r)=B\mathrm{e}^{-\alpha r}$；

在 $r=a$ 处波函数 $u(r)$ 与波函数的一阶导数 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}u(r)$ 都连续，有

$$A\sin ka-B\mathrm{e}^{-\alpha a}=0\ ,\quad Ak\cos ka-B(-\alpha)\mathrm{e}^{-\alpha a}=0\ ,\tag{4.8-1}$$

方程组(4.8-1)有解的条件为

$$\det\begin{vmatrix}\sin ka & -\mathrm{e}^{-\alpha a}\\ k\cos ka & \alpha\mathrm{e}^{-\alpha a}\end{vmatrix}=0\ ,$$

即

$$\alpha(\sin ka)\mathrm{e}^{-\alpha a}+k(\cos ka)\mathrm{e}^{-\alpha a}=0\ ,$$

$-\alpha a=ka(\cot ka)$，曲线Ⅰ，

$(\alpha a)^2+(ka)^2=\dfrac{2\mu}{\hbar^2}V_0a^2$，曲线Ⅱ

如图 4.8-2 所示，曲线Ⅰ和曲线Ⅱ交点的横坐标为 k^*a，得到 $E=\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\left(\dfrac{k^*a}{a}\right)^2$，要使曲线Ⅱ与曲线Ⅰ有 n 个交点，曲线Ⅱ的半径 $\sqrt{\dfrac{2\mu}{\hbar^2}V_0a^2}$ 要大于 $\dfrac{\pi}{2}(2n-1)$，并小于 $\dfrac{\pi}{2}(2n+1)$，即

$\dfrac{\pi}{2}(2n-1)<\sqrt{\dfrac{2\mu}{\hbar^2}V_0a^2}<\dfrac{\pi}{2}(2n+1)$ 或写成 $\dfrac{\pi^2\hbar^2}{2\mu}\left(n-\dfrac{1}{2}\right)<V_0a^2<\dfrac{\pi^2\hbar^2}{2\mu}\left(n+\dfrac{1}{2}\right)$.

采用 MATLAB 编制程序，并利用 Visio 补全曲线，以 $\sqrt{\dfrac{2\mu}{\hbar^2}V_0a^2}=2.75\pi$ 为例，

有 3 个交点，即 $\frac{5\pi}{2}<\sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}V_0a^2}=2.75\pi<\frac{7\pi}{2}$，程序为

```
x1=0:0.01:2.85;y1=x1.*cot(x1);y2=sqrt((5.*3.14.*2.2./4).^2-x1.^2);
x2=3.8:0.01:5.75;y3=x2.*cot(x2);y4=sqrt((5.*3.14.*2.2./4).^2-x2.^2);
x3=7.1:0.01:8.7;y5=x3.*cot(x3);y6=sqrt((5.*3.14.*2.2./4).^2-x3.^2);
plot(x1,-y1,x1,y2,x2,-y3,x2,y4,x3,-y5,x3,y6)
```

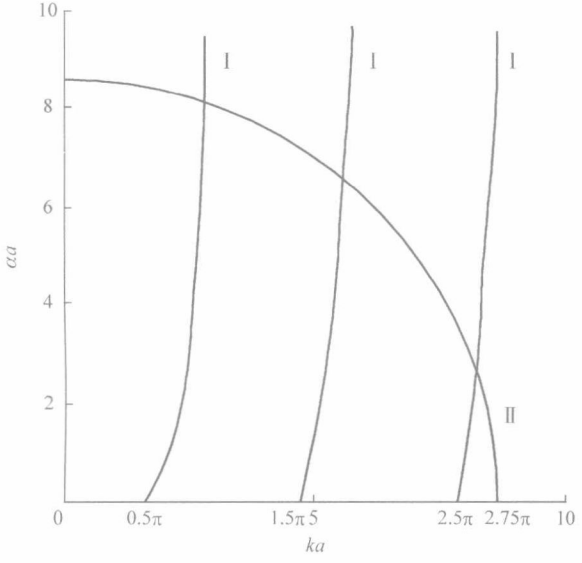

图 4.8-2　以 $\sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}V_0a^2}=2.75\pi$ 绘制 αa-ka 关系曲线

求解其中第一个交点，即 ka 最小的交点可以采用 MATLAB 编制程序获得.

```
x1=2.805:0.001:2.815;y1=x1.*cot(x1);y2=sqrt((5.*3.14.*2.2.
/4).^2-x1.^2);
plot(x1,-y1,x1,y2)
```

如图 4.8-3 所示得到的结果交点是(2.81, 8.16).

求解 ka 次小的交点可以采用 MATLAB 编制程序获得：

```
x2=5.575:0.001:5.585;y3=x2.*cot(x2);y4=sqrt((5.*3.14.*2.2.
/4).^2-x2.^2);
plot(x2,-y3,x2,y4)
```

如图 4.8-4 所示得到的结果交点是(5.581, 6.585).

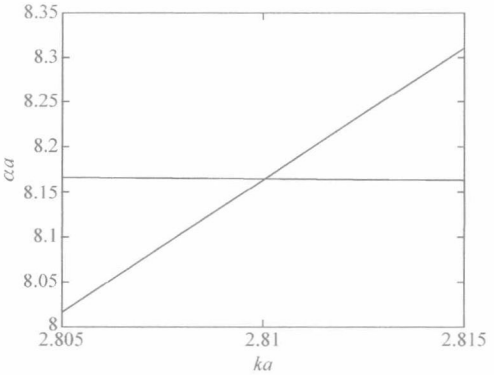

图 4.8-3　*ka* 最小的交点

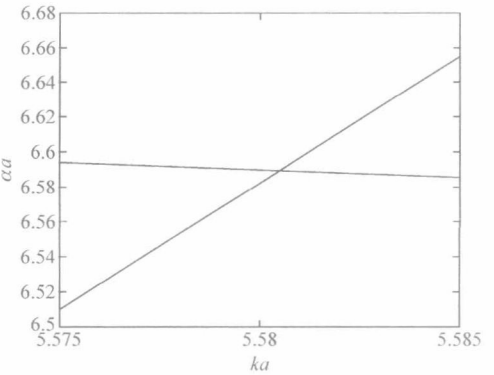

图 4.8-4　*ka* 次小的交点

求解 *ka* 较大的交点可以采用 MATLAB 编制程序获得.

```
x3=8.175:0.001:8.185;y5=x3.*cot(x3);y6=sqrt((5.*3.14.*2.2./4).^2-x3.^2);
plot(x3,-y5,x3,y6)
```

如图 4.8-5 所示得到的结果交点是(8.18, 2.77).

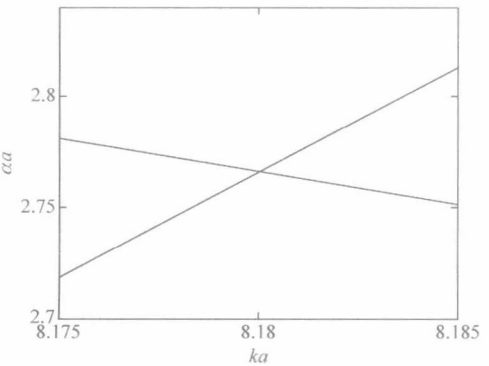

图 4.8-5　*ka* 较大的交点

答　有 n 个 $l=0$ 的束缚态的条件是 $\frac{\pi}{2}(2n-1)<\sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}V_0a^2}<\frac{\pi}{2}(2n+1)$.

4.9　求氢原子基态动量的分布概率.

分析　氢原子基态波函数 $\psi_{100}=\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}$，动量的本征函数 $\psi_p=$

$\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}e^{\frac{i}{\hbar}p\cdot x}$.

解　氢原子基态 $\psi_{100}=\int d^3p\Phi(\boldsymbol{p})\psi_{\boldsymbol{p}}$，式中

$$\Phi(\boldsymbol{p})=\int d^3x\psi_{\boldsymbol{p}}^*(\boldsymbol{x})\psi_{100}=\int d^3x\frac{e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\frac{e^{-\frac{r}{a_0}}}{\sqrt{\pi a_0^3}}$$

$$=\frac{2\pi}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}\sqrt{\pi a_0^3}}\int_0^\infty e^{-\frac{r}{a_0}}r^2dr\int_0^\pi e^{-\frac{i}{\hbar}pr\cos\theta}\sin\theta d\theta$$

$$=\frac{2\pi}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}\sqrt{\pi a_0^3}}\int_0^\infty e^{-\frac{r}{a_0}}r^2dr\frac{e^{-\frac{i}{\hbar}pr}-e^{\frac{i}{\hbar}pr}}{\frac{pr}{i\hbar}}$$

$$=\frac{2i\hbar\pi}{p\sqrt{(2\pi\hbar)^3}\sqrt{\pi a_0^3}}\int_0^\infty e^{-\frac{r}{a_0}}rdr\left[e^{-\frac{i}{\hbar}pr}-e^{\frac{i}{\hbar}pr}\right]$$

利用分部积分法，

$$I_1=\int_0^\infty e^{-\left[\frac{1}{a_0}+\frac{i}{\hbar}p\right]r}rdr=\frac{1}{-\left[\frac{1}{a_0}+\frac{i}{\hbar}p\right]}\int_0^\infty rde^{-\left[\frac{1}{a_0}+\frac{i}{\hbar}p\right]r}$$

$$=\frac{1}{-\left[\frac{1}{a_0}+\frac{i}{\hbar}p\right]}\left[re^{-\left[\frac{1}{a_0}+\frac{i}{\hbar}p\right]r}\Big|_0^\infty-\int_0^\infty e^{-\left[\frac{1}{a_0}+\frac{i}{\hbar}p\right]r}dr\right]$$

$$=\frac{1}{\frac{1}{a_0}+\frac{i}{\hbar}p}\frac{1}{-\left[\frac{1}{a_0}+\frac{i}{\hbar}p\right]}\int_0^\infty de^{-\left[\frac{1}{a_0}+\frac{i}{\hbar}p\right]r}$$

$$=\frac{1}{\frac{1}{a_0}+\frac{i}{\hbar}p}\frac{1}{-\left[\frac{1}{a_0}+\frac{i}{\hbar}p\right]}e^{-\left[\frac{1}{a_0}+\frac{i}{\hbar}p\right]r}\Big|_0^\infty=\frac{1}{\left(\frac{1}{a_0}+\frac{i}{\hbar}p\right)^2}=\frac{a_0^2\hbar^2}{(\hbar+ia_0p)^2}.$$

$$I_2=\int_0^\infty e^{-\left[\frac{1}{a_0}-\frac{i}{\hbar}p\right]r}rdr=\frac{1}{-\left[\frac{1}{a_0}-\frac{i}{\hbar}p\right]}\int_0^\infty rde^{-\left[\frac{1}{a_0}-\frac{i}{\hbar}p\right]r}$$

$$=\frac{1}{-\left[\frac{1}{a_0}-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p\right]}\left[r\mathrm{e}^{-\left[\frac{1}{a_0}-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p\right]r}\Big|_0^\infty-\int_0^\infty \mathrm{e}^{-\left[\frac{1}{a_0}-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p\right]r}\mathrm{d}r\right]$$

$$=\frac{1}{\frac{1}{a_0}-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p}\frac{1}{-\left[\frac{1}{a_0}-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p\right]}\int_0^\infty \mathrm{d}\mathrm{e}^{-\left[\frac{1}{a_0}-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p\right]r}=\frac{1}{\frac{1}{a_0}-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p}\frac{1}{-\left[\frac{1}{a_0}-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p\right]}\mathrm{e}^{-\left[\frac{1}{a_0}-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p\right]r}\Big|_0^\infty$$

$$=\frac{1}{\left(\frac{1}{a_0}-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p\right)^2}=\frac{a_0^2\hbar^2}{(\hbar-\mathrm{i}a_0p)^2}.$$

则

$$\begin{aligned}\Phi(\boldsymbol{p})&=\frac{2\mathrm{i}\hbar\pi}{p\sqrt{(2\pi\hbar)^3}\sqrt{\pi a_0^3}}[I_1-I_2]\\&=\frac{2\mathrm{i}\hbar\pi}{p\sqrt{(2\pi\hbar)^3}\sqrt{\pi a_0^3}}\left[\frac{a_0^2\hbar^2}{(\hbar+\mathrm{i}a_0p)^2}-\frac{a_0^2\hbar^2}{(\hbar-\mathrm{i}a_0p)^2}\right]\\&=\frac{\mathrm{i}\sqrt{a_0\hbar^3}}{\pi p\sqrt{2}}\left[\frac{1}{(\hbar+\mathrm{i}a_0p)^2}+\frac{1}{(\hbar-\mathrm{i}a_0p)^2}\right]=\frac{\mathrm{i}\sqrt{2a_0\hbar^3}}{\pi p}\frac{-2\hbar\mathrm{i}a_0p}{[\hbar^2+(a_0p)^2]^2}\\&=\frac{2\sqrt{2a_0^3\hbar^5}}{\pi[\hbar^2+(a_0p)^2]^2}.\end{aligned}$$

故 $\Phi^2(\boldsymbol{p})=\dfrac{8a_0^3\hbar^5}{\pi^2[\hbar^2+(a_0p)^2]^4}$ 与 $\boldsymbol{p}$ 的方向无关，

$$\Phi^2(\boldsymbol{p})\mathrm{d}^3p=\Phi^2(\boldsymbol{p})4\pi p^2\mathrm{d}p=\frac{32a_0^3\hbar^5p^2\mathrm{d}p}{\pi[\hbar^2+(a_0p)^2]^4},\quad P(p)\mathrm{d}p=\frac{32a_0^3\hbar^5p^2\mathrm{d}p}{\pi[\hbar^2+(a_0p)^2]^4}.$$

答　氢原子基态动量的分布概率 $P(p)\mathrm{d}p=\dfrac{32a_0^3\hbar^5p^2\mathrm{d}p}{\pi[\hbar^2+(a_0p)^2]^4}$.

4.10　氢原子处于基态，求平均半径及概率最大的位置.

分析　氢原子的基态波函数 $\psi_{100}=\dfrac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}$，平均半径 $\langle r\rangle=\int\mathrm{d}^3x\psi_{100}^*r\psi_{100}$.

解

$$\langle r\rangle=\int \mathrm{d}^3x\psi_{100}^{*}r\psi_{100}=\frac{1}{\pi a_0^3}\int r^2\mathrm{d}r\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}r\int \mathrm{d}\Omega=\frac{4}{a_0^3}\int r^3\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\mathrm{d}r$$

$$=\frac{4}{a_0^3}\frac{1}{-\frac{2}{a_0}}\int_0^{\infty}r^3\mathrm{d}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}=-\frac{2}{a_0^2}\left[r^3\mathrm{d}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\Big|_0^{\infty}-\int_0^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}3r^2\mathrm{d}r\right]=\frac{2}{a_0^2}\int_0^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}3r^2\mathrm{d}r$$

$$=\frac{2}{a_0^2}\frac{1}{-\frac{2}{a_0}}\int_0^{\infty}3r^2\mathrm{d}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}=\frac{2}{a_0^2}\frac{1}{-\frac{2}{a_0}}\left[3r^2\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\Big|_0^{\infty}-\int_0^{\infty}6\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}r\mathrm{d}r\right]=\frac{2}{a_0^2}\frac{1}{\frac{2}{a_0}}\int_0^{\infty}6\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}r\mathrm{d}r$$

$$=\frac{6}{a_0}\frac{1}{-\frac{2}{a_0}}\int_0^{\infty}r\mathrm{d}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}=\frac{6}{a_0}\frac{1}{-\frac{2}{a_0}}\left[r\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\Big|_0^{\infty}-\int_0^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\mathrm{d}r\right]$$

$$=3\int_0^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\mathrm{d}r=3\frac{1}{-\frac{2}{a_0}}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\Big|_0^{\infty}=1.5a_0$$

概率分布 $P(r)\mathrm{d}r=\frac{1}{\pi a_0^3}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}r^2\mathrm{d}r$，则 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}P(r)=\frac{1}{\pi a_0^3}\left[-\frac{2}{a_0}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}r^2+\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}2r\right]=0$，

即 $-\frac{2r^2}{a_0}+2r=0$，$r_1=0$，$r_2=a_0$，

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}P(r)=\frac{1}{\pi a_0^3}\left[-\frac{4r}{a_0}+2\right]\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}+\frac{1}{\pi a_0^3}\frac{1}{-\frac{2}{a_0}}\left[-\frac{2}{a_0}r^2+2r\right]\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}},\qquad(4.10\text{-}1)$$

将 $r_1=0$ 代入式(4.10-1)，则 $\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}P(r)>0$；

将 $r_2=a_0$ 代入式(4.10-1)，则 $\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}P(r)=\frac{1}{\pi a_0^3}\left[-\frac{4r}{a_0}+2\right]\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}+\frac{1}{\pi a_0^3}\frac{1}{-\frac{2}{a_0}}\left[-\frac{2}{a_0}r^2+2r\right]\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}<0$；

即 $r_2=a_0$ 处为概率最大的位置，$P(r)_{\max}=\frac{1}{\pi a_0\mathrm{e}^2}$.

答　平均半径为$1.5a_0$，概率最大的位置在$r=a_0$处，最大概率为$P(r)_{\max}=\dfrac{1}{\pi a_0 \mathrm{e}^2}$.

4.11　写出动量的径向分量算符，并求氢原子处于基态时动量径向分量、动能、势能的平均值.

分析　动量$\hat{p}_r=\mu\dot{\hat{r}}=\mu\dfrac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{r},\hat{H}]$，式中$\hat{H}=\dfrac{\hat{p}^2}{2\mu}+V(\boldsymbol{r})=-\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(\boldsymbol{r})$，

$$\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\hat{\Omega}(\theta,\varphi)=\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{-\hat{L}^2}{r^2\hbar^2}.$$

解

$$[\hat{r},\hat{H}]=\left[\hat{r},-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{-\hat{L}^2}{r^2\hbar^2}\right)+V(\boldsymbol{r})\right]=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left\{\left[\hat{r},\frac{\partial^2}{\partial r^2}\right]+\frac{2}{r}\left[\hat{r},\frac{\partial}{\partial r}\right]\right\}$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left\{\left[\hat{r},\frac{\partial}{\partial r}\right]\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial}{\partial r}\left[\hat{r},\frac{\partial}{\partial r}\right]-\frac{2}{r}\right\}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left\{-2\frac{\partial}{\partial r}-\frac{2}{r}\right\}$$

$$\hat{p}_r=\mu\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{r},\hat{H}]=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)\Big],\quad \psi_{100}=\sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}},$$

$$\langle p_r\rangle=\frac{1}{\pi a_0^3}\int_0^\infty \mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)\Big]\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}r^2\mathrm{d}r\int_{\varphi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi}\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi$$

$$=\frac{4\pi}{\pi a_0^3}\int_0^\infty \mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)\Big]\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}r^2\mathrm{d}r=-\frac{4\hbar}{\mathrm{i}a_0^4}\int_0^\infty r^2\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\mathrm{d}r+\frac{4\hbar}{\mathrm{i}a_0^3}\int_0^\infty \mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}r\mathrm{d}r$$

$$=-\frac{4\hbar}{\mathrm{i}a_0^4}\frac{1}{-\frac{2}{a_0}}\int_0^\infty r^2\mathrm{d}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}+\frac{4\hbar}{\mathrm{i}a_0^3}\frac{1}{-\frac{2}{a_0}}\int_0^\infty r\mathrm{d}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}$$

$$=-\frac{4\hbar}{\mathrm{i}a_0^4}\frac{1}{-\frac{2}{a_0}}\left[r^2\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\Big|_0^\infty-\int_0^\infty 2r\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\mathrm{d}r\right]+\frac{4\hbar}{\mathrm{i}a_0^3}\frac{1}{-\frac{2}{a_0}}\left[r\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\Big|_0^\infty-\int_0^\infty \mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\mathrm{d}r\right]$$

$$=-\frac{8\hbar}{\mathrm{i}a_0^3}\frac{1}{-\frac{2}{a_0}}\int_0^\infty r\mathrm{d}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}+\frac{4\hbar}{\mathrm{i}a_0^2}\frac{1}{-\frac{2}{a_0}}\int_0^\infty \mathrm{d}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}$$

$$=-\frac{8\hbar}{\mathrm{i}a_0^3}\frac{1}{\frac{2}{a_0}}\frac{1}{-\frac{2}{a_0}}\int_0^\infty \mathrm{d}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}+\frac{4\hbar}{\mathrm{i}a_0^2}\frac{1}{-\frac{2}{a_0}}\int_0^\infty \mathrm{d}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}$$

$$=-\frac{8\hbar}{\mathrm{i}a_0^3}\frac{1}{\frac{2}{a_0}}\frac{1}{-\frac{2}{a_0}}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\Big|_0^\infty+\frac{4\hbar}{\mathrm{i}a_0^2}\frac{1}{-\frac{2}{a_0}}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\Big|_0^\infty=0$$

势能的平均值

$$\left\langle -\frac{e^2}{r}\right\rangle=\int\psi_{100}\left(-\frac{e^2}{r}\right)\psi_{100}r^2\mathrm{d}r\mathrm{d}\Omega=-\frac{4\pi e^2}{\pi a_0^3}\int_0^\infty \mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}r\mathrm{d}r=-\frac{4e^2}{a_0^3}\frac{1}{-\frac{2}{a_0}}\int_0^\infty r\mathrm{d}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}$$

$$=-\frac{4e^2}{a_0^3}\frac{1}{-\frac{2}{a_0}}\left[r\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\Big|_0^\infty-\int_0^\infty \mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\mathrm{d}r\right]=-\frac{2e^2}{a_0^2}\frac{1}{-\frac{2}{a_0}}\left[\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\Big|_0^\infty\right]=-\frac{e^2}{a_0}$$

由 $\hat{H}=\hat{T}-\dfrac{e^2}{r}$，$\left\langle\hat{T}\right\rangle=\left\langle\hat{H}\right\rangle-\left\langle-\dfrac{e^2}{r}\right\rangle$，$\left\langle\hat{H}\right\rangle=\langle 100|\hat{H}|100\rangle=-\dfrac{e^2}{2a_0}$，则

$$\left\langle\hat{T}\right\rangle=\left\langle\hat{H}\right\rangle-\left\langle-\frac{e^2}{r}\right\rangle=-\frac{e^2}{2a_0}+\frac{e^2}{a_0}=\frac{e^2}{2a_0}.$$

答　氢原子处于基态时动量径向分量为 0，动能的平均值为 $\dfrac{e^2}{2a_0}$，势能的平均值为 $-\dfrac{e^2}{a_0}$.

4.12　如图 4.12-1 所示，粒子在半径为 a，高为 d 的圆筒内运动，在筒内势能为零，在筒壁和筒外，势能为无限大，求解能量本征值问题.

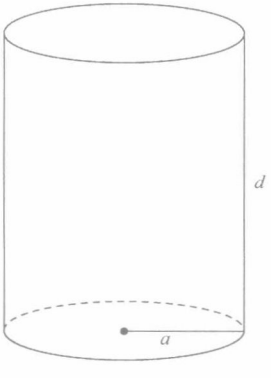

图 4.12-1　筒外势无限大

分析　在筒壁和筒外，势能为无限大，则波函数为零. 对于粒子在筒内的运动，势能为零，取柱坐标 (ρ,φ,z)，则哈密顿算符为

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right),\tag{4.12-1}$$

定态波函数 ψ 满足

$$\hat{H}\psi(\rho,\varphi,z)=E\psi(\rho,\varphi,z)\,, \tag{4.12-2}$$

将 $\psi(\rho,\varphi,z)$ 进行分离

$$\psi(\rho,\varphi,z)=R(\rho)\Phi(\varphi)Z(z)\,, \tag{4.12-3}$$

代入定态方程(4.12-2)，得到

$$\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial R(\rho)}{\partial\rho}\frac{1}{R(\rho)}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2\Phi(\varphi)}{\partial\varphi^2}\frac{1}{\Phi(\varphi)}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\frac{1}{Z(z)}=-\frac{2\mu}{\hbar^2}E\,. \tag{4.12-4}$$

解　使用试探法求解式(4.12-4)，设

$$\frac{\partial^2\Phi(\varphi)}{\partial\varphi^2}\frac{1}{\Phi(\varphi)}=-m^2\,, \tag{4.12-5}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2}\frac{1}{Z(z)}=-\alpha^2\,, \tag{4.12-6}$$

则 $R(\rho)$ 满足

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}R(\rho)+\frac{1}{\rho}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}R(\rho)+\left(\frac{2\mu}{\hbar^2}E-\alpha^2-\frac{m^2}{\rho^2}\right)R=0\,, \tag{4.12-7}$$

由式(4.12-5)，解得

$$\Phi(\varphi)=C\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\,, \tag{4.12-8}$$

由单值性要求

$$\Phi(\varphi)=\Phi(\varphi+2\pi)\,, \tag{4.12-9}$$

得

$$m=0,\pm1,\pm2,\cdots\,, \tag{4.12-10}$$

考虑 $\Phi(\varphi)$ 的归一化

$\int_0^{2\pi}\Phi^*(\varphi)\Phi(\varphi)\mathrm{d}\varphi=\int_0^{2\pi}C\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\varphi}C\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\mathrm{d}\varphi=C^2 2\pi=1$，取 $C=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}$，即

$$\Phi_m(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\,, \tag{4.12-11}$$

由式(4.12-6)得到

$$Z(z)=a\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha z}+b\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha z}\,, \tag{4.12-12}$$

由边界条件 $Z(0)=0$，得 $b=-a$，则

$$Z(z)=a(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha z}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha z})=2\mathrm{i}a\sin\alpha z=a_1\sin\alpha z\,, \tag{4.12-13}$$

由边界条件 $Z(d)=0$，得 $\alpha d=n\pi$，即

$$\alpha=\frac{n\pi}{d}\,,\quad n=1,2,\cdots\,, \tag{4.12-14}$$

由归一化条件 $a_1^2\int_0^d \sin^2\alpha z\mathrm{d}z=1$，$a_1^2\int_0^d \frac{1-\cos 2\frac{n\pi}{d}z}{2}\mathrm{d}z=1$，$a_1^2\frac{d}{2}-\frac{a_1^2}{2}\frac{1}{2\frac{n\pi}{d}}\cos 2\frac{n\pi}{d}z\Big|_0^d=1$，$a_1^2\frac{d}{2}=1$，取 $a_1=\sqrt{\frac{2}{d}}$，则

$$Z_n(z)=\sqrt{\frac{2}{d}}\sin\frac{n\pi}{d}z\,, \tag{4.12-15}$$

设 $\frac{2\mu}{\hbar^2}E-\alpha^2=\mu$，即 $E=\frac{\hbar^2}{2\mu}(\mu+\alpha^2)$，令 $x=\sqrt{\mu}\rho$，则由方程式(4.12-7)得到

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}R+\frac{1}{x}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}R+\left(1-\frac{m^2}{x^2}\right)R=0\,, \tag{4.12-16}$$

这是 m 阶贝塞尔方程，所以

$$R=C_1\mathrm{j}_m(\sqrt{\mu}\rho)+C_2\mathrm{n}_m(\sqrt{\mu}\rho)\,, \tag{4.12-17}$$

式中，j_m 和 n_m 分别是归一化的 m 阶贝塞尔函数和诺依曼函数.

由于 $\int_0^d R^2r^2\mathrm{d}r=1$，$R(r)r$ 在 $r=0$ 处为零，所以 $R(r)\big|_{r=0}$ 应有限，但是 $\mathrm{n}_m(\sqrt{\mu}\rho)$ 在 $\rho=0$ 处发散，所以取 $C_2=0$，$C_1=1$，即 $R_m=\mathrm{j}_m(\sqrt{\mu}\rho)$，因为 $R_m(a)=\mathrm{j}_m(\sqrt{\mu}a)=0$，$\sqrt{\mu}a=x_m^j$，这是 m 阶贝塞尔函数的第 j 个零点，所以 $\sqrt{\mu}=\frac{x_m^j}{a}$，圆筒内的波函数

$$\psi_{mjn}=\mathrm{j}_m\left(\frac{x_m^j}{a}\rho\right)\Phi_m(\varphi)Z_n(z)\,, \tag{4.12-18}$$

相应的能量为

$$E_{mjn}=\frac{\hbar^2}{2a}\left[\left(\frac{x_m^j}{a}\right)^2+\left(\frac{n\pi}{d}\right)^2\right]. \tag{4.12-19}$$

答　圆筒内的波函数为 $\psi_{mjn}=\mathrm{j}_m\left(\frac{x_m^j}{a}\rho\right)\Phi_m(\varphi)Z_n(z)$，能量本征值为

$$E_{mjn}=\frac{\hbar^2}{2a}\left[\left(\frac{x_m^j}{a}\right)^2+\left(\frac{n\pi}{d}\right)^2\right].$$

4.13　设粒子在无限长的圆筒中运动，筒的半径为 a，求粒子的质量本征值问题.

分析　设圆筒在 z 方向上无限长，而圆筒的底面在 x-y 平面上，取柱坐标系 (ρ, φ, z)，在筒内粒子的哈密顿为

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]. \tag{4.13-1}$$

解　定态方程为

$$\hat{H}\psi(\rho, \varphi, z) = E\psi(\rho, \varphi, z). \tag{4.13-2}$$

设

$$\psi(\rho, \varphi, z) = R(\rho)\Phi(\varphi)Z(z). \tag{4.13-3}$$

将式(4.13-3)代入式(4.13-2)中，得到

$$\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho}R(\rho)\frac{1}{R(\rho)} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\Phi(\varphi)\frac{1}{\Phi(\varphi)} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\frac{1}{Z(z)} = -\frac{2\mu}{\hbar^2}E. \tag{4.13-4}$$

设

$$\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\Phi(\varphi)\frac{1}{\Phi(\varphi)} = -m^2. \tag{4.13-5}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2}\frac{1}{Z(z)} = -\alpha^2. \tag{4.13-6}$$

则 $R(\rho)$ 满足

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}R(\rho) + \frac{1}{\rho}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}R(\rho) + \left(\frac{2\mu}{\hbar^2}E - \alpha^2 - \frac{m^2}{\rho^2}\right)R(\rho) = 0. \tag{4.13-7}$$

设 $\mu_1 = \dfrac{2\mu}{\hbar^2}E - \alpha^2$，即 $E = \dfrac{\hbar^2}{2\mu}(\mu_1 + \alpha^2)$，则

$$R(\rho) = C\mathrm{j}_l(\sqrt{\mu_1}\rho) + D\mathrm{n}_l(\sqrt{\mu_1}\rho). \tag{4.13-8}$$

由于归一化条件 $\int_0^\infty R^2(\rho)\rho^2\mathrm{d}\rho = 1$，且 $R(0)$ 有限，但 $\mathrm{n}_l(0)$ 发散，故 $D = 0$，$C = 1$，即 $R(\rho) = \mathrm{j}_l(\sqrt{\mu_1}\rho)$，由 $R(a) = 0$，得

$\mathrm{j}_l(\sqrt{\mu_1}a) = 0$，$\sqrt{\mu_1} = \dfrac{1}{a}x_m^j$，而 x_m^j 是 m 阶贝塞尔函数的第 j 个零点，由式(4.13-5)得

$$\Phi(\varphi) = C\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}. \tag{4.13-9}$$

由于

$$\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi). \tag{4.13-10}$$

得

$$m=0,\pm1,\pm2,\cdots. \tag{4.13-11}$$

由 $\int_0^{2\pi}|\Phi(\varphi)|^2\,\mathrm{d}\varphi=1$，得 $C=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}$，故

$$\Phi(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}. \tag{4.13-12}$$

由式(4.13-6)并考虑圆筒无限长，得到

$$Z_\alpha(z)=C\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha z}. \tag{4.13-13}$$

由 $\int Z_\alpha^*(z)Z_{\alpha_1}(z)\mathrm{d}z=\delta(\alpha-\alpha_1)$，得到 $C^2\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha z}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha z}\mathrm{d}z=2\pi\hbar C^2\delta(\alpha-\alpha_1)=\delta(\alpha-\alpha_1)$，即 $C=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$，

$$Z_\alpha(z)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha z}=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_z z},\quad p_z=\alpha\hbar, \tag{4.13-14}$$

$$\psi(\rho,\varphi,z)=\mathrm{j}_l(\sqrt{\mu_1}\rho)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_z z},$$

相应的能量为 $E_{mjp_z}=\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\left[\left(\dfrac{x_m^j}{a}\right)^2+\left(\dfrac{p_z}{\hbar}\right)^2\right]$.

答　波函数为 $\psi(\rho,\varphi,z)=\mathrm{j}_l(\sqrt{\mu_1}\rho)\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_z z}$，相应的能量为

$$E_{mjp_z}=\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\left(\frac{x_m^j}{a}\right)^2+\left(\frac{p_z}{\hbar}\right)^2\right].$$

4.14　质量为 μ 的粒子在三维球方势阱中运动，对固定半径为 R 的阱，证明仅当阱深具有一定的极小值时，才存在一束缚态，并计算出极小值，而一维的类似问题导致一个不同的结论，此结论如何？

分析　三维球方势阱 $V(r)=\begin{cases}-V_0, & r\leqslant R\\ 0, & r>R\end{cases}$ 在有心力场中，$\psi=R(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$，径向波函数 $R(r)$ 满足方程

$$\frac{\mathrm{d}^2R}{\mathrm{d}r^2}+\frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E-V(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R(r)=0. \tag{4.14-1}$$

解　考虑到 $V(r)$ 分段为常数，则

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}^2R}{\mathrm{d}r^2}+\dfrac{2}{r}\dfrac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}+\left[\dfrac{2\mu}{\hbar^2}(E+V_0)-\dfrac{l(l+1)}{r^2}\right]R(r)=0, & r\leqslant R \\ \dfrac{\mathrm{d}^2R}{\mathrm{d}r^2}+\dfrac{2}{r}\dfrac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}+\left[\dfrac{2\mu}{\hbar^2}E-\dfrac{l(l+1)}{r^2}\right]R(r)=0, & r>R \end{cases}. \tag{4.14-2}$$

考虑到 $-V_0<E<0$，令

$$\rho=\begin{cases} kr=r\sqrt{\dfrac{2\mu}{\hbar^2}(E+V_0)}, & r\leqslant R \\ \alpha(r)=r\sqrt{-\dfrac{2\mu}{\hbar^2}E}, & r>R \end{cases}. \tag{4.14-3}$$

则方程(4.14-2)可化成

$$\frac{\mathrm{d}^2R}{\mathrm{d}\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}\rho}+\left[1-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R=0,\quad r\leqslant R, \tag{4.14-4}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2R}{\mathrm{d}\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}\rho}+\left[-1-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R=0,\quad r>R. \tag{4.14-5}$$

式(4.14-4)是球贝塞尔方程，式(4.14-5)是虚宗量球贝塞尔方程，它们的解分别是

$$R(\rho)=A\mathrm{j}_l(\rho)+B\mathrm{n}_l(\rho),\quad r\leqslant R, \tag{4.14-6}$$

$$R(\rho)=C\mathrm{h}_l^{\mathrm{I}}(\mathrm{i}\rho)+D\mathrm{h}_l^{\mathrm{II}}(\mathrm{i}\rho),\quad r>R, \tag{4.14-7}$$

式(4.14-6)中的 j_l 和 n_l 分别是 l 阶球贝塞尔函数和球诺伊曼函数，式(4.14-7)中的 $\mathrm{h}_l^{\mathrm{I}}$ 和 $\mathrm{h}_l^{\mathrm{II}}$ 分别是 l 阶第Ⅰ类和第Ⅱ类球汉克尔函数. 函数 n_l 在原点($\rho=0$ 即 $r=0$)处发散，不符合波函数归一化条件，故舍去；在 $r\to\infty$ 时，虚宗量的函数 $\mathrm{h}_l^{\mathrm{I}}$ 和 $\mathrm{h}_l^{\mathrm{II}}$ 都满足 $r\mathrm{h}_l^{\mathrm{I}}$ 趋向于零，而 $r\mathrm{h}_l^{\mathrm{II}}$ 发散，故 $\mathrm{h}_l^{\mathrm{II}}$ 应舍去，这样得到径向函数为

$$R(r)=\begin{cases} A\mathrm{j}_l(kr), & r\leqslant R \\ C\mathrm{h}_l^{\mathrm{I}}(\mathrm{i}\alpha r), & r>R \end{cases}. \tag{4.14-8}$$

由于波函数满足的连接条件，在 $r=R$ 球面上，$R(r)$ 和 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}R(r)$ 必须连续，因此

$$A\mathrm{j}_l(kR)-C\mathrm{h}_l^{\mathrm{I}}(\mathrm{i}\alpha R)=0,\quad kA\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\mathrm{j}_l(kR)-\mathrm{i}\alpha C\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\mathrm{h}_l^{\mathrm{I}}(\mathrm{i}\alpha R)=0, \tag{4.14-9}$$

式(4.14-9)是关于 A 和 C 的线性方程组，有解的条件为

$$\det\begin{vmatrix} \mathrm{j}_l(kR) & -\mathrm{h}_l^{\mathrm{I}}(\mathrm{i}\alpha R) \\ k\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\mathrm{j}_l(kR) & -\mathrm{i}\alpha\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\mathrm{h}_l^{\mathrm{I}}(\mathrm{i}\alpha R) \end{vmatrix}=0, \tag{4.14-10}$$

按 k 和 α 的定义，还有方程

$$k^2R^2+\alpha^2R^2=\frac{2\mu}{\hbar^2}V_0R^2\,, \tag{4.14-11}$$

由式(4.14-10)和式(4.14-11)解得α和k后，则

$$E=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\alpha^2\,, \tag{4.14-12}$$

对于不同的l值，$l=0$时相应能级最低，对于$l=0$的束缚态，$\mathrm{j}_0(x)=\dfrac{\sin x}{x}$，$\mathrm{h}_0^{\mathrm{I}}(x)=\dfrac{1}{\mathrm{i}x}\mathrm{e}^{\mathrm{i}x}$，根据式(4.14-10)对于$l=0$，有

$$\det\begin{vmatrix}\mathrm{j}_0(kR) & -\mathrm{h}_0^{\mathrm{I}}(\mathrm{i}\alpha R)\\ k\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\mathrm{j}_0(kR) & -\mathrm{i}\alpha\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\mathrm{h}_0^{\mathrm{I}}(\mathrm{i}\alpha R)\end{vmatrix}=0\,,$$

$$-\mathrm{i}\alpha\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\mathrm{h}_0^{\mathrm{I}}(\mathrm{i}\alpha R)\mathrm{j}_0(kR)+k\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\mathrm{j}_0(kR)\mathrm{h}_0^{\mathrm{I}}(\mathrm{i}\alpha R)=0\,,$$

$$\frac{\mathrm{i}\alpha\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\mathrm{h}_0^{\mathrm{I}}(\mathrm{i}\alpha R)}{\mathrm{h}_0^{\mathrm{I}}(\mathrm{i}\alpha R)}=\frac{k\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\mathrm{j}_0(kR)}{\mathrm{j}_0(kR)}\,,\quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\mathrm{j}_0(x)=\frac{\cos x}{x}-\frac{\sin x}{x^2}\,,\quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\mathrm{h}_0^{\mathrm{I}}(x)=\frac{\mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}x}}{\mathrm{i}x}-\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}x}}{\mathrm{i}x^2}\,,$$

$$\frac{\mathrm{i}\alpha\left[\dfrac{\mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathrm{i}\alpha R}}{\mathrm{i}\mathrm{i}\alpha R}-\dfrac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathrm{i}\alpha R}}{-\mathrm{i}\alpha^2R^2}\right]}{\dfrac{1}{\mathrm{i}\mathrm{i}\alpha R}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathrm{i}\alpha R}}=\frac{k\left[\dfrac{\cos kR}{kR}-\dfrac{\sin kR}{k^2R^2}\right]}{\dfrac{\sin kR}{kR}}\,,\quad \frac{\dfrac{\mathrm{e}^{-\alpha R}}{R}+\dfrac{\mathrm{e}^{-\alpha R}}{\alpha R^2}}{-\dfrac{1}{\alpha R}\mathrm{e}^{-\alpha R}}=\frac{\dfrac{\cos kR}{R}-\dfrac{\sin kR}{kR^2}}{\dfrac{\sin kR}{kR}}\,,$$

$$\frac{\alpha R}{R}+\frac{\alpha R}{\alpha R^2}+k\cot kR-\frac{1}{R}=0\,,\quad \alpha+\frac{1}{R}+k\cot kR-\frac{1}{R}=0\,,\text{故}$$

$$kR\cot kR=\alpha R\,, \tag{4.14-13}$$

由式(4.14-13)和式(4.14-11)得例如图 4.14-1 所示，由两曲线交点的α值，得到$E=-\dfrac{\hbar^2\alpha^2}{2\mu}$，要有一个束缚态，则$\sqrt{\dfrac{2\mu}{\hbar^2}R^2V_0}\geqslant\dfrac{\pi}{2}$，即深势阱$V_0\geqslant\dfrac{\pi^2\hbar^2}{8\mu R^2}$，对于一维的情况，总存在一个束缚态，不管阱管多少.

利用MATLAB编制程序，假设$\sqrt{\dfrac{2\mu}{\hbar^2}R^2V_0}=0.8\pi$，再利用Visio绘制如图4.14-1所示.

```
x1=0:0.01:2.7;y1=x1.*cot(x1);y2=sqrt((0.8.*3.14).^2-x1.^2);
x2=3.8:0.01:5.5;y3=x2.*
cot(x2);y4=sqrt((0.8.*3.14).^2-x2.^2);plot(x1,-y1,x1,y2,x2,
-y3,x2,y4)
```

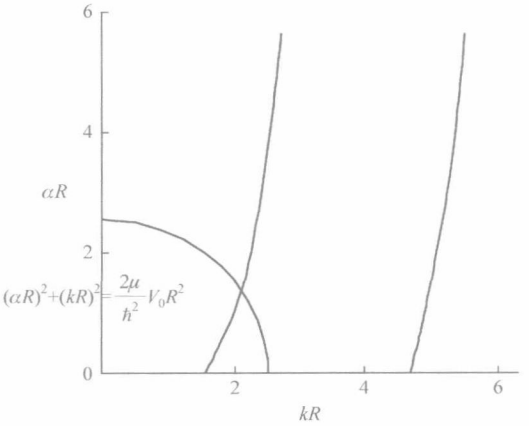

图 4.14-1　$\sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}R^2V_0}=0.8\pi$ 时的 kR-αR 曲线图

进一步地利用 MATLAB 编制程序.

```
x1=2.127:0.0001:2.132;y1=x1.*cot(x1);y2=sqrt((0.8.*3.14).^2
-x1.^2);x2=3.8:0.01:5.5; plot(x1,-y1,x1,y2)
```

得到交点处的坐标为(2.1298,1.332)，如图 4.14-2 所示.

答　深势阱 V_0 极小值为 $\frac{\pi^2\hbar^2}{8\mu R^2}$.

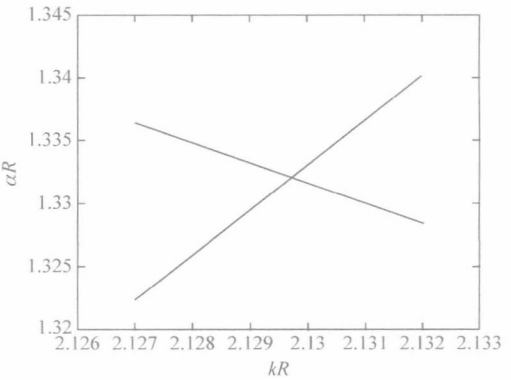

图 4.14-2　交点处的坐标(2.1298,1.332)

4.15　对 $\hat{L}^2$ 和 $\hat{L}_z$ 的共同本征值 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$，求下列平均值：(1) $\langle\hat{L}_x\rangle$ 和 $\langle\hat{L}_y\rangle$；(2) $\langle\hat{L}_x\hat{L}_y\rangle$，$\langle\hat{L}_y\hat{L}_x\rangle$，$\langle\hat{L}_x^2\rangle$，$\langle\hat{L}_y^2\rangle$；(3) 当 $l=1$ 时，$\langle\hat{L}_x^n\rangle$ 和 $\langle\hat{L}_y^n\rangle$.

分析　利用$[\hat{L}_i,\hat{L}_j]=\mathrm{i}\hbar\hat{L}_k$，$i,j,k=1,2,3$ 轮换.

解

(1) 求$\langle\hat{L}_x\rangle$和$\langle\hat{L}_y\rangle$.

$[\hat{L}_z,\hat{L}_x]=\mathrm{i}\hbar\hat{L}_y$，$[\hat{L}_y,\hat{L}_z]=\mathrm{i}\hbar\hat{L}_x$，即$\hat{L}_z\hat{L}_x-\hat{L}_x\hat{L}_z=\mathrm{i}\hbar\hat{L}_y$，$\hat{L}_y,\hat{L}_z-\hat{L}_z\hat{L}_y=\mathrm{i}\hbar\hat{L}_x$，

$$\left\langle Y_{lm}\middle|\hat{L}_z\hat{L}_x-\hat{L}_x\hat{L}_z\middle|Y_{lm}\right\rangle=\mathrm{i}\hbar\left\langle Y_{lm}\middle|\hat{L}_y\middle|Y_{lm}\right\rangle,$$

$$m\hbar\left\langle Y_{lm}\middle|\hat{L}_x\middle|Y_{lm}\right\rangle-m\hbar\left\langle Y_{lm}\middle|\hat{L}_x\middle|Y_{lm}\right\rangle=\mathrm{i}\hbar\left\langle Y_{lm}\middle|\hat{L}_y\middle|Y_{lm}\right\rangle,\tag{4.15-1}$$

式(4.15-1)左边为零，故$\left\langle Y_{lm}\middle|\hat{L}_y\middle|Y_{lm}\right\rangle=0$，同理，$\left\langle Y_{lm}\middle|\hat{L}_y\hat{L}_z-\hat{L}_z\hat{L}_y\middle|Y_{lm}\right\rangle=\mathrm{i}\hbar\left\langle Y_{lm}\middle|\hat{L}_x\middle|Y_{lm}\right\rangle=0$，$\left\langle Y_{lm}\middle|\hat{L}_x\middle|Y_{lm}\right\rangle=0$.

(2) 求$\left\langle\hat{L}_x\hat{L}_y\right\rangle$，$\left\langle\hat{L}_y\hat{L}_x\right\rangle$，$\left\langle\hat{L}_x^2\right\rangle$，$\left\langle\hat{L}_y^2\right\rangle$.

由于$\hat{L}_\pm=\hat{L}_x\pm\mathrm{i}\hat{L}_y$，则$\hat{L}_x=\frac{1}{2}(\hat{L}_++\hat{L}_-)$，$\hat{L}_y=\frac{1}{2\mathrm{i}}(\hat{L}_+-\hat{L}_-)$，而

$$\hat{L}_+Y_{lm}=\sqrt{(l+m+1)(l-m)}\hbar Y_{l,m+1}，\quad \hat{L}_-Y_{lm}=\sqrt{(l-m+1)(l+m)}\hbar Y_{l,m-1}，$$

对于$\hat{L}_x\hat{L}_y=\frac{1}{4\mathrm{i}}(\hat{L}_++\hat{L}_-)(\hat{L}_+-\hat{L}_-)=\frac{1}{4\mathrm{i}}(\hat{L}_+^2-\hat{L}_-^2+\hat{L}_-\hat{L}_+-\hat{L}_+\hat{L}_-)$，

$$\left\langle Y_{lm}\middle|\hat{L}_x\hat{L}_y\middle|Y_{lm}\right\rangle=\frac{1}{4\mathrm{i}}\left\langle Y_{lm}\middle|(\hat{L}_+^2-\hat{L}_-^2+\hat{L}_-\hat{L}_+-\hat{L}_+\hat{L}_-)\middle|Y_{lm}\right\rangle$$

$$=\frac{1}{4\mathrm{i}}\left\langle Y_{lm}\middle|\hat{L}_-\hat{L}_+-\hat{L}_+\hat{L}_-\middle|Y_{lm}\right\rangle,$$

式中，

$$\hat{L}_-\hat{L}_+Y_{lm}=\hat{L}_-(\sqrt{(l+m+1)(l-m)}\hbar Y_{lm+1})=\sqrt{(l+m+1)(l-m)}\hbar\hat{L}_-Y_{lm+1}$$

$$=\sqrt{(l+m+1)(l-m)}\hbar\sqrt{[l-(m+1)+1][l+(m+1)]}\hbar Y_{lm}=(l+m+1)(l-m)\hbar^2Y_{lm}$$

$$\hat{L}_+\hat{L}_-Y_{lm}=\hat{L}_+\sqrt{(l-m+1)(l+m)}\hbar Y_{lm-1}=\sqrt{(l-m+1)(l+m)}\hbar\hat{L}_+Y_{lm-1}$$

$$=\sqrt{(l-m+1)(l+m)}\hbar\sqrt{[l+(m-1)+1][l-m+1]}\hbar Y_{lm}=(l-m+1)(l+m)\hbar^2Y_{lm}$$

$$\hat{L}_x\hat{L}_y=\frac{1}{4\mathrm{i}}\left\{\left\langle Y_{lm}\middle|\hat{L}_-\hat{L}_+\middle|Y_{lm}\right\rangle-\left\langle Y_{lm}\middle|\hat{L}_+\hat{L}_-\middle|Y_{lm}\right\rangle\right\}$$

$$=\frac{\hbar^2}{4\mathrm{i}}\{(l+m+1)(l-m)-(l-m+1)(l+m)\}=\frac{\hbar^2}{2\mathrm{i}}(m^2-m)$$

因$[\hat{L}_x,\hat{L}_y]=\mathrm{i}\hbar\hat{L}_z$，即$\hat{L}_y\hat{L}_x=\hat{L}_x\hat{L}_y-\mathrm{i}\hbar\hat{L}_z$，两边对$Y_{lm}$求平均，所以

$$\left\langle\hat{L}_y\hat{L}_x\right\rangle=\left\langle\hat{L}_x\hat{L}_y\right\rangle-\mathrm{i}\hbar m\hbar=\frac{\hbar^2}{2\mathrm{i}}(m^2-m)-\mathrm{i}m\hbar^2=\frac{\hbar^2}{2\mathrm{i}}(m^2-m+2m)=-\frac{\mathrm{i}\hbar^2m(m+1)}{2}.$$

因为$\hat{L}_x=\frac{1}{2}(\hat{L}_++\hat{L}_-)$，$\hat{L}_x^2=\frac{1}{4}(\hat{L}_+^2+\hat{L}_-^2+\hat{L}_+\hat{L}_-+\hat{L}_-\hat{L}_+)$，

$$\left\langle \mathrm{Y}_{lm} \middle| \hat{L}_x^2 \middle| \mathrm{Y}_{lm} \right\rangle = \frac{1}{4}\left\langle \mathrm{Y}_{lm} \middle| \hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_-\hat{L}_+ \middle| \mathrm{Y}_{lm} \right\rangle$$

$$= \frac{\hbar^2}{4}\{(l-m+1)(l+m)-(l+m+1)(l-m)\} = \frac{\hbar^2 m}{2}.$$

$$\hat{L}_y^2 = \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - \hat{L}_x^2,$$

$$\left\langle \mathrm{Y}_{lm} \middle| \hat{L}_y^2 \middle| \mathrm{Y}_{lm} \right\rangle = \left\langle \mathrm{Y}_{lm} \middle| \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - \hat{L}_x^2 \middle| \mathrm{Y}_{lm} \right\rangle$$

$$= l(l+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 - \frac{m}{2}\hbar^2 = \hbar^2\left[l(l+1) - m\left(m + \frac{1}{2} \right) \right].$$

(3) 当 $l=1$ 时，求 $\left\langle \hat{L}_x^n \right\rangle$ 和 $\left\langle \hat{L}_y^n \right\rangle$.

$$\left\langle \mathrm{Y}_{1m} \middle| \hat{L}_x^n \middle| \mathrm{Y}_{1m} \right\rangle = \left\langle \mathrm{Y}_{1m} \middle| \left(\frac{1}{2} \right)^n (\hat{L}_+ + \hat{L}_-)^n \middle| \mathrm{Y}_{1m} \right\rangle \quad , \quad (\hat{L}_+ + \hat{L}_-)^n = \hat{L}_+^n + n\hat{L}_+^{n-1}\hat{L}_- + \frac{1}{2!}C_n^2\hat{L}_+^{n-2}\hat{L}_-^2 + \cdots ,$$

注意到 $\left\langle \mathrm{Y}_{lm} \middle| \mathrm{Y}_{l_1 m_1} \right\rangle = \delta_{ll_1}\delta_{mm_1}$，故 $\left\langle \mathrm{Y}_{1m} \middle| \hat{L}_x^n \middle| \mathrm{Y}_{1m} \right\rangle = 0$. 又 $\hat{L}_y^n = \left[\frac{1}{2\mathrm{i}}(\hat{L}_+ - \hat{L}_-) \right]^n$，

$$\left\langle \mathrm{Y}_{1m} \middle| \hat{L}_y^2 \middle| \mathrm{Y}_{1m} \right\rangle = \left(\frac{1}{2} \right)^n \left\langle \mathrm{Y}_{1m} \middle| (\hat{L}_+ - \hat{L}_-)^n \middle| \mathrm{Y}_{lm} \right\rangle = 0 .$$

答　(1) $\left\langle \mathrm{Y}_{lm} \middle| \hat{L}_y \middle| \mathrm{Y}_{lm} \right\rangle = 0$，$\left\langle \mathrm{Y}_{lm} \middle| \hat{L}_x \middle| \mathrm{Y}_{lm} \right\rangle = 0$；(2) 求 $\left\langle \hat{L}_x\hat{L}_y \right\rangle$，$\left\langle \hat{L}_y\hat{L}_x \right\rangle$，$\left\langle \mathrm{Y}_{lm} \middle| \hat{L}_x^2 \middle| \mathrm{Y}_{lm} \right\rangle = \frac{\hbar^2 m}{2}$，$\left\langle \mathrm{Y}_{lm} \middle| \hat{L}_y^2 \middle| \mathrm{Y}_{lm} \right\rangle = \hbar^2\left[l(l+1) - m\left(m + \frac{1}{2} \right) \right]$；(3) 当 $l=1$ 时，$\left\langle \mathrm{Y}_{1m} \middle| \hat{L}_x^n \middle| \mathrm{Y}_{1m} \right\rangle = 0$，$\left\langle \mathrm{Y}_{1m} \middle| \hat{L}_y^2 \middle| \mathrm{Y}_{1m} \right\rangle = 0$.

4.16　一空间定点转子处于状态 $\psi(\theta,\varphi) = (1+\cos\theta)(1+\sin\theta\cos\varphi)$ 中，求该转子能量、角动量平方 $\hat{L}^2$ 以及角动量第三分量 $\hat{L}_z$ 的测量可能值、相应的概率和平均值.

分析　空间定点转子的哈密顿 $\hat{H} = \frac{1}{2I}\hat{L}^2$，$\hat{L}^2$ 和 $\hat{L}_3$ 共同的本征函数系：$\hat{L}^2\mathrm{Y}_{lm} = l(l+1)\hbar^2\mathrm{Y}_{lm}$，$\hat{L}_3\mathrm{Y}_{lm} = m\hbar\mathrm{Y}_{lm}$，$\hat{H}\mathrm{Y}_{lm} = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2I}\mathrm{Y}_{lm}$，$E_l = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2I}$，为 $2l+1$ 度简并.

解　设 $\psi(\theta,\varphi)$ 的归一化系数为 A，即 $\psi(\theta,\varphi) = A(1+\cos\theta)(1+\sin\theta\cos\varphi)$，注意

$$\mathrm{Y}_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad \mathrm{Y}_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta, \quad \mathrm{Y}_{1,\pm1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\,\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\varphi},$$

$Y_{2,\pm1}=\sqrt{\dfrac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\,\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\varphi}$，则

$$\psi(\theta,\varphi)=A\left\{\sqrt{4\pi}Y_{00}+\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_{10}+\sqrt{\frac{2\pi}{3}}(Y_{1,1}+Y_{1,-1})+\sqrt{\frac{8\pi}{15}}\frac{1}{2}(Y_{2,1}+Y_{2,-1})\right\},$$

$$A^2\left[4\pi+\frac{4\pi}{3}+\frac{2\pi}{3}\times2+\frac{8\pi}{15}\right]=1,\quad A=\frac{1}{6}\sqrt{\frac{5}{\pi}}.$$

在$\psi(\theta,\varphi)$态，测到

$E=0$，$L^2=0$，$L_3=0$的概率为$4\pi A^2$；

$E=\dfrac{2\hbar^2}{2I}$，$L^2=2\hbar^2$，$L_3=0$的概率为$\dfrac{4\pi}{3}A^2$；

$E=\dfrac{2\hbar^2}{2I}$，$L^2=2\hbar^2$，$L_3=\hbar$的概率为$\dfrac{2\pi}{3}A^2$；

$E=\dfrac{2\hbar^2}{2I}$，$L^2=2\hbar^2$，$L_3=-\hbar$的概率为$\dfrac{2\pi}{3}A^2$；

$E=\dfrac{6\hbar^2}{2I}$，$L^2=6\hbar^2$，$L_3=\hbar$的概率为$\dfrac{2\pi}{15}A^2$；

$E=\dfrac{6\hbar^2}{2I}$，$L^2=6\hbar^2$，$L_3=-\hbar$的概率为$\dfrac{2\pi}{15}A^2$；

根据以上各式，得到

$$\langle E\rangle=0\times4\pi A^2+\frac{\hbar^2}{I}\times\frac{4\pi}{3}A^2+\frac{\hbar^2}{I}\times\frac{2\pi}{3}A^2+\frac{\hbar^2}{I}\times\frac{2\pi}{3}A^2+\frac{3\hbar^2}{I}\times\frac{2\pi}{15}A^2+\frac{3\hbar^2}{I}\times\frac{2\pi}{15}A^2$$

$$=\frac{\pi\hbar^2A^2}{I}4\left[\frac{1}{3}+\frac{1}{3}+\frac{1}{5}\right]=\frac{\pi\hbar^2A^2}{I}\frac{4\times13}{15}=\frac{\pi\hbar^2}{I}\frac{4\times13}{15}\times\frac{5}{36\pi}=\frac{\hbar^2}{I}\frac{13}{3}\times\frac{1}{9}=\frac{13\hbar^2}{27I}$$

$$\langle L^2\rangle=2\hbar^2\times\frac{4\pi}{3}A^2+2\hbar^2\times\frac{2\pi}{3}A^2+2\hbar^2\times\frac{2\pi}{3}A^2+6\hbar^2\times\frac{2\pi}{15}A^2+6\hbar^2\times\frac{2\pi}{15}A^2$$

$$=\hbar^2\pi A^2\left[\frac{8}{3}+\frac{8}{3}+\frac{8}{5}\right]=\hbar^2\pi\frac{8\times13}{15}\times\frac{5}{36\pi}=\hbar^2\frac{2\times13}{3}\times\frac{1}{9}=\frac{26}{27}\hbar^2$$

$$\langle L_3\rangle=\hbar\times\frac{2\pi}{3}A^2-\hbar\times\frac{2\pi}{3}A^2+\hbar\times\frac{2\pi}{15}A^2-\hbar\times\frac{2\pi}{15}A^2=0.$$

$E=0$的概率为$4\pi A^2=4\pi\times\dfrac{5}{36\pi}=\dfrac{5}{9}$；

$E=\dfrac{\hbar^2}{I}$的概率为$\dfrac{4\pi}{3}A^2+\dfrac{2\pi}{3}A^2+\dfrac{2\pi}{3}A^2=\dfrac{8\pi}{3}\times\dfrac{5}{36\pi}=\dfrac{2}{3}\times\dfrac{5}{9}=\dfrac{10}{27}$；

$E=\dfrac{3\hbar^2}{I}$的概率为$\dfrac{2\pi}{15}A^2+\dfrac{2\pi}{15}A^2=\dfrac{4\pi}{15}A^2=\dfrac{4\pi}{15}\times\dfrac{5}{36\pi}=\dfrac{1}{3}\times\dfrac{1}{9}=\dfrac{1}{27}$；

$L^2=0$ 的概率为 $4\pi A^2=4\pi\times\dfrac{5}{36\pi}=\dfrac{5}{9}$；

$L^2=2\hbar^2$ 的概率为 $\dfrac{4\pi}{3}A^2+\dfrac{2\pi}{3}A^2+\dfrac{2\pi}{3}A^2=\dfrac{8\pi}{3}\times\dfrac{5}{36\pi}=\dfrac{2}{3}\times\dfrac{5}{9}=\dfrac{10}{27}$；

$L^2=6\hbar^2$ 的概率为 $\dfrac{2\pi}{15}A^2+\dfrac{2\pi}{15}A^2=\dfrac{4\pi}{15}A^2=\dfrac{4\pi}{15}\times\dfrac{5}{36\pi}=\dfrac{1}{3}\times\dfrac{1}{9}=\dfrac{1}{27}$；

测 L_3 的可能值及相应的概率

$L_3=0$ 的概率为 $4\pi A^2+\dfrac{4\pi}{3}A^2=\dfrac{16\pi}{3}A^2=\dfrac{16\pi}{3}\times\dfrac{5}{36\pi}=\dfrac{4}{3}\times\dfrac{5}{9}=\dfrac{20}{27}$；

$L_3=\hbar$ 的概率为 $\dfrac{2\pi}{3}A^2+\dfrac{2\pi}{15}A^2=\dfrac{12\pi}{15}A^2=\dfrac{12\pi}{15}\times\dfrac{5}{36\pi}=\dfrac{1}{9}$；

$L_3=-\hbar$ 的概率为 $\dfrac{2\pi}{3}A^2+\dfrac{2\pi}{15}A^2=\dfrac{12\pi}{15}A^2=\dfrac{12\pi}{15}\times\dfrac{5}{36\pi}=\dfrac{1}{9}$.

答　转子能量的测量可能值 $E=0$ 的概率为 $\dfrac{5}{9}$，$E=\dfrac{\hbar^2}{I}$ 的概率为 $\dfrac{10}{27}$，$E=\dfrac{3\hbar^2}{I}$ 的概率为 $\dfrac{1}{27}$；角动量平方 $\hat{L}^2$ 的测量可能值 $L^2=0$ 的概率为 $\dfrac{5}{9}$，$L^2=2\hbar^2$ 的概率为 $\dfrac{10}{27}$，$L^2=6\hbar^2$ 的概率为 $\dfrac{1}{27}$；角动量第三分量 $\hat{L}_z$ 的测量可能值 $L_3=0$ 的概率为 $\dfrac{20}{27}$，$L_3=\hbar$ 的概率为 $\dfrac{1}{9}$，$L_3=-\hbar$ 的概率为 $\dfrac{1}{9}$.

4.17　一空间定点转子，处于态 $\psi(\theta,\varphi)=\dfrac{1}{\sqrt{4\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\varphi}$ 中，求 $\hat{L}^2$ 的各种可能测量值及相应的概率.

分析　从 $\hat{L}^2\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)=l(l+1)\hbar^2\mathrm{Y}_{lm}$，$\psi(\theta,\varphi)=\sum\limits_{l,m}C_{lm}\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$ 出发进行运算.

解　由于 $\psi(\theta,\varphi)=\dfrac{1}{\sqrt{4\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\varphi}$ 不是 θ 的函数，所以求和号中 $m=2$，但仅当 $l=2$ 时，Y_{22} 才不是 θ 的函数，所以 $l=2$，除了 C_{22} 以外，其余的 C_{lm} 均为零，所以 L^2 的可能测量值为 $6\hbar^2$，相应的测量概率为 1.

答　L^2 的可能测量值为 $6\hbar^2$，相应的测量概率为 1.

4.18　在非相对论量子力学中，对于中心力场 $V(r)$，任何单粒子能量束缚态满足如下关系：$|\psi(0)|^2=\dfrac{\mu}{2\pi\hbar^2}\left\langle\dfrac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}\right\rangle-\dfrac{1}{2\pi\hbar^2}\left\langle\dfrac{\hat{L}^2}{r^3}\right\rangle$，试证明之.

分析　对于中心力场 $V(r)$，因 $V(r)$ 不含 t，有定态

$$\psi(\boldsymbol{x},t)=\psi(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}, \tag{4.18-1}$$

对于定态，$\langle A\rangle=\int\psi^*\hat{A}\psi\mathrm{d}^3x$ 不含时间 t，

$$\frac{\mathrm{d}\langle A\rangle}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\psi|[\hat{A},\hat{H}]|\psi\rangle=0. \tag{4.18-2}$$

证明　对于有心力场 $V(r)$，

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+\frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\frac{\hat{L}^2}{\hbar^2}\frac{1}{r^2}\right]+V(r), \tag{4.18-3}$$

从 $|\psi(0)|^2$ 表示式中有 $\mu\left\langle\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right\rangle$ 和 $-\left\langle\frac{\hat{L}^2}{r^3}\right\rangle$，看样子它们来源于 $\left[\mu\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r},\hat{H}\right]=\mu\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\hat{H}$，因为 $\left[\mu\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r},V\right]=\mu\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}V\to\mu\left\langle\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}V\right\rangle$，$\left[\mu\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r},\frac{1}{2\mu}\frac{\hat{L}^2}{r^2}\right]=-\frac{2}{2}\frac{\hat{L}^2}{r^3}=-\left\langle\frac{\hat{L}^2}{r^3}\right\rangle$，所以取 $\hat{A}=\mu\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}$.

由 $\left\langle\left[\mu\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r},\hat{H}\right]\right\rangle=0$，即 $\left\langle-\frac{\hbar^2}{2}\left\{\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r},\frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right]-\frac{-2\hat{L}^2}{\hbar^2}\frac{1}{r^3}\right\}+\mu\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}V\right\rangle=0$，因为 $\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r},\frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right]=-\frac{2}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}$，故有 $\left\langle\mu\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right\rangle-\left\langle\frac{\hat{L}^2}{r^3}\right\rangle=-\left\langle\frac{\hbar^2}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right\rangle$，而 $\psi=R_{nl}\mathrm{Y}_{lm}$，式中 R_{nl} 是实数，因为一维束缚态可取实函数，

$$\left\langle-\frac{\hbar^2}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right\rangle=-\int_0^\infty R_{nl}\frac{\hbar^2}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}r^2\mathrm{d}r=\frac{\hbar^2}{2}\int_\infty^0\frac{\mathrm{d}R_{nl}^2}{\mathrm{d}r}=\frac{\hbar^2}{2}[R_{nl}^2(0)-R_{nl}^2(\infty)].$$

由于 $rR(r)\xrightarrow{r\to0}0$，$rR(r)\xrightarrow{r\to\infty}0$，故 $R_{nl}^2(\infty)=0$，因为 $\psi=\psi(r,\theta,\varphi)$，$\psi(0)=R_{nl}(0)\mathrm{Y}_{lm}$，$|\psi(0,\theta,\varphi)|^2=R_{nl}^2(0)|\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)|^2$，$\int|\psi(0,\theta,\varphi)|^2\mathrm{d}\Omega=R_{nl}^2(0)\int|\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)|^2\,\mathrm{d}\Omega$，$|\psi(0)|^2\times4\pi=R_{nl}^2(0)$，故 $\left\langle-\frac{\hbar^2}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right\rangle=\frac{\hbar^2}{2}R_{nl}^2(0)=2\pi\hbar^2|\psi(0)|^2$，即

$$|\psi(0)|^2=\frac{1}{2\pi\hbar^2}\left\langle-\frac{\hbar^2}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right\rangle=\frac{1}{2\pi}\left\langle-\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right\rangle=\frac{1}{2\pi}\left(\frac{\mu}{\hbar^2}\left\langle\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right\rangle-\frac{1}{\hbar^2}\left\langle\frac{\hat{L}^2}{r^3}\right\rangle\right).$$

证毕.

4.19　设氢原子处于基态，求：(1) 电子处于经典禁区 $[E_1-V(r)<0]$ 的概率；(2) 电子处于质子所占体积内的概率(质子半径取 $10^{-13}\,\mathrm{cm}$).

分析　氢原子基态波函数

$$\psi_{100}=\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a}}, \tag{4.19-1}$$

相应的能量为 $E_1=-\dfrac{e^2}{2a_0}$，经典禁区为 $E_1<V(r)=-\dfrac{e^2}{r}$，即 $r>\dfrac{-e^2}{-\dfrac{e^2}{2a_0}}=2a_0$.

解 (1) 电子处于经典禁区的概率

$$P=\int_{2a_0}^{\infty}|\psi_{100}|^2\,r^2\mathrm{d}r\int\mathrm{d}\Omega=4\pi\int_{2a_0}^{\infty}\psi_{100}^2r^2\mathrm{d}r=\frac{4}{a_0^3}\int_{2a_0}^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}r^2\mathrm{d}r=\frac{4}{a_0^3}\frac{1}{-\dfrac{2}{a_0}}\int_{2a_0}^{\infty}r^2\mathrm{d}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}$$

$$=\frac{4}{a_0^3}\frac{1}{-\dfrac{2}{a_0}}\left[r^2\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\Big|_{2a_0}^{\infty}-\int_{2a_0}^{\infty}2r\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\mathrm{d}r\right]=-\frac{2}{a_0^2}\left[-4a_0^2\mathrm{e}^{-4}-\frac{1}{-\dfrac{2}{a_0}}\int_{2a_0}^{\infty}2r\mathrm{d}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\right]$$

$$=-\frac{2}{a_0^2}\left[-4a_0^2\mathrm{e}^{-4}+a_0\left[r\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\Big|_{2a_0}^{\infty}-\int_{2a_0}^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\mathrm{d}r\right]\right.$$

$$=-\frac{2}{a_0^2}\left\{-4a_0^2\mathrm{e}^{-4}+a_0\left[-2a_0\mathrm{e}^{-4}-\frac{1}{-\dfrac{2}{a_0}}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\Big|_{2a_0}^{\infty}\right]\right\}$$

$$=-\frac{2}{a_0^2}\left\{-4a_0^2\mathrm{e}^{-4}+a_0\left[-2a_0\mathrm{e}^{-4}+\frac{a_0}{2}(-\mathrm{e}^{-4})\right]\right\}$$

$$=\frac{2\mathrm{e}^{-4}}{a_0^2}\left\{4a_0^2+\frac{5a_0^2}{2}\right\}=13\mathrm{e}^{-4}=0.2381.$$

(2) 设质子半径 $r_0=10^{-13}\mathrm{cm}$，则其体积为 $V=\dfrac{4\pi}{3}r_0^3$，电子处于质子所占体积 V 内的概率为

$$P_V=4\pi\int_0^{r_0}\psi_{100}^2r^2\mathrm{d}r=\frac{4}{a_0^3}\int_0^{r_0}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}r^2\mathrm{d}r=\frac{4}{a_0^3}\frac{1}{-\dfrac{2}{a_0}}\int_0^{r_0}r^2\mathrm{d}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}$$

$$=\frac{4}{a_0^3}\frac{1}{-\dfrac{2}{a_0}}\left[r^2\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\Big|_0^{r_0}-\int_0^{r_0}2r\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\mathrm{d}r\right]=-\frac{2}{a_0^2}\left[r_0^2\mathrm{e}^{-\frac{2r_0}{a_0}}-\frac{1}{-\dfrac{2}{a_0}}\int_0^{r_0}2r\mathrm{d}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\right]$$

$$
\begin{aligned}
&=-\frac{2}{a_0^2}\left[r_0^2\mathrm{e}^{-\frac{2r_0}{a_0}}+a_0\left[r\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\Big|_0^{r_0}-\int_0^{r_0}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\mathrm{d}r\right]\right]\\
&=-\frac{2}{a_0^2}\left\{r_0^2\mathrm{e}^{-\frac{2r_0}{a_0}}+a_0\left[r_0\mathrm{e}^{-\frac{2r_0}{a_0}}-\frac{1}{-\frac{2}{a_0}}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\Big|_0^{r_0}\right]\right\}\\
&=-\frac{2}{a_0^2}\left\{r_0^2\mathrm{e}^{-\frac{2r_0}{a_0}}+a_0\left[r_0\mathrm{e}^{-\frac{2r_0}{a_0}}+\frac{a_0}{2}\left(\mathrm{e}^{-\frac{2r_0}{a_0}}-1\right)\right]\right\}\\
&=-\frac{2}{a_0^2}r_0^2\mathrm{e}^{-\frac{2r_0}{a_0}}-\frac{2}{a_0^2}a_0r_0\mathrm{e}^{-\frac{2r_0}{a_0}}-\frac{2}{a_0^2}\frac{a_0^2}{2}\left(\mathrm{e}^{-\frac{2r_0}{a_0}}-1\right)\\
&=-2\left(\frac{r_0}{a_0}\right)^2\mathrm{e}^{-\frac{2r_0}{a_0}}-2\frac{r_0}{a_0}\mathrm{e}^{-\frac{2r_0}{a_0}}-\mathrm{e}^{-\frac{2r_0}{a_0}}+1. \qquad (4.19\text{-}2)
\end{aligned}
$$

由 $r_0=10^{-13}\mathrm{cm}$，$a_0=0.53\times10^{-8}\mathrm{cm}$，故 $\dfrac{r_0}{a_0}=\dfrac{10^{-13}\mathrm{cm}}{0.53\times10^{-8}\mathrm{cm}}=1.8868\times10^{-5}$.

利用 MATLAB 编制程序计算式(4.19-2).

```
ra=10^(-13)/(0.53*10^(-8));
PV=-2*ra^2*exp(-2*ra)-2*ra*exp(-2*ra)-exp(-2*ra)+1;
PV=8.9928×10^-15.
```

答　(1) 电子处于经典禁区 $[E_1-V(r)<0]$ 的概率为 $13\mathrm{e}^{-4}=0.2381$；(2) 电子处于质子所占体积内的概率为 8.9928×10^{-15}，忽略不计.

4.20　一个带电荷 Q 的粒子，进入基态类氢离子附近所感受到的电势能为多少?

分析　类氢原子包括 Li (3)、Na (11)、K (19)、Rb (37)、Se (55)等，核外有一个电子.

解　设类氢原子除了价电子外，还有一个原子实，在带电荷 Q 的粒子在电场作用下，原子实发生极化有电偶极矩 τ，则

$$V=\frac{eQ}{r}+\frac{\tau Q}{r^2}, \qquad (4.20\text{-}1)$$

r 为 Q 到离子中心的距离.

答　电势能为 $V=\dfrac{eQ}{r}+\dfrac{\tau Q}{r^2}$.

4.21　处于基态的氘核因发生β衰变突然变成 ^{3}He 核，问 He^+ 离子处于基态的概率多大?

分析　氘核因发生β衰变变成 ^{3}He 核，$e\to 2e$，基态氘核的波函数

$$\psi_{100}(1)=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}},$$

基态 He 的波函数

$$\psi_{100}(2)=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{2}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}.$$

解　β衰变突然氘核变成 ^{3}He 核，He^+ 离子处于基态的概率幅

$$\begin{aligned}\langle\psi_{100}(2)|\psi_{100}(1)\rangle&=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{2}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}4\pi\int_0^\infty\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}r^2\mathrm{d}r=4\pi\frac{2\sqrt{2}}{\pi a_0^3}\int_0^\infty\mathrm{e}^{-\frac{3r}{a_0}}r^2\mathrm{d}r\\&=4\pi\frac{2\sqrt{2}}{\pi a_0^3}\frac{1}{-\dfrac{3}{a_0}}\int_0^\infty r^2\mathrm{d}\mathrm{e}^{-\frac{3r}{a_0}}=4\pi\frac{2\sqrt{2}}{\pi a_0^3}\frac{1}{-\dfrac{3}{a_0}}\left[r^2\mathrm{e}^{-\frac{3r}{a_0}}\Big|_0^\infty-\int_0^\infty 2\mathrm{e}^{-\frac{3r}{a_0}}r\mathrm{d}r\right]\\&=-4\pi\frac{4\sqrt{2}}{\pi a_0^3}\frac{1}{\left(-\dfrac{3}{a_0}\right)^2}\int_0^\infty r\mathrm{d}\mathrm{e}^{-\frac{3r}{a_0}}=-4\pi\frac{4\sqrt{2}}{\pi a_0^3}\frac{1}{\left(-\dfrac{3}{a_0}\right)^2}\left[r\mathrm{e}^{-\frac{3r}{a_0}}\Big|_0^\infty-\int_0^\infty\mathrm{e}^{-\frac{3r}{a_0}}\mathrm{d}r\right]\\&=4\pi\frac{4\sqrt{2}}{\pi a_0^3}\frac{1}{\left(-\dfrac{3}{a_0}\right)^3}\int_0^\infty\mathrm{d}\mathrm{e}^{-\frac{3r}{a_0}}=4\pi\frac{4\sqrt{2}}{\pi a_0^3}\frac{1}{\left(-\dfrac{3}{a_0}\right)^3}\mathrm{e}^{-\frac{3r}{a_0}}\Big|_0^\infty=\frac{16\sqrt{2}}{27}.\end{aligned}$$

概率 $P=|\langle\psi_{100}(2)|\psi_{100}(1)\rangle|^2=2\times\left(\dfrac{16}{27}\right)^2=0.7023$.

答　处于基态的氘核因发生β衰变突然变成 ^{3}He 核，问 He^+ 离子处于基态的概率为 $P=0.7023$.

4.22　带电量为 Q 的平面转子置于恒定的磁场 $\boldsymbol{B}$ 中，$\boldsymbol{B}$ 的方向与转动平面垂直，求定态的能量.

分析　为求定态能级，应先求出哈密顿算符，为此先在经典力学中，得出哈密顿函数，再根据正则量子化条件，得到量子力学中的哈密顿算符，进而求出能量本征值. 在本题中，由于磁场的存在，要注意计入广义势，即广义动量不再等于机械运动的动量.

解　首先，根据经典力学求平面转子的哈密顿量. 设垂直于平面转子的方向为 z 方向，以平面转子的转轴所在处为极点建立极坐标系(r,θ)，根据转子运动的对称性，可取空间各点矢量势沿 $\boldsymbol{e}_\theta$ 方向，根据斯托克斯定理，矢量势的环流等于环线所围面积中的磁通量，因此易得矢量势的大小为 $A=\dfrac{Br}{2}$，即坐标 $\boldsymbol{r}$ 处的矢量势为 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})=\dfrac{Br}{2}\boldsymbol{e}_\theta$ (对称规范)，在经典力学中，处于外磁场中的带电粒子具有广义势能 $-q\boldsymbol{v}\cdot\dfrac{\boldsymbol{A}}{c}$，假定平面转子中位置$(r,\theta)$处的质元 $\mathrm{d}m$ 携带电量 $\mathrm{d}q$，速度为 $\boldsymbol{v}=r\dot{\theta}\boldsymbol{e}_\theta$，则转子的拉格朗日函数可以写成

$$L=\int\left[\frac{v^2\mathrm{d}m}{2}+\frac{\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\mathrm{d}q}{c}\right]=\frac{1}{2}I\dot{\theta}^2+\frac{QBI\dot{\theta}}{2\mu c}, \tag{4.22-1}$$

式(4.22-1)中，转动惯量 $I=\int r^2\mathrm{d}m$，μ 是转子的质量，为简单起见，假定了 $\dfrac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}m}=\dfrac{Q}{\mu}$ 与位置无关，广义动量 $p_\theta=\dfrac{\partial L}{\partial\dot{\theta}}=I\dot{\theta}+\dfrac{QBI}{2\mu c}$，经勒让德变换，得到哈密顿函数

$$H=p_\theta\dot{\theta}-L=\frac{1}{2}I\dot{\theta}^2=\frac{1}{2I}\left(p_\theta-\frac{QBI}{2\mu c}\right)^2. \tag{4.22-2}$$

根据经典力学中的哈密顿函数，即式(4.22-2)和正则量子化条件$[\theta,p_\theta]=\mathrm{i}\hbar$，易得量子力学中该转子的哈密顿(事实上，注意到对应于角为量 θ 的广义动量就是角动量 L_z，也容易得到)

$$\hat{H}=\frac{1}{2I}\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{QBI}{2\mu c}\right)^2. \tag{4.22-3}$$

转子的能量本征态可取为哈密顿算符和角动量算符 $L_z=\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\partial}{\partial\theta}$ 的共同本征态，后者的本征值恰好为 $m\hbar$，因此转子的定态能级为

$$E_m=\frac{1}{2I}\left(m\hbar-\frac{QBI}{2\mu c}\right)^2,\quad m=\text{整数}. \tag{4.22-4}$$

答　转子的定态能级为 $\dfrac{1}{2I}\left(m\hbar-\dfrac{QBI}{2\mu c}\right)^2$.

第五章　含时问题的近似方法

5.1　粒子处在一维的宽度为 a 的无限深势阱中的基态，当势阱的宽度突然变为 $2a$，求系统处于 $2a$ 宽的一维无穷深势阱中第一激发态的概率.

分析　一维的宽度为 a 的无限深势阱的本征基态为

$$\psi_1(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{\pi x}{a}, & 0\leqslant x\leqslant a\\ 0, & x<0, x>a\end{cases} \tag{5.1-1}$$

相应的本征能量为 $E_1=\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\left(\dfrac{\pi}{a}\right)^2$.

解　一维的宽度为 $2a$ 的无限深势阱的本征态为

$$\psi_{n_1}(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{2a}}\sin\dfrac{n_1\pi x}{2a}, & 0\leqslant x\leqslant 2a\\ 0, & x<0, x>2a\end{cases}, \tag{5.1-2}$$

相应的本征能量为 $E_{n_1}=\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\left(\dfrac{n_1\pi}{2a}\right)^2$，第一激发态的波函数为

$$\psi_2(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{1}{a}}\sin\dfrac{\pi x}{a}, & 0\leqslant x\leqslant 2a\\ 0, & x<0, x>2a\end{cases}, \tag{5.1-3}$$

$$\psi_1(x)=\sum_n C_n\varphi_n(x)\,, \tag{5.1-4}$$

$$\begin{aligned}C_2&=\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_2^*(x)\psi_1(x)\mathrm{d}x=\int_0^{2a}\mathrm{d}x\sqrt{\frac{1}{a}}\sin\frac{x}{a}\cdot\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{2a}}\sin\dfrac{\pi x}{2a}, & 0\leqslant x\leqslant 2a\\ 0, & x<0, x>2a\end{cases}\\ &=\frac{\sqrt{2}}{a}\int_0^a\mathrm{d}x\sin\frac{\pi x}{a}\cdot\sin\frac{\pi x}{a}=\frac{\sqrt{2}}{a}\int_0^a\mathrm{d}x\sin^2\frac{\pi x}{a}=\frac{\sqrt{2}}{a}\int_0^a\frac{1-\cos\dfrac{2\pi x}{a}}{2}\mathrm{d}x\\ &=\frac{\sqrt{2}}{a}\frac{a}{2}=\frac{1}{\sqrt{2}}.\end{aligned} \tag{5.1-5}$$

系统处于 $n=2$ 态的概率为 $|C_2|^2=\dfrac{1}{2}$.

答　系统处于 $2a$ 宽的一维无穷深势阱中第一激发态的概率为 $\frac{1}{2}$.

5.2　一类氢原子，其核电荷为 Ze，处于基态，假定突然经历β衰变(即其核电荷由 $Ze\to(Z+1)e$)，试求新离子处在基态的概率.

分析　核荷 Ze 的类氢离子的基态波函数

$$\psi_{100}(Z)=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\mathrm{e}^{-\frac{Zr}{a_0}}. \tag{5.2-1}$$

解　$Z\to Z+1$(β衰变)新离子的基态波函数

$$\psi_{100}(Z+1)=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z+1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\mathrm{e}^{-\frac{(Z+1)r}{a_0}}, \tag{5.2-2}$$

β衰变后新离子处于基态的概率幅为

$$\begin{aligned}
\left\langle\psi_{100}(Z+1)\,|\,\psi_{100}(Z)\right\rangle&=\frac{1}{\pi}\frac{Z^{\frac{3}{2}}(Z+1)^{\frac{3}{2}}}{a_0^3}4\pi\int_0^\infty\mathrm{e}^{-\frac{(Z+1)r}{a_0}}\mathrm{e}^{-\frac{Zr}{a_0}}r^2\mathrm{d}r\\
&=\frac{4Z^{\frac{3}{2}}(Z+1)^{\frac{3}{2}}}{a_0^3}\int_0^\infty\mathrm{e}^{-\frac{(2Z+1)r}{a_0}}r^2\mathrm{d}r\\
&=\frac{4Z^{\frac{3}{2}}(Z+1)^{\frac{3}{2}}}{a_0^3}\frac{1}{-\frac{(2Z+1)}{a_0}}\int_0^\infty r^2\mathrm{d}\mathrm{e}^{-\frac{(2Z+1)r}{a_0}}\\
&=\frac{4Z^{\frac{3}{2}}(Z+1)^{\frac{3}{2}}}{a_0^3}\frac{1}{-\frac{(2Z+1)}{a_0}}\left[r^2\mathrm{e}^{-\frac{(2Z+1)r}{a_0}}\Big|_0^\infty-\int_0^\infty 2r\mathrm{e}^{-\frac{(2Z+1)r}{a_0}}\mathrm{d}r\right]\\
&=\frac{4Z^{\frac{3}{2}}(Z+1)^{\frac{3}{2}}}{(2Z+1)a_0^2}\int_0^\infty 2r\mathrm{e}^{-\frac{(2Z+1)r}{a_0}}\mathrm{d}r\\
&=\frac{4Z^{\frac{3}{2}}(Z+1)^{\frac{3}{2}}}{(2Z+1)a_0^2}\frac{1}{-\frac{(2Z+1)}{a_0}}\int_0^\infty 2r\mathrm{d}\mathrm{e}^{-\frac{(2Z+1)r}{a_0}}\\
&=-\frac{8Z^{\frac{3}{2}}(Z+1)^{\frac{3}{2}}}{(2Z+1)^2a_0}\left[r\mathrm{e}^{-\frac{(2Z+1)r}{a_0}}\Big|_0^\infty-\int_0^\infty\mathrm{e}^{-\frac{(2Z+1)r}{a_0}}\mathrm{d}r\right]
\end{aligned}$$

$$=\frac{8Z^{\frac{3}{2}}(Z+1)^{\frac{3}{2}}}{(2Z+1)^2 a_0}\frac{1}{\frac{(2Z+1)}{a_0}}\int_0^\infty \mathrm{d}e^{-\frac{(2Z+1)r}{a_0}}$$

$$=-\frac{8Z^{\frac{3}{2}}(Z+1)^{\frac{3}{2}}}{(2Z+1)^3}e^{-\frac{(2Z+1)r}{a_0}}\Bigg|_0^\infty=\frac{8Z^{\frac{3}{2}}(Z+1)^{\frac{3}{2}}}{(2Z+1)^3},$$

概率幅为

$$P_{100}^{(Z+1)}=\frac{64Z^3(Z+1)^3}{(2Z+1)^6}. \tag{5.2-3}$$

答　新离子处在基态的概率为 $\dfrac{64Z^3(Z+1)^3}{(2Z+1)^6}$.

5.3　粒子被约束在半径为 r 的圆周上运动，并设立“路障”进一步限制粒子在 $0\leqslant\varphi\leqslant\varphi_0$ 的一段圆弧上运动，即 $V(\varphi)=\begin{cases}0, & 0\leqslant\varphi\leqslant\varphi_0\\ \infty, & \varphi_0<\varphi<2\pi\end{cases}$，求解粒子的能量本征值和本征函数. 设粒子处在基态，突然撤去“路障”后，粒子仍然处在最低能态的概率是多少？

分析　粒子被约束在圆环上运动，其动能为 $\dfrac{L_z^2}{2\mu r^2}$，根据能量本征方程，可以分别在有无路障两种情形下，求出能量本征值和本征函数，其中有路障时的情形与一维无限深势阱类似，利用突发近似，可以得到拆除路障后粒子仍处于基态的概率.

解　粒子的哈密顿量写作

$$\hat{H}=\frac{\hat{L}_z^2}{2\mu r^2}+V(\varphi)=-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}+V(\varphi). \tag{5.3-1}$$

对于有路障的情况，在路障以内势能为零，路障以外势能为无穷，显然在路障以外($\varphi_0<\varphi<2\pi$)波函数为零，在路障以内($0<\varphi<\varphi_0$)，能量本征波函数满足

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\psi=E\psi,\quad \psi(0)=\psi(\varphi_0)=0. \tag{5.3-2}$$

与一维无限深势阱问题类比，容易解得

$$\psi_n=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{\varphi_0}}\sin\dfrac{n\pi\varphi}{\varphi_0}, & 0<\varphi<\varphi_0\\ 0, & \varphi_0<\varphi<2\pi\end{cases}. \tag{5.3-3}$$

拆去路障后，势能始终为零，能量本征值即为角动量 L_z 的本征态 $\tilde{\psi}_n=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{in\varphi}$，能量本征值为 $\frac{n^2\hbar^2}{2\mu r^2}$，最低能量态即 $n=0$ 的态，波函数为 $\tilde{\psi}_0=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$，因此突然拆去路障后，粒子处于最低能量态的概率为

$$P=\left|\int_0^{2\pi}\tilde{\psi}_0^*\psi_1\right|^2=\left|\int_0^{\varphi_0}\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right)\sqrt{\frac{2}{\varphi_0}}\sin\frac{\pi\varphi}{\varphi_0}\right|^2=\frac{4\varphi_0}{\pi^3}. \tag{5.3-4}$$

答　能量本征值为 $\frac{n^2\hbar^2}{2\mu r^2}$，本征函数为 $\psi_n=\begin{cases}\sqrt{\frac{2}{\varphi_0}}\sin\frac{n\pi\varphi}{\varphi_0}, & 0<\varphi<\varphi_0\\ 0, & \varphi_0<\varphi<2\pi\end{cases}$；突然拆去路障后，粒子处于最低能量的概率为 $\frac{4\varphi_0}{\pi^3}$.

5.4　氢原子处于 ψ_{100} 态，突然中断库仑势，问测到电子动量为 $\boldsymbol{p}$ 的概率是多少？

分析　突然中断库仑势，自由电子的波函数是各种 $\boldsymbol{p}$ 的平面波的叠加，$\psi_{100}(\boldsymbol{r})=\int d^3pC(\boldsymbol{p})\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}}{(\sqrt{2\pi\hbar})^3}$，$C(\boldsymbol{p})=\int d^3x\frac{e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}}{(\sqrt{2\pi\hbar})^3}\psi_{100}(\boldsymbol{x})$，将 x_3 选在 $\boldsymbol{p}$ 方向，$\psi_{100}=\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}e^{-\frac{r}{a_0}}$.

解　概率幅

$$C(\boldsymbol{p})=\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^3}\int e^{-\frac{i}{\hbar}pr\cos\theta-\frac{r}{a_0}}r^2\sin\theta dr d\theta d\varphi$$

$$=\frac{2\pi}{\sqrt{\pi a_0^3}}\frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^3}\int e^{-\frac{i}{\hbar}pr\cos\theta-\frac{r}{a_0}}r^2\sin\theta dr d\theta,$$

令

$$I=\int_0^{\pi}e^{-\frac{i}{\hbar}pr\cos\theta}\sin\theta d\theta=\frac{1}{\frac{i}{\hbar}pr}\int_0^{\pi}de^{-\frac{i}{\hbar}pr\cos\theta}=\frac{1}{\frac{i}{\hbar}pr}e^{-\frac{i}{\hbar}pr\cos\theta}\Big|_0^{\pi}$$

$$=\frac{1}{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}pr}\left[\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}pr}-\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}pr}\right]=\frac{2i\sin\frac{pr}{\hbar}}{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}pr}=\frac{2\sin\frac{pr}{\hbar}}{\frac{pr}{\hbar}},$$

$$C(\boldsymbol{p})=\frac{2\pi}{\sqrt{\pi a_0^3}}\frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^3}\int_{r=0}^{\infty}\frac{2\sin\frac{pr}{\hbar}}{\frac{pr}{\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}r^2\mathrm{d}r=\frac{4\pi\hbar}{p\sqrt{\pi a_0^3}}\frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^3}\int_{r=0}^{\infty}\sin\frac{pr}{\hbar}r\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\mathrm{d}r,$$

令 $I_0=\int_{r=0}^{\infty}\sin\frac{pr}{\hbar}r\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\mathrm{d}r$，则

$$I_0=\int_{r=0}^{\infty}\sin\frac{pr}{\hbar}r\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\mathrm{d}r=\frac{1}{-\frac{1}{a_0}}\int_{r=0}^{\infty}\sin\frac{pr}{\hbar}r\mathrm{d}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}$$

$$=-a_0\left[\sin\frac{pr}{\hbar}r\,\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\Big|_0^{\infty}-\int_{r=0}^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\left(\sin\frac{pr}{\hbar}+r\frac{p}{\hbar}\cos\frac{pr}{\hbar}\right)\mathrm{d}r\right]$$

$$=a_0\int_{r=0}^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\left(\sin\frac{pr}{\hbar}+r\frac{p}{\hbar}\cos\frac{pr}{\hbar}\right)\mathrm{d}r=a_0I_1+a_0\frac{p}{\hbar}I_2$$

式中，$I_1=\int_{r=0}^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\sin\frac{pr}{\hbar}\mathrm{d}r$，$I_2=\int_{r=0}^{\infty}r\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\cos\frac{pr}{\hbar}\mathrm{d}r$，则

$$I_1=\int_{r=0}^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\sin\frac{pr}{\hbar}\mathrm{d}r=\frac{1}{-\frac{1}{a_0}}\int_{r=0}^{\infty}\sin\frac{pr}{\hbar}\mathrm{d}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}$$

$$=-a_0\left[\sin\frac{pr}{\hbar}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\Big|_0^{\infty}-\frac{p}{\hbar}\int_{r=0}^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\cos\frac{pr}{\hbar}\mathrm{d}r\right]$$

$$=a_0\frac{p}{\hbar}\int_{r=0}^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\cos\frac{pr}{\hbar}\mathrm{d}r=a_0\frac{p}{\hbar}\frac{1}{-\frac{1}{a_0}}\int_{r=0}^{\infty}\cos\frac{pr}{\hbar}\mathrm{d}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}$$

$$=-a_0^2\frac{p}{\hbar}\left[\cos\frac{pr}{\hbar}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\Big|_0^{\infty}+\frac{p}{\hbar}\int_{r=0}^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\sin\frac{pr}{\hbar}\mathrm{d}r\right]=-a_0^2\frac{p}{\hbar}\left[-1+\frac{p}{\hbar}I_1\right]$$

$$=\left[a_0^2\frac{p}{\hbar}-a_0^2\frac{p^2}{\hbar^2}I_1\right]$$

$$I_1=\frac{a_0^2\dfrac{p}{\hbar}}{1+a_0^2\dfrac{p^2}{\hbar^2}}=\frac{a_0^2p\hbar}{\hbar^2+a_0^2p^2},$$

$$I_2=\int_{r=0}^{\infty}re^{-\frac{r}{a_0}}\cos\frac{pr}{\hbar}\mathrm{d}r=\frac{1}{-\dfrac{1}{a_0}}\int_{r=0}^{\infty}r\cos\frac{pr}{\hbar}\mathrm{d}e^{-\frac{r}{a_0}}$$

$$=-a_0\left[r\cos\frac{pr}{\hbar}e^{-\frac{r}{a_0}}\Big|_0^{\infty}-\int_{r=0}^{\infty}e^{-\frac{r}{a_0}}\left(\cos\frac{pr}{\hbar}-r\frac{p}{\hbar}\sin\frac{pr}{\hbar}\right)\mathrm{d}r\right]$$

$$=a_0\int_{r=0}^{\infty}e^{-\frac{r}{a_0}}\left(\cos\frac{pr}{\hbar}-r\frac{p}{\hbar}\sin\frac{pr}{\hbar}\right)\mathrm{d}r$$

$$=a_0\int_{r=0}^{\infty}e^{-\frac{r}{a_0}}\cos\frac{pr}{\hbar}\mathrm{d}r-a_0\frac{p}{\hbar}\int_{r=0}^{\infty}e^{-\frac{r}{a_0}}r\sin\frac{pr}{\hbar}\mathrm{d}r$$

$$=a_0\frac{1}{-\dfrac{1}{a_0}}\int_{r=0}^{\infty}\cos\frac{pr}{\hbar}\mathrm{d}e^{-\frac{r}{a_0}}-a_0\frac{p}{\hbar}I_0$$

$$=-a_0^2\left[\cos\frac{pr}{\hbar}e^{-\frac{r}{a_0}}\Big|_0^{\infty}+\frac{p}{\hbar}\int_{r=0}^{\infty}e^{-\frac{r}{a_0}}\sin\frac{pr}{\hbar}\mathrm{d}r\right]-a_0\frac{p}{\hbar}I_0$$

$$=-a_0^2\left[-1+\frac{p}{\hbar}I_1\right]-a_0\frac{p}{\hbar}I_0,$$

故 $I_0=a_0I_1+a_0\dfrac{p}{\hbar}I_2$ ，$I_1=\dfrac{a_0^2p\hbar}{\hbar^2+a_0^2p^2}$ ，$I_2=-a_0^2\left[-1+\dfrac{p}{\hbar}I_1\right]-a_0\dfrac{p}{\hbar}I_0$ ，所以

$$I_0=a_0I_1+a_0\frac{p}{\hbar}I_2=a_0\frac{a_0^2p\hbar}{\hbar^2+a_0^2p^2}+a_0\frac{p}{\hbar}\left\{a_0^2\left[1-\frac{p}{\hbar}\frac{a_0^2p\hbar}{\hbar^2+a_0^2p^2}\right]-a_0\frac{p}{\hbar}I_0\right\}$$

$$=a_0\frac{a_0^2p\hbar}{\hbar^2+a_0^2p^2}+a_0\frac{p}{\hbar}\left\{a_0^2-\frac{p}{\hbar}\frac{a_0^4p\hbar}{\hbar^2+a_0^2p^2}-a_0\frac{p}{\hbar}I_0\right\}$$

$$=\frac{a_0^3p\hbar}{\hbar^2+a_0^2p^2}+a_0^3\frac{p}{\hbar}-\frac{a_0^5p^3}{\hbar(\hbar^2+a_0^2p^2)}-a_0^2\frac{p^2}{\hbar^2}I_0,$$

$$I_0=\frac{\dfrac{a_0^3p\hbar}{\hbar^2+a_0^2p^2}+a_0^3\dfrac{p}{\hbar}-\dfrac{a_0^5p^3}{\hbar(\hbar^2+a_0^2p^2)}}{1+a_0^2\dfrac{p^2}{\hbar^2}}=\frac{a_0^3p\hbar^3+a_0^3p\hbar(\hbar^2+a_0^2p^2)-a_0^5p^3h}{(\hbar^2+a_0^2p^2)^2}$$

$$=\frac{2a_0^3p\hbar^3}{(\hbar^2+a_0^2p^2)^2}.$$

故

$$C(\boldsymbol{p})=\frac{4\pi\hbar}{p\sqrt{\pi a_0^3}}\frac{1}{(\sqrt{2\pi}\hbar)^3}\int_{r=0}^{\infty}\sin\frac{pr}{\hbar}r\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\mathrm{d}r=\frac{4\pi\hbar}{p\sqrt{\pi a_0^3}}\frac{1}{(\sqrt{2\pi}\hbar)^3}\frac{2a_0^3p\hbar^3}{(\hbar^2+a_0^2p^2)^2},$$

中断库仑势测到电子动量为 $\boldsymbol{p}$ 的概率为

$$P=|C(\boldsymbol{p})|^2=\left|\frac{4\pi\hbar}{\sqrt{\pi a_0^3}}\frac{1}{(\sqrt{2\pi}\hbar)^3}\frac{2a_0^3\hbar^3}{(\hbar^2+a_0^2p^2)^2}\right|^2=\frac{8a_0^3\hbar^5}{\pi^2(\hbar^2+a_0^2p^2)^4}.$$

答　测到电子动量为 $\boldsymbol{p}$ 的概率是 $\dfrac{8a_0^3\hbar^5}{\pi^2(\hbar^2+a_0^2p^2)^4}$.

5.5　一维谐振子处于基态，突然消除弹性力，问测到动量为 $\boldsymbol{p}$ 的概率是多少？

分析　一维谐振子的基态波函数

$$\psi_{\mathrm{g}}(x)=\psi_0(x)=\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}\mathrm{H}_0(\xi),\tag{5.5-1}$$

式中，$\xi=\sqrt{\dfrac{\mu\omega}{\hbar}}x$，$\mathrm{H}_0=\dfrac{1}{\sqrt[4]{\pi}}$.

解　由式(5.5-1)得 $\psi_{\mathrm{g}}(x)=\sqrt[4]{\dfrac{\mu\omega}{\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}\mathrm{H}_0(\xi)=\sqrt[4]{\dfrac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\frac{\mu\omega}{\hbar}x^2}$，又

$$\psi_{\mathrm{g}}(x)=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\Phi(p)\frac{\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}}{\sqrt{2\pi\hbar}},$$

$$\Phi(p)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\psi_g(x)\mathrm{d}x=\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\frac{\mu\omega}{\hbar}x^2}\mathrm{d}x$$

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

$$=\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\left(\frac{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p}{2\sqrt{\frac{1}{2}\frac{\mu\omega}{\hbar}}}\right)^2}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\left[\left(\sqrt{\frac{1}{2}\frac{\mu\omega}{\hbar}}x+\frac{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p}{2\sqrt{\frac{1}{2}\frac{\mu\omega}{\hbar}}}\right)^2\right]}\mathrm{d}x$$

$$=\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\frac{1}{\sqrt{\frac{1}{2}\frac{\mu\omega}{\hbar}}}\mathrm{e}^{\left(\frac{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p}{2\sqrt{\frac{1}{2}\frac{\mu\omega}{\hbar}}}\right)^2}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\left[\left(\sqrt{\frac{1}{2}\frac{\mu\omega}{\hbar}}x+\frac{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p}{2\sqrt{\frac{1}{2}\frac{\mu\omega}{\hbar}}}\right)^2\right]}\mathrm{d}\left(\sqrt{\frac{1}{2}\frac{\mu\omega}{\hbar}}x+\frac{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p}{2\sqrt{\frac{1}{2}\frac{\mu\omega}{\hbar}}}\right)$$

$$=\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\frac{1}{2}\frac{\mu\omega}{\hbar}}}\mathrm{e}^{\left(\frac{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p}{2\sqrt{\frac{1}{2}\frac{\mu\omega}{\hbar}}}\right)^2}=\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\frac{1}{\sqrt{\mu\omega}}\mathrm{e}^{-\frac{p^2}{2\hbar\mu\omega}}.$$

突然消除弹性力，测到动量为 $\boldsymbol{p}$ 的概率为 $P=|\Phi(p)|^2=\dfrac{1}{\sqrt{\pi\hbar\mu\omega}}\mathrm{e}^{-\frac{p^2}{\hbar\mu\omega}}$.

答　测到动量为 $\boldsymbol{p}$ 的概率为 $\dfrac{1}{\sqrt{\pi\hbar\mu\omega}}\mathrm{e}^{-\frac{p^2}{\hbar\mu\omega}}$.

5.6　一维谐振子处于基态，突然 $k\to 2k$，问测到 $2k$ 的振子处于基态的概率是多少？

分析　因为 $\dfrac{k}{\mu}=\omega^2$，则 $\dfrac{2k}{\mu}=(\sqrt{2}\omega)^2$.

解　当为 k 时，振子的基态波函数为

$$\psi_0^k(x)=\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\frac{\mu\omega}{\hbar}x^2}=\sqrt[4]{\frac{\sqrt{k\mu}}{\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\frac{\sqrt{k\mu}}{\hbar}x^2},\tag{5.6-1}$$

式中 $\omega=\sqrt{\dfrac{k}{\mu}}$，$\mu\omega=\sqrt{k\mu}$.

当为 $2k$ 时，振子的基态波函数为

$$\psi_0^{2k}(x)=\sqrt[4]{\frac{\sqrt{2k\mu}}{\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\frac{\sqrt{2k\mu}}{\hbar}x^2},\tag{5.6-2}$$

式中 $\omega=\sqrt{\dfrac{2k}{\mu}}$，$\mu\omega=\sqrt{2k\mu}$.

$$\psi_0^k(x)=\sum_n C_n\psi_n^{2k}(x)\,,$$

式中

$$C_0=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\psi_0^{2k}(x)\psi_0^k(x)=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\sqrt[4]{\frac{\sqrt{2k\mu}}{\pi\hbar}}\sqrt[4]{\frac{\sqrt{k\mu}}{\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\frac{\sqrt{2k\mu}}{\hbar}x^2}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\frac{\sqrt{k\mu}}{\hbar}x^2}$$

$$=2^{\frac{1}{8}}\sqrt{\frac{\sqrt{k\mu}}{\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\left(\frac{\sqrt{2k\mu}}{\hbar}+\frac{\sqrt{k\mu}}{\hbar}\right)x^2}\mathrm{d}x$$

$$=2^{\frac{1}{8}}\sqrt{\frac{\sqrt{k\mu}}{\pi\hbar}}\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{\sqrt{2k\mu}}{\hbar}+\frac{\sqrt{k\mu}}{\hbar}\right)}}=2^{\frac{1}{8}}\sqrt{\frac{\sqrt{k\mu}}{\hbar}}\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{(\sqrt{2}+1)\frac{\sqrt{k\mu}}{\hbar}}}=\frac{2^{\frac{5}{8}}}{\sqrt{(\sqrt{2}+1)}}.$$

测到 $2k$ 振子处于基态的概率为 $P=|C_0|^2=\dfrac{2^{\frac{5}{4}}}{\sqrt{2}+1}$.

答　测到 $2k$ 的振子处于基态的概率是 $\dfrac{2^{\frac{5}{4}}}{\sqrt{2}+1}$.

5.7　一维位移振子处于基态，突然撤去引起位移的恒力，求处于最低能态的概率.

分析　一维位移振子的哈密顿量

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2+fx=\hat{H}_0+fx\,,\tag{5.7-1}$$

撤去恒力 f 后，是谐振子系统

$$\hat{H}_0=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2\,,\tag{5.7-2}$$

其本征态：$\hat{H}_0\psi_n^{(0)}=E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}$，$E_n^{(0)}=\left(n+\dfrac{1}{2}\right)\hbar\omega$.

解　为了求 $\hat{H}$ 的基态，将 $\hat{H}$ 写成

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2\left(x^2+\frac{2fx}{\mu\omega^2}\right)$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2\left[x^2+\frac{2fx}{\mu\omega^2}+\left(\frac{f}{\mu\omega^2}\right)^2-\left(\frac{f}{\mu\omega^2}\right)^2\right]$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2\left(x+\frac{f}{\mu\omega^2}\right)^2-\frac{1}{2}\mu\omega^2\left(\frac{f}{\mu\omega^2}\right)^2$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2\left(x+\frac{f}{\mu\omega^2}\right)^2-\frac{f^2}{2\mu\omega^2}.$$

$\hat{H}$ 的基态

$$\hat{H}\psi_0\left(x+\frac{f}{\mu\omega^2}\right)=\left(E_0+\frac{1}{2}\frac{f}{\mu\omega^2}\right)\psi_0\left(x+\frac{f}{\mu\omega^2}\right)=\frac{1}{2}\hbar\omega\psi_0\left(x+\frac{f}{\mu\omega^2}\right),$$

$$E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega-\frac{1}{2}\frac{f^2}{\mu\omega^2}.$$

$$\psi_0\left(x+\frac{f}{\mu\omega^2}\right)=\sum_n C_n\psi_0(x)\text{，其中}\psi_0(x)=\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{\mu\omega^2x^2}{2\hbar}},$$

$$C_0=\int\mathrm{d}x\psi_0^{(0)}(x)\psi_0\left(x+\frac{f}{\mu\omega^2}\right)=\sqrt{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\int_0^\infty\mathrm{d}x\left[\mathrm{e}^{-\frac{\mu\omega x^2}{2\hbar}}\right]\left[\mathrm{e}^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}\left(x+\frac{f}{\mu\omega^2}\right)^2}\right]$$

$$=\sqrt{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\int_0^\infty\mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\frac{\mu\omega x^2}{2\hbar}-\frac{\mu\omega x^2}{2\hbar}-\frac{\mu\omega}{\hbar}x\frac{f}{\mu\omega^2}-\frac{\mu\omega}{2\hbar}\left(\frac{f}{\mu\omega^2}\right)^2}$$

$$=\sqrt{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\int_0^\infty\mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\frac{\mu\omega}{\hbar}\left[x^2+x\frac{f}{\mu\omega^2}+\left(\frac{f}{2\mu\omega^2}\right)^2-\left(\frac{f}{2\mu\omega^2}\right)^2\right]-\frac{\mu\omega}{2\hbar}\left(\frac{f}{\mu\omega^2}\right)^2}$$

$$=\sqrt{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\int_0^\infty\mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\frac{\mu\omega}{\hbar}\left(x+\frac{f}{2\mu\omega^2}\right)^2+\frac{\mu\omega}{\hbar}\left(\frac{f}{2\mu\omega^2}\right)^2-\frac{\mu\omega}{2\hbar}\left(\frac{f}{\mu\omega^2}\right)^2}$$

$$=\sqrt{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\frac{\mu\omega}{\hbar}\left(\frac{f}{2\mu\omega^2}\right)^2-\frac{\mu\omega}{2\hbar}\left(\frac{f}{\mu\omega^2}\right)^2}\frac{1}{\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}}\frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

$$=\frac{1}{2}\mathrm{e}^{\frac{f^2}{4\mu\omega^2\hbar}-\frac{f^2}{2\hbar\mu\omega^2}}=\frac{1}{2}\mathrm{e}^{-\frac{f^2}{4\hbar\mu\omega^2}}.$$

处于最低能态的概率为 $P=|C_0|^2=\frac{1}{4}\mathrm{e}^{-\frac{f^2}{2\hbar\mu\omega^2}}$.

答　处于最低能态的概率为 $\frac{1}{4}\mathrm{e}^{-\frac{f^2}{2\hbar\mu\omega^2}}$.

5.8　一维谐振子处于 n 激发态，突然撤去弹性力，求测量动量的概率(提示：在动量表象中求 $\Phi(p)$).

分析　在动量 p 表象中，$\hat{x}=\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}$，$E_n=\left(n+\dfrac{1}{2}\right)\hbar\omega$.

一维谐振子的解为

$$\psi_n(x)=\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{\xi^2}{2}}\mathrm{H}_n(\xi)\,, \tag{5.8-1}$$

式中 $\xi=\sqrt{\dfrac{\mu\omega}{\hbar}}x$，$\mathrm{H}_n(\xi)=(-1)^n\dfrac{1}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}}}\mathrm{e}^{\xi^2}\dfrac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}\xi^n}\mathrm{e}^{-\xi^2}$.

解　在动量 p 表象中，设一维谐振子的 n 激发态为 $\Phi_n(p)$，它满足方程

$$\frac{p^2}{2\mu}\Phi_n(p)+\frac{1}{2}\mu\omega^2\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}\right)^2\Phi_n(p)=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\Phi_n(p)\,,$$

即

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\mu^2\omega^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}p^2}\Phi_n(p)+\frac{p^2}{2\mu}\Phi_n(p)=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\Phi_n(p)$$ 和在 x 表象中的方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_n(x)+\frac{\mu^2\omega^2x^2}{2\mu}\psi_n(x)=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\psi_n(x)$$

作比较，可见 $p\leftrightarrow\mu\omega x$，$\Phi_n\leftrightarrow\psi_n$，$\psi_n(\mu\omega x)=\displaystyle\int\mathrm{d}p\Phi_n(p)\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}$，

$$\Phi_n(p)=\int\mathrm{d}x\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\psi_n(\mu\omega x)\,, \tag{5.8-2}$$

撤去弹性力后，测量动量的概率为 $|\Phi_n(p)|^2$.

由式(5.8-1)，当 $n=2$ 时，

$$\begin{aligned}
\psi_2(x)&=\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{\xi^2}{2}}(-1)^2\frac{1}{\sqrt{2^2 2!\sqrt{\pi}}}\mathrm{e}^{\xi^2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}\mathrm{e}^{-\xi^2}\\
&=\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{\xi^2}{2}}(-1)^2\frac{1}{\sqrt{2^2 2!\sqrt{\pi}}}\mathrm{e}^{\xi^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}(-2\xi\mathrm{e}^{-\xi^2})\\
&=\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{\xi^2}{2}}(-1)^2\frac{1}{\sqrt{2^2 2!\sqrt{\pi}}}\mathrm{e}^{\xi^2}[-2\mathrm{e}^{-\xi^2}+(-2\xi)^2\mathrm{e}^{-\xi^2}]\\
&=\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{\xi^2}{2}}\frac{1}{\sqrt{2}}(2\xi^2-1)=\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}x^2}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(2\frac{\mu\omega}{\hbar}x^2-1\right).
\end{aligned} \tag{5.8-3}$$

将式(5.8-3)代入式(5.8-2)得

$$\Phi_2(p)=\int \mathrm{d}x\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}(\mu\omega x)^2}\frac{1}{\sqrt{2}}\left[2\frac{\mu\omega}{\hbar}(\mu\omega x)^2-1\right]$$

$$=\frac{1}{\sqrt{\pi\hbar}}\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\frac{\mu^3\omega^3}{\hbar}\int_0^\infty \mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{e}^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}(\mu\omega x)^2}x^2-\frac{1}{2\sqrt{\pi\hbar}}\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\int_0^\infty \mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{e}^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}(\mu\omega x)^2},$$

$$=\frac{1}{\sqrt{\pi\hbar}}\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\frac{\mu^3\omega^3}{\hbar}I_1-\frac{1}{2\sqrt{\pi\hbar}}\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}I_2, \tag{5.8-4}$$

式中，

$$I_1=\int_0^\infty \mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{e}^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}(\mu\omega x)^2}x^2=\int_0^\infty \mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}\left[x^2+\frac{2\mathrm{i}px}{\mu^3\omega^3}+\left(\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)^2-\left(\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)^2\right]}x^2$$

$$=\mathrm{e}^{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}\left(\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)^2}\int_0^\infty \mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}\left(x+\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)^2}x^2$$

$$=\mathrm{e}^{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}\left(\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)^2}\int_0^\infty \mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}\left(x+\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)^2}\left[\left(x+\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)^2-2x\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}-\left(\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)^2\right]$$

$$=\mathrm{e}^{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}\left(\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)^2}\int_0^\infty \mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}\left(x+\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)^2}\left[\left(x+\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)^2-2\left(x+\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}+\left(\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)^2\right]$$

$$=\mathrm{e}^{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}\left(\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)^2}\frac{1}{\left(\sqrt{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}}\right)^3}\int_0^\infty \mathrm{d}\left[\sqrt{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}}\left(x+\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)\right],$$

$$\mathrm{e}^{-\left[\sqrt{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}}\left(x+\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)\right]^2}\left\{\left[\sqrt{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}}\left(x+\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)\right]^2\right.$$

$$\left.-2\sqrt{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}}\left(x+\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)\sqrt{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}}\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}+\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}\left(\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)^2\right\}$$

$$=\mathrm{e}^{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}\left(\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)^2}\frac{1}{\left(\sqrt{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}}\right)^3}\int_0^\infty \mathrm{d}t\mathrm{e}^{-t^2}\left\{t^2-2t\sqrt{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}}\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}+\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}\left(\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)^2\right\}$$

$$=\mathrm{e}^{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}\left(\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)^2}\frac{1}{\left(\sqrt{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}}\right)^3}\int_0^\infty \mathrm{d}t\mathrm{e}^{-t^2}t^2$$

$$-2\mathrm{e}^{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}\left(\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)^2}\frac{1}{\left(\sqrt{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}}\right)^3}\sqrt{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}}\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\int_0^\infty \mathrm{d}t\mathrm{e}^{-t^2}t$$

$$+\mathrm{e}^{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}\left(\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)^2}\frac{1}{\left(\sqrt{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}}\right)^3}\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}\left(\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)^2\int_0^\infty \mathrm{d}t\mathrm{e}^{-t^2}$$

$$=\mathrm{e}^{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}\left(\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)^2}\frac{1}{\left(\sqrt{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}}\right)^3}I_{11}-2\mathrm{e}^{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}\left(\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)^2}\frac{1}{\left(\sqrt{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}}\right)^3}\sqrt{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}}\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}I_{12}$$

$$+\mathrm{e}^{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}\left(\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)^2}\frac{1}{\left(\sqrt{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}}\right)^3}\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}\left(\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)^2 I_{13},$$

式中，令 $t=\sqrt{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}}\left(x+\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)$，$I_{11}=\int_0^\infty \mathrm{d}t\mathrm{e}^{-t^2}t^2$，$I_{12}=\int_0^\infty \mathrm{d}t\mathrm{e}^{-t^2}t$，$I_{13}=\int_0^\infty \mathrm{d}t\mathrm{e}^{-t^2}=\frac{\sqrt{\pi}}{2}$，

$$I_{11}=\frac{1}{2}\int_0^\infty t\mathrm{d}t^2\mathrm{e}^{-t^2}=-\frac{1}{2}\int_0^\infty t\mathrm{d}\mathrm{e}^{-t^2}=-\frac{1}{2}\left[t\,\mathrm{e}^{-t^2}\Big|_0^\infty-\int_0^\infty \mathrm{e}^{-t^2}\mathrm{d}t\right]=\frac{1}{2}\frac{\sqrt{\pi}}{2}=\frac{\sqrt{\pi}}{4};$$

$$I_{12}=\int_0^\infty \mathrm{d}t\mathrm{e}^{-t^2}t=\frac{1}{2}\int_0^\infty \mathrm{d}t^2\mathrm{e}^{-t^2}=-\frac{1}{2}\int_0^\infty \mathrm{d}\mathrm{e}^{-t^2}=-\frac{1}{2}\mathrm{e}^{-t^2}\Big|_0^\infty=\frac{1}{2};$$

故

$$I_1=\mathrm{e}^{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}\left(\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)^2}\frac{1}{\left(\sqrt{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}}\right)^3}\frac{\sqrt{\pi}}{4}-2\mathrm{e}^{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}\left(\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)^2}\frac{1}{\left(\sqrt{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}}\right)^3}\sqrt{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}}\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\frac{1}{2}$$

$$+\mathrm{e}^{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}\left(\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)^2}\frac{1}{\left(\sqrt{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}}\right)^3}\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}\left(\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)^2\frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

$$=\mathrm{e}^{-\frac{p^2}{2\hbar\mu^3\omega^3}}\left(\sqrt{\frac{2\hbar}{\mu^3\omega^3}}\right)^3\frac{\sqrt{\pi}}{4}-2\mathrm{e}^{-\frac{p^2}{2\hbar\mu^3\omega^3}}\frac{\mathrm{i}p\hbar}{\mu^6\omega^6}-\mathrm{e}^{-\frac{p^2}{2\hbar\mu^3\omega^3}}\sqrt{\frac{2\hbar}{\mu^3\omega^3}}\frac{p^2}{\mu^6\omega^6}\frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

$$I_2=\int_0^\infty \mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{e}^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}(\mu\omega x)^2}=\int_0^\infty \mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}\left[x^2+\frac{\mathrm{i}2px}{\mu^3\omega^3}+\left(\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)^2-\left(\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)^2\right]}$$

$$=\mathrm{e}^{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}\left(\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)^2}\int_0^\infty \mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\left[\sqrt{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}}\left(x+\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)\right]^2}$$

$$=\mathrm{e}^{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}\left(\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)^2}\frac{1}{\sqrt{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}}}\int_0^\infty \mathrm{d}\left[\sqrt{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}}\left(x+\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)\right]\mathrm{e}^{-\left[\sqrt{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}}\left(x+\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)\right]^2}$$

$$=\mathrm{e}^{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}\left(\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right)^2}\frac{1}{\sqrt{\frac{\mu^3\omega^3}{2\hbar}}}\frac{\sqrt{\pi}}{2}=\mathrm{e}^{-\frac{p^2}{2\hbar\mu^3\omega^3}}\sqrt{\frac{\pi\hbar}{2\mu^3\omega^3}},$$

故

$$\Phi_2(p)=\frac{1}{\sqrt{\pi\hbar}}\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\frac{\mu^3\omega^3}{\hbar}I_1-\frac{1}{2\sqrt{\pi\hbar}}\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}I_2$$

$$=\frac{1}{\sqrt{\pi\hbar}}\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\frac{\mu^3\omega^3}{\hbar}\left\{\mathrm{e}^{-\frac{p^2}{2\hbar\mu^3\omega^3}}\left(\sqrt{\frac{2\hbar}{\mu^3\omega^3}}\right)^3\frac{\sqrt{\pi}}{4}-2\mathrm{e}^{-\frac{p^2}{2\hbar\mu^3\omega^3}}\frac{\mathrm{i}p\hbar}{\mu^6\omega^6}\right.$$

$$\left.-\mathrm{e}^{-\frac{p^2}{2\hbar\mu^3\omega^3}}\sqrt{\frac{2\hbar}{\mu^3\omega^3}}\frac{p^2}{\mu^6\omega^6}\frac{\sqrt{\pi}}{2}\right\}-\frac{1}{2\sqrt{\pi\hbar}}\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{p^2}{2\hbar\mu^3\omega^3}}\sqrt{\frac{\pi\hbar}{2\mu^3\omega^3}}$$

$$=\left\{\frac{1}{\sqrt{\pi\hbar}}\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\frac{\mu^3\omega^3}{\hbar}\left(\sqrt{\frac{2\hbar}{\mu^3\omega^3}}\right)^3\frac{\sqrt{\pi}}{4}-2\frac{1}{\sqrt{\pi\hbar}}\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\frac{\mu^3\omega^3}{\hbar}\frac{\mathrm{i}p\hbar}{\mu^6\omega^6}\right.$$

$$-\frac{1}{\sqrt{\pi\hbar}}\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\frac{\mu^3\omega^3}{\hbar}\sqrt{\frac{2\hbar}{\mu^3\omega^3}}\frac{p^2}{\mu^6\omega^6}\frac{\sqrt{\pi}}{2}-\frac{1}{2\sqrt{\pi\hbar}}\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\sqrt{\frac{\pi\hbar}{2\mu^3\omega^3}}\Bigg\}e^{-\frac{p^2}{2\hbar\mu^3\omega^3}}$$

$$=\left\{\frac{1}{\sqrt{\hbar}}\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\frac{\mu^3\omega^3}{\hbar}\left(\sqrt{\frac{2\hbar}{\mu^3\omega^3}}\right)^3\frac{1}{4}-2\frac{1}{\sqrt{\pi\hbar}}\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\frac{\mathrm{i}p}{\mu^3\omega^3}\right.$$

$$\left.-\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\sqrt{\frac{2}{\mu^3\omega^3}}\frac{p^2}{\mu^3\omega^3}\frac{1}{2\hbar}-\frac{1}{2}\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\sqrt{\frac{1}{2\mu^3\omega^3}}\right\}e^{-\frac{p^2}{2\hbar\mu^3\omega^3}}$$

$$=\left\{\frac{\mu^{\frac{13}{4}}\omega^{\frac{13}{4}}2^{\frac{3}{2}}\hbar^{\frac{3}{2}}}{4\hbar^{\frac{7}{4}}\pi^{\frac{1}{4}}\mu^{\frac{9}{2}}\omega^{\frac{9}{2}}}-\frac{\mathrm{i}2p\mu^{\frac{1}{4}}\omega^{\frac{1}{4}}}{\mu^3\omega^3\pi^{\frac{3}{4}}\hbar^{\frac{3}{4}}}-\frac{p^2\mu^{\frac{1}{4}}\omega^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{2}\hbar^{\frac{5}{4}}\pi^{\frac{1}{4}}\mu^{\frac{9}{2}}\omega^{\frac{9}{2}}}-\frac{\mu^{\frac{1}{4}}\omega^{\frac{1}{4}}}{2^{\frac{3}{2}}\mu^{\frac{3}{2}}\omega^{\frac{3}{2}}\hbar^{\frac{1}{4}}\pi^{\frac{1}{4}}}\right\}e^{-\frac{p^2}{2\hbar\mu^3\omega^3}}$$

$$=\left\{\frac{1}{\sqrt{2}\hbar^{\frac{1}{4}}\pi^{\frac{1}{4}}\mu^{\frac{5}{4}}\omega^{\frac{5}{4}}}-\frac{\mathrm{i}2p}{\mu^{\frac{11}{4}}\omega^{\frac{11}{4}}\pi^{\frac{3}{4}}\hbar^{\frac{3}{4}}}-\frac{p^2}{\sqrt{2}\hbar^{\frac{5}{4}}\pi^{\frac{1}{4}}\mu^{\frac{17}{4}}\omega^{\frac{17}{4}}}-\frac{1}{2^{\frac{3}{2}}\mu^{\frac{5}{4}}\omega^{\frac{5}{4}}\hbar^{\frac{1}{4}}\pi^{\frac{1}{4}}}\right\}e^{-\frac{p^2}{2\hbar\mu^3\omega^3}}$$

$$=\left\{\frac{1}{2\sqrt{2}\hbar^{\frac{1}{4}}\pi^{\frac{1}{4}}\mu^{\frac{5}{4}}\omega^{\frac{5}{4}}}-\frac{p^2}{\sqrt{2}\hbar^{\frac{5}{4}}\pi^{\frac{1}{4}}\mu^{\frac{17}{4}}\omega^{\frac{17}{4}}}-\frac{\mathrm{i}2p}{\mu^{\frac{11}{4}}\omega^{\frac{11}{4}}\pi^{\frac{3}{4}}\hbar^{\frac{3}{4}}}\right\}e^{-\frac{p^2}{2\hbar\mu^3\omega^3}},$$

$$P_2=|\Phi_2(p)|^2=\left[\left(\frac{1}{2\sqrt{2}\hbar^{\frac{1}{4}}\pi^{\frac{1}{4}}\mu^{\frac{5}{4}}\omega^{\frac{5}{4}}}-\frac{p^2}{\sqrt{2}\hbar^{\frac{5}{4}}\pi^{\frac{1}{4}}\mu^{\frac{17}{4}}\omega^{\frac{17}{4}}}\right)^2+\left(\frac{2p}{\mu^{\frac{11}{4}}\omega^{\frac{11}{4}}\pi^{\frac{3}{4}}\hbar^{\frac{3}{4}}}\right)^2\right]e^{-\frac{p^2}{\hbar\mu^3\omega^3}}.$$

答　撤去弹性力后，测量动量的概率为$\left|\int\mathrm{d}x\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\psi_n(\mu\omega x)\right|^2$，当$n=2$时，测量动量的概率为$P_2=|\Phi_2(p)|^2=\left[\left(\frac{1}{2\sqrt{2}\hbar^{\frac{1}{4}}\pi^{\frac{1}{4}}\mu^{\frac{5}{4}}\omega^{\frac{5}{4}}}-\frac{p^2}{\sqrt{2}\hbar^{\frac{5}{4}}\pi^{\frac{1}{4}}\mu^{\frac{17}{4}}\omega^{\frac{17}{4}}}\right)^2+\left(\frac{2p}{\mu^{\frac{11}{4}}\omega^{\frac{11}{4}}\pi^{\frac{3}{4}}\hbar^{\frac{3}{4}}}\right)^2\right]e^{-\frac{p^2}{\hbar\mu^3\omega^3}}$.

5.9　$t=-\infty$时，氢原子处于基态$\psi_{100}^{(0)}$，受到电场$\varepsilon(t)=\frac{c\tau}{t^2+\tau^2}$作用，电场方向在$x_3$方向，求$t=\infty$后激发到$n=2$能级的概率.

分析　氢原子的哈密顿量

$$\hat{H}_0=\frac{1}{2\mu}\hat{p}^2-\frac{e^2}{r}, \tag{5.9-1}$$

式中 $r=|\boldsymbol{x}|$，

$$\hat{H}_0\psi_{100}^{(0)}=\frac{-e^2}{2a_0}\psi_{100}^{(0)},\quad E_1=\frac{-e^2}{2a_0}. \tag{5.9-2}$$

由 $\psi(r,\theta,\varphi)=R_{nl}(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$，式中

$$R_{nl}(r)=-\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n\{(n+l)!\}^3}}\left(\frac{2}{na_0}\right)^{\frac{3}{2}}\mathrm{L}_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)\left(\frac{2r}{na_0}\right)^l\mathrm{e}^{-\frac{2r}{2na_0}}, \tag{5.9-3}$$

$$\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)=(\mp)^m\sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{2(l+|m|)!}}\mathrm{P}_l^m(\cos\theta)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}, \tag{5.9-4}$$

微分 M 次的缔合拉盖尔多项式

$$\mathrm{L}_N^M\left(\frac{r}{n}\right)=\sum_{k=0}^{N-M}\frac{(N!)^2(-1)^{k+M}}{(N-M-k)!(M+k)!k!}\left(\frac{r}{n}\right)^k, \tag{5.9-5}$$

勒让德多项式

$$\mathrm{P}_l(\cos\theta)=\sum_{k=0}^{\leqslant\frac{l}{2}}\frac{(-1)^k(2l-2k)!}{2^l k!(l-k)!(l-2k)!}(\cos\theta)^{l-2k}, \tag{5.9-6}$$

微分 m 次的勒让德多项式

$$\mathrm{P}_l^m(\cos\theta)=(1-\cos^2\theta)^{\frac{m}{2}}\frac{\mathrm{d}^m\mathrm{P}_l(\cos\theta)}{\mathrm{d}\cos^m\theta}. \tag{5.9-7}$$

$$\langle nlm|r\cos\theta|n_1l_1m_1\rangle=2\pi\int_0^\infty R_{nl}(r)rR_{n_1l_1}(r)r^2\mathrm{d}r\int_0^\pi\mathrm{Y}_{lm}\cos\theta\mathrm{Y}_{l_1m_1}\sin\theta\mathrm{d}\theta. \tag{5.9-8}$$

解　受到电场 $\varepsilon(t)=\dfrac{c\tau}{t^2+\tau^2}$ 作用，附加势能为

$$V=e\varepsilon(t)x_3=\frac{ce\tau}{t^2+\tau^2}r\cos\theta,\quad \hat{H}=\hat{H}_0+V.$$

设电场可作为微扰看待，则根据含时微扰论

$$a_{2lm}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\left\langle 2lm\left|\frac{ce\tau}{t^2+\tau^2}r\cos\theta\right|100\right\rangle\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{2lm,100}t}\mathrm{d}t,$$

当 $l=1$ 时， $m=0,\pm1$ ；当 $l=0$ 时， $m=0$ ；

对于 $\langle lm|\cos\theta|00\rangle\neq0$ ， $\Delta l=\pm1$ ， $\Delta m=0$ ，所以 $l=1$ ， $m=0$ ，

$$a_{210}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\left\langle 210\left|\frac{ce\tau}{t^2+\tau^2}r\cos\theta\right|100\right\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{210,100}t}\mathrm{d}t$$

$$=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle 210|ce\tau r\cos\theta|100\rangle\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{210,100}t}}{t^2+\tau^2}\mathrm{d}t=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}I\times J.$$

式中， $I=\langle 210|ce\tau r\cos\theta|100\rangle$ ， $J=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{210,100}t}}{t^2+\tau^2}\mathrm{d}t$.

(1) 求解 $I=\langle 210|ce\tau r\cos\theta|100\rangle$ 的过程.

由式(5.9-6)、式(5.9-7)、式(5.9-8)、式(5.9-9)，及 $L_3^3=\frac{(3!)^2(-1)^3}{1\times3!}=-6$ ，

$L_1^1=\frac{(-1)^1}{0!\times1!\times0!}=-1$ ，得

$$R_{nl}(r)=-\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n\{(n+l)!\}^3}}\left(\frac{2}{na_0}\right)^{\frac{3}{2}}\mathrm{L}_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)\left(\frac{2r}{na_0}\right)^l\mathrm{e}^{-\frac{2r}{2na_0}},$$

$$R_{21}(r)=-\sqrt{\frac{1}{4\times(3!)^3}}\frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}}\mathrm{L}_3^3\left(\frac{r}{a_0}\right)\left(\frac{r}{a_0}\right)\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a_0}}=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{6}}\frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}}\frac{r}{a_0}\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a_0}},$$

$R_{10}(r)=-\sqrt{\frac{1}{2}}\left(\frac{2}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\mathrm{L}_1^1(r)\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}=\frac{2}{a_0^{\frac{3}{2}}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}$ ， $\mathrm{Y}_{10}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{3}{2}}\cos\theta\sqrt{\frac{1}{2\pi}}$ ， $\mathrm{Y}_{00}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{1}{2\pi}}$.

又利用

$$\langle nlm|r\cos\theta|n_1l_1m_1\rangle=\int_0^{\infty}R_{nl}(r)rR_{n_1l_1}(r)r^2\mathrm{d}r\int_0^{\pi}\mathrm{Y}_{lm}^*\cos\theta\mathrm{Y}_{l_1m_1}\sin\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi=I_1\times I_2,$$

式中， $I_1=\int_0^{\infty}R_{nl}(r)rR_{n_1l_1}(r)r^2\mathrm{d}r$ ，

$$I_2=\int_0^{\pi}\mathrm{Y}_{lm}^*\cos\theta\mathrm{Y}_{l_1m_1}\sin\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi$$

$$=\sqrt{\frac{(l+|m|+1)(l-|m|+1)}{(2l+1)(2l+3)}}\delta_{l_1,l+1}\delta_{m_1,m}+\sqrt{\frac{(l+|m|)(l-|m|)}{(2l-1)(2l+1)}}\delta_{l_1,l-1}\delta_{m_1,m}.$$

对于 $\langle 210|r\cos\theta|100\rangle$ 而言， $n=2,n_1=1,l=1,l_1=m=m_1=0$ ，有

$$I_1=\int_0^\infty R_{nl}(r)rR_{n_1l_1}(r)r^2\mathrm{d}r=\int_0^\infty R_{21}(r)rR_{10}(r)r^2\mathrm{d}r$$

$$=\int_0^\infty\frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{6}}\frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}}\frac{r}{a_0}\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a_0}}r\mathrm{e}^{-\frac{r}{4}}r\frac{2}{a_0^{\frac{3}{2}}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}r^2\mathrm{d}r$$

$$=\frac{1}{a_0^4\sqrt{6}}\frac{1}{\left(-\frac{3}{2a_0}\right)}\int_0^\infty r^4\mathrm{d}\mathrm{e}^{-\frac{3r}{2a_0}}=\frac{1}{a_0^4\sqrt{6}}\frac{1}{-\frac{3}{2a_0}}\left[r^4\mathrm{e}^{-\frac{3r}{2a_0}}\Big|_0^\infty-\int_0^\infty 4r^3\mathrm{e}^{-\frac{3r}{2a_0}}\mathrm{d}r\right]$$

$$=-\frac{1}{a_0^4\sqrt{6}}\frac{4}{\left(-\frac{3}{2a_0}\right)^2}\int_0^\infty r^3\mathrm{d}\mathrm{e}^{-\frac{3r}{2a_0}}=-\frac{1}{a_0^4\sqrt{6}}\frac{4}{\left(-\frac{3}{2a_0}\right)^2}\left[r^3\mathrm{e}^{-\frac{3r}{2a_0}}\Big|_0^\infty-\int_0^\infty 3r^2\mathrm{e}^{-\frac{3r}{2a_0}}\mathrm{d}r\right]$$

$$=\frac{1}{a_0^4\sqrt{6}}\frac{12}{\left(-\frac{3}{2a_0}\right)^3}\int_0^\infty r^2\mathrm{d}\mathrm{e}^{-\frac{3r}{2a_0}}=\frac{1}{a_0^4\sqrt{6}}\frac{12}{\left(-\frac{3}{2a_0}\right)^3}\left[r^2\mathrm{e}^{-\frac{3r}{2a_0}}\Big|_0^\infty-\int_0^\infty 2r\mathrm{d}\mathrm{e}^{-\frac{3r}{2a_0}}\right]$$

$$=-\frac{1}{a_0^4\sqrt{6}}\frac{24}{\left(-\frac{3}{2a_0}\right)^4}\int_0^\infty r\mathrm{d}\mathrm{e}^{-\frac{3r}{2a_0}}=-\frac{1}{a_0^4\sqrt{6}}\frac{24}{\left(-\frac{3}{2a_0}\right)^4}\left[r\mathrm{e}^{-\frac{3r}{2a_0}}\Big|_0^\infty-\int_0^\infty\mathrm{e}^{-\frac{3r}{2a_0}}\mathrm{d}r\right]$$

$$=\frac{1}{a_0^4\sqrt{6}}\frac{24}{\left(-\frac{3}{2a_0}\right)^5}\mathrm{e}^{-\frac{3r}{2a_0}}\Big|_0^\infty=\frac{1}{a_0^4\sqrt{6}}\frac{24}{\left(\frac{3}{2a_0}\right)^5}=\frac{1}{\sqrt{6}}\frac{2\times2\times2\times2^5}{3\times3\times3\times3}a_0,$$

$I_2=\sqrt{\frac{(l+|m|+1)(l-|m|+1)}{(2l+1)(2l+3)}}\delta_{l_1,l+1}\delta_{m_1,m}+\sqrt{\frac{(l+|m|)(l-|m|)}{(2l-1)(2l+1)}}\delta_{l_1,l-1}\delta_{m_1,m}=\sqrt{\frac{1}{3}}$，故

$$\left\langle 210\left|\frac{c\mathrm{e}\tau}{t^2+\tau^2}r\cos\theta\right|100\right\rangle=\frac{c\mathrm{e}\tau}{t^2+\tau^2}I_1\times I_2=\frac{c\mathrm{e}\tau}{t^2+\tau^2}\frac{\sqrt{2}\times2^7}{3^5}a_0.$$

(2) 求解 $J=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{210,100}t}}{t^2+\tau^2}\mathrm{d}t$ 的过程.

(该方法由在 1988 年南京大学数学系本科毕业的刘玉清博士提供)

对于函数 $f(t)$，其傅里叶变换 $F(\omega)=\int_{-\infty}^{\infty}f(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{210,100}t}\mathrm{d}t$，则 $f\left(\frac{1}{t}\right)=-\mathrm{i}\pi\operatorname{sgn}\omega$，

$F[f(t-a)]=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega a}F(\omega)$，故

$$J=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{210,100}t}}{t^2+\tau^2}\mathrm{d}t=F\left(\frac{1}{t^2+\tau^2}\right)=F\left(\frac{1}{t-\mathrm{i}\tau}-\frac{1}{t+\mathrm{i}\tau}\right)\cdot\frac{1}{2\mathrm{i}\tau}$$

$$=-\frac{\mathrm{i}}{2\tau}\left[F\left(\frac{1}{t-\mathrm{i}\tau}\right)-F\left(\frac{1}{t+\mathrm{i}\tau}\right)\right]$$

$$=-\frac{\mathrm{i}}{2\tau}[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{210,100}\mathrm{i}\tau}F(\omega_{210,100})-\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{210,100}\mathrm{i}\tau}F(\omega_{210,100})]$$

$$=-\frac{\mathrm{i}}{2\tau}(\mathrm{e}^{\omega_{210,100}\tau}-\mathrm{e}^{-\omega_{210,100}\tau})F(\omega_{210,100})$$

$$=-\frac{\mathrm{i}}{\tau}\left(\frac{\mathrm{e}^{\omega_{210,100}\tau}-\mathrm{e}^{-\omega_{210,100}\tau}}{2}\right)(-\mathrm{i}\pi\,\mathrm{sgn}\,\omega_{210,100})=-\frac{\pi\,\mathrm{sgn}\,\omega_{210,100}}{\tau}\sinh\omega_{210,100}\tau,$$

$$a_{210}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}I\times J=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left(\frac{ce\tau}{t^2+\tau^2}\frac{\sqrt{2}\times 2^7}{3^5}a_0\right)\left(-\frac{\pi\,\mathrm{sgn}\,\omega_{210,100}}{\tau}\sinh\omega_{210,100}\tau\right).$$

概率

$$P=|a_{210}|^2=\frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{ce\tau}{t^2+\tau^2}\frac{\sqrt{2}\times 2^7}{3^5}a_0\right)^2\left(\frac{\pi\,\mathrm{sgn}\,\omega_{210,100}}{\tau}\sinh\omega_{210,100}\tau\right)^2$$

$$=\frac{2^{15}c^2e^2\pi^2}{3^{10}\hbar^2(t^2+\tau^2)^2}a_0^2(\sinh\omega_{210,100}\tau)^2(\mathrm{sgn}\,\omega_{210,100})^2.$$

答　激发到 $n=2$ 能级的概率为 $\dfrac{2^{15}c^2e^2\pi^2}{3^{10}\hbar^2(t^2+\tau^2)^2}a_0^2(\sinh\omega_{210,100}\tau)^2(\mathrm{sgn}\,\omega_{210,100})^2$.

5.10　带电刚性定 z 轴转子，受 x 方向交变电场 $\varepsilon=\varepsilon_0\cos\omega t$ 的作用，如电场可当作微扰，求激发概率. 讨论 ω 满足什么条件才能使系统激发?

分析　根据一阶含时微扰论，在周期性微扰作用下，粒子的跃迁速率可以写成

$$\frac{2\pi}{\hbar}|\langle n|V|m\rangle|^2\,\delta(E_n-E_m\pm\hbar\omega),$$

这里 $|m\rangle$ 和 $|n\rangle$ 是粒子的初态和末态，E_m 和 E_n 是初态和末态的能量(未微扰哈密顿量的本征值). 跃迁的选择定则由矩阵元 $\langle n|V|m\rangle$ 不为零的条件给出.

解　本题中，带电粒子约束在一个圆环上运动，未微扰哈密顿量 $\hat{H}_0=\dfrac{\hat{L}_z^2}{2I}$(参阅题 4.22 和题 5.3 的解)，在电偶极近似下，微扰哈密顿的空间部分就是电偶极子在电场中的电势能，因此跃迁矩阵元正比于

$$\langle n|\boldsymbol{\tau}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}|m\rangle\propto\langle n|\cos\theta|m\rangle\propto\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\theta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m-n)\theta}\cos\theta.\tag{5.10-1}$$

显然，式(5.10-1)非零的条件是 $m-n=\pm1$，这就是跃迁的选择规则，再根据跃迁中能量守恒的要求，$E_{n+1}-E_n=\hbar\omega$ 或者 $E_n-E_{n-1}=\hbar\omega$ 可得系统激发的条件 $\omega=\dfrac{2n\pm1}{2I}\hbar$.

答　系统激发的条件 $\omega=\dfrac{2n\pm1}{2I}\hbar$.

5.11　基态氢原子被告置于均匀电场中，电场强度为 $\varepsilon=\begin{cases}0, & t<0\\ \varepsilon_0 e^{-\frac{t}{\tau}}, & t\geqslant0\end{cases}$，求氢原子被激发到2s及2p态的概率.

分析　设电场 ε 在 x_3 方向，$\hat{H}=\hat{H}_0+e\varepsilon x_3$，$\hat{H}_0$ 为氢原子的哈密顿量，氢原子的基态波函数 $\psi_{100}=R_{10}Y_{00}=\sqrt{\dfrac{1}{a_0^3}}2e^{-\frac{r}{a_0}}\dfrac{1}{\sqrt{4\pi}}$.

解　氢原子的2s及2p态的波函数

$$\psi_{2s}:\ \psi_{200}=R_{20}Y_{00}=\sqrt{\frac{1}{8a_0^3}}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)e^{-\frac{r}{2a_0}}\frac{1}{\sqrt{4\pi}};$$

$$\psi_{2p}:\ \psi_{210}=R_{21}Y_{10}=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sqrt{\frac{1}{8a_0^3}}\frac{r}{2a_0}e^{-\frac{r}{2a_0}}\cos\theta;$$

$$\psi_{21,\pm1}=R_{21}Y_{1,\pm1}=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{1}{2a_0}e^{-\frac{r}{2a_0}}\sin\theta e^{\pm i\varphi};$$

$$\begin{aligned}a_{200,100}&=\frac{e\varepsilon_0}{i\hbar}\int_0^t dt\langle200|x_3|100\rangle e^{-\frac{t}{\tau}}e^{-i\omega_{200,100}t}\\&=\frac{e\varepsilon_0}{i\hbar}\langle200|x_3|100\rangle\int_0^t dt e^{-\frac{t}{\tau}-i\omega_{200,100}t}\\&=\frac{e\varepsilon_0}{i\hbar}\langle200|x_3|100\rangle\frac{1}{-\frac{1}{\tau}-i\omega_{200,100}}e^{-\frac{t}{\tau}-i\omega_{200,100}t}\Bigg|_0^t\\&=\frac{e\varepsilon_0}{\hbar}\langle200|x_3|100\rangle\frac{e^{-\frac{t}{\tau}-i\omega_{200,100}t}-1}{-\frac{i}{\tau}+\omega_{200,100}},\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
a_{21,\pm1} &= \frac{e\varepsilon_0}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^t \mathrm{d}t \langle 21,\pm1|x_3|100\rangle \mathrm{e}^{-\frac{t}{\tau}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{21,\pm1,100}t} \\
&= \frac{e\varepsilon_0}{\mathrm{i}\hbar}\langle 21,\pm1|x_3|100\rangle \int_0^t \mathrm{d}t \mathrm{e}^{-\frac{t}{\tau}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{21,\pm1,100}t} \\
&= \frac{e\varepsilon_0}{\mathrm{i}\hbar}\langle 21,\pm1|x_3|100\rangle \frac{1}{-\frac{1}{\tau}-\mathrm{i}\omega_{21,\pm1,100}}\mathrm{e}^{-\frac{t}{\tau}-\mathrm{i}\omega_{21,\pm1,100}t}\Bigg|_0^t \\
&= \frac{e\varepsilon_0}{\hbar}\langle 21,\pm1|x_3|100\rangle \frac{\mathrm{e}^{-\frac{t}{\tau}-\mathrm{i}\omega_{21,\pm1,100}t}-1}{-\frac{\mathrm{i}}{\tau}+\omega_{21,\pm1,100}},
\end{aligned}
$$

故

$$
\begin{aligned}
&P_{200,100} \\
&= |a_{200,100}|^2 \\
&= \left[\frac{e\varepsilon_0}{\hbar}\langle 200|x_3|100\rangle\right]^2 \mathrm{e}^{-\frac{2t}{\tau}}\left[\frac{\cos(\omega_{200,100}t)-\mathrm{i}\sin(\omega_{200,100}t)-1}{(\omega_{200,100})^2+\left(\frac{1}{\tau}\right)^2}\left(\omega_{200,100}-\frac{\mathrm{i}}{\tau}\right)\right]^* \\
&\quad\cdot\left[\frac{\cos(\omega_{200,100}t)-\mathrm{i}\sin(\omega_{200,100}t)-1}{(\omega_{200,100})^2+\left(\frac{1}{\tau}\right)^2}\left(\omega_{200,100}-\frac{\mathrm{i}}{\tau}\right)\right] \\
&= \left[\frac{e\varepsilon_0}{\hbar}\langle 200|x_3|100\rangle\right]^2 \mathrm{e}^{-\frac{2t}{\tau}} \\
&\quad\cdot\frac{\left[\omega_{200,100}(\cos\omega_{200,100}t-1)-\frac{\sin(\omega_{200,100}t)}{\tau}\right]^2+\left[\omega_{200,100}\sin(\omega_{200,100}t)+\frac{\cos\omega_{200,100}t-1}{\tau}\right]^2}{\left[(\omega_{200,100})^2+\left(\frac{1}{\tau}\right)^2\right]^2},
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&P_{21,\pm1} \\
&= |a_{21,\pm1}|^2 \\
&= \left[\frac{e\varepsilon_0}{\hbar}\langle 21,\pm1|x_3|100\rangle\right]^2 \mathrm{e}^{-\frac{2t}{\tau}}\left[\frac{(\cos\omega_{21,\pm1,100}t-1)-i\sin\omega_{21,\pm1,100}t}{(\omega_{21,\pm1,100})^2+\left(\frac{1}{\tau}\right)^2}\left(\omega_{21,\pm1,100}+\frac{\mathrm{i}}{\tau}\right)\right]^*
\end{aligned}
$$

$$\cdot\left[\frac{(\cos\omega_{21,\pm1,100}t-1)-i\sin\omega_{21,\pm1,100}t\left(\omega_{21,\pm1,100}+\frac{\mathrm{i}}{\tau}\right)}{(\omega_{21,\pm1,100})^2+\left(\frac{1}{\tau}\right)^2}\right]$$

$$=\left[\frac{e\varepsilon_0}{\hbar}\langle 21,\pm1|x_3|100\rangle\right]^2\mathrm{e}^{-\frac{2t}{\tau}}$$

$$\cdot\frac{\left[(\cos\omega_{21,\pm1,100}t-1)\omega_{21,\pm1,100}+\frac{1}{\tau}\sin\omega_{21,\pm1,100}t\right]^2+\left[\frac{1}{\tau}(\cos\omega_{21,\pm1,100}t-1)-\omega_{21,\pm1,100}\sin\omega_{21,\pm1,100}t\right]^2}{\left[(\omega_{21,\pm1,100})^2+\left(\frac{1}{\tau}\right)^2\right]^2}.$$

答　氢原子被激发到 $2s$ 态的概率为

$$\left[\frac{e\varepsilon_0}{\hbar}\langle 200|x_3|100\rangle\right]^2$$

$$\cdot\mathrm{e}^{-\frac{2t}{\tau}}\frac{\left[\omega_{200,100}(\cos\omega_{200,100}t-1)-\frac{\sin(\omega_{200,100}t)}{\tau}\right]^2+\left[\omega_{200,100}\sin(\omega_{200,100}t)+\frac{\cos\omega_{200,100}t-1}{\tau}\right]^2}{\left[(\omega_{200,100})^2+\left(\frac{1}{\tau}\right)^2\right]^2};$$

氢原子被激发到 $2p$ 态的概率

$$\left[\frac{e\varepsilon_0}{\hbar}\langle 21,\pm1|x_3|100\rangle\right]^2$$

$$\cdot\mathrm{e}^{-\frac{2t}{\tau}}\frac{\left[(\cos\omega_{21,\pm1,100}t-1)\omega_{21,\pm1,100}+\frac{1}{\tau}\sin\omega_{21,\pm1,100}t\right]^2+\left[\frac{1}{\tau}(\cos\omega_{21,\pm1,100}t-1)-\omega_{21,\pm1,100}\sin\omega_{21,\pm1,100}t\right]^2}{\left[(\omega_{21,\pm1,100})^2+\left(\frac{1}{\tau}\right)^2\right]^2}.$$

5.12　在 y 方向入射光(电磁场)，偏振方向 $\boldsymbol{A}_0$ 在 x 方向，振动频率为 ω，大于离化频率，求其照射在处于基态的氢原子，产生一颗动量为 $\hbar\boldsymbol{k}$ 的光电子的跃迁概率，游离后的电子可用平面波来表示，且积分

$$\int\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{e}^{-\frac{Zr}{a_0}}\frac{x}{r}\mathrm{d}^3x=\frac{8\pi\mathrm{i}k_1}{\left|\left(\frac{Z}{a_0}\right)^2+k^2\right|}.$$

分析　氢原子的基态波函数 $\psi_{100}=\sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}$.

解　一颗动量为 $\hbar\boldsymbol{k}$ 的光电子的波函数 $\psi_{\hbar\boldsymbol{k}}=\dfrac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}$，

$$a_{\hbar\boldsymbol{k},100}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^t\mathrm{d}t\left\langle\hbar\boldsymbol{k}\left|x_3\right|100\right\rangle\mathrm{e}^{-\frac{t}{\tau}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{\hbar\boldsymbol{k},100}t}$$

$$=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left\langle\hbar\boldsymbol{k}\left|x_3\right|100\right\rangle\int_0^t\mathrm{d}t\mathrm{e}^{-\frac{t}{\tau}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{\hbar\boldsymbol{k},100}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}I\times J,$$

式中 $I=\left\langle\hbar\boldsymbol{k}\left|x_3\right|100\right\rangle=\displaystyle\int_0^\infty\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\frac{x}{r}\mathrm{d}^3x=\frac{2\sqrt{2}\mathrm{i}k_1}{\pi\sqrt{a_0^3\hbar^3}\left|\left(\dfrac{Z}{a_0}\right)^2+k^2\right|}$，

$$J=\int_0^t\mathrm{d}t\mathrm{e}^{-\frac{t}{\tau}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{\hbar\boldsymbol{k},100}t}.$$

答　光电子的跃迁概率为 $\dfrac{2\sqrt{2}\mathrm{i}k_1}{\pi\sqrt{a_0^3\hbar^3}\left|\left(\dfrac{Z}{a_0}\right)^2+k^2\right|}$.

5.13　具有电荷为 q 的离子，在其平衡位置附近做一维简谐振动，在光的照射下发生跃迁，入射光的能量密度为 $\rho(\omega)$，波长较长. (1)求跃迁的选择定则；(2)设离子原来处于基态，求每秒钟跃迁到第一激发态的概率.

分析　根据一阶含时微扰论，在形如 $\hat{H}_1=V(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\omega t}$ 的周期性微扰作用下，粒子的跃迁速率可以写成

$$W_{m\to n}=\frac{2\pi}{\hbar}\left|\left\langle n\left|V\right|m\right\rangle\right|^2\delta(E_n-E_m\pm\hbar\omega).$$

这里 $\left|m\right\rangle$ 和 $\left|n\right\rangle$ 是粒子的初态和末态，E_m 和 E_n 是初态和末态的能量(未微扰哈密顿量的本征值). 矩阵元 $\left\langle n\left|V\right|m\right\rangle$ 代表了扰动在初、末态间引发的跃迁的强弱，跃迁的选择定则就由该矩阵元不为零的条件给出. δ 函数是一个选择因子，表明跃迁只能发生在满足能量守恒的初、末态之间，在本题中，通过考虑入射光的非单色光效应，对圆频率 ω 积分可以消去该 δ 函数. 考虑到在粒子的运动范围内(也就是粒子波函数显著不为零的区域)，粒子的坐标远小于入射光的波长，仅需要计及辐射的电偶极近似，即微扰哈密顿量可以写成 $\hat{H}_1=-\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{\tau}$，其中 $\boldsymbol{\varepsilon}=\boldsymbol{\varepsilon}_0\cos\omega t$ 是入射光的电场强度，$\boldsymbol{\tau}=q\boldsymbol{x}$ 是粒子的电偶极矩.

解　本征频率为 ω_0 的一维谐振子能量本征值和本征函数分别为 $\left(n+\dfrac{1}{2}\right)\hbar\omega_0$

和 $\varphi_n(x)$，考虑到 $\cos\omega t=\dfrac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}}{2}$，两个指数项分别代表辐射和吸收光子，跃迁速率可以写为

$$W_{m\to n}=\frac{2\pi}{\hbar}\left|\left\langle n\left|\left(-\frac{1}{2}q\varepsilon_0\cos\theta\right)x\right|m\right\rangle\right|^2\delta(E_n-E_m\pm\hbar\omega)$$

$$=\frac{\pi}{6\hbar}\varepsilon_0^2q^2\,|\,x_{nm}\,|^2\,\delta(E_n-E_m\pm\hbar\omega). \tag{5.13-1}$$

这里 θ 是电场强度与 x 轴的夹角，$\varepsilon_0\cos\theta$ 是电场强度在 x 轴上的投影，考虑入射光的电场强度方向完全没有规律，在式(5.13-1)的最后一步中已将 $\cos^2\theta$ 用其空间平均值 $\dfrac{1}{3}$ 代替，利用厄米多项式的递推关系，式(5.13-1)中的坐标矩阵可以计算如下：

$$x_{nm}=\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi_n(x)\cdot x\cdot\varphi_m(x)\mathrm{d}x=\sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega_0}}(\sqrt{m}\delta_{n,m-1}+\sqrt{m+1}\delta_{n,m+1}). \tag{5.13-2}$$

跃迁定则为 $n-m=\pm1$.

若粒子原来处于基态，取 $m=0$，$n=1$，把式(5.13-2)代入式(5.13-1)得到

$$W_{0\to1}=\frac{\pi q^2}{12\hbar\mu\omega_0}\varepsilon_0^2\delta(\omega_0-\omega). \tag{5.13-3}$$

下面将 ε_0^2 用入射光的能量密度表示出来，并利用非单色光效应完成对 δ 函数的积分，根据电磁学的公式，电场的能量密度为 $\dfrac{\varepsilon^2}{8\pi}$，在单色平面电磁波的情况下，电场能量与磁场能量相等地，入射光的能量密度为 $I=\dfrac{\varepsilon^2}{4\pi}$，电场能量是时间的振荡函数，在一个周期内的平均值给出 $\overline{\varepsilon^2}=\dfrac{\varepsilon_0^2}{2}$，因此 $\varepsilon_0^2=8\pi I$，考虑到入射光实际上并非单色光，而是分布在一定频率范围内，因此 I 应该用 $\rho(\omega)\mathrm{d}\omega$ 代替，其中 $\rho(\omega)$ 是单位圆频率间隔中的入射光能量密度，于是跃迁速率可以表示为

$$W_{0\to1}=\frac{2\pi^2q^2}{3\hbar\mu\omega_0}\rho(\omega)\delta(\omega_0-\omega). \tag{5.13-4}$$

完成式(5.13-4)中对 ω 的积分，得到

$$W_{0\to1}=\frac{2\pi^2q^2}{3\hbar\mu\omega_0}\rho(\omega_0). \tag{5.13-5}$$

答　跃迁选择定则为 $n-m=\pm1$，基态到第一激发态的跃迁速率为

$$W_{0\to 1}=\frac{2\pi^2q^2}{3\hbar\mu\omega_0}\rho(\omega_0).$$

5.14　一质量为 μ 的带电量为 q 的粒子，束缚在宽度为 a 的一维无限深势阱中运动，在入射光照射下发生跃迁，若光波波长 $\lambda\gg a$，(1) 求跃迁选择定则；(2) 若粒子原来处于基态，求跃迁速率.

分析　根据一阶含时微扰论，在形如 $\hat{H}_1=V(x)\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\omega t}$ 的周期性微扰作用下，粒子的跃迁速率可以写为

$$W_{m\to n}=\frac{2\pi}{\hbar}\left|\langle n|V|m\rangle\right|^2\delta(E_n-E_m\pm\hbar\omega).$$

这里 $|m\rangle$ 和 $|n\rangle$ 是粒子的初态和末态，相应的能量为 E_m 和 E_n，矩阵元 $\langle n|V|m\rangle$ 为扰动在初态和末态间引发的强弱，跃迁的选择定则就由该矩阵元不为零的条件给出. δ 函数是一个选择因子，表明跃迁只能发生在满足能量守恒的初态和末态之间. 由题意通过考虑入射光的非单光效应，对频率 ω 的积分可以消去该 δ 函数，考虑到在粒子的运动范围内，即粒子波函数显著不为零的区域，粒子的坐标远小于入射光的波长，只需要计及辐射的电偶极矩近似，一阶微扰哈密顿量可以写成 $\hat{H}_1=-\varepsilon\tau$，式中 $\varepsilon=\varepsilon_0\cos\omega t$ 为入射光的电场强度，$\tau=qx$ 为粒子的电偶极矩.

解 1　宽度为 a 的一维无维深势阱的粒子能量本征值和本征函数分别为

$$E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2},\quad n=1,2,3,\cdots,\quad \psi_n=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi x}{a}, & 0\leqslant x\leqslant a\\ 0, & x>a,x<0\end{cases},\tag{5.14-1}$$

考虑到 $\cos\omega t=\dfrac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}}{2}$，两个指数项分别代表辐射和吸收光子，跃迁速率可以写成

$$\begin{aligned}W_{m\to n}&=\frac{2\pi}{\hbar}\left|\left\langle n\left|\left(-\frac{q}{2}\varepsilon_0\cos\theta\right)x\right|m\right\rangle\right|^2\delta(E_n-E_m\pm\hbar\omega)\\&=\frac{\pi}{6\hbar}\varepsilon_0^2q^2\,|x_{nm}|^2\,\delta(E_n-E_m\pm\hbar\omega).\end{aligned}\tag{5.14-2}$$

这里 θ 是电场强度与 x 轴的夹角. $\varepsilon_0\cos\omega t$ 是电场强度在 x 轴上的投影，考虑入射光的电场强度方向完全无规则的情况下，式(5.14-2)的最后一步中已将 $\cos^2\theta$ 用其平均值 $\dfrac{1}{3}$ 代替，式(5.14-2)中的坐标矩阵元可以计算如下：

$$x_{nm}=\int_0^a\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}\cdot x\cdot\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{m\pi x}{a}dx=\begin{cases}-\dfrac{8anm}{\pi^2(n^2-m^2)^2}, & n-m=\text{奇数}\\ 0, & n-m=\text{偶数}\end{cases},\quad (5.14\text{-}3)$$

由此可见，跃迁定则为 $n-m=$奇数，这一点其实也可以从对称性来判断，若将坐标原点取在势阱的中点处，那么能量本征波函数具有确定的宇称，坐标为奇宇称，因此仅在宇称相异的态间才有非零矩阵元，从而跃迁选择定则必为 $n-m=$奇数.

若粒子原来处于基态，取 $m=1$，$n=2k$，则式(5.14-3)代入式(5.14-2)得到

$$W_{1\to 2k}=\frac{128a^2k^2q^2}{3\hbar^2\pi^3(4k^2-1)^4}\varepsilon_0^2\delta(\omega_{2k,1}-\omega),\quad \omega_{2k,1}=\frac{(4k^2-1)^2\pi^2\hbar}{2\mu a^2},\quad (5.14\text{-}4)$$

下面将 ε_0^2 用入射光的能量密度表示出来，并利用非单色光效应完成对 δ 函数的积分，根据电磁学的公式，电场的能量密度为 $\dfrac{\varepsilon^2}{8\pi}$，在单色平面电磁波的情况下，电场能量与磁场能量相等，入射光的能量密度为 $I=\dfrac{\varepsilon^2}{4\pi}$，电场强度是时间的振荡函数，在一个周期内的平均值给出 $\overline{\varepsilon^2}=\dfrac{\varepsilon_0^2}{2}$，因此 $\varepsilon_0^2=8\pi I$，考虑到入射光实际上并非单色光，而是分布在一定的频率范围内，因此，I 应该用 $\rho(\omega)\mathrm{d}\omega$ 代替，其中 $\rho(\omega)$ 是单位圆频率间隔中的入射光能量密度，于是跃迁速率可以表示为

$$w_{1\to 2k}=\frac{1024a^2k^2q^2}{3\hbar^2\pi^2(4k^2-1)^4}\rho(\omega)\delta(\omega_{2k,1}-\omega)\mathrm{d}\omega,\quad (5.14\text{-}5)$$

由式(5.14-5)对 ω 进行积分，得

$$W_{1\to 2k}=\frac{1024a^2k^2q^2}{3\hbar^2\pi^2(4k^2-1)^4}\rho(\omega_{2k,1}).\quad (5.14\text{-}6)$$

解 2　一维无限深势阱中的定态

$$E_n=\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2,\quad \psi_n=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi}{a}x, & 0\leqslant x\leqslant a\\ 0, & x<0,x>a\end{cases}.$$

在入射光照射下，粒子发生跃迁，已知 $\lambda\gg a$，

(1) 求跃迁选择定则.

由一维无限深势阱定态波函数 $\psi_n=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi}{a}x, & 0\leqslant x\leqslant a\\ 0, & x<0,x>a\end{cases}$，矩阵元

$$x_{m,n}=\frac{2}{a}\int_0^a \sin\frac{m\pi}{a}x\cdot x\cdot\sin\frac{n\pi}{a}x\mathrm{d}x=\frac{1}{a}\int_0^a x\left[\cos\frac{m-n}{a}\pi x-\cos\frac{m+n}{a}\pi x\right]\mathrm{d}x$$

$$=\frac{1}{a}\int_0^a x\left(\cos\frac{m-n}{a}\pi x\right)\mathrm{d}x-\frac{1}{a}\int_0^a x\left(\cos\frac{m+n}{a}\pi x\right)\mathrm{d}x$$

$$=\frac{1}{a}\frac{1}{\frac{m-n}{a}\pi}\int_0^a x\mathrm{d}\sin\frac{m-n}{a}\pi x-\frac{1}{a}\frac{1}{\frac{m+n}{a}\pi}\int_0^a x\mathrm{d}\sin\frac{m+n}{a}\pi x$$

$$=\frac{1}{a}\frac{1}{\frac{m-n}{a}\pi}\left[x\sin\frac{m-n}{a}\pi x\Big|_0^a-\int_0^a\sin\frac{m-n}{a}\pi x\mathrm{d}x\right]$$

$$-\frac{1}{a}\frac{1}{\frac{m+n}{a}\pi}\left[x\sin\frac{m+n}{a}\pi x\Big|_0^a-\int_0^a\sin\frac{m+n}{a}\pi x\mathrm{d}x\right]$$

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

$$=\frac{a[(-1)^{m+n}-1]}{\pi^2}\left[\frac{1}{(m-n)^2}-\frac{1}{(m+n)^2}\right]$$

$$=\frac{a[(-1)^{m+n}-1]}{\pi^2}\frac{4mn}{(m^2-n^2)^2}.$$

可见 $x_{m,n}\neq 0$ 的条件是，$m+n$ 是奇数，即 m 和 n 中一个是奇数，一个是偶数，且计算中用到了 $m+n-2n=m-n$.

(2) 利用公式(5.13-2)得

$$W_{mn}=\frac{4\pi^2q^2}{3\hbar^2}|x_{mn}|^2\rho(\omega_{mn})=\frac{4\pi^2q^2}{3\hbar^2}\frac{a^2[(-1)^{m+n}-1]^2}{\pi^4}\frac{16m_1^2n^2}{(m^2-n^2)^4}\rho(\omega_{mn}).$$

当从基态跃迁至 $2k$ 态时，有

$$W_{2k,1}=\frac{16q^2}{3\hbar^2}\frac{a^2}{\pi^2}\frac{16\times 4k^2}{(4k^2-1)^4}\rho(\omega_{2k,1})=\frac{1024(kaq)^2}{3\pi^2\hbar^2(4k^2-1)^4}\rho(\omega_{2k,1}).$$

由一维无限深势阱粒子的定态能量 $E_n^{(0)}=\dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}$，则

$$w_{2k,1}=\frac{E_{2k}^{(0)}-E_1^{(0)}}{h}=\frac{\pi^2\hbar}{2\mu a^2}(4k^2-1).$$

答　(1) 跃迁的选择定则为从 n 态跃迁到 n_1 态，在 n_1 和 n 中，一个是奇数，一

个是偶数；(2) 从基态跃迁至 $2n$ 态时，跃迁速率为 $\dfrac{1024(naq)^2}{3\pi^2\hbar^2(4k^2-1)^4}\rho(\omega_{2k,1})$，式中 $\omega_{2k,1}=\dfrac{\pi^2\hbar}{2\mu a^2}(4k^2-1)$.

5.15　估计氢原子第一激发能级的自然宽度.

分析　能级的自然宽度可以根据不确定关系 $\Delta E\cdot\tau\sim\hbar$ 进行估算，其中 τ 为能级的寿命，可以根据自发辐射的跃迁速率来计算.

解　在电偶极矩近似下，自发辐射的跃迁速率可以写成

$$W_{m\to n}=\frac{4\omega^3}{3\hbar c^3}|\langle n|\tau|m\rangle|^2,\quad \tau=-ex,\quad \omega=\frac{E_m-E_n}{\hbar}. \tag{5.15-1}$$

由题意，初态 $|m\rangle$ 为氢原子第一激发态，末态 $|n\rangle$ 为氢原子基态，具体的波函数形式为

$$\psi_{100}=\frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a}},\quad \psi_{200}=\frac{1}{\sqrt{8\pi a^3}}\left(1-\frac{r}{2a}\right)\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a}},\quad \psi_{210}=\frac{1}{\sqrt{8\pi a^3}}\left(\frac{r}{2a}\right)\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a}}\cos\theta,$$

$$\psi_{21,\pm1}=\frac{1}{\sqrt{16\pi a^3}}\left(\frac{r}{2a}\right)\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a}}\sin\theta\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\varphi}, \tag{5.15-2}$$

式中，$a=\dfrac{\hbar^2}{\mu c^2}$ 是氢原子的玻尔半径，考察波函数在变换 $x\to-x$，$y\to-y$，$z\to-z$ 下的对称性，容易看出非零的跃迁矩阵元仅包括 $\langle100|z|210\rangle$，$\langle100|x|211\rangle$，$\langle100|y|211\rangle$，$\langle100|x|21,-1\rangle$ 和 $\langle100|y|21,-1\rangle$，代入式(5.15-2)得到波函数的具体形式

$$\begin{cases}\langle100|z|210\rangle=\dfrac{2^7\sqrt{2}}{3^5}a,\\ \langle100|x|21,\pm1\rangle=\dfrac{2^7}{3^5}a,\\ \langle100|y|21,\pm1\rangle=(\pm\mathrm{i})\dfrac{2^7}{3^5}a.\end{cases} \tag{5.15-3}$$

把式(5.15-3)中计算得到的矩阵元代入式(5.15-1)得到各态间自发辐射的跃迁速率

$$\begin{cases} W_{200\to100}=0, \\ W_{210\to100}=\dfrac{4e^2\omega^3}{3\hbar c^3}\left|\langle 100\,|\,z\,|\,210\rangle\right|^2=\dfrac{4e^2\omega^3}{3\hbar c^3}\cdot\dfrac{2^{15}}{3^{10}}a^2, \\ W_{21,\pm1\to100}=\dfrac{4e^2\omega^3}{3\hbar c^3}\left(\left|\langle 100\,|\,z\,|\,21,\pm1\rangle\right|^2+\left|\langle 100\,|\,y\,|\,21,\pm1\rangle\right|^2\right)=\dfrac{4e^2\omega^3}{3\hbar c^3}\cdot\dfrac{2^{15}}{3^{10}}a^2. \end{cases} \tag{5.15-4}$$

代入 $\omega=\dfrac{E_1-E_0}{\hbar}=\dfrac{3e^2}{8a\hbar}$，并对初态求平均，可得平均的自发跃迁系数为

$$A=\frac{1}{4}(W_{200\to100}+W_{210\to100}+W_{21,-1\to100})=\frac{\mu e^{10}}{\hbar^6c^3}\cdot\frac{2^6}{3^7}. \tag{5.15-5}$$

能级寿命 $\tau=\dfrac{1}{A}$，能级的自然宽度

$$\Delta E=\frac{\hbar}{\tau}=\hbar A=\frac{\mu e^{10}}{\hbar^5c^3}\cdot\frac{2^6}{3^7}. \tag{5.15-6}$$

利用精细结构常数 $\alpha=\dfrac{e^2}{\hbar c}=\dfrac{1}{137}$ 和电子静能量 $\mu c^2=0.511\text{MeV}$，容易计算式(5.15-6)的近似数值

$$\Delta E=\frac{2^6}{3^7}(\mu c^2)\alpha^5\approx3.1\times10^{-7}\text{eV}. \tag{5.15-7}$$

答　能级的自然宽度为 $3.1\times10^{-7}\text{eV}$.

5.16　已知 He-Ne 激光器输出波长为 632.8nm，激光器内能量密度 $\rho(\omega)$ 为 $10^{-2}\text{erg}\cdot\text{cm}^{-3}$，求其受激辐射与自发辐射之比.

分析　受激辐射与自发辐射的比例可以通过热力学平衡条件获得，也就是通常所说的爱因斯坦 A、B 系数的唯象方法获得. 值得注意的是，在爱因斯坦 A、B 系数的唯象方法中，虽然用到了热力学平衡条件，但得到的受激辐射与自发辐射的比例公式对于非平衡体系来说，也是成立的. 这是因为受激辐射和自发辐射分别是电子与外加电磁场和真空相互作用的结果，都可以通过微观理论计算出来，与体系是否处于平衡态无关. 爱因斯坦 A、B 系数方法不过是利用了平衡态的条件从而可以唯象地得到受激辐射与自发辐射的比例，但这一比例在非平衡态中仍然成立，这里采用的激光器是一个非平衡体系，我们仍然可以利用势力学平衡条件来求受激辐射与自发辐射的比例.

解　假定跃迁发生在低能级 E_1 和高能级 E_2 之间，两个能级上的粒子数在热力学平衡时分别为 N_1 和 N_2，根据细致平衡原理，受激辐射和吸收的概率相同，

记为 $B\rho(\nu)$，其中 $\rho(\nu)$ 是辐射场单位频率间隔里的能量密度. 自发辐射的概率记为 A，根据热力学平衡条件

$$N_2(A+B\rho)=N_1\cdot B\rho\,, \tag{5.16-1}$$

在热力学平衡条件下，$N_{1,2}\propto \mathrm{e}^{-\frac{E_{1,2}}{k_BT}}$，由此解得

$$\frac{B\rho(\nu)}{A}=\frac{1}{\frac{N_1}{N_2}-1}=\frac{1}{\mathrm{e}^{\frac{h\nu}{k_BT}}-1}\,,\quad h\nu=E_2-E_1\,. \tag{5.16-2}$$

根据黑体辐射的普朗克公式，热力学平衡时辐射场单位频率间隔里的能量密度

$$\rho(\nu)=\frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\frac{1}{\mathrm{e}^{\frac{h\nu}{k_BT}}-1}\,, \tag{5.16-3}$$

因此，受激辐射与自发辐射之比为

$$\frac{B\rho(\nu)}{A}=\frac{c^3\rho(\nu)}{8\pi h\nu^3}\,. \tag{5.16-4}$$

由题给的数值 $\lambda=632.8\mathrm{nm}$，$\nu=\dfrac{c}{\lambda}$，$\rho(\nu)=10^{-2}\mathrm{erg\cdot s\cdot cm^{-3}}$，得

$$\frac{B\rho(\nu)}{A}\approx 1.52\times10^{10}\,. \tag{5.16-5}$$

答　受激辐射与自发辐射之比为 1.52×10^{10}.

5.17　已知某能级寿命 $10^{-8}\mathrm{s}$，约有 10^{11} 颗原子处于该能量状态，问经多长时间发光原子占据总数 $\dfrac{1}{2}$？

分析　能级寿命 $\tau=\dfrac{1}{A}$，A 是跃迁系数，代表单位时间内跃迁的概率.

解　假定体系中有 N 个原子，则经过 $\mathrm{d}t$ 的时间，将有 $NA\mathrm{d}t$ 个原子跃迁，因此

$$\mathrm{d}N=-NA\mathrm{d}t\,,\quad \frac{\mathrm{d}N}{N}=-\frac{\mathrm{d}t}{\tau}\,. \tag{5.17-1}$$

设 N_0 是初始时刻的粒子数，可得

$$N=N_0\mathrm{e}^{-\frac{t}{\tau}}\,, \tag{5.17-2}$$

代入题给的数值，$N=\dfrac{N_0}{2}$，$\tau=10^{-8}\mathrm{s}$，解得 $t=6.93\times10^{-9}\mathrm{s}$.

答　经过 6.93×10^{-9}s 发光原子数占原子总数的一半.

5.18　已知某能级自然宽度为 $\Delta f=3\times10^{7}$Hz，求该能级的寿命多长?

分析　能级的自然宽度与能级的寿命之间由不确定关系 $\Delta E\cdot\tau\sim h$ 相联系.

解　$\tau=\dfrac{\hbar}{\Delta E}=\dfrac{h}{h\Delta f}=\dfrac{1}{2\pi\Delta f}\approx5.3\times10^{-9}\text{s}$.

答　该能级的寿命为 5.3×10^{-9}s.

5.19　带电量 g，本征振动频率为 ω_0 的作一维谐振的粒子原来处于基态，受沿振动方向的均匀的弱电场作用，微扰作用为(1) $H_1=-g\varepsilon_0 x\mathrm{e}^{-\frac{|t|}{\tau}}$；(2) $H_1=-g\varepsilon_0 x\mathrm{e}^{-\left(\frac{|t|}{\tau}\right)^2}$，问长时间以后振子跃迁到第一激发态的概率分别是多少?

分析　根据一阶含时微扰论，若粒子初始时刻($t=t_0$)处于 k 态，那么在微扰 $\hat{H}_1$ 的作用下，t 时刻处于 j 态的概率幅为

$$c_j(t)=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{t_0}^{t}\left\langle j\left|\hat{H}_1(t_0)\right|k\right\rangle \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}i}{\hbar}(E_j-E_k)t_1}\mathrm{d}t_1\,,\tag{5.19-1}$$

题中 k 态和 j 态分别为一维谐振子的基态和第一激发态，初始时刻 $t_0=-\infty$ (扰动尚未开始，$\hat{H}_1=0$)，末时刻 $t=\infty$ (扰动结束，$\hat{H}_1=0$)，微扰哈密顿量 $\hat{H}_1=-q\varepsilon_0 xf(t)$，其中时间依赖关系 $f(t)=\mathrm{e}^{-\frac{|t|}{\tau}}$ 或者 $f(t)=\mathrm{e}^{-\left(\frac{|t|}{\tau}\right)^2}$.

解　基于上述分析，不难得到

$$c_1=-\frac{1}{i\hbar}q\varepsilon_0\langle1|x|0\rangle\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t_1}f(t_1)\mathrm{d}t_1\,,\tag{5.19-2}$$

为求出坐标在基态与第一激发态间的矩阵元，我们利用一维谐振子问题中的升降算符(当然也可以依靠波函数的递推关系)

$$x=\sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega_0}}(\hat{a}+\hat{a}^{+})\,,\quad \hat{a}|0\rangle=0\,,\quad \hat{a}^{+}|0\rangle=|1\rangle\,.\tag{5.19-3}$$

由式(5.19-3)容易得到

$$\langle1|x|0\rangle=\sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega_0}}\,.\tag{5.19-4}$$

对时间的积分，根据两种不同的时间依赖关系，可以分别算得

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega_0 t_1} e^{-\frac{|t|}{\tau}} dt_1 = \frac{2\tau}{1+\omega_0^2\tau^2}, \tag{5.19-5}$$

$$\langle 1|x|0\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega_0}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega_0 t_1} e^{-\left(\frac{t_1}{\tau}\right)^2} dt_1 = \sqrt{\pi}\tau e^{-\frac{\omega_0^2\tau^2}{4}}. \tag{5.19-6}$$

处于第一激发态的概率为 $P_1 = |c_1|^2$，将式(5.19-4)、(5.19-5)和(5.19-6)代入式(5.19-2)，对应于两种时间依赖关系，可分别得到

$$P_1 = \frac{q^2\varepsilon_0^2}{2\mu\omega_0\hbar} \cdot \frac{4\tau^2}{(1+\omega_0^2\tau^2)^2}, \tag{5.19-7}$$

和

$$P_1 = \frac{q^2\varepsilon_0^2}{2\mu\omega_0\hbar} \cdot \pi\tau^2 e^{-\frac{\omega_0^2\tau^2}{2}}. \tag{5.19-8}$$

答　经过长时间扰动后，对应于两种时间依赖关系，振子处于第一激发态的概率分别为

$$\frac{q^2\varepsilon_0^2}{2\mu\omega_0\hbar} \cdot \frac{4\tau^2}{(1+\omega_0^2\tau^2)^2} \text{ 和 } \frac{q^2\varepsilon_0^2}{2\mu\omega_0\hbar} \cdot \pi\tau^2 e^{-\frac{\omega_0^2\tau^2}{2}}.$$

5.20　一粒子受一维 δ 势阱 $V(x) = -g\delta(x)$ 束缚而处于基态，从 $t \geqslant 0$ 受微扰 $H_1 = -Ax\sin\omega t$ 作用，A 为正值小量，求粒子受微扰作用后，跃迁到自由定态 $\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{px}{\hbar}}$ 的单位时间跃迁概率.

分析　本题与题 5.14 类似，根据一阶含时微扰论，在形如 $\hat{H}_1 = V(x)e^{\pm i\omega t}$ 的周期性微扰作用下，粒子的跃迁速率可以写为 $W_{i\to f} = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle f|V|i\rangle|^2 \delta(E_f - E_i \pm \hbar\omega)$，在本题中，初态 $|i\rangle$ 是 δ 势阱的基态，末态是动量为 p 的平面波态. 因为末态处于连续谱中，δ 函数因子可以通过对末态的求和消除.

解　先求解 δ 势阱的能量本征态，定态薛定谔方程写为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2}\psi - g\delta(x)\psi = E\psi. \tag{5.20-1}$$

对于束缚态 $E<0$，可令 $\alpha = \frac{\sqrt{-2\mu E}}{\hbar}$，暂不考虑奇点，在 $x<0$ 和在 $x>0$ 的两个区间内定态薛定谔方程都可以写作

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi-\alpha^2\psi=0\,, \tag{5.20-2}$$

利用束缚态边界条件$\psi(\pm\infty)=0$，求解方程(5.20-2)可得在$x<0$和在$x>0$的两个区间内的波函数

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi-\alpha^2\psi(x)=\begin{cases}A\mathrm{e}^{\alpha x}, & x<0\\ B\mathrm{e}^{-\alpha x}, & x>0\end{cases}. \tag{5.20-3}$$

在$x=0$处波函数连续，于是$A=B$，由于δ函数势的关系，波函数的一阶导数不连续. 在$x=0$的邻域上，对式(5.20-1)两边同时积分得到

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi\right)\mathrm{d}x-g\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\delta(x)\psi(x)\mathrm{d}x=E\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon}\psi(x)\mathrm{d}x\,, \tag{5.20-4}$$

式中，$\varepsilon\to0^+$，式(5.20-4)中的等号左边第一项中的积分就是波函数的一阶导数在$x=0$处的跃变，第二项的积分根据$\delta(x)$的定义就是$\psi(0)$，等号右边的积分是一个有限大小的函数在无穷小区间上的积分，因而为零，因此式(5.20-4)为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi(0^+)-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi(0^-)=-\frac{2\mu g}{\hbar^2}\psi(0)\,. \tag{5.20-5}$$

将式(5.20-3)中$A=B$，代入式(5.20-5)，得

$$\alpha=\frac{\mu g}{\hbar^2}\,, \tag{5.20-6}$$

最后，经归一化，得到一维δ势阱的基态(也是唯一的束缚态)

$$\psi(x)=\sqrt{\alpha}\mathrm{e}^{-\alpha|x|}\,,\quad \alpha=\frac{\mu g}{\hbar^2}\,,\quad E_\mathrm{g}=-\frac{\hbar^2\alpha^2}{2\mu}=-\frac{\mu g^2}{2\hbar^2}\,. \tag{5.20-7}$$

在本题的跃迁问题中，式(5.20-7)即为初态ψ_i，末态为$\psi_\mathrm{f}=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}px}{\hbar}}$，微扰哈密顿为

$$\hat{H}_1=-\frac{1}{2\mathrm{i}}Ax(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t})\,,$$

因此跃迁速率可以写为

$$\begin{aligned}W_{\mathrm{i}\to\mathrm{f}}&=\frac{2}{\hbar}\left|\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{px}{\hbar}}\right)\left(\frac{Ax}{2\mathrm{i}}\right)(\sqrt{\alpha}\mathrm{e}^{-\alpha|x|})\right|^2\delta\left(\frac{p^2}{2\mu}-E_\mathrm{g}-\hbar\omega\right)\\&=\frac{4A^2\hbar^4\alpha^3p^2}{(p^2+\hbar^2\alpha^2)^4}\delta\left(\frac{p^2}{2\mu}-E_\mathrm{g}-\hbar\omega\right),\end{aligned} \tag{5.20-8}$$

由于末态落在连续谱中，所以需要对末态求和，也就是将式(5.20-8)乘以$\mathrm{d}N$后积分，$\mathrm{d}N$是能量在E到$E+\mathrm{d}E$之间的状态数. 在这里$\mathrm{d}N=2\mathrm{d}p$，因子 2 来自于

$\pm p$ 态具有相同的能量，可以说明的是，在这里平面波态是采用的归一化到 δ 函数的形式，若采用箱归一化，则

$$W_{i\to f}=\int_0^\infty \frac{8A^2\hbar^4\alpha^3p^2}{(p^2+\hbar^2\alpha^2)^4}\delta\left(\frac{p^2}{2\mu}-E_g-\hbar\omega\right)dp=\frac{2\hbar A^2|E_g|^{\frac{3}{2}}\sqrt{\hbar\omega-|E_g|}}{\mu(\hbar\omega)^4}. \tag{5.20-9}$$

答　跃迁速率为 $\dfrac{2\hbar A^2|E_g|^{\frac{3}{2}}\sqrt{\hbar\omega-|E_g|}}{\mu(\hbar\omega)^4}$，其中 $E_g=-\dfrac{\mu g^2}{2\hbar^2}$.

5.21　利用能量-时间测不准关系，估计：(1) 正负电子对能发生湮灭的最近距离；(2) 核力力程，核子通过吞吐 π 介子而传递核力，π 介子质量为电子质量的 207 倍；(3) 已知一种不稳定粒子自发蜕变的平均寿命为 τ，求这种粒子质量的不确定范围.

分析　在能量-时间不确定关系 $\Delta E\Delta t\sim\hbar$ 中，ΔE 可以理解为某个物理过程中能量的改变量，Δt 则是该过程的特征时间，另一种常见的理解是 Δt 代表某能级的寿命，而 ΔE 则是该能级的展宽.

解　在正负电子对湮没过程中，电子的能量改变为 $\Delta E\sim\mu c^2$，根据能量-时间不确定关系，这一物理过程的特征时间 $\Delta t=\dfrac{\hbar}{\mu c^2}$，在这段时间里电子能运动的最大距离是 $c\Delta t=\dfrac{\hbar}{\mu c}\approx3.9\times10^{-11}\text{cm}$.

在 π 介子的产生湮灭过程中，能量变化量 $\Delta E\sim\mu_\pi c^2$，根据能量-时间不确定关系，这一物理过程的特征时间 $\Delta t=\dfrac{\hbar}{\mu_\pi c^2}$，在这段时间里 π 介子能运动的最大距离是 $c\Delta t=\dfrac{\hbar}{\mu_\pi c}\approx1.4\times10^{-13}\text{cm}$，大约就是核力的力程.

粒子的平均寿命为 τ，则根据能量-时间不确定关系，其能级展宽(能量的不确定度) $\Delta E=\dfrac{\hbar}{\tau}$，又因为 $E=\mu c^2$，可得到粒子质量的不确定度 $\Delta\mu=\dfrac{\hbar}{\tau c^2}$.

答　正负电子对能发生湮没的最大距离约为 $3.9\times10^{-11}\text{cm}$，核力的力程大约为 $1.4\times10^{-13}\text{cm}$，本题中粒子质量的不确定度为 $\dfrac{\hbar}{\tau c^2}$.

5.22　氢原子处于基态，受脉冲电场 $\varepsilon(t)=\varepsilon_0\delta(t)$ 的作用，用微扰论计算氢原子跃迁到各激发态的总概率，以及仍然停留在基态的概率.

分析　根据一阶含时微扰论，若粒子初始时刻($t=t_0$)处于k态，那么在微扰$\hat{H}_1$的作用下，t时刻处于j态的概率幅为

$$c_j(t)=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{t_0}^{t}\left\langle j\left|\hat{H}_1(t_1)\right|k\right\rangle \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E_j-E_k)t_1}\mathrm{d}t_1 . \tag{5.22-1}$$

在本题中k态为氢原子基态$|100\rangle$，j态为氢原子激发态$|nlm\rangle$. 假定电场沿z方向，那么电子处于电场中就获得了电势能，其值为电场力作功的负值. 取原子核处为势能零点，可得微扰哈密顿量$\hat{H}_1=-(-e\varepsilon)z=e\varepsilon_0 r\cos\theta\delta(t)$.

解　根据上面的分析，把微扰哈密顿量代入式(5.22-1)得到

$$c_{nlm}=\frac{e\varepsilon_0}{\mathrm{i}\hbar}\langle nlm|r\cos\theta|100\rangle , \tag{5.22-2}$$

即为处于nlm态时的概率幅，概率即是式(5.22-2)的平方，对100以外的所有nlm求和，就得到了跃迁到各激发态的总概率

$$P=\sum_{nlm}{}'|nlm|^2=\sum_{nlm}{}'\frac{e^2\varepsilon_0^2}{\hbar^2}\left|\langle nlm|r\cos\theta|100\rangle\right|^2 , \tag{5.22-3}$$

这里求和号上的一撇表示求和中不包括$\left|\langle 100|r\cos\theta|100\rangle\right|^2$，然而，由于氢原子基态波函数仅为径向坐标的函数，与角度无关，因此容易验证$\left|\langle 100|r\cos\theta|100\rangle\right|^2=0$，在式(5.22-3)中取消撇号的限制，并不会改变实际结果. 于是，我们得到

$$\begin{aligned}P&=\sum_{nlm}\frac{e^2\varepsilon_0^2}{\hbar^2}\left|\langle nlm|r\cos\theta|100\rangle\right|^2=\frac{e^2\varepsilon_0^2}{\hbar^2}\sum_{nlm}\langle 100|r\cos\theta|nlm\rangle\langle nlm|r\cos\theta|100\rangle\\&=\frac{e^2\varepsilon_0^2}{\hbar^2}\langle 100|r^2\cos^2\theta|100\rangle .\end{aligned} \tag{5.22-4}$$

在式(5.22-4)运算的最后一步中，用到了完备性条件$\sum_{nlm}|nlm\rangle\langle nlm|=1$，代入氢原子基态波函数的具体形式中，可得

$$\begin{aligned}\langle 100|r^2\cos^2\theta|100\rangle&=\int_0^\infty r^2\mathrm{d}r\int_0^\pi\sin\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\left(\frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a}}\right)(r^2\cos^2\theta)\left(\frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a}}\right),\\&=a^2,\end{aligned} \tag{5.22-5}$$

式中，$a=\dfrac{\hbar^2}{\mu e^2}$是氢原子的玻尔半径，将式(5.22-5)代入式(5.22-4)中得到处于各激发态的总概率为$P=\dfrac{e^2\varepsilon_0^2a^2}{\hbar^2}$，仍留在基态的概率为$1-P=1-\dfrac{e^2\varepsilon_0^2a^2}{\hbar^2}$.

答　处于各激发态的总概率为$\dfrac{e^2\varepsilon_0^2a^2}{\hbar^2}$，仍留在基态的概率为$1-\dfrac{e^2\varepsilon_0^2a^2}{\hbar^2}$.

第六章　定态问题的近似方法

6.1　如果核势能为 $u(r)=-A\mathrm{e}^{-\frac{r}{a}}$，$A=32\mathrm{MeV}$，$a=2.2\times10^{-13}\mathrm{cm}$，试用变分法近似地确定核的能量(取一依赖于参数 α 的函数 $R=C\mathrm{e}^{-\frac{\alpha r}{2a}}$，而 C 由归一化条件确定).

分析　题目已给出试探波函数，因此先完成归一化，然后计算哈密顿算符在试探波函数下的平均值，最后求变分极值即可.

解　由归一化条件，可得

$$C=\sqrt{\frac{\alpha^3}{8\pi a^3}},\quad R=\sqrt{\frac{\alpha^3}{8\pi a^3}}c^{-\frac{\alpha r}{2a}},\tag{6.1-1}$$

哈密顿算符在试探波函数下的平均值为

$$I(\alpha)=\int_0^\infty r^2\mathrm{d}r\int_0^\pi\sin\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi R^*\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+u(r)\right]R,\tag{6.1-2}$$

其中球坐标系下的拉普拉斯算符

$$\nabla^2=\frac{1}{r^2}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)\right]+\frac{1}{r^2\sin\theta}\left[\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right]+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2},\tag{6.1-3}$$

完成积分，可得

$$I(\alpha)=\frac{\hbar^2}{8\mu a^2}\alpha^2-A\frac{\alpha^3}{(1+\alpha)^3},\tag{6.1-4}$$

最佳的参数 α_0 由极值条件决定

$$\frac{\partial}{\partial\alpha}I(\alpha)=0,\quad\frac{\alpha_0}{(1+\alpha_0)^4}=\frac{\hbar^2}{12\mu a^2A}.\tag{6.1-5}$$

因为是研究核的基态，上式中的 μ 应取质子和中子的折合质量，代入题所给的数据，可得

$$\frac{\alpha_0}{(1+\alpha_0)^4}\approx0.045,\tag{6.1-6}$$

式(6.1-6)是关于 α_0 的一元四次方程，虽有解析的求根公式但写出来很繁琐，可以用数值方法得到解的近似值 $\alpha_0\approx1.34$，将 α_0 代入式(6.1-4)可得核基态能量的近似

值为 $I(\alpha_0)=-2.16\text{MeV}$.

答　核基态能量的近似值为 –2.16MeV .

6.2　粒子在吸引的有心力场 $V(r)=Ar^n$ 中运动(整数 $n\geqslant -1$), 应用变分法, 求解基态($l=0$), 应用试探函数 $R(r)=C\mathrm{e}^{-\beta r}$, 把 β 作为变分参数, 对于 $n=1$ 和 $n=2$, 将计算结果与准确的基态能量作比较.

分析　与题 6.1 类似, 先完成归一化, 然后计算哈密顿算符在试探波函数下的平均值, 最后求变分极值.

解　由归一化条件, 可得

$$C=\sqrt{\frac{\beta^3}{\pi}}\ ,\quad R=\sqrt{\frac{\beta^3}{\pi}}\mathrm{e}^{-\beta r}\ . \tag{6.2-1}$$

哈密顿算符在试探波函数下的平均值为

$$I(\beta)=\int_0^{\infty}r^2\mathrm{d}r\int_0^{\pi}\sin\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi R^*\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(r)\right]R\ , \tag{6.2-2}$$

其中球坐标系下的拉普拉斯算符

$$\nabla^2=\frac{1}{r^2}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)\right]+\frac{1}{r^2\sin\theta}\left[\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right]+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\ , \tag{6.2-3}$$

完成积分, 可得

$$I(\beta)=\frac{\hbar^2\beta^2}{2\mu}+A\frac{(n+2)!}{2^{n+1}\beta^n}\ . \tag{6.2-4}$$

最佳的参数 β_0 由极值条件决定

$$\frac{\partial}{\partial\beta}I(\beta)=0\ ,\quad \beta_0=\left[\frac{n(n+2)!\mu A}{2^{n+1}\hbar^2}\right]^{\frac{1}{n+2}}\ , \tag{6.2-5}$$

将 β_0 代入式(6.2-4)得到 $I(\beta_0)$ 即为基态能量的近似值, 下面讨论两个特例:

(a)　$n=-1$ 时,

$$\beta_0=-\frac{\mu A}{\hbar^2}\ ,\quad E=I(\beta_0)=-\frac{\mu A^2}{2\hbar^2}\ , \tag{6.2-6}$$

此种情形相当于 $e=\sqrt{-A}$ 的氢原子, 与氢原子的结果比较, 可得严格解为 $E_0=-\dfrac{\mu A^2}{2\hbar^2}$ 与变分计算结果相一致, 由于氢原子的严格基态波函数就具有试探波函数的形式, 所以变分计算结果与严格解一致是自然的结果.

(b) $n=2$ 时，

$$\beta_0=\sqrt[4]{\frac{6\mu A}{\hbar^2}}\ ,\quad E=I(\beta_0)=\hbar\sqrt{\frac{6A}{\mu}}\ , \tag{6.2-7}$$

此种情形相当于 $\omega=\sqrt{\dfrac{2A}{\mu}}$ 的三维各向同性谐振子，与谐振子的结果比较，可得严格解为 $E_0=\hbar\sqrt{\dfrac{4.5A}{\mu}}$，小于变分计算结果.

答　当 $n=-1$ 时，变分得到的基态能量与严格解一致，均为 $-\dfrac{\mu A^2}{2\hbar^2}$；当 $n=2$ 时，变分得到的基态能为 $\hbar\sqrt{\dfrac{6A}{\mu}}$，大于严格解 $\hbar\sqrt{\dfrac{4.5A}{\mu}}$.

6.3　用变分法求一维谐振子的基态波函数和能量(试探波函数取 $Ce^{-\lambda x^2}$，λ 为待定常数).

分析　先完成归一化，然后计算哈密顿算符在试探波函数下的平均值，最后求变分极值.

解　由归一化条件，可得

$$C=\sqrt[4]{\frac{2\lambda}{\pi}}\ ,\quad \psi=\sqrt[4]{\frac{2\lambda}{\pi}}e^{-\lambda x^2}\ . \tag{6.3-1}$$

哈密顿算符在试探波函数下的平均值为

$$I(\lambda)=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2\right)\psi\ \frac{\lambda\hbar^2}{2\mu}+\frac{\mu\omega^2}{8\lambda}\ , \tag{6.3-2}$$

完成积分，可得

$$I(\lambda)=\frac{\lambda\hbar^2}{2\mu}+\frac{\mu\omega^2}{8\lambda}\ , \tag{6.3-3}$$

最佳的参数 λ_0 由极值条件决定

$$\frac{\partial}{\partial\lambda}I(\lambda)=0\ ,\quad \lambda_0=\frac{\mu\omega}{2\hbar}\ . \tag{6.3-4}$$

$\psi(\lambda_0)$ 和 $I(\lambda_0)$ 即为基态波函数和能量，具体写成

$$\psi=\sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}e^{-\frac{\mu\omega x^2}{2\hbar}}\ ,\quad E=\frac{1}{2}\hbar\omega\ . \tag{6.3-5}$$

答　基态波函数和能量分别为 $\sqrt[4]{\dfrac{\mu\omega}{\pi\hbar}}e^{-\frac{\mu\omega x^2}{2\hbar}}$ 和 $\dfrac{1}{2}\hbar\omega$.

6.4　设粒子所处的势能函数 $V(x,y,z)$ 是坐标的 n 次齐次函数，即

$$V(\lambda x,\lambda y,\lambda z)=\lambda^n V(x,y,z)\,,$$

试用变分法证明，在束缚态下动能 T 和势能 V 的平均值满足下列关系：

$$2\langle T\rangle=n\langle V\rangle\ (\text{位力定理}).$$

分析　假定 $\psi(x,y,z)$ 是体系归一化的严格的能量本征波函数，采用 $C\psi(\lambda x,\lambda y,\lambda z)$ 作为试探波函数进行变分计算，其中 λ 为变分参数，C 为归一化常数. 由 $\lambda=1$ 时取变分极值，即可证明位力定理.

证明　体系严格的能量本征波函数为 $\psi(x,y,z)$，因此

$$\langle T\rangle=\iiint\psi^*(x,y,z)\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\right)\psi(x,y,z)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\,,$$

$$\langle V\rangle=\iiint\psi^*(x,y,z)V\psi(x,y,z)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\,,\tag{6.4-1}$$

取试探波函数 $C\psi(\lambda x,\lambda y,\lambda z)$，归一化条件为

$$C^2\iiint\psi^*(\lambda x,\lambda y,\lambda z)\psi(\lambda x,\lambda y,\lambda z)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z=1\,,\tag{6.4-2}$$

作变量代换，$u=\lambda x$，$v=\lambda y$，$w=\lambda z$，式(6.4-2)写成

$$C^2\left(\frac{1}{\lambda^3}\right)\iiint\psi^*(u,v,w)\psi(u,v,w)\mathrm{d}u\mathrm{d}v\mathrm{d}w=1\,,\tag{6.4-3}$$

利用波函数 $\psi(u,v,w)$ 的归一性，容易完成式(6.4-3)中的积分，并求得 $C=\sqrt{\lambda^3}$，利用复合函数求导规则容易看出

$$\frac{\partial}{\partial x}\psi(\lambda x,\lambda y,\lambda z)=\lambda\left.\frac{\partial\psi(u,v,w)}{\partial u}\right|_{u=\lambda x,\,v=\lambda y,\,w=\lambda z}.\tag{6.4-4}$$

对坐标 y,z 也有类似的表达式. 引入记号

$$\nabla^2_{xyz}=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\,,\quad\nabla^2_{uvw}=\frac{\partial^2}{\partial u^2}+\frac{\partial^2}{\partial v^2}+\frac{\partial^2}{\partial w^2}\,.\tag{6.4-5}$$

根据式(6.4-4)，容易看出

$$\nabla^2_{xyz}\psi(\lambda x,\lambda y,\lambda z)=\lambda^2\nabla^2_{uvw}\psi(u,v,w)\big|_{u=\lambda x,\,v=\lambda y,\,w=\lambda z}.\tag{6.4-6}$$

因此，利用变量代换可以得到动能算符在试探波函数中的平均值为

$$C^2\iiint\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\psi^*(\lambda x,\lambda y,\lambda z)\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2_{xyz}\right)\psi(\lambda x,\lambda y,\lambda z)$$

$$=\lambda^2C^2\iiint\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\left[\psi^*(u,v,w)\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2_{xyz}\right)\psi(u,v,w)\right]_{u=\lambda x,\,v=\lambda y,\,w=\lambda z}$$

$$=\lambda^2 C^2\iiint \mathrm{d}u\mathrm{d}v\mathrm{d}w\psi^*(u,v,w)\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2_{uvw}\right)\psi(u,v,w)=\lambda^2\langle T\rangle. \tag{6.4-7}$$

利用势能函数的齐次性质，作变量代换可以得到势能函数在试探波函数中的平均值为

$$\begin{aligned}&C^2\iiint \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\psi^*(\lambda x,\lambda y,\lambda z)V(x,y,z)\psi(\lambda x,\lambda y,\lambda z)\\&=\frac{C^2}{\lambda^n}\iiint \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z[\psi^*(\lambda x,\lambda y,\lambda z)V(x,y,z)\psi(\lambda x,\lambda y,\lambda z)]\\&=\frac{1}{\lambda^n}\iiint \mathrm{d}u\mathrm{d}v\mathrm{d}w\psi^*(u,v,w)V(u,v,w)\psi(u,v,w)=\frac{1}{\lambda^n}\langle V\rangle.\end{aligned} \tag{6.4-8}$$

哈密顿算符在试探波函数中的平均值为动能算符平均值(6.4-7)和势能函数平均值(6.4-8) 之和，即

$$I(\lambda)=\langle\hat{H}\rangle=\lambda^2\langle T\rangle+\frac{1}{\lambda^n}\langle V\rangle. \tag{6.4-9}$$

最佳的参数 λ_0，由变分极值条件决定

$$\frac{\partial}{\partial\lambda}I(\lambda)=0,\quad 2\lambda_0\langle T\rangle-n\left(\frac{1}{\lambda_0^{n+1}}\right)\langle V\rangle=0, \tag{6.4-10}$$

$$2\langle T\rangle=n\langle V\rangle. \tag{6.4-11}$$

这就是要证明的位力定理.

证毕.

6.5　设 $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}_1$，其中 $\hat{H}_1$ 微扰是正定的，试用变分法证明：$\hat{H}_0$ 的基态能量低于 $\hat{H}$ 的基态能量. 利用此结论，证明在中心力场中，束缚粒子的基态必为 S 态.

分析　假定 $\hat{H}$ 的基态是 $|\psi\rangle$，基态能量是 E，假定 $\hat{H}_0$ 的基态能量是 E_0，根据变分原理，利用任何试探波函数计算 $\hat{H}_0$ 的平均值均不小于 E_0，由此可证本题.

解　由 $\hat{H}_1$ 的正定性

$$E=\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle=\langle\psi|\hat{H}_0|\psi\rangle+\langle\psi|\hat{H}_1|\psi\rangle>\langle\psi|\hat{H}_0|\psi\rangle. \tag{6.5-1}$$

根据变分原理，

$$\langle\psi|\hat{H}_0|\psi\rangle\geqslant E_0. \tag{6.5-2}$$

合并式(6.5-1)和式(6.5-2)即得 $E>E_0$.

对于中心力场 $V(r)$ 中的束缚态能量本征值问题，由于角动量守恒，其能量本征波函数可以表示为径向波函数 $R(r)$ 与球谐函数的乘积. 令 $u=rR$，则径向波函

数与束缚态能级由定态薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}u+\left[V(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u=Eu\,. \tag{6.5-3}$$

和边界条件 $u(0)=u(\infty)=0$ 决定. 这里 $-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+V(r)$ 就是所谓的 $\hat{H}_0$，而 $\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}$ 就是正定算符 $\hat{H}_1$，本题前文证明了 $\hat{H}_0$ 的基态能必定小于 $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}_1$ 的基态能，式中 $\hat{H}_0$ 就是 S 波的哈密顿量，因此中心力场粒子的基态必为 S 态.

证毕.

6.6　证明：选用试探波函数根据变分原理计算基态能量不可能比实际的基态能量低.

分析　将变分计算的试探解用体系的严格能量本征态展开，即可证明.

证明　假定体系的严格能量本征态为 $|n\rangle$，能量本征值为 E_n. 显然 $E_n>E_0$，其中 E_0 是基态能. 假定作变分计算的态矢量为 $|\psi\rangle$，将其用体系的严格能量本征态展开可得

$$|\psi\rangle=\sum_n c_n|n\rangle\,,\quad \sum_n|c_n|^2=1\,. \tag{6.6-1}$$

$$\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle=\sum_{mn}c_m^*c_n\langle m|\hat{H}|n\rangle=\sum_{mn}c_m^*c_nE_n\delta_{mn}=\sum_n|c_n|^2E_n\geqslant\sum_n|c_n|^2E_0=E_0\,. \tag{6.6-2}$$

证毕.

6.7　如果 $\psi_0,\psi_1,\cdots,\psi_m$ 是 $\hat{H}$ 的基态、第一激发态、…、第 m 激发态，求证：由试探波函数 $\psi_{m+1}(\boldsymbol{r},\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_k)=\psi(\boldsymbol{r},\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_k)-\sum_{i=0}^{m}\psi_i\langle\psi_i|\psi\rangle$ 根据变分原理计算求得的第 $m+1$ 激发态的能量不可能低于实际的第 $m+1$ 激发态的能量.

分析　此题给出的变分试探解是逐次正交后的结果，只需证明其与基态和所有的低激发态正交，然后就可以用与题 6.6 类似的方法进行证明.

证明　记体系的严格能量本征态为 $|n\rangle$，本征值为 E_n，作变分计算的态矢量为 $|\psi_{m+1}\rangle$，将 $|\psi_{m+1}\rangle$ 用体系的严格能量本征态展开可得

$$|\psi_{m+1}\rangle=\sum_n c_n|n\rangle\,,\quad c_n=\langle n|\psi_{m+1}\rangle\,,\quad \sum_n|c_n|^2=1\,. \tag{6.7-1}$$

根据题设条件

$$|\psi_{m+1}\rangle=|\psi\rangle-\sum_{i=0}^{m}(\langle i|\psi\rangle)|i\rangle\,, \tag{6.7-2}$$

显然，对于所有的$0\leqslant k\leqslant m$，容易看出$\langle k|\psi_{m+1}\rangle=0$，即$|\psi_{m+1}\rangle$和体系的基态以及第1至第$m$激发态都正交，$|\psi_{m+1}\rangle$的展开式可以重写为

$$|\psi_{m+1}\rangle=\sum_{n\geqslant m+1}c_n|n\rangle\,,\quad \sum_{n\geqslant m+1}|c_n|^2=1\,, \tag{6.7-3}$$

$$\begin{aligned}\langle\psi_{m+1}|\hat{H}|\psi_{m+1}\rangle&=\sum_{i\geqslant m+1,\ j\geqslant m+1}c_i^*c_j\langle i|\hat{H}|j\rangle=\sum_{i\geqslant m+1,\ j\geqslant m+1}c_i^*c_jE_j\delta_{ij}\\&=\sum_{i\geqslant m+1}|c_i|^2E_i\geqslant\sum_{i\geqslant m+1}|c_i|^2E_{m+1}=E_{m+1}.\end{aligned}$$

证毕.

6.8　一维谐振子受到一恒力作用，用微扰法求它的二级近似能量和一级近似波函数，并和严格解比较.

分析　恒力作用引起的微扰可以写为$\hat{H}_1=Fx$，一维谐振子的能量本征态无简并，可利用非简并微扰论的标准程序计算二级近似能量和一级近似波函数，至于严格解，可将上述微扰与谐振子势合并后配方求解.

解　在本题中，未微扰问题是一维谐振子

$$\hat{H}_0=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2\,,\quad E_n^{(0)}=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\,,\quad n=0,1,2,\cdots. \tag{6.8-1}$$

对于本征态$|n\rangle$，微扰引起的能量一级修正

$$E_n^{(1)}=\langle n|\hat{H}_1|n\rangle=0\,. \tag{6.8-2}$$

由于$|n\rangle$态具有确定的宇称，而$\hat{H}_1$具有奇宇称，因而上式中的矩阵元为零是对称性的必然结果，微扰引起的波函数一级修正表示为

$$\psi_n^{(1)}(x)=\sum_{m\neq n}a_m^{(1)}\psi_m^{(0)}(x)\,,\quad a_m^{(1)}=\frac{\langle m|\hat{H}_1|n\rangle}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\,. \tag{6.8-3}$$

利用一维谐振子的升降算符

$$x=\sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}(\hat{a}+\hat{a}^+)\,,\quad \hat{a}|n\rangle=\sqrt{n}|n-1\rangle\,,\quad \hat{a}^+|n\rangle=\sqrt{n+1}|n+1\rangle\,. \tag{6.8-4}$$

容易求得

$$\langle m|\hat{H}_1|n\rangle=F\sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}\langle m|\hat{a}+\hat{a}^+|n\rangle=F\sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}\left(\sqrt{n}\delta_{m,n-1}+\sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}\right). \tag{6.8-5}$$

将式(6.8-5)代入波函数一级修正的式(6.8-3)，可得

$$\psi_n^{(1)}(x)=F\sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\hbar\omega^3}}\left[\sqrt{n}\psi_{n-1}^{(0)}(x)-\sqrt{n+1}\psi_{n+1}^{(0)}(x)\right]. \tag{6.8-6}$$

微扰引起的能量二级修正表示为

$$E_n^{(2)}=\sum_{m\neq n}\frac{|\langle m|\hat{H}_1|n\rangle|^2}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}. \tag{6.8-7}$$

同样是利用式(6.8-5)，将其代入上式得到

$$E_n^{(2)}=-\frac{F^2}{2\mu\omega^2}. \tag{6.8-8}$$

准至二级近似，体系的能量本征值可以写为

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega-\frac{F^2}{2\mu\omega^2},\quad n=0,1,2,\cdots, \tag{6.8-9}$$

下面讨论严格解，计入微扰后，体系的势能表示为

$$V(x)=\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2+Fx=\frac{1}{2}\mu\omega^2\left(x+\frac{F}{\mu\omega^2}\right)^2-\frac{F^2}{2\mu\omega^2}. \tag{6.8-10}$$

从式(6.8-10)可以看出，若定义新的坐标 $x_1=x+\dfrac{F}{\mu\omega^2}$，势能函数仍然是一个圆频率为 ω 的一维谐振子(此坐标变换不影响微分也就是动能算符)，只是多了一个常数项 $-\dfrac{F}{2\mu\omega^2}$，因此体系严格的能量本征值为

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega-\frac{F^2}{2\mu\omega^2},\quad n=0,1,2,\cdots. \tag{6.8-11}$$

与微扰结果一致.

答　准至二级近似，体系的能量本征值为 $\left(n+\dfrac{1}{2}\right)\hbar\omega-\dfrac{F^2}{2\mu\omega^2}$，$n=0,1,2,\cdots$，与严格解一致，一级近似波函数为 $F\sqrt{\dfrac{\hbar}{2\mu\hbar\omega^3}}\left[\sqrt{n}\psi_{n-1}^{(0)}(x)-\sqrt{n+1}\psi_{n+1}^{(0)}(x)\right]$.

6.9　一维谐振子 $\hat{H}_0=-\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\dfrac{\mu}{2}\omega_0^2x^2$，处于基态，如再加一弹性力作用，$\hat{H}_1=\dfrac{1}{2}bx^2$，$b$ 为小量，试用微扰论计算 $\hat{H}_1$ 对能量一级修正并与严格解比较.

分析　微扰哈密顿写为 $\hat{H}_1=\dfrac{bx^2}{2}$，一维谐振子的基态无简并，可利用非简并

微扰论的标准程序计算基态的一级近似能量.

解　在本题中，未微扰问题是一维谐振子

$$\hat{H}_0=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2\ ,\quad E_0^{(0)}=\frac{\hbar\omega}{2}. \tag{6.9-1}$$

微扰引起的能量一级修正

$$E_0^{(1)}=\langle 0|\hat{H}_1|0\rangle=\frac{b}{2}\langle 0|x^2|0\rangle. \tag{6.9-2}$$

利用一维谐振子的升降算符

$$x=\sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}(\hat{a}+\hat{a}^+)\ ,\quad \hat{a}|n\rangle=\sqrt{n}|n\rangle\ ,\quad a^+|n\rangle=\sqrt{n+1}|n+1\rangle. \tag{6.9-3}$$

容易求得

$$\langle 0|x^2|0\rangle=\frac{\hbar}{2\mu\omega}\langle 0|(\hat{a}+\hat{a}^+)^2|0\rangle=\frac{\hbar}{2\mu\omega}\ , \tag{6.9-4}$$

代入能量一级修正的式(6.9-2)，可得

$$E_0^{(1)}=\frac{\hbar b}{4\mu\omega}. \tag{6.9-5}$$

下面讨论严格解. 计入微扰后，体系的势能表示为

$$V(x)=\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2+\frac{1}{2}bx^2=\frac{1}{2}\mu\Omega^2x^2\ ,\quad \Omega=\sqrt{\omega^2+\frac{b}{\mu}}\approx\omega+\frac{b}{2\mu\omega}. \tag{6.9-6}$$

式(6.9-6)是一个圆频率为 Ω 的一维谐振子，因此体系严格的基态能为

$$E_0=\frac{1}{2}\hbar\Omega. \tag{6.9-7}$$

准至 $\dfrac{b}{\mu\omega^2}$ 的一次方，微扰结果与严格解一致.

答　一级近似能量为 $\dfrac{\hbar b}{4\mu\omega}$，准至 $\dfrac{b}{\mu\omega^2}$ 的一次方，微扰结果与严格解一致.

6.10　一个粒子在二维无限深势阱 $V(x,y)=\begin{cases}0, & 0,x<a,0<y<a\\ \infty, & \text{其他}\end{cases}$ 中运动，设加上微扰 $\hat{H}=\lambda xy$，$(0\leqslant x,y\leqslant a)$，求基态及第一激发态的能量修正.

分析　本题的未微扰问题是二维无限深势阱，二维无限深势阱的哈密顿量 $\hat{H}$ 可以写为 x 方向上和 y 方向上两个无限深势阱的哈密顿量 $\hat{H}_x$ 和 $\hat{H}_y$ 之和，$\hat{H}_x$ 和 $\hat{H}_y$ 彼此对易，因而存在 $\hat{H}$ 和 $\hat{H}_x$、$\hat{H}_y$ 的共同本征态，二维无限深势阱的能量本

征波函数是两个一维无限深势阱波函数之积，本征值是两个一维无限深势阱能量之和，二维无限深势阱的基态无简并，适用非简并微扰，第一激发态两重简并，适用简并微扰.

解　在本题中，未微扰问题是二维无限深势阱，根据上述分析，其能量本征值和本征波函数为

$$\psi_{nm}(x,y)=\begin{cases}\dfrac{2}{a}\sin\dfrac{n\pi x}{a}\sin\dfrac{n\pi y}{a}, & 0<x,y<a\\ 0, & \text{其他}\end{cases},\quad E_{nm}=\frac{(n^2+m^2)\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}, \tag{6.10-1}$$

其中 n 和 m 为自然数，对于基态 $n=m=1$，基态无简并，微扰引起的能量一级修正为

$$E^{(1)}_{\text{基态}}=\langle 11|\lambda xy|11\rangle=\int_0^a \mathrm{d}x\int_0^a \mathrm{d}y\psi^*_{11}(x,y)\lambda xy\psi_{11}(x,y)=\frac{\lambda a^2}{4}, \tag{6.10-2}$$

对于第一激发态，$n=1$、$m=2$ 或者 $n=2$、$m=1$，第一激发态二重简并，为求微扰引起的能量一级修正，应在简并态张成的子空间中写出微扰哈密顿矩阵，也就是

$$\begin{bmatrix}\langle 12|\lambda xy|12\rangle & \langle 12|\lambda xy|21\rangle\\ \langle 21|\lambda xy|12\rangle & \langle 21|\lambda xy|21\rangle\end{bmatrix}, \tag{6.10-3}$$

矩阵元计算如下：

$$\langle 12|\lambda xy|12\rangle=\langle 21|\lambda xy|21\rangle=\frac{\lambda a^2}{4},\quad \langle 12|\lambda xy|21\rangle=\langle 21|\lambda xy|12\rangle=\frac{256\lambda a^2}{81\pi^4}. \tag{6.10-4}$$

将矩阵元(6.10-4)代入微扰哈密顿量的矩阵(6.10-3)，求出矩阵的本征值，即得第一激发态能量的一级修正

$$E^{(1)}_{\text{第一激发态}}=\frac{\lambda a^2}{4}\pm\frac{256\lambda a^2}{81\pi^4}. \tag{6.10-5}$$

答　微扰 λxy 引起的二维无限深势阱中基态能量的一级修正为 $\dfrac{\lambda a^2}{4}$，第一激发态能量的一级修正为 $\dfrac{\lambda a^2}{4}\pm\dfrac{256\lambda a^2}{81\pi^4}$.

6.11　设在 H_0 表象中 $\hat{H}$ 的矩阵表示为

$$\begin{bmatrix}E_1^{(0)} & 0 & a\\ 0 & E_2^{(0)} & b\\ a^* & b^* & E_3^{(0)}\end{bmatrix},$$

其中 $E_1^{(0)}<E_2^{(0)}<E_3^{(0)}$，试用微扰论求能量的二级修正.

分析　在本题中，给出了 $\hat{H}_0$ 表象下哈密顿量的矩阵，该矩阵的非对角元就是微扰计算公式中所要用到的矩阵元 $\langle m|\hat{H}_1|n\rangle$.

解　由 $\hat{H}_1=\hat{H}-\hat{H}_0$，可得 $\hat{H}_0$ 表象下微扰哈密顿量 $\hat{H}_1$ 的矩阵

$$\hat{H}_1=\begin{bmatrix}0 & 0 & a\\ 0 & 0 & b\\ a^* & b^* & 0\end{bmatrix}, \tag{6.11-1}$$

显然能量的一级修正 $\langle n|\hat{H}_1|n\rangle=0$，下面计算能量的二级修正. 对于基态

$$E_1^{(2)}=\sum_{m\neq 1}\frac{|\langle m|\hat{H}_1|1\rangle|^2}{E_1^{(0)}-E_m^{(0)}}=\frac{|\langle 2|\hat{H}_1|1\rangle|^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}+\frac{|\langle 3|\hat{H}_1|1\rangle|^2}{E_1^{(0)}-E_3^{(0)}}=\frac{|a|^2}{E_1^{(0)}-E_3^{(0)}}, \tag{6.11-2}$$

对于第一激发态

$$E_2^{(2)}=\sum_{m\neq 2}\frac{|\langle m|\hat{H}_1|2\rangle|^2}{E_2^{(0)}-E_m^{(0)}}=\frac{|\langle 1|\hat{H}_1|2\rangle|^2}{E_2^{(0)}-E_1^{(0)}}+\frac{|\langle 3|\hat{H}_1|2\rangle|^2}{E_2^{(0)}-E_3^{(0)}}=\frac{|b|^2}{E_2^{(0)}-E_3^{(0)}}, \tag{6.11-3}$$

对于第二激发态

$$E_3^{(2)}=\sum_{m\neq 3}\frac{|\langle m|\hat{H}_1|3\rangle|^2}{E_3^{(0)}-E_m^{(0)}}=\frac{|\langle 1|\hat{H}_1|3\rangle|^2}{E_3^{(0)}-E_1^{(0)}}+\frac{|\langle 2|\hat{H}_1|3\rangle|^2}{E_3^{(0)}-E_2^{(0)}}=\frac{|a|^2}{E_3^{(0)}-E_1^{(0)}}+\frac{|b|^2}{E_3^{(0)}-E_2^{(0)}}. \tag{6.11-4}$$

答　三个能级的能量二级修正分别为 $\dfrac{|a|^2}{E_1^{(0)}-E_3^{(0)}}$、$\dfrac{|b|^2}{E_2^{(0)}-E_3^{(0)}}$ 和 $\dfrac{|a|^2}{E_3^{(0)}-E_1^{(0)}}+\dfrac{|b|^2}{E_3^{(0)}-E_2^{(0)}}$.

6.12　设在 $\hat{H}_0$ 表象中 $\hat{H}$ 的矩阵表示为 $\begin{bmatrix}E_1^{(0)}+a & b\\ b & E_2^{(0)}+a\end{bmatrix}$，$a$、$b$ 为常数，用微扰论求能级修正到二级近似，并与严格解比较.

分析　与题 6.11 类似，在本题中给出了 $\hat{H}_0$ 表象下哈密顿量 $\hat{H}$ 的矩阵，由 $\hat{H}-\hat{H}_0$ 可得微扰哈密顿量的矩阵.

解　由 $\hat{H}_1=\hat{H}-\hat{H}_0$，可得 $\hat{H}_0$ 表象下微扰哈密顿量 $\hat{H}_1$ 的矩阵

$$\hat{H}_1=\begin{bmatrix}a & b\\ b & a\end{bmatrix}, \tag{6.12-1}$$

显然能量的一级修正

$$E_1^{(1)}=\langle 1|\hat{H}_1|1\rangle=a,\quad E_2^{(1)}=\langle 2|\hat{H}_1|2\rangle=a, \tag{6.12-2}$$

能量的二级修正

$$E_1^{(2)}=\sum_{m\neq 1}\frac{|\langle m|\hat{H}_1|1\rangle|^2}{E_1^{(0)}-E_m^{(0)}}=\frac{|\langle 2|\hat{H}_1|1\rangle|^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}=\frac{b^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}\,, \tag{6.12-3}$$

$$E_2^{(2)}=\sum_{m\neq 2}\frac{|\langle m|\hat{H}_1|2\rangle|^2}{E_2^{(0)}-E_m^{(0)}}=\frac{|\langle 1|\hat{H}_1|2\rangle|^2}{E_2^{(0)}-E_1^{(0)}}=\frac{b^2}{E_2^{(0)}-E_1^{(0)}}\,, \tag{6.12-4}$$

准至二级近似，两个能级分别为

$$E_1^{(0)}+a+\frac{b^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}\,,\quad E_2^{(0)}+a+\frac{b^2}{E_2^{(0)}-E_1^{(0)}}\,. \tag{6.12-5}$$

直接求解题中 $\hat{H}$ 矩阵的本征值可得严格解. $\hat{H}$ 矩阵是 2×2 的矩阵，容易求得本征值为

$$E_{\pm}=\frac{1}{2}\left[(E_1^{(0)}+E_2^{(0)}+2a)\pm\sqrt{(E_1^{(0)}-E_2^{(0)})^2+4b^2}\right]. \tag{6.12-6}$$

以 $\dfrac{4b^2}{(E_1^{(0)}-E_2^{(0)})^2}$ 为小量，式(6.12-6)中的根式可近似展开为

$$\sqrt{(E_1^{(0)}-E_2^{(0)})^2+4b^2}\approx|E_1^{(0)}-E_2^{(0)}|\left[1+\frac{2b^2}{(E_1^{(0)}-E_2^{(0)})^2}\right]. \tag{6.12-7}$$

将式(6.12-7)代入式(6.12-6)，容易验证准至 b^2，严格解与微扰结果一致.

答　准至二级近似，两个能级分别为 $E_1^{(0)}+a+\dfrac{b^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}$，$E_2^{(0)}+a+\dfrac{b^2}{E_2^{(0)}-E_1^{(0)}}$.

6.13　设在 H_0 表象中 $\hat{H}$ 的矩阵表示为

$$\begin{bmatrix}E_1^{(0)} & 0 & a\\ 0 & E_1^{(0)} & b\\ a^* & b^* & E_2^{(0)}\end{bmatrix},\quad E_2^{(0)}>E_1^{(0)}\,,$$

(1) 不考虑简并，按非简并微扰计算能量修正到二级；

(2) 考虑简并，按简并微扰计算能量修正到二级；

(3) 严格求解，并在 a、b 为小量时与(1)和(2)问比较.

分析　与题 6.11 类似，在本题中给出了 $\hat{H}_0$ 表象下哈密顿量 $\hat{H}$ 的矩阵，由 $\hat{H}-\hat{H}_0$ 可得微扰哈密顿量的矩阵，此后可按微扰论的标准程序进行.

解　由 $\hat{H}_1=\hat{H}-\hat{H}_0$，可得 $\hat{H}_0$ 表象下微扰哈密顿量 $\hat{H}_1$ 的矩阵

$$\hat{H}_1=\begin{bmatrix}0 & 0 & a\\ 0 & 0 & b\\ a^* & b^* & 0\end{bmatrix}, \tag{6.13-1}$$

首先，根据题目要求，按非简并微扰处理，能量一级修正为

$$E_n^{(1)}=\langle n|\hat{H}_1|n\rangle=0\ ,\quad n=1,2,3. \tag{6.13-2}$$

能量的二级修正为

$$E_1^{(2)}=\sum_{m\neq 1}\frac{|\langle m|\hat{H}_1|1\rangle|^2}{E_1^{(0)}-E_m^{(0)}}=\frac{|\langle 3|\hat{H}_1|1\rangle|^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}=\frac{|a|^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}\ , \tag{6.13-3}$$

$$E_2^{(2)}=\sum_{m\neq 2}\frac{|\langle m|\hat{H}_1|2\rangle|^2}{E_1^{(0)}-E_m^{(0)}}=\frac{|\langle 3|\hat{H}_1|2\rangle|^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}=\frac{|b|^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}\ , \tag{6.13-4}$$

$$E_3^{(2)}=\sum_{m\neq 3}\frac{|\langle m|\hat{H}_1|3\rangle|^2}{E_2^{(0)}-E_m^{(0)}}=\frac{|\langle 1|\hat{H}_1|3\rangle|^2}{E_2^{(0)}-E_1^{(0)}}+\frac{|\langle 2|\hat{H}_1|3\rangle|^2}{E_2^{(0)}-E_1^{(0)}}=\frac{|a|^2+|b|^2}{E_2^{(0)}-E_1^{(0)}}\ . \tag{6.13-5}$$

准至三级近似，三个能级分别为

$$E_1^{(0)}+\frac{|a|^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}\ ,\quad E_1^{(2)}+\frac{|b|^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}\ ,\quad E_2^{(0)}+\frac{|a|^2+|b|^2}{E_2^{(0)}-E_1^{(0)}}\ . \tag{6.13-6}$$

实际上，体系的基态(头两个能级)是简并的，用非简并微扰并不合适，改用简并微扰，为求简并微扰下的一级能量修正，需要在简并态张成的子空间中写出微扰哈密顿矩阵，在本题中恰好是个零矩阵，因此微扰引起的能量一级修正为零，需要进一步计算二级能量修正，为此需要在简并态张成的子空间中考虑如下的矩阵，其矩阵元为

$$A_{\beta\alpha}=\sum_m\frac{\langle\beta|\hat{H}_1|m\rangle\langle m|\hat{H}_1|\alpha\rangle}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\ , \tag{6.13-7}$$

其中 $|\alpha\rangle$、$|\beta\rangle$ 是简并态子空间中的态，能量为 $E_n^{(0)}$，$|m\rangle$ 是简并态子空间以外的态，能量为 $E_m^{(0)}$，在本题中，这个矩阵表示为

$$A=\frac{1}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}\begin{bmatrix}|a|^2 & ab^*\\ a^*b & |b|^2\end{bmatrix}. \tag{6.13-8}$$

式(6.13-8)中 A 矩阵的本征值，给出能量的二级修正，A 矩阵是 2×2 的矩阵，容易算得其本征值为

$$0\ 和\ \frac{|a|^2+|b|^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}\ . \tag{6.13-9}$$

因此，准至二级近似，两个简并态的能量为

$$E_1^{(0)} \text{ 和 } E_1^{(0)}+\frac{|a|^2+|b|^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}. \tag{6.13-10}$$

当然能级 $E_2^{(0)}$ 是不简并的，其能量的二级修正就是前面非简并微扰得到的公式(6.13-5). 直接求解题目中 $\hat{H}$ 矩阵的本征值可得严格解，也就是说，严格的能量本征值 E 是下面方程的根：

$$\begin{vmatrix} E_1^{(0)}-E & 0 & a \\ 0 & E_1^{(0)}-E & b \\ a^* & b^* & E_1^{(0)}-E \end{vmatrix}. \tag{6.13-11}$$

经过一些代数运算可以得到

$$\begin{cases} E_1=E_1^{(0)} \\ E_2=\dfrac{1}{2}\left[(E_1^{(0)}+E_2^{(0)})-\sqrt{(E_1^{(0)}-E_2^{(0)})^2+4(|a|^2+|b|^2)}\right] \\ E_3=\dfrac{1}{2}\left[(E_1^{(0)}+E_2^{(0)})+\sqrt{(E_1^{(0)}-E_2^{(0)})^2+4(|a|^2+|b|^2)}\right] \end{cases}. \tag{6.13-12}$$

以 $\dfrac{4(|a|^2+|b|^2)}{(E_1^{(0)}-E_2^{(0)})^2}$ 为小量，将式(6.13-12)中的根式近似展开，可得

$$\begin{cases} E_1=E_1^{(0)} \\ E_2=E_1^{(0)}-\dfrac{|a|^2+|b|^2}{E_2^{(0)}-E_1^{(0)}} \\ E_3=E_2^{(0)}+\dfrac{|a|^2+|b|^2}{E_2^{(0)}-E_1^{(0)}} \end{cases}. \tag{6.13-13}$$

与前面的微扰结论一致.

答　准至二级近似，不考虑简并，三个能级可分别写成 $E_1^{(0)}+\dfrac{|a|^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}$，$E_1^{(2)}+\dfrac{|b|^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}$，$E_2^{(0)}+\dfrac{|a|^2+|b|^2}{E_2^{(0)}-E_1^{(0)}}$；考虑简并，三个能级分别为 $E_1=E_1^{(0)}$、$E_2=E_1^{(0)}-\dfrac{|a|^2+|b|^2}{E_2^{(0)}-E_1^{(0)}}$ 和 $E_3=E_2^{(0)}+\dfrac{|a|^2+|b|^2}{E_2^{(0)}-E_1^{(0)}}$；严格解为 $E_1=E_1^{(0)}$、$E_2=\dfrac{1}{2}\left[(E_1^{(0)}+E_2^{(0)})-\sqrt{(E_1^{(0)}-E_2^{(0)})^2+4(|a|^2+|b|^2)}\right]$ 和 $E_3=\dfrac{1}{2}\left[(E_1^{(0)}+E_2^{(0)})+\right.$

$$\sqrt{(E_1^{(0)}-E_2^{(0)})^2+4(|a|^2+|b|^2)}\Big].$$

6.14　带电平面转子，电矩为τ处在外电场ε中，ε方向在平面内，求能量到二级近似，如果电场极强则情况如何？

分析　假定转子所在的平面为x-y平面，转轴为z轴，先不考虑电场的影响，转子的哈密顿量为$\hat{H}_0=\dfrac{\hat{L}_z^2}{2I}$，其中$I$是转子的转动惯量，$\hat{L}_z$是沿转轴方向的角动量. 假定平面内的转角用$\varphi$表示，那么$\hat{L}_z=\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\partial}{\partial\varphi}$. 下面考虑电场的作用，电偶极矩在电场中的能量表示为$\hat{H}_1=-\varepsilon\tau$，前面转子的动能只和对$\varphi$的微分有关而与$\varphi$的绝对大小无关，为此不妨假定，转角是从外电场的方向量起的，转子电偶极矩就沿着转子的方向，因此电偶极矩的能量可以写为$\hat{H}_1=-\tau\varepsilon\cos\varphi$，至此体系的哈密顿量完全确定，后面可以按照微扰论的标准程序进行计算.

解　根据前面的分析，体系的哈密顿量表示为

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}_1,\quad \hat{H}_0=\frac{\hat{L}_z^2}{2I},\quad \hat{H}_1=-\tau\varepsilon\cos\varphi. \tag{6.14-1}$$

先考虑第一种情况，电场较弱，那么$\hat{H}_1$可以作为微扰，未微扰问题就是$\hat{H}_0$的本征值问题. 显然$\hat{L}_z$的本征态就是$\hat{H}_0$的本征态，根据$\hat{L}_z$本征值问题的结果，可以得到未微扰哈密顿的能量本征值与本征波函数如下：

$$\psi_m=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi},\quad E_m^{(0)}=\frac{m^2\hbar^2}{2I},\quad m=0,\pm1,\pm2,\cdots, \tag{6.14-2}$$

对于$m=0$的态，适用简并微扰，能量的一级修正为

$$\langle 0|\hat{H}_1|0\rangle=\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\frac{1}{\sqrt{2\pi}}(-\tau\varepsilon\cos\varphi)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}=0, \tag{6.14-3}$$

能量的二级修正为

$$E_0^{(2)}=\sum_{m\neq0}\frac{\left|\langle m|\hat{H}_1|0\rangle\right|^2}{E_0^{(0)}-E_m^{(0)}}=-\frac{\tau^2\varepsilon^2I}{\hbar^2}. \tag{6.14-4}$$

在计算矩阵元$\langle m|\hat{H}_1|n\rangle$的过程中，容易发现，仅在$m-n=\pm1$时才能算得非零的矩阵元. 注意到这一点，式(6.14-4)以及后面的一些矩阵元计算就能很容易的完成了.

下面讨论$m\neq0$的情形，此时$|\pm m\rangle$态简并，适用简并微扰，为求能量的一级修正，需要在简并态张成的子空间中写出微扰哈密顿矩阵，在本题中恰好是个零

矩阵，因此微扰引起的能量一级修正为零，需要进一步计算二级能量修正. 为此需要在简并态张成的子空间中考虑如下的矩阵，其矩阵元为

$$A_{\beta\alpha}=\sum_k \frac{\langle\beta|\hat{H}_1|k\rangle\langle k|\hat{H}_1|\alpha\rangle}{E_m^{(0)}-E_k^{(0)}}, \tag{6.14-5}$$

其中$|\alpha\rangle$和$|\beta\rangle$是简并态子空间中的态，这里就是$|\pm m\rangle$，能量为$E_m^{(0)}=\dfrac{m^2\hbar^2}{2I}$，$|k\rangle$是简并态子空间以外的态，能量为$E_k^{(0)}=\dfrac{k^2\hbar^2}{2I}$. 以下再分两种情形讨论，

(a) 当$m=\pm1$时，这个矩阵有非对角元，可以表示为

$$A=\frac{\tau^2\varepsilon^2 I}{6\hbar^2}\begin{bmatrix}2 & 3\\ 3 & 2\end{bmatrix}, \tag{6.14-6}$$

能量的二级修正由上面A矩阵的本征值给出，具体为

$$-\frac{\tau^2\varepsilon^2 I}{6\hbar^2}\text{和}\frac{5\tau^2\varepsilon^2 I}{6\hbar^2}. \tag{6.14-7}$$

(b) 当$m\neq\pm1$时，A矩阵没有非对角元，可以表示为

$$A=\frac{\tau^2\varepsilon^2 I}{\hbar^2(4m^2-1)}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}, \tag{6.14-8}$$

能量的二级修正由上面A矩阵的本征值给出，具体为

$$\frac{\tau^2\varepsilon^2 I}{\hbar^2(4m^2-1)}. \tag{6.14-9}$$

总结一下前面的结果，准至ε^2，体系的基态为

$$E_0=-\frac{\tau^2\varepsilon^2 I}{\hbar^2}. \tag{6.14-10}$$

体系的第一激发态劈裂为两个能级

$$E_{1,-}=\frac{\hbar^2}{2I}-\frac{\tau^2\varepsilon^2 I}{6\hbar^2}\text{和}E_{1,+}=\frac{\hbar^2}{2I}+\frac{5\tau^2\varepsilon^2 I}{6\hbar^2}. \tag{6.14-11}$$

体系的其他激发态仍然为两重简并，能量为

$$E_m=\frac{m^2\hbar^2}{2I}+\frac{\tau^2\varepsilon^2 I}{\hbar^2(4m^2-1)},\quad m=\pm2,\ \pm3,\pm4,\cdots. \tag{6.14-12}$$

现在讨论第二种情况，假定电场很强. 此时哈密顿量中$\hat{H}_1$起主导作用，对于体系的基态和低激发态而言，电偶极矩基本与外电场方向平行，也就是说$\varphi\approx0$. 因此，可以将$\hat{H}_1$中的$\cos\varphi$在$\varphi\approx0$附近展开，保留至φ的平方项，哈密顿量写为

$$H=-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varphi^2}+\frac{1}{2}\tau\varepsilon\varphi^2-\tau\varepsilon\,. \tag{6.14-13}$$

式(6.14-13)除去一个常数因子$-\tau\varepsilon$外，与一个质量为I，圆频率为$\omega=\sqrt{\frac{\tau\varepsilon}{I}}$的一维谐振子相当，因此，体系的能量本征值为

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\sqrt{\frac{\tau\varepsilon}{I}}-\tau\varepsilon\,,\quad n=0,1,2,\cdots. \tag{6.14-14}$$

答　在弱场近似下，准至外电场的二级近似，体系的能级包括$-\frac{\tau^2\varepsilon^2 I}{\hbar^2}$，$\frac{\hbar^2}{2I}-\frac{\tau^2\varepsilon^2 I}{6\hbar^2}$，$\frac{\hbar^2}{2I}+\frac{5\tau^2\varepsilon^2 I}{6\hbar^2}$和$\frac{m^2\hbar^2}{2I}+\frac{\tau^2\varepsilon^2 I}{\hbar^2(4m^2-1)}$，$m=\pm2,\pm3,\cdots$；对于强场情形下的低能态，有

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\sqrt{\frac{\tau\varepsilon}{I}}-\tau\varepsilon\,,\quad n=0,1,2,\cdots.$$

6.15　设有一取向用θ,φ确定的转子，作阻尼转动，用哈密顿量

$$\hat{H}=A\hat{L}^2+B\hbar^2\cos2\varphi\,,\quad (A\gg B)$$

描写，后一项当作微扰，写出没有微扰时的能量本征函数和能量本征值，再用一级微扰论计算系统s、p、d能级修正.

分析　未微扰哈密顿量的本征值问题就是角动量算符的本征值问题. s、p、d能级分别为不简并、3重简并和5重简并，分别按照非简并微扰和简并微扰的标准程序计算即可.

解　未微扰问题的哈密顿量为$\hat{H}_0=A\hat{L}^2$，显然$\hat{H}_0$的本征值和本征波函数为

$$E_l^{(0)}=Al(l+1)\hbar^2\,,\quad \psi_{lm}=\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)\,,\quad \psi_{lm}=\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)\,. \tag{6.15-1}$$

微扰哈密顿量$\hat{H}_1=B\hbar^2\cos2\varphi$. 对于s能级($l=0$)，能级无简并，适用非简并微扰. 能级的一级修正为

$$E_1^{(0)}=\langle00|\hat{H}_1|00\rangle=\int_0^{\pi}\sin\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\mathrm{Y}_{00}^{*}(\theta,\varphi)(B\hbar^2\cos2\varphi)\mathrm{Y}_{00}(\theta,\varphi)=0\,. \tag{6.15-2}$$

对于p能级($l=1$)，能级三重简并($\mathrm{Y}_{11},\mathrm{Y}_{10},\mathrm{Y}_{1,-1}$)，适用简并微扰. 为求能量的一级修正，需要在简并态张成的子空间中写出微扰哈密顿矩阵

$$B\hbar^2\begin{bmatrix}\langle11|\cos2\varphi|11\rangle & \langle11|\cos2\varphi|10\rangle & \langle11|\cos2\varphi|1,-1\rangle\\ \langle11|0\cos2\varphi|11\rangle & \langle10|\cos2\varphi|10\rangle & \langle10|\cos2\varphi|1,-1\rangle\\ \langle1,-1|\cos2\varphi|11\rangle & \langle1,-1|\cos2\varphi|10\rangle & \langle1,-1|\cos2\varphi|1,-1\rangle\end{bmatrix}. \tag{6.15-3}$$

显然矩阵元$\langle lm|\cos 2\varphi|l_1m_1\rangle$仅在$m_1=m\pm 2$时不等于零，据此，式(6.15-3)的矩阵可以容易地算出，写为

$$\frac{B\hbar^2}{2}\begin{bmatrix}0&0&1\\0&0&0\\1&0&0\end{bmatrix}. \tag{6.15-4}$$

能量的一级修正由矩阵(6.15-4)的本征值给出，具体为

$$E_1^{(1)}=0,\pm\frac{B\hbar^2}{2}. \tag{6.15-5}$$

对于d能级($l=2$)，能级五重简并($Y_{22},Y_{21},Y_{20},Y_{2,-1},Y_{2,-2}$)，适用简并微扰. 为求能量的一级修正，需要在简并态张成的子空间中写出微扰哈密顿矩阵. 根据$m_1=m\pm 2$的规则，可知非零的矩阵元仅有

$$\begin{cases}\langle 22|\cos 2\varphi|20\rangle=\langle 20|\cos 2\varphi|22\rangle=-\dfrac{\sqrt{6}}{12}\\ \langle 21|\cos 2\varphi|2,-1\rangle=\langle 2,-1|\cos 2\varphi|21\rangle=\dfrac{1}{2}\\ \langle 2,-2|\cos 2\varphi|20\rangle=\langle 20|\cos 2\varphi|2,-2\rangle=-\dfrac{\sqrt{6}}{12}\end{cases}. \tag{6.15-6}$$

微扰哈密顿矩阵写成

$$B\hbar^2\begin{bmatrix}0&0&-\dfrac{\sqrt{6}}{12}&0&0\\0&0&0&\dfrac{1}{2}&0\\-\dfrac{\sqrt{6}}{12}&0&0&0&-\dfrac{\sqrt{6}}{12}\\0&\dfrac{1}{2}&0&0&0\\0&0&-\dfrac{\sqrt{6}}{12}&0&0\end{bmatrix}. \tag{6.15-7}$$

能量的一级修正由矩阵(6.15-7)的本征值给出，具体为

$$E_2^{(1)}=0,\pm\frac{B\hbar^2}{2},\pm\frac{\sqrt{3}B\hbar^2}{6}. \tag{6.15-8}$$

答　准至一级微扰，s能级的能量修正为0，p能级的能量修正为$0,\pm\dfrac{B\hbar^2}{2}$，d能级的能量修正为$0,\pm\dfrac{B\hbar^2}{2},\pm\dfrac{\sqrt{3}B\hbar^2}{6}$.

6.16　弹性耦合谐振子(两相等质量粒子处于共同的谐振子势中，限制在一直线上运动，且两粒子间有依赖于它们之间距离的弹性力作用)，试作出系统的薛定谔方程，假定粒子间的互作用是弱的，应用微扰论解释耦合谐振子问题，并与严格解比较.

分析　体系的哈密顿量可以写为

$$\hat{H}=\hat{H}_1+\hat{H}_2+\hat{H}_3,\quad \hat{H}_1=-\frac{\hbar}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x_1^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x_1^2,$$

$$\hat{H}_2=-\frac{\hbar}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x_2^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x_2^2,\quad \hat{H}_3=k(x_1-x_2)^2,\tag{6.16-1}$$

这里 $\hat{H}_1$ 是粒子 1 处在谐振子势中的哈密顿量，$\hat{H}_2$ 是粒子 2 处在谐振子势中的哈密顿量，$\hat{H}_3$ 是粒子 1 和粒子 2 之间的弹性力互作用，k 是弹性系数. $\hat{H}_3$ 可以作为微扰处理，$\hat{H}_0=\hat{H}_1+\hat{H}_2$ 构成未微扰问题. 由于 $\hat{H}_1$ 和 $\hat{H}_2$ 彼此对易，因此存在 $\hat{H}_0$、$\hat{H}_1$ 和 $\hat{H}_2$ 的共同本征态(或者说 $\hat{H}_0$ 可以按坐标 x_1 和 x_2 分离变量求解). $\hat{H}_0$ 的能量本征值和能量本征波函数分别是两个一维谐振子能量之和以及两个一维谐振子能量本征波函数之积. 因此未微扰问题 $\hat{H}_0$ 是可解的，其能量本征值为 $(n_1+n_2+1)\hbar\omega$. 可以看出，$\hat{H}_0$ 的能量本征态一般是简并的. 只要是 $N=n_1+n_2$ 相同的态，就具有相同的能量，也就是说简并度为 $N+1$，当 N 很大时，在简并态张成的子空间中写出的微扰哈密顿矩阵就会很大，导致其本征值的求解困难. 由于本题属于两体问题，可以预期引入质心坐标和相对坐标有可能方便求解. 事实上，微扰哈密顿仅与相对坐标有关，与质心坐标有关，这预示着引入质心坐标和相对坐标肯定是有益的.

解　引入质心坐标 $R=\dfrac{x_1+x_2}{2}$ 和相对坐标 $r=x_1-x_2$，体系的哈密顿量可以写为

$$\hat{H}=\hat{H}_R+\hat{H}_r+\hat{H}_3,\quad \hat{H}_R=-\frac{\hbar^2}{2(2\mu)}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}R^2}+\frac{1}{2}(2\mu)\omega^2R^2,$$

$$\hat{H}_r=-\frac{\hbar^2}{2\left(\dfrac{\mu}{2}\right)}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+\frac{1}{2}\left(\frac{\mu}{2}\right)\omega^2r^2,$$

$$\hat{H}_3=kr^2.\tag{6.16-2}$$

这里 $\hat{H}_R$ 是两粒子的质心运动，$\hat{H}_r$ 是两粒子的相对运动. $\hat{H}_0=\hat{H}_R+\hat{H}_r$ 构成未微扰问题. 容易验证 $\hat{H}_R$ 和 $\hat{H}_r$ 彼此对易，因此存在 $\hat{H}_0$、$\hat{H}_R$ 和 $\hat{H}_r$ 的共同本征态，$\hat{H}_R$

代表的是一个质量为2μ，圆频率为ω的一维谐振子；$\hat{H}_r$代表的是一个质量为$\frac{\mu}{2}$，圆频率为ω的一维谐振子. $\hat{H}_0$ 的能量本征值是$\hat{H}_R$和$\hat{H}_r$能量本征值之和，$\hat{H}_0$的能量本征波函数是$\hat{H}_R$和$\hat{H}_r$能量本征波函数之积，因此未微扰问题$\hat{H}_0$的解为

$$\psi_{n_R,n_r}=\Phi_{n_R}(R)\phi_{n_r}(r)\ ,\quad E_N^{(0)}=(N+1)\hbar\omega\ ,\quad N=n_R+n_r\ ,\quad n_R,n_r=0,1,2,\cdots\ , \tag{6.16-3}$$

式中Φ和ϕ分别是质量为2μ和质量为$\frac{\mu}{2}$的一维谐振子波函数. 容易看出，只要是$N=n_R+n_r$相同的态，就具有相同的能量，因此能级的简并度为$N+1$.

对于$N=0$，必有$n_R=n_r=0$，因此$N=0$的能级无简并，适用非简并微扰，能量的一级修正为

$$E_0^{(1)}=\langle 00|\hat{H}_1|00\rangle=k\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}R\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}r\Phi_{n_R}^*(R)\phi_{n_r}^*(r)(r^2)\Phi_{n_R}(R)\phi_{n_r}(r)\ , \tag{6.16-4}$$

式(6.16-4)中关于坐标R和r的积分可以分开进行. 关于R的积分因为归一化，等于 1，关于r的积分可以利用一维谐振子中势能平均值恰为能量本征值的一半这一事实，直接写出为$\frac{\hbar}{\mu\omega}$. 因此能量的一级修正为

$$E_0^{(1)}=\frac{\hbar k}{\mu\omega}\ . \tag{6.16-5}$$

对于$N\neq 0$的能级，适用简并微扰，需要在简并态张成的子空间中写出微扰哈密顿矩阵，其矩阵元为

$$H_{3n_R,n_r,n_{1R},n_{1r}}=\langle n_Rn_r|\hat{H}_3|n_{1R}n_{1r}\rangle=k\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}R\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}r\Phi_{n_R}^*(R)\phi_{n_r}^*(r)(r^2)\Phi_{n_{1R}}(R)\phi_{n_{1r}}(r)\ . \tag{6.16-6}$$

式(6.16-6)中关于坐标R和r的积分可以分开进行. 关于R的积分因为Φ的正交归一性，仅当$n_R=n_{1R}$时等于 1，其他情况下都为零. 又因为N能级下所有的简并态满足$n_R+n_r=n_{1R}+n_{1r}$，所以上述矩阵元中，当$n_R=n_{1R}$时必有$n_r=n_{1r}$. 也就是说在简并态张成的子空间中的微扰哈密顿矩阵是个对角矩阵，矩阵的本征值就是对角元，利用一维谐振子中势能平均值恰为能量本征值的一半这一事实，容易算出

$$E_N^{(1)}=\frac{2\hbar k}{\mu\omega}\left(n_r+\frac{1}{2}\right),\quad n_r=0,1,2,\cdots,N\ , \tag{6.16-7}$$

在微扰作用下，原来的一条$N+1$重简并的能级，劈裂为$N+1$条能级. 准至k的一次方，式(6.16-3)、式(6.16-5)和式(6.16-7)可以合并写成

$$E_{n_R n_r}=(n_R+n_r+1)\hbar\omega+\frac{2\hbar k}{\mu\omega}\left(n_r+\frac{1}{2}\right),\quad n_R,n_r=0,1,2,\cdots. \tag{6.16-8}$$

为求体系的严格解，重新写出哈密顿量

$$\hat{H}=\left[-\frac{\hbar^2}{2(2\mu)}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}R^2}+\frac{1}{2}(2\mu)\omega^2R^2\right]+\left[-\frac{\hbar^2}{2\left(\frac{\mu}{2}\right)}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+\frac{1}{2}\left(\frac{\mu}{2}\right)\omega^2r^2\right]+kr^2, \tag{6.16-9}$$

将 kr^2 项与 $\frac{1}{2}\left(\frac{\mu}{2}\right)\omega^2r^2$ 项合并，得到 $\frac{1}{2}\left(\frac{\mu}{2}\right)\Omega^2r^2$，$\Omega=\sqrt{\omega^2+\frac{4k}{\mu}}$. 如此一来，质心运动是一个质量为 2μ，圆频率为 ω 的一维谐振子；相对运动是一个质量为 $\frac{\mu}{2}$，圆频率为 Ω 的一维谐振子. 体系的能量本征值为

$$E_{n_R n_r}=\left(n_R+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega+\left(n_r+\frac{1}{2}\right)\hbar\Omega,\quad \Omega=\sqrt{\omega^2+\frac{4k}{\mu}}\approx\omega+\frac{2k}{\mu\omega},\quad n_R,n_r=0,1,2,\cdots. \tag{6.16-10}$$

准至 k 的一级近似，严格解与微扰论的结果一致.

答　准至 k 的一级近似，微扰下的能级公式为 $(n_R+n_r+1)\hbar\omega+\frac{2\hbar k}{\mu\omega}\left(n_r+\frac{1}{2}\right)$，严格解为 $\left(n_R+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega+\left(n_r+\frac{1}{2}\right)\hbar\Omega$，$\Omega=\sqrt{\omega^2+\frac{4k}{\mu}}\approx\omega+\frac{2k}{\mu\omega}$，$n_R,n_r=0,1,2,\cdots$.

6.17　氢原子处于平行的外电场 ε 和外磁场 H 中，设外场很弱，讨论 $n=2$ 的能级分裂情况.

分析　氢原子处于平行的外电场和磁场中，其电子除了具有动能和库仑能外，会因电场增加额外的电势能，因磁场增加额外的塞曼能(本题中不讨论自旋，仅考虑轨道磁矩在磁场中的能量)，这两项能量可以作微扰处理.

解　为了不失一般性，可设外电场 ε 和 H 均沿 z 方向. 因电场 ε 增加的电势能等于电场力作功的负值，取原子核处为参考零点，这部分能量为 $e\varepsilon z=e\varepsilon r\cos\theta$，电子的轨道磁矩处于磁场 H 中的能量为 $-M_zH=\omega_{\mathrm{L}}\hat{L}_z$，其中拉莫尔频率 $\omega_{\mathrm{L}}=\frac{eH}{2\mu c}$，因此体系哈密顿量写为

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}_1,\quad \hat{H}_0=\frac{\hat{p}^2}{2\mu}-\frac{e^2}{r},\quad \hat{H}_1=e\varepsilon r\cos\theta+\omega_{\mathrm{L}}\hat{L}_z. \tag{6.17-1}$$

未微扰问题就是氢原子的能量本征值问题，$n=2$ 的能级 4 重简并，适用简并

微扰，为此需要在简并态张成的子空间中，写出微扰哈密顿的矩阵. 考虑到 $\hat{L}_z$ 与微扰哈密顿对易，凡是 $\hat{L}_z$ 量子数不相同的矩阵元必定为零. 在写微扰矩阵时应将 $\hat{L}_z$ 量子数相同的简并态排在一起，从而矩阵可以分块对角化，简化计算.

微扰矩阵的分块对角化是带有普遍性的重要问题，在后面的题目中也会多次用到，值得在这里专门作一个说明，假设未微扰哈密顿的本征波函数是哈密顿量 $\hat{H}_0$ 与算符 $\hat{A}$ 、$\hat{B}$ 的共同本征态(为叙述确定起见，这里举两个算符的例子，结论可以容易的推广到多个算符的情况). 本征波函数标记为 ψ_{nab} ，其中 n 代表能量量子数，a 和 b 则代表算符 $\hat{A}$ 、$\hat{B}$ 的本征值，如果体系的能量仅与 n 有关，不同 a 和 b 指标的波函数 ψ_{nab} 就是一组简并态. 当存在微扰 $\hat{H}_1$ 时，能量的一级修正就由微扰矩阵的本征值给出. 微扰矩阵是以相同 n 指标但不同 a 和 b 指标的各个简并态作为基计算的 $\hat{H}_1$ 矩阵，其矩阵元的一般形式为

$$\langle nab|\hat{H}_1|na_1b_1\rangle. \tag{6.17-2}$$

如果算符 $\hat{A}$ 与微扰哈密顿 $\hat{H}_1$ 对易，也就是说 $[\hat{A},\hat{H}_1]=0$ ，那么该对易式在任意态间的矩阵元也必定为零，现在将对易式展开来计算矩阵元，并利用 $|nab\rangle$ 是算符 $\hat{A}$ 的本征值为 a 的本征态这一性质，那么容易看到

$$\begin{aligned}0&=\langle nab|[\hat{A},\hat{H}_1]|na_1b_1\rangle=\langle nab|\hat{A}\hat{H}_1-\hat{H}_1\hat{A}_1|na_1b_1\rangle=a\langle nab|\hat{H}_1|na_1b_1\rangle-a_1\langle nab|\hat{H}_1|na_1b_1\rangle\\&=(a-a_1)\langle nab|\hat{H}_1|na_1b_1\rangle\end{aligned} \tag{6.17-3}$$

从式(6.17-3)立刻可以看出，当 $a\neq a_1$ 时，微扰矩阵元 $\langle nab|\hat{H}_1|na_1b_1\rangle$ 必定为零，也就是说，如果算符 $\hat{A}$ 与微扰哈密顿 $\hat{H}_1$ 对易，那么所有 a 指标不相同的微扰矩阵元必为零，排列微扰矩阵时，将相同 a 指标的简并态排在一起，得到的一定是一个分块对角矩阵，每个 a 对应一个块，不同块之间没有非零的矩阵元，此时求解简并微扰的工作，就简化为在相同 n,a 指标但不同 b 指标的各个简并态间，计算 $\hat{H}_1$ 的矩阵并对角化. 相比于原始的微扰矩阵，对角化的工作量大大减轻. 如若 B 算符也与 $\hat{H}_1$ 对易，那么微扰矩阵就只剩下对角元了，简并微扰计算中就只需要计算这些对角矩阵元，而无须再做对角化的工作，这里与微扰哈密顿算符仍然保持对易的 $\hat{A}$ 算符的量子数，我们称为好量子数. 利用好量子数，实现微扰矩阵的分块对角化在简并微扰计算中是至关重要的，特别是当简并度比较高的时候，在后面的习题中(例如题 6.21 题、题 7.19、题 7.20 等)还会多次用到这一技巧.

回到本题，因为 $\hat{L}_z$ 与微扰哈密顿对易，凡是 m 指标不相同的微扰矩阵元都为零，在微扰矩阵中将相同 m 指标的态($|200\rangle$ 和 $|210\rangle$)排列在一起，就得到了一个分块对角矩阵

$$\begin{bmatrix} \langle 200|\hat{H}_1|200\rangle & \langle 200|\hat{H}_1|210\rangle & 0 & 0 \\ \langle 210|\hat{H}_1|200\rangle & \langle 210|\hat{H}_1|210\rangle & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \langle 211|\hat{H}_1|211\rangle & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \langle 21,-1|\hat{H}_1|21,-1\rangle \end{bmatrix}. \tag{6.17-4}$$

矩阵(6.17-4)中的零就是根据前面关于好量子数的分析直接填入的，并不需要复杂的计算. 矩阵(6.17-4)中的其他矩阵元，需要利用波函数的具体形式来计算，其中非零的矩阵元有

$$\begin{cases} \langle 200|\hat{H}_1|210\rangle = \langle 210|\hat{H}_1|210\rangle = -3e\varepsilon a, \\ \langle 211|\hat{H}_1|211\rangle = \hbar\omega_L, \\ \langle 21,-1|\hat{H}_1|21,-1\rangle = -\hbar\omega_L, \end{cases} \tag{6.17-5}$$

式中，$a=\dfrac{\hbar^2}{\mu e^2}$ 是氢原子的玻尔半径，因此微扰矩阵最终写为

$$\begin{bmatrix} 0 & -3e\varepsilon a & 0 & 0 \\ -3e\varepsilon a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \hbar\omega_L & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\hbar\omega_L \end{bmatrix}. \tag{6.17-6}$$

能量一级修正由式(6.17-6)中矩阵的本征值给出，由于该矩阵是分块对角的，容易求出

$$E_2^{(1)} = \pm 3e\varepsilon a, \pm\hbar\omega_L . \tag{6.17-7}$$

原来四重简并的能级劈裂为四个能级.

答　$n=2$ 能级的能量一级修正为 $\pm 3e\varepsilon a, \pm\hbar\omega_L$.

6.18　设碱金属价电子的势能为 $V(r)=-\dfrac{e^2}{r}-\dfrac{e\tau}{r^2}$，其中第二项为原子实极化的贡献，用微扰论讨论碱金属的能级.

分析　未微扰问题就是氢原子的本征值问题，微扰哈密顿量是 $-\dfrac{e\tau}{r^2}$.

解　哈密顿量写为

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}_1,\quad \hat{H}_0=\frac{\hat{p}^2}{2\mu}-\frac{e^2}{r},\quad H_1=-\frac{e\tau}{r^2}. \tag{6.18-1}$$

式中 $\hat{H}_0$ 的能量本征值和本征波函数分别写成

$$E_n^{(0)} = -\frac{1}{n^2}\left(\frac{e^2}{2a}\right) \text{和} \psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)\,, \tag{6.18-2}$$

其中 $a = \dfrac{\hbar^2}{\mu e^2}$ 是氢原子的玻尔半径.

对于 $n=1$ 的基态，能级无简并，适用非简并微扰，能量一级修正为

$$E_1^{(1)} = \langle 100|\hat{H}_1|100\rangle = -e\tau\int_0^\infty r^2 \mathrm{d}r R_{10}^*(r)\left(\frac{1}{r^2}\right)R_{10}(r) = -e\tau\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle_{10}, \tag{6.18-3}$$

对于 $n\neq 1$ 的态，能级 n^2 重简并，适用简并微扰，为此需要在简并态张成的子空间中，写出微扰哈密顿的矩阵. 其矩阵元为

$$(\hat{H}_1)_{lm,l_1m_1} = \langle nlm|\hat{H}_1|nl_1m_1\rangle\,. \tag{6.18-4}$$

由于 $\hat{H}_1$ 与角度坐标无关，式(6.18-4)中的矩阵元仅在 $l=l_1$，$m=m_1$ 时才不等于零，也就是说微扰矩阵是对角矩阵，对角元就是矩阵的本征值(当然利用题 6.17 中好量子数的分析也能得到同样的结论，这里微扰哈密顿量显然是与角动量算符对易的)，因此能量的一级修正为

$$E_{nl}^{(1)} = -e\tau\int_0^\infty r^2 \mathrm{d}r R_{nl}^*(r)\left(\frac{1}{r^2}\right)R_{nl}(r) = -e\tau\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle_{nl}, \tag{6.18-5}$$

式中 $E_{nl}^{(1)}$ 的下标 l 表明，该修正项与角量子数 l 有关，取 $n=1, l=0$ 就包括了前面 $n=1$ 的情形，现在剩下的任务就是具体求出 $\dfrac{1}{r^2}$ 的平均值，为此，引入 $u_{nl}(r) = rR_{nl}(r)$，可得

$$\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle_{nl} = \int_0^\infty \mathrm{d}r u_{nl}^*(r)\left(\frac{1}{r^2}\right)u_{nl}(r)\,. \tag{6.18-6}$$

这表明，$\dfrac{1}{r^2}$ 在三维波函数 ψ_{nlm} 中的平均值就等于其在一维波函数 u_{nl} 中的平均值，而一维波函数 u_{nl} 与对应的能量满足一维定态薛定谔方程

$$\hat{H}_{nl}u_{nl}(r) = E_{nl}u_{nl}(r)\,,\quad \hat{H}_{nl} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} - \frac{e^2}{r} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\,. \tag{6.18-7}$$

根据 Hellmann-Feynman(赫尔曼-费恩曼)定理

$$\frac{\partial}{\partial l}E_{nl} = \left\langle u_{nl}\left|\frac{\partial}{\partial l}\hat{H}_{nl}\right|u_{nl}\right\rangle, \tag{6.18-8}$$

式中右边就是 $\dfrac{(2l+1)\hbar^2}{2\mu}\left\langle\dfrac{1}{r^2}\right\rangle_{nl}$，左边 E_{nl} 就是 $\hat{H}_{nl}$ 的本征值，参考氢原子问题的求

解过程可以知道 $E_{nl}=-\frac{e^2}{2a}\cdot\frac{1}{(n_r+l+1)^2}$，$n_r=0,1,\cdots$(在氢原子能级中，将 n_r+l+1 重新记为一个整数 n，才有了氢原子 $\frac{1}{n^2}$ 型的能级公式，以及 $l=0,1,\cdots,n-1$)，因此 $\frac{\partial}{\partial l}E_{nl}=\frac{e^2}{n^3a}$，将上述讨论的结果代回式(6.18-8)中，得到

$$\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle_{nl}=\frac{1}{n^3a^2\left(l+\frac{1}{2}\right)}. \tag{6.18-9}$$

将式(6.18-9)代入式(6.18-5)，得到

$$E_{nl}^{(1)}=-e\tau\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle_{nl}=-\frac{e\tau}{n^3a^2\left(l+\frac{1}{2}\right)}. \tag{6.18-10}$$

上式是碱金属原子能级相对于氢原子能级的修正项. 根据上式可知，碱金属原子的能级与 l 有关，其能级比相应的氢原子能级要低，l 越小的能级，下降得越厉害.

答　碱金属原子的能级为 $-\frac{1}{n^2}\frac{e^2}{2a}-\frac{e\tau}{n^3a^2\left(l+\frac{1}{2}\right)}$.

6.19　氢原子的原子核实际上不是点电荷，而是

(1) 均匀分布于半径为 R 的球内；

(2) 均匀分布于半径为 R 的球壳上，求由此而引起的对氢原子1S态的能级修正.

分析　假定氢原子原子核是一个总电量为 e，半径为 R 的球形电荷分布，根据电磁学知识可以算出其在空间产生的电势分布 $\varphi_{球}$，类似地假定氢原子原子核是一个总电量为 e，半径为 R 的薄球壳电荷分布，可以算出其在空间产生的电势分布 $\varphi_{球壳}$，以 $\varphi_{球}$ 和 $\varphi_{球壳}$ 与点电荷电势分布之差作微扰计算即可得到氢原子的能级修正.

解　根据电磁学知识，

$$\varphi_{球}=\begin{cases}\dfrac{\varepsilon}{r}, & r>R\\ \dfrac{\varepsilon}{R}\left(\dfrac{3}{2}-\dfrac{r^2}{2R^2}\right), & 0<r\leqslant R\end{cases},\quad \varphi_{球壳}=\begin{cases}\dfrac{\varepsilon}{r}, & r>R\\ \dfrac{\varepsilon}{R}, & 0<r\leqslant R\end{cases}, \tag{6.19-1}$$

体系的哈密顿量

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}_1,\quad \hat{H}_0=\frac{\hat{p}^2}{2\mu}-\frac{e^2}{r},\quad \hat{H}_1=\Delta V, \tag{6.19-2}$$

$$\Delta V_{球}=-e\varphi_{球}-\left(-\frac{e^2}{r}\right)=\begin{cases}0, & r>R\\ \dfrac{e^2}{r}-\dfrac{3e^2}{2R}+\dfrac{e^2r^2}{2R^3}, & 0<r\leqslant R\end{cases}, \tag{6.19-3}$$

$$\Delta V_{球壳}=-e\varphi_{球壳}-\left(-\frac{e^2}{r}\right)=\begin{cases}0, & r>R\\ \dfrac{e^2}{r}-\dfrac{e^2}{R}, & 0<r\leqslant R\end{cases}. \tag{6.19-4}$$

$\hat{H}_0$ 就是氢原子哈密顿量，1s 能级不简并，其波函数写为

$$\psi_{100}(r,\theta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a}}. \tag{6.19-5}$$

式中 $a=\dfrac{\hbar^2}{\mu e^2}$ 是氢原子的玻尔半径. 根据非简并微扰的标准作法，1s 能级的一级能量修正为

$$\Delta E^{(1)}=\int_0^{\infty}r^2\mathrm{d}r\int_0^{\pi}\sin\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\psi_{100}^{*}(r,\theta,\varphi)(\Delta V)\psi_{100}(r,\theta,\varphi). \tag{6.19-6}$$

代入 $\Delta V_{球}$ 和 $\Delta V_{球壳}$ 的具体形式，准至 $\dfrac{R^2}{a^2}$，可以分别算得

$$\Delta E_{球}^{(1)}=\frac{4}{5}\left(\frac{R^2}{a^2}\right)\left(\frac{e^2}{2a}\right), \tag{6.19-7}$$

$$\Delta E_{球壳}^{(1)}=\frac{4}{3}\left(\frac{R^2}{a^2}\right)\left(\frac{e^2}{2a}\right). \tag{6.19-8}$$

在完成积分计算的过程中，如果注意到积分变量 $\dfrac{2r}{a}\leqslant\dfrac{2R}{a}\ll 1$，因而 $\mathrm{e}^{\frac{2r}{a}}\approx 1$，将能大大减少计算量.

答　球形电荷分布情形下的能级修正为 $\dfrac{4}{5}\left(\dfrac{R^2}{a^2}\right)\left(\dfrac{e^2}{2a}\right)$，球壳分布情形下的能级修正为 $\dfrac{4}{3}\left(\dfrac{R^2}{a^2}\right)\left(\dfrac{e^2}{2a}\right)$.

6.20　有机分子 C_2H_6 能作“扭转运动”，转过 φ 角的位能为 $V(\varphi)=u_0(1-\cos 3\varphi)$，求其较低的扭转振动能级.

分析　有机分子C_2H_6的扭转运动，可视为一个平面转子的转动，假定转子所在的平面为x-y平面，转轴为z轴. 转子的动能为$\hat{T}=\dfrac{\hat{L}_z^2}{2I}$，其中$I$是转子的转动惯量，$\hat{L}_z$是沿转轴方向的角动量，假定平面内的转角用$\varphi$表示，那么$\hat{L}_z=\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\partial}{\partial\varphi}$，转子处于势场$V(\varphi)=u_0(1-\cos 3\varphi)$中，体系较低的扭转振动能级应该代表的是转子在平衡位置附近的小振动. 将势场V中的φ理解为在平衡位置附近的转角并作小角度展开，得到$V(\varphi)\approx\dfrac{9u_0}{2}\varphi^2$，与前面的动能项合并，求解能量本征值问题即可得到扭转振动能级.

解　根据分析，体系的哈密顿量表示为

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varphi^2}+\frac{9u_0}{2}\varphi^2. \tag{6.20-1}$$

式(6.20-1)与一个质量为I，圆频率为$\omega=3\sqrt{\dfrac{u_0}{I}}$的一维谐振子相当，因此，体系的能量本征值为

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\sqrt{\frac{9u_0}{I}}\ ,\quad n=0,1,2,\cdots. \tag{6.20-2}$$

答　体系较低的扭转振动能级为$\left(n+\dfrac{1}{2}\right)\hbar\sqrt{\dfrac{9u_0}{I}}$，$n=0,1,2,\cdots$.

6.21　在计入了质量随速度改变的相对论修正以后$\left(\text{到}\dfrac{v^2}{c^2}\text{项}\right)$，求氢原子的能级修正. $\left(\text{已知}\left\langle\dfrac{1}{r}\right\rangle_{nl}=\dfrac{Z}{a_0}\dfrac{1}{n^2},\ \left\langle\dfrac{1}{r^2}\right\rangle_{nl}=\dfrac{Z}{a_0^2}\dfrac{1}{n^3\left(l+\frac{1}{2}\right)}\right)$

分析　相对论的动能公式为$T=\sqrt{p^2c^2+\mu^2c^4}-\mu c^2$，在$p^2c^2\ll\mu^2c^4$的非相对论极限下，可以展开为

$$T\approx\frac{p^2}{2\mu}-\frac{p^4}{8\mu^3c^2}\ , \tag{6.21-1}$$

式中$-\dfrac{p^4}{8\mu^3c^2}$就是所谓的相对论动能修正，以此为微扰，按照微扰论的标准程序即可得到相应的能级修正.

解　计入相对论动能修正后，氢原子的哈密顿量写为

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}_1,\quad \hat{H}_0=\frac{\hat{p}^2}{2\mu}+V(r),\quad V(r)=-\frac{e^2}{r},\quad \hat{H}_1=-\frac{\hat{p}^4}{8\mu^3c^2}. \tag{6.21-2}$$

$\hat{H}_0$ 的能量本征值为

$$E_n^{(0)}=-\frac{1}{n^2}\left(\frac{e^2}{2a}\right),\quad n=1,2,3,\cdots. \tag{6.21-3}$$

式中 $a=\dfrac{\hbar^2}{\mu e^2}$ 是氢原子的玻尔半径，对于 $n=1$ 的基态，能级无简并，适用非简并微扰，能量一级修正为

$$E_1^{(1)}=-\frac{1}{8\mu^3c^2}\langle 100|\hat{p}^4|100\rangle. \tag{6.21-4}$$

对于 $n\neq 1$ 的态，能级为 n^2 重简并，适用简并微扰，为此需要在简并态张成的子空间中，写出微扰哈密顿的矩阵，其矩阵元为

$$(\hat{H}_1)_{lm,l_1m_1}=-\frac{1}{8\mu^3c^2}\langle nlm|\hat{p}^4|nl_1m_1\rangle. \tag{6.21-5}$$

由于 $\hat{p}^4$ 与角动量算符 $\hat{L}^2$ 和 $\hat{L}_z$ 都对易，因此式(6.21-5)的矩阵元仅在 $l=l_1, m=m_1$ 时才不等于零，也就是说微扰矩阵是对角矩阵，对角元就是矩阵的本征值(参看题 6.17)，因此能量的一级修正为

$$E_{nl}^{(1)}=-\frac{1}{8\mu^3c^2}\langle nlm|\hat{p}^4|nlm\rangle, \tag{6.21-6}$$

式中 $E_{nl}^{(1)}$ 的下标 l 表明该修正项与角量子数 l 有关(由于球对称性，矩阵元显然与 m 无关)；式中取 $n=1, l=0, m=0$ 就包括了 $n=1$ 情形中的式(6.21-4). 现在剩下的任务就是求 $\langle nlm|\hat{p}^4|nlm\rangle$.

为此考虑算符等式

$$\begin{aligned}\hat{H}_0^2&=\frac{\hat{p}^4}{4\mu^2}+\frac{\hat{p}^2}{2\mu}V+V\frac{\hat{p}^2}{2\mu}+V^2=\frac{\hat{p}^4}{4\mu^2}+(\hat{H}_0-V)V+V(\hat{H}_0-V)+V^2\\&=\frac{\hat{p}^4}{4\mu^2}+\hat{H}_0V+V\hat{H}_0-V^2,\end{aligned} \tag{6.21-7}$$

因此

$$\hat{p}^4=4\mu^2(\hat{H}_0^2-\hat{H}_0V-V\hat{H}_0+V^2). \tag{6.21-8}$$

$$\begin{aligned}\langle nlm|\hat{p}^4|nlm\rangle &= 4\mu^2\langle nlm|\hat{H}_0^2-\hat{H}_0V-V\hat{H}_0+V^2|nlm\rangle \\ &= 4\mu^2[(E_n^{(0)})^2-2E_n^{(0)}\langle nlm|V|nlm\rangle+\langle nlm|V^2|nlm\rangle] \\ &= 4\mu^2[(E_n^{(0)})^2-2E_n^{(0)}\langle nlm|V|nlm\rangle+e^4\langle nlm|\frac{1}{r^2}|nlm\rangle].\end{aligned} \tag{6.21-9}$$

利用位力定理 $2\langle T\rangle=-\langle V\rangle$，$\langle T\rangle+\langle V\rangle=E_n^{(0)}$，以及题 6.18 中得到的 $\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle=\frac{1}{n^3a^2\left(l+\frac{1}{2}\right)}$ 可以得到

$$\langle nlm|\hat{p}^4|nlm\rangle=4\mu^2\left[-\frac{3e^4}{4n^4a^2}+\frac{e^4}{n^3a^2\left(l+\frac{1}{2}\right)}\right]. \tag{6.21-10}$$

将式(6.21-10)代入式(6.21-6)得到

$$E_{nl}^{(1)}=-\frac{1}{2\mu c^2}\frac{e^4}{n^4a^2}\left(\frac{n}{l+\frac{1}{2}}-\frac{3}{4}\right). \tag{6.21-11}$$

答　计入相对论动能修正后，氢原子能级的修正为 $-\frac{1}{2\mu c^2}\frac{e^4}{n^4a^2}\left(\frac{n}{l+\frac{1}{2}}-\frac{3}{4}\right)$.

6.22　试用变分法求一维谐振子基态能量近似值，取试探波函数为如下形式：

$$\psi(x)=\begin{cases}A(a^2-x^2)^2, & |x|\leqslant a\\ 0, & |x|>a\end{cases},$$

其中 A 是归一化数，a 作为变分参数.

分析　先完成归一化，然后计算哈密顿算符在试探波函数下的平均值，最后求变分极值.

解　由归一化条件，可得

$$A=\sqrt{\frac{315}{256a^9}},\quad \psi(x)=\begin{cases}\sqrt{\frac{315}{256a^9}}(a^2-x^2)^2, & |x|\leqslant a\\ 0, & |x|>a\end{cases}. \tag{6.22-1}$$

哈密顿算符在试探波函数下的平均值为

$$I(a)=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\psi^{*}\left(-\frac{\hbar^{2}}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^{2}}{\mathrm{d}x^{2}}+\frac{1}{2}\mu\omega^{2}x^{2}\right)\psi\,. \tag{6.22-2}$$

积分可得

$$I(a)=\frac{3\hbar^{2}}{2\mu a^{2}}+\frac{1}{22}\mu\omega^{2}a^{2}\,. \tag{6.22-3}$$

最佳的参数 a_0 由极值条件决定

$$\frac{\partial}{\partial a}I(a)=0\,,\quad a_0=\sqrt{\frac{\sqrt{33}\hbar}{\mu\omega}}\,. \tag{6.22-4}$$

代入式(6.22-3)得到 $I(a_0)$ 即为基态能量的近似值，具体写成

$$E_0=I(a_0)=\frac{\sqrt{33}}{11}\hbar\omega\,. \tag{6.22-5}$$

可以看到变分得到的基态能大于严格解 $\frac{1}{2}\hbar\omega$.

答　基态能量的近似值为 $\frac{\sqrt{33}}{11}\hbar\omega$.

6.23　用试探波函数 $\psi(x)=\frac{\sqrt{\alpha}}{\sqrt[4]{\pi}}\mathrm{e}^{-\frac{\alpha^{2}x^{2}}{2}}$，其中 α 作为变分参数，求一维势场 $V(x)=\frac{kx^{2}}{2}$ 和 $V(x)=kx^{4}$ 中粒子的基态能量.

分析　题目中已给出归一化的试探波函数，只需计算哈密顿算符在试探波函数下的平均值，然后求变分极值.

解　哈密顿算符在试探波函数下的平均值为

$$I(\alpha)=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\psi^{*}\left[-\frac{\hbar^{2}}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^{2}}{\mathrm{d}x^{2}}+V(x)\right]\psi\,. \tag{6.23-1}$$

就 $V(x)=\frac{1}{2}kx^{2}$ 和 $V(x)=kx^{4}$ 两种情形，分别完成积分得到

$$I(\alpha)=\frac{\hbar^{2}\alpha^{2}}{4\mu}+\frac{k}{4\alpha^{2}}\quad\text{和}\quad I(\alpha)=\frac{\hbar^{2}\alpha^{2}}{4\mu}+\frac{3k}{4\alpha^{4}}\,, \tag{6.23-2}$$

最佳的参数 α_0 由极值条件 $\frac{\partial}{\partial\alpha}I(\alpha)=0$ 决定，在两种情形下，分别得到

$$\alpha_0=\sqrt[4]{\frac{\mu k}{\hbar^{2}}}\quad\text{和}\quad\alpha_0=\sqrt[4]{\frac{6\mu k}{\hbar^{2}}}\,. \tag{6.23-3}$$

代入式(6.23-2)得到 $I(\alpha_0)$ 即为基态能量的近似值，在两种情形下，分别算得

$$E_0=\frac{1}{2}\hbar\sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad \text{和} \quad E_0=\left(\frac{3}{4}\right)^{\frac{4}{3}}\sqrt[3]{k}\left(\frac{\hbar^2}{\mu}\right)^{\frac{2}{3}}. \tag{6.23-4}$$

答　基态能量的近似值分别为 $\frac{1}{2}\hbar\sqrt{\frac{k}{\mu}}$ 和 $\left(\frac{3}{4}\right)^{\frac{4}{3}}\sqrt[3]{k}\left(\frac{\hbar^2}{\mu}\right)^{\frac{2}{3}}$.

第七章　自　　旋

7.1　验证下列各式：

(1) 如 $\alpha=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$，$\beta=\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$，则 $\hat{\sigma}_x\alpha=\beta$，$\hat{\sigma}_y\alpha=\mathrm{i}\beta$，$\hat{\sigma}_z\alpha=\alpha$，$\hat{\sigma}_x\beta=\alpha$，$\hat{\sigma}_y\beta=-\mathrm{i}\alpha$，$\hat{\sigma}_z\beta=-\beta$；

(2) $\hat{\sigma}_\alpha\hat{\sigma}_\beta-\hat{\sigma}_\beta\hat{\sigma}_\alpha=2\mathrm{i}\hat{\sigma}_\gamma$，$\hat{\sigma}_\alpha\hat{\sigma}_\beta+\hat{\sigma}_\beta\hat{\sigma}_\alpha=2\delta_{\alpha\beta}$，$(\alpha,\beta,\gamma=x,y,z$并循环)；

(3) $\hat{\sigma}_\alpha\hat{\sigma}_\beta=\mathrm{i}\hat{\sigma}_\gamma$，$\hat{\sigma}_\alpha\hat{\sigma}_\beta\hat{\sigma}_\gamma=\mathrm{i}$，$(\alpha,\beta,\gamma=x,y,z$并循环$)$.

分析　本题为泡利矩阵的简单代数运算，直接应用泡利矩阵 $\hat{\sigma}_x=\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}$，$\hat{\sigma}_y=\begin{bmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{bmatrix}$，$\hat{\sigma}_z=\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix}$，即可证明.

证明　(1) $\hat{\sigma}_x\alpha=\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}=\beta$，$\hat{\sigma}_y\alpha=\begin{bmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\\mathrm{i}\end{bmatrix}=\mathrm{i}\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}=\mathrm{i}\beta$，

$$\hat{\sigma}_z\alpha=\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}=\alpha,\quad \hat{\sigma}_x\beta=\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}=\alpha,$$

$$\hat{\sigma}_y\beta=\begin{bmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-\mathrm{i}\\0\end{bmatrix}=-\mathrm{i}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}=-\mathrm{i}\alpha;\quad \hat{\sigma}_z\beta=\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}=-1\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}=-\beta.$$

(2) 因为

$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y=\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathrm{i}&0\\0&-\mathrm{i}\end{bmatrix}=\mathrm{i}\hat{\sigma}_z,\tag{7.1-1}$$

$$\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x=\begin{bmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-\mathrm{i}&0\\0&\mathrm{i}\end{bmatrix}=-\mathrm{i}\hat{\sigma}_z,\tag{7.1-2}$$

$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_x=\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1&0\\0&1\end{bmatrix}=1,\tag{7.1-3}$$

式(7.1-1)、(7.1-2)和(7.1-3)中，并不涉及空间的特殊取向，所以下标 x,y,z 可以轮换，当然这一点也可以通过直接计算验证，有了式(7.1-1)、(7.1-2)和(7.1-3)，原题(2)中其他各式都可以直接写出，例如 $\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y-\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x=2\mathrm{i}\hat{\sigma}_z$，即可写出

$$\hat{\sigma}_\alpha\hat{\sigma}_\beta-\hat{\sigma}_\beta\hat{\sigma}_\alpha=2\mathrm{i}\hat{\sigma}_\gamma,\quad(\alpha,\beta,\gamma=x,y,z\text{并循环});$$

由 $\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_x=1$，同理 $\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_y=1$，$\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_z=1$，与 $\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y=\mathrm{i}\hat{\sigma}_z$，$\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x=-\mathrm{i}\hat{\sigma}_z$，即可得到

$$\hat{\sigma}_\alpha\hat{\sigma}_\beta+\hat{\sigma}_\beta\hat{\sigma}_\alpha=2\delta_{\alpha\beta},\quad(\alpha,\beta,\gamma=x,y,z\text{并循环});$$

(3) 由 $\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y=\mathrm{i}\hat{\sigma}_z$，同理可得 $\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z=\mathrm{i}\hat{\sigma}_x$，$\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x=\mathrm{i}\hat{\sigma}_y$，即可得 $\hat{\sigma}_\alpha\hat{\sigma}_\beta=\mathrm{i}\hat{\sigma}_\gamma$ 和 $\hat{\sigma}_\alpha\hat{\sigma}_\beta\hat{\sigma}_\gamma=\mathrm{i}$，$(\alpha,\beta,\gamma=x,y,z\text{并循环})$.

证毕.

7.2　如令 $\hat{\sigma}_\pm=\dfrac{1}{2}(\hat{\sigma}_x\pm\mathrm{i}\hat{\sigma}_y)$，证明：$(\hat{\sigma}_\pm)^2=0$.

分析　利用 $\hat{\sigma}_x=\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}$，$\hat{\sigma}_y=\begin{bmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{bmatrix}$，$\hat{\sigma}_z=\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix}$，即可证明.

证明
$$(\hat{\sigma}_\pm)^2=\frac{1}{4}(\hat{\sigma}_x\pm\mathrm{i}\hat{\sigma}_y)^2=\frac{1}{4}[(\hat{\sigma}_x)^2-(\hat{\sigma}_y)^2\pm\mathrm{i}(\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y+\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x)]$$
$$=\frac{1}{4}[1-1\pm\mathrm{i}\times0]=0.$$

证毕.

7.3　求在 σ_z 表象中，$\hat{\sigma}_x,\hat{\sigma}_y,\hat{\sigma}_z$ 以及 $\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{n}$ 的归一化本征态.其中

$$\boldsymbol{n}=(\sin\theta\cos\varphi,\sin\theta\sin\varphi,\cos\theta)$$

是 (θ,φ) 方向的单位矢量，在 $\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{n}$ 本征态 σ_z 取哪些值，相应的概率有多大?

分析　在 σ_z 表象下写出各算符的矩阵，按线性代数的标准程序可求出相应的本征矢量.

解　$\hat{\sigma}_x=\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}$，本征值与本征矢量为 $+1,\dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}$；$-1,\dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\-1\end{bmatrix}$.　(7.3-1)

$\hat{\sigma}_y=\begin{bmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{bmatrix}$，本征值与本征矢量为 $+1,\dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\\mathrm{i}\end{bmatrix}$；$-1,\dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\-\mathrm{i}\end{bmatrix}$.　(7.3-2)

$\hat{\sigma}_z=\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix}$，本征值与本征矢量为 $+1,\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$；$-1,\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$.　(7.3-3)

$$\hat{\sigma}_n=\hat{\sigma}_x\sin\theta\cos\varphi+\hat{\sigma}_y\sin\theta\sin\varphi+\hat{\sigma}_z\cos\theta=\begin{bmatrix}\cos\theta&\sin\theta\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\\\sin\theta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}&-\cos\theta\end{bmatrix},\quad(7.3\text{-}4)$$

$\hat{\sigma}_n$ 的本征值与本征矢量为

$$+1,\begin{bmatrix}\left(\cos\dfrac{\theta}{2}\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}\end{bmatrix};\quad -1,\begin{bmatrix}\left(\sin\dfrac{\theta}{2}\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\\ -\cos\dfrac{\theta}{2}\end{bmatrix}. \tag{7.3-5}$$

$\hat{\sigma}_z$ 的本征值是 ±1，因此在 $\hat{\sigma}_n$ 的本征态中，$\hat{\sigma}_z$ 的取值只能是 ±1，为得到相应的取值概率，需要将 $\hat{\sigma}_n$ 的本征态用 $\hat{\sigma}_z$ 的本征态展开，对于 $\hat{\sigma}_n$ 的本征值为 +1 的本征态，$\hat{\sigma}_z$ 取值 ±1 的概率分别为 $\cos^2\dfrac{\theta}{2}$ 和 $\sin^2\dfrac{\theta}{2}$；对于 $\hat{\sigma}_n$ 的本征值为 −1 的本征态，$\hat{\sigma}_z$ 取值 ±1 的概率分别为 $\sin^2\dfrac{\theta}{2}$ 和 $\cos^2\dfrac{\theta}{2}$.

答　对于 $\hat{\sigma}_n$ 的本征值为 +1 的本征态，$\hat{\sigma}_z$ 取值 ±1 的概率分别为 $\cos^2\dfrac{\theta}{2}$ 和 $\sin^2\dfrac{\theta}{2}$；对于 $\hat{\sigma}_n$ 的本征值为 −1 的本征态，$\hat{\sigma}_z$ 取值 ±1 的概率分别为 $\sin^2\dfrac{\theta}{2}$ 和 $\cos^2\dfrac{\theta}{2}$.

7.4　证明恒等式：$(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\boldsymbol{A}})(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\boldsymbol{B}})=(\hat{\boldsymbol{A}}\cdot\hat{\boldsymbol{B}})+\mathrm{i}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot(\hat{\boldsymbol{A}}\times\hat{\boldsymbol{B}})$，其中 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{B}}$ 是与 $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ 对易的算符.

分析　利用 $\hat{\sigma}_x=\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}$，$\hat{\sigma}_y=\begin{bmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{bmatrix}$，$\hat{\sigma}_z=\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix}$，即可证明.

证明

$$\begin{aligned}(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\boldsymbol{A}})(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\boldsymbol{B}})&=(\hat{\sigma}_x\hat{A}_x+\hat{\sigma}_y\hat{A}_y+\hat{\sigma}_z\hat{A}_z)(\hat{\sigma}_x\hat{B}_x+\hat{\sigma}_y\hat{B}_y+\hat{\sigma}_z\hat{B}_z)\\&=\hat{A}_x\hat{B}_x+\hat{A}_y\hat{B}_y+\hat{A}_z\hat{B}_z+\mathrm{i}\hat{\sigma}_z(\hat{A}_x\hat{B}_y-\hat{A}_y\hat{B}_x)+\mathrm{i}\hat{\sigma}_y(\hat{A}_z\hat{B}_x-\hat{A}_x\hat{B}_z)+\mathrm{i}\hat{\sigma}_x(\hat{A}_y\hat{B}_z-\hat{A}_z\hat{B}_y)\\&=(\hat{\boldsymbol{A}}\cdot\hat{\boldsymbol{B}})+\mathrm{i}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot(\hat{\boldsymbol{A}}\times\hat{\boldsymbol{B}}).\end{aligned}$$

证毕.

7.5　证明找不到一个表象，在其中(1)三个泡利矩阵均为实矩阵，或(2)两个为纯虚矩阵而一个为实矩阵.

分析　利用 $\hat{\sigma}_x=\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}$，$\hat{\sigma}_y=\begin{bmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{bmatrix}$，$\hat{\sigma}_z=\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix}$，得 $\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z=\mathrm{i}$，即可证明.

证明　由分析 $\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z=\mathrm{i}$，在表象变换下保持不变，若存在某个表象，使得三个泡利矩阵均为实矩阵或者两个泡利矩阵为纯虚矩阵另一个为实矩阵，那么三

个泡利矩阵的乘积必为实数，即 $\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z=\mathrm{i}$ 无法成立，因此三个泡利矩阵均为实矩阵，或者两个泡利矩阵为纯虚矩阵另一个为实矩阵，是不可能的.

证毕.

7.6 如电子处于 $\hat{S}_x$ 的本征态，试证明在此态中，$\hat{S}_y$ 取值为 $\frac{\hbar}{2}$，或者 $-\frac{\hbar}{2}$ 的概率各一半，$\hat{S}_z$ 亦同样.

分析 将自旋算符 $\hat{S}_x$ 的本征态分别用自旋算符 $\hat{S}_y$ 和 $\hat{S}_z$ 的本征态展开即可.

证明 自旋算符与相应的泡利矩阵有相同的本征态，引用题 7.3 的结果，把自旋算符 $\hat{S}_x$ 本征值为 $\frac{\hbar}{2}$ (泡利矩阵 $\hat{\sigma}_x$ 本征值为 $+1$)的本征态用自旋算符 $\hat{S}_y$ 的本征态展开得到

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}=\frac{1-\mathrm{i}}{2}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\\mathrm{i}\end{bmatrix}+\frac{1+\mathrm{i}}{2}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\-\mathrm{i}\end{bmatrix}. \tag{7.6-1}$$

由展开系数的模平方可知 $\hat{S}_y$ 取值 $\pm\frac{\hbar}{2}$ 的概率各半，把自旋算符 $\hat{S}_x$ 本征值为 $\frac{\hbar}{2}$ 的本征态用自旋算符 $\hat{S}_z$ 的本征态展开得到

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}+\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}. \tag{7.6-2}$$

由展开系数的模平方可知 $\hat{S}_z$ 取值 $\pm\frac{\hbar}{2}$ 的概率各半，对于自旋算符 $\hat{S}_x$ 本征值为 $-\frac{\hbar}{2}$ 的本征态可以作类似的处理，结果是一样的.

证毕.

7.7 一自旋为 $\frac{\hbar}{2}$ 的体系，在 $t=0$ 时，处于本征值为 $\frac{\hbar}{2}$ 的 $\hat{S}_x$ 本征态，将其置于 $H=(0,0,H_z)$ 的磁场中，求 t 时刻测量 $\hat{S}_x$ 取 $-\frac{\hbar}{2}$ 的概率.

分析 自旋处于磁场中，仅考虑自旋空间的运动，其哈密顿量就是自旋磁矩的塞曼能，根据哈密顿量的本征值和本征态以及初始条件，可以求出 t 时刻的波函数，进而可求出 t 时刻测量某个自旋分量的概率，对于自旋 $\frac{1}{2}$ 的体系，其自旋算符的本征态就是相应的泡利矩阵的本征态.

解　一个自旋$\frac{1}{2}$的体系，其自旋磁矩为可以一般地表示为$\boldsymbol{M}_S = M_0\boldsymbol{\sigma}$，其中$M_0$是一个常量，体系的哈密顿量为

$$\hat{H} = -\boldsymbol{M}_S \cdot \boldsymbol{H} = -M_0 H_z \hat{\sigma}_z , \tag{7.7-1}$$

哈密顿量的本征值和本征态为

$$-M_0 H_z, \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \text{和} M_0 H_z, \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \tag{7.7-2}$$

因此t时刻的波函数为

$$\psi(t) = c_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} + c_2 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}, \quad \omega = \frac{M_0 H_z}{\hbar}. \tag{7.7-3}$$

根据初始条件

$$\psi(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}. \tag{7.7-4}$$

可以求得$c_1 = c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$，$t$时刻的波函数成为

$$\psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} \\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \end{bmatrix}. \tag{7.7-5}$$

为求出t时刻测量$S_x = -\frac{\hbar}{2}$的概率，将式(7.7-5)中的波函数用$\hat{S}_x$算符的本征态展开，得到

$$\psi(t) = a_1 \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} + a_2 \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}. \tag{7.7-6}$$

解得，$a_2 = \mathrm{i}\sin\omega t$测量$S_x = -\frac{\hbar}{2}$的概率为$|a_2|^2 = \sin^2\omega t$.

答　t时刻测量$S_x = -\frac{\hbar}{2}$的概率为$|a_2|^2 = \sin^2\omega t$.

7.8　对于自旋为$\frac{\hbar}{2}$的体系，求$\hat{S}_x + \hat{S}_y$的本征值和本征态，在具有较小的本征值所对应的本征态中，测量$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}$的概率多大?

分析　先求出算符$\hat{S}_x + \hat{S}_y$的本征值和本征态，再将其中较小本征值的本征态$\hat{S}_x$的本征态展开即可，对于自旋$\frac{1}{2}$的体系，其自旋算符的本征态就是相应的泡利

矩阵的本征态.

解　在$(\hat{S}^2,\hat{S}_z)$表象下，自旋算符$\hat{S}_x+\hat{S}_y$表示为

$$\hat{S}_x+\hat{S}_y=\frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix}0 & 1-\mathrm{i}\\ 1+\mathrm{i} & 0\end{bmatrix}, \tag{7.8-1}$$

相应的本征值与本征矢量为

$$\frac{\sqrt{2}\hbar}{2},\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1-\mathrm{i}\\ \sqrt{2}\end{bmatrix}\text{和}-\frac{\sqrt{2}\hbar}{2},\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1-\mathrm{i}\\ \sqrt{2}\end{bmatrix}. \tag{7.8-2}$$

将较小本征值的本征态用$\hat{S}_x$的本征态展开，得到

$$\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1-\mathrm{i}\\ -\sqrt{2}\end{bmatrix}=a_1\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ 1\end{bmatrix}+a_2\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ -1\end{bmatrix}, \tag{7.8-3}$$

解得$a_1=\dfrac{1-\sqrt{2}-\mathrm{i}}{2\sqrt{2}}$，测量$S_x=\dfrac{\hbar}{2}$的概率为$|a_1|^2=\dfrac{2-\sqrt{2}}{4}$.

答　测量$S_x=\dfrac{\hbar}{2}$的概率为$\dfrac{2-\sqrt{2}}{4}$.

7.9　设电子处S_x取$\dfrac{\hbar}{2}$的本征态，问测量S_x能得到哪些值？相应的概率多大？

分析　将$S_z=\dfrac{\hbar}{2}$的本征态用$\hat{S}_x$的本征态展开即可，对于自旋$\dfrac{1}{2}$的体系，其自旋算符的本征态就是相应的泡利矩阵的本征态.

解　在$(\hat{S}^2,\hat{S}_z)$表象下，$S_z=\dfrac{\hbar}{2}$的本征态表示为

$$\psi=\begin{bmatrix}1\\ 0\end{bmatrix}. \tag{7.9-1}$$

由于S_x的本征值为$\pm\dfrac{\hbar}{2}$，因此在态ψ中测量S_x所能得到的值只可能是$\pm\dfrac{\hbar}{2}$.

为求相应的概率，需要将ψ用$\hat{S}_x$的本征态展开，得到

$$\begin{bmatrix}1\\ 0\end{bmatrix}=a_1\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ 1\end{bmatrix}+a_2\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ -1\end{bmatrix}. \tag{7.9-2}$$

解得，$a_1=a_2=\dfrac{1}{\sqrt{2}}$，$|a_1|^2=|a_2|^2=\dfrac{1}{2}$，因此测量$S_x$得到$\pm\dfrac{\hbar}{2}$的概率各为50%.

答　测量S_x只可能得到$\pm\dfrac{\hbar}{2}$，相应的概率各半.

7.10　证明：$\theta_{ij}=\dfrac{1}{4}(1-\boldsymbol{\sigma}_i\cdot\boldsymbol{\sigma}_j)=\begin{cases}0, & (ij\text{两电子自旋平行})\\ 1, & (ij\text{两电子自旋反平行})\end{cases}$，其中$\boldsymbol{\sigma}_i=\dfrac{2}{\hbar}\hat{\boldsymbol{S}}_i$，$\boldsymbol{\sigma}_j=\dfrac{2}{\hbar}\hat{\boldsymbol{S}}_j$，并取$\hbar=1$的单位制.

分析　两电子自旋角动量相加所得到的总自旋角动量量子数只能是1或者0，分别称为两电子自旋平行或反平行，利用这一性质，原题得证.

证明

$$\theta_{ij}=\frac{1}{4}(1-\boldsymbol{\sigma}_i\cdot\boldsymbol{\sigma}_j)=\frac{1}{4}(1-4\boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_j)=\frac{1}{4}\{1-2[(\boldsymbol{S}_i+\boldsymbol{S}_j)^2-\boldsymbol{S}_i^2-\boldsymbol{S}_j^2]\}\,, \tag{7.10-1}$$

$(\boldsymbol{S}_i+\boldsymbol{S}_j)^2$、$\boldsymbol{S}_i^2$、$\boldsymbol{S}_j^2$彼此对易，存在共同本征态，在此共同本征态中，单电子自旋量子数为$\dfrac{1}{2}$，两电子总自旋量子数只能是1或者0，因此

$$\boldsymbol{S}_i^2=\frac{1}{2}\times\left(\frac{1}{2}+1\right)=\frac{3}{4}\,,\quad \boldsymbol{S}_j^2=\frac{1}{2}\times\left(\frac{1}{2}+1\right)=\frac{3}{4}\,, \tag{7.10-2}$$

$$(\boldsymbol{S}_i+\boldsymbol{S}_j)^2=\begin{cases}1\times(1+1)=2, & i,j\text{两电子自旋平行}\\ 0, & i,j\text{两电子自旋反平行}\end{cases}, \tag{7.10-3}$$

将式(7.10-2)和式(7.10-3)代入式(7.10-1)，即得

$$\theta_{ij}=\begin{cases}0, & ij\text{两电子自旋平行}\\ 1, & ij\text{两电子自旋反平行}\end{cases}. \tag{7.10-4}$$

证毕.

7.11　求在自旋$\hat{S}_z=\dfrac{\hbar}{2}$的状态中，$\hat{S}_x$和$\hat{S}_y$的测不准关系$\overline{(\Delta S_x)^2}\cdot\overline{(\Delta S_y)^2}=?$

分析　假定$|Sm\rangle$是自旋角动量算符$\hat{S}^2$和$\hat{S}_z$的共同本征态，利用角动量算符的对易关系，可以证明在此状态中自旋算符$\hat{S}_x$和$\hat{S}_y$的平均值都是零，进而可以求出题中所要求的不确定关系式.

解　根据角动量算符的对易关系

$$\hat{S}_y\hat{S}_z-\hat{S}_z\hat{S}_y=\mathrm{i}\hbar\hat{S}_x\,, \tag{7.11-1}$$

可得

$$\begin{aligned}\langle Sm|\hat{S}_x|Sm\rangle&=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle Sm|\hat{S}_y\hat{S}_z-\hat{S}_z\hat{S}_y|Sm\rangle\\ &=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(m\hbar\langle Sm|\hat{S}_y|Sm\rangle-\langle Sm|\hat{S}_y|Sm\rangle)=0.\end{aligned} \tag{7.11-2}$$

类似地，利用对易关系 $\hat{S}_z\hat{S}_x-\hat{S}_x\hat{S}_z=\mathrm{i}\hbar\hat{S}_y$，可以证明 $\langle Sm|\hat{S}_y|Sm\rangle=0$．容易证明

$$\langle Sm|\hat{S}_x^2+\hat{S}_y^2|Sm\rangle=\langle Sm|\hat{S}^2-\hat{S}_z^2|Sm\rangle=[S(S+1)-m^2]\hbar^2. \tag{7.11-3}$$

根据对称性

$$\langle Sm|\hat{S}_x^2|Sm\rangle=\langle Sm|\hat{S}_y^2|Sm\rangle=\frac{1}{2}[S(S+1)-m^2]\hbar^2. \tag{7.11-4}$$

根据上述结论，易得

$$\overline{\Delta S_x^2}=\langle Sm|\hat{S}_x^2|Sm\rangle-(\langle Sm|\hat{S}_x|Sm\rangle)^2=\frac{1}{2}[S(S+1)-m^2]\hbar^2, \tag{7.11-5}$$

$$\overline{\Delta S_y^2}=\langle Sm|\hat{S}_y^2|Sm\rangle-(\langle Sm|\hat{S}_y|Sm\rangle)^2=\frac{1}{2}[S(S+1)-m^2]\hbar^2, \tag{7.11-6}$$

$$\overline{\Delta S_x^2}\cdot\overline{\Delta S_y^2}=\frac{1}{4}[S(S+1)-m^2]\hbar^2. \tag{7.11-7}$$

代入题设条件，$S=\frac{1}{2},m=\frac{1}{2}$，得到

$$\overline{\Delta S_x^2}\cdot\overline{\Delta S_y^2}=\frac{\hbar^2}{16}. \tag{7.11-8}$$

答　$\overline{\Delta S_x^2}\cdot\overline{\Delta S_y^2}=\frac{\hbar^2}{16}$.

7.12　证明：在 J_z 的本征态，$\langle J_x\rangle=\langle J_y\rangle=0$.

分析　此题与题 7.11 类似，利用角动量算符的对易关系可证.

证明　假定 $|Jm\rangle$ 是角动量算符 $\hat{J}^2$ 和 $\hat{J}_z$ 的共同本征态，根据角动量算符的对易关系

$$\hat{J}_y\hat{J}_z-\hat{J}_z\hat{J}_y=\mathrm{i}\hbar\hat{J}_x, \tag{7.12-1}$$

可得

$$\langle jm|\hat{J}_x|jm\rangle=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle jm|\hat{J}_y\hat{J}_z-\hat{J}_z\hat{J}_y|jm\rangle=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(m\hbar\langle jm|\hat{J}_y|jm\rangle-m\hbar\langle jm|\hat{J}_y|jm\rangle)=0. \tag{7.12-2}$$

类似地，利用对易关系 $\hat{J}_z\hat{J}_x-\hat{J}_x\hat{J}_z=\mathrm{i}\hbar\hat{J}_y$，可以证明 $\langle jm|\hat{J}_y|jm\rangle=0$.

证毕.

7.13　光子可以认为自旋为 1，求出它的自旋算符与自旋函数，并求出 $\hat{S}_x$ 和 $\hat{S}_y$ 的本征值及本征函数.

分析　可以利用角动量的升降算符求解.

解　根据角动量理论，若记角动量算符 $\hat{J}^2$ 和 $\hat{J}_z$ 的共同本征态为 $|jm\rangle$，则有

$$\hat{J}^2|jm\rangle = j(j+1)\hbar^2|jm\rangle\ ,\quad \hat{J}_z|jm\rangle = m\hbar^2|jm\rangle\ ,\quad m = j, j-1, \cdots -j+1, -j\ , \tag{7.13-1}$$

定义角动量的升降算符 $\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm \mathrm{i}\hat{J}_y$，则有

$$\hat{J}_\pm|jm\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1)-m(m\pm1)}\,|j,m\pm1\rangle\ . \tag{7.13-2}$$

利用式(7.13-2)，可在($\hat{J}^2$，$\hat{J}_z$)表象中写出 $\hat{J}_\pm$ 的矩阵，对于光子而言，$j=1$，$\hat{J}_\pm$ 的矩阵写为

$$\hat{J}_+ = \hbar\begin{bmatrix}0 & \sqrt{2} & 0\\ 0 & 0 & \sqrt{2}\\ 0 & 0 & 0\end{bmatrix},\quad \hat{J}_- = \hbar\begin{bmatrix}0 & 0 & 0\\ \sqrt{2} & 0 & 0\\ 0 & \sqrt{2} & 0\end{bmatrix}, \tag{7.13-3}$$

利用式(7.13-3)可以求出矩阵 $\hat{J}_x$、$\hat{J}_y$

$$\hat{J}_x = \frac{\sqrt{2}\hbar}{2}\begin{bmatrix}0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\end{bmatrix},\quad \hat{J}_y = \frac{\sqrt{2}\hbar}{2}\begin{bmatrix}0 & -\mathrm{i} & 0\\ \mathrm{i} & 0 & -\mathrm{i}\\ 0 & \mathrm{i} & 0\end{bmatrix}. \tag{7.13-4}$$

$\hat{J}_z$ 的矩阵可以直接写出为

$$\hat{J}_z = \hbar\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ \mathrm{i} & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{bmatrix}. \tag{7.13-5}$$

下面求解 $\hat{J}_x$ 的本征值问题：

$$\frac{\sqrt{2}}{2}\hbar\begin{bmatrix}0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\\ \gamma\end{bmatrix} = \lambda\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\\ \gamma\end{bmatrix}. \tag{7.13-6}$$

按线性代数的标准程序可求得本征值和本征矢量分别为

$$\hbar,\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\ \sqrt{2}\\ 1\end{bmatrix};\quad 0,\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ 0\\ -1\end{bmatrix};\quad -\hbar,\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\ -\sqrt{2}\\ 1\end{bmatrix}. \tag{7.13-7}$$

$\hat{J}_y$ 的本征值问题可以类似地求得

$$\hbar,\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\ \sqrt{2}\mathrm{i}\\ -1\end{bmatrix};\quad 0,\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ 0\\ 1\end{bmatrix};\quad -\hbar,\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\ -\sqrt{2}\mathrm{i}\\ -1\end{bmatrix}. \tag{7.13-8}$$

答　$\hat{J}_x$ 的本征值问题可以类似地求得 $\hbar, \frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\ \sqrt{2}\\ 1\end{bmatrix}$；$0, \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ 0\\ -1\end{bmatrix}$；$-\hbar, \frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\ -\sqrt{2}\\ 1\end{bmatrix}$；

$\hat{J}_y$ 的本征值问题可以类似地求得 $\hbar, \frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\ \sqrt{2}\mathrm{i}\\ -1\end{bmatrix}$；$0, \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ 0\\ 1\end{bmatrix}$；$-\hbar, \frac{1}{2}\begin{bmatrix}1\\ -\sqrt{2}\mathrm{i}\\ -1\end{bmatrix}$.

7.14　设系统的哈密顿含时算符为 $\hat{H}=\frac{e\hbar}{2\mu c}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{H}_1+\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}$，其中

$$H_{1x}=H_0\cos\omega t,\quad H_{1y}=H_0\sin\omega t,\quad H_{1z}=0,$$

在 $t=0$ 时刻，自旋在磁场方向（y 方向）的投影为 $\frac{\hbar}{2}$，求 t 时刻自旋在 y 方向的投影为 $-\frac{\hbar}{2}$ 的概率多大？

分析　本题中，哈密顿量的轨道空间运动部分和自旋空间运动部分彼此独立，可以分离变量. 由于问题只关心自旋的运动情况，轨道空间部分的哈密顿量可以不考虑，只需要用自旋空间部分的哈密顿量求解薛定谔方程即可.

解　自旋空间部分的哈密顿量写成

$$\hat{H}=M_0\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{H}=M_0H_0\begin{bmatrix}0 & -\mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\\ \mathrm{i}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} & 0\end{bmatrix},\quad M_0=\frac{e\hbar}{2\mu c}. \tag{7.14-1}$$

含时的薛定谔方程写成

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\end{bmatrix}=M_0H_0\begin{bmatrix}0 & -\mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\\ \mathrm{i}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\end{bmatrix}. \tag{7.14-2}$$

得到联立的微分方程组

$$\begin{cases}\dot{\alpha}=-\omega_0\beta\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\\ \dot{\beta}=-\omega_0\alpha\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\end{cases},\quad \omega_0=\frac{M_0H_0}{\hbar}. \tag{7.14-3}$$

结合初始条件 $\alpha(0)=\frac{1}{\sqrt{2}}$，$\beta(0)=\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}$，可以解得

$$\alpha(t)=\frac{1}{2}\left[\left(\frac{1}{\sqrt{2}}-\frac{\sqrt{2}\omega_0}{\Omega}-\frac{\omega}{\sqrt{2}\Omega}\right)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\Omega t}{2}}+\left(\frac{1}{\sqrt{2}}+\frac{\sqrt{2}\omega_0}{\Omega}+\frac{\omega}{\sqrt{2}\Omega}\right)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\Omega t}{2}}\right]\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\omega t}{2}}, \tag{7.14-4}$$

$$\beta(t)=\frac{\mathrm{i}}{2}\left[\left(\frac{1}{\sqrt{2}}-\frac{\sqrt{2}\omega_0}{\Omega}+\frac{\omega}{\sqrt{2}\Omega}\right)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\Omega t}{2}}+\left(\frac{1}{\sqrt{2}}+\frac{\sqrt{2}\omega_0}{\Omega}-\frac{\omega}{\sqrt{2}\Omega}\right)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\Omega t}{2}}\right]\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\omega t}{2}}. \tag{7.14-5}$$

其中

$$\Omega=\sqrt{\omega^2+4\omega_0^2}. \tag{7.14-6}$$

将 t 时刻的波函数，用 $\hat{S}_y$ 的本征态展开

$$\begin{bmatrix}\alpha(t)\\ \beta(t)\end{bmatrix}=c_1\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ \mathrm{i}\end{bmatrix}+c_2\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\ -\mathrm{i}\end{bmatrix}. \tag{7.14-7}$$

$$\begin{aligned}c_2&=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & \mathrm{i}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\end{bmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha+\mathrm{i}\beta)\\&=2\left(\frac{\omega_0}{\Omega}\right)\sin\frac{\Omega t}{2}\sin\frac{\omega t}{2}+\mathrm{i}\left[\cos\frac{\Omega t}{2}\sin\frac{\omega t}{2}-\left(\frac{\omega}{\Omega}\right)\sin\frac{\Omega t}{2}\cos\frac{\omega t}{2}\right].\end{aligned} \tag{7.14-8}$$

t 时刻 $S_y=-\dfrac{\hbar}{2}$ 的概率为

$$|c_2|^2=\frac{4\omega_0^2}{\Omega^2}\sin^2\frac{\Omega t}{2}\sin^2\frac{\omega t}{2}+\left[\cos\frac{\Omega t}{2}\sin\frac{\omega t}{2}-\left(\frac{\omega}{\Omega}\right)\sin\frac{\Omega t}{2}\cos\frac{\omega t}{2}\right]^2. \tag{7.14-9}$$

答　t 时刻 $S_y=-\dfrac{\hbar}{2}$ 的概率为 $\dfrac{4\omega_0^2}{\Omega^2}\sin^2\dfrac{\Omega t}{2}\sin^2\dfrac{\omega t}{2}+\left[\cos\dfrac{\Omega t}{2}\sin\dfrac{\omega t}{2}-\left(\dfrac{\omega}{\Omega}\right)\sin\dfrac{\Omega t}{2}\cos\dfrac{\omega t}{2}\right]^2$，其中 $\Omega=\sqrt{\omega^2+4\omega_0^2}$，$\omega_0=\dfrac{M_0H_0}{\hbar}$.

7.15　在 $x>0$ 的半空间有 z 方向的均匀恒定磁场 H_z 的存在，而在 $x<0$ 的半空间无磁场，中子以一定能量从 $x<0$ 向 $x>0$ 入射，

(1) 中子正入射(沿 x 轴方向入射)；

(2) 中子斜入射 x,z 平面内，与 x 轴成 θ 角方向入射，试讨论中子的运动情况.

分析　中子的哈密顿量写为

$$\hat{H}=\hat{H}_L+\hat{H}_S,\quad \hat{H}_L=\frac{\hat{p}^2}{2\mu},\quad \hat{H}_S=\begin{cases}0, & x<0\\ -M_0H_z\hat{\sigma}_z, & x\geqslant 0\end{cases}, \tag{7.15-1}$$

其中 M_0 是中子磁矩，由于不考虑自旋轨道耦合，中子自旋空间的运动和轨道空间的运动可以分离变量，$\hat{H}$ 的本征波函数是 $\hat{H}_L$ 和 $\hat{H}_S$ 各自的本征波函数之积，$\hat{H}$ 的本征值是 $\hat{H}_L$ 和 $\hat{H}_S$ 各自的本征值之和. 由于磁场沿 z 方向，因此在 $x<0$ 和

$x \geqslant 0$ 两个半空间中，$\hat{H}_S$ 的本征态都可以取 $\hat{\sigma}_z$ 的本征态，中子不带电，没有轨道磁矩，因此磁场对中子轨道空间的运动没有影响，$\hat{H}_L$ 的本征态就是平面波的线性组合(和通常的透射问题一样，有入射波、反射波、透射波等). 在 $x<0$ 和 $x \geqslant 0$ 两个半空间的区别在于，当 $x<0$ 时，中子没有塞曼能，中子的总能量就是动能，当 $x \geqslant 0$ 时，中子有塞曼能，中子的总能量是动能和塞曼能之和. 由于 $\hat{H}_S$ 的本征态在两个半空间中相同，在界面处又没有自旋相关的散射，因此透射过程中不会发生自旋翻转，可以按两个自旋通道独立求解(换句话说就是，由于 $\hat{\sigma}_z$ 和 $\hat{H}$ 对易，我们求的是 $\hat{\sigma}_z$ 和 $\hat{H}$ 的共同本征态).

解　先计算正入射的情况，根据上述分析，中子波函数可以写为

$$\psi_{\pm}=\begin{cases}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+r_{\pm}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx})\xi_{\pm}, & x<0\\ (t_{\pm}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_{\pm}x})\xi_{\pm}, & x\geqslant 0\end{cases}, \tag{7.15-2}$$

其中 $\xi_{\pm}$ 代表 $\hat{\sigma}_z$ 的本征值为 ± 1 的自旋本征态. 在 $x<0$ 的半空间中，没有塞曼能，总能量($\hat{H}$ 的本征值)

$$E=\frac{\hbar^2k^2}{2\mu},\quad k=\sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}. \tag{7.15-3}$$

在 $x>0$ 的半空间中，总能量是动能和塞曼能之和，因此

$$E=\frac{\hbar^2k_{\pm}^2}{2\mu}\mp M_0H_z,\quad k_{\pm}=\sqrt{\frac{2\mu(E\pm M_0H_z)}{\hbar^2}}. \tag{7.15-4}$$

根据波函数连续和波函数一阶导数连续，可以解得

$$r_{\pm}=\frac{k-k_{\pm}}{k+k_{\pm}}. \tag{7.15-5}$$

反射系数

$$R_{\pm}=|r_{\pm}|^2=\left(\frac{k-k_{\pm}}{k+k_{\pm}}\right)^2. \tag{7.15-6}$$

接下来，考虑斜入射的情况

$$\psi_{\pm}=\begin{cases}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_xx}+r_{\pm}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_xx})\xi_{\pm}, & x<0\\ (t_{\pm}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_{\pm,x}x})\xi_{\pm}, & x\geqslant 0\end{cases}, \tag{7.15-7}$$

其中 $k_x=k\cos\theta$，$k_z=k\sin\theta$，θ 是入射角，考虑到在 $x>0$ 的半空间中有塞曼能，并且透射过程中 z 方向的动量守恒，因此总能量

$$E=\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(k_{\pm,x}^2+k^2\sin^2\theta\right)\mp M_0H_z,\quad k_{\pm,x}=\sqrt{k_{\pm}^2-k^2\sin^2\theta}. \tag{7.15-8}$$

根据波函数连续和波函数一阶导数连续，可以解得

$$r_{\pm}=\frac{k\cos\theta-k_{\pm,x}}{k\cos\theta+k_{\pm,x}}. \tag{7.15-9}$$

反射系数

$$R_{\pm}=|r_{\pm}|^2=\left(\frac{k\cos\theta-k_{\pm,x}}{k\cos\theta+k_{\pm,x}}\right)^2. \tag{7.15-10}$$

透射角定义为

$$\tan\theta_{\pm}=\frac{k\sin\theta}{k_{\pm,x}}. \tag{7.15-11}$$

由于中子磁矩 $M_0<0$，容易看出 $\theta_+>\theta>\theta_-$，也就是说透射中子分成了两束．此外，对于自旋向上通道的中子会发生全反射，全反射的临界角 $\theta_0=\arccos\sqrt{\dfrac{|M_0H_z|}{E}}$.

答　正入射的情况下，反射系数为 $\left(\dfrac{k\cos\theta-k_{\pm,x}}{k\cos\theta+k_{\pm,x}}\right)^2$，其中 $k=\dfrac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar}$，$k_{\pm}=\dfrac{\sqrt{2\mu(E\pm M_0H_z)}}{\hbar}$，$M_0$ 是中子磁矩，对于入射角为 θ 的斜入射情形，透射中子分成了两束，透射角 $\theta_+>\theta>\theta_-$，反射系数为 $\left(\dfrac{k\cos\theta-k_{\pm,x}}{k\cos\theta+k_{\pm,x}}\right)^2$，其中 $k_{\pm,x}=\sqrt{k_{\pm}^2-k^2\sin^2\theta}$.

7.16　电子处于恒定外磁场 H_z 中(z 方向)，计算电子自旋角动量的平均值的时间变化率，并由此说明电子自旋角动量矢量绕 z 方向进动，进动频率是多少？

分析　根据算符平均值随时间变化的公式，自旋算符平均值的变化率取决于自旋算符与哈密顿算符的对易式的平均值.

解　电子自旋的哈密顿量

$$\hat{H}=\frac{e\hbar}{2\mu c}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{H}=\frac{eH_z\hbar}{2\mu c}\hat{\sigma}_z=\hbar\omega_L\hat{\sigma}_z,\quad \omega_{\mathrm{L}}=\frac{eH_z}{2\mu c}. \tag{7.16-1}$$

根据算符平均值随时间变化的公式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle S_x\rangle=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[\hat{S}_x,\hat{H}]}=-2\omega_{\mathrm{L}}\langle S_y\rangle, \tag{7.16-2}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle S_y\rangle=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[\hat{S}_y,\hat{H}]}=2\omega_{\mathrm{L}}\langle S_x\rangle. \tag{7.16-3}$$

两式可以联立求解，得到

$$\langle S_x\rangle = A\sin(2\omega_L t+\varphi)\ ,\ \ \langle S_y\rangle = -A\cos(2\omega_L t+\varphi)\ . \tag{7.16-4}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle S_x\rangle = 2\omega_L A\cos(2\omega_L t+\varphi)\ ,\ \ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle S_y\rangle = 2\omega_L A\sin(2\omega_L t+\varphi)\ , \tag{7.16-5}$$

其中 A 和 φ 是由初始条件决定的两个常数，对于自旋的 z 分量，显然有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle S_z\rangle = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[\hat{S}_z,\hat{H}]} = 0\ ,\ \ \langle S_z\rangle = 常数. \tag{7.16-6}$$

从上面公式可以看出，自旋角动量绕 z 轴进动，进动圆频率为 $2\omega_L$.

答　自旋角动量平均值的时间变化率为 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle S_x\rangle = 2\omega_L A\cos(2\omega_L t+\varphi)$，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle S_y\rangle = 2\omega_L A\sin(2\omega_L t+\varphi)\ ,\ \ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle S_z\rangle = 0\ .$$

7.17　当 $t=0$ 时，某系统处于 $S_3=\dfrac{\hbar}{2}$，$\hat{\boldsymbol{S}}=\dfrac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$，受哈密顿 $\hat{H}=a\hat{S}_x$ 的作用，其中 a 是实常数，求当 $t=T$ 时，系统处 $-\dfrac{\hbar}{2}$ 态的概率是多少？

分析　本题与题 7.7 类似，根据哈密顿量的本征值和本征态以及初始条件，可以求出 t 时刻的波函数，进而可求出 t 时刻测量某个自旋分量的概率. 对于自旋 $\dfrac{1}{2}$ 的体系，其自旋算符的本征态就是相应的泡利矩阵的本征态，可以直接引用题 7.3 的结果.

解　体系的哈密顿量为

$$\hat{H}=a\hat{S}_x=\frac{\hbar a}{2}\hat{\sigma}_x\ . \tag{7.17-1}$$

哈密顿量的本征值和本征态为

$$\frac{\hbar a}{2},\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}\text{和}-\frac{\hbar a}{2},\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\-1\end{bmatrix}. \tag{7.17-2}$$

因此 t 时刻的波函数为

$$\psi(t)=c_1\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{at}{2}}+c_2\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\-1\end{bmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{at}{2}}\ . \tag{7.17-3}$$

根据初始条件

$$\psi(0)=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}. \tag{7.17-4}$$

可以求得 $c_1=c_2=\dfrac{1}{\sqrt{2}}$，$t$ 时刻的波函数成为

$$\psi(t)=\begin{bmatrix}\cos\left(\dfrac{at}{2}\right)\\ -\mathrm{i}\sin\left(\dfrac{at}{2}\right)\end{bmatrix}. \tag{7.17-5}$$

为求出 $t=T$ 时刻测量 $S_z=-\dfrac{\hbar}{2}$ 的概率，将上式中的波函数用 $\hat{S}_z$ 算符的本征态展开，得到

$$\psi(T)=a_1\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}+a_2\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}. \tag{7.17-6}$$

解得，$a_2=-\mathrm{i}\sin\left(\dfrac{at}{2}\right)$，测量 $S_z=-\dfrac{\hbar}{2}$ 的概率为 $|a_2|^2=\sin^2\left(\dfrac{at}{2}\right)$.

答　T 时刻测量 $S_z=-\dfrac{\hbar}{2}$ 的概率为 $\sin^2\left(\dfrac{at}{2}\right)$.

7.18　讨论在强磁场中钠的 $3^3\mathrm{P}\to 3^2\mathrm{D}$ 谱线的完整分裂情况(帕邢-巴克效应).

分析　本题中磁场很强的含义指自旋轨道耦合的能量远小于塞曼能. 因而可以将碱金属原子中价电子的动能，库仑能和塞曼能合并作为未微扰哈密顿量 $\hat{H}_0$，将自旋轨道耦合作为微扰 $\hat{H}_1$，按一阶微扰的标准程序计算即可得到能级修正.

解　假定磁场 $\boldsymbol{H}$ 沿 z 方向，根据上述分析，未微扰哈密顿量写为

$$\hat{H}_0=\frac{\hat{p}^2}{2\mu}+V(r)+\frac{eH}{2\mu c}(\hat{L}_z+2\hat{S}_z). \tag{7.18-1}$$

若不考虑式中塞曼能的贡献，碱金属原子中的电子处于中心势场中，电子的能级与磁量子数 m 和自旋量子数 m_s 无关，可以一般地将能级写为 $E_{nl}^{(0)}$ (与氢原子不同，碱金属原子的能级一般与角量子数 l 有关)，能量本征波函数为 $\psi_{nlmm_s}=R_{nl}(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)\zeta_{m_s}$，$\zeta_{m_s}\left(m_s=\pm\dfrac{1}{2}\right)$ 是自旋波函数，代表 $S_z=\pm\dfrac{\hbar}{2}$ 两种自旋态，能级有 $4l+2$ 重简并，计入塞曼能以后，容易看出 ψ_{nlmm_s} 是 $\hat{L}_z$ 和 $\hat{S}_z$ 的本征波函数，因此仍然是哈密顿量 $\hat{H}_0$ 的本征波函数 . 于是，未微扰哈密顿量 $\hat{H}_0$ 的本征波函数是 ψ_{nlmm_s}，而本征值也就是未微扰能级是 $E_{nl}^{(0)}+M_0H(m+2m_s)$，其中 $M_0=\dfrac{e\hbar}{2\mu c}$ 是玻尔磁子. 计入塞曼能以后，能级简并完全消除，微扰哈密顿量为

$$\hat{H}_1 = \hat{H}_{LS} = \frac{1}{2\mu^2 c^2}\left(\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right)\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}. \tag{7.18-2}$$

根据非简并微扰的标准公式，计入微扰的一级修正后，碱金属原子中的电子能级为

$$E_{nlmm_s} = E_{nl}^{(0)} + M_0 H(m+2m_s) + \langle nlmm_s|\hat{H}_{LS}|nlmm_s\rangle. \tag{7.18-3}$$

引入角动量的升降算符 $\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm \mathrm{i}\hat{L}_y$，$\hat{S}_\pm = \hat{S}_x \pm \mathrm{i}\hat{S}_y$，容易验证 $\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}} = \dfrac{\hat{L}_+\hat{S}_- + \hat{L}_-\hat{S}_+}{2} + \hat{L}_z\hat{S}_z$，因此

$$\begin{aligned}
&\langle nlmm_s|\hat{H}_{LS}|nlmm_s\rangle \\
&= \frac{1}{2\mu^2c^2}\langle nlmm_s|\left(\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right)\left[\frac{\hat{L}_+\hat{S}_- + \hat{L}_-\hat{S}_+}{2} + \hat{L}_z\hat{S}_+\right]|nlmm_s\rangle \\
&= \frac{1}{2\mu^2c^2}\langle nlmm_s|\left(\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right)\hat{L}_z\hat{S}_+|nlmm_s\rangle \\
&= mm_s\frac{\hbar^2}{2\mu^2c^2}\int_0^\infty r^2\mathrm{d}r\left(\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right)|R_{nl}(r)|^2,
\end{aligned} \tag{7.18-4}$$

式(7.18-4)中最后一项的积分，实际上正比于碱金属原子能级精细结构中相邻能级的能级差，为此引用碱金属原子能级精细结构的公式

$$E_{nl,j=l\pm\frac{1}{2}} = E_{nl}^{(0)} + \left[\frac{\hbar^2}{4\mu^2c^2}\int_0^\infty r^2\mathrm{d}r\left(\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right)|R_{nl}(r)|^2\right]\cdot\left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right], \tag{7.18-5}$$

比较式(7.18-4)和式(7.18-5)，得到

$$\langle nlmm_s|\hat{H}_{LS}|nlmm_s\rangle = mm_s\frac{E_{nl,j=l+\frac{1}{2}} - E_{nl,j=l-\frac{1}{2}}}{l+\frac{1}{2}}, \tag{7.18-6}$$

代入式(7.18-3)中得到在强磁场中碱金属原子的能级公式

$$E_{nlmm_s} = E_{nl}^{(0)} + M_0 H(m+2m_s) + mm_s\frac{E_{nl,j=l+\frac{1}{2}} - E_{nl,j=l-\frac{1}{2}}}{l+\frac{1}{2}}. \tag{7.18-7}$$

具体考虑3P能级到3D能级的跃迁，根据电偶级辐射 $\Delta m = 0, \pm 1$，$\Delta m_s = 0$ 的跃迁选择定则，仔细地计数可以发现，从3P能级到3D能级的光谱线将分裂为15条.

答　能级 $E_{nlmm_s}=E_{nl}^{(0)}+M_0H(m+2m_s)+mm_s\dfrac{E_{nl,j=l+\frac{1}{2}}-E_{nl,j=l-\frac{1}{2}}}{l+\dfrac{1}{2}}$，从 $3P$ 能级到 $3D$ 能级的光谱线将分裂为15条.

7.19　讨论在弱磁场下，氢原子的一级斯塔克效应(考虑自旋).

分析　氢原子处于外电场 ε 中，假定电场沿 z 方向，那么因外电场而增加的电势能可以写成 $\hat{H}_\varepsilon=e\varepsilon z=e\varepsilon r\cos\theta$ (参见题 6.17)，$\hat{H}_\varepsilon$ 与自旋无关，如果不考虑自旋轨道耦合，那么在斯塔克效应中是否考虑自旋并没有什么区别. 本题中强调外场很弱，必须考虑自旋，其含义是指 $\hat{H}_\varepsilon$ 远小于自旋轨道耦合的能量，应将电子的动能、库仑能和自旋轨道耦合能合并作为未微扰哈密顿量，$\hat{H}_\varepsilon$ 作为微扰，进行微扰计算. 因为自旋轨道耦合哈密顿量正比于 $\hat{J}^2-\hat{L}^2-\hat{S}^2$，其中 $\hat{\boldsymbol{J}}=\hat{\boldsymbol{L}}+\hat{\boldsymbol{S}}$ 是总角动量，未微扰哈密顿量的本征波函数应取总角动量的本征态，即耦合表象基 ψ_{nlmm_s}，自旋轨道耦合能量与量子数 n,l,j 都有关，因此微扰在不同 m_j 的简并态之间展开. 由于微扰哈密顿 $\hat{H}_\varepsilon$ 与 $\hat{L}_z$、$\hat{S}_z$ 都对易，因而与 $\hat{J}_z=\hat{L}_z+\hat{S}_z$ 也对易，不同 m_j 指标的微扰哈密顿矩阵元为零，微扰矩阵成为一个对角矩阵(参看题 6.17). 再由于宇称对称性的关系(下面计算过程中会清楚地体现出来)，这些对角元也都是零，如此一来，题目要求的一级斯塔克效应似乎为零，外电场的影响至少是二级效应，其实不然，这是因为在未微扰哈密顿中，若是考虑自旋轨道耦合，就应该同时考虑另一项相对论修正，即动能的相对论修正. 动能的相对论修正与自旋轨道耦合具有相同的量级，后面详细地计算将表明，同时计入动能的相对论修正与自旋轨道耦合以后，能量仅和量子数 n,j 有关，微扰将在不同 j 和 m_j 的量子态间展开. 如前所述，不同 m_j 指标的微扰哈密顿矩阵元为零，微扰实际上是在相同的 n,j,m_j 但 $l=j\pm\dfrac{1}{2}$ 的两个不同的态间进行. 微扰矩阵是 2×2 的，基于前面所说的宇称对称性的原因，对角元为零，但有两个非零的反对角元，据此可以得到一级斯塔克效应的能级修正. 总结一下计算步骤，第一步在耦合表象基中求解包含电子的动能、库仑能、动能的相对论修正以及自旋轨道耦合能的哈密顿本征值问题，其中动能的相对论修正作微扰处理(自旋轨道耦合作微扰和严格解一致)；第二步再以上一步中的解作为出发点，以 $\hat{H}_\varepsilon$ 作微扰进行计算.

解　根据前面的分析，先来处理动能的相对论修正以及自旋轨道耦合，仅考虑电子动能和库仑能的哈密顿量为

$$\hat{H}_{\mathrm{C}}=\frac{\hat{p}^2}{2\mu}+V(r)\,,\quad V(r)=-\frac{e^2}{r}\,,\tag{7.19-1}$$

其能量本征值为

$$E_n^{(0)}=\frac{e^2}{n^2}\left(-\frac{e^2}{2a}\right),\ \text{玻尔半径}\ a=\frac{\hbar^2}{\mu e^2}.\tag{7.19-2}$$

能量本征波函数为 $\psi_{nlm}=R_{nl}(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$，考虑自旋后，能量本征波函数为 $\psi_{nlmm_s}=R_{nl}(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)\xi_{m_s}$，$\xi_{m_s}$ 是自旋波函数，也可以将 ψ_{nlmm_s} 线性组合后得到耦合表象基，即 $\psi_{nlmm_s}=R_{nl}(r)\chi_{jm_j}$，其中 χ_{jm_j} 由球谐函数和自旋波函数的乘积线性组合得到，是 $\hat{J}^2$ 和 $\hat{J}_z$ 的本征态，$\hat{\boldsymbol{J}}=\hat{\boldsymbol{L}}+\hat{\boldsymbol{S}}$ 是总角动量，因为要讨论自旋轨道耦合，后面我们采用 ψ_{nljm_j} 作为 $\hat{H}_{\mathrm{C}}$ 的本征态.

动能的相对论修正为 $\sqrt{p^2c^2+\mu^2c^4}-\mu c^2-\dfrac{p^2}{2\mu}\approx-\dfrac{p^4}{8\mu^3c^2}$. 我们取 $\hat{H}_{\mathrm{C}}$ 作为未微扰哈密顿量，以动能的相对论修正

$$\hat{H}_{\mathrm{rel}}=-\frac{\hat{p}^4}{8\mu^3c^2}\,,\tag{7.19-3}$$

作微扰. $\hat{H}_{\mathrm{C}}$ 的能量本征值仅与 n 有关，微扰在不同 l,j,m_j 的简并态 ψ_{nljm_j} 间展开，显然 $\hat{H}_{\mathrm{rel}}$ 与 $\hat{L}^2$、$\hat{J}^2$、J_z 都对易，微扰矩阵成为对角矩阵，微扰后的零级近似波函数仍然为 ψ_{nljm_j}，只是每个态 ψ_{nljm_j} 的能量多了一级修正(微扰矩阵的对角元)

$$\left\langle nljm_j\right|-\frac{\hat{p}^4}{8\mu^3c^2}\left|nljm_j\right\rangle.\tag{7.19-4}$$

把算符等式

$$\frac{\hat{p}^4}{4\mu^2}=(\hat{H}_{\mathrm{C}}-V)^2\,,\tag{7.19-5}$$

代入式(7.19-4)，得到

$$\begin{aligned}\left\langle nljm_j\right|-\frac{\hat{p}^4}{8\mu^3c^2}\left|nljm_j\right\rangle&=-\frac{1}{2\mu c^2}\left\langle nljm_j\right|\hat{H}_C^2-\hat{H}_CV-V\hat{H}_C-V^2\left|nljm_j\right\rangle\\&=-\frac{1}{2\mu c^2}\left[(E_n^{(0)})^2-2E_n^{(0)}\left\langle nljm_j\right|V\left|nljm_j\right\rangle+e^4\left\langle nljm_j\right|\frac{1}{r^2}\left|nljm_j\right\rangle\right]\end{aligned}\tag{7.19-6}$$

根据位力定理，$2\langle T\rangle=-\langle V\rangle$，$\langle T\rangle+\langle V\rangle=E_n^{(0)}$，可得 $\left\langle nljm_j\right|V\left|nljm_j\right\rangle=2E_n^{(0)}$.

$$\left\langle nljm_j\left|\frac{1}{r^2}\right|nljm_j\right\rangle=\int_0^\infty r^2\mathrm{d}r\int_0^\pi\sin\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi R_{nl}^*(r)\left[\chi_{jm_j}^+\left(\frac{1}{r^2}\right)\chi_{jm_j}\right]R_{nl}(r)$$

$$=\int_0^\infty\mathrm{d}r\,|\,rR_{nl}(r)\,|^2\,\frac{1}{r^2}=\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle_{nl}. \tag{7.19-7}$$

根据题 6.18 中得到的结果

$$\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle_{nl}=\frac{1}{n^3a^2\left(l+\frac{1}{2}\right)}, \tag{7.19-8}$$

合并式(7.19-6)至(7.19-8)可得

$$\left\langle nljm_j\left|-\frac{\hat{p}^4}{8\mu^3c^2}\right|nljm_j\right\rangle=\frac{1}{2\mu c^2}\left(\frac{e^4}{n^4a^2}\right)\left(\frac{3}{4}-\frac{n}{l+\frac{1}{2}}\right). \tag{7.19-9}$$

至此，我们得到了 $\hat{H}_{\mathrm{C}}+\hat{H}_{\mathrm{rel}}$ 本征值问题的解，准至 $\hat{H}_{\mathrm{rel}}$ 的一级近似，本征波函数为 ψ_{nljm_j}，能量为

$$E_n^{(0)}+\frac{1}{2\mu c^2}\left(\frac{e^4}{n^4a^2}\right)\left(\frac{3}{4}-\frac{n}{l+\frac{1}{2}}\right). \tag{7.19-10}$$

接下来计入自旋轨道耦合

$$\hat{H}_{LS}=\frac{1}{2\mu^2c^2}\left(\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right)\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}=\frac{1}{4\mu^2c^2}\left(\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right)(\hat{J}^2-\hat{L}^2-\hat{S}^2). \tag{7.19-11}$$

显然 ψ_{nljm_j} 就是 $\hat{H}_{LS}$ 的本征波函数，计入自旋轨道耦合后，波函数不变，只是每个态上多一份能量

$$\left\langle nljm_j\left|\hat{H}_{LS}\right|nljm_j\right\rangle=\frac{1}{4\mu^2c^2}\left\langle nljm_j\left|\left(\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right)(\hat{J}^2-\hat{L}^2-\hat{S}^2)\right|nljm_j\right\rangle$$

$$=\frac{1}{4\mu^2c^2}\left[j(j+1)-l(l+1)-\frac{3}{4}\right]\left\langle nljm_j\left|\left(\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right)\right|nljm_j\right\rangle \tag{7.19-12}$$

$$=\frac{e^2\hbar^2}{4\mu^2c^2}\left[j(j+1)-l(l+1)-\frac{3}{4}\right]\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle_{nl},$$

式中

$$\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle_{nl}=\int_0^\infty\mathrm{d}r\,|\,rR_{nl}(r)\,|^2\,\frac{1}{r^3}. \tag{7.19-13}$$

下面设法计算式(7.19-13)中的积分，为此令 $u_{nl}(r)=rR_{nl}(r)$，$u_{nl}(r)$ 满足薛定

谓方程

$$\hat{H}_r u_{nl}(r) = E_n^{(0)} u_{nl}(r)\,,\quad \hat{H}_r = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r}\,, \tag{7.19-14}$$

两边对 r 求微分可得

$$\hat{H}_r \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}u_{nl}(r) + \left[-\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + \frac{e^2}{r}\right]u_{nl}(r) = E_n^{(0)}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}u_{nl}(r)\,. \tag{7.19-15}$$

将式(7.19-15)两边同时乘以 $u_{nl}(r)$ 并积分可得

$$\begin{aligned}&\int_0^\infty \mathrm{d}r u_{nl}^*(r)\hat{H}_r \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}u_{nl}(r) + \int_0^\infty \mathrm{d}r u_{nl}^*(r)\left[-\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + \frac{e^2}{r}\right]u_{nl}(r)\\ &= \int_0^\infty \mathrm{d}r E_n^{(0)} u_{nl}^*(r)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}u_{nl}(r).\end{aligned} \tag{7.19-16}$$

在式(7.19-16)等号左方的第一项中将哈密顿算符 $\hat{H}_r$ 向前作用，即可发现该项与等号右侧的项刚好相消，于是得到

$$\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle_{nl} = \frac{1}{l(l+1)a}\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle_{nl} = \frac{1}{n^3a^3l\left(l+\frac{1}{2}\right)(l+1)}\,. \tag{7.19-17}$$

至此，合并电子的动能，库仑能，相对论动能修正和自旋轨道耦合，哈密顿量写成

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_{\mathrm{C}} + \hat{H}_{\mathrm{rel}} + \hat{H}_{LS}\,. \tag{7.19-18}$$

准至 $\hat{H}_{\mathrm{rel}}$ 的一级近似，$\hat{H}_0$ 的本征波函数为 ψ_{nljm_j}，本征值为

$$E_n^{(0)} + \frac{1}{2\mu c^2}\left(\frac{e^4}{n^4a^2}\right)\left(\frac{3}{4} - \frac{n}{l+\frac{1}{2}}\right) + \frac{e^2\hbar^2}{4\mu^2c^2}\left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right]\frac{1}{n^3a^3l\left(l+\frac{1}{2}\right)(l+1)}\,. \tag{7.19-19}$$

就 $j = l \pm \frac{1}{2}$ 两种情况具体验算后可以发现，上式可以写为

$$E_{nj} = E_n^{(0)} + \frac{1}{2\mu c^2}\left(\frac{e^4}{n^4a^2}\right)\left(\frac{3}{4} - \frac{n}{j+\frac{1}{2}}\right)\,. \tag{7.19-20}$$

也就是说 $\hat{H}_0$ 的本征值只与 n、j 有关，与 l、m_j 无关.

下面以 $\hat{H}_0$ 为未微扰哈密顿量，从上面的解出发，计入微扰 $\hat{H}_\varepsilon = e\varepsilon r\cos\theta$，

讨论斯塔克效应. 根据前面对 $\hat{H}_0$ 的讨论，微扰应在量子数 n 、 j 相同，而量子数 l 、 m_j 不同的一组简并态间展开. 微扰哈密顿 $\hat{H}_\varepsilon$ 与 $\hat{L}_z$ 、 $\hat{S}_z$ 都对易，因此与 $\hat{J}_z$ 也对易，微扰矩阵中所有 m_j 指标不相同的矩阵元都为零，微扰矩阵成为按 m_j 量子数分块的分块对角矩阵. 每一个块仅含有 $\left|n,l=j+\frac{1}{2},jm_j\right\rangle$ 和 $\left|n,l=j-\frac{1}{2},jm_j\right\rangle$ 两个简并态，则微扰矩阵成为 2×2 的矩阵，每一个波函数 $\psi_{nljm_j}=R_{nl}(r)\chi_{jm_j}$ ，而 χ_{jm_j} 由具有相同 l 指标的球谐函数 $\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$ 与自旋波函数的乘积线性叠加而成，因此容易看出在空间反演变换 $x\to-x$ 下面，每个波函数 ψ_{nljm_j} 都具有确定的宇称 $(-1)^l$ ，波函数 $\psi_{n,l=j+\frac{1}{2},jm_j}$ 和 $\psi_{n,l=j-\frac{1}{2},jm_j}$ 恰好具有相反的宇称，而微扰哈密顿 $\hat{H}_\varepsilon$ 具有奇宇称，据此可以判断，在 2×2 的微扰矩阵中，两个对角元必为零，两个反对角元为一对不为零的共轭复数(或相等的实数)，微扰矩阵的本征值，也就是能量一级修正，就是 $\pm\left|\left\langle n,l=j-\frac{1}{2},jm_j\right|\hat{H}_\varepsilon\left|n,l=j+\frac{1}{2},jm_j\right\rangle\right|$.

下面根据 ψ_{nljm_j} 的具体形式来计算矩阵元.

$$\psi_{n,l=j+\frac{1}{2},jm_j}=R_{n,j+\frac{1}{2}}(r)\frac{1}{\sqrt{2j+2}}\begin{bmatrix}\sqrt{j-m_j+1}\,\mathrm{Y}_{j+\frac{1}{2},m_j-\frac{1}{2}}\\-\sqrt{j+m_j+1}\,\mathrm{Y}_{j+\frac{1}{2},m_j+\frac{1}{2}}\end{bmatrix},\tag{7.19-21}$$

$$\psi_{n,l=j-\frac{1}{2},jm_j}=R_{n,j-\frac{1}{2}}(r)\frac{1}{\sqrt{2j}}\begin{bmatrix}\sqrt{j+m_j}\,\mathrm{Y}_{j-\frac{1}{2},m_j-\frac{1}{2}}\\\sqrt{j-m_j+1}\,\mathrm{Y}_{j-\frac{1}{2},m_j+\frac{1}{2}}\end{bmatrix},\tag{7.19-22}$$

$$\begin{aligned}&\left\langle n,l=j-\frac{1}{2},jm_j\right|\hat{H}_\varepsilon\left|n,l=j+\frac{1}{2},jm_j\right\rangle\\&=e\varepsilon\int_0^\infty r^2\mathrm{d}rR^*_{n,j-\frac{1}{2}}(r)rR_{n,j-\frac{1}{2}}(r)\frac{1}{2\sqrt{j(j+1)}}\\&\cdot\int_0^\pi\sin\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\left[\sqrt{j+m_j}\,\mathrm{Y}^*_{j-\frac{1}{2},m_j-\frac{1}{2}}\cos\theta\sqrt{j-m_j+1}\,\mathrm{Y}_{j+\frac{1}{2},m_j-\frac{1}{2}}\right.\\&\left.-\sqrt{j-m_j}\,\mathrm{Y}^*_{j-\frac{1}{2},m_j+\frac{1}{2}}\cos\theta\sqrt{j+m_j+1}\,\mathrm{Y}_{j+\frac{1}{2},m_j+\frac{1}{2}}\right].\end{aligned}\tag{7.19-23}$$

利用球谐函数的递推关系

$$\cos\theta Y_{lm}=\sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}}Y_{l-1,m}+\sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}Y_{l+1,m}\,, \tag{7.19-24}$$

和球谐函数的正交归一性，可以完成式(7.19-23)中的积分，得到

$$\left\langle n,l=j-\frac{1}{2},jm_j\left|\hat{H}_\varepsilon\right|n,l=j+\frac{1}{2},jm_j\right\rangle=e\varepsilon\frac{m_j}{2j(j+1)}\langle r\rangle_{nj}\,, \tag{7.19-25}$$

式中

$$\langle r\rangle_{nj}=\int_0^\infty r^2\mathrm{d}rR^*_{n,j-\frac{1}{2}}(r)rR_{n,j+\frac{1}{2}}(r)\,, \tag{7.19-26}$$

根据前面的分析，微扰矩阵是2×2的矩阵，且仅有如上的反对角元. 因此氢原子一级斯塔克效应的能级修正为

$$\Delta E^{(1)}=\pm e\varepsilon\frac{m_j}{2j(j+1)}\langle r\rangle_{nj}\,. \tag{7.19-27}$$

两点特别说明：

(a) 对于$j=n-\frac{1}{2}$的情形，只有$l=j-\frac{1}{2}$的态，没有$l=j+\frac{1}{2}$的态，因此微扰矩阵退化为1×1，根据宇称对称性，$\hat{H}_\varepsilon$的对角元为零，没有一级斯塔克效应，这相当于在前面式中，约定当$l=n$时，波函数$R_{nl}=0=0$，从而$\langle r\rangle_{nj}=0$.

(b) $j=\frac{1}{2}$也是一个特殊情况. 按前面讨论，此时$\hat{H}_0$的本征态中，对应于一个m_j应有两个简并态$l=0$和$l=1$，但实际上这是不对的. 这是因为，当$l=0$时，自旋轨道耦合能应当为零，而在前面的计算中，由于$\frac{1}{r^3}$的平均值在$l=0$时有$\frac{1}{l}$奇异性，算出的自旋轨道耦合修正项是有限的. 事实上$\frac{1}{r^3}$平均值的奇异性是非本征的(例如考虑核的有限大小就可以消去)，因此$l=0$时应把自旋轨道耦合能设为零，这样一来，前面E_{nj}的式对于$l=0$不成立，$j=\frac{1}{2},l=0$与$j=\frac{1}{2},l=1$的两个态在$\hat{H}_0$中的能量是不一样的，在一级微扰中这两个态不会混合，只需要计及$\hat{H}_\varepsilon$在这两个态中的对角矩阵元，然而根据宇称对称性此时对角矩阵元为零，因此在$j=\frac{1}{2}$时也没有一级斯塔克效应.

答　在弱场近似下，氢原子一级斯塔克效应的能级修正为$\pm e\varepsilon\frac{m_j}{2j(j+1)}\langle r\rangle_{nj}$，

其中 $\langle r\rangle_{nj}=\int_0^\infty r^2\mathrm{d}rR^*_{n,j-\frac{1}{2}}(r)rR_{n,j+\frac{1}{2}}(r)$.

7.20　氢原子处于平行的外磁场中，设外场很弱，求 $n=2$ 能级的分裂(考虑自旋).

分析　本题 7.19 类似，弱场的含义指外场导致的能量修正远小于自旋轨道耦合. 应取电子的动能、库仑能、动能的相对论修正和自旋轨道耦合能四项合并，作为未微扰哈密顿 $\hat{H}_0$，其本征波函数为耦合表象基 ψ_{nljm_j}. 假定外场沿方向，因外电场增加而增加的电势能可以写成 $\hat{H}_\varepsilon=e\varepsilon r\cos\theta$，因外磁场增加而增加的塞曼能为 $\hat{H}_B=\dfrac{eH}{2\mu c}(\hat{L}_z+2\hat{S}_z)$，以 $\hat{H}_\varepsilon+\hat{H}_B$ 作微扰，进行计算.

解　根据前面的分析(参考题 7.19)，未微扰哈密顿量写成

$$\hat{H}_0=\hat{H}_{\mathrm{C}}+\hat{H}_{\mathrm{rel}}+\hat{H}_{LS},\quad \hat{H}_{\mathrm{C}}=\frac{\ddot{p}^2}{2\mu}-\frac{e^2}{r},\quad \hat{H}_{\mathrm{rel}}=-\frac{p^4}{8\mu^3c^2},\quad \hat{H}_{LS}=\frac{1}{2\mu^2c^2}\left(\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right)\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}. \tag{7.20-1}$$

准至 $\hat{H}_{\mathrm{rel}}$ 的一级近似，$\hat{H}_0$ 的本征波函数为 ψ_{nljm_j}，本征值为

$$E_{nl}=E_n^{(0)}+\frac{1}{2\mu c^2}\left(\frac{e^4}{n^4a^2}\right)\left(\frac{3}{4}-\frac{n}{j+\frac{1}{2}}\right). \tag{7.20-2}$$

$\hat{H}_0$ 的本征值只与 n、j 有关，与 l、m_j 无关.

下面以 $\hat{H}_0$ 为未微扰哈密顿量，从上面的解出发，计入微扰

$$\hat{H}_1=\hat{H}_\varepsilon+\hat{H}_B,\quad \hat{H}_\varepsilon=e\varepsilon r\cos\theta,\quad \hat{H}_B=\frac{eH}{2\mu c}(\hat{L}_z+2\hat{S}_z). \tag{7.20-3}$$

$\hat{H}_0$ 的本征值仅与 n、j 有关，因此微扰应在 n、j 量子数相同，而 l、m_j 量子数不同的一组简并态间展开. 容易看出两项微扰 $\hat{H}_\varepsilon$ 和 $\hat{H}_B$ 都与 $\hat{J}_z$ 对易，所以微扰矩阵中所有 m_j 指标不相同的矩阵元都为零，微扰矩阵成为按 m_j 量子数分块的分块对角矩阵. 每一个块仅含有 $\left|n,l=j+\frac{1}{2},jm_j\right\rangle$ 和 $\left|n,l=j-\frac{1}{2},jm_j\right\rangle$ 两个简并态，微扰矩阵成为 2×2 的矩阵. $\hat{H}_\varepsilon$ 对微扰矩阵的贡献是两个非对角元，其值已经在题 7.19 中求出，引用在这里

$$\left\langle n,l=j-\frac{1}{2},jm_j\middle|\hat{H}_\varepsilon\middle|n,l=j+\frac{1}{2},jm_j\right\rangle=e\varepsilon\left[\frac{m_j}{2j(j+1)}\right]\langle r\rangle_{nj}, \tag{7.20-4}$$

其中

$$\langle r\rangle_{nj}=\int_0^\infty r^2\mathrm{d}rR^*_{n,j-\frac{1}{2}}(r)rR_{n,j+\frac{1}{2}}(r)\,, \tag{7.20-5}$$

下面求 $\hat{H}_B$ 对微扰矩阵的贡献. ψ_{nljm_j} 是算符 $\hat{J}_z$ 的本征态，因此在态 ψ_{nljm_j} 中，算符 $\hat{J}_z$ 仅有唯一的取值 $m_j\hbar$，在两个简并态 $\left|n,l=j\pm\frac{1}{2},jm_j\right\rangle$ 张成的子空间中，算符 $\hat{J}_z$ 可以用常数 $m_j\hbar$ 来代替，因此塞曼能可以写为

$$\hat{H}_B=\frac{eH}{2\mu c}\left(\hat{L}_z+2\hat{S}_z\right)=M_0H\left(m_j+\frac{1}{2}\hat{\sigma}_z\right),\quad M_0=\frac{e\hbar}{2\mu c}. \tag{7.20-6}$$

由于每个波函数 ψ_{nljm_j} 都具有确定的宇称 $(-1)^l$，两个波函数 $\psi_{n,l=j\pm\frac{1}{2},jm_j}$ 恰好具有相反的宇称，据此可以判断，在 2×2 的微扰矩阵中，$\hat{H}_B$ 仅对两个对角元有非零的贡献. 下面根据 ψ_{nljm_j} 的具体形式来计算矩阵元.

$$\psi_{n,l=j+\frac{1}{2},jm_j}=R_{n,j+\frac{1}{2}}(r)\frac{1}{\sqrt{2j+2}}\begin{bmatrix}\sqrt{j-m_j+1}\mathrm{Y}_{j+\frac{1}{2},m_j-\frac{1}{2}}\\-\sqrt{j+m_j+1}\mathrm{Y}_{j+\frac{1}{2},m_j+\frac{1}{2}}\end{bmatrix}, \tag{7.20-7}$$

$$\psi_{n,l=j-\frac{1}{2},jm_j}=R_{n,j-\frac{1}{2}}(r)\frac{1}{\sqrt{2j}}\begin{bmatrix}\sqrt{j+m_j}\mathrm{Y}_{j-\frac{1}{2},m_j-\frac{1}{2}}\\-\sqrt{j-m_j}\mathrm{Y}_{j-\frac{1}{2},m_j+\frac{1}{2}}\end{bmatrix}. \tag{7.20-8}$$

$$\left\langle n,l=j-\frac{1}{2},jm_j\middle|\hat{H}_B\middle|n,l=j-\frac{1}{2},jm_j\right\rangle=M_0Hm_j\frac{2j+1}{2j}\,, \tag{7.20-9}$$

$$\left\langle n,l=j+\frac{1}{2},jm_j\middle|\hat{H}_B\middle|n,l=j+\frac{1}{2},jm_j\right\rangle=M_0Hm_j\frac{2j+1}{2j+2}. \tag{7.20-10}$$

根据前面的计算，微扰矩阵可以写为

$$\begin{bmatrix}p&t\\t&q\end{bmatrix}, \tag{7.20-11}$$

$$p=M_0Hm_j\frac{2j+1}{2j}\,,\quad q=M_0Hm_j\frac{2j+1}{2j+2}\,,\quad t=e\varepsilon\frac{m_j}{2j(j+1)}\langle r\rangle_{nj}. \tag{7.20-12}$$

矩阵(7.20-11)的本征值，也就是能量一级修正为

$$\Delta E^{(1)}=\frac{1}{2}\left[(p+q)\pm\sqrt{(p-q)^2+4t^2}\right]. \tag{7.20-13}$$

另外需要指出，题 7.19 中的两点特别说明，对本题同样适用.

答　准至一级修正，$E_{nl}=E_n^{(0)}+\dfrac{1}{2\mu c^2}\left(\dfrac{e^4}{n^4a^2}\right)\left(\dfrac{3}{4}-\dfrac{n}{j+\dfrac{1}{2}}\right)+\dfrac{1}{2}\left[(p+q)\pm\right.$

$\left.\sqrt{(p-q)^2+4t^2}\right]$，$p=M_0Hm_j\dfrac{2j+1}{2j}$，$q=M_0Hm_j\dfrac{2j+1}{2j+2}$，$t=e\varepsilon\dfrac{m_j}{2j(j+1)}\langle r\rangle_{nj}$，

$\langle r\rangle_{nj}=\int_0^\infty r^2\mathrm{d}rR^*_{n,j-\frac{1}{2}}(r)rR_{n,j+\frac{1}{2}}(r)$.

7.21　求自旋在 $\boldsymbol{n}$ 方向 $(\cos\alpha,\cos\beta,\cos\gamma)$ 投影 $\boldsymbol{S}_n=\cos\alpha S_x\boldsymbol{i}+\cos\beta S_y\boldsymbol{j}+\cos\gamma S_z\boldsymbol{k}$ 的本征值和本征函数，在这些本征态中测量 S_z 的可能值是多少？相应概率多大？

分析　在 (S^2,S_x) 表象中，写出 $\boldsymbol{n}$ 方向上的自旋矩阵，求解相应的本征值问题即可，在求解时需要注意到三个方向余弦的平方和是 1，即 $\cos^2\alpha+\cos^2\beta+\cos^2\gamma=1$.

解　$\boldsymbol{n}$ 方向上的自旋表示为

$$\begin{aligned}(\hat{S}_n)&=\frac{\hbar}{2}\left(\cos\alpha\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}+\cos\beta\begin{bmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{bmatrix}+\cos\gamma\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix}\right)\\&=\frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix}\cos\gamma&\cos\alpha-\mathrm{i}\cos\beta\\\cos\alpha+\mathrm{i}\cos\beta&-\cos\gamma\end{bmatrix},\end{aligned}\tag{7.21-1}$$

求解矩阵的本征值问题，得到

$$\frac{\hbar}{2},\frac{1}{2\sin\dfrac{\gamma}{2}}\begin{bmatrix}\cos\alpha-\mathrm{i}\cos\beta\\1-\cos\gamma\end{bmatrix}\quad\text{和}\quad-\frac{\hbar}{2},\frac{1}{2\cos\dfrac{\gamma}{2}}\begin{bmatrix}\cos\alpha-\mathrm{i}\cos\beta\\-1-\cos\gamma\end{bmatrix}.\tag{7.21-2}$$

对于前一个本征态，测量 S_z 可得 $\pm\dfrac{\hbar}{2}$，概率分别为 $\cos^2\dfrac{\gamma}{2}$ 和 $\sin^2\dfrac{\gamma}{2}$. 对于后一个本征态，测量 S_z 可得 $\pm\dfrac{\hbar}{2}$，概率分别为 $\sin^2\dfrac{\gamma}{2}$ 和 $\cos^2\dfrac{\gamma}{2}$.

答　对应于 $\dfrac{\hbar}{2}$ 的本征值，本征矢量为 $\dfrac{1}{2\sin\dfrac{\gamma}{2}}(\cos\alpha-\mathrm{i}\cos\beta,1-\cos\gamma)^{\mathrm{T}}$，对应于 $-\dfrac{\hbar}{2}$ 的本征值，本征矢量为 $\dfrac{1}{2\cos\dfrac{\gamma}{2}}(\cos\alpha-\mathrm{i}\cos\beta,-1-\cos\gamma)^{\mathrm{T}}$，其中符号 T 表示

矩阵的转置. 对于前一个本征态，测量 S_z 可得 $\pm\frac{\hbar}{2}$，概率分别为 $\cos^2\frac{\gamma}{2}$ 和 $\sin^2\frac{\gamma}{2}$，对于后一个本征态，测量 S_z 可得 $\pm\frac{\hbar}{2}$，概率分别为 $\sin^2\frac{\gamma}{2}$ 和 $\cos^2\frac{\gamma}{2}$.

7.22　电子的总磁矩算符为 $\hat{\boldsymbol{\mu}}=-\frac{e}{2\mu c}\hat{\boldsymbol{L}}-\frac{e}{\mu c}\hat{\boldsymbol{S}}$，当电子处于 $\hat{\boldsymbol{L}}^2$、$\hat{\boldsymbol{J}}^2$ 和 $\hat{J}_z$ 的本征态 (l, j, m_j) 中求磁矩 $\langle ljm_j|\mu_3|ljm_j\rangle$.

分析　利用耦合表象基 χ_{jm_j} 的具体形式求磁矩算符的平均值.

解　磁矩算符表示为

$$\hat{\mu}_z=-\frac{e}{2\mu c}(\hat{L}_z+2\hat{S}_z)=-\frac{e}{2\mu c}(\hat{J}_z+\hat{S}_z)\,, \tag{7.22-1}$$

在耦合表象基 χ_{jm_j} 中，算符 $\hat{J}_z$ 具有确定值 $m_j\hbar$，因此

$$\langle ljm_j|\hat{\mu}_z|ljm_j\rangle=-M_0\left(m_j+\frac{1}{2}\langle ljm_j|\hat{\sigma}_z|ljm_j\rangle\right),\quad M_0=\frac{e\hbar}{2\mu c}\,. \tag{7.22-2}$$

对于 $j=l+\frac{1}{2}$，$m_j=m+\frac{1}{2}$ 的情况

$$\chi_{jm_j}=\chi_{l+\frac{1}{2},m+\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{2l+1}}\begin{bmatrix}\sqrt{l+m+1}\,\mathrm{Y}_{lm}\\ \sqrt{l-m}\,\mathrm{Y}_{l,m-1}\end{bmatrix}. \tag{7.22-3}$$

$$\langle\sigma_z\rangle=\int \mathrm{d}\Omega\chi^{+}_{l+\frac{1}{2},m+\frac{1}{2}}\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix}\chi_{l+\frac{1}{2},m+\frac{1}{2}}=\frac{2m_j}{2l+1}\,. \tag{7.22-4}$$

将式(7.22-4)代入式(7.22-2)得到

$$\langle ljm_j|\hat{\mu}_z|ljm_j\rangle=-M_0m_j\frac{2l+2}{2l+1}\,. \tag{7.22-5}$$

对于 $j=l-\frac{1}{2}$，$m_j=m+\frac{1}{2}$ 的情况

$$\chi_{jm_j}=\chi_{l-\frac{1}{2},m+\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{2l+1}}\begin{bmatrix}\sqrt{l-m}\,\mathrm{Y}_{lm}\\ -\sqrt{l+m+1}\,\mathrm{Y}_{l,m+1}\end{bmatrix}, \tag{7.22-6}$$

$$\langle\sigma_z\rangle=\int \mathrm{d}\Omega\chi^{+}_{l-\frac{1}{2},m+\frac{1}{2}}\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix}\chi_{l-\frac{1}{2},m+\frac{1}{2}}=\frac{-2m_j}{2l+1}\,, \tag{7.22-7}$$

将式(7.22-7)代入式(7.22-2)得到

$$\langle ljm_j|\hat{\mu}_z|ljm_j\rangle=-M_0m_j\frac{2l}{2l+1}\,. \tag{7.22-8}$$

答　对于 $j=l\pm\frac{1}{2}$ 两种情况，分别有 $\left\langle ljm_j\left|\hat{\mu}_z\right|ljm_j\right\rangle=-M_0m_j\frac{2l+1\pm1}{2l+1}$，其中 $M_0=\frac{e\hbar}{2\mu c}$.

7.23　计算在 $^3S_1$ 态的氘核算的磁矩.

分析　$^3S_1$ 态表示，氘核中质子和中子的总自旋量子数是 1(自旋态数是左上角的 3)，质子和中子相对运动的轨道角动量是零(由中间的字母 S 表示)，氘核的总角动量量子数是 1(右下角的数字表示).

解　对于 $^3S_1$ 态，轨道角动量为零，因而没有轨道磁矩. 又由于总自旋为 1，质子和中子自旋平行，氘核的磁矩就是质子和中子的自旋磁矩之和，也即 $\mu=\mu_p+\mu_n=(2.79-1.91)\mu_N=0.88\mu_N$，其中 μ_N 是核磁子.

答　氘核处于 $^3S_1$ 态时磁矩为 $0.88\mu_N$，其中 μ_N 是核磁子.

7.24　已知氢原子处于下列状态 $\psi(r,\theta,\varphi,S_z)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}\sqrt{\frac{1}{\pi a^3}}e^{-\frac{r}{a_0}}\\ \sqrt{\frac{1}{\pi a^3}}e^{-\frac{r}{a_0}}\end{bmatrix}$，$a_0$ 为玻尔半径，问测量此原子的能量、角动量、自旋能测得什么数值，相应的概率如何?

分析　为求某个可观察量的可能取值和相应概率，应将波函数用该物理量的本征态展开，这里就是用能量、角动量 $\hat{L}^2$、$\hat{L}_z$ 和自旋 $\hat{S}_z$ 的共同本征态 ψ_{nlmm_s} 展开.

解　将波函数用 ψ_{nlmm_s} 展开得到

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{100}\xi_+ +\psi_{100}\xi_-)\,, \tag{7.24-1}$$

据此可知，能量取值为 $E_0=-\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}$，概率 100%，角动量取值为零，概率 100%，自旋 S_z 取值为 $\pm\frac{\hbar}{2}$，概率各为 50%.

答　能量取值为 $E_0=-\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}$，概率 100%，角动量取值为零，概率 100%，自旋 S_z 取值为 $\pm\frac{\hbar}{2}$，概率各为 50%.

7.25　电子束通过第一个施特恩-格拉赫实验装置后分为两束，将其中一束引入第二个装置，第二个装置的磁场与第一个装置的磁场方向成φ角，问通过第二个装置后分为两束的粒子强度之比.

分析　电子通过第一个施特恩-格拉赫装置后成为自旋极化$S_z=\pm\frac{\hbar}{2}$的电子束，通过第二个施特恩-格拉赫装置后成为自旋极化$S_n=\pm\frac{\hbar}{2}$的电子束. $\boldsymbol{n}$是与z轴成φ角的方向. 题目要求的就是对于一个$S_z=\pm\frac{\hbar}{2}$的电子，测量其$\boldsymbol{n}$方向上的自旋，得到两种取值$\pm\frac{\hbar}{2}$的概率比.

解　引用题 7.21 的结果，可知$S_n=\pm\frac{\hbar}{2}$的两个本征态为

$$\frac{1}{2\sin\frac{\gamma}{2}}\begin{bmatrix}\cos\alpha-\mathrm{i}\cos\beta\\1-\cos\gamma\end{bmatrix}\text{和}\frac{1}{2\cos\frac{\gamma}{2}}\begin{bmatrix}\cos\alpha-\mathrm{i}\cos\beta\\-1-\cos\gamma\end{bmatrix},\tag{7.25-1}$$

这里$\cos^2\alpha+\cos^2\beta+\cos^2\gamma=1$，角度$\gamma$就是本题中的$\varphi$，对于进入第二个施特恩-格拉赫装置的为$S_z=\frac{\hbar}{2}$的极化电子的情形

$$\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}=a_1\frac{1}{2\sin\frac{\gamma}{2}}\begin{bmatrix}\cos\alpha-\mathrm{i}\cos\beta\\1-\cos\gamma\end{bmatrix}+a_2\frac{1}{2\cos\frac{\gamma}{2}}\begin{bmatrix}\cos\alpha-\mathrm{i}\cos\beta\\-1-\cos\gamma\end{bmatrix},\tag{7.25-2}$$

解得

$$a_1=\frac{\cos\alpha+\mathrm{i}\cos\beta}{2\sin\frac{\gamma}{2}},\quad|a_1|^2=\cos^2\frac{\gamma}{2},\quad a_1=\frac{\cos\alpha+\mathrm{i}\cos\beta}{2\cos\frac{\gamma}{2}},\quad|a_2|^2=\sin^2\frac{\gamma}{2}.\tag{7.25-3}$$

因此，经过第二个施特恩-格拉赫装置后，两束粒子强度之比为

$$\frac{|a_2|^2}{|a_1|^2}=\tan^2\frac{\gamma}{2}=\tan^2\frac{\varphi}{2}.\tag{7.25-4}$$

对于进入第二个施特恩-格拉赫装置的为$S_z=-\frac{\hbar}{2}$的极化电子的情形，可以类似地计算，得到两束粒子强度之比为$\cot^2\frac{\varphi}{2}$.

答　对于进入第二个施特恩-格拉赫装置的为$S_z=\frac{\hbar}{2}$的极化电子的情形，出射的两束粒子强度之比为$\tan^2\frac{\varphi}{2}$，对于进入第二个施特恩-格拉赫装置的为$S_z=-\frac{\hbar}{2}$

的极化电子的情形，出射的两束粒子强度之比为 $\cot^2\dfrac{\varphi}{2}$.

7.26　定义算符 $\hat{\sigma}_{12}=\dfrac{3(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1\cdot\boldsymbol{r})(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_2\cdot\boldsymbol{r})}{r^2}-\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_2$，$\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2$，证明：

(1) $\hat{\sigma}_{12}=\dfrac{3(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1\cdot\boldsymbol{r})^2}{2r^2}-\dfrac{\hat{\sigma}^2}{2}$，式中 $\hat{\boldsymbol{\sigma}}=\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1+\hat{\boldsymbol{\sigma}}_2$；

(2) $\hat{\sigma}_{12}^2=6+2\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_2-2\hat{\sigma}_{12}=\hat{\sigma}^2-2\hat{\sigma}_{12}$.

并求 $\hat{\sigma}_{12}$ 的本征值.

分析　本题研究算符 $\hat{\sigma}_{12}$ 的代数关系，具体计算以泡利矩阵的代数关系为基础. 要注意的是，下标为 1 和 2 的泡利矩阵分别作用在不同的空间上(例如 1 代表质子的自旋空间，2 代表中子的自旋空间)，因此不同数字下标的泡利矩阵彼此对易，相同数字下标但空间取向指标分别为 x、y、z 的泡利矩阵满足题 7.1 中的代数关系.

解　定义空间方向 $\boldsymbol{n}=\dfrac{\boldsymbol{r}}{r}$，则

$$\hat{\sigma}_{12}=3\hat{\sigma}_{1n}\hat{\sigma}_{2n}-\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_2\,, \tag{7.26-1}$$

记 $\hat{\boldsymbol{\sigma}}=\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1+\hat{\boldsymbol{\sigma}}_2$，则

$$\hat{\sigma}_n^2=(\hat{\sigma}_{1n}+\hat{\sigma}_{2n})^2=\hat{\sigma}_{1n}^2+\hat{\sigma}_{2n}^2+2\hat{\sigma}_{1n}\hat{\sigma}_{2n}\,. \tag{7.26-2}$$

假定 $\boldsymbol{n}$ 方向用三个方向余弦 $\cos\alpha$、$\cos\beta$ 和 $\cos\gamma$ 来表示，$\cos^2\alpha+\cos^2\beta+\cos^2\gamma=1$，

$$\hat{\sigma}_{1n}^2=(\hat{\sigma}_{1x}\cos\alpha+\hat{\sigma}_{1y}\cos\beta+\hat{\sigma}_{1z}\cos\gamma)^2\,, \tag{7.26-3}$$

不同空间取向指标的泡利矩阵反对易，例如 $\hat{\sigma}_{1x}\hat{\sigma}_{1y}+\hat{\sigma}_{1y}\hat{\sigma}_{1x}=0$，相同空间取向指标的泡利矩阵乘积为 1，例如 $\hat{\sigma}_{1x}\hat{\sigma}_{1x}=1$，因此容易看出 $\hat{\sigma}_{1n}^2=1$，同样地，有 $\hat{\sigma}_{2n}^2=1$，代入式(7.26-2)得到

$$\hat{\sigma}_n^2=2+2\hat{\sigma}_{1n}\hat{\sigma}_{2n}\,,\quad \hat{\sigma}_{1n}\hat{\sigma}_{2n}=\frac{1}{2}\hat{\sigma}_n^2-1\,. \tag{7.26-4}$$

对于矢量 $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ 有

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}^2=(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1+\hat{\boldsymbol{\sigma}}_2)^2=\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1^2+\hat{\boldsymbol{\sigma}}_2^2+2\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_2\,, \tag{7.26-5}$$

因为

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1^2=\hat{\sigma}_{1x}^2+\hat{\sigma}_{1y}^2+\hat{\sigma}_{1z}^2=3\,. \tag{7.26-6}$$

类似地，有 $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_2^2=3$，所以

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}^2 = 6 + 2\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2 , \quad \hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2 = \frac{1}{2}\hat{\boldsymbol{\sigma}}^2 - 3 , \tag{7.26-7}$$

把式(7.26-4)和式(7.26-7)代入式(7.26-1)得到

$$\hat{\sigma}_{12} = \frac{3}{2}\hat{\sigma}_n^2 - \frac{1}{2}\hat{\boldsymbol{\sigma}}^2 , \tag{7.26-8}$$

$$\hat{\sigma}_{12}^2 = \frac{9}{4}\hat{\sigma}_n^4 + \frac{1}{4}\hat{\boldsymbol{\sigma}}^4 - \frac{3}{4}(\hat{\sigma}_n^2\hat{\boldsymbol{\sigma}}^2 + \hat{\boldsymbol{\sigma}}^2\hat{\sigma}_n^2) . \tag{7.26-9}$$

利用式(7.26-4)得到

$$\hat{\sigma}_n^4 = 4(1+\hat{\sigma}_{1n}\hat{\sigma}_{2n})^2 = 4(1+2\hat{\sigma}_{1n}\hat{\sigma}_{2n} + \hat{\sigma}_{1n}^2\hat{\sigma}_{2n}^2) = 4(1+2\hat{\sigma}_{1n}\hat{\sigma}_{2n}+1) = 4\hat{\sigma}_n^2 . \tag{7.26-10}$$

利用式(7.26-7)得到

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}^4 = 36 + 24\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2 + 4(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2)^2 , \tag{7.26-11}$$

$$\begin{aligned}(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2)^2 &= (\hat{\sigma}_{1x}\hat{\sigma}_{2x} + \hat{\sigma}_{1y}\hat{\sigma}_{2y} + \hat{\sigma}_{1z}\hat{\sigma}_{2z})^2 \\ &= \hat{\sigma}_{1x}^2\hat{\sigma}_{2x}^2 + \hat{\sigma}_{1y}^2\hat{\sigma}_{2y}^2 + \hat{\sigma}_{1z}^2\hat{\sigma}_{2z}^2 + 2\hat{\sigma}_{1x}\hat{\sigma}_{1y}\hat{\sigma}_{2x}\hat{\sigma}_{2y} \\ &\quad + 2\hat{\sigma}_{1y}\hat{\sigma}_{1z}\hat{\sigma}_{2y}\hat{\sigma}_{2z} + 2\hat{\sigma}_{1z}\hat{\sigma}_{1x}\hat{\sigma}_{2z}\hat{\sigma}_{2x} \\ &= 3 + 2[(\mathrm{i}\hat{\sigma}_{1z})(\mathrm{i}\hat{\sigma}_{2z}) + (\mathrm{i}\hat{\sigma}_{1x})(\mathrm{i}\hat{\sigma}_{2x}) + (\mathrm{i}\hat{\sigma}_{1y})(\mathrm{i}\hat{\sigma}_{2y})] \\ &= 3 - 2\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2 .\end{aligned} \tag{7.26-12}$$

将式(7.26-12)代入式(7.26-11)并利用式(7.26-7)得到

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}^4 = 48 + 16\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2 = 8\hat{\boldsymbol{\sigma}}^2 . \tag{7.26-13}$$

接下来计算$(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2)\hat{\sigma}_x$，

$$\begin{aligned}(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2)\hat{\sigma}_x &= (\hat{\sigma}_{1x}\hat{\sigma}_{2x} + \hat{\sigma}_{1y}\hat{\sigma}_{2y} + \hat{\sigma}_{1z}\hat{\sigma}_{2z})(\hat{\sigma}_{1x} + \hat{\sigma}_{2x}) \\ &= \hat{\sigma}_{2x} - \mathrm{i}\hat{\sigma}_{1z}\hat{\sigma}_{2y} + \mathrm{i}\hat{\sigma}_{1y}\hat{\sigma}_{2z} + \hat{\sigma}_{1x} - \mathrm{i}\hat{\sigma}_{1y}\hat{\sigma}_{2z} + \mathrm{i}\hat{\sigma}_{1z}\hat{\sigma}_{2y} \\ &= \hat{\sigma}_x .\end{aligned} \tag{7.26-14}$$

根据对称性，上式对于空间取向指标为 y 、z 的情形也是成立的(当然也可以直接验算)，因此式(7.26-14)可以写为矢量式

$$(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2)\hat{\boldsymbol{\sigma}} = \hat{\boldsymbol{\sigma}} , \tag{7.26-15}$$

于是

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}^2\hat{\sigma}_n = (6 + 2\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2)\hat{\sigma}_n = 8\hat{\sigma}_n . \tag{7.26-16}$$

除常数因子外，$\hat{\boldsymbol{\sigma}}^2$ 算符就是总自旋的平方，$\hat{\sigma}_n$ 就是总自旋在某个空间方向上的分量，因此这两个算符是彼此对易的，

$$\hat{\sigma}_n\hat{\boldsymbol{\sigma}}^2 = \hat{\boldsymbol{\sigma}}^2\hat{\sigma}_n = 8\hat{\sigma}_n . \tag{7.26-17}$$

把式(7.26-10)、式(7.26-13)和式(7.26-17)代入式(7.26-9)并利用式(7.26-8)得到

$$\hat{\sigma}_{12}^2 = \hat{\boldsymbol{\sigma}}^2 - 2\hat{\sigma}_{12}. \tag{7.26-18}$$

将式中两边同时乘以 $\hat{\sigma}_{12}$（$\hat{\sigma}_{12}$ 与 $\hat{\boldsymbol{\sigma}}^2$ 是对易的），并利用式(7.26-8)、式(7.26-13)、式(7.26-17)化简得到

$$\hat{\sigma}_{12}^3 + 2\hat{\sigma}_{12}^2 - 8\hat{\sigma}_{12} = 0. \tag{7.26-19}$$

在 $\hat{\sigma}_{12}$ 的自身表象中，$\hat{\sigma}_{12}$ 是对角矩阵，其对角元就是 $\hat{\sigma}_{12}$ 的本征值，将这个对角矩阵代入式(7.26-19)可以看出，式(7.26-19)就是 $\hat{\sigma}_{12}$ 的本征值满足的代数方程. 解之，得到 $\hat{\sigma}_{12}$ 的三个本征值为 –4 、2、0. 另外，可以说明的是，从前面的计算过程还可以看出式(7.26-19)是 $\hat{\sigma}_{12}$ 的最简代数方程，也就是说前面得到的本征值并无增根.

答　$\hat{\sigma}_{12}$ 的三个本征值为 –4、2、0.

7.27　求 $\hat{H}_1$ 和 $\hat{H}_2$ 两算符的本征值，

$$\hat{H}_1 = a(\hat{\sigma}_{1z} + \hat{\sigma}_{2z}) + b\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2;\quad \hat{H}_2 = a_1\hat{\sigma}_{1z} + a_2\hat{\sigma}_{2z} + b\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2,\quad a_1 \neq a_2,$$

其中 a 、b 、a_1 和 a_2 为实数.

分析　在耦合表象或非耦合表象下写出哈密顿矩阵并对角化即可. (本题采用 $\hbar = 1$ 的单位制，这样叙述比较简单.)

解　首先研究 $\hat{H}_1$，用自旋算符可将 $\hat{H}_1$ 表示为

$$\hat{H}_1 = 2a\hat{S}_z + 2b(\hat{S}^2 - \hat{S}_1^2 - \hat{S}_2^2), \tag{7.27-1}$$

其中 $\hat{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2$ 是总自旋算符，由式(7.27-1)可知，总自旋 $\hat{S}^2$ 、$\hat{S}_z$ 的共同本征态(也就是耦合表象基 χ_{sm_s} 就是 $\hat{H}_1$ 的本征态. 对于单个自旋，$S_1^2 = \frac{3}{4}$，$S_2^2 = \frac{3}{4}$，根据总自旋的取值情况，$S^2 = 1\times(1+1) = 2$，$S_z = 0, \pm 1$，或者 $S^2 = 0$，$S_z = 0$，可知 $\hat{H}_1$ 的本征值为 $-3b$ 、b 、$b \pm 2a$.

下面讨论 $\hat{H}_2$，无论在耦合或是非耦合表象下 $\hat{H}_2$ 的矩阵都不是对角的，我们选用非耦合表象来计算，四个基函数取为 $\xi_+\eta_+$ 、$\xi_+\eta_-$ 、$\xi_-\eta_+$ 、$\xi_-\eta_-$. $\xi_\pm$ 和 $\eta_\pm$ 是单个自旋的波函数($\hat{S}_{1z}$ 和 $\hat{S}_{2z}$ 的本征态). 为叙述方便起见，将 $\hat{H}_2$ 分为两部分

$$\hat{H}_2 = \hat{A} + \hat{B},\quad \hat{A} = a_1\hat{\sigma}_{1z} + a_2\hat{\sigma}_{2z} + b\hat{\sigma}_{1z}\hat{\sigma}_{2z},\quad \hat{B} = b(\hat{\sigma}_{1x}\hat{\sigma}_{2x} + \hat{\sigma}_{1y}\hat{\sigma}_{2y}). \tag{7.27-2}$$

显然，四个非耦合表象基是 $\hat{A}$ 算符的本征态，$\hat{A}$ 算符的矩阵是对角矩阵

$$\hat{A}=\begin{bmatrix} a_1+a_2+b & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_1-a_2-b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -a_1+a_2-b & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -a_1-a_2+b \end{bmatrix}. \tag{7.27-3}$$

再看 $\hat{B}$ 算符，由于泡利矩阵 $\sigma_{x,y}$ 的代数性质(参阅题 7.1)，经过 $\hat{B}$ 作用后，单自旋态要发生翻转，因此 $\hat{B}$ 的矩阵一定是非对角的. 再注意到四个非耦合表象基 $\xi_+\eta_+$、$\xi_+\eta_-$、$\xi_-\eta_+$、$\xi_-\eta_-$ 都是总自旋的 z 分量($\hat{S}_z$)的本征态，本征值分别为1, 0, 0和 -1. 而 $\hat{B}$ 算符与 $\hat{S}_z$ 对易式计算如下：

$$[\hat{S}_z,\hat{B}]=2b\left(\hat{S}_z,2\hat{\boldsymbol{S}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{S}}_2-2\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}\right)=2b\left(\hat{S}_z,\hat{\boldsymbol{S}}^2-\hat{S}_1^2-\hat{S}_2^2-2\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}\right)=0. \tag{7.27-4}$$

因此，在 $\hat{B}$ 算符的矩阵中，凡是 $\hat{S}_z$ 量子数不相同的态间的矩阵元都为零，按照这一原则，$\hat{B}$ 算符仅在 $\xi_+\eta_-$ 和 $\xi_-\eta_+$ 间有非零矩阵元，可以算得

$$\langle\xi_+\eta_-|\hat{B}|\xi_-\eta_+\rangle=b\langle\xi_+\eta_-|\sigma_{1x}\sigma_{2x}+\sigma_{1y}\sigma_{2y}|\xi_-\eta_+\rangle=2b. \tag{7.27-5}$$

在式(7.27-5)中的计算中，只要注意到数字下标为 1 的泡利矩阵只对 ξ 作用，数字下标为 2 的泡利矩阵只对 η 作用，计算就很容易完成. 至此我们可以写出 $\hat{B}$ 算符的矩阵

$$\hat{B}\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2b & 0 \\ 0 & 2b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \tag{7.27-6}$$

和 $\hat{A}$ 算符的矩阵合并后得到

$$\hat{H}_2=\begin{bmatrix} a_1+a_2+b & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_1-a_2-b & 2b & 0 \\ 0 & 2b & -a_1+a_2-b & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -a_1-a_2+b \end{bmatrix}. \tag{7.27-7}$$

矩阵(7.27-7)的本征值就是哈密顿量 $\hat{H}_2$ 的本征值，经过线性代数的标准程序，可以算出四个本征值分别为 a_1+a_2+b、$-a_1-a_2+b$、$-b\pm\sqrt{(a_1+a_2)^2+4b^2}$.

答　$\hat{H}_1$ 的本征值为 $-3b$、b、$b\pm2a$，$\hat{H}_2$ 的本征值为 a_1+a_2+b、$-a_1-a_2+b$、$-b\pm\sqrt{(a_1+a_2)^2+4b^2}$.

第八章　多粒子系的量子力学

8.1　考虑微弱的相互作用着的三个玻色粒子组成的系统，可近似作为独立粒子系处理，各粒子处于已知单粒子态，试写出系统的零级近似波函数.

分析　根据题设条件，体系近似地可看作独立粒子系，且已知单粒子态，那么将 3 个粒子的单粒子波函数相乘得到的乘积态，必定是哈密顿量的本征态. 在乘积态中，轮换粒子的坐标会得到不同的波函数，所有这些波函数都有相同的能量本征值. 对于玻色子系统，应将这些轮换得到的波函数重新组合得到一个在任意交换两个粒子坐标时完全对称化的波函数；对于费米子系统，应将这些轮换得到的波函数重新组合得到一个在任意交换两个粒子时完全反对称化的波函数.

解　假定 3 个粒子分别处于归一化的单粒子态 φ_1 、φ_2 和 φ_3；3 个粒子的坐标分别记作 q_1 、q_2 和 q_3 (这里的坐标是广义的提法，既包括空间坐标变量也包括自旋以及其他可能的内禀变量)，则体系的零级近似波函数可以写成

$$\begin{aligned}\psi=\frac{1}{\sqrt{6}}[&\varphi_1(q_1)\varphi_2(q_2)\varphi_3(q_3)+\varphi_1(q_1)\varphi_2(q_3)\varphi_3(q_2)+\varphi_1(q_2)\varphi_2(q_1)\varphi_3(q_3)\\&+\varphi_1(q_2)\varphi_2(q_3)\varphi_3(q_1)+\varphi_1(q_3)\varphi_2(q_1)\varphi_3(q_2)+\varphi_1(q_3)\varphi_2(q_2)\varphi_3(q_1)].\end{aligned}\tag{8.1-1}$$

如果两个粒子处于同一个单粒子态，例如 φ_1，另一个粒子处于单粒子态 φ_2，那么式(8.1-1)中部分轮换不会产生新的函数，因而是不必要的，体系的零级近似波函数可以简化为

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{3}}[\varphi_1(q_1)\varphi_1(q_2)\varphi_2(q_3)+\varphi_1(q_1)\varphi_1(q_3)\varphi_2(q_2)+\varphi_1(q_2)\varphi_1(q_3)\varphi_2(q_1)].\tag{8.1-2}$$

如果 3 个粒子都处于同一个单粒子态，例如 φ_1，那么所有的轮换都是不必要的，体系的零级近似波函数成为

$$\psi=\varphi_1(q_1)\varphi_1(q_2)\varphi_1(q_3).\tag{8.1-3}$$

答　题目所求的体系零级近似波函数，根据单粒子态的不同取法，分别为

$$\begin{aligned}&\frac{1}{\sqrt{6}}[\varphi_1(q_1)\varphi_2(q_2)\varphi_3(q_3)+\varphi_1(q_1)\varphi_2(q_3)\varphi_3(q_2)+\varphi_1(q_2)\varphi_2(q_1)\varphi_3(q_3)\\&+\varphi_1(q_2)\varphi_2(q_3)\varphi_3(q_1)+\varphi_1(q_3)\varphi_2(q_1)\varphi_3(q_2)+\varphi_1(q_3)\varphi_2(q_2)\varphi_3(q_1)],\\&\frac{1}{\sqrt{3}}[\varphi_1(q_1)\varphi_1(q_2)\varphi_2(q_3)+\varphi_1(q_1)\varphi_1(q_3)\varphi_2(q_2)+\varphi_1(q_2)\varphi_1(q_3)\varphi_2(q_1)],\\&\varphi_1(q_1)\varphi_1(q_2)\varphi_1(q_3).\end{aligned}$$

8.2　若由两个动量为 $\boldsymbol{p}_1$ 和 $\boldsymbol{p}_2$，自旋相反的自由电子所组成的系统，试求其归一化波函数(忽略电子间的相互作用).

分析　根据题设条件，忽略电子间的相互作用，两电子的波函数可以由单电子态构成，即写出两个单电子波函数的乘积，在乘积中轮换电子坐标并进行反对称化的组合. 由于这里不考虑自旋轨道耦合，因此波函数可以写成轨道波函数乘以自旋波函数的形式. 根据题设条件，两电子自旋相反，也就是说两电子的自旋波函数是自旋单态 χ_{00}，是交换反对称的. 两电子波函数必为交换反对称，既然其中的自旋部分已经交换反对称，那么其中的轨道波函数部分就应该是交换对称的. 这里要注意的是，自旋相反或者自旋反平行都是自旋单态的另一种提法，尽管自旋三重态 χ_{10} 中两个电子的自旋 z 分量也是相反的，但 χ_{10} 并不算在自旋反平行或自旋相反的态中.

解　具有确定动量 $\boldsymbol{p}$ 的单电子轨道波函数就是平面波，题目所求波函数的自旋部分是自旋单态，轨道部分动量分别为 $\boldsymbol{p}_1$ 和 $\boldsymbol{p}_2$ 的两个平面波函数的交换对称化组合，因此

$$\begin{aligned}\psi &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}_1\cdot\boldsymbol{x}_1}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\frac{\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}_2\cdot\boldsymbol{x}_2}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}+\frac{\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}_1\cdot\boldsymbol{x}_2}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\frac{\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}_2\cdot\boldsymbol{x}_1}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\right]\chi_{00} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}_1\cdot\boldsymbol{x}_1+\boldsymbol{p}_2\cdot\boldsymbol{x}_2)}+\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}_1\cdot\boldsymbol{x}_2+\boldsymbol{p}_2\cdot\boldsymbol{x}_1)}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\chi_{00}.\end{aligned} \tag{8.2-1}$$

答　体系的归一化波函数为 $\dfrac{1}{\sqrt{2}}\dfrac{\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}_1\cdot\boldsymbol{x}_1+\boldsymbol{p}_2\cdot\boldsymbol{x}_2)}+\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}_1\cdot\boldsymbol{x}_2+\boldsymbol{p}_2\cdot\boldsymbol{x}_1)}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\chi_{00}$.

8.3　证明两个自旋平行，动量为 $\boldsymbol{p}_1$ 和 $\boldsymbol{p}_2$ 的自由电子相距 $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2$ 的概率为

$$P(\boldsymbol{r})=\frac{1}{V}\left\{1-\cos\left[\frac{1}{\hbar}(\boldsymbol{p}_1-\boldsymbol{p}_2)\cdot\boldsymbol{r}\right]\right\}.$$

分析　两电子的自旋波函数是三重态 χ_{1s}，是交换对称的，两电子的轨道波函数是反对称的. 为了求出两电子相距为 $\boldsymbol{r}$ 的概率，引入质心坐标和相对坐标，并采用箱归一化，来描述电子的波函数.

证明　由题意，两电子的波函数自旋部分是自旋三重态，轨道部分的动量分别为 $\boldsymbol{p}_1$ 和 $\boldsymbol{p}_2$ 的两个平面波乘积交换反对称组合，有

$$\begin{aligned}\psi &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{1}{\sqrt{V}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}_1\cdot\boldsymbol{r}_1}\frac{1}{\sqrt{V}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}_2\cdot\boldsymbol{r}_2}-\frac{1}{\sqrt{V}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}_1\cdot\boldsymbol{r}_2}\frac{1}{\sqrt{V}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}_2\cdot\boldsymbol{r}_1}\right]\chi_{1s}\\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{V}\left[\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}_1\cdot\boldsymbol{r}_1+\boldsymbol{p}_2\cdot\boldsymbol{r}_2)}-\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}_1\cdot\boldsymbol{r}_2+\boldsymbol{p}_2\cdot\boldsymbol{r}_1)}\right]\chi_{1s},\end{aligned} \tag{8.3-1}$$

引入质心坐标 $\boldsymbol{R}=\dfrac{\boldsymbol{r}_1+\boldsymbol{r}_2}{2}$ 和相对坐标 $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2$，式(8.3-1)成为

$$\psi = \sqrt{2}\mathrm{i}\frac{1}{V}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}_1+\boldsymbol{p}_2)\cdot\boldsymbol{R}}\left[\sin\frac{(\boldsymbol{p}_1-\boldsymbol{p}_2)\cdot\boldsymbol{r}}{2\hbar}\right]\chi_{1s}. \tag{8.3-2}$$

为了得到两电子相距为 $\boldsymbol{r}$ 的概率 $P(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3r$，需要对自旋指标和质心坐标求和，即

$$P(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3r = \left[\int\psi^{+}\psi\mathrm{d}^3R\right]\mathrm{d}^3r, \tag{8.3-3}$$

$$\begin{aligned}P(\boldsymbol{r}) &= \frac{2}{V^2}\int\left[\sin^2\frac{(\boldsymbol{p}_1-\boldsymbol{p}_2)\cdot\boldsymbol{r}}{2\hbar}\right]\mathrm{d}^3R\\ &= \frac{2}{V}\sin^2\frac{(\boldsymbol{p}_1-\boldsymbol{p}_2)\cdot\boldsymbol{r}}{2\hbar} = \frac{1}{V}\left[1-\cos\frac{(\boldsymbol{p}_1-\boldsymbol{p}_2)\cdot\boldsymbol{r}}{\hbar}\right].\end{aligned} \tag{8.3-4}$$

证毕.

8.4　证明：对于两个自旋为 I 的全同粒子所组成的系统，自旋对称的状态数与自旋反对称的状态数之比为 $\dfrac{I+1}{I}$.

分析　自旋为 I 的体系共有 $2I+1$ 种不同的自旋态，取 1 个自旋态，共有 $2I+1$ 种不同的取法，在取一个自旋态的条件下，无法构成交换反对称的状态，但可以构成交换对称的状态(两粒子处于同一个态). 取 2 个自旋态，共有 $\dfrac{2I(2I+1)}{2}=I(2I+1)$ 种不同取法，每种取法均可以构成一个交换对称的状态，也可以构成一个交换反对称的状态.

证明　根据分析可得，交换对称的态与交换反对称的态的数目之比为

$$\frac{\dfrac{2I(2I+1)}{2}+(2I+1)}{\dfrac{2I(2I+1)}{2}} = \frac{2I(2I+1)+2(2I+1)}{2I(2I+1)} = \frac{I+1}{I}. \tag{8.4-1}$$

证毕.

8.5　求两个在一维无穷深势阱 $V(x)=\begin{cases}0, & 0\leqslant x\leqslant a\\ \infty, & x<0, x>a\end{cases}$ 中的电子所组成的系统的零级近似归一化波函数，并写出基态的一级近似能量修正的表达式.

分析　题目中不考虑自旋轨道耦合，体系的波函数可以写为自旋部分和轨道部分的乘积. 两电子的总自旋守恒，因此波函数的自旋部分为总自旋的本征态，即自旋单态和三重态，分别是交换反对称和交换对称的，因而相应的轨道波函数分别为交换对称和交换反对称的. 特别地，当两电子处于同一个轨道态时，仅能构成交换对称的轨道波函数，此时自旋波函数仅可以取交换反对称的自旋单态.

解　一维无限深势阱的单粒子轨道波函数为

$$\varphi_n(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi x}{a}, & 0\leqslant x\leqslant a\\ 0, & x<0, x>a\end{cases}. \tag{8.5-1}$$

当两电子处于不同的轨道态(即 $m\neq n$)时，其零级近似波函数可以写成

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_n(x_1)\varphi_m(x_2)+\varphi_n(x_2)\varphi_m(x_1)]\chi_{00}\,, \tag{8.5-2}$$

或者

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_n(x_1)\varphi_m(x_2)-\varphi_n(x_2)\varphi_m(x_1)]\chi_{1s}\,. \tag{8.5-3}$$

这是 4 个能量简并的态，能量为 $\dfrac{(n^2+m^2)\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}$，当两电子处于相同的轨道态时，其零级近似波函数可以写为

$$\psi=\varphi_n(x_1)\varphi_n(x_2)\chi_{00}\,, \tag{8.5-4}$$

能量为 $\dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{\mu a^2}$. 当两个电子都处于 $n=1$ 的轨道态时能量最低，所以基态的零级近似波函数为

$$\psi_{\mathrm{G}}=\varphi_1(x_1)\varphi_1(x_2)\chi_{00}\,. \tag{8.5-5}$$

考虑到电子间的库仑能，基态能量修正的一级近似为

$$\Delta E^{(1)}=\int_0^a\mathrm{d}x_1\int_0^a\mathrm{d}x_1\psi_G^{+}\frac{e^2}{|x_1-x_2|}\psi_{\mathrm{G}}=\int_0^a\mathrm{d}x_1\int_0^a\mathrm{d}x_1\frac{e^2|\varphi_1(x_1)|^2|\varphi_1(x_2)|^2}{|x_1-x_2|}\,. \tag{8.5-6}$$

答　两个在一维无穷深势阱 $V(x)=\begin{cases}0, & 0\leqslant x\leqslant a\\ \infty, & x<0, x>a\end{cases}$ 中的电子所组成的系统的零级近似归一化波函数为 $\dfrac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_n(x_1)\varphi_m(x_2)+\varphi_n(x_2)\varphi_m(x_1)]\chi_{00}$、$\dfrac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_n(x_1)\varphi_m(x_2)-$

$\varphi_n(x_2)\varphi_m(x_1)]\chi_{1s}$ 和 $\varphi_n(x_1)\varphi_n(x_2)\chi_{00}$，基态的一级近似能量修正的表达式 $\int_0^a \mathrm{d}x_1 \int_0^a \mathrm{d}x_1 \dfrac{e^2 |\varphi_1(x_1)|^2 |\varphi_1(x_2)|^2}{|x_1 - x_2|}$.

8.6 试求三个电子的自旋波函数.

分析 在非耦合表象下写出总自旋平方算符的矩阵并对角化即可，具体计算时，下标为 1、2、3 的泡利矩阵分别作用在 $\xi_\pm$、$\eta_\pm$、$\zeta_\pm$ 上，不同数字下标的泡利矩阵彼此对易，相同数字下标但空间取向指标分别为 x、y、z 的泡利矩阵满足题 7.1 中的代数关系. 本题为叙述简单起见，采用 $\hbar = 1$ 的单位制.

解 非耦合表象基共有 8 个态，分别是 $\xi_+\eta_+\zeta_+$、$\xi_+\eta_+\zeta_-$、$\xi_+\eta_-\zeta_+$、$\xi_+\eta_-\zeta_-$、$\xi_-\eta_+\zeta_+$、$\xi_-\eta_+\zeta_-$、$\xi_-\eta_-\zeta_+$、$\xi_-\eta_-\zeta_-$. 我们的任务是在这 8 个态张成的空间中写出总自旋平方算符 $\hat{S}^2$ 的矩阵并对角化. 注意到这 8 个态都是总自旋 z 分量算符 $\hat{S}_z$ 的本征态，而 $\hat{S}^2$ 和 $\hat{S}_z$ 对易，因此 $\hat{S}^2$ 的矩阵中凡是 $\hat{S}_z$ 的量子数不相同的态间的矩阵元必定为零，$\hat{S}^2$ 的矩阵成为按 $\hat{S}_z$ 的量子数分块的分块对角矩阵. 观察 8 个表象基函数，可以发现 $\hat{S}_z$ 的量子数共有 $\pm\dfrac{1}{2}$ 和 $\pm\dfrac{3}{2}$ 四种情况，因此 $\hat{S}^2$ 的矩阵应由 4 个分块矩阵组成. 我们来逐一讨论.

(1) $\hat{S}_z$ 的量子数为 $\dfrac{3}{2}$ 的块. 这个块中仅有一个态 $\xi_+\eta_+\zeta_+$，因此这个态必为 $\hat{S}^2$ 的本征态，本征值为

$$\langle \xi_+\eta_+\zeta_+ | \hat{S}^2 | \xi_+\eta_+\zeta_+ \rangle. \tag{8.6-1}$$

为计算矩阵元，写出用泡利矩阵表达的总自旋平方算符

$$\begin{aligned} \hat{S}^2 = {} & \frac{9}{4} + \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_{1z}\hat{\sigma}_{2z} + \hat{\sigma}_{2z}\hat{\sigma}_{3z} + \hat{\sigma}_{3z}\hat{\sigma}_{1z}) \\ & + \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_{1x}\hat{\sigma}_{2x} + \hat{\sigma}_{2x}\hat{\sigma}_{3x} + \hat{\sigma}_{3x}\hat{\sigma}_{1x} + \hat{\sigma}_{1y}\hat{\sigma}_{2y} + \hat{\sigma}_{2y}\hat{\sigma}_{3y} + \hat{\sigma}_{3y}\hat{\sigma}_{1y}). \end{aligned} \tag{8.6-2}$$

把式(8.6-2)代入式(8.6-1)，注意到 $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1$ 仅对 $\xi_\pm$ 作用，$\hat{\boldsymbol{\sigma}}_3$ 仅对 $\zeta_\pm$ 作用，作用规则同题 7.1 中的代数关系，不难得到矩阵元，也就是这个分块矩阵的本征值

$$\langle \xi_+\eta_+\zeta_+ | \hat{S}^2 | \xi_+\eta_+\zeta_+ \rangle = \frac{15}{4}. \tag{8.6-3}$$

本题中，还有大量的矩阵元计算，都与这里类似.

(2) $\hat{S}_z$ 的量子数为 $-\dfrac{3}{2}$ 的块. 这个块中仅有一个态 $\xi_-\eta_-\zeta_-$，因此这个态必为 $\hat{S}^2$ 的本征态，本征值为

$$\langle\xi_-\eta_-\zeta_-|\hat{S}^2|\xi_-\eta_-\zeta_-\rangle=\frac{15}{4}. \tag{8.6-4}$$

(3) $\hat{S}_z$ 的量子数为 $\frac{1}{2}$ 的块. 这个块中有 3 个态 $\xi_+\eta_+\zeta_-$、$\xi_+\eta_-\zeta_+$、$\xi_-\eta_+\zeta_+$，非零矩阵元有

$$\langle\xi_+\eta_+\zeta_-|\hat{S}^2|\xi_+\eta_+\zeta_-\rangle=\langle\xi_+\eta_-\zeta_+|\hat{S}^2|\xi_+\eta_-\zeta_+\rangle=\langle\xi_-\eta_+\zeta_+|\hat{S}^2|\xi_-\eta_+\zeta_+\rangle=\frac{7}{4}, \tag{8.6-5}$$

$$\langle\xi_+\eta_+\zeta_-|\hat{S}^2|\xi_+\eta_-\zeta_+\rangle=\langle\xi_+\eta_-\zeta_+|\hat{S}^2|\xi_+\eta_+\zeta_-\rangle=1, \tag{8.6-6}$$

$$\langle\xi_+\eta_+\zeta_-|\hat{S}^2|\xi_-\eta_+\zeta_+\rangle=\langle\xi_-\eta_+\zeta_+|\hat{S}^2|\xi_+\eta_+\zeta_-\rangle=1, \tag{8.6-7}$$

$$\langle\xi_+\eta_-\zeta_+|\hat{S}^2|\xi_-\eta_+\zeta_+\rangle=\langle\xi_-\eta_+\zeta_+|\hat{S}^2|\xi_+\eta_-\zeta_+\rangle=1. \tag{8.6-8}$$

矩阵写成

$$\begin{bmatrix}\frac{7}{4} & 1 & 1\\ 1 & \frac{7}{4} & 1\\ 1 & 1 & \frac{7}{4}\end{bmatrix}. \tag{8.6-9}$$

对角化上面的矩阵，得到 3 个本征值和本征矢量，分别写成

$$\frac{15}{4},\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{bmatrix}1\\1\\1\end{bmatrix};\quad \frac{3}{4},\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0\\1\\-1\end{bmatrix};\quad \frac{3}{4},\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{bmatrix}2\\-1\\-1\end{bmatrix}. \tag{8.6-10}$$

实际上，根据角动量理论，这些本征值在对角化矩阵以前就已经是知道的(三个电子的总自旋量子数只能是 $\frac{1}{2}$ 和 $\frac{3}{2}$，对应的本征值分别是 $\frac{3}{4}$ 和 $\frac{15}{4}$)，这里的本征值 $\frac{3}{4}$ 是二重根，仅仅从数学上考虑，本征矢量的写法是不确定的，只要满足该矢量的三个分量之和为零就能满足本征方程. 这里的写法考虑了物理因素. 在自旋相加时，先用自旋 1 和自旋 2 相加得到两电子总自旋 $\hat{S}_{12}$，再用 $\hat{S}_{12}$ 和自旋 3 相加得到三电子总自旋 $\hat{S}$，因此三电子总自旋量子数为 $\frac{1}{2}$ 的态有两个来源，一是来自于 $\hat{S}_{12}$ 量子数为 0 的态，另一个是来自于 $\hat{S}_{12}$ 量子数为 1 的态. 这就是本征值 $\frac{3}{4}$ 是二重根的物理原因，因此我们在上面本征矢量的确定过程中，考虑了这一因素，使得本征值 $\frac{3}{4}$ 的两个本征矢量，同时还是 $\hat{S}_{12}^2$ 的本征态，$\hat{S}_{12}$ 的量子数分别为 0 和

1. 这样不仅将本征值$\frac{3}{4}$的两个本征矢量唯一地确定下来(除位相因子外)，而且这两个本征矢量也是正交的，当然，在这一处理方案中不用$\hat{S}_{12}^2$而改用$\hat{S}_{23}^2$或者$\hat{S}_{31}^2$也是可以的.

(4) $\hat{S}_z$的量子数为$-\frac{1}{2}$的块. 这个块中有3个态$\xi_-\eta_-\zeta_+$、$\xi_+\eta_-\zeta_-$、$\xi_-\eta_+\zeta_-$. 得到的矩阵与$\hat{S}_z$量子数为$\frac{1}{2}$情形中的完全一样，解也完全一样.

总结前面的结果如下：(为清楚起见，每行列出1个总自旋的本征波函数，并注明各个量子数)

$$\begin{cases} \xi_+\eta_+\zeta_+, & S=\dfrac{3}{2},\ S_z=\dfrac{3}{2}, \\ \dfrac{(\xi_+\eta_+\zeta_- +\xi_+\eta_-\zeta_+ +\xi_-\eta_+\zeta_+)}{\sqrt{3}}, & S=\dfrac{3}{2},\ S_z=\dfrac{1}{2}, \\ \dfrac{(\xi_-\eta_-\zeta_+ +\xi_+\eta_-\zeta_- +\xi_-\eta_+\zeta_-)}{\sqrt{3}}, & S=\dfrac{3}{2},\ S_z=-\dfrac{1}{2}, \\ \xi_-\eta_-\zeta_-, & S=\dfrac{3}{2},\ S_z=-\dfrac{3}{2}, \end{cases} \tag{8.6-11}$$

$$\begin{cases} \dfrac{\xi_+\eta_-\zeta_+ -\xi_-\eta_+\zeta_+}{\sqrt{2}}, & S=\dfrac{1}{2},\ S_z=\dfrac{1}{2},\ S_{12}=0, \\ \dfrac{2\xi_+\eta_+\zeta_- -\xi_+\eta_-\zeta_+ -\xi_-\eta_+\zeta_+}{\sqrt{6}}, & S=\dfrac{1}{2},\ S_z=\dfrac{1}{2},\ S_{12}=1, \\ \dfrac{\xi_+\eta_-\zeta_- -\xi_-\eta_+\zeta_-}{\sqrt{2}}, & S=\dfrac{1}{2},\ S_z=\dfrac{1}{2},\ S_{12}=0, \\ \dfrac{2\xi_-\eta_-\zeta_+ -\xi_+\eta_-\zeta_- -\xi_-\eta_+\zeta_-}{\sqrt{6}}, & S=\dfrac{1}{2},\ S_z=\dfrac{1}{2},\ S_{12}=1. \end{cases} \tag{8.6-12}$$

答　总自旋波函数为$\xi_+\eta_+\zeta_+$、$\frac{\xi_+\eta_+\zeta_- +\xi_+\eta_-\zeta_+ +\xi_-\eta_+\zeta_+}{\sqrt{3}}$、$\frac{\xi_-\eta_-\zeta_+ +\xi_+\eta_-\zeta_- +\xi_-\eta_+\zeta_-}{\sqrt{3}}$、$\xi_+\eta_+\zeta_-$、$\xi_-\eta_-\zeta_-$、$\frac{\xi_+\eta_-\zeta_+ -\xi_-\eta_+\zeta_+}{\sqrt{2}}$、$\frac{2\xi_+\eta_+\zeta_- -\xi_+\eta_-\zeta_+ -\xi_-\eta_+\zeta_+}{\sqrt{6}}$、$\frac{\xi_+\eta_-\zeta_- -\xi_-\eta_+\zeta_-}{\sqrt{2}}$、$\frac{2\xi_-\eta_-\zeta_+ -\xi_+\eta_-\zeta_- -\xi_-\eta_+\zeta_-}{\sqrt{6}}$.

8.7　忽略相互作用，写出锂原子基态波函数.

分析　由题意，忽略锂原子中各电子间的相互作用，那么锂原子的波函数就可以由锂原子中3个电子的单粒子波函数乘积的交换反对称化组合来得到. 具体地说，每个单电子波函数为轨道部分和自旋部分的乘积. 轨道部分就是$Z=3$的类

氢原子波函数ψ_{nlm}，自旋部分就是$S_z=\pm\frac{\hbar}{2}$的本征态$\xi_\pm$，选择3个不同的单粒子态，构造斯莱特行列式即得到锂原子的波函数. 这里要注意，三电子的情形与两电子的情形是不同的，尽管不考虑自旋轨道耦合，单粒子波函数可以写成轨道部分与自旋部分的乘积，但是整体锂原子的波函数并不能像两电子时那样写成交换对称或者反对称的轨道波函数与交换反对称或对称的自旋波函数的乘积. 这是因为三电子的总自旋波函数并不都是具有确定的交换对称性的，特别是不存在交换反对称的总自旋本征态.

解　锂原子中的单粒子态记为$\psi_{nlm}\xi_\pm$，对于基态应取能量最低的3个单粒子态，考虑到单粒子态的能量仅与量子数n有关，那么能量最低的3个量子态分别为$\psi_{100}\xi_+$、$\psi_{100}\xi_-$和$\psi_{2lm}\xi_\pm$，最后一个单粒子态中自旋有两种取法，lm也有4种取法(00，10，11和1,−1)能量都是一样的. 列出3个单粒子态的斯莱特行列式即得锂原子的基态波函数

$$\Psi=\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{vmatrix}\psi_{100}(x_1)\xi_+(1) & \psi_{100}(x_1)\xi_-(1) & \psi_{2lm}(x_1)\xi_\pm(1)\\ \psi_{100}(x_2)\xi_+(2) & \psi_{100}(x_2)\xi_-(2) & \psi_{2lm}(x_2)\xi_\pm(2)\\ \psi_{100}(x_3)\xi_+(3) & \psi_{100}(x_3)\xi_-(3) & \psi_{2lm}(x_3)\xi_\pm(3)\end{vmatrix}, \tag{8.7-1}$$

式中自旋波函数括号中为1代表1号电子的自旋波函数，依次类推. 值得注意的是，斯莱特行列式的写法，同一行为同一个电子的坐标，同一列为同一个单粒子态，当然也可以反过来，因为行列式在转置操作下是不变的. 由于第三个单粒子态有8种不同的取法，式(8.7-1)中共包含了这8个简并态. 当然这是完全不考虑电子间相互作用的结果. 事实上电子间是有库仑相互作用的，锂原子可以看作为原子核和两个处于100态的电子形成的原子实与第三个处于$2lm$态的外电子构成的体系，在这个体系中，由于两个处于100态的电子的屏蔽效应，外电子处于不同的l态能量是不同的，其中s态的能量要比p态的能量更低(参阅量子力学关于碱金属原子能级的讨论). 考虑到这一点后，式(8.7-1)中的最后一个电子态应取为$\psi_{200}\xi_\pm$，即取$lm=00$，这样锂原子基态波函数就成了两重简并了，当然这是考虑了一点电子间的相互作用.

答　忽略相互作用，锂原子基态波函数为$\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{vmatrix}\psi_{100}(x_1)\xi_+(1) & \psi_{100}(x_1)\xi_-(1) & \psi_{2lm}(x_1)\xi_\pm(1)\\ \psi_{100}(x_2)\xi_+(2) & \psi_{100}(x_2)\xi_-(2) & \psi_{2lm}(x_2)\xi_\pm(2)\\ \psi_{100}(x_3)\xi_+(3) & \psi_{100}(x_3)\xi_-(3) & \psi_{2lm}(x_3)\xi_\pm(3)\end{vmatrix}$.

8.8　设有一对动量和自旋都相反的电子($\boldsymbol{p}_\uparrow$-$\boldsymbol{p}_\downarrow$)，它们之间相互吸引，吸引势的傅里叶分量为常量$\lambda$，(当$E_f<E_1<(E_1+\hbar\omega)$，否则为零)，证明无论$\lambda$多么弱，这一对电子总可以形成束缚态.

分析　本题背景是 s 波超导体中库柏对的形成，两个自旋相反电子的自旋波函数是自旋单态，是交换反对称的，因此这两个电子的轨道波函数必为交换对称的. 引入质心坐标和相对坐标，两个电子的轨道波函数可以写成质心运动波函数与相对运动波函数的乘积. 前者必然是交换对称的，也和是否形成束缚态无关，因此只需要专注于求解相对运动部分的波函数，看是否得到交换对称的束缚态解(相对运动的能量 $E<0$)即可.

证明　写出两电子相对运动的薛定谔方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\cdot\dfrac{m}{2}}\nabla_r^2+V(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r})=E'\psi(\boldsymbol{r})\,, \tag{8.8-1}$$

式中 $\dfrac{m}{2}$ 是两电子的折合质量，$\boldsymbol{r}$ 是两电子的相对运动坐标. 为了求解式(8.8-1)，自然需要相互作用势 $V(\boldsymbol{r})$ 的具体信息，由题意，给出的是相互作用势的傅里叶分量，因此式(8.8-1)的傅里叶变换

$$\varphi(\boldsymbol{k})=\int \mathrm{d}^3 r\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\,,\quad V(\boldsymbol{k})=\int \mathrm{d}^3 rV(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\,, \tag{8.8-2}$$

$$\frac{\hbar^2k^2}{m}\varphi(\boldsymbol{k})+\frac{1}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}^3k'V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\varphi(\boldsymbol{k}')=E'\varphi(\boldsymbol{k})\,, \tag{8.8-3}$$

记单粒子能量为 $\varepsilon(k)=\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}$，考虑到题目中固体物理背景，取费米能 E_F 为能量的零点，即令单粒子能量 $\xi(k)=\varepsilon(k)-E_\mathrm{F}$，两粒子相对运动的能量 $E=E'-2E_\mathrm{F}$，则式(8.8-3)为

$$(2\xi-E)\varphi(\boldsymbol{k})=-\frac{1}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}^3k'V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\varphi(\boldsymbol{k}')\,. \tag{8.8-4}$$

根据题设条件，仅在费米面附近的区域 D 中，相互作用势的傅里叶分量保持为一个常量，其他地方都为零，即

$$V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')=\begin{cases}-\lambda, & 0<\xi(k),\xi(k')<\hbar\omega_\mathrm{D}\\ 0, & \text{其他}\end{cases}\,, \tag{8.8-5}$$

式中 λ 前面的负号表明是吸引势，$\hbar\omega_\mathrm{D}$ 是有互作用的能量范围，对电声子互作用而言，ω_D 就是德拜频率. 将式(8.8-5)代入式(8.8-4)得到

$$(2\xi-E)\varphi(\boldsymbol{k})=\frac{\lambda}{(2\pi)^3}\int_D \mathrm{d}^3k'\varphi(\boldsymbol{k}')\,, \tag{8.8-6}$$

显然式(8.8-6)的等号右端是一个与波长无关的常量，记作 C. 对于区域 D 中的波矢量，由式(8.8-6)解得

$$\varphi(\boldsymbol{k})=\frac{C}{2\xi(k)-E}\,, \tag{8.8-7}$$

式中 $\varphi(\boldsymbol{k})$ 仅与波矢 $\boldsymbol{k}$ 的大小有关，与方向无关(s 波的特征，是由题给的互作用势的具体形式而定的)，因此经傅里叶变换后，两电子的相对运动波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$ 也仅是相对坐标大小的函数，是交换对称的，满足分析中的交换对称性的要求. 将式(8.8-7)代入式(8.8-6)得到自洽方程

$$1=\frac{\lambda}{(2\pi)^3}\int_D\frac{\mathrm{d}^3k'}{2\xi(k')-E}\,. \tag{8.8-8}$$

引入单位体积中的能态密度(即单位体积单位能量间隔里的状态数)

$$N(\xi)=\frac{4\pi^2k^2}{(2\pi)^3}\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}\xi}\,. \tag{8.8-9}$$

式(8.8-8)改写为

$$1=\lambda\int_0^{\hbar\omega_\mathrm{D}}\mathrm{d}\xi\frac{N(\xi)}{2\xi-E}\,. \tag{8.8-10}$$

考虑到积分限于费米面附近，即 $\hbar\omega_\mathrm{D}\ll E_\mathrm{F}$，可以将态密度 $N(\xi)$ 近似地看成为一个常量，即费米面处的态密度 $N(0)$，由此可以完成式(8.8-10)积分，得到

$$1=\frac{1}{2}\lambda N(0)\ln\frac{E-2\hbar\omega_\mathrm{D}}{E}\,. \tag{8.8-11}$$

显然，式中 E 的解是负的，且无论 λ 多么小，这个 $E<0$ 的解都存在，事实上，若假定 $\lambda N(0)\ll1$，容易从式(8.8-11)中解得

$$E=-2\hbar\omega_\mathrm{D}\mathrm{e}^{-\frac{2}{\lambda N(0)}}\,, \tag{8.8-12}$$

式中 $E<0$ 的解表明了两电子间束缚态的形成，结合固体物理的背景，同时也表明两电子间的吸引势会使得费米球态(即自由电子气的最低能量态)失稳，电子两两配对，拥有更低的能量.

值得注意的是，(1) 本题的固体物理背景，实际上是论证费米球态失稳，电子形成两两配对的束缚态. 本题的证明过程表明，只要有吸引的势，无论该吸引势多么弱，都可以形成束缚态，这一点与通常的两体问题是截然不同的. 在通常的两体问题中，不存在费米面，相当于在本题证明过程中取了 $E_\mathrm{F}=0$，此时 $\varepsilon=\xi$. 式(8.8-10)等号右侧的积分中不可以将态密度 $N(\varepsilon)$ 近似地看成一个常量，事实上 $N(\varepsilon)\propto\sqrt{\varepsilon}$，在 $\varepsilon\approx0$ 的附近不可以视作常量. E 越大，式(8.8-10)等号右侧的积分就越大，即使对于束缚束解中最大的能量 $E=0$ 而言，该积分也是一个正比于 $\sqrt{\hbar\omega_\mathrm{D}}$ 的有限值，如果 λ 过小，式(8.8-10)就无法成立，也就是不存在 $E<0$ 的束缚态解，所以在通常的两体问题中，存在有限的费米能，在 $\varepsilon\approx E_\mathrm{F}$ 附近，完全可

以把 $\sqrt{\varepsilon}$ 近似为 $\sqrt{E_{\mathrm{F}}}$，因此，本题证明的对于任意小的 λ，束缚态都是存在的. 实际上观察式(8.8-10)等号右侧的积分，现在在 $E=0$ 时该积分是对数发散的，所以无论 λ 多小，式(8.8-10)都是可能成立的. (2) 本题中的吸引势是一个常量，因此得到的是 s 波的配对，在一般情况下，可将吸引势用球谐函数展开，得到其他 l 分波的配对情况，此时配对波函数的自旋部分也有可能出现三重态的情形.

证毕.

8.9 忽略相互作用，用单粒子波函数写出下列各情形的多粒子系的波函数. (1) 基态的 H_2 分子；(2) 氘核(一质子加一中子，总的自旋为 1)；(3) ^4H_e 核(总自旋为零)；(4) 在基态的 D_2 分子(每个氘核当作一个自旋的粒子)，以上除了对于电子外，任意用一些符号代表单粒子波函数的轨道波函数.

分析 本题忽略相互作用，存在单粒子态，由多个单粒子态乘积得到乘积态. 对于非全同粒子，乘积态即为所求的波函数，对于玻色子或费米子，则需要将乘积作交换对称化或交换反对称化的组合得到所求的波函数.

解 (1) 就基态的 H_2 分子而言，由于原子核的质量远大于电子的质量，根据奥本海默近似，分子波函数可以表示为电子波函数与原子核波函数的乘积，即

$$\Psi_{\mathrm{H}_2}=\psi_{\mathrm{electron}}\psi_{\mathrm{nucleus}}\,. \tag{8.9-1}$$

在计算电子波函数时，假定原子核都处于平衡位置，即视原子核的坐标为常量，得到电子的本征波函数与本征能量. 然后将电子的本征能量(其中含有原子核的坐标)与原子核间的相互作用以及原子核的动能合并，作为原子核的哈密顿量，求解原子核的波函数. H_2 分子有两个电子，忽略电子间的相互作用，两电子的零级近似波函数有两种常见的构造方法. 其一、原子轨道法(Heitler-London method)，即以电子处于原子核 A 附近的 $1s$ 态波函数 ψ_A (即以原子核 A 的位置为坐标原点的氢原子基态波函数)和电子处于原子核 B 附近的 $1s$ 态波函数 ψ_B 的对称化组合得到 4 个简并的电子波函数

$$\psi_{\mathrm{electron}}=\begin{cases}C_+[\psi_A(x_1)\psi_B(x_2)+\psi_A(x_2)\psi_B(x_1)]\chi_{00}\\ C_-[\psi_A(x_1)\psi_B(x_2)-\psi_A(x_2)\psi_B(x_1)]\chi_{1s}\end{cases}, \tag{8.9-2}$$

其中 $C_\pm$ 是归一化系数，以电子间的相互作用作为微扰，计算后可以发现三重态无法形成有效的束缚态，电子的基态波函数是式(8.9-2)的单态(事实上，单态波函数的轨道部分是交换对称的，这意味着两电子出现在两核之间的概率较大，这正是形成分子间共价键的条件). 其二、分子轨道法，即以氢分子离子(即 1 个电子处于氢分子的两个原子核的势场中运动)的基态波函数 φ_0 来构造氢分子中两电子的零级近似波函数

$$\psi_{\text{electron}} = \varphi_0(x_1)\varphi_0(x_2)\chi_{00}\,, \tag{8.9-3}$$

式中，φ_0 可以利用旋转椭球坐标系严格求解氢分子离子问题得到，也可以近似地写成原子波函数的成键组合

$$\varphi_0(x) = C'_+[\varphi_A(x) + \varphi_B(x)]\,. \tag{8.9-4}$$

至于两个原子核的波函数，由于是两体问题，可以分解为质心运动和相对运动，其中质心运动并不重要以，相对运动部分可以看作是原子核处于一个有效势场中的运动. 该有效势场由电子运动的能量本征值来提供，只与两原子核的相对坐标的大小 R 有关，与方向无关. 因此可以类似于普通的中心力场问题，将相对运动问题按角动量的 l 分波展开，每个分波感受到的势能包括前面所述的有效势在平衡位置附近展开后得到的振动能量和 l 分波的转动能量. 由此可以解得分子的振动能谱和转动能谱，均与角量子数 l 有关. 具体求解比较复杂，但是原则上根据交换对称性的要求，可以将波函数写成

$$\psi_{\text{nucleus}} = \begin{cases} u_l(R)\chi_{00}, & l = \text{偶数;} \\ u_l(R)\chi_{1s}, & l = \text{奇数.} \end{cases} \tag{8.9-5}$$

(2) 氘核是一个质子和一个中子形成的束缚态. 由于是两体问题，可以分解为质心运动和相对运动. 其中质心运动并不重要，相对运动部分可以看作是一个核子处于有效势中的运动. 两个核子不是全同粒子，所以没有交换对称性的要求，但是根据核自旋(包括质子的自旋、中子的自旋和相对运动的角动量)为 1 和宇称的要求可知相对运动的波函数中仅能包含 s 波和 d 波的成分，因此氘核的基态波函数可以写成

$$\psi_{\text{D}} = f(r)\text{Y}_{00}\chi_{11} + g(r)\text{Y}_{20}\chi_{11} + p(r)\text{Y}_{21}\chi_{10} + q(r)\text{Y}_{22}\chi_{1,-1}\,, \tag{8.9-6}$$

式中，f 、g 、p 和 q 是需要根据相互作用的具体形式，通过求解定态薛定谔方程来确定径向坐标的函数. 实际上利用核自旋的本征方程，还能进一步地确定 $p = \sqrt{3}g$ 和 $q = \sqrt{6}g$，这样待定函数缩减至两个.

(3) 氦核中有 4 个核子，它们因核力相互作用形成束缚态，这里采用原子核的壳层模型的物理图像. 把每个核子受到的所有其他核子对它的作用，用一个平均场来代替，由此产生一组单粒子态. 每个单粒子态上，根据泡利不相容原理可以填充两个自旋相反的质子或中子. 由于质子间的库仑相互作用，质子和中子各形成一组单粒子态，质子能级比相应的中子能级要高一些，用 p_{G} 和 n_{G} 表示最低的质子态波函数和中子态波函数. $\boldsymbol{x}_{p_1,p_2}$ 表示两个质子的运动坐标，$\boldsymbol{x}_{n_1,n_2}$ 表示两个中子的运动坐标，$\chi_{00}^{p,n}$ 表示两个质子或中子形成的自旋单态，那么氦核的基态波函数可以写成

$$\psi_{\text{He}} = p_{\text{G}}(\boldsymbol{x}_{p_1})p_{\text{G}}(\boldsymbol{x}_{p_2})\chi_{00}^{p}\cdot n_{\text{G}}(\boldsymbol{x}_{n_1})n_{\text{G}}(\boldsymbol{x}_{n_2})\chi_{00}^{n}\,. \tag{8.9-7}$$

(4) 本问题与问题(1)类似，只不过是氢核换作了氘核，电子部分的波函数具有相同的形式，但两个原子核相对运动的波函数有所不同，因为氘核是自旋为 1 的玻色子，所以两个氘核的波函数整体上应该是交换对称的，如果轨道波函数是 $l=$偶数 的分波，自旋波函数也应该是交换对称的，这对应于总自旋 $J=2$ 和 $J=0$ 的 6 个态，如果轨道波函数是 $l=$奇数 的分波，自旋波函数也应该是交换反对称的，这对应于总自旋 $J=1$ 的 3 个态. 因此对于氘分子中两个核的相对运动，有波函数

$$\psi_{\text{nucleus}}=\begin{cases}u_l(R)\chi_{J=0,2}, & l=\text{偶数}\\ u_l(R)\chi_{J=1}, & l=\text{奇数}\end{cases}. \tag{8.9-8}$$

答　(1) 基态的 H_2 分子，电子处于原子核 A 附近的 $1s$ 态波函数 ψ_A (即以原子核 A 的位置为坐标原点的氢原子基态波函数)和电子处于原子核 B 附近的 $1s$ 态波函数 ψ_B 的对称化组合得到 4 个简并的电子波函数 $\psi_{\text{electron}}=\begin{cases}C_+[\psi_A(x_1)\psi_B(x_2)+\psi_A(x_2)\psi_B(x_1)]\chi_{00}\\ C_-[\psi_A(x_1)\psi_B(x_2)-\psi_A(x_2)\psi_B(x_1)]\chi_{1s}\end{cases}$，核波函数写成 $\psi_{\text{nucleus}}=\begin{cases}u_l(R)\chi_{00}, & l=\text{偶数}\\ u_l(R)\chi_{1s}, & l=\text{奇数}\end{cases}$；(2) 氘核(一质子加一中子，总的自旋为 1)的基态波函数可以写成 $\psi_{\text{D}}=f(r)\text{Y}_{00}\chi_{11}+g(r)\text{Y}_{20}\chi_{11}+p(r)\text{Y}_{21}\chi_{10}+q(r)\text{Y}_{22}\chi_{1,-1}$；(3) $^4\text{H}_\text{e}$ 核(总自旋为零)基态波函数可以写成 $\psi_{\text{He}}=p_{\text{G}}(\boldsymbol{x}_{p_1})p_{\text{G}}(\boldsymbol{x}_{p_2})\chi_{00}^{p}\cdot n_{\text{G}}(\boldsymbol{x}_{n_1})n_{\text{G}}(\boldsymbol{x}_{n_2})\chi_{00}^{n}$；(4) 在基态的 D_2 分子(每个氘核当作一个自旋的粒子)波函数 $\psi_{\text{nucleus}}=\begin{cases}u_l(R)\chi_{J=0,2}, & l=\text{偶数}\\ u_l(R)\chi_{J=1}, & l=\text{奇数}\end{cases}$.

8.10　计算氢分子的另一种方法如下：把两个电子中的每一个，看作是在两个核的共同电场中运动，$V=-\dfrac{e^2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{X}_A|}-\dfrac{e^2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{X}_B|}$，然后用微扰论计算电子间相互作用的影响. (1) 设电子基态波函数的轨道部分为 $\psi_{100}^{A}(x)+\psi_{100}^{B}(x)$，写出分子基态的波函数(核固定)和分子基态能量的表达式；(2) 用原子波函数来近似地表示单电子波函数，即如氢分子离子那样，取 $\psi(x)=\dfrac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{100}^{A}(x)+\psi_{100}^{B}(x)]$，写出氢分子能量的详细表达式.

分析　本题中波函数的选取方法参考题 8.9 中第(1)问的分子轨道法构造的基态波函数，有了波函数，基态能量可以由哈密顿在基态下的平均值得到.

解　根据题 8.9 中的讨论，可知氢原子基态的电子波函数可以写成

$$\psi_{\text{electron}}=\varphi_0(\boldsymbol{x}_1)\varphi_0(\boldsymbol{x}_2)\chi_{00}, \tag{8.10-1}$$

式中，φ_0 是氢分子离子(即 1 个电子处于氢分子的两个原子核的势场中运动)的基

态波函数，按题给条件，φ_0 可以近似地写成原子波函数的成键组合

$$\varphi_0(\boldsymbol{x}) = C[\psi_A(\boldsymbol{x}) + \psi_B(\boldsymbol{x})]\,, \tag{8.10-2}$$

这里，$\psi_{A,B}$ 是以原子核 A, B 的位置为坐标原点的氢原子基态波函数，由于 $\psi_{A,B}$ 中坐标原点的不同，归一化系数并不是 $\dfrac{1}{\sqrt{2}}$，而是一个与两个核的距离有关的函数. 单粒子哈密顿(氢分子离子的哈密顿)写为

$$\hat{h} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 - \frac{e^2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{X}_A|} - \frac{e^2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{X}_B|}\,, \tag{8.10-3}$$

式中 μ 是电子的质量，$\boldsymbol{x}$ 是电子的坐标，$\boldsymbol{X}_A$、$\boldsymbol{X}_B$ 是两个原子核的坐标. 在基态中，每个电子的单粒子能量表示为

$$E_0 = \int \mathrm{d}^3x\varphi_0^*(\boldsymbol{x})\hat{h}\varphi_0(\boldsymbol{x})\,, \tag{8.10-4}$$

电子间库仑相互作用的哈密顿量表示为

$$\hat{H}_{\mathrm{C}} = \frac{e^2}{|\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2|}. \tag{8.10-5}$$

基态能中库仑的贡献为

$$E_{\mathrm{C}} = \int \mathrm{d}^3x_1\mathrm{d}^3x_2\varphi_0^*(\boldsymbol{x}_1)\varphi_0^*(\boldsymbol{x}_2)\hat{H}_{\mathrm{C}}\varphi_0(\boldsymbol{x}_1)\varphi_0(\boldsymbol{x}_2)\,. \tag{8.10-6}$$

总的基态能为

$$E = 2E_0 + E_{\mathrm{C}}\,. \tag{8.10-7}$$

答　(1) 分子基态的波函数(核固定)为 $\psi_{\mathrm{electron}} = \varphi_0(\boldsymbol{x}_1)\varphi_0(\boldsymbol{x}_2)\chi_{00}$，分子基态能量的表达式为 $E = 2E_0 + E_{\mathrm{C}}$；(2) 氢分子能量的详细表达式为 $E_0 = \int \mathrm{d}^3x\varphi_0^*(\boldsymbol{x})\hat{h}\varphi_0(\boldsymbol{x})$ 和 $E_{\mathrm{C}} = \int \mathrm{d}^3x_1\mathrm{d}^3x_2\varphi_0^*(\boldsymbol{x}_1)\varphi_0^*(\boldsymbol{x}_2)\hat{H}_{\mathrm{C}}\varphi_0(\boldsymbol{x}_1)\varphi_0(\boldsymbol{x}_2)$.

8.11　三个自旋为 1 的全同玻色子处于相同的空间运动状态，归一化波函数记成 $\psi(x)$，问体系可能状态的归一化波函数有多少种数目？

分析　根据题设条件，体系的轨道波函数已经给定，并且是交换对称的，体系可能的状态数取决于体系可能具有的不同的自旋波函数的数目，并且由于是玻色子体系且轨道波函数已经交换对称，其自旋波函数也应该是交换对称的.

解　自旋为 1 的体系共有 3 个不同的自旋态，分别对应于自旋的 z 分量取值 $\hbar$、0、$-\hbar$，由于要求自旋波函数交换对称，所以并没有两个粒子不能同处一个自旋态的限制. 因此共有 3 粒子同处于一个自旋态；2 粒子同处于一个自旋态，另一个粒子处于另一个自旋态；以及 3 个粒子分处于三个不同的自旋态三种情况. 根

据自旋态的不同取法，第一种情形有 3 种选择；第二种情形有 6 种选择，第三种情形只有 1 种选择. 因此，一共有 10 种不同的自旋波函数.

答　体系可能的状态共有 10 种.

8.12　若两个全同粒子分别处于归一化状态 $\psi_1(x)$ 和 $\psi_2(x)$ 的态中，两态有确定并且相反的宇称，(1) 两粒子为自旋 $s=0$ 的全同粒子；(2) 两粒子为自旋态相同的全同费米子，求两个粒子都处于半空间 $z\geqslant 0$ 的概率.

分析　自旋为 0 的全同粒子是玻色子，其波函数没有自旋部分，波函数的轨道部分必为交换对称. 对于自旋态相同的全同费米子，其总的波函数必为反对称的，由于自旋部分已经交换对称，其轨道波函数必为交换反对称的.

解　对称化和反对称化的轨道波函数分别写成

$$\psi_{\mathrm{S}}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(\boldsymbol{x}_1)\psi_2(\boldsymbol{x}_2)+\psi_1(\boldsymbol{x}_2)\psi_2(\boldsymbol{x}_1)]\,, \tag{8.12-1}$$

$$\psi_{\mathrm{A}}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(\boldsymbol{x}_1)\psi_2(\boldsymbol{x}_2)-\psi_1(\boldsymbol{x}_2)\psi_2(\boldsymbol{x}_1)]\,, \tag{8.12-2}$$

式(8.12-1)和式(8.12-2)分别适用于自旋为 0 的全同粒子和自旋态相同的全同费米子情形，两粒子同处于 $z\geqslant 0$ 的半空间的概率表示为

$$P_{\mathrm{S,A}}=\int_0^{\infty}\mathrm{d}z_1\int_0^{\infty}\mathrm{d}z_2\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}y_1\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}y_2\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x_1\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x_2\,|\psi_{\mathrm{S,A}}(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2)|^2\,, \tag{8.12-3}$$

代入 $\psi_{\mathrm{S,A}}$ 的表达式，可以算得

$$P_{\mathrm{S,A}}=AB\pm|\Delta|^2\,, \tag{8.12-4}$$

式中

$$\Delta=\int_0^{\infty}\mathrm{d}z\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}y\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\psi_1^{*}(\boldsymbol{x})\psi_2(\boldsymbol{x})\,, \tag{8.12-5}$$

$$A=\int_0^{\infty}\mathrm{d}z\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}y\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\,|\psi_1(\boldsymbol{x})|^2\,, \tag{8.12-6}$$

$$B=\int_0^{\infty}\mathrm{d}z\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}y\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\,|\psi_2(\boldsymbol{x})|^2\,. \tag{8.12-7}$$

由于 ψ_1 和 ψ_2 有确定的宇称，那么 $|\psi_1|^2$ 和 $|\psi_2|^2$ 是坐标 z 的偶函数，再根据归一化条件可得

$$1=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}z\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}y\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\,|\psi_1(\boldsymbol{x})|^2=2A\,. \tag{8.12-8}$$

因此，$A=\dfrac{1}{2}$，同理 $B=\dfrac{1}{2}$，因此对于对称化和反对称化的轨道函数

$$P_{\mathrm{S,A}}=\frac{1}{4}\pm|\Delta|^2. \tag{8.12-9}$$

答　对于自旋为 0 的全同粒子，两粒子同处于 $z\geqslant 0$ 的半空间的概率为 $\frac{1}{4}+|\Delta|^2$；对于自旋态相同的全同费米子情形，这一概率为 $\frac{1}{4}-|\Delta|^2$，其中 $\Delta=\int_{z\geqslant 0}\mathrm{d}^3x\psi_1^*(\boldsymbol{x})\psi_2(\boldsymbol{x})$.

8.13　对于两个自旋为 S 的全同玻色子系或全同费米子系，可能存在哪些 ${}^{2S+1}L$？

分析　两玻色子系的波函数应为交换对称的，其轨道波函数部分可以分解为质心波函数与相对运动波函数. 质心坐标总是交换对称的，对于相对运动波函数的部分可以分解为不同角动量 l 分波的叠加. 交换两粒子坐标时，相对运动坐标变号，根据球谐函数的性质可知对于偶数的 l，l 分波是交换对称的，相应的自旋波函数也应该选择交换对称的；对于奇数的 l，l 分波是交换反对称的，相应的自旋波函数也应该选择交换反对称的. 两费米子系的波函数应为交换反对称的，因此对于偶数 l 的分波应选择交换反对称的自旋波函数，而对于奇数 l 的分波应选择交换对称的自旋波函数.

解　根据角动量加法中 Clebsch-Gordan 系数的一般公式(参阅量子力学教材)，可以知道两个自旋为 S 的粒子的总自旋波函数在交换操作下有确定的对称性. 对于总自旋量子数 J 满足 $2S-J=$ 偶数 的态，是交换对称的，$2S-J=$ 奇数 的态，是交换反对称的，因此

(1) 对于 $S=$ 整数 的玻色子情形，偶数 l 的分波应选择交换对称的自旋波函数，即总自旋量子数为 $J=0,2,\cdots,2S$ 的 $(S+1)(2S+1)$ 个总自旋的本征态；而对于奇数 l 的分波，应选择交换反对称的自旋波函数，即总自旋量子数为 $J=1,3,\cdots,2S-1$ 的 $S(2S+1)$ 个总自旋的本征态.

(2) 对于 $S=$ 半奇数 的费米子情形，偶数 l 的分波应选择交换反对称的自旋波函数，即总自旋量子数为 $J=0,2,\cdots,2S-1$ 的 $S(2S+1)$ 个总自旋的本征态；而对于奇数 l 的分波，应选择交换对称的自旋波函数，即总自旋量子数为 $J=1,3,\cdots,2S$ 的 $(S+1)(2S+1)$ 个总自旋的本征态.

答　对于 $S=$ 整数 的玻色子情形，存在角量子数 l 为偶数且总自旋量子数为 $J=0,2,\cdots 2S$ 的项，或者角量子数 l 为奇数且总自旋量子数 $J=1,3,\cdots,2S-1$ 的项；对于 $S=$ 半奇数 的费米子情形，存在角量子数 l 为偶数且总自旋量子数为 $J=0,2,\cdots 2S-1$ 的项，或者角量子数 l 为奇数且总自旋量子数 $J=1,3,\cdots,2S$ 的项.

8.14　边长为 $a>b>c$ 的长方体盒子中，关进两个全同粒子，粒子间的相互作用势能为 $V=A\delta(x_1-x_2)$，求体系基态能量. (1) 若两粒子为 $s=0$ 的玻色子；(2) 两粒子为 $s=\dfrac{1}{2}$ 而自旋平行的全同费米子.

分析　首先求出无限深势阱中的单粒子态，其次根据交换对称性，暂不计入相互作用，利用单粒子态构造玻色子系和费米子系的基态能与波函数，最后以相互作用作为微扰，求出基态能的修正.

解　三维无限深势阱可以分离变量求解，得到单粒子态为

$$\psi_{nlm}(x,y,z)=\sqrt{\frac{8}{abc}}\sin\frac{n\pi x}{a}\sin\frac{l\pi y}{b}\sin\frac{m\pi z}{c},\quad E_{nlm}(x,y,z)=\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{n^2}{a^2}+\frac{l^2}{b^2}+\frac{m^2}{c^2}\right). \tag{8.14-1}$$

式中 n，l，m 是正整数，μ 是粒子的质量，此外式(8.14-1)是阱内波函数的表达式，阱外波函数显然为零.

(1) 两个自旋为 0 的全同玻色子情形，此情形波函数应为交换对称的. 由于自旋为 0，没有自旋波函数，粒子仅有轨道波函数. 两个粒子均占据 ψ_{111} 态时能量最低，因此基态能和基态波函数可以写成

$$\psi_{\mathrm{G}}=\psi_{111}(x_1,y_1,z_1)\psi_{111}(x_2,y_2,z_2),\quad E_{\mathrm{G}}^{(0)}=\frac{\pi^2\hbar^2}{\mu}\left(\frac{1}{a^2}+\frac{1}{b^2}+\frac{1}{c^2}\right). \tag{8.14-2}$$

计入相互作用，根据一阶微扰论可得

$$\begin{aligned}\Delta E_{\mathrm{G}}^{(0)}&=\int_0^a\mathrm{d}x_1\int_0^b\mathrm{d}y_1\int_0^c\mathrm{d}z_1\int_0^a\mathrm{d}x_2\int_0^b\mathrm{d}y_2\int_0^c\mathrm{d}z_2\psi_G^*A\delta(x_1-x_2)\psi_{\mathrm{G}}\\&=A\int_0^a\mathrm{d}x_1\int_0^b\mathrm{d}y_1\int_0^c\mathrm{d}z_1\psi_{111}^4(x_1,y_1,z_1)=\frac{27A}{8abc}.\end{aligned} \tag{8.14-3}$$

计入微扰后的体系基态能为

$$E_{\mathrm{G}}=E_{\mathrm{G}}^{(0)}+\Delta E_{\mathrm{G}}^{(0)}=\frac{\pi^2\hbar^2}{\mu}\left(\frac{1}{a^2}+\frac{1}{b^2}+\frac{1}{c^2}\right)+\frac{27A}{8abc}. \tag{8.14-4}$$

(2) 两个自旋 $\dfrac{1}{2}$ 且自旋平行的全同费米子情形，此情形波函数应为交换反对称的. 由于自旋平行，自旋波函数已经为交换对称，则轨道波函数应为交换反对称的. 两个粒子都占据 ψ_{111} 态，无法构成反对称的波函数，因此能量最低的状态应为一个粒子占据 ψ_{111} 态，另一个占据 ψ_{211} 态. 基态能和基态波函数可以写成

$$\psi_{\mathrm{G}}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{111}(x_1,y_1,z_1)\psi_{211}(x_2,y_2,z_2)-\psi_{111}(x_2,y_2,z_2)\psi_{211}(x_1,y_1,z_1)],$$

$$E_{\mathrm{G}}^{(0)}=\frac{\pi^2\hbar^2}{\mu}\left(\frac{5}{2a^2}+\frac{1}{b^2}+\frac{1}{c^2}\right). \tag{8.14-5}$$

计入相互作用，根据一阶微扰论可得

$$\Delta E_{\mathrm{G}}^{(0)}=\int_0^a \mathrm{d}x_1\int_0^b \mathrm{d}y_1\int_0^c \mathrm{d}z_1\int_0^a \mathrm{d}x_2\int_0^b \mathrm{d}y_2\int_0^c \mathrm{d}z_2\psi_{\mathrm{G}}^{*}A\delta(\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2)\psi_{\mathrm{G}}=0. \tag{8.14-6}$$

计入微扰后的体系基态能为

$$E_{\mathrm{G}}=E_{\mathrm{G}}^{(0)}+\Delta E_{\mathrm{G}}^{(1)}=\frac{\pi^2\hbar^2}{\mu}\left(\frac{5}{2a^2}+\frac{1}{b^2}+\frac{1}{c^2}\right). \tag{8.14-7}$$

答　对于两个自旋为 0 的全同玻色子情形，体系的基态能为 $\dfrac{\pi^2\hbar^2}{\mu}\left(\dfrac{1}{a^2}+\dfrac{1}{b^2}+\dfrac{1}{c^2}\right)+\dfrac{27A}{8abc}$；对于两个自旋 $\dfrac{1}{2}$，且自旋平行的全同费米子情形，体系的基态能为 $\dfrac{\pi^2\hbar^2}{\mu}\left(\dfrac{5}{2a^2}+\dfrac{1}{b^2}+\dfrac{1}{c^2}\right)$.

第九章　散　　射

9.1　试求低能粒子被刚性球散射的相移，并求低能散射的截面.

分析　刚性球散射问题可以写成

$$V=\begin{cases}\infty, & r\leqslant a\\ 0. & r>a\end{cases} \tag{9.1-1}$$

式中 a 为刚性球的半径.

解 1　设粒子的入射能 $E=\dfrac{\hbar^2k^2}{2\mu}$，能量守恒则 k 不变，粒子在有心力场中运动，其角动量守恒，所以对不同的角量子数 l 的粒子，独立进行散射. 当 $r\leqslant a$，$R_l(r)=0$；当 $r>a$，$R_l(r)$ 满足

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}R_l+\frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}R_l+\left[k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R_l=0\,, \tag{9.1-2}$$

式(9.1-2)就是球贝塞尔方程，其通解为

$$R_l(r)=c_l\mathrm{j}_l(kr)+d_l\mathrm{n}_l(kr)\,,\quad r>a\,, \tag{9.1-3}$$

式中，j_l 和 n_l 分别是 l 阶球贝塞尔函数和 l 阶球诺依曼函数，当 $r=a$，$R_l(r)$ 应连续，所以 $R_l(a)=0$，即 $c_l\mathrm{j}_l(ka)+d_l\mathrm{n}_l(ka)=0$，$d_l=-\dfrac{c_l\mathrm{j}_l(ka)}{\mathrm{n}_l(ka)}$.

当 $r\to\infty$ 时，利用 $\mathrm{j}_l(kr)$ 和 $\mathrm{n}_l(kr)$ 的渐近公式分别是

$$\mathrm{j}_l(kr)\xrightarrow{r\to\infty}\frac{\cos\left[kr-\dfrac{\pi}{2}(l+1)\right]}{kr}\,,\quad \mathrm{n}_l(kr)\xrightarrow{r\to\infty}\frac{\sin\left[kr-\dfrac{\pi}{2}(l+1)\right]}{kr}\,,$$

由(9.1-3)知

$$R_l(r)\xrightarrow{r\to\infty}c_l\frac{\cos\left[kr-\dfrac{\pi}{2}(l+1)\right]}{kr}+d_l\frac{\sin\left[kr-\dfrac{\pi}{2}(l+1)\right]}{kr}\,,$$

令 $c_l=E_l\cos\delta_l$，$d_l=E_l\sin\delta_l$，则 $R_l(r)\xrightarrow{r\to\infty}\dfrac{E_l}{kr}\cos\left[kr-\dfrac{\pi}{2}(l+1)-\delta_l\right]$，

$$\cot\delta_l=\frac{c_l}{d_l}=-\frac{\mathrm{n}_l(ka)}{\mathrm{j}_l(ka)}\,, \tag{9.1-4}$$

当 $ka \to 0$ 时，

$$\mathrm{j}_l(ka) \xrightarrow{ka\to 0} \frac{(ka)^l}{(2l+1)!!}, \tag{9.1-5}$$

$$\mathrm{n}_l(ka) \xrightarrow{ka\to 0} \frac{(2l-1)!!}{(ka)^{l+1}}. \tag{9.1-6}$$

在低能极限，$ka \ll 1$ 时，

$$\tan\delta_l = -\frac{(ka)^{2l+1}}{(2l+1)!!(2l-1)!!}, \tag{9.1-7}$$

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sum_l (2l+1)\sin^2\delta_l \approx \frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0, \tag{9.1-8}$$

$$\tan\delta_0 = -\frac{\mathrm{j}_0(ka)}{\mathrm{n}_0(ka)} = \frac{-\dfrac{\sin ka}{ka}}{-\dfrac{\cos ka}{ka}} = \tan ka, \quad \delta_0 = ka, \quad \sin\delta_0 = \sin ka,$$

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0 \xrightarrow{ka\ll 1} 4\pi a^2; \tag{9.1-9}$$

在高能极限，$ka \gg 1$ 时，由式(9.1-4)得 $\cot\delta_l = -\dfrac{\mathrm{n}_l(ka)}{\mathrm{j}_l(ka)}$，式(9.1-8)中的 $\sin^2\delta_l$ 为

$$\sin^2\delta_l = \frac{1}{1+\cot^2\delta_l} = \frac{\mathrm{j}_l^2(ka)}{\mathrm{j}_l^2(ka)+\mathrm{n}_l^2(ka)} \xrightarrow{ka\gg 1} \frac{\dfrac{\cos^2\left(ka-\dfrac{l+1}{2}\pi\right)}{(ka)^2}}{\dfrac{\cos^2\left(ka-\dfrac{l+1}{2}\pi\right)}{(ka)^2}+\dfrac{\sin^2\left(ka-\dfrac{l+1}{2}\pi\right)}{(ka)^2}}$$

$$= \sin^2\left(ka-\frac{l}{2}\pi\right),$$

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{[ka]}(2l+1)\sin^2\left(ka-\frac{l}{2}\pi\right).$$

式中 $[ka]$ 表示取 ka 最近的整数，为什么 l 取上限呢？因为 $l > [ka]$ 的粒子不会被散射.

当瞄准距离 $d = \dfrac{L}{p} \approx \dfrac{l\hbar}{k\hbar} > a$ 时，如图 9.1-1 所示，即 $l > ka$，不会被散射.

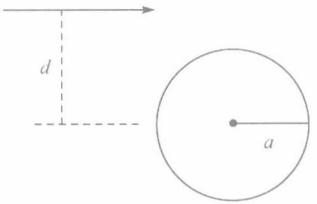

图 9.1-1　高能散射

由于 $\sin\left(ka-\frac{l}{2}\pi\right)=\sin ka\cos\frac{l}{2}\pi-\cos ka\sin\frac{l}{2}\pi$，当 l 为奇数时，$\sin^2\left(ka-\frac{l}{2}\pi\right)=\sin^2 ka$；当 l 为偶数时，$\sin^2\left(ka-\frac{l}{2}\pi\right)=\cos^2 ka$.

设 $[ka]$ 为偶数，

$$\sigma=\frac{4\pi}{k^2}\left\{\sum_{l=0,2,4,\cdots}^{[ka]}(2l+1)\sin^2 ka+\sum_{l=1,3,5,\cdots}^{[ka]-1}(2l+1)\cos^2 ka\right\}$$

$$=\frac{4\pi}{k^2}\left\{\frac{1+2[ka]+1}{2}\frac{[ka]}{2}\sin^2 ka+\frac{3+2[ka]-1}{2}\frac{[ka]-1}{2}\cos^2 ka\right\}$$

$$\xrightarrow{ka\to\infty}\frac{4\pi}{k^2}\left\{\frac{(ka)^2}{2}\sin^2 ka+\frac{(ka)^2}{2}\cos^2 ka\right\}=2\pi a^2.$$

讨论：值得注意的是，这是经典刚球截面 πa^2 的 2 倍，但当 $ka\gg1$ 时，因 a 有限，则有 $k\to\infty$，即 $\lambda\to0$. 在 $r>a$ 的区域，$V(r)=0$，$\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}=0$，相当于 $\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}r}=0$，$\left(n=\sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-V)}\text{为折射率}\right)$，这是经典力学适用的情形(几何光学适用)，那么截面应是 πa^2，这种矛盾是如何引起的？在量子力学的散射理论中，$\psi=\psi_{\mathrm{i}}+\psi_{\mathrm{s}}$，而计算散射粒子时，则没有考虑 ψ_{i} 和 ψ_{s} 的相干性，但是如图 9.1-2 所示的散射，在几何阴影区实际上没有粒子到达，即 ψ_{i} 和 ψ_{s} 干涉相消了，而 $2\pi a^2$ 是不考虑 ψ_{i} 和 ψ_{s} 的相干性所得到的结果(仅用 ψ_{s} 计算).

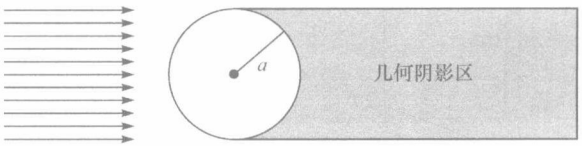

图 9.1-2　散射示意图

考虑 P. M. Morse 的《振动与声》中 § 29 的思想，可以证明：被散射的 $N\sigma=2\pi a^2N$ 个粒子分为二部分，一部分 πa^2N 个粒子的散射角在 $\frac{\pi}{2}\sim\pi$ 之间，即经典力学阐明的被散射粒子，另一半 πa^2N 个粒子则完全集中在 $\theta=0$ 的方向上，它们的 ψ_{s} 波与 ψ_{i} 波完全抵销(干涉)，造成阴影区，在阴影区测不到粒子. 入射粒子流中

凡是打在 πa^2 面积上的，都被散射到 $\frac{\pi}{2}\leqslant\theta\leqslant\pi$ 的半边，没有打中 πa^2 截面的粒子继续前进不散射.

解 2　采用薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi+V(r)\psi=E\psi\ , \tag{9.1-10}$$

入射波 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}$ 可以展开成

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr\cos\theta}=\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{i}^l\mathrm{j}_l(kr)\mathrm{P}_l(\cos\theta)=\sum_{l=0}^{\infty}\sqrt{4\pi(2l+1)}\mathrm{i}^l\mathrm{j}_l(kr)\mathrm{Y}_{l0}(\theta)\ . \tag{9.1-11}$$

式中，$\mathrm{j}_l(kr)\xrightarrow{kr\to\infty}\dfrac{\sin\left(kr-\dfrac{l\pi}{2}\right)}{kr}$，式(9.1-10)的解为

$$\psi(r,\theta,\varphi)=\sum_{l=0}^{\infty}R_l(kr)\mathrm{Y}_{l0}(\theta)=\sum_{l=0}^{\infty}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}R_l(kr)\mathrm{P}_l(\cos\theta)\ , \tag{9.1-12}$$

式中 $R_l(kr)$ 满足方程

$$\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left[r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}R_l(kr)\right]+\left[k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}-\frac{2\mu V(r)}{h^2}\right]R_l(kr)=0\ ,\quad k^2=\frac{2\mu E}{h^2}\ , \tag{9.1-13}$$

对于 $V(r)=0$ 情形，有

$$R_l(kr)=\mathrm{i}^l\sqrt{4\pi(2l+1)}\mathrm{j}_l(kr)\xrightarrow{r\to\infty}\mathrm{i}^l\sqrt{4\pi(2l+1)}\frac{\sin\left(kr-\dfrac{l\pi}{2}\right)}{kr}\ ;$$

对于 $V(r)\neq0$ 情形，有

$$R_l(kr)=\mathrm{i}^l\sqrt{4\pi(2l+1)}\left[\mathrm{j}_l(kr)+\frac{1}{2}a_l\mathrm{h}_l^{(1)}(kr)\right]\ ;$$

式中第一类球汉克尔函数(spherical Hankel function) $\mathrm{h}_l^{(1)}(kr)\xrightarrow{r\to\infty}\dfrac{1}{\mathrm{i}kr}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)}$，因此，当 $r\to\infty$ 时，

$$R_l(kr)=\mathrm{i}^l\sqrt{4\pi(2l+1)}\left[\frac{\sin\left(kr-\dfrac{l\pi}{2}\right)}{kr}+\frac{1}{2}a_l\frac{1}{\mathrm{i}kr}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)}\right]$$

$$=\mathrm{i}^l\sqrt{4\pi(2l+1)}\left[\frac{1}{kr}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)}}{2\mathrm{i}}+\frac{1}{2}a_l\frac{1}{\mathrm{i}kr}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)}\right]$$

$$=\mathrm{i}^{l}\sqrt{4\pi(2l+1)}\left\{\frac{1}{2\mathrm{i}kr}\left[(1+a_l)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)}\right]\right\}.$$

在碰撞过程中粒子数守恒的条件是球面入射波与出射波的波幅相等，有 $|1+a_l|=1$，即

$$1+a_l=\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_l}\ , \tag{9.1-14}$$

式中 δ_l 称为相移量，则

$$R_l(kr)\xrightarrow{r\to\infty}\mathrm{i}^{l}\sqrt{4\pi(2l+1)}\left\{\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}}{kr}\frac{\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right)}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right)}\right]}{2\mathrm{i}}\right\}$$

$$=\mathrm{i}^{l}\sqrt{4\pi(2l+1)}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}}{kr}\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right).$$

值得注意的是 $\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right)=\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)\cos(\delta_l)+\cos\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)\sin(\delta_l)$，又诺依曼函数(Neumann function，即第二类贝塞尔函数 Bessel function of the second kind)

$$\mathrm{n}_l(kr)\xrightarrow{r\to\infty}-\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(kr-\frac{l}{2}\pi\right)}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(kr-\frac{l}{2}\pi\right)}}{2kr}\ ,\ \text{又}$$

$$\mathrm{j}_l(kr)\xrightarrow{r\to\infty}\frac{\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)}{kr}=\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(kr-\frac{l}{2}\pi\right)}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(kr-\frac{l}{2}\pi\right)}}{2\mathrm{i}kr}\ ,$$

故

$$\cos\delta_l\,\mathrm{j}_l(kr)-\sin\delta_l\,\mathrm{n}_l(kr)\xrightarrow{r\to\infty}\cos\delta_l\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(kr-\frac{l}{2}\pi\right)}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(kr-\frac{l}{2}\pi\right)}}{2\mathrm{i}kr}$$

$$+\mathrm{i}\sin\delta_l\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(kr-\frac{l}{2}\pi\right)}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(kr-\frac{l}{2}\pi\right)}}{2\mathrm{i}kr}$$

$$=\frac{1}{2\mathrm{i}kr}\left\{\cos\delta_l\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(kr-\frac{l}{2}\pi\right)}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(kr-\frac{l}{2}\pi\right)}\right]+\mathrm{i}\sin\delta_l\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(kr-\frac{l}{2}\pi\right)}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(kr-\frac{l}{2}\pi\right)}\right]\right\}$$

$$=\frac{1}{2\mathrm{i}kr}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(kr-\frac{l}{2}\pi\right)}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(kr-\frac{l}{2}\pi\right)}\right]$$

$$=\frac{1}{kr}\sin\left(kr-\frac{l}{2}\pi+\delta_l\right).$$

$R_l(kr)$ 又可以写成

$$R_l(kr)\xrightarrow{r\to\infty}\mathrm{i}^l\sqrt{4\pi(2l+1)}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}}{kr}\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right) \tag{9.1-15}$$

$$=c[\cos\delta_l\mathrm{j}_l(kr)-\sin\delta_l\mathrm{n}_l(kr)].$$

式中 c 为常数. 式(9.1-4)写成

$$\psi(r,\theta,\varphi)=\sum_{l=0}^{\infty}R_l(kr)\mathrm{Y}_{l0}(\theta)=\sum_{l=0}^{\infty}\mathrm{i}^l\sqrt{4\pi(2l+1)}\left[\mathrm{j}_l(kr)+\frac{1}{2}a_l\mathrm{h}_l^{(1)}(kr)\right]\mathrm{Y}_{l0}(\theta),$$

$$\psi(r,\theta,\varphi)-\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}$$

$$=\sum_{l=0}^{\infty}\mathrm{i}^l\sqrt{4\pi(2l+1)}[\mathrm{j}_l(kr)+\frac{1}{2}a_l\mathrm{h}_l^{(1)}(kr)]\mathrm{Y}_{l0}(\theta)-\sum_{l=0}^{\infty}\mathrm{i}^l\sqrt{4\pi(2l+1)}\mathrm{j}_l(kr)\mathrm{Y}_{l0}(\theta)$$

$$\xrightarrow{kr\to\infty}\sum_{l=0}^{\infty}\mathrm{i}^l\sqrt{4\pi(2l+1)}\frac{a_l}{\mathrm{i}2kr}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)}\mathrm{Y}_{l0}(\theta)$$

$$=f(\theta)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}.$$

由于 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(-\frac{l\pi}{2}\right)}=\mathrm{i}^{-l}$，即 $\mathrm{i}^l\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(-\frac{l\pi}{2}\right)}=1$，$a_l=\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta_l}-1=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta_l})=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}2\mathrm{i}\sin\delta_l$，

$\mathrm{Y}_{l0}(\theta)=\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\mathrm{P}_l(\cos\theta)$，因此

$$f(\theta)=\sum_{l=0}^{\infty}\sqrt{4\pi(2l+1)}\frac{1}{\mathrm{i}2k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}2\mathrm{i}\sin\delta_l\mathrm{Y}_{l0}(\theta)$$

$$=\sum_{l=0}^{\infty}\sqrt{4\pi(2l+1)}\frac{1}{\mathrm{i}2k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}2\mathrm{i}\sin\delta_l\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\mathrm{P}_l(\cos\theta)$$

$$=\frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}(\sin\delta_l)\mathrm{P}_l(\cos\theta).$$

微分散射截面为 $\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2=|\frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}(\sin\delta_l)\mathrm{P}_l(\cos\theta)|^2$.

低能散射总截面为

$$\sigma=\int_{\varphi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi}\sigma(\theta)\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi=\int_{\varphi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi}|f(\theta)|^2\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi=2\pi\int_{\theta=0}^{\pi}|f(\theta)|^2\mathrm{d}\theta$$

$$=\frac{2\pi}{k^2}\sum_{l_1=1}^{\infty}\sum_{l=0}^{\infty}(2l_1+1)(2l+1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta_l}(\sin^2\delta_l)\int_{\theta=0}^{\pi}\mathrm{P}_l(\cos\theta)\mathrm{P}_{l_1}(\cos\theta)\mathrm{d}\theta.$$

$$=\frac{2\pi}{k^2}\sum_{l_1=1}^{\infty}\sum_{l=0}^{\infty}(2l_1+1)(2l+1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta_l}(\sin^2\delta_l)\frac{2}{2l+1}\delta_{ll_1} \tag{9.1-16}$$

$$=\frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l.$$

式(9.1-15)写成 $R_l(kr)=\begin{cases}0, & r\leqslant a\\ c[\cos\delta_l\mathrm{j}_l(kr)-\sin\delta_l\mathrm{n}_l(kr)], & r>a\end{cases}$，且

$R_l(kr)\xrightarrow{r\to\infty}\dfrac{\sin\left(kr-\dfrac{l}{2}\pi+\delta_l\right)}{kr}$，在 $r=a$ 处波函数连续，有

$$c[\cos\delta_l\mathrm{j}_l(ka)-\sin\delta_l\mathrm{n}_l(ka)]=0,\quad \tan\delta_l=\frac{\mathrm{j}_l(ka)}{\mathrm{n}_l(ka)}.$$

对于低能情形，即 $ka\to0$，有 $\mathrm{j}_l(ka)\xrightarrow{ka\to0}\dfrac{(ka)^l}{(2l+1)!!}$，$\mathrm{n}_l(ka)\xrightarrow{ka\to0}-\dfrac{(2l-1)!!}{(ka)^{l+1}}$ 因此 $\tan\delta_l\xrightarrow{ka\to0}-\dfrac{(ka)^l}{(2l+1)!!}\dfrac{(ka)^{l+1}}{(2l-1)!!}=-\dfrac{(ka)^{2l+1}}{[(2l-1)!!]^2(2l+1)}$，显然 $ka\to0$ 时，只有 $l=0$(即 s 分波)的分波的相移 δ_0 最重要，即 $\tan\delta_0=-ka$，$ka\ll1$，故 $\delta_0=-ka$；

散射总截面 $\sigma=\dfrac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l\xrightarrow{l=0}\dfrac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0=4\pi a^2$.

答　低能粒子被刚性球散射的相移 $\delta_0=-ka$，低能散射的截面为 $\sigma=4\pi a^2$.

9.2　求势场 $V=\dfrac{A}{r^2}$，($A>0$)中 l 分波的散射相移以及小角度微分散射截面.

分析　由定态薛定谔方程

$$\nabla^2\psi+\left[k^2-\frac{2\mu V(r)}{\hbar^2}\right]\psi=0, \tag{9.2-1}$$

波函数 $\psi(r,\theta)$ 与 φ 无关的解为

$$\psi(r,\theta)=\sum_l R_l(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta)=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\sum_l\sqrt{2l+1}R_l(r)\mathrm{P}_l(\cos\theta), \tag{9.2-2}$$

式中径向分量 $R_l(r)$ 满足

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}R_l(r)+\frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}R_l(r)+\left[k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}-\frac{2\mu V}{\hbar^2}\right]R_l(r)=0. \tag{9.2-3}$$

分析 $A=0$ 和 $A>0$ 之间的相位差，即可获得各 l 分波的散射相移，进而在一级 Born 近似下，由散射振幅积分得微分散射截面.

解 1　(1) 设该粒子质量是 μ，势函数是 $V(r)=\dfrac{A}{r^2}$，式(9.2-3)中当 $A=0$ 的解为

$$R_l^0(r)=\mathrm{j}_l(kr)=\sqrt{\frac{\pi}{2kr}}\mathrm{J}_{l+\frac{1}{2}}(kr)\xrightarrow{r\to\infty}\frac{1}{kr}\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right). \tag{9.2-4}$$

当 $A>0$ 时，令 $\dfrac{l(l+1)}{r^2}-\dfrac{2\mu A}{\hbar^2 r^2}=\dfrac{\nu(\nu+1)}{r^2}$，则 $l(l+1)-\dfrac{2\mu A}{\hbar^2}=\nu^2+\nu$，

$\nu=\dfrac{-1\pm\sqrt{1+4\left[l(l+1)-\dfrac{2\mu A}{\hbar^2}\right]}}{2}$，取 $\nu>l\geqslant 0$ 一支，有 $\nu=\dfrac{\sqrt{1+4\left[l(l+1)-\dfrac{2\mu A}{\hbar^2}\right]}-1}{2}$.

故

$$\begin{aligned}R_\nu^0(r)=\mathrm{j}_\nu(kr)&=\sqrt{\frac{\pi}{2kr}}\mathrm{J}_{\nu+\frac{1}{2}}(kr)\xrightarrow{r\to\infty}\frac{1}{kr}\sin\left(kr-\frac{\nu\pi}{2}\right)\\&=\frac{1}{kr}\sin\left(kr-\frac{\sqrt{1+4\left[l(l+1)-\dfrac{2\mu A}{\hbar^2}\right]}-1}{2}\frac{\pi}{2}\right).\end{aligned} \tag{9.2-5}$$

令 $kr-\dfrac{\sqrt{1+4\left[l(l+1)-\dfrac{2\mu A}{\hbar^2}\right]}-1}{2}\dfrac{\pi}{2}=kr-\dfrac{l\pi}{2}+\delta_l$，故 l 分波的散射相移

$$\delta_l=\frac{l\pi}{2}-\frac{\sqrt{1+4\left[l(l+1)-\dfrac{2\mu A}{\hbar^2}\right]}-1}{2}\frac{\pi}{2}=\frac{\left(l+\dfrac{1}{2}\right)\pi}{2}-\frac{\sqrt{1+4\left[l(l+1)-\dfrac{2\mu A}{\hbar^2}\right]}}{2}\frac{\pi}{2}. \tag{9.2-6}$$

(2) 入射粒子波数是 k_i，散射粒子波数为 k_f，方向如图 9.2-1 所示. 由于散射是弹性散射，波长不变，即

$k_\mathrm{f}=k_\mathrm{i}=k$，$\boldsymbol{k}_\mathrm{f}-\boldsymbol{k}_\mathrm{i}=\overrightarrow{AC}$，大小为 $2k\sin\dfrac{\theta}{2}$，

粒子的能量为

$$E=\frac{k^2\hbar^2}{2\mu}. \tag{9.2-7}$$

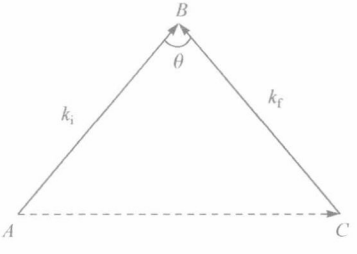

图 9.2-1　粒子散射波矢矢量

散射导致的动量转移，其散射振幅

$$f=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int_{r=0}^{\infty}V(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}_\mathrm{f}-\boldsymbol{k}_\mathrm{i})\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}^3r=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int_{r=0}^{\infty}\int_{\theta=0}^{\pi}\int_{\varphi=0}^{2\pi}V(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}_\mathrm{f}-\boldsymbol{k}_\mathrm{i})\cdot\boldsymbol{r}}r^2\mathrm{d}r\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi,$$

对于$V=\dfrac{A}{r^2}$，（$A>0$）势场，散射振幅与φ无关，即

$$f(\theta)=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int_{r=0}^{\infty}\int_{\varphi=0}^{2\pi}V(r)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}_\mathrm{f}-\boldsymbol{k}_\mathrm{i})\cdot\boldsymbol{r}}r^2\mathrm{d}r\mathrm{d}\varphi=-\frac{\mu}{\hbar^2}\int_{r=0}^{\infty}V(r)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}_\mathrm{f}-\boldsymbol{k}_\mathrm{i})\cdot\boldsymbol{r}}r^2\mathrm{d}r$$

$$=-\frac{\mu}{\hbar^2}\int_{r=0}^{\infty}V(r)\left\{\cos\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r\right]-\mathrm{i}\sin\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r\right]\right\}r^2\mathrm{d}r,$$

其实部为

$$f(\theta)=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int_{r=0}^{\infty}\int_{\varphi=0}^{2\pi}V(r)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}_\mathrm{f}-\boldsymbol{k}_\mathrm{i})\cdot\boldsymbol{r}}r^2\mathrm{d}r\mathrm{d}\varphi=-\frac{\mu}{\hbar^2}\int_{r=0}^{\infty}V(r)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}_\mathrm{f}-\boldsymbol{k}_\mathrm{i})\cdot\boldsymbol{r}}r^2\mathrm{d}r$$

$$=-\frac{\mu}{\hbar^2}\int_{r=0}^{\infty}V(r)\cos\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r\right]r^2\mathrm{d}r$$

$$=-\frac{\mu}{\hbar^2}\frac{1}{2k\left(\sin\dfrac{\theta}{2}\right)}\int_{r=0}^{\infty}V(r)\cos\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r\right]r^2\mathrm{d}\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r\right]$$

$$=-\frac{\mu}{\hbar^2}\frac{1}{2k\left(\sin\dfrac{\theta}{2}\right)}\int_{r=0}^{\infty}V(r)r^2\mathrm{d}\sin\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r\right],$$

$$=-\frac{\mu}{\hbar^2}\frac{1}{2k\left(\sin\dfrac{\theta}{2}\right)}\left\{V(r)r^2\sin\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r\right]\Big|_0^{\infty}-\int_{r=0}^{\infty}V(r)\sin\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r\right]2r\mathrm{d}r\right\}$$

$$=\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{1}{2k\left(\sin\dfrac{\theta}{2}\right)}\int_{r=0}^{\infty}V(r)\sin\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r\right]r\mathrm{d}r,$$

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2=\left|\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{1}{2k\left(\sin\dfrac{\theta}{2}\right)}\int_{r=0}^{\infty}V(r)\sin\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r\right]r\mathrm{d}r\right|^2. \tag{9.2-8}$$

一级 Born 近似下的微分散射截面.

对于势场$V=\dfrac{A}{r^2}$　（$A>0$），

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2=\left|\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{1}{2k\left(\sin\dfrac{\theta}{2}\right)}\int_{r=0}^{\infty}\frac{A}{r^2}\sin\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r\right]r\mathrm{d}r\right|^2$$

$$=\left|\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{1}{2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)}\int_{r=0}^{\infty}\frac{A}{r}\sin\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r\right]\mathrm{d}r\right|^2$$

$$=\left|\frac{A\mu}{\hbar^2 2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)}\int_{r=-\infty}^{\infty}\frac{\sin\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r\right]}{2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r}\mathrm{d}\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r\right]\right|^2$$

$$=\left(\frac{\pi A\mu}{\hbar^2 2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)}\right)^2. \tag{9.2-9}$$

解 2 散射问题的边界条件

$$\psi\xrightarrow{r\to\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr\cos\theta}+f(\theta,\varphi)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}, \tag{9.2-10}$$

这表明 $r\to\infty$ 是自由粒子，因为平面波和球面波都是自由粒子的一种波函数，边界条件隐含着要求散射势能 V 是有限力程的.

现在 $V(r)=\frac{A}{r^2}$，随着 $r\to\infty$ 势能下降较快，可以看作有限力程，$E>V(\infty)=0$ 是自由式态问题.

$V(r)=\frac{A}{r^2}$ 是有心力场，在有心力场中运动，粒子的角动量守恒，所以在分波法中，各 l 分波独立进行散射，微分散射截面

$$f(\theta)=\frac{1}{2\mathrm{i}k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\delta_l}-1)\mathrm{P}_l(\cos\theta),\quad \sigma(\theta)=|f(\theta)|^2, \tag{9.2-11}$$

l 分波的相移 δ_l 决定于

$$\mathrm{j}_l(kr)\xrightarrow{r\to\infty}\frac{1}{kr}\cos\left[kr-\frac{\pi}{2}(l+1)\right],\quad R_l(kr)\xrightarrow{r\to\infty}\frac{1}{kr}\cos\left[kr-\frac{\pi}{2}(l+1)-\delta_l\right], \tag{9.2-12}$$

$R_l(kr)$ 满足方程

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}R_l+\frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}R_l+\left[k^2-\frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R_l=0, \tag{9.2-13}$$

由于 $V(r)=\dfrac{A}{r^2}$，令

$$l(l+1)+\frac{2\mu}{\hbar^2}A=l_1(l_1+1)\,, \tag{9.2-14}$$

由于 $A>0$，$l_1>l\geqslant 0$，由于 $rR(r)\xrightarrow{r\to 0}0$，于是球贝塞尔方程的解不能取球诺依曼函数，所以

$$R_l(kr)=\mathrm{j}_{l_1}(kr)\xrightarrow{r\to\infty}\frac{1}{kr}\cos\left[kr-\frac{\pi}{2}(l_1+1)\right], \tag{9.2-15}$$

即

$$\delta_l=\frac{\pi}{2}(l_1-l)\,, \tag{9.2-16}$$

式(9.2-14)得到

$$l_1=\frac{1}{2}\left[-1+\sqrt{1+4\left(l^2+l+\frac{2\mu}{\hbar^2}A\right)}\right]=-\frac{1}{2}+\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2+\frac{2\mu}{\hbar^2}A}$$

l 分波的散射相移

$$\delta_l=\frac{\pi}{2}(l_1-l)=\frac{\pi}{2}\left\{\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2+\frac{2\mu A}{\hbar^2}}-\left(l+\frac{1}{2}\right)\right\}, \tag{9.2-17}$$

当 $\theta\to 0$ 时，$f(\theta)=\dfrac{1}{2\mathrm{i}k}\sum\limits_{l=0}^{\infty}(2l+1)(\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\delta_l}-1)\mathrm{P}_l(\cos\theta)$，因 $\mathrm{P}_l(1)=1$ 而发散；

当 θ 很小时，只有大的 l 对计算 $f(\theta)$ 才是重要的，对于大的 l，有

$$\delta_l=\frac{\pi}{2}\left\{\left(l+\frac{1}{2}\right)\left[1+\frac{1}{2}\frac{2\mu A}{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2\hbar^2}\right]-\left(l+\frac{1}{2}\right)\right\}=\frac{\pi}{2}\frac{\mu A}{\left(l+\frac{1}{2}\right)\hbar^2}\ll 1\,, \tag{9.2-18}$$

故

$$f(\theta)=-\frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\delta_l\mathrm{P}_l(\cos\theta)\,. \tag{9.2-19}$$

考虑到式(9.2-18)，有

$$f(\theta)=-\frac{\pi\mu A}{\hbar^2 k}\sum_{l=0}^{\infty}\mathrm{P}_l(\cos\theta)\,. \tag{9.2-20}$$

注意 $\mathrm{P}_l(u)$ 的生成函数是

$$T(u,s)=\frac{1}{\sqrt{1-2us+s^2}}=\sum_{l=0}^{\infty}\mathrm{P}_l(u)s^l\ ,\quad |s|<1.$$

设$s\to 1^-$，$u=\cos\theta$，则

$$\sum_{l=0}^{\infty}\mathrm{P}_l(\cos\theta)=\frac{1}{\sqrt{2-2\cos\theta}}=\frac{1}{2\sin\dfrac{\theta}{2}}\ , \tag{9.2-21}$$

$$f(\theta)=\frac{-\pi\mu A}{\hbar^2 k}\frac{1}{2\sin\dfrac{\theta}{2}}\ , \tag{9.2-22}$$

$$\sigma(\theta)=\frac{\pi^2\mu^2A^2}{4\hbar^4k^2}\frac{1}{\sin^2\dfrac{\theta}{2}}\ . \tag{9.2-23}$$

若式(9.2-17)中的$\dfrac{2\mu}{\hbar^2}A\ll 1$，则式(9.2-18)对所有$l$均成立，式(9.2-22)和式(9.2-23)对所有θ都成立.

答 (1) l分波的散射相移为$\dfrac{\pi}{2}\left\{\left(l+\dfrac{1}{2}\right)\pi-\sqrt{\left(l+\dfrac{1}{2}\right)^2-\dfrac{2\mu A}{\hbar^2}}\right\}$或

$\dfrac{\pi}{2}\left\{\sqrt{\left(l+\dfrac{1}{2}\right)^2+\dfrac{2\mu A}{\hbar^2}}-\left(l+\dfrac{1}{2}\right)\right\}$；(2) 小角度微分散射截面为$\sigma(\theta)=\left(\dfrac{\pi A\mu}{\hbar^2 2k\left(\sin\dfrac{\theta}{2}\right)}\right)^2$.

9.3 用分波法公式证明光学定理$\sigma=\dfrac{4\pi}{k}\mathrm{Im}\,f(0)$.

分析 分波法就是将波函数$\psi(r,\theta)$分解成入射波波函数$\psi_{\mathrm{i}}(r,\theta)$和散射波波函数$\psi_{\mathrm{s}}(r,\theta)$之和. 其中波函数$\psi(r,\theta)$满足定态薛定谔方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(r)\right]\psi(r,\theta,\varphi)=E\psi(r,\theta,\varphi)\ , \tag{9.3-1}$$

式中，$E>0$即自由态，$V(r)$具有球对称性，$\psi(r,\theta)$与φ无关，满足

$$\psi(r,\theta)=\sum_l A_l R_l(r)\mathrm{P}_l(\cos\theta)\ , \tag{9.3-2}$$

即

$$\psi(r,\theta)=\psi_{\mathrm{i}}(r,\theta)+\psi_{\mathrm{s}}(r,\theta)\ , \tag{9.3-3}$$

式中入射波波函数为

$$\psi_{\mathrm{i}}(r,\theta)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr\cos\theta}=\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{i}^{l}\mathrm{j}_{l}(kr)\mathrm{P}_{l}(\cos\theta)\ , \tag{9.3-4}$$

式中 $\mathrm{j}_l(kr)$ 为 l 阶球贝塞尔函数.

值得注意的是，式 $\sigma=\dfrac{4\pi}{k}\mathrm{Im}\,f(0)$ 中“Im”是“image”虚部的缩写，$f(0)=f(\theta=0)$.

证明 1

散射波波函数

$$\psi_{\mathrm{s}}(r,\theta)=\psi(r,\theta)-\psi_{\mathrm{i}}(r,\theta)=\sum_{l}[A_lR_l-(2l+1)\mathrm{i}^{l}\mathrm{j}_{l}(kr)]\mathrm{P}_{l}(\cos\theta)\xrightarrow{r\to\infty}f(\theta)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}. \tag{9.3-5}$$

微分散射截面

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2\ . \tag{9.3-6}$$

径向函数 $R_l(r)$ 满足

$$\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}r^2\frac{\mathrm{d}R_l(r)}{\mathrm{d}r}+\left[k^2-\frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R_l(r)=0\ , \tag{9.3-7}$$

且满足 $rR_l(r)\xrightarrow{r\to0}0$，作变换

$$R_l(r)=\frac{u_l(r)}{r}\ . \tag{9.3-8}$$

则式(9.3-7)为 $\dfrac{1}{r^2}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}r^2\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\dfrac{u_l(r)}{r}+\left[k^2-\dfrac{2\mu}{\hbar^2}V(r)-\dfrac{l(l+1)}{r^2}\right]\dfrac{u_l(r)}{r}=0$，

$$\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}r^2\left[\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}u_l(r)-\frac{u_l(r)}{r^2}\right]+\left[k^2-\frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\frac{u_l(r)}{r}=0\ ,$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left[r\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}u_l(r)-u_l(r)\right]+\left[k^2-\frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\frac{u_l(r)}{r}=0\ ,$$

$\dfrac{1}{r}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}^2r}u_l(r)+\left[k^2-\dfrac{2\mu}{\hbar^2}V(r)-\dfrac{l(l+1)}{r^2}\right]\dfrac{u_l(r)}{r}=0$，即当 $r\neq0$ 时，有

$\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}^2r}u_l(r)+\left[k^2-\dfrac{2\mu}{\hbar^2}V(r)-\dfrac{l(l+1)}{r^2}\right]u_l(r)=0$，且 $u_l(r)\xrightarrow{r\to0}0$，当 $r\to\infty$ 时，$V(r)\to0$，有

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}^2r}u_l(r)+k^2u_l(r)=0\ . \tag{9.3-9}$$

$u_l(r)=A\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}kr}$，于是

$$R_l(r)\xrightarrow{r\to\infty}\frac{1}{r}(A_l^+\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}+A_l^-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}). \tag{9.3-10}$$

考虑到散射过程中粒子数守恒，则$\left|\frac{1}{r}A_l^+\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}\right|^2=\left|\frac{1}{r}A_l^-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}\right|^2$，即$|A_l^+|=|A_l^-|$，记$A_l^{\pm}=A_l^{\mathrm{I}}\mathrm{e}^{\mp\mathrm{i}\delta_l^{\mathrm{I}}}$，有

$$R_l(r)\xrightarrow{r\to\infty}\frac{A_l^{\mathrm{I}}}{r}\cos(kr-\delta_l^{\mathrm{I}}). \tag{9.3-11}$$

式(9.3-5)中的

$$\mathrm{j}_l(kr)\xrightarrow{r\to\infty}\frac{1}{kr}\cos\left(kr-\frac{l+1}{2}\pi\right), \tag{9.3-12}$$

渐近式(9.3-11)中$\delta_l^{\mathrm{I}}=\frac{l+1}{2}\pi+\delta_l$，式中$\delta_l$就是散射引起$l$分波的相移. 于是式(9.3-5)写成

$$\psi_{\mathrm{s}}=\psi-\psi_{\mathrm{i}}\xrightarrow{r\to\infty}\sum_{l=0}^{\infty}\left[\frac{A_l}{kr}\cos\left(kr-\frac{l+1}{2}\pi-\delta_l\right)\right.$$
$$\left.-\frac{1}{kr}(2l+1)\mathrm{i}^l\cos\left(kr-\frac{l+1}{2}\pi\right)\right]\mathrm{P}_l(\cos\theta),$$

$$\psi_{\mathrm{s}}\to\sum_{l=0}^{\infty}\left[\frac{A_l}{kr}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(kr-\frac{l+1}{2}\pi-\delta_l\right)}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(kr-\frac{l+1}{2}\pi-\delta_l\right)}}{2}-\frac{1}{kr}(2l+1)\mathrm{i}^l\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(kr-\frac{l+1}{2}\pi\right)}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(kr-\frac{l+1}{2}\pi\right)}}{2}\right]\mathrm{P}_l(\cos\theta)$$

$$\to\sum_{l=0}^{\infty}\left\{[A_l\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta_l}-(2l+1)\mathrm{i}^l]\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(kr-\frac{l+1}{2}\pi\right)}+[A_l\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}-(2l+1)\mathrm{i}^l]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(kr-\frac{l+1}{2}\pi\right)}\right\}\frac{\mathrm{P}_l(\cos\theta)}{2kr},$$

又$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{l+1}{2}\pi}=\frac{1}{\mathrm{i}^{(l+1)}}$，令$A_l=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta_l}(2l+1)\mathrm{i}^l$，故

$$\psi_{\mathrm{s}}\to\sum_{l=0}^{\infty}[(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\delta_l}-1)(2l+1)\mathrm{i}^l]\frac{\mathrm{P}_l(\cos\theta)}{2kr}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{\mathrm{i}^{(l+1)}},$$

由式(9.3-5)得

$$\psi_{\mathrm{s}}\xrightarrow{r\to\infty}f(\theta)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}=\sum_{l=0}^{\infty}[(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\delta_l}-1)(2l+1)\mathrm{i}^l]\frac{\mathrm{P}_l(\cos\theta)}{2kr}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{\mathrm{i}^{(l+1)}}，\text{则}$$

$$f(\theta)=\sum_{l=0}^{\infty}[(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\delta_l}-1)(2l+1)\mathrm{i}^l]\frac{\mathrm{P}_l(\cos\theta)}{2k}\frac{1}{\mathrm{i}^{(l+1)}}$$
$$=\sum_{l=0}^{\infty}[(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\delta_l}-1)(2l+1)]\frac{\mathrm{P}_l(\cos\theta)}{2k}\frac{1}{\mathrm{i}}. \tag{9.3-13}$$

总散射截面

$$\sigma=\int_{\varphi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi}\sigma(\theta)\sin\theta\,\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi=\int_{\varphi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi}|f(\theta)|^2\sin\theta\,\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi$$

$$=\int_{\varphi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi}\left|\sum_{l=0}^{\infty}[(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\delta_l}-1)(2l+1)]\frac{\mathrm{P}_l(\cos\theta)}{2k}\frac{1}{\mathrm{i}}\right|^2\sin\theta\,\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi$$

$$=\frac{2\pi}{4k^2}\left|\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{l_1=0}^{\infty}(2l+1)\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\delta_l}-1}{\mathrm{i}}\right|^2\int_{\theta=0}^{\pi}\mathrm{P}_l(\cos\theta)\mathrm{P}_{l_1}(\cos\theta)\sin\theta\,\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi$$

$$=\frac{2\pi}{4k^2}\left|\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{l_1=0}^{\infty}(2l+1)\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\delta_l}-1}{\mathrm{i}}\right|^2\frac{2}{2l+1}\delta_{ll_1}$$

$$=\frac{\pi}{k^2}\left|\sum_{l=0}^{\infty}\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\delta_l}-1}{\mathrm{i}}\right|^2(2l+1)=\frac{\pi}{k^2}\left|\sum_{l=0}^{\infty}\frac{\cos2\delta_l-\mathrm{i}\sin2\delta_l-1}{\mathrm{i}}\right|^2(2l+1)$$

$$=\frac{\pi}{k^2}\left|\sum_{l=0}^{\infty}\frac{-2\sin^2\delta_l-\mathrm{i}\sin2\delta_l}{\mathrm{i}}\right|^2(2l+1)=\frac{\pi}{k^2}\left|\sum_{l=0}^{\infty}2\sin\delta_l(\cos\delta_l-\mathrm{i}\sin\delta_l)\right|^2(2l+1)$$

$$=\frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l.\tag{9.3-14}$$

式(9.3-12)可以转化为

$$f(\theta)=\sum_{l=0}^{\infty}[\cos2\delta_l-1-\mathrm{i}\sin2\delta_l](2l+1)]\frac{\mathrm{P}_l(\cos\theta)}{2k}\frac{1}{\mathrm{i}}$$

$$=\sum_{l=0}^{\infty}[\mathrm{i}\sin^2\delta_l-\sin\delta_l\cos\delta_l](2l+1)]\frac{\mathrm{P}_l(\cos\theta)}{k},$$

虚部为

$$\mathrm{Im}\,f(\theta)=\sum_{l=0}^{\infty}(\sin^2\delta_l)(2l+1)\frac{\mathrm{P}_l(\cos\theta)}{k}\text{，即}$$

$$\mathrm{Im}\,f(0)=\sum_{l=0}^{\infty}(\sin^2\delta_l)(2l+1)\frac{\mathrm{P}_l(1)}{k}=\sum_{l=0}^{\infty}(\sin^2\delta_l)(2l+1)\frac{1}{k}\text{，故}\sigma=\frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}\,f(0)\text{，}$$

证毕.

证明 2　散射幅为

$$f(\theta)=\frac{1}{2\mathrm{i}k}\sum_l(2l+1)(\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\delta_l}-1)\mathrm{P}_l(\cos\theta)=R+\mathrm{i}I\text{，}\tag{9.3-15}$$

而

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2=R^2+I^2\text{，}\tag{9.3-16}$$

式中，

$$R=\frac{-1}{2k}\sum_l(2l+1)\sin 2\delta_l \mathrm{P}_l(\cos\theta)\,, \tag{9.3-17}$$

$$I=\frac{-1}{2k}\sum_l(2l+1)(\cos 2\delta_l-1)\mathrm{P}_l(\cos\theta)\,, \tag{9.3-18}$$

总的散射截面

$$\sigma=\int\sigma(\theta)\mathrm{d}\Omega=2\pi\int\sigma(\theta)\sin\theta\mathrm{d}\theta$$

$$=\frac{2}{4k^2}\sum_l\sum_{l_1}(2l_1+1)(2l+1)(\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\delta_l}-1)(\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta l_1}-1)\int\mathrm{P}_l(\cos\theta)\mathrm{P}_{l_1}(\cos\theta)\sin\theta\,\mathrm{d}\theta.$$

注意 $\int\mathrm{P}_l(\cos\theta)\mathrm{P}_{l_1}(\cos\theta)\sin\theta\,\mathrm{d}\theta=\dfrac{2}{2l+1}\delta_{l,l_1}$，则有

$$\sigma=\frac{4\pi}{k^2}\sum_l(2l+1)\frac{(\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\delta_l}-1)(\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\delta l_1}-1)}{4}$$

$$=\frac{4\pi}{k^2}\sum_l(2l+1)\sin^2\delta_l \qquad , \tag{9.3-19}$$

式(9.3-18)中 $\mathrm{P}_l(\cos\theta)\big|_{\theta=0}=1$，则有

$$\mathrm{Im}\,f(0)=\frac{1}{k}\sum_l(2l+1)\sin^2\delta_l\,, \tag{9.3-20}$$

所以

$$\sigma=\frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}\,f(0)\,. \tag{9.3-21}$$

证毕.

9.4　用玻恩近似计算下面几种势场的微分散射截面和总截面. (1) $V(r)=V_0\mathrm{e}^{-\alpha^2r^2}$；(2) $V(r)=V_0\mathrm{e}^{-\alpha r}$；(3) $V(r)=\dfrac{V_0\mathrm{e}^{-\alpha r}}{r}$.

分析　对于有心力场 $V(r)$ 引起的散射，如图 9.4-1 所示，微分散射截面 $\sigma(\theta)$ 仅与 θ 有关，

(1) $V(r)=V_0\mathrm{e}^{-\alpha^2r^2}$；(2) $V(r)=V_0\mathrm{e}^{-\alpha r}$；(3) $V(r)=\dfrac{V_0\mathrm{e}^{-\alpha r}}{r}$

三种情形，势能都只与矢径 r 有关，则由式(9.2-8)可以求解微分散射截面

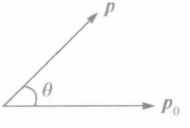

图 9.4-1　散射角θ

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2=\left|\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{1}{2k\left(\sin\dfrac{\theta}{2}\right)}\int_{r=0}^{\infty}V(r)\sin\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r\right]r\mathrm{d}r\right|^2\,, \tag{9.4-1}$$

积分后得总截面

$$\sigma=\int_{\varphi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi}\sigma(\theta)\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi\,. \tag{9.4-2}$$

解　由式(9.2-8)可以求解微分散射截面.

(1) $V_1(r)=V_0\mathrm{e}^{-\alpha^2r^2}$,

$\sigma_1(\theta)$

$$=\left|\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{1}{2k\left(\sin\dfrac{\theta}{2}\right)}\int_{r=0}^{\infty}V_0\mathrm{e}^{-\alpha^2r^2}\sin\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r\right]r\mathrm{d}r\right|^2$$

$$=\left|\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{1}{2k\left(\sin\dfrac{\theta}{2}\right)(-2\alpha^2)}\int_{r=0}^{\infty}V_0\mathrm{e}^{-\alpha^2r^2}\sin\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r\right]\mathrm{d}(-\alpha^2r^2)\right|^2$$

$$=\left|\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{V_0}{2k\left(\sin\dfrac{\theta}{2}\right)(-\alpha^2)}\int_{r=0}^{\infty}\sin\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r\right]\mathrm{d}\mathrm{e}^{-\alpha^2r^2}\right|^2$$

$$=\left|\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{V_0}{2k\left(\sin\dfrac{\theta}{2}\right)(-2\alpha^2)}\left\{\mathrm{e}^{-\alpha^2r^2}\sin\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r\right]-\int_{r=0}^{\infty}\mathrm{e}^{-\alpha^2r^2}\mathrm{d}\sin\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r\right]\right\}\right|^2$$

$$=\left|\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{V_0}{2k\left(\sin\dfrac{\theta}{2}\right)(-2\alpha^2)}\left\{\mathrm{e}^{-\alpha^2r^2}\sin\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r\right]\Big|_{r=0}^{\infty}-\int_{r=0}^{\infty}\mathrm{e}^{-\alpha^2r^2}\mathrm{d}\sin\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r\right]\right\}\right|^2$$

$$=\left|\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{V_0\,2k\left(\sin\dfrac{\theta}{2}\right)}{2k\left(\sin\dfrac{\theta}{2}\right)(2\alpha^2)}\int_{r=0}^{\infty}\mathrm{e}^{-\alpha^2r^2}\cos\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r\right]\mathrm{d}r\right|^2$$

$$=\left|\frac{\mu}{\hbar^2}\frac{V_0}{\alpha^2}\int_{r=0}^{\infty}\mathrm{e}^{-\alpha^2r^2}\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r}\right]\mathrm{d}r\right|^2$$

$$=\left|\frac{\mu}{2\hbar^2}\frac{V_0}{\alpha^2}\int_{r=0}^{\infty}\left[\mathrm{e}^{-\alpha^2r^2+\mathrm{i}2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r}+\mathrm{e}^{-\alpha^2r^2-\mathrm{i}2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r}\right]\mathrm{d}r\right|^2$$

$$=\left|\frac{\mu}{2\hbar^2}\frac{V_0}{\alpha^2}\int_{r=0}^{\infty}\left[\mathrm{e}^{-\left[\alpha^2r^2-\mathrm{i}2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r+\left(\frac{\mathrm{i}k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)}{\alpha}\right)^2\right]+\left(\frac{\mathrm{i}k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)}{\alpha}\right)^2}\right.\right.$$

$$\left.\left.+\mathrm{e}^{-\left[\alpha^2r^2+\mathrm{i}2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r+\left(\frac{\mathrm{i}k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)}{\alpha}\right)^2\right]+\left(\frac{\mathrm{i}k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)}{\alpha}\right)^2}\right]\mathrm{d}r\right|^2$$

$$=\left|\frac{\mu}{4\hbar^2}\frac{V_0}{\alpha^2}\int_{r=-\infty}^{\infty}\left[\mathrm{e}^{-\left[\alpha^2r^2-\mathrm{i}2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r+\left(\frac{\mathrm{i}k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)}{\alpha}\right)^2\right]+\left(\frac{\mathrm{i}k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)}{\alpha}\right)^2}\right.\right.$$

$$\left.\left.+\mathrm{e}^{-\left[\alpha^2r^2+\mathrm{i}2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r+\left(\frac{\mathrm{i}k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)}{\alpha}\right)^2\right]+\left(\frac{\mathrm{i}k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)}{\alpha}\right)^2}\right]\mathrm{d}r\right|^2$$

$$=\left|\frac{\mu}{4\hbar^2}\frac{V_0}{\alpha^2}\left[\mathrm{e}^{\left(\frac{\mathrm{i}k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)}{\alpha}\right)^2}\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}+\mathrm{e}^{\left(\frac{\mathrm{i}k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)}{\alpha}\right)^2}\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}\right]\right|^2=\left|\frac{\mu}{2\hbar^2}\frac{V_0\sqrt{\pi}}{\alpha^3}\mathrm{e}^{-\left(\frac{k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)}{\alpha}\right)^2}\right|^2$$

$$=\frac{\mu^2}{4\hbar^4}\frac{V_0^2\pi}{\alpha^6}\mathrm{e}^{\frac{2k^2\left(\sin^2\frac{\theta}{2}\right)}{\alpha^2}}.$$

总散射截面 $\sigma_1=\int_{\varphi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi}\sigma_1(\theta)\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi=\int_{\varphi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi}\frac{\mu^2}{4\hbar^4}\frac{V_0^2\pi}{\alpha^6}\mathrm{e}^{\frac{2k^2\left(\sin^2\frac{\theta}{2}\right)}{\alpha^2}}\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi$，

$$\sigma_1 = 2\pi\frac{\mu^2}{4\hbar^4}\frac{V_0^2\pi}{\alpha^6}\int_{\theta=0}^{\pi} \mathrm{e}^{\frac{2k^2\left(\sin^2\frac{\theta}{2}\right)}{\alpha^2}} 2\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{d}\theta$$

$$= \frac{\mu^2}{\hbar^4}\frac{V_0^2\pi^2}{\alpha^6}\int_{\theta=0}^{\pi} \mathrm{e}^{\frac{2k^2\left(\sin^2\frac{\theta}{2}\right)}{\alpha^2}} 2\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{d}\sin\frac{\theta}{2}$$

$$= \frac{\mu^2}{\hbar^4}\frac{V_0^2\pi^2}{\alpha^6}\frac{1}{-\frac{2k^2}{\alpha^2}}\int_{\theta=0}^{\pi} \mathrm{e}^{\frac{2k^2\left(\sin^2\frac{\theta}{2}\right)}{\alpha^2}} \mathrm{d}\left(-\frac{2k^2\left(\sin^2\frac{\theta}{2}\right)}{\alpha^2}\right)$$

$$= \frac{\mu^2}{\hbar^4}\frac{V_0^2\pi^2}{\alpha^6}\frac{1}{-\frac{2k^2}{\alpha^2}} \mathrm{e}^{\frac{2k^2\left(\sin^2\frac{\theta}{2}\right)}{\alpha^2}}\Bigg|_{\theta=0}^{\pi} = \frac{\mu^2}{\hbar^4}\frac{V_0^2\pi^2}{\alpha^6}\frac{1}{-\frac{2k^2}{\alpha^2}}\left[\mathrm{e}^{-\frac{2k^2}{\alpha^2}} - 1\right]$$

$$= \frac{V_0^2\mu^2\pi^2}{2k^2\hbar^4\alpha^4}\left(1 - \mathrm{e}^{-\frac{2k^2}{\alpha^2}}\right).$$

(2) $V_2(r) = V_0\mathrm{e}^{-\alpha r}$,

$$\sigma_2(\theta) = \left|\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{1}{2k(\sin\frac{\theta}{2})}\int_{r=0}^{\infty} V_0\mathrm{e}^{-\alpha r}\sin\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r\right]r\mathrm{d}r\right|^2$$

$$= \left|\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{1}{2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)}\int_{r=0}^{\infty} V_0\mathrm{e}^{-\alpha r}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r}}{2\mathrm{i}}r\mathrm{d}r\right|^2$$

$$= \left|\frac{\mu}{\hbar^2}\frac{V_0}{2k\mathrm{i}\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)}\int_{r=0}^{\infty} r[\mathrm{e}^{-\left[\alpha-\mathrm{i}2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]r} - \mathrm{e}^{-\left[\alpha+\mathrm{i}2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]r}]\mathrm{d}r\right|^2$$

$$= \left|\frac{\mu}{\hbar^2}\frac{V_0}{2k\mathrm{i}\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)}\left\{-\frac{\int_{r=0}^{\infty} r\mathrm{d}\mathrm{e}^{-\left[\alpha-\mathrm{i}2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]r}}{\left[\alpha-\mathrm{i}2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]} + \frac{\int_{r=0}^{\infty} r\mathrm{d}\mathrm{e}^{-\left[\alpha+\mathrm{i}2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]r}}{\left[\alpha+\mathrm{i}2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]}\right\}\right|^2$$

$$
=\left|\frac{\mu}{\hbar^2}\frac{V_0}{2ki\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)}\left\{-\frac{re^{-\left[\alpha-i2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]r}\Big|_{r=0}^{\infty}-\int_{r=0}^{\infty}e^{-\left[\alpha-i2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]r}dr}{\left[\alpha-i2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]}\right.\right.
$$

$$
\left.\left.+\frac{re^{-\left[\alpha+i2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]r}\Big|_{r=0}^{\infty}-\int_{r=0}^{\infty}e^{-\left[\alpha+i2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]r}dr}{\left[\alpha+i2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]}\right\}\right|^2
$$

$$
=\left|\frac{\mu}{\hbar^2}\frac{V_0}{2ki\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)}\left\{\frac{\int_{r=0}^{\infty}e^{-\left[\alpha-i2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]r}dr}{\left[\alpha-i2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]}-\frac{\int_{r=0}^{\infty}e^{-\left[\alpha+i2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]r}dr}{\left[\alpha+i2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]}\right\}\right|^2
$$

$$
=\left|\frac{\mu}{\hbar^2}\frac{V_0}{2ki\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)}\left\{\frac{e^{-\left[\alpha-i2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]r}\Big|_{r=0}^{\infty}}{-\left[\alpha-i2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]^2}-\frac{e^{-\left[\alpha+i2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]r}\Big|_{r=0}^{\infty}}{-\left[\alpha+i2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]^2}\right\}\right|^2
$$

$$
=\left|\frac{\mu}{\hbar^2}\frac{V_0}{2ki\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)}\left\{\frac{-1}{-\left[\alpha-i2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]^2}-\frac{-1}{-\left[\alpha+i2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]^2}\right\}\right|^2
$$

$$
=\left|\frac{\mu}{\hbar^2}\frac{V_0}{2ki\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)}\left\{\frac{1}{\left[\alpha-i2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]^2}-\frac{1}{\left[\alpha+i2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]^2}\right\}\right|^2
$$

$$=\left|\frac{\mu}{\hbar^2}\frac{V_0}{2ki\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)}\left\{\frac{1}{\alpha^2-\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]^2-\mathrm{i}4k\alpha\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)}\right.\right.$$

$$\left.\left.-\frac{1}{\alpha^2-\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]^2+\mathrm{i}4k\alpha\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)}\right\}\right|^2$$

$$=\left|\frac{\mu}{\hbar^2}\frac{V_0}{2ki\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)}\frac{\mathrm{i}8k\alpha\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)}{\left\{\alpha^2-\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]^2\right\}^2+\left\{4k\alpha\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right\}^2}\right|^2$$

$$=\left|\frac{\mu}{\hbar^2}\frac{4\alpha V_0}{\left\{\alpha^2-\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]^2\right\}^2-\left\{4k\alpha\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right\}^2}\right|^2$$

$$=\left|\frac{\mu}{\hbar^2}\frac{4\alpha V_0}{\left\{\alpha^2+\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]^2\right\}^2}\right|^2=\frac{16\mu^2\alpha^2V_0^2}{\hbar^4\left\{\alpha^2+\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]^2\right\}^4}.$$

总散射截面

$$\sigma_2=\int_{\varphi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi}\sigma_2(\theta)\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi=\int_{\varphi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi}\frac{16\mu^2\alpha^2V_0^2}{\hbar^4\left\{\alpha^2+\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]^2\right\}^4}\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi,$$

$$=2\pi\frac{16\mu^2\alpha^2V_0^2}{\hbar^4}\int_{\theta=0}^{\pi}\frac{1}{\left\{\alpha^2+\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]^2\right\}^4}2\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{d}\theta$$

$$=\pi\frac{64\mu^2\alpha^2V_0^2}{\hbar^4}\int_{\theta=0}^{\pi}\frac{1}{\left\{\alpha^2+\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]^2\right\}^4}2\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{d}\sin\frac{\theta}{2}$$

$$=\pi\frac{64\mu^2\alpha^2V_0^2}{4k^2\hbar^4}\int_{\theta=0}^{\pi}\frac{1}{\left\{\alpha^2+\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]^2\right\}^4}\mathrm{d}\left[\alpha^2+4k^2\sin^2\frac{\theta}{2}\right]$$

$$=\pi\frac{64\mu^2\alpha^2V_0^2}{4k^2\hbar^4}\frac{1}{-4+1}\frac{1}{\left\{\alpha^2+\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]^2\right\}^3}\Bigg|_{\theta=0}^{\pi}$$

$$=\pi\frac{64\mu^2\alpha^2V_0^2}{4k^2\hbar^4}\frac{1}{-4+1}\left[\frac{1}{\{\alpha^2+[2k]^2\}^3}-\frac{1}{\alpha^6}\right]=\pi\frac{64\mu^2\alpha^2V_0^2}{3\hbar^4 4k^2}\left[\frac{1}{\alpha^6}-\frac{1}{(\alpha^2+4k^2)^3}\right]$$

$$=\pi\frac{64\mu^2\alpha^2V_0^2}{3\hbar^4 4k^2}\left[\frac{(\alpha^2+4k^2)^3-\alpha^6}{\alpha^6(\alpha^2+4k^2)^3}\right]=\pi\frac{64\mu^2V_0^2}{3\hbar^4}\left[\frac{3\alpha^4+12\alpha^2k^2+16k^4}{\alpha^4(\alpha^2+4k^2)^3}\right].$$

(3) $V_3(r)=\dfrac{V_0\mathrm{e}^{-\alpha r}}{r}$,

$$\sigma_3(\theta)=\left|\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{1}{2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)}\int_{r=0}^{\infty}\frac{V_0\mathrm{e}^{-\alpha r}}{r}\sin\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r\right]r\mathrm{d}r\right|^2$$

$$=\left|\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{1}{2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)}\int_{r=0}^{\infty}V_0\mathrm{e}^{-\alpha r}\sin\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r\right]\mathrm{d}r\right|^2$$

$$=\left|\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{1}{2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)}\int_{r=0}^{\infty}V_0\mathrm{e}^{-\alpha r}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r}}{2\mathrm{i}}\mathrm{d}r\right|^2$$

$$=\left|\frac{\mu}{\hbar^2\mathrm{i}}\frac{1}{2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)}\int_{r=0}^{\infty}V_0\left[\mathrm{e}^{-\left[\alpha-\mathrm{i}2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]r}-\mathrm{e}^{-\left[\alpha+\mathrm{i}2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]r}\right]\mathrm{d}r\right|^2$$

$$=\left|\frac{\mu}{\hbar^2\mathrm{i}}\frac{V_0}{2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)}\left[\frac{\mathrm{e}^{-\left[\alpha-\mathrm{i}2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]r}\Big|_{r=0}^{\infty}}{-\left[\alpha-\mathrm{i}2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]}-\frac{\mathrm{e}^{-\left[\alpha+\mathrm{i}2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]r}\Big|_{r=0}^{\infty}}{-\left[\alpha+\mathrm{i}2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]}\right]\right|^2$$

$$=\left|\frac{\mu}{\hbar^2\mathrm{i}}\frac{V_0}{2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)}\left[\frac{1}{\left[\alpha-\mathrm{i}2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]}-\frac{1}{\left[\alpha+\mathrm{i}2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]}\right]\right|^2$$

$$=\left|\frac{\mu}{\hbar^2}\frac{V_0}{2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)}\frac{4k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)}{\alpha^2+\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]^2}\right|^2=\left|\frac{\mu}{\hbar^2}\frac{2V_0}{\alpha^2+\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]^2}\right|^2$$

$$=\frac{4\mu^2V_0^2}{\hbar^4\left\{\alpha^2+\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]^2\right\}^2}$$

总散射截面

$$\sigma_3=\int_{\varphi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi}\sigma_2(\theta)\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi=\int_{\varphi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi}\frac{4\mu^2V_0^2}{\hbar^4\left\{\alpha^2+\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]^2\right\}^2}\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi,$$

$$=2\pi\frac{4\mu^2V_0^2}{\hbar^4}\int_{\theta=0}^{\pi}\frac{1}{\left\{\alpha^2+\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]^2\right\}^2}2\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{d}\theta$$

$$=\pi\frac{16\mu^2V_0^2}{\hbar^4}\int_{\theta=0}^{\pi}\frac{1}{\left\{\alpha^2+\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]^2\right\}^2}2\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{d}\cos\frac{\theta}{2}$$

$$=\pi\frac{16\mu^2V_0^2}{4k^2\hbar^4}\int_{\theta=0}^{\pi}\frac{1}{\left\{\alpha^2+\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)\right]^2\right\}^2}\mathrm{d}\left[\alpha^2+4k^2\sin^2\frac{\theta}{2}\right]$$

$$=-\pi\frac{16\mu^2V_0^2}{4k^2\hbar^4}\frac{1}{\alpha^2+4k^2\sin^2\dfrac{\theta}{2}}\Bigg|_{\theta=0}^{\pi}$$

$$=-\pi\frac{16\mu^2V_0^2}{4k^2\hbar^4}\left(\frac{1}{\alpha^2+4k^2}-\frac{1}{\alpha^2}\right)=\pi\frac{16\mu^2V_0^2}{4k^2\hbar^4}\left(\frac{1}{\alpha^2}-\frac{1}{\alpha^2+4k^2}\right)$$

$$=\pi\frac{16\mu^2V_0^2}{4k^2\hbar^4}\frac{4k^2}{\alpha^2(\alpha^2+4k^2)}=\pi\frac{16\mu^2V_0^2}{\hbar^4\alpha^2(\alpha^2+4k^2)}.$$

答　微分散射截面分别是 $\sigma_1(\theta)=\dfrac{V_0^2\mu^2\pi^2}{2k^2\hbar^4\alpha^4}\left(1-\mathrm{e}^{-\frac{2k^2}{\alpha^2}}\right)$；$\sigma_2(\theta)=\pi\dfrac{64\mu^2V_0^2}{3\hbar^4}\left[\dfrac{3\alpha^4+12\alpha^2k^2+16k^4}{\alpha^4(\alpha^2+4k^2)^3}\right]$；$\sigma_3(\theta)=\dfrac{4\mu^2V_0^2}{\hbar^4\left\{\alpha^2+\left[2k\left(\sin\dfrac{\theta}{2}\right)\right]^2\right\}^2}$.

总散射截面分别为 $\sigma_1=\dfrac{V_0^2\mu^2\pi^2}{2k^2\hbar^4\alpha^4}\left(1-\mathrm{e}^{-\frac{2k^2}{\alpha^2}}\right)$；$\sigma_2=\pi\dfrac{64\mu^2\alpha^2V_0^2}{3\hbar^4}\left[\dfrac{1}{\alpha^6}-\dfrac{1}{(\alpha^2+4k^2)^3}\right]$；$\sigma_3=\pi\dfrac{16\mu^2V_0^2}{\hbar^4\alpha^2(\alpha^2+4k^2)}$.

9.5　求低能粒子被球势阱散射的散射截面.

分析　对于低能粒子入射情形，其德布罗意波长比球势阱势场作用力程大很多，散射势写成

$$V(r)=\begin{cases}-V_0, & r\leqslant a\\ 0. & r>a\end{cases}. \tag{9.5-1}$$

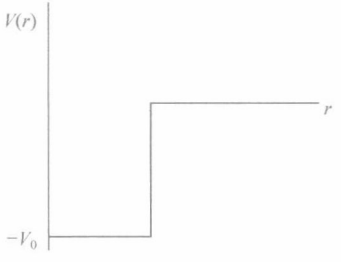

图 9.5-1　球势阱散射

解　如图 9.5-1 所示，由于 $V(\infty)=0$，$E>0$ 是自由态，有心力场对低能($ka\ll1$)粒子的散射，只需考虑 s 分波($l=0$)对 σ 的贡献，$\psi=\dfrac{u(r)}{r}\mathrm{Y}_{00}$，$u(r)\xrightarrow{r\to0}0$，$u(r)$ 满足

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+V(r)\right]u(r)=Eu(r), \tag{9.5-2}$$

由于 $V(r)$ 分段表示，由分段求解得

$$u(r)=\begin{cases}A\sin k_1 r+B\cos k_1 r, & r<a\\ C\sin kr+D\cos kr, & r>a\end{cases}, \tag{9.5-3}$$

其中，

$$k^2=\frac{2\mu E}{\hbar^2}>0\ ,\quad k_1^2=\frac{2\mu(E+V_0)}{\hbar^2}>0\ , \tag{9.5-4}$$

所以 $k_1^2=k^2+\dfrac{2\mu V_0}{\hbar^2}$，为了满足 $u(r)\xrightarrow{r\to 0}0$，令 $B=0$，

在 $r=a$ 处，u 和 $\dfrac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}r}$ 连续，有

$$\begin{cases}A\sin k_1 a=C\sin ka+D\cos ka\\ k_1 A\cos k_1 a=kC\cos ka-kD\sin ka\end{cases}, \tag{9.5-5}$$

根据克拉默法则，得

$$C=\frac{\begin{vmatrix}A\sin k_1 a & \cos ka\\ \dfrac{k_1}{k}A\cos k_1 a & -\sin ka\end{vmatrix}}{\begin{vmatrix}\sin ka & \cos ka\\ \cos ka & -\sin ka\end{vmatrix}}=A\left(\sin ka\sin k_1 a+\frac{k_1}{k}\cos ka\cos k_1 a\right), \tag{9.5-6}$$

$$D=-\begin{vmatrix}\sin ka & A\sin k_1 a\\ \cos ka & \dfrac{k_1}{k}A\cos k_1 a\end{vmatrix}=-A\left(\frac{k_1}{k}\sin ka\cos k_1 a-\cos ka\sin k_1 a\right), \tag{9.5-7}$$

入射的 s 分波，

$$\mathrm{j}_0(kr)\xrightarrow{r\to\infty}\frac{1}{kr}\cos\left(kr-\frac{\pi}{2}\right), \tag{9.5-8}$$

散射后的 s 分波，当 $r>a$

$$\psi(r)=\frac{1}{r}(D\cos kr+C\sin kr)\xrightarrow{r\to\infty}\frac{1}{r}\cos\left(kr-\frac{\pi}{2}-\delta_0\right). \tag{9.5-9}$$

为了求 δ_0，令

$$D=E\cos\left(\frac{\pi}{2}+\delta_0\right),\quad C=E\sin\left(\frac{\pi}{2}+\delta_0\right), \tag{9.5-10}$$

则

$$\frac{D}{C}=\frac{\cos\left(\frac{\pi}{2}+\delta_0\right)}{\sin\left(\frac{\pi}{2}+\delta_0\right)}=-\frac{\sin\delta_0}{\cos\delta_0},\quad \tan\delta_0=-\frac{D}{C}=\frac{\frac{k_1}{k}\sin ka\cos k_1a-\cos ka\sin k_1a}{\sin ka\sin k_1a+\frac{k_1}{k}\cos ka\cos k_1a},$$

当 $ka\ll 1$ 时，$\sin ka\approx ka$，$\cos ka\approx 1$，

$$\tan\delta_0=\frac{k_1a\cos k_1a-\sin k_1a}{ka\sin k_1a+\frac{k_1}{k}\cos k_1a}\approx ka-\frac{ka}{k_1a}\tan k_1a=ka\left(1-\frac{\tan k_1a}{k_1a}\right)\xrightarrow{ka\to 0}0,$$

所以，$\sin\delta_0\approx\tan\delta_0$，

$$\sigma=\frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0=4\pi a^2\left(1-\frac{\tan k_1a}{k_1a}\right)^2. \tag{9.5-11}$$

由于 $k_1^2=k^2+\frac{2\mu}{\hbar^2}V_0$，所以 $k_1^2a^2=k^2a^2+\frac{2\mu}{\hbar^2}V_0a^2$，

当 $ka\to 0$，则 $k_1^2a^2\approx\frac{2\mu}{\hbar^2}V_0a^2$，

$$\sigma=4\pi a^2\left(1-\frac{\tan\sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}V_0}a}{\sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}V_0}a}\right)^2. \tag{9.5-12}$$

答 低能粒子被球势阱散射的散射截面为 $\sigma=4\pi a^2\left(1-\frac{\tan\sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}V_0}a}{\sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}V_0}a}\right)^2$.

9.6 粒子受 δ 球壳势 $V(r)=A\delta(r-a)$ 散射，求 s 波相移满足的条件及极低能时的散射截面.

分析 根据式(9.2-8)计算散射振幅，再计算微分散射截面，以 $l=0$ 求出 s 波相移满足的条件以及极低能时的散射截面.

解 1 由式(9.2-8)得

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2=\left|\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{1}{2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)}\int_{r=0}^{\infty}V(r)\sin\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)r\right]r\mathrm{d}r\right|^2$$

$$
\begin{aligned}
&= \left| \frac{2\mu}{\hbar^2} \frac{1}{2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)} \int_{r=0}^{\infty} A\delta(r-a) \sin\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right) r \right] r\mathrm{d}r \right|^2 \\
&= \left| \frac{2\mu}{\hbar^2} \frac{Aa\sin\left[2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right) a \right]}{2k\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)} \right|^2 .
\end{aligned} \tag{9.6-1}
$$

对于极低能情形即当 $k \to 0$ 时，$\sigma(\theta) = \dfrac{4\mu^2 A^2 a^4}{\hbar^4}$，

$$
\sigma = 4\pi\sigma(\theta) = \frac{16\pi\mu^2 A^2 a^4}{\hbar^4} . \tag{9.6-2}
$$

对于低能粒子被 δ 球壳势 $V(r) = A\delta(r-a)$ 散射的径向函数 $R_l(r)$ 满足

$\dfrac{1}{r^2}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} r^2 \dfrac{\mathrm{d}R_l(r)}{\mathrm{d}r} + \left[k^2 - \dfrac{2\mu}{\hbar^2} V(r) - \dfrac{l(l+1)}{r^2} \right] R_l(r) = 0$，$rR_l(r) \xrightarrow{r\to 0} 0$，当 $r \to \infty$ 时，$V(r) \to 0$，现作变换 $R_l(r) = \dfrac{u_l(r)}{r}$，有

$$
\begin{cases}
\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}^2 r} u_0(r) + k^2 u_0(r) = 0, & r \neq a \\
\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}^2 r} u_0(r) + k_1^2 u_0(r) = 0, & r = a
\end{cases} ,
$$

式中 $k^2 = \dfrac{2\mu E}{\hbar^2}$，$k_1^2 = k^2 - \dfrac{2\mu A\delta(r-a)}{\hbar^2}$，对于低能情形，令 $k_1^2 = -\dfrac{2\mu A\delta(r-a)}{\hbar^2} = -b < 0$，

$$
\dot{u}_0(r) \frac{\mathrm{d}\dot{u}_0(r)}{\mathrm{d}u_0(r)} = b u_0(r) ,\quad \frac{\dot{u}_0^2(r)}{2} = b\frac{u_0^2(r)}{2} + \frac{c}{2} ,\quad \dot{u}_0^2(r) = b u_0^2(r) + c ,
$$

$$
\frac{\mathrm{d}u_0(r)}{\mathrm{d}r} = \pm\sqrt{b u_0^2(r) + c} .
$$

(1) 取 “+” 的一支，有 $\displaystyle\int \frac{\mathrm{d}u_0(r)}{\sqrt{b u_0^2(r) + c}} = \int \mathrm{d}r$，$\dfrac{1}{\sqrt{b}} \displaystyle\int \frac{\mathrm{d}u_0(r)}{\sqrt{u_0^2(r) + \dfrac{c}{b}}} = \int \mathrm{d}r$，

令 $u_0(r) = x = \sqrt{\dfrac{c}{b}} \sinh t = \sqrt{\dfrac{c}{b}} \dfrac{\mathrm{e}^t - \mathrm{e}^{-t}}{2}$，则 $\mathrm{d}u_0(r) = \sqrt{\dfrac{c}{b}} \dfrac{\mathrm{e}^t + \mathrm{e}^{-t}}{2} \mathrm{d}t$，

$$
\sqrt{u_0^2(r) + \frac{c}{b}} = \sqrt{\frac{c}{b}\left(\frac{\mathrm{e}^t - \mathrm{e}^{-t}}{2}\right)^2 + \frac{c}{b}} x = \sqrt{\frac{c}{b}} \sqrt{\frac{\mathrm{e}^{2t} - 2 + \mathrm{e}^{-2t}}{4} + 1} = \sqrt{\frac{c}{b}} \frac{\mathrm{e}^t + \mathrm{e}^{-t}}{2} ,
$$

$$\int \frac{\sqrt{\frac{c}{b}}\frac{\mathrm{e}^{t}+\mathrm{e}^{-t}}{2}\mathrm{d}t}{\sqrt{\frac{c}{b}}\frac{\mathrm{e}^{t}+\mathrm{e}^{-t}}{2}} = \int \mathrm{d}r\ ,$$

$t = r + c_1$，即 $\ln\left[\sqrt{\frac{b}{c}}u_0(r) + \sqrt{\frac{b}{c}u_0^2(r)+1}\right] = r + c_1$，$u_0(r) = \sqrt{\frac{c}{b}}\frac{\mathrm{e}^{2r+2c_1}-1}{2\mathrm{e}^{r+c_1}} = \sqrt{\frac{c\hbar^2}{2\mu A}}\frac{\mathrm{e}^{2r+2c_1}-1}{2\mathrm{e}^{r+c_1}}$.

对于 $r \neq a$，解为 $u_0(r) = A_0\sin(kr+\delta_0)$，由于 $R_0(r) = \frac{u_0(r)}{r}$ 在 $r\to 0$ 处有限，即 $u_0(r) \xrightarrow{r\to 0} 0$，取 $\delta_1 = 0$．在 $r = a$ 处，$R_0(r)$ 和 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}R_0(r)$ 连续，即在 $r = a$ 处，$u_0(r)$ 和 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}u_0(r)$ 连续，得到

$$u_0(a) = \sqrt{\frac{c\hbar^2}{2\mu A}}\frac{\mathrm{e}^{2a+2c_1}-1}{2\mathrm{e}^{a+c_1}} = A_0\sin(ka)\ ;\quad \sqrt{\frac{c\hbar^2}{2\mu A}}\left[\frac{2\mathrm{e}^{2a+2c_1}}{2\mathrm{e}^{a+c_1}} - \frac{(\mathrm{e}^{2a+2c_1}-1)}{2\mathrm{e}^{a+c_1}}\right] = A_0 k\cos(ka)\ .$$

令 $\mathrm{e}^{a+c_1} = y$，$\sqrt{\frac{c\hbar^2}{2\mu A}} = z$，故有 $z\frac{y^2-1}{2y} = A_0\sin(ka)$，$z\left(y - \frac{y^2-1}{2y}\right) = A_0 k\cos(ka)$，

$$y = \frac{A_0\sin(ka) + A_0 k\cos(ka)}{z} = A_0\frac{\sin(ka)+k\cos(ka)}{z}\ ,$$

$$[A_0\sin(ka)+kA_0\cos(ka)]^2 - z^2 = 2[A_0\sin(ka)+kA_0\cos(ka)]A_0\sin(ka)\ ,$$

$$z = \pm\sqrt{[A_0\sin(ka)+kA_0\cos(ka)]^2 - 2[A_0\sin(ka)+kA_0\cos(ka)]A_0\sin(ka)}\ ,$$

由于 $\sqrt{\frac{c\hbar^2}{2\mu A}} = z > 0$，则

$$z = \sqrt{A_0^2\sin^2(ka) + k^2A_0^2\cos^2(ka) + 2kA_0^2\sin(ka)\cos(ka) - 2A_0^2\sin^2(ka) - 2kA_0^2\sin(ka)\cos(ka)}$$

$$= \sqrt{k^2A_0^2\cos^2(ka) - A_0^2\sin^2(ka)} = A_0\sqrt{k^2\cos^2(ka) - \sin^2(ka)} = \sqrt{\frac{c\hbar^2}{2\mu A}}.$$

$$c = \frac{2\mu A}{\hbar^2}A_0\sqrt{k^2\cos^2(ka) - \sin^2(ka)}\ .$$

即

$$y = A_0\frac{\sin(ka)+k\cos(ka)}{z} = \frac{\sin(ka)+k\cos(ka)}{\sqrt{k^2\cos^2(ka)-\sin^2(ka)}} = \sqrt{\frac{k\cos(ka)+\sin(ka)}{k\cos(ka)-\sin(ka)}} = \mathrm{e}^{a+c_1}\ .$$

$$c_1=\ln\sqrt{\frac{k\cos(ka)+\sin(ka)}{k\cos(ka)-\sin(ka)}}-a\,.$$

故

$$u_0(r)=\sqrt{\frac{c\hbar^2}{2\mu A}}\frac{\mathrm{e}^{2r+2c_1}-1}{2\mathrm{e}^{r+c_1}}=A_0\sqrt{k^2\cos^2(ka)-\sin^2(ka)}\,\frac{\dfrac{k\cos(ka)+\sin(ka)}{k\cos(ka)-\sin(ka)}\mathrm{e}^{2r-2a}-1}{2\sqrt{\dfrac{k\cos(ka)+\sin(ka)}{k\cos(ka)-\sin(ka)}}\mathrm{e}^{r-a}}$$

$$=A_0\frac{[k\cos(ka)+\sin(ka)]\mathrm{e}^{2r-2a}-[k\cos(ka)-\sin(ka)]}{2\mathrm{e}^{r-a}}.$$

当 $r=a$ 时，$u_0(a)=A_0\sin(ka)$，与 $u_0(r)=A_0\sin(kr+\delta_0)$ 相比，$\delta_0=0$.

(2)取“–”的一支，有 $\int\frac{\mathrm{d}u_0(r)}{\sqrt{bu_0^2(r)+c}}=-\int\mathrm{d}r$，$\frac{1}{\sqrt{b}}\int\frac{\mathrm{d}u_0(r)}{\sqrt{u_0^2(r)+\frac{c}{b}}}=-\int\mathrm{d}r$，

令 $u_0(r)=x=\sqrt{\frac{c}{b}}\sinh t=\sqrt{\frac{c}{b}}\frac{\mathrm{e}^t-\mathrm{e}^{-t}}{2}$，则 $\mathrm{d}u_0(r)=\sqrt{\frac{c}{b}}\frac{\mathrm{e}^t+\mathrm{e}^{-t}}{2}\mathrm{d}t$，

$$\sqrt{u_0^2(r)+\frac{c}{b}}=\sqrt{\frac{c}{b}\left(\frac{\mathrm{e}^t-\mathrm{e}^{-t}}{2}\right)^2+\frac{c}{b}}x=\sqrt{\frac{c}{b}}\sqrt{\frac{\mathrm{e}^{2t}-2+\mathrm{e}^{-2t}}{4}+1}=\sqrt{\frac{c}{b}}\frac{\mathrm{e}^t+\mathrm{e}^{-t}}{2},$$

$$\int\frac{\sqrt{\frac{c}{b}}\frac{\mathrm{e}^t+\mathrm{e}^{-t}}{2}\mathrm{d}t}{\sqrt{\frac{c}{b}}\frac{\mathrm{e}^t+\mathrm{e}^{-t}}{2}}=-\int\mathrm{d}r\,,$$

$t=r+c_1$，即 $\ln\left[\sqrt{\frac{b}{c}}u_0(r)+\sqrt{\frac{b}{c}u_0^2(r)+1}\right]=-r+c_1$，$u_0(r)=\sqrt{\frac{c}{b}}\frac{\mathrm{e}^{-2r+2c_1}-1}{2\mathrm{e}^{-r+c_1}}=$

$$\sqrt{\frac{c\hbar^2}{2\mu A}}\frac{\mathrm{e}^{-2r+2c_1}-1}{2\mathrm{e}^{-r+c_1}}.$$

对于 $r\neq a$，解为 $u_0(r)=A_0\sin(kr+\delta_0)$，由于 $R_0(r)=\frac{u_0(r)}{r}$ 在 $r\to0$ 处有限，即 $u_0(r)\xrightarrow{r\to0}0$，取 $\delta_1=0$. 在 $r=a$ 处，$R_0(r)$ 和 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}R_0(r)$ 连续，即在 $r=a$ 处，$u_0(r)$ 和 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}u_0(r)$ 连续，得到

$$u_0(a)=\sqrt{\frac{c\hbar^2}{2\mu A}}\frac{\mathrm{e}^{-2a+2c_1}-1}{2\mathrm{e}^{-a+c_1}}=A_0\sin(ka)\,,$$

$$\sqrt{\frac{c\hbar^2}{2\mu A}}\left[\frac{2\mathrm{e}^{-2a+2c_1}}{2\mathrm{e}^{-a+c_1}}-\frac{(\mathrm{e}^{-2a+2c_1}-1)}{2\mathrm{e}^{-a+c_1}}\right]=A_0k\cos(ka)\,.$$

令 $\mathrm{e}^{-a+c_1}=y$，$\sqrt{\frac{c\hbar^2}{2\mu A}}=z$，故有 $z\frac{y^2-1}{2y}=A_0\sin(ka)$，$z\left(y-\frac{y^2-1}{2y}\right)=A_0k\cos(ka)$，

$$y=\frac{A_0\sin(ka)+A_0k\cos(ka)}{z}=A_0\frac{\sin(ka)+k\cos(ka)}{z}\,,$$

$$[A_0\sin(ka)+kA_0\cos(ka)]^2-z^2=2[A_0\sin(ka)+kA_0\cos(ka)]A_0\sin(ka)\,,$$

$$z=\pm\sqrt{[A_0\sin(ka)+kA_0\cos(ka)]^2-2[A_0\sin(ka)+kA_0\cos(ka)]A_0\sin(ka)}\,,$$

由于 $\sqrt{\frac{c\hbar^2}{2\mu A}}=z>0$，则

$$z=\sqrt{A_0^2\sin^2(ka)+k^2A_0^2\cos^2(ka)+2kA_0^2\sin(ka)\cos(ka)-2A_0^2\sin^2(ka)-2kA_0^2\sin(ka)\cos(ka)}$$

$$=\sqrt{k^2A_0^2\cos^2(ka)-A_0^2\sin^2(ka)}=A_0\sqrt{k^2\cos^2(ka)-\sin^2(ka)}=\sqrt{\frac{c\hbar^2}{2\mu A}}\,.$$

$$c=\frac{2\mu A}{\hbar^2}A_0\sqrt{k^2\cos^2(ka)-\sin^2(ka)}\,.$$

即

$$y=A_0\frac{\sin(ka)+k\cos(ka)}{z}=\frac{\sin(ka)+k\cos(ka)}{\sqrt{k^2\cos^2(ka)-\sin^2(ka)}}=\sqrt{\frac{k\cos(ka)+\sin(ka)}{k\cos(ka)-\sin(ka)}}=\mathrm{e}^{-a+c_1}\,.$$

$$c_1=\ln\sqrt{\frac{k\cos(ka)+\sin(ka)}{k\cos(ka)-\sin(ka)}}-a\,.$$

故

$$u_0(r)=\sqrt{\frac{c\hbar^2}{2\mu A}}\frac{\mathrm{e}^{-2r+2c_1}-1}{2\mathrm{e}^{-r+c_1}}=A_0\sqrt{k^2\cos^2(ka)-\sin^2(ka)}\,\frac{\dfrac{k\cos(ka)+\sin(ka)}{k\cos(ka)-\sin(ka)}\mathrm{e}^{-2r+2a}-1}{2\sqrt{\dfrac{k\cos(ka)+\sin(ka)}{k\cos(ka)-\sin(ka)}}\mathrm{e}^{-r+a}}$$

$$=A_0\frac{[k\cos(ka)+\sin(ka)]\mathrm{e}^{-2r+2a}-[k\cos(ka)-\sin(ka)]}{2\mathrm{e}^{-r+a}}.$$

当 $r=a$ 时，$u_0(a)=A_0\sin(ka)$，与 $u_0(r)=A_0\sin(kr+\delta_0)$ 相比，$\delta_0=0$.

解 2　低能粒子在有心力场中的散射，只需要考虑 s 分波散射截面的贡献，因 $V(\infty)=0$，$E>0$ 是自由态问题，s 分波对散射截面的贡献

$$\sigma=\frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0\,,\tag{9.6-3}$$

需要求 δ_0，

$$\psi_0 = \frac{u(r)}{r} Y_{00} = \frac{u(r)}{r} \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \tag{9.6-4}$$

$u(r)$ 满足

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + V(r) \right] u(r) = E u(r), \tag{9.6-5}$$

即

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} u(r) + \left[k^2 - \frac{2\mu}{\hbar^2} V(r) \right] u(r) = 0, \quad E = \frac{\hbar^2}{2\mu} k^2, \quad u(r) \xrightarrow{r \to 0} 0, \tag{9.6-6}$$

对方程(9.6-6)进行积分 $\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \mathrm{d}r \left\{ \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} u(r) + \left[k^2 - \frac{2\mu}{\hbar^2} V(r) \right] u(r) \right\} = 0$，再令 $\varepsilon \to 0$，得

$$\left. \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}r} \right|_{a+\varepsilon} - \left. \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}r} \right|_{a-\varepsilon} + \frac{2\mu g}{\hbar^2} u(a) + k^2 u(a) 2\varepsilon = 0, \tag{9.6-7}$$

式(9.6-6)左方第 4 项 $k^2 u(a) 2\varepsilon$ 随着 $\varepsilon \to 0$ 而为零，又 $0 \leqslant r \leqslant a$，$V(r) = 0$，

$$u_1 = B \sin kr + D \cos kr,$$

为满足边界条件 $u_1(0) = 0$，所以 $D = 0$.

在 $r > a$ 区域，$u_2(r) = A_1 \sin(kr + \delta_0)$，考虑到 $r = a$ 时，$u = u_1 = u_2$，则

$$A_1 \sin(ka + \delta_0) - B \sin ka = 0, \tag{9.6-8}$$

又根据方程式(9.6-6)，

$$k[A_1 \cos(ka + \delta_0) - B \cos ka] + \frac{-2\mu A}{\hbar^2} B \sin ka = 0,$$

即

$$A_1 \cos(ka + \delta_0) - B \left[\cos ka + \frac{2\mu A}{\hbar^2 k} \sin ka \right] = 0, \tag{9.6-9}$$

联立方程(9.6-8)和(9.6-9)，有解条件为系数矩阵的行列式为零

$$\det \begin{vmatrix} \sin(ka + \delta_0) & -\sin ka \\ \cos(ka + \delta_0) & -\left(\cos ka + \dfrac{2\mu A}{\hbar^2 k} \sin ka \right) \end{vmatrix} = 0, \tag{9.6-10}$$

即

$$\tan(ka + \delta_0) = \frac{\sin ka}{\cos ka + \dfrac{2\mu A}{\hbar^2 k} \sin ka},$$

这就是 s 波相移 δ_0 满足的条件，当 $ka\to 0$ 时，$\sin ka = ka$，$\cos ka = 1$，

$$\tan(ka+\delta_0)=\frac{ka}{1+\dfrac{2\mu A}{\hbar^2}a}\ ,\quad \delta_0 = ka\left[\frac{1}{1+\dfrac{2\mu Aa}{\hbar^2}}-1\right]\xrightarrow{ka\to 0}0\ ,\quad \sin\delta_0\sim\delta_0\ ,\ \text{所以}$$

$$\sin^2\delta_0=(ka)^2\left[\frac{1}{1+\dfrac{2\mu Aa}{\hbar^2}}-1\right]^2\ ,$$

$$\sigma=\frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0=4\pi a^2\left[\frac{1}{1+\dfrac{2\mu Aa}{\hbar^2}}-1\right]^2\ . \tag{9.6-11}$$

对于极低能 $ka\to 0$ 时，$\sigma\approx 4\pi a^2\left(\dfrac{2\mu Aa}{\hbar^2}\right)^2=\dfrac{16\pi\mu^2A^2a^4}{\hbar^4}$，与式(9.6-2)相同.

答 粒子受 δ 球壳势 $V(r)=A\delta(r-a)$ 散射，求 s 波相移满足的条件是 $\delta_0\xrightarrow{ka\to 0}0$；极低能时的散射截面为 $\sigma=4\pi a^2\left[\dfrac{1}{1+\dfrac{2\mu Aa}{\hbar^2}}-1\right]^2$，对于极低能 $ka\to 0$ 时，

$$\sigma\approx 4\pi a^2\left(\frac{2\mu Aa}{\hbar^2}\right)^2=\frac{16\pi\mu^2A^2a^4}{\hbar^4}\ .$$

9.7 求解球方势垒 $V(r)=\begin{cases}V_0, & r\leqslant a\\ 0, & r>a\end{cases}$，对低能粒子的散射.

分析 由于球方势垒只与径向有关，利用径向球薛定谔方程求解.

解 1 低能粒子，$0<E<V_0$，$ka\ll 1$，只需要考虑 $s\,(l=0)$ 分波对散射截面的贡献，

$$\psi=\frac{u(r)}{r}\mathrm{Y}_{00}\ ,\quad \mathrm{Y}_{00}=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\ , \tag{9.7-1}$$

$u(r)$ 满足方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+V(r)\right]u(r)=Eu(r)\ . \tag{9.7-2}$$

因 $V(r)$ 是分段表示的，故分段求解方程

当 $r<a$ 时，

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2}=\frac{2\mu}{\hbar^2}(V_0-E)u=k_1^2u\ ,\quad k_1^2=\frac{2\mu}{\hbar^2}(V_0-E)>0\ ,\quad u(r)=A_1\mathrm{e}^{k_1r}+B_1\mathrm{e}^{-k_1r}\ ,$$

$$u(0)=0\ ,\quad B_1=-A_1\ ,$$

$$u(r)=A\sinh k_1r\ . \tag{9.7-3}$$

当 $r>a$ 时，

$$u(r)=C\sin kr+D\cos kr=E\cos\left(kr-\frac{\pi}{2}-\delta_0\right)\ ,\quad k^2=\frac{2\mu}{\hbar^2}E\ ,$$

其中，

$$C=E\sin\left(\frac{\pi}{2}+\delta_0\right)\ ,\quad D=E\cos\left(\frac{\pi}{2}+\delta_0\right)\ , \tag{9.7-4}$$

在 $r=a$ 处，u 和 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}u$ 连续，

$$A\sinh k_1a=C\sin ka+D\cos ka\ , \tag{9.7-5}$$

$$k_1a\cosh k_1a=kC\sin ka-kD\sin ka\ , \tag{9.7-6}$$

方程(9.7-5)和(9.7-6)联立，据克拉默法则解得

$$C=\frac{\begin{vmatrix}\sin k_1a & \cos ka\\ \dfrac{k_1}{k}\cosh k_1a & -\sin ka\end{vmatrix}}{\begin{vmatrix}\sin ka & \cos ka\\ \cos ka & -\sin ka\end{vmatrix}}A=(-1)A\left[-\sinh(k_1a)\sin ka-\frac{k_1}{k}\cosh(k_1a)\cos(ka)\right] \tag{9.7-7}$$

$$\xrightarrow{ka\ll1}A\left[ka\sinh(k_1a)+\frac{k_1}{k}\cosh(k_1a)\right],$$

$$D=\frac{\begin{vmatrix}\sin ka & \sinh k_1a\\ \cos ka & \dfrac{k_1}{k}\cosh k_1a\end{vmatrix}}{(-1)}A=-A\left[\sin ka\frac{k_1}{k}\cosh(k_1a)-\sinh(k_1a)\cos(ka)\right], \tag{9.7-8}$$

$$\xrightarrow{ka\ll1}-A[k_1a\cosh(k_1a)-\sinh(k_1a)].$$

得 $\dfrac{D}{C}=\dfrac{\cos\left(\dfrac{\pi}{2}+\delta_0\right)}{\sin\left(\dfrac{\pi}{2}+\delta_0\right)}=-\dfrac{\sin\delta_0}{\cos\delta_0}$，故

$$\tan\delta_0=-\frac{D}{C}=\frac{k_1a\cosh(k_1a)-\sinh(k_1a)}{ka\sinh(k_1a)+\dfrac{k_1}{k}\cosh(k_1a)}\ ,$$

当 $ka \to 0$，

$$\tan\delta_0 = ka\left[1-\frac{\tanh(k_1a)}{k_1a}\right] \xrightarrow{ka\to 0} 0\,,\quad \tan\delta_0 \approx \sin\delta_0\,, \tag{9.7-9}$$

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0 = 4\pi a^2\left[1-\frac{\tanh(k_1a)}{k_1a}\right]^2. \tag{9.7-10}$$

讨论：将本题结果(9.7-10)和题 9.5 的式(9.5-11)作比较，$\tan(k_1a)\to\tanh(k_1a)$，若题 9.5 中 $V_0 \to -V_0$，即 $V(r)=\begin{cases}V_0, & r<a\\ 0, & r>a\end{cases}$，而 $(k_1a)^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2}(-V_0)a^2$，即 $k_1a \to -\mathrm{i}k_1a$，$\frac{\tan k_1a}{k_1a} = \frac{\tan(\mathrm{i}k_1a)}{\mathrm{i}k_1a} = \frac{\tanh k_1a}{k_1a}$，所以散射截面为

$$\sigma = 4\pi a^2\left[1-\frac{\tanh(k_1a)}{k_1a}\right]^2. \tag{9.7-11}$$

解 2 对于低能粒子入射情形，其德布罗意波长比球势阱势场作用力程大很多，散射势写成

$$V(r)=\begin{cases}V_0, & r\leqslant a\\ 0. & r>a\end{cases} \tag{9.7-12}$$

且 $V_0<0$，$ka\ll 1$，故只需要讨论 s 波即 $l=0$ 的散射问题. 低能粒子被球势阱散射的径向函数 $R_l(r)$ 满足

$$\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}r^2\frac{\mathrm{d}R_l(r)}{\mathrm{d}r}+\left[k^2-\frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R_l(r)=0\,,$$

$$rR_l(r)\xrightarrow{r\to 0}0\,,\ \text{当}\ r\to\infty\ \text{时},\ V(r)\to 0\,,$$

现作变换 $R_l(r)=\frac{u_l(r)}{r}$，有

$$\begin{cases}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}^2r}u_0(r)+k^2u_0(r)=0, & r>a\\[2ex] \dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}^2r}u_0(r)+k_1^2u_0(r)=0, & r\leqslant a\end{cases}, \tag{9.7-13}$$

式中 $k^2=\frac{2\mu E}{\hbar^2}$，$k_1^2=k^2-\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}$，解得

$$\begin{cases}u_0(r)=A_0\sin(kr+\delta_0), & r>a\\ u_0(r)=A_1\sin(k_1r+\delta_1), & r\leqslant a\end{cases}. \tag{9.7-14}$$

由 $R_0(r)=\frac{u_0(r)}{r}$ 在 $r\to 0$ 处有限，即 $u_0(r)\xrightarrow{r\to 0}0$，取 $\delta_1=0$. 在 $r=a$ 处，

$R_0(r)$ 和 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}R_0(r)$ 连续，即在 $r=a$ 处，$u_0(r)$ 和 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}u_0(r)$ 连续，得到

$$A_0\sin(ka+\delta_0)=A_1\sin(k_1a)\ ,\quad A_0k\cos(ka+\delta_0)=A_1k_1\cos(k_1a)\ ,$$

$$k\frac{\cos(ka+\delta_0)}{\sin(ka+\delta_0)}=k_1\frac{\cos(k_1a)}{\sin(k_1a)}\ ,$$

$\tan(ka+\delta_0)=\dfrac{k}{k_1}\tan(k_1a)$，相移量 $\delta_0=\arctan\left[\dfrac{k}{k_1}\tan(k_1a)\right]-ka$，总散射截面

$$\sigma=\frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0=\frac{4\pi}{k^2}\sin^2\left\{\arctan\left[\frac{k}{k_1}\tan(k_1a)\right]-ka\right\}. \tag{9.7-15}$$

在低能情形下，$E\to0$，则 $k\to0$，

$$\arctan\left[\frac{k}{k_1}\tan(k_1a)\right]-ka\to\frac{k}{k_1}\tan(k_1a)-ka\to\sin\left[\frac{k}{k_1}\tan(k_1a)-ka\right]\ll1\ ,$$

故

$$\begin{aligned}\sigma&=\frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0\approx\frac{4\pi}{k^2}\left[\frac{k}{k_1}\tan(k_1a)-ka\right]^2=\frac{4\pi}{k^2}(ka)^2\left[\frac{\tan(k_1a)}{k_1a}-1\right]^2\\&=4\pi a^2\left[1-\frac{\tan(k_1a)}{k_1a}\right]^2.\end{aligned} \tag{9.7-16}$$

式(9.7-16)与式(9.7-11)相同.

答　$\sigma=4\pi a^2\left[1-\dfrac{\tanh(k_1a)}{k_1a}\right]^2$.

9.8　一个质量为 μ、能量为 E 的低能粒子，在有心力场 $V(r)$ 中作量子力学散射，已知

$$V(r)=\frac{\hbar^2}{2\mu}u(r)\ ,\quad u(r)=-2\left(\frac{\lambda}{\cosh(\lambda r)}\right)^2\ ,$$

其中 λ 是实参数，求散射截面 $\sigma(E)$.

分析　方程

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}\phi(r)+A\phi(r)=u(r)\phi(r)\ ,$$

式中 A 为正的常数，有通解 $\phi(r)=\alpha[\lambda\tanh(\lambda r)-\mathrm{i}k]\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}+\beta[\lambda\tanh(\lambda r)+\mathrm{i}k]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}$，

$k=\sqrt{A}$，α,β 为积分常数，$\tanh(\lambda r)=\dfrac{\mathrm{e}^{\lambda r}-\mathrm{e}^{-\lambda r}}{\mathrm{e}^{\lambda r}+\mathrm{e}^{-\lambda r}}$.

解　低能粒子在有心力场中的散射，只要计算 s 分波的贡献，$u(r)$ 的图形如图 9.8-1 所示.

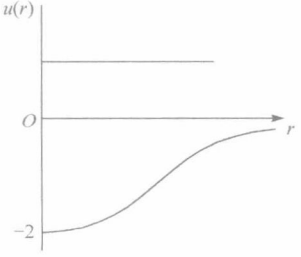

图 9.8-1　有心力场

$$\sigma=\frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0\,, \tag{9.8-1}$$

因为 $\cosh(x)=\dfrac{\mathrm{e}^{x}+\mathrm{e}^{-x}}{2}$，所以 $\cosh(0)=1$，当 $x\to\infty$，$\cosh(x)\to\infty$，所以 $u(r)\xrightarrow{r\to\infty}0$，需要求相移 δ_0，对于 s 分波，

$$\psi=\frac{\Phi(r)}{r}\mathrm{Y}_{00}\,,\quad \mathrm{Y}_{00}=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\,, \tag{9.8-2}$$

而 $\Phi(r)$ 满足方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}r^2}+V(r)\Phi=E\Phi\,, \tag{9.8-3}$$

即

$$\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}r^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}E\Phi=\frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)\Phi=u(r)\Phi\,, \tag{9.8-4}$$

其中，

$$\frac{2\mu}{\hbar^2}E=k^2=A\,,\quad k=\sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}\,. \tag{9.8-5}$$

根据分析，通解为

$$\Phi=\alpha[\lambda\tanh(\lambda r)-\mathrm{i}k]\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}+\beta[\lambda\tanh(\lambda r)+\mathrm{i}k]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}\,, \tag{9.8-6}$$

式(9.8-3)的边界条件为

$$r=0\,,\quad \Phi(0)=0\,, \tag{9.8-7}$$

由于 $\tanh(0)=0$，满足式(9.8-7)的解必须 $\alpha=\beta$，又因为

$$\tanh(\lambda r)\xrightarrow{r\to\infty}1\,, \tag{9.8-8}$$

所以

$$\Phi(r)\xrightarrow{r\to\infty}\alpha[(\lambda-\mathrm{i}k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}+(\lambda+\mathrm{i}k)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}]\,, \tag{9.8-9}$$

由于式(9.8-10)中的两项互为复共轭，相加后应为实部的 2 倍，所以

$$\Phi(r)\xrightarrow{r\to\infty}2\alpha(\lambda\cos kr+k\sin kr)\,. \tag{9.8-10}$$

设

$$\lambda=C\cos\left(\frac{\pi}{2}+\delta_0\right)\,,\quad k=C\sin\left(\frac{\pi}{2}+\delta_0\right)\,, \tag{9.8-11}$$

则有

$$\Phi(r)\xrightarrow{r\to\infty}2\alpha C\cos\left(kr-\frac{\pi}{2}-\delta_0\right), \tag{9.8-12}$$

由式(9.8-11)得 $\lambda^2+k^2=C^2$，$C=\sqrt{\lambda^2+k^2}$，代入式(9.8-12)得

$$\Phi(r)\xrightarrow{r\to\infty}2\alpha\sqrt{\lambda^2+k^2}\cos\left(kr-\frac{\pi}{2}-\delta_0\right). \tag{9.8-13}$$

由式(9.8-11)得

$$\frac{k}{\lambda}=\tan\left(\frac{\pi}{2}+\delta_0\right), \tag{9.8-14}$$

所以，$\delta_0=\arctan\dfrac{k}{\lambda}-\dfrac{\pi}{2}$，

$$\sigma=\frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0=\frac{4\pi}{k^2}\sin^2\left[\arctan\frac{k}{\lambda}-\frac{\pi}{2}\right]. \tag{9.8-15}$$

当 $E\to0$，即 $k\to0$ 时，由式(9.8-15)得 $\delta_0=-\dfrac{\pi}{2}$，

$$\sigma=\frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0=\frac{4\pi}{k^2}\frac{\hbar^2}{\hbar^2}=\frac{2\pi\hbar^2}{\mu E}. \tag{9.8-16}$$

讨论：当 $E\to0$ 时，$\sigma(E)$ 发散，这表示所取的近似有了困难，$\psi=\psi_i+\psi_s$，忽略 ψ_s 和 ψ_i 相干性的条件为 $kr\gg1$，当 $E\to0$ 时，$k\to0$，$kr\gg1$ 的条件不能满足.

答　散射截面 $\sigma(E)=\dfrac{2\pi\hbar^2}{\mu E}$.

9.9　一个非相对论的高能电子，在有心力场 $V(r)$ 中散射，取 $\hbar=1$ 的单位制，其自旋-轨道耦合能是

$$\hat{H}_{LS}=\left(\frac{1}{2\mu c}\right)^2\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}.$$

假定电子初始动量 $\boldsymbol{k}_1$ 沿 x 方向，末动量 $\boldsymbol{k}_2$ 在 x-y 平面内，而电子自旋是沿 z 方向量子化.

(1) 计算一级 Born 近似散射幅在 $|\boldsymbol{k}_2\pm>$ 与 $|\boldsymbol{k}_1\pm>$ 之间依赖空间积分的 2×2 矩阵(±代表自旋朝上和朝下).

(2) 估算必要的积分，说明对于上述的自旋量子化选择，不存在自旋翻转的散射.

分析　从入射和出射粒子的 2 种自旋出发.

解　(1) 散射幅因入射和出射粒子的自旋有 2 种取值，其矩阵形式为

$$f_{\boldsymbol{k}_2(s_3)_2,\boldsymbol{k}_1(s_3)_1}=-\frac{\mu}{2\pi}\left\langle \boldsymbol{k}_2(s_3)_2\left|V(r)+\hat{H}_{LS}\right|\boldsymbol{k}_1(s_3)_1\right\rangle ,$$

其中 $\left|\boldsymbol{k}_1(s_3)_1\right\rangle=\left|\boldsymbol{k}_1\right\rangle\left|\pm\right\rangle_1$，下标“1”指散射前；$\left|\boldsymbol{k}_2(s_3)_2\right\rangle=\left|\boldsymbol{k}_2\right\rangle\left|\pm\right\rangle_2$，下标“2”指散射后. 所以，

$$\begin{aligned}f_{\boldsymbol{k}_2(s_3)_2,\boldsymbol{k}_1(s_3)_1}=&-\frac{\mu}{2\pi}\left\langle \boldsymbol{k}_2\left|V(r)\right|\boldsymbol{k}_1\right\rangle\delta_{(s_3)_2(s_3)_1}\\&-\frac{\mu}{2}\sum_{i=1,2,3}\left\langle \boldsymbol{k}_2\left|\left(\frac{1}{2\mu c}\right)^2\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}\hat{L}_i\right|\boldsymbol{k}_1\right\rangle\left\langle (s_3)_2\left|\sigma_i\right|(s_3)_1\right\rangle ,\end{aligned}\tag{9.9-1}$$

(2) $\hat{L}_1=x_2\hat{p}_3-x_3\hat{p}_2$，$\left|\boldsymbol{k}_1\right\rangle$ 的 $\boldsymbol{k}_1$ 沿 x 方向，所以 $\hat{L}_1$ 对 $\left|\boldsymbol{k}_1\right\rangle$ 作用为零，$\left|\boldsymbol{k}_1\right\rangle$ 的波函数为 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1x}$；

$\hat{L}_2=x_3\hat{p}_1-x_1\hat{p}_3$ 中 $-x_1\hat{p}_3$ 对 $\left|\boldsymbol{k}_1\right\rangle$ 的作用为零，

$$\left\langle \boldsymbol{k}_2\left|\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}x_3\hat{p}_1\right|\boldsymbol{k}_1\right\rangle\propto\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x_3\frac{x_3}{r}\frac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}=0 ,$$

因为 $\left|\boldsymbol{k}_1\right\rangle\leftrightarrow\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1x}$ 和 x_3 无关；$\left|\boldsymbol{k}_2\right\rangle\leftrightarrow\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_2x}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}[k_{2x}x+k_{2y}y]}$ 和 x_3 无关，而 $\dfrac{1}{r}\dfrac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}$ 对 $x_3\to-x_3$ 的变换不变.

在 $\left\langle \boldsymbol{k}_2\left|\dfrac{1}{r}\dfrac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}\hat{L}_3\right|\boldsymbol{k}_1\right\rangle$ 矩阵元中，因 $\hat{L}_3=x_1\hat{p}_2-x_2\hat{p}_1$，$x_1\hat{p}_2\left|\boldsymbol{k}_1\right\rangle=x\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}y}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1x}=0$，但 $-x_2\hat{p}_1$ 的矩阵元不为零，这时 $\left\langle\pm\left|\sigma_3\right|\pm\right\rangle$ 是对角的，不引起自旋的倒转，又由于 $\left\langle\pm\left|\sigma_3\right|\pm\right\rangle$ 有 ±1 的不同，自旋“向上”或者“向下”的散射幅 f 是不同的.

答　(1) 计算一级 Born 近似散射幅在 $\left|\boldsymbol{k}_2\pm\right\rangle$ 与 $\left|\boldsymbol{k}_1\pm\right\rangle$ 之间依赖空间积分的 2×2 矩阵分别是为 $\left|\boldsymbol{k}_2(s_3)_2\right\rangle=\left|\boldsymbol{k}_2\right\rangle\left|\pm\right\rangle_2$ 和 $\left|\boldsymbol{k}_1(s_3)_1\right\rangle=\left|\boldsymbol{k}_1\right\rangle\left|\pm\right\rangle_1$；

(2) $\left\langle \boldsymbol{k}_2\left|\dfrac{1}{r}\dfrac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}x_3\hat{p}_1\right|\boldsymbol{k}_1\right\rangle\propto\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x_3\dfrac{x_3}{r}\dfrac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}=0$，说明在自旋量子化选择中，不存在自旋翻转的散射.

(O-7786.31)

物理学核心课程习题精讲系列

- 电磁学千题解（第二版）
- 电动力学题解（第三版）
- 理论力学学习指导与习题解析（理科用）（第二版）
- 近代物理习题解答
- 量子力学习题解答

……



科学出版社互联网入口
高教数理出版分社：(010)64015178　销售：(010)64031535
E-mail：mph@mail.sciencep.com
销售分类建议：物理教辅

www.sciencep.com

ISBN 978-7-03-

9 787030 6

定 价：69