量子力学习题集

（增订第三版）

D 特哈尔 选编 王正清 李光惠 李文博 译



4

高等教育出版社

科工数学院802 2 0041483 6
:45

量子力学习题集

（增订第三版）

D 特哈尔 选编
王正清 李毛[illegible] 之侨 译

高等教育出版社

内 容 简 介

本书根据D. 特哈尔 (ter Haar) 选编的《量子力学习题集》1975年增订第三版译出。本习题集包括习题和解答两部分；可与L.I.席夫、H. A. 克拉默斯、Л.Д. 朗道和 E.M. 栗弗席兹、A. 梅西亚、A. C. 达维多夫等分别所著《量子力学》教科书配合使用；可作为高等学校理工科物理专业及有关专业高年级学生或研究生学习量子力学课的参考书，也可供有关专业的教师及科研人员参考。

Problems in Quantum Mechanics
editor D ter Haar
Pion Limited 1975

量子力学习题集
(增订第三版)
D.特哈尔 选编 王正清 李兆宏 李文博 译

*

高等教育出版社出版
新华书店北京发行所发行
重庆印制一厂印刷

*

开本 850×1168 1/32 印张 17 字数 440 000
1980 年 7 月第 3 版 1990 年 7 月第 1 次印刷
印数 0 001— 9 020
ISBN 7-04-002303-9/O·785
定价 4.30 元

译者说明

D.特哈尔选编的量子力学习题集初版（1960年）的中译本于1965年与读者见面，并于1981年再次印刷，都受到读者欢迎。在本习题集的第三版中，原作者根据实际需要重新调整和增补了恰当一部分习题，并且增选了关于密度矩阵、产生算符和湮没算符、相对论性波动方程等方面的习题。这一版比前两版有较大改进，选题目的更明确，解题思路和物理概念清楚，取材更加全面系统。因此，我们将本习题集的第三版重新翻译出版，希望它能对读者有更大的裨益。本书序言部分和一、二、三章由王正清翻译；四、五、六、七章由李文博翻译；八、九、十、十一章和索引部分由李光惠翻译。

本书的出版得到了曲孝先工程师热情的赞助和高等教育出版社的大力支持，译者向他们表示衷心的感谢。

本书译文不当之处，欢迎读者批评指正。

译者

第三版序

在第三版的编写过程中，我删去一些习题，重新编排了某些习题的次序；对原有几章增加了新的习题；还增选了关于密度矩阵、产生算符和湮没算符、相对论波动方程方面的习题。除此之外，本书的宗旨和范围与前一版基本相同。为了方便读者，对较复杂的习题加了星号。

D.特哈尔

1974年9月于牛津

第二版序

本书实质上是原习题集的修订和增订版。原习题集包括戈利德曼(И.И.Гольдман)和克里夫琴科夫(В.Д. Кривченков)的教科书中的全部习题，以及选自科甘(В.И.Коган)和加利茨基(В.И.Галицкий)的类似的书中的习题。

在这一版的编写过程中，我修改了第一版的某些习题和少数解答，并使全书的符号既统一，又符合英语习惯。此外，我们还从伊罗多夫(Иродов)的习题集中增选了一些关于原子物理的问题和某些新习题，这些新习题主要取自牛津大学的考题。我在此感谢牛津大学出版社允许我将这些考题收入此习题集。

本习题集可与任何一本近代量子力学教科书配合使用，例如L.I.席夫(Schiff)、H.A.克拉默斯(Kramers)、Л.Д.朗道(Ландау)和E.M.栗弗席兹(Лифшиц)、A.梅西亚(Messiah)或A.C.达维多夫(Давыдов)所著量子力学。对于已从初等教科书中熟悉了量子力学基本概念的读者，本书可作为进一步的读物。

D.特哈尔

1963年9月于牛津

目　录

第三版序…… 1

第二版序…… 2

	习题	解答
§1 一维运动……	1	81
§2 隧道效应……	8	136
§3 对易关系；海森伯关系；波包的扩散；算符……	13	167
§4 角动量；自旋……	23	237
§5 有心力场……	34	261
§6 粒子在磁场中的运动……	37	284
§7 原子……	42	302
§8 分子……	53	397
§9 散射……	58	435
§10产生算符和湮没算符；密度矩阵……	67	494
§11相对论波动方程……	75	509
索引……	534	

习　题

§1. 一维运动

1. 设粒子的势能为

$V=\infty$，当$x<0$及$x>a$时；

$V=0$，当$0<x<a$时。

试求在这“势阱”中粒子的能级和归一化波函数。

2. 试证明对于“势阱”中的粒子（见上题），下列关系式成立：

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

并证明，当n大时，上面的结果与相应的经典结果一致。

3. 当粒子在“势阱”中处于第n个能态时，试求出其动量的几率分布函数。

4. 设有一粒子处在无限深的矩形势阱中，它所处的态由下面的波函数描写：

$$\psi(x)=Ax(a-x),$$

其中a为阱宽，A为常数。

求粒子取不同能量的几率分布以及能量的平均值和方均根偏差。

5. 在宽为a的势阱中的粒子处于基态。在$t=0$时，$x=a$处的阱壁突然移动到$x=2a$，试就下列两种情况，计算$t>0$时的几率：

（a）粒子的能量与$t=0$之前相同；

（b）粒子的能量小于$t=0$之前的。

6.* 设有一粒子，被限制在具有无限高壁的一维矩形势阱内，试计算这粒子作用在阱壁上的平均力。

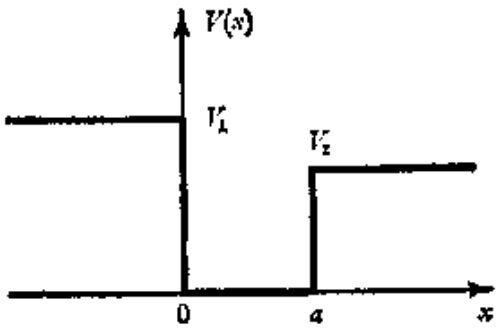


图 1

7. 试求在不对称的势阱中（见图1）粒子的能级和波函数，并讨论$V_1=V_2$的情况。

8. 振子的哈密顿量为$\hat{H}=\hat{p}^2/2\mu+\mu\omega^2\hat{x}^2/2$，其中$\hat{p}$和$\hat{x}$满足对易关系$\hat{p}\hat{x}-\hat{x}\hat{p}=-i\hbar$。在下面的计算中，为了避免写$\mu$，$\omega$和$\hbar$，我们引进新的变量$\hat{P}$和$\hat{Q}$，①

$$\hat{P}=\hat{p}/\sqrt{(\mu\hbar\omega)},\quad \hat{Q}=\sqrt{(\mu\omega/\hbar)}\,\hat{x}$$

$$(\hat{P}\hat{Q}-\hat{Q}\hat{P}=-i)$$

并且将能量E以$\hbar\omega$为单位表出（$E=\epsilon\hbar\omega$）。用新的变量表示时，振子的薛定谔方程将是

$$\hat{H}'\psi=\frac{1}{2}(\hat{P}^2+\hat{Q}^2)\psi=\epsilon\psi$$

（a） 利用对易关系$\hat{P}\hat{Q}-\hat{Q}\hat{P}=-i$，证明

$$\frac{1}{2}(\hat{P}^2+\hat{Q}^2)(\hat{Q}\pm iP)^n\psi=(\epsilon\mp n)(\hat{Q}\pm i\hat{P})^n\psi.$$

（b） 求出振子的归一化波函数和能级。

（c） 确定算符$a=(1/\sqrt{2})(\hat{Q}+i\hat{P})$和它的厄密共轭算符$a^+=(1/\sqrt{2})(\hat{Q}-i\hat{P})$的对易关系。利用算符$a$，将第$n$个激发态的波函数用基态波函数表示出来。

（d） 确定算符$\hat{P}$和$\hat{Q}$在能量表象中的矩阵元。

提示：$\hat{P}^2+\hat{Q}^2-1=(\hat{P}+i\hat{Q})(\hat{P}-i\hat{Q})$。

9. 利用上题结果，用矩阵直接相乘的办法证明，对于处在第n个定态的振子，有

① 算符都冠以尖帽号^。

$$\overline{(\Delta x)^2}=\overline{x^2}=(\hbar/\mu\omega)\left(n+\frac{1}{2}\right);$$

$$\overline{(\Delta p)^2}=\overline{p^2}=\mu\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right).$$

对于任何定态，证明x的方均根值与同样能量下经典振子的x的方均根值相同。

10．有一粒子在势场$V(x)=\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2$中运动。若粒子处在基态，试求出发现它在经典界限之外的几率。

11．设一粒子在如下形式的势场中运动：

$V(x)=\infty(x<0)$；$V(x)=\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2(x>0)$。求该粒子的能级。

12．试写出“p表象”中振子的薛定谔方程，并求出其动量的几率分布函数。

13．求在势场$V(x)=V_0(a/x-x/a)^2$ $(x>0)$（见图2）中粒子的波函数和能级，并证明其能谱与振子的能谱相同。

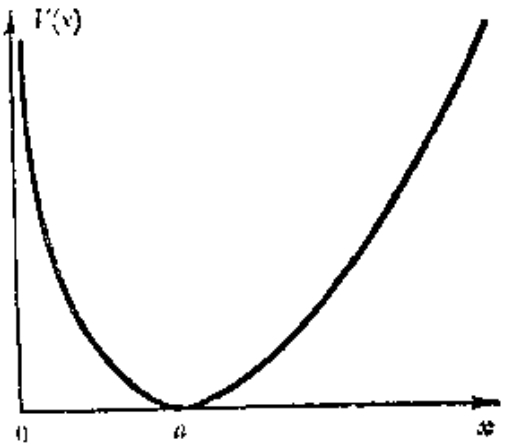


图 2

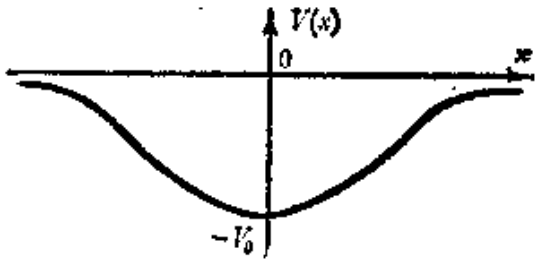


图 3

14*．试确定在势场$V=-V_0/\cosh^2(x/a)$（见图3）中粒子的能级。

15*．试求出在势场$V=V_0\cot^2(\pi x/a)$ $(0<x<a)$（见图4）

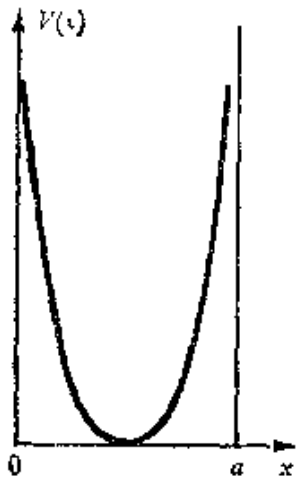


图 4

中粒子的能级和波函数，并求出基态波函数的归一化常数。

考虑V_0值很大和很小这两个极限情况。

16. 试确定在如下势场中粒子的能级

$$V(x)=D(1-e^{-ax})^2$$

17 一质量为μ的电子在一维势场

$$V(x)=-(\hbar^2P/\mu)\delta(x^2-a^2)$$

中运动，其中P是一个正的无量纲常数，$\delta(x)$是狄拉克δ函数，a为常数，表示长度。将势场作为P的函数讨论其束缚态。

18*. 一维“氢原子”是指这样的原子，其中一个电子被限制在x轴上。电子所受的力反比于它到原点距离的平方。求这个体系的能量本征值和本征函数。

19. 试求在均匀场$V(x)=-Fx$中带电粒子的波函数。

20*. 一质量为μ的粒子，在均匀重力场g中运动，运动区域被限制在一个完全反射平面之上，求粒子的定态波函数和能级。（我们可以取一个在金属板上上下跳动的重刚球，作为这一体系的经典类比。注意，本题的全部计算和结果，对于一个带电荷e的粒子在均匀电场$\mathscr{E}$中运动、且存在一反射平面的情况来说，显然也是正确的，只要在所有的方程中将g换为$(e/m)\mathscr{E}$即可。）试过渡到经典力学的极限。

21*. 利用半经典近似导出在势场$V(x)$中运动的粒子的波函数的表达式。给出这个近似适用的条件，并确定量子化条件。

22. 利用半经典近似，导出在给定势场中运动的粒子的分立能级数目的表达式。

23. 在半经典近似情况下，求在下列势场中粒子的能谱：

（a） $V=\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2$（谐子）；

（b） $V=V_0\cot^2(\pi x/a)$ $(0<x<a)$.

24. 一质量为μ的粒子在势场中运动，这势场在$x=0$处为$-V_0$，随x线性变化到$x=\pm a$，而在$|x|\geqslant a$时为零（见图5）。运用半经典近似确定束缚态能级，并确定分立能级的总数。

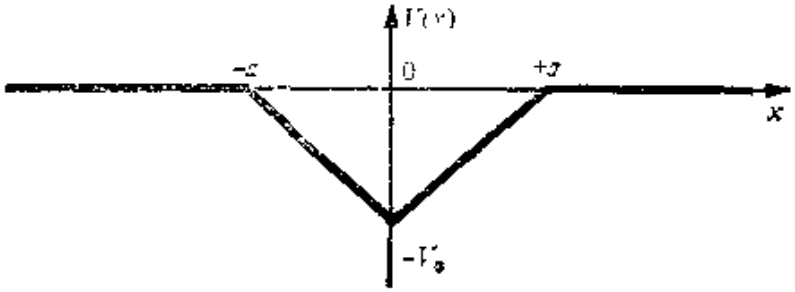


图 5

25. 在半经典近似下，确定定态中动能的平均值。

26. 利用上题结果，在半经典近似下，求出处于下列势场中粒子的平均动能：

（a） $V=\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2$;

（b） $V=V_0\cot^2(\pi x/a)$ $(0<x<a)$ （见23题）

27. 利用半经典近似和维里定理，确定在势场$V(x)=ax^n$中粒子的能谱形式。

28. 设一粒子在均匀重力场中运动，运动区域被限制在一个完全反射平面之上，求粒子能级的半经典表达式。

29. 一个粒子在一维势场中，在两个转折点$x=a$和$x=b$之间振动，前一个转折点是由于竖直的势阱壁，而后者是dV/dx有限的一般形式的阱壁。利用WKB方法求在这势场中粒子的定态的量子化条件。

30*. 在半经典近似下，试对给定的能谱E_n求出势能$V(x)$的形式。可假设$V(x)$为偶函数$V(x)=V(-x)$，且当$x>0$时，$V(x)$单调上升。

31*. 在动量表象中求出能定态方程的半经典解。

试证明：从通常的半经典坐标波函数出发，由“x表象”变换到“p表象”，能得到同样的半经典解。

32. 求出转动贯量为I的平面转子的定态波函数和能级。

所谓转子，是指在平面上（或空间中）转动的两个刚性连接的粒子所组成的系统。转子的转动惯量$I=\mu a^2$，式中μ是两个粒子的约化质量，a是它们之间的距离。

33. 设在$t=0$时刻，平面转子的波函数给定为$\psi(\varphi, 0)=A\sin^2\varphi$，其中$A$是归一化常数，试求$t$时刻的波函数$\psi(\varphi,t)$？

34. 一个质量为μ的小球，穿在一根细金属丝上，此金属丝做成半径为a的刚性圆环。试求当此体系处于定态时，金属丝中张力的表达式。假定小球加在金属丝上之前，金属丝不受应力。

35. 设一粒子在周期势场$V(x)=V_0\cos bx$中运动，试写出它在“p表象”中的薛定谔方程。

36. 设一粒子在周期势场$V(x)=V(x+b)$中运动，试写出它在“p表象”中的薛定谔方程。

37*. 设一粒子在图6所示的周期势场中运动，试求出它的允许能带。研究$V_0\to\infty$，$b\to 0$而$V_0b=$常数的极限情况。

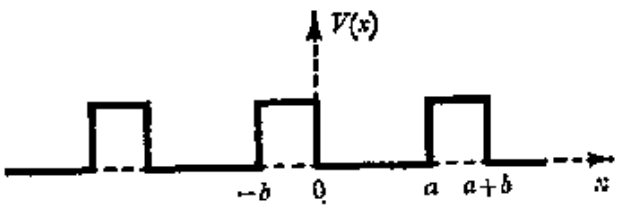


图 6

38*. 金属中电子能级的一个简单模型是采用如下一维势场：

$$V(x)=\hbar^2 p/2\mu a\sum_{n=-\infty}^{+\infty}\delta(x+na)$$

其中μ是电子的质量，a是晶格常数，p是一个正的无量纲常数，而$\delta(x)$则是狄拉克δ函数。试求在能带上界的有效质量的表达

式。

39* 一粒子在周期势场$V(x)$中运动：

$$V(x+a)=V(x)$$

利用适当的半经典近似，求出确定容许能带的超越方程，并讨论之。

40. 设粒子被复势场$V(x)(1+i\xi)$散射，证明几率流密度

$$j=(\hbar/2\mu i)[\psi^*(\partial\psi/\partial x)-\psi(\partial\psi^*/\partial x)]$$

和几率密度$\rho=\psi^*\psi$满足“连续性”方程：

$$\partial j/\partial x+\partial\rho/\partial t=2V(x)\xi\rho/\hbar.$$

41. 利用变分法证明，任何纯吸引的一维势场至少有一个束缚态。

42. 一个质量为μ的粒子在一维势场$\lambda V(x)$中运动；$V(x)$满足条件

$$V(x)=0,\ x<0;\ V(x)=0,\ x>a;\ \lambda\int_0^a V(x)\mathrm{d}x<0.$$

试证：当λ充分小时，存在一个束缚态，其能量E近似地为

$$E=-(\mu\lambda^2/2\hbar^2)\left[\int_0^a V(x)\mathrm{d}x\right]^2.$$

§2.隧道效应

1. 在研究金属电子发射时，必须考虑以下事实：具有足够能量能从金属中跑出来的电子，可能在金属表面被反射。

考虑一个势场为V的一维模型。当$x<0$时（在金属内），V等于$-V_0$；当$x>0$时（在金属外），V等于0（见图7）。试求能量$E>0$的电子在金属表面的反射系数。

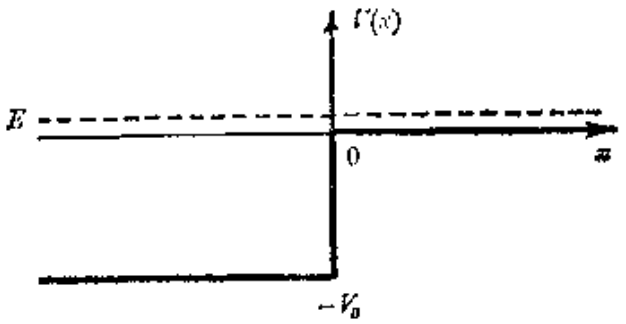


图 7

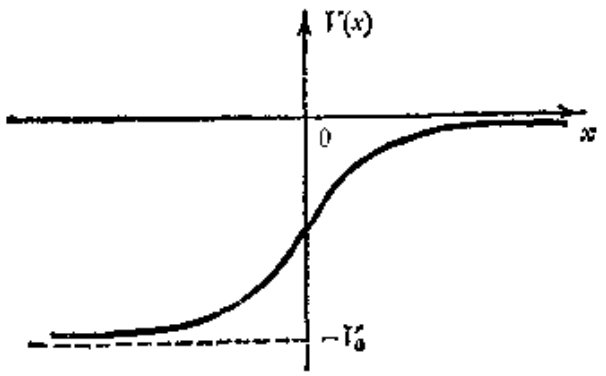


图 8

2*. 在上题中曾假设势场在金属表面是不连续变化的。在实际金属中，在大小约为金属中原子间距的范围内，势场的变化是连续的。设金属表面附近的势可近似地表为

$$V=-V_0/(e^{x/a}+1)$$（见图8）

试求能量$E>0$的电子的反射系数。

3. 试求粒子穿过矩形势垒的透射系数（见图9）。

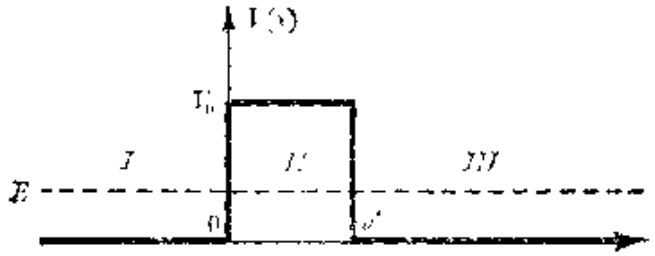


图 9

4 在能量$E>V_0$的情况下，求矩形势垒对粒子的反射系数（在势垒之上的反射）。

5. 设一个粒子沿x轴运动，试求该粒子在原点处穿过δ函数势垒的透射几率。

6. 近似地求出图10所示的对称势阱中粒子的能级和波函数。设$E\ll V_0$，并且势垒穿透性很小（$2\mu V_0 b^2/\hbar^2\gg 1$）。

7*. 试求粒子穿过三角形势垒的透射系数（见图11）。考虑穿透性很小和很大这两种极限情况。

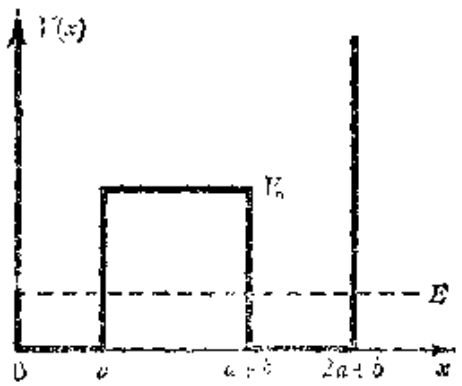


图 10

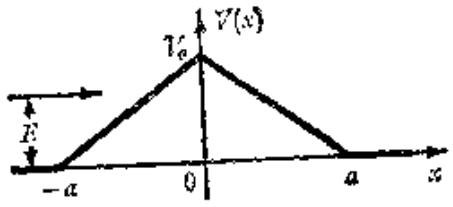


图 11

8* 试计算粒子穿过势垒$V(x)=V_0/\cosh^2(x/a)$（见图12）的透射系数。粒子的能量$E<V_0$。

9. 在半经典近似下，试计算如下形式的抛物形势垒（见图13）的透射系数。

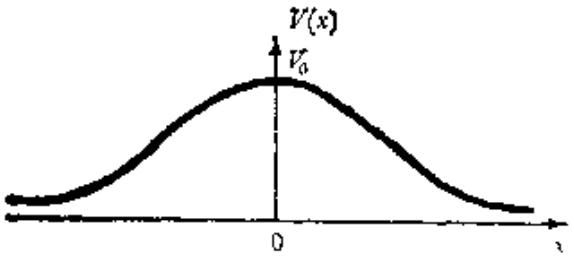


图 12

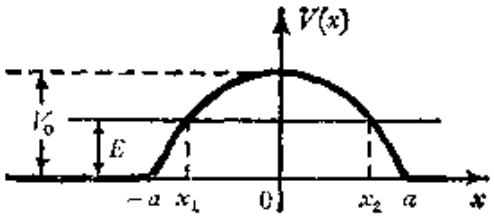


图 13

$$V(x)=\begin{cases}V_0(1-x^2/a^2), & \text{当}-a\leqslant x\leqslant a\\ 0, & \text{当}|x|\geqslant a\end{cases}$$

试给出所得结果的适用条件.

10. 在半经典近似下，计算电子在强度为 F 的强电场作用下，穿过金属表面的透射系数（见图14），并求出这个计算的适用

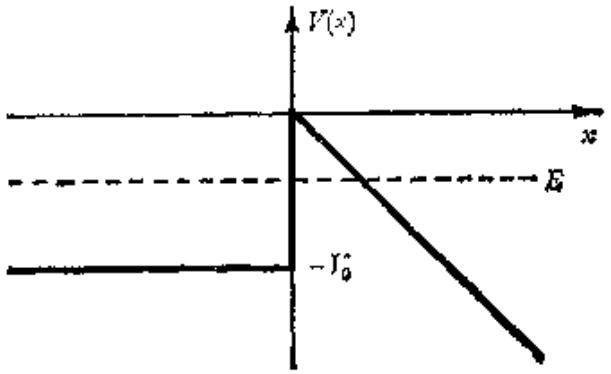


图 14

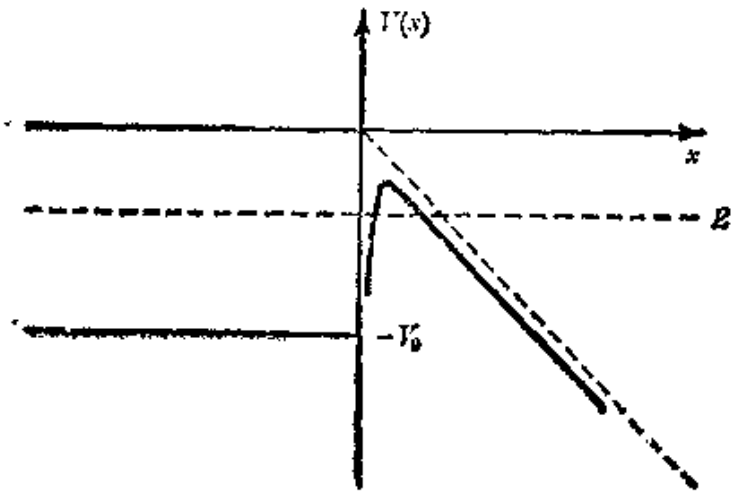


图 15

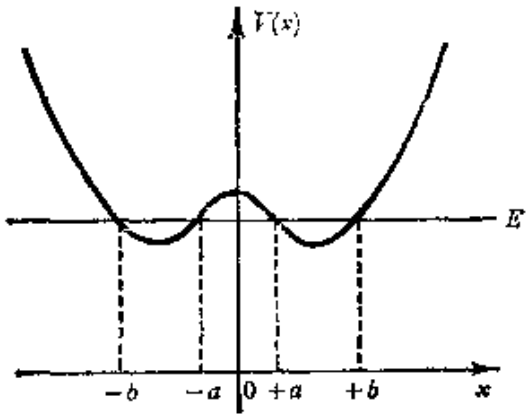


图 16

范围。

11*. 在金属表面附近，势的变化实际上是连续的。例如，电象势$V_{电像}=-e/4x$，在远离金属表面的地方还起作用。计及电象力，试计算电子在电场作用下穿过金属表面的透射系数D（图15）。

12*. 一对称势场$V(x)$是由被一势垒分开的两个势阱组成的（见图16）。假定可以利用半经典近似，试求粒子在势场$V(x)$中的能级。把所得能谱与单个势阱中的能谱加以比较。

13. 假定$t=0$时在两个对称势垒之间存在一个不可穿透的隔板（见上题），并设在左边的势阱中有一个处于定态的粒子。试问，移去隔板后，经过多长时间τ，该粒子将出现在右边的势阱中。

14*. 势场$V(x)$由N个相同的势阱组成，这些势阱被相同的势垒隔开（见图17）。假设可以用半经典的方法，试确定在这势场中的能级。

试将所得结果和单个势阱中的能谱加以比较。

15*. 假设可以用半经典的方法，试求出图18所示的对称场中粒子的准定态能级。并求出能量$E<V_0$的粒子的透射系数$D(E)$，这里V_0是势$V(x)$的极大值。

16. (i) 试普遍证明：对于任何势垒，关系式$R+D=1$

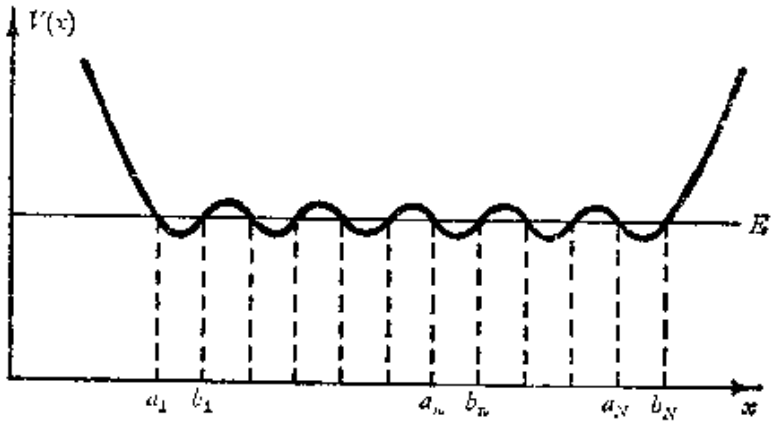


图 17

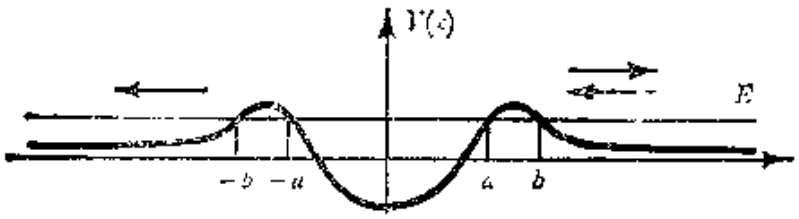


图 18

动地满足。式中R是反射系数，D是透射系数。

（ii） 一个作一维运动的粒子，碰到一个以$x=0$为中心、具有有限扩展范围的对称势垒。对于每一个能量 $E=\hbar^2k^2/2\mu$，薛定谔方程都有一个偶的和一个奇的解，在势垒右边这些解分别为$A\cos(kx+\varphi)$ 和$B\sin(kx+\varphi')$。试证明，在此能量下，反射系数和透射系数分别为$\sin^2 2(\varphi-\varphi')$和$\cos^2 2(\varphi-\varphi')$。

17. 一粒子在势场$V(x)$中运动，当$|x|>a$时，$V(x)=0$；而当$|x|<a$时，$V(x)$有限。验证波函数$\psi(x)$满足积分方程：

$$\psi(x)=e^{ikx}+(\mu/ik\hbar^2)\int_{-a}^{a}e^{ik|x-y|}V(y)\psi(y)dy.$$

如果质量为μ、动量为$p=\hbar k$的粒子束入射在这势场$V(x)$上，取V的最低次，试求反射系数的表达式。

§3. 对易关系；海森伯关系；波包的扩散；算符

1. 设$\hat{A}$、$\hat{B}$、和$\hat{C}$是三个算符，试用对易子$[\hat{A}, \hat{C}]_-$和$[\hat{B}, \hat{C}]_-$来表示乘积$\hat{A}\hat{B}$与$\hat{C}$的对易子。

2. 试证明对于对易子的代数运算，分配律成立，即和的对易子等于对易子之和：

$$[\sum_i \hat{A}_i \sum_k \hat{B}_k]_- = \sum_{i,k} [\hat{A}_i, B_k]_-$$

3. 证明：若$f(x)$是坐标x的函数，$g(p)$是动量p的函数，则有：

$$[\hat{p}, f]_- = -i\hbar \mathrm{d}f/\mathrm{d}x,$$

和 $$[x, g]_- = i\hbar \mathrm{d}g/\mathrm{d}p.$$

4. 证明下列关系成立：

$$e^{\hat{L}} a e^{-\hat{L}} = a + [\hat{L}, a]_- + \frac{1}{2!}[\hat{L}, [\hat{L}, a]_-]_-$$

$$+ \frac{1}{3!}[\hat{L}, [\hat{L}, [\hat{L}, a]_-]_-]_- + \cdots.$$

5. 证明：如果$[\hat{A}, \hat{B}] = K$，其中K是一个c数，而且假定λ也是一个c数，则有

$$\exp[\lambda(\hat{A}+\hat{B})]_- = \exp(\lambda\hat{A})\exp(\lambda\hat{B})\exp\left(-\frac{1}{2}\lambda^2 K\right)$$

6. 证明：

$$[\hat{A}, e^{\alpha\hat{B}}]_- = e^{\alpha\hat{B}} \int_0^\alpha e^{\lambda\hat{B}} [\hat{A}, \hat{B}]_- e^{-\lambda\hat{B}} \mathrm{d}\lambda.$$

这个关系式称为久保恒等式。

7. 若两个厄米算符$\hat{A}$和$\hat{B}$满足对易关系$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = i\hat{C}$，试证明下列关系式成立：

$$\sqrt{[(\Delta\hat{A})^2 \quad (\Delta\hat{B})^2]} \geq |\bar{C}|/2.$$

8. 设$\hat{q}$和$\hat{p}$满足对易关系 $\hat{q}\hat{p}-\hat{p}\hat{q}=i\hbar$，试求出算符 $\hat{q}$ 和 $F(\hat{p})$的测不准关系。

提示：将$F(\hat{p})$表成泰勒级数形式。

9. 利用海森伯关系估计谐振子基态的能量。

10. 在相对论和非相对论两种情况下，试估计原子序数为Z的原子的K壳层上一个电子的能量。

11. 利用海森伯关系，估计核电荷为Z的双电子原子的基态能量。

12. 自由电子所产生的磁场，一部分来自于它的运动，而另一部分来自它的固有磁矩。

从电动力学知道，运动电荷产生的磁场，其强度的数量级为：

$$H_1\sim ev/cr^2$$

而由磁偶极矩μ所产生的磁场强度的数量级为

$$H_2\sim\mu/r^3。$$

为了能从测量自由电子所产生的磁场强度来确定它的磁矩μ，下面两个条件必须满足：

$$H_2\gg H_1 \qquad (1)$$

和

$$\Delta r\ll r。 \qquad (2)$$

后一个条件的意义是，电子必须局限于Δr区域内，而Δr比从这区域到测量磁场之点的距离要小得多。

问这两个条件是否能同时满足？

提示：考虑海森伯关系和电子磁矩的值$\mu=e\hbar/2mc$。

13. 考虑一维对称势阱中的粒子，众所周知，在这种情况下，至少总有一个能级（参见§1.41题）。

对子给定的势阱深度V_0，若减少阱宽a使其满足不等式

$$a^2\ll\hbar^2/\mu V_0,$$

那么，初看起来，束缚在势阱中的粒子的空间位置将越来越精

确（$\Delta x \sim a$），然而，在任何情况下，动量的不确定度 Δp 却限制在数量级 $\sqrt{(\overline{\mu V_0})}$ 之内，所以下列不等式将成立

$$\Delta p \Delta x \leqslant \sqrt{(\overline{\mu V_0})} \cdot a \ll \hbar$$

这与海森伯关系相矛盾。

试指出以上论证中的错误，并算出粒子的坐标不确定度和动量的不确定度的乘积。

14. 在威耳孙云室中，粒子的轨迹是线度约为 1μ 的一串小液滴。试问：对于能量为 1keV 的电子，能否观测到它对经典运动的偏离？

15. 设在第一玻尔轨道中电子的角坐标完全不确定，试求电子角动量的相对不确定度之值。

16. 对于极角坐标 $-\pi < \varphi \leqslant \pi$，考虑算符 $\hat{M}_z = -i\hbar \partial/\partial\varphi$ 和 $\hat{\varphi}$，将海森伯关系应用于 $\hat{M}_z$ 和 $\hat{\varphi}$ 并加以讨论（参考 § 3.7题中海森伯关系的推导）。

17. 在 $t=0$ 时，自由粒子的波函数为

$$\psi(x, 0) = \varphi(x) \exp(i p_0 x/\hbar)$$

函数 $\varphi(x)$ 是实的，且仅在间隔 $-\delta < x < +\delta$ 内才显著地不等于零。试确定 x 值在什么区域内，t 时刻的波函数将不为零。

18. 对于下列三种情形，给出了 $t=0$ 时的波函数。试求这些波函数的变化（波包的扩散）：

（a） 自由粒子

$$\psi(\boldsymbol{r}, 0) = (\pi\delta^2)^{-3/4} \exp\left[\frac{i(\boldsymbol{p}_0 \cdot \boldsymbol{r})}{\hbar} - \frac{r^2}{2\delta^2}\right],$$

(b)* 在均匀场中运动的粒子

$$\psi(\boldsymbol{r}, 0) = (\pi\delta^2)^{-3/4} \exp\left[\frac{i(\boldsymbol{p}_0 \cdot \boldsymbol{r})}{\hbar} - \frac{r^2}{2\delta^2}\right];$$

（c） 在势场 $V(x) = \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2$ 中运动的粒子

$$\psi(x,0)=c\exp\left[\frac{ip_0x}{\hbar}-\frac{\alpha^2(x-x_0)^2}{2}\right],$$

$$\alpha=(\mu\omega/\hbar)^{1/2}.$$

19. 试证明：若引入新的变数$x_1=x-\xi(t)$[这里$\xi(t)$满足经典方程$\mu\ddot{\xi}=f(t)-\mu\omega^2\xi$]，则处理在外力$f(t)$作用下振子运动的问题，就可简化为处理自由振子运动的问题。

20*. 试求本征频率随时间改变的振子的格林函数，并用频率变化的振子的经典运动方程的解来表示它。

21*. 利用上题求得的格林函数，求在势场$V(x)=\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2$（$\omega$=常数）中运动的粒子的几率密度随时间的变化。设粒子的波函数在$t=0$时为

$$\psi(x,0)=c\exp\left[\frac{-\alpha^2(x-x_0)^2}{2}+\frac{ip_0x}{\hbar}\right].$$

22*. 求一振子的格林函数。设该振子受扰动力$f(t)$的作用，且其本征频率随时间变化。

23*. 在$t=0$时，振子处于第n个能量本征态，求在扰动力$f(t)$的作用下，振子跃迁到第m个本征态的几率，并求出t时刻振子能量的平均值和方均根偏差。

24* 设一振子处于基态，其平衡点x_0在$t=0$时开始移动，随时间移动的规律为$x_0=x_0(t)$，在$t=T$时，平衡点又固定。

试用格林函数（见§3.20题），求出在$t>0$的任何时刻体系的波函数，并求出所考虑的过程使振子激发到第n个能级的几率。

试讨论快过程和慢过程（$\omega T\ll1$和$\omega T\gg1$，其中ω是振子的频率）这两种极限情况。

25*. 若粒子的运动取决于哈密顿量

$$\hat{H}=e^{-\gamma t}(\hat{p}^2/2\mu)-e^{\gamma t}F(t)x,$$

其中γ是一正常数，试讨论粒子的运动情况。

设$t\to\infty$时，$F(t)=0$；且$t=0$时的波函数为

$\psi_0=A\exp\left(\mathrm{i}k_0x-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right)$，$A$=常数。求在这种情况下体系的波函数。

26、 因为薛定谔方程是关于时间的一阶微分方程，所以$\psi(t)$由$\psi(0)$的值唯一地确定。将这个关系写成如下形式：

$$\psi(t)=\hat{S}(t)\psi(0)$$

式中$\hat{S}(t)$是某个算符。

(a) 证明$\hat{S}(t)$满足方程

$$\mathrm{i}\hbar\dot{\hat{S}}(t)=\hat{H}\hat{S}(t),$$

并且是一个幺正算符，即$\hat{S}^+=\hat{S}^{-1}$。

(b) 证明在$\hat{H}$与时间无关的情况下，$\hat{S}(t)$的形式为

$$\hat{S}(t)=\exp(-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar)$$

27、 在时刻t算符$\hat{L}$的平均值由下式给出：

$$\check{L}(t)=\int\psi^*(t)\hat{L}\psi(t)\mathrm{d}\tau.$$

(a) 证明与时间有关的算符①$\hat{\mathscr{L}}=\hat{S}^{-1}(t)\ \hat{L}S(t)$满足方程

$$\int\psi^*(0)\hat{\mathscr{L}}\psi(0)\mathrm{d}\tau=\check{L}(t),$$

其中$S(t)$由方程$\hat{S}(t)\psi(0)=\psi(t)$决定。

(b) 证明下面的算符方程：

$$\mathrm{i}\hbar\dot{\hat{\mathscr{L}}}=\hat{\mathscr{L}}\hat{\mathscr{H}}-\hat{\mathscr{H}}\hat{\mathscr{L}},$$

其中

$$\hat{\mathscr{H}}=\hat{S}^{-1}\hat{H}\hat{S}$$

(c) 若算符$\hat{L}$和$\hat{M}$满足对易关系

$$\hat{L}\hat{M}-\hat{M}\hat{L}=\mathrm{i}\hat{N},$$

证明相应的与时间有关的算符满足方程：

$$\hat{\mathscr{L}}\hat{\mathscr{M}}-\hat{\mathscr{M}}\hat{\mathscr{L}}=\mathrm{i}\hat{\mathscr{N}}.$$

28 推导两个算符的乘积对时间微商的法则。

29、 求海森伯表象中自由粒子为坐标算符。

①算符$\hat{\mathscr{L}}$称为海森伯表象或海森伯绘景(picture)中的算符，而$\hat{L}$称为薛定谔绘景中的算符，见关于相互作用绘景的§3.31题。

30. 试利用解坐标和动量算符的运动方程的方法，求出海森伯表象中线性谐振子的坐标和动量算符。

31. 在海森伯绘景中，算符与时间有关，且满足运动方程（见§3.27题）

$$i\hbar\dot{\hat{\mathscr{Q}}}=[\hat{\mathscr{Q}},\ \hat{\mathscr{P}}]_-$$

而波函数与时间无关。另一方面，在薛定谔绘景中，算符（显含时间的除外）是与时间无关的，而波函数满足薛定谔方程

$$i\hbar\partial\psi/\partial t=\hat{H}\psi$$

海森伯绘景中的算符和波函数（用下标H标记）和薛定谔绘景的算符和波函数（用下标S标记）之间的关系由下列公式表示：

$$\hat{\mathscr{Q}}_H=\hat{S}^{-1}(t)\hat{L}_S\hat{S}(t),\ \psi_S=\hat{S}(t)\psi_H,$$

$$\hat{S}=\exp(-i\hat{H}t/\hbar).$$

引入中间绘景常常是方便的，这中间绘景称为相互作用绘景。当哈密顿量的形式为

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}_1$$

时，我们可以按如下方式

$$\hat{L}_{int}=\hat{S}_0^{-1}(t)\hat{L}_S\hat{S}_0(t),\ \psi_S=\hat{S}_0(t)\psi_{int}$$

$$\hat{S}_0(t)=\exp(-i\hat{H}_0t/\hbar),$$

在相互作用绘景（用下标 int 标记）中引进算符和波函数。试求关于$\hat{L}_{int}$和ψ_{int}的运动方程。

32. 如果q和p是粒子的广义坐标和广义动量，求证在一维情况下，有

$$\bar{\dot{q}}=\frac{\partial\bar{H}}{\partial p},\quad \bar{\dot{p}}=-\frac{\partial\bar{H}}{\partial q}$$

其中H是体系的哈密顿量，上面的横线表示量子力学的平均值。这是厄任费斯脱定理的一个特例。这个定理说，如果用量子力学的平均值取代物理量，则经典运动方程仍成立。

33. 试证明，在分立谱的定态中，不显含时间的物理量对时间的导数的平均值为零。

34. 证明量子力学中的维里定理。

35. 在波函数的表达式

$$\psi(x)=\varphi(x)\exp(ip_0x/\hbar)$$

中，若$\varphi(x)$是实函数，问量p_0的物理意义是什么？

36. 证明在具有分立的能量本征值的定态中，动量的平均值等于零。

37. 试对下列两种情况，确定坐标算符x（在坐标表象中）对时间的依赖关系：(a)自由粒子，(b)振子。

38. 利用上题结果，确定在自由粒子的情况下，坐标的均方差随时间的变化。

39. 在$t=0$时，粒子的波函数为$\psi(x)=\varphi(x)\exp(ip_0x/\hbar)$，其中$\varphi(x)$是实函数，并且是归一化的。试对§3.37题中(a)和(b)两种情况，求出在t时刻的均方差$\overline{(\Delta x)^2}$的值。证明在振子的情况下，若$\varphi(x)=c\exp(-\mu\omega x^2/\hbar)$，则$\overline{(\Delta x)_t^2}=(\Delta x)^2_{t=0}$，即均方差不随时间增加（见§3.18题c）。

40. 试求出谐振子的湮没算符和产生算符对时间的依赖关系（§1.8题中的a和a^+）。

41. 设有一振子，在$t=-\infty$时处于基态。如果它受的作用力为$f(t)$，这里$f(t)$是时间t的任意偶函数[当$t\to\pm\infty$时，$f(t)=0$]。试求$t=+\infty$时振子处于第n个激发态的几率。

对以下两种情况计算上面所得的表达式：

(a) $f(t)=f_0\exp(-t^2/\tau^2)$,

(b) $f(t)=f_0/[(t/\tau)^2+1]$.

42. 试在"p表象"中表出算符$\left(\frac{\hat{1}}{r}\right)$，在"$r$表象"中表出算符$\left(\frac{\hat{1}}{p}\right)$.

43*. 试在"x表象"中表出算符$\left(\frac{\hat{1}}{p_x}\right)$，在"$p_x$表象"中表

出算符$\left(\frac{\hat{1}}{x}\right)$.

44. 设粒子处于无限深一维矩形势阱中，求在能量表象中粒子的坐标和动量的矩阵.

45. 证明厄密算符平方的平均值是正的.

46. 复共轭算符是不是：(1) 线性算符，(2) 厄密算符，(3)它自身的复共轭算符?

47. 假如$\hat{T}$是一个平移算符，它由方程

$$\hat{T}f(x)=f(x+a)$$

来定义，其中$f(x)$是任意函数，试用动量算符p表出$\hat{T}$.

48. 设λ是一个小量，求算符$(\hat{A}-\lambda\hat{B})^{-1}$按$\lambda$的幂的展开式.

49. 设在一量子力学体系的一个由给定的波函数ψ_A所描写的态中，力学量A具有完全确定的值.

问在算符$\hat{A}$和$\hat{B}$(1) 不对易，(2)对易这两种情况下，在上述态中力学量B是否也具有完全确定的值?

50. 试证明：若经某种坐标变换，体系的哈密顿量不变，则此变换的算符与哈密顿算符对易.

51. 当N个粒子的体系在下列外场中运动时，试指出哪些力学量或者它们的哪些组合是守恒的.(考虑能量、总角动量及其分量、动量的分量、宇称)：

(1) 自由运动；

(2) 无限、均匀带电柱体的场；

(3) 无限、均匀带电平面的场；

(4) 均匀带电球体的场；

(5) 无限、均匀带电半平面的场；

(6) 两个点电荷的场；

(7) 均匀交变的电场；

(8) 带有交变电荷的直导线的场；

(9) 均匀带电三轴椭球的场；

(10) 无限、均匀带电螺线的场；

(11) 无限、均匀带电棱柱的场；

(12) 均匀带电圆锥体的场；

(13) 带电空心圆柱体的场；

并弄清相应算符的对易性。

52. 证明在伽利略变换下，非相对论薛定谔方程的不变性。

53. 设$t=0$时，函数ψ描写物理量A具有完全确定值的态，试证明$t>0$时，它是算符$\hat{A}(-t)$对应于同一本征值的本征函数。$\hat{A}(\tau)$是在海森伯表象中、在时刻τ物理量A所对应的算符。

54. 有一个做一维有限运动的体系，其哈密顿量$\hat{H}$显含时间。若已知任何时刻t的“瞬时”哈密顿量的本征值$E_n(t)$，以及相应的完备的正交归一本征函数组$\psi_n(t)$。[这里“瞬时”一词是在“给定的时刻”意义下使用的，它与§7.73和§7.74两题中的含意不同，在那里它与“突然”是同义的。为简单起见，在此略去了函数ψ对坐标(q)的依赖关系。]

在以函数组$\psi_n(t)$为基的表象中，写出体系的波函数。

55. 设上题中体系的哈密顿量是一个随时间t缓慢变化的函数。假设$t=0$时，体系处于第m个量子态。试在浸渐微扰论的一级近似下，求$t>0$时系统的波函数，并讨论所得结果的适用条件。

56. 设有一处于基态的线性振子，在$t=0$时，它的平衡点开始缓慢地移动，$t=T$时又变为静止。试用浸渐近似求振子的激发几率，并确定这种近似的适用条件（与§3.24题比较）。

57. 设一粒子束缚在宽为a的无限深矩形势阱中。在$t=0$时，势阱的一个壁按任意给定的时间依赖关系开始移动。

试将此问题归结为哈密顿量含时间的波动方程，并讨论壁运动的一种特殊情况，在这种情况下，该方程中的变量可以分离。

58*. 在宽为a的无限深矩形势阱中，有一个处于第n个定态的粒子。在$t=0$时，一个阱壁开始按给定的时间规律缓慢地移

动。试用浸渐近似，求$t>0$时发现粒子在第m个定态的几率（$m\neq n$）。

59. 若粒子的动能是100eV，试计算下列各种粒子的德布罗意波长。

（i）一个电子；（ii）氢原子；（iii）铀原子。

60. 求电子和中子的动能，设它们的德布罗意波长是1Å。

61 设有一质量为μ、速度为$v(\ll c)$的粒子。试问在什么情况下，当它被线性周期为d的周期场散射时，明显地显示出波动性？

62. 当中子在晶格常数为2.5Å和6.0Å的天然晶体上散射时，为了得到特别强的衍射效果，问中子的能量多大为宜？

63. 考虑到粒子的波动性，对于能量为10eV的电子和能量为1MeV的质子，阐明经典概念的适用范围。

64. 为了研究原子核的结构，一些实验室建造了能量高达6GeV的电子加速器。在这种情况下，电子的德布罗意波长如何？为什么需要如此高的能量？

§4. 角动量；自旋

1. 考虑角动量算符J_x, J_y, J_z, 它们满足对易关系：

$$[J_x, J_y]_- = i\hbar J_z, \quad [J_y, J_z]_- = i\hbar J_x,$$

$$[J_z, J_x]_- = i\hbar J_y.$$

并引入非厄密算符

$$J_\pm = J_x \pm iJ_y.$$

(i) 导出J_+, J_-和J_z满足的对易关系；

(ii) 证明关系式$J_\mp J_\pm = J^2 - J_z(J_z \pm 1)$；

(iii) 设$\varphi_{a,b}$是对应于本征值a和b的 J^2 和 J_z 的共同本征函数，

$$J^2\varphi_{a,b} = a\varphi_{a,b}, \quad J_z\varphi_{a,b} = b\varphi_{a,b};$$

我们采用狄拉克符号：

$$\varphi_{a,b} = |a,b\rangle,$$

选取$\varphi_{a,b}$是正交归一集合，即

$$\langle a',b'|a,b\rangle = \delta_{aa'}\delta_{bb'}.$$

证明

$$a \geqslant b^2,$$

且$J_+|a,b\rangle$ 和$J_-|a,b\rangle$ 仍然是J^2和J_z的共同本征函数. 求出相应于$J_+|a,b\rangle$ 和$J_-|a,b\rangle$ 的本征值.

进而证明，存在下面两式所表示的状态：

$$J_+|a,b_{max}\rangle = 0, \quad J_-|a,b_{min}\rangle = 0.$$

如果令$b_{max}/\hbar = j$，试证

$$a = j(j+1)\hbar^2,$$

且证明j是整数或半奇整数.

(iv) 如果我们令$b = m\hbar$，并采用角动量本征态的通常记法，把态$|a,b\rangle$记作$|j,m\rangle$，试在$|j,m\rangle$表象中求出J_x, J_y和J_z的矩阵表示.

2. 试用(N个粒子体系的)角动量算符，表出绕 $\boldsymbol{n}$ 方向转过有限角φ_0的转动算符。

3. 从$\hat{l}_x$, $\hat{l}_y$, $\hat{l}_z$是无穷小转动算符这一事实出发，求出算符$\hat{l}_x$, $\hat{l}_y$, $\hat{l}_z$在球坐标中的表达式。

4. 证明在转动下，算符$\hat{\Omega}$变成新算符$\hat{\Omega}'$。

$$\hat{\Omega}'=\hat{R}\hat{\Omega}\hat{R}^{-1},$$

式中$\hat{R}$是转动算符（见§4.2题）。

5. 试从动量和角动量算符的运动学意义（它们与无限小平动和转动相联系）出发，对动量分量算符间的对易性和角动量分量算符之间的非对易性给出简单的解释。

6. 证明下列对易关系：

(a) $[\hat{l}_i,\hat{x}_k]_-=ie_{ikl}\hat{x}_l$;

(b) $[\hat{l}_i,\hat{p}_k]_-=ie_{ikl}\hat{p}_l$。

式中e_{ikl}是三阶反对称单位张量，当交换任何两个下角标时，它的分量变号，即$e_{ikl}=-e_{ilk}$，而且$e_{123}=1$(1,2,3相当于x,y,z)。

7. 证明下列关系式成立：

(a) $[\hat{\boldsymbol{l}},(\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2)]_-=0$,

(b) $[\hat{\boldsymbol{l}},(x^2+y^2+z^2)]_-=0$。

8. 试证明，若 $\psi_m^{(0)}$是算符$\hat{J}_z$的本征函数，对应的本征值是m，则函数$\psi_m=\exp(-i\hat{J}_z\varphi)\exp(-i\hat{J}_y\theta)\psi_m^{(0)}$是算符

$$\hat{J}_\xi=\hat{J}_x\sin\theta\cos\varphi+\hat{J}_y\sin\theta\sin\varphi+\hat{J}_z\cos\theta$$

的本征函数，且对应于相同的本征值，亦即

$$\hat{J}_\xi\psi_m=m\psi_m。$$

提示：利用关系式（见§3.21题）

$$\exp(-i\hat{J}_y\theta)\hat{J}_z\exp(i\hat{J}_y\theta)=\hat{J}_z\cos\theta+\hat{J}_x\sin\theta$$

$$\exp(-i\hat{J}_z\varphi)\hat{J}_x\exp(i\hat{J}_z\varphi)=\hat{J}_x\cos\varphi+\hat{J}_y\sin\varphi$$

9. 证明在$\hat{J}_z$具有完全确定值的态ψ中($\hat{J}_z\psi=m\psi$)，$\hat{J}_x$和$\hat{J}_y$的平均值等于零。

提示：求出对易关系式

$$\hat{l}_y\hat{l}_z-\hat{l}_z\hat{l}_y=i\hat{l}_x$$
$$\hat{l}_z\hat{l}_x-\hat{l}_x\hat{l}_z=i\hat{l}_y$$

的左边和右边在态ψ中的平均值。

10　试用算符$\hat{l}_x$，$\hat{l}_y$，$\hat{l}_z$表示出相对于任意轴(z')的角动量算符。

11．试证明：若在某一态ψ中，$\hat{l}_z\psi=m\psi$，则绕与z轴成θ角的z'轴的角动量的平均值为$m\cos\theta$。

这个结果可以直观地解释如下。在态ψ_m中角动量矢量均匀地"散布"在以z轴为轴的锥体上，锥体的斜高为$\sqrt{l(l+1)}$，高度为m。角动量在xy平面上的投影的平均值等于零，它在z'轴上的投影在平均后等于$m\cos\theta$。

12　试求在坐标系的任意转动之下，自旋为1的粒子的自旋函数分量的变换矩阵。

13．在斯特恩-革拉赫实验中，总角动量为J的原子束的偏转与角动量在磁场方向上的分量的值有关。如果粒子束中的粒子相对于某个轴有完全确定的角动量，而且这个轴不与外加磁场的方向重合，则此粒子束将分裂为$2J+1$束。

设$J=1$，而且在与外加磁场方向成θ角的轴上角动量的分量有完全确定的值$M(+1,\ 0,\ -1)$，试求分裂后各束的相对强度。

14．三个厄密算符$\hat{\sigma}_x$，$\hat{\sigma}_y$和$\hat{\sigma}_z$满足下列关系式：

$$[\hat{\sigma}_x,\hat{\sigma}_y]_-=2i\hat{\sigma}_z,\quad [\hat{\sigma}_y,\hat{\sigma}_z]_-=2i\hat{\sigma}_x,$$
$$[\hat{\sigma}_z,\hat{\sigma}_x]_-=2i\hat{\sigma}_y,\quad \hat{\sigma}_x^2+\hat{\sigma}_y^2+\hat{\sigma}_z^2=3.$$

试求在$\hat{\sigma}_z$对角化的表象中，这些所谓泡利矩阵的表示。

15　设$\hat{\boldsymbol{\sigma}}$是一矢量算符，它的分量是$\hat{\sigma}_x$、$\hat{\sigma}_y$和$\hat{\sigma}_z$，试证，

(i)　若$\hat{\boldsymbol{A}}$和$\hat{\boldsymbol{B}}$都与$\hat{\boldsymbol{\sigma}}$对易，则有

$$(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\boldsymbol{A}})(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\boldsymbol{B}})=(\hat{\boldsymbol{A}}\cdot\hat{\boldsymbol{B}})+i(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot[\hat{\boldsymbol{A}}\times\hat{\boldsymbol{B}}]);$$

(ii)　$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z=i$

16. 试求自旋函数$\left(\text{自旋为}\frac{1}{2}\text{的粒子的旋量}\right)$对应于转动的变换算符。设转动用欧勒角$\vartheta$、$\psi$和$\varphi$描述(见图19)。

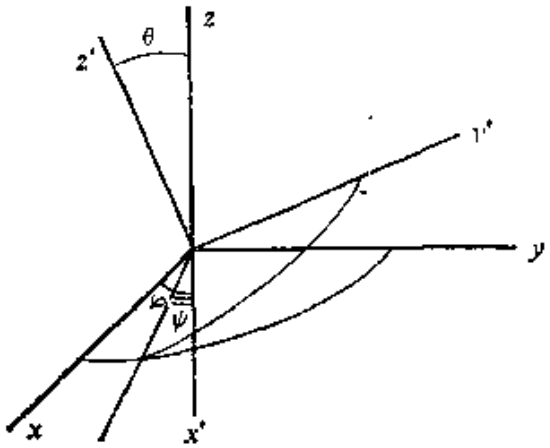


图 19

17. 若坐标系相对于方向余弦为α,β,γ的轴转动一个角度Φ，试求旋量分量的变换矩阵。

18. 求算符$\alpha\hat{\sigma}_x+\beta\hat{\sigma}_y+\gamma\hat{\sigma}_z$的本征函数，其中$\alpha^2+\beta^2+\gamma^2=1$。并证明任意自旋函数$\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}$按这些函数展开的展开系数，就决定了在方向余弦为$\alpha,\beta,\gamma$的方向上、自旋分量的值等于$+\frac{1}{2}$或$-\frac{1}{2}$的几率。

19. 设电子自旋的z分量是$+\frac{1}{2}$，问在与z轴成θ角的z'方向上，自旋的分量等于$+\frac{1}{2}$或$-\frac{1}{2}$的几率是多少？试求出在这个方向上自旋分量的平均值。

20. 在"$\left|\frac{1}{2},\ m\right\rangle$表象"中，自旋为$\frac{1}{2}$的粒子的，自旋函数的最普遍形式为

$$\psi_1=e^{i\alpha}\cos\delta,\quad \psi_2=e^{i\beta}\sin\delta.$$

在这函数所描写的态中，粒子自旋的z分量为$+\frac{1}{2}\left(\text{或}-\frac{1}{2}\right)$的几率是$\cos^2\delta$(或$\sin^2\delta$)。

试问在任意方向上，测量自旋分量的结果如何？

21. 在"$\left|\frac{1}{2}m\right\rangle$表象"中，自旋为$\frac{1}{2}$的粒子的自旋函数有如下形式：

$$\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}e^{i\varphi}\cos\delta\\ e^{i\theta}\sin\delta\end{pmatrix}.$$

试问：在空间中是否存在这样一个方向，在此方向上自旋分量具有完全确定的值$+\frac{1}{2}$？

若这种方向存在，试求出这个方向的极角(θ,Φ).

提示：根据自旋函数的第二个分量为零的条件来找出θ和Φ.

22. 考虑一个无相互作用的全同粒子系。设这些粒子的动量相同，自旋为$\frac{1}{2}$。要是这些粒子没有自旋，则可以用"纯粹"系综来描写这个粒子系。然而，我们并不知道所有粒子的自旋是否平行。

试问：此时能否用斯特恩-盖拉赫型实验来确定这个粒子束究竟相当于"纯粹"系综，还是"混合"系综？

23. 试求出由两个自旋为$\frac{1}{2}$的粒子所组成的体系的波函数，这个波函数是总自旋的平方及其z分量这两个对易算符的共同本征函数。

24. 设有一由自旋为$\frac{1}{2}$的两个粒子组成的体系。若它的哈密顿量对两个自旋是对称的，试证明总自旋S是运动积分。

25 我们用$\hat{\sigma}_1$和$\hat{\sigma}_2$表示两个粒子的自旋算符，用r表示连接这两个粒子的径矢。试证明，算符

$$\hat{A}\equiv(\hat{\sigma}_1\cdot\hat{\sigma}_2)\text{和}\hat{S}_{12}=3(\hat{\sigma}_1\cdot\hat{r})(\hat{\sigma}_2\cdot\hat{r})/r^2-(\hat{\sigma}_1\cdot\hat{\sigma}_2)$$

的任何正整数次方，以及这些乘方的任何乘积，都可以用算符$\hat{A}$，

$\hat{S}_{12}$与j单位矩阵的线性组合来表示。

26. 试证明，上题中的算符$\hat{S}_{12}$可用总自旋算符$\hat{\boldsymbol{S}}=\frac{1}{2}(\hat{\sigma}_1+\hat{\sigma}_2)$表示成

$$\hat{S}_{12}=6(\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\hat{\boldsymbol{r}})^2/r^2-2\hat{\boldsymbol{S}}^2。$$

并证明：如果两粒子的总自旋为1，则$\hat{S}_{12}$可表为如下的三阶矩阵

$$\hat{S}_{12}=4\sqrt{\pi}/\sqrt{5}\begin{Bmatrix} Y_{20} & -\sqrt{3}Y_{2,-1} & \sqrt{6}Y_{2,-2} \\ -\sqrt{3}Y_{21} & -2Y_{20} & \sqrt{3}Y_{2,-1} \\ \sqrt{6}Y_{22} & \sqrt{3}Y_{21} & Y_{20} \end{Bmatrix}。$$

27. 考虑两个自旋为$\frac{1}{2}$的粒子，它们之间的相互作用是磁偶极-偶极相互作用，

$$V=A[(\hat{\sigma}_1\cdot\hat{\sigma}_2)r^2-(\hat{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{r})(\hat{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{r})]/r^5。$$

如果两自旋之间有固定的距离d，而且若在$t=0$时一个自旋与$\boldsymbol{r}$平行，另一自旋与$\boldsymbol{r}$反平行，试计算平行的自旋变成反平行，反平行的自旋变成平行所需的时间。

28. 对于三个自旋为$\frac{1}{2}$的粒子系，写出所有的四重态和二重态的自旋波函数。

29. 试证，n个自旋为$\frac{1}{2}$的粒子体系的全对称的自旋波函数是具有量子数$\frac{1}{2}n$的总自旋算符$\hat{\boldsymbol{S}}^2\left(\hat{\boldsymbol{S}}=\sum_i\frac{1}{2}\hbar\hat{\sigma}_i\right)$的一个本征函数。同时证明，这体系的任何其他的态具有较小的总自旋量子数。

30 令σ_i表示第i个电子的自旋变量。这个变量可取+1和−1两个值。试证明，若以属于第l个电子的算符

$$\hat{\sigma}_{lx}=\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_l,\quad \hat{\sigma}_{ly}=\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}_l,\quad \hat{\sigma}_{lz}=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}_l$$

作用在n个电子自旋变量的函数$f(\sigma_1,\sigma_2,\cdots,\sigma_l,\cdots,\sigma_n)$上，则得到如下结果：

$$\hat{\sigma}_{lx}f=f(\sigma_1,\cdots,\sigma_{l-1},-\sigma_l,\sigma_{l+1},\cdots,\sigma_n)$$

$$\hat{\sigma}_{ly}f=-i\sigma_l f(\sigma_1,\cdots,\sigma_{l-1},-\sigma_l,\sigma_{l+1},\cdots,\sigma_n)$$

$$\hat{\sigma}_{lz}f=\sigma_l f(\sigma_1,\cdots,\sigma_{l-1},\sigma_l,\sigma_{l+1},\cdots,\sigma_n)$$

31. 证明n个电子总自旋平方的算符可写成如下形式

$$\hat{\boldsymbol{S}}^2=n-n^2/4+\sum_{k<l}P_{kl},$$

式中P_{kl}是交换自旋变量σ_k和σ_l的算符，即

$$P_{kl}f(\sigma_1,\cdots,\sigma_{k-1},\sigma_k,\sigma_{k+1},\cdots,\sigma_{l-1},\sigma_l,\sigma_{l+1},\cdots,\sigma_n)$$
$$=f(\sigma_1,\cdots,\sigma_{k-1},\sigma_l,\sigma_{k+1},\cdots,\sigma_{l-1},\sigma_k,\sigma_{l+1},\cdots,\sigma_n)$$

32. 利用二阶对称张量的变换，求出§4.12题的结果。

33. 一粒子的角动量为j，并且它的z分量取最大的可能值。试确定在与z轴成θ角的方向上，角动量分量取不同值的几率。

34. 对于$s=\frac{1}{2}$（例如$s=1$）。如何写出自旋角动量的波函数？(i) 指向任意选定的方向的态存在吗？(ii) 一个任意态能指向某个方向吗？试说明这个情况。

35*. 有一体系，其总角动量为J，处于$J_z=M$的态中，试确定在与z轴成θ角的z'方向上，测得（例如，用斯特恩-革拉赫实验）角动量分量取M'值的几率。

36*. 有一个自旋为$\frac{1}{2}$的粒子在有心力场中运动。试求出这粒子的波函数，而这个波函数同时是下列三个对易算符

$$\hat{j}_z=\hat{l}_z+s_z,\ \hat{l}^2,\ \hat{j}^2$$

的共同本征函数。

37. 设电子处于由量子数l，j和m表征的态。试利用上题中求得的波函数，确定轨道角动量和自旋角动量的分量的可能值。

以及取这些值的几率，并求出这些分量的平均值。

38. 我们把自旋分量有完全确定值$+\frac{1}{2}$的方向确定为自旋方向。设这一方向用极角Θ和Φ来表征，且粒子的态由波函数$\psi\left(l, j=l\pm\frac{1}{2}, m\right)$(见§4.36题)描述。显然，这样的粒子的自旋方向在空间各点一般说来是不同的。试求极角Θ，Φ与粒子的空间坐标之间的关系。

39. 设有由两个粒子组成的体系，其中一粒子的角动量$l_1=1$，另一粒子的角动量$l_2=l$。在这种情况下，总角动量J可以取值$l+1$，l和$l-1$。试用各个粒子的角动量的平方和角动量的z分量的本征函数来表示算符$\hat{J}^2$和$\hat{J}_z$的本征函数。

40. 设有一体系由两个粒子组成，其中一个粒子的自旋为$\frac{1}{2}$，另一个的自旋为0。试证明，无论这两个粒子之间按什么样的规律相互作用，轨道角动量总是运动积分。

41. 试证明，在$^3D_1$态的波函数中，有关自旋变量和角度变量的归一化部分可写成下列形式：

$$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\hat{S}_{12}\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}(J=1, M=1, L=2, S=1),$$

$$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\hat{S}_{12}\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}(J=1, M=0, L=2, S=1),$$

$$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\hat{S}_{12}\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}(J=1, M=-1, L=2, S=1).$$

提示：(见§4.39题)。

42. 证明下列等式：

(a) $[\hat{\boldsymbol{J}}^2,\hat{\boldsymbol{A}}]_-=i\{(\hat{\boldsymbol{A}}\times\hat{\boldsymbol{J}})-(\hat{\boldsymbol{J}}\times\hat{\boldsymbol{A}})\}$,

(b) $[\hat{\boldsymbol{J}}^2,[\hat{\boldsymbol{J}}^2,\hat{\boldsymbol{A}}]_-]_-=2(\hat{\boldsymbol{J}}^2\hat{\boldsymbol{A}}+\hat{\boldsymbol{A}}\hat{\boldsymbol{J}}^2)-4\hat{\boldsymbol{J}}(\hat{\boldsymbol{J}}\cdot\hat{\boldsymbol{A}})$,

(c) $(\hat{\boldsymbol{A}})^{n'J'M'}_{nJM}=[(\hat{\boldsymbol{J}}\cdot\hat{\boldsymbol{A}})^{n'J}_{nJ}/J(J+1)](\hat{\boldsymbol{J}})^{J'M'}_{JM}$.

其中$\hat{\boldsymbol{A}}$是任意矢量算符，它满足对易关系

$$[\hat{J}_i,\hat{A}_k]=ie_{ikl}\hat{A}_l.$$

43. 若$\hat{\boldsymbol{T}}$是一个矢量算符，它与总角动量算符$\hat{\boldsymbol{J}}$的对易关系式为

$$[(\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}),\hat{\boldsymbol{T}}]_-=i\hbar[\hat{\boldsymbol{T}}\times\boldsymbol{a}].$$

其中$\boldsymbol{a}$是一个任意常矢量，若取$\hat{\boldsymbol{T}}$为电偶极矩算符，试证明，在$|j,m\rangle$态中，在电偶极矩跃迁中量子数m的改变为0或±1（见§4.1题）。

运用上题(b)的结果证明：

$$[(\lambda_j-\lambda_{j'})^2-2(\lambda_j+\lambda_{j'})]\langle j,m|\hat{\boldsymbol{T}}|j',m'\rangle$$
$$=-4\langle j,m|\hat{\boldsymbol{J}}(\hat{\boldsymbol{J}}\cdot\hat{\boldsymbol{T}})|j',m'\rangle$$

式中$\lambda_j=j(j+1)$。

再证明$\hat{\boldsymbol{J}}$与$(\hat{\boldsymbol{J}}\cdot\hat{\boldsymbol{T}})$对易，且$\langle j,m|\hat{\boldsymbol{J}}(\hat{\boldsymbol{J}}\cdot\hat{\boldsymbol{T}})|j',m'\rangle$为零，除非$j=j'$。运用这些结果，

(i) 在$\hat{\boldsymbol{T}}$是电偶极矩算符的情况下，证明在电偶极跃迁中j的改变为0或±1；

(ii) 在$\hat{\boldsymbol{T}}$是电子自旋$\hat{\boldsymbol{S}}$的情况下，且$j=j'$，在罗素-桑德斯耦合中，求朗德g因子（这里的态是$\hat{\boldsymbol{J}}^2,\hat{J}_z,\hat{\boldsymbol{S}}^2$和$\hat{\boldsymbol{L}}^2$的共同本征态）。

44. 如果总角动量$\hat{\boldsymbol{J}}=\hat{\boldsymbol{J}}_1+\hat{\boldsymbol{J}}_2$，求在由量子数$J$，$M_J$，$J_1$和$J_2$所表征的态中，算符$\hat{\mu}=g_1\hat{\boldsymbol{J}}_1+g_2\hat{\boldsymbol{J}}_2$的平均值。

提示：利用§4.42题中导出的公式。

45. 计算^{15}N核的磁矩（以核磁子为单位）。在^{15}N核的满壳层中缺少一个处于$p_{1/2}$态的质子，自由质子的磁矩$\mu_p=2.79$。

46. 试计算^{17}O核的磁矩。此核在满壳层之外，还有一个处于$d_{5/2}$态的中子，自由中子的磁矩为$\mu_n=-1.91$。

47. 处于下列各态的氘核磁矩的值分别是多少？(a)$^3S_1$，(b)$^1P_1$，(c)$^3P_1$，(d)$^3D_1$。

48. 设氘核的基态是$^3S_1$态和$^3D_1$态的叠加。如果$\mu_p=2.79$，$\mu_n=-1.91$，$\mu_d=0.85$，试决定D态的权重。

49. 下述各态中，哪些可能出现，哪些不可能出现：$^1P_0$，$^2P_{\frac{1}{2}}$，$^2P_1$，$^2P_{5/2}$，$^3P_0$，$^3P_{1/2}$，$^3P_1$。

50. 有一自旋为1的核A被激发到偶态。从能量上看，它发射α粒子的反应

$$A\longrightarrow B+\alpha$$

是允许的。在反应中产生的核B是稳定的，自旋为零，而且也处于偶态。试利用角动量和宇称守恒说明这个反应是禁戒的。

51. 试证明两个α粒子相对运动的轨道角动量L总是偶数($L=0,2,4,\cdots$)。

52. 问自旋为1的受激核^{8}Be是否能衰变成两个α粒子？

53. 利用下述事实：中子-质子$(n,\ p)$系统的唯一束缚态是偶态，这个态的总自旋等于1，$(n,\ n)$和$(n,\ p)$相互作用力相同，试证明两个中子不能形成一个束缚态系统。

54. 一个光子能否自发地变成(*i*)两个光子，或者(*ii*)三个光子？

55. 试证明，对于由自旋为I的两个全同粒子组成的系统来说，两个自旋对称的态的数目与两个自旋反对称的态的数目之比等于$(I+1)/I$。

56. 一个体系由两个无自旋的粒子组成，每个粒子都处于p态。若$\hat{L}=\hat{l}^{(1)}+\hat{l}^{(2)}$，求证$\hat{L}^2$只有一个允许的本征值。如果这两个粒子的波函数必须是反对称的，求在这个容许的态中$(\hat{l}^{(1)}\cdot\hat{l}^{(2)})$的期望值。

57. 一体系的四极矩张量由下式确定：

$$Q_{ik}=\sum_j e_j(3x_i^{(j)}x_k^{(j)}-\delta_{ik}r^{(j)2}),$$

其中求和遍及体系的所有粒子，而$r^{(j)}$是它们的位矢。

如果体系处于总角动量具有完全确定值的态中，对应的角量子数为 j，则四极矩Q定义为在$m=j$的态中Q_{zz}的值。

试对于由波函数 $\Psi(r,\theta,\varphi)=f(r)Y_{l,m}(\theta,\varphi)$ 表征的态，计算Q_{ik}的平均值。利用关系式

$$\cos\theta\, Y_{l,m}=\sqrt{\left[\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}\right]}\,Y_{l+1,m}$$

$$+\sqrt{\left[\frac{(l+m)(l-m)}{(2l-1)(2l+1)}\right]}\,Y_{l-1,m}.$$

58* 一个电子在有心力场中运动，试对于以量子数j，l和m_j表征的态计算Q_{ik}的平均值。

59 利用矢量的矩阵元表达式，证明原子核的四极矩等于

$$Q=I(2I-1)\sum_{i=1}^{Z}\sum_{n'}\{2(I+1)|(z_i)^{n}_{n'};^{I}_{,I+1}|^2$$

$$-2I|(z_i)^{n}_{n'};^{I}_{,I-1}|^2\},$$

其中，求和应对所有Z个质子进行，I是核的自旋，n是表征核的状态的所有其他量子数的组合。

60. 计算一个原子核的四极矩，此核在其闭壳层、球对称的核心之外有一个角动量为 j 的质子。忽略核心的形变。

§5. 有心力场

1. 设有n体系由质量为μ_1和μ_2的两个粒子组成。试用质心坐标$\boldsymbol{R}=(\mu_1\boldsymbol{r}_1+\mu_2\boldsymbol{r}_2)/(\mu_1+\mu_2)$和相对距离$\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1$来表示总轨道角动量算符$\hat{\boldsymbol{l}}_1+\hat{\boldsymbol{l}}_2$和总动量算符$\hat{\boldsymbol{p}}_1+\hat{\boldsymbol{p}}_2$。如果粒子的相互作用势能只依赖于它们之间的距离，即$V=V(|\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1|)$，试证明哈密顿量可取如下形式：

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2(\mu_1+\mu_2)}\nabla_R^2-\frac{\hbar^2(\mu_1+\mu_2)}{2\mu_1\mu_2}\nabla_r^2+V(r)$$

式中∇_R^2和∇_r^2是对应于$\boldsymbol{R}$和$\boldsymbol{r}$分量的拉普拉斯算符。

2. 一粒子在有心力场中运动。试将波函数的径向部分R_{nl}的方程写成一维薛定谔方程的形式。

3. 试证明，在有心力场中分立谱的情形下，对于给定的轨道量子数l的值，能量的最小值随l的增加而增加。

4. 试确定三维各向同性振子的能级和波函数。

5. 在笛卡儿坐标中，试用分离变量法解上题。试将$n_r=0$，$l=1$的波函数（见上题）表成所求得的波函数的线性组合。

6. 设轻核中的核子在形式为$V(r)=-V_0+\frac{1}{2}\mu\omega^2r^2$的平均势场中运动，试确定满壳层中能容纳的同一类粒子（中子或质子）的数目。所谓壳层，应理解为具有相同能量的所有态的总合。

7. 设势场和上题所给出的一样，试计算有闭壳层的核${}_2^4\mathrm{He}$和${}_8^{16}\mathrm{O}$的理论半径。所谓理论上的核半径，应理解为从核的质心到那样一点的距离，在该点"核密度"$\rho(r)=\sum_p\psi_p^*(r)\psi_p(r)$（对所有的核子求和）下降最陡，即

$$(\mathrm{d}^2\rho/\mathrm{d}r^2)_{r=R}=0.$$

8. 设质子和中子间的相互作用可近似地写成$V(r)$

$=-Ae^{-r/a}$。试求基态（$l=0$）的波函数。并利用氘核结合能的经验值$E=-2.2\text{MeV}$，确定势阱深度A与表征力程的量a之间的关系。

9. 如果势$V(r)=-Ae^{-r/a}$（$A=32\text{MeV}$，$a=2.2$费密），试利用里兹变分原理，近似地确定氘核基态的能量。取一依赖于一个参数α的函数$R=ce^{-\alpha r/2a}$为试探波函数，而c值由归一化条件$\int_0^\infty R^2 r\,dr=1$确定。

10. 试确定处于球形“势阱”

$$V(r)=0\quad(r<a);\quad V(r)=\infty\quad(r>a)$$

中的粒子的能级和波函数。考虑$l=0$的情形。

11. 试确定在球形势阱

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

中角动量为零的粒子的分立能谱。

12. 在上题的势场中，求p态波函数，它与$\cos\theta$成正比。

13. 当势场由

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

变成图20所给的形状时，试用微扰论定性地确定能级的改变。

14.* 在核中，α粒子的势能由两部分组成：库仑排斥力和

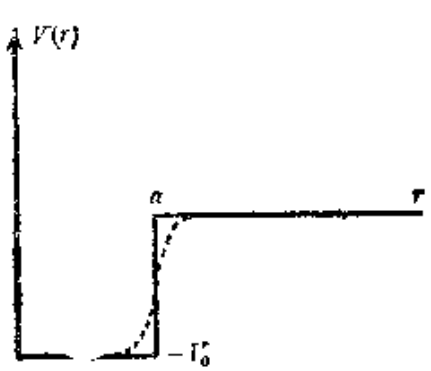


图 20

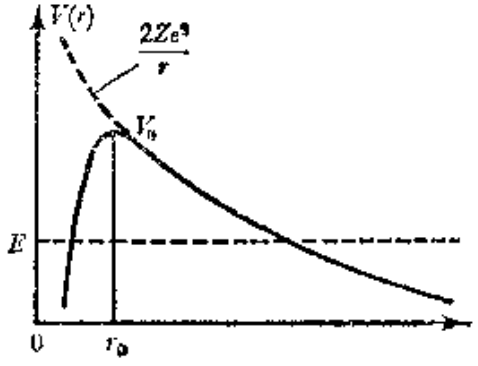


图 21

短程的核吸引力。总势能的形式，如图21所描绘。α 粒子的发射，是由势垒穿透所造成的一种典型的量子现象。试讨论角动量为零的粒子通过下面简单球形势垒透射的情况：

$$V(r)=0 \qquad (r<r_1),$$
$$V(r)=V_0 \qquad (r_1<r<r_2),$$
$$V(r)=0 \qquad (r_2<r)$$

试求出寿命与能量之间的关系。

15*. 试研究μ^-子在电荷为Ze的核场中运动（把核看作半径为R、并有均匀体电荷分布的球），设μ子与核间的相互作用具有纯静电的性质。

在Z很小和很大的极限情形下，求μ子的定态波函数和能级。

16. 设处于有心力场中的粒子受一微扰的作用，微扰算符和梯度算符（∇）成正比，试求在粒子定态之间跃迁的选择定则。

17*. 若粒子在库仑势场中，处于以量子数n，l和m标记的态中，指出如何才能计算$\langle r^p\rangle$($p>-2l-3$)。并对于 $p=-4$，-3，-2，-1，$+1$和$+2$计算这个平均值。

18*. 试用半经典近似方法，求有心力场中粒子的径向波函数。

19. 用两种方法：(*i*)严格的，(*ii*)运用半经典近似，求角动量量子数为l的自由粒子的波函数。

20*. 应用半经典近似方法于径向薛定谔方程，导出氢原子的本征值。

21. 运用半经典近似，对于在给定有心力场$V(r)$中运动的粒子，导出其分立能级数的表达式（与§1.22题比较）。

§6、 粒子在磁场中的运动

1. 设在$t=0$时电子的波函数为：

$$\Psi(x,y,z,0)=\psi(x,y,0)\varphi(z,0)$$

于是，在无向沿 z 轴的均匀磁场$\mathscr{H}$内，在 t 时刻波函数也可写为

$$\Psi(x,y,z,t)=\psi(x,y,t)\varphi(z,t)\,.$$

这是因为在薛定谔方程中，变量 z 是可分离的。如果T是磁场中粒子作经典运动的周期，试证明，除相差一相因子外，$\psi(x,y,T)$和初值相同。

2. 试证明，在有磁场的情形下，速度分量算符满足下列对易关系：

$$\hat{v}_x\hat{v}_y-\hat{v}_y\hat{v}_x=\frac{ie\hbar}{\mu^2c}\mathscr{H}_z,$$

$$\hat{v}_y\hat{v}_z-\hat{v}_z\hat{v}_y=\frac{ie\hbar}{\mu^2c}\mathscr{H}_x,$$

$$\hat{v}_z\hat{v}_x-\hat{v}_x\hat{v}_z=\frac{ie\hbar}{\mu^2c}\mathscr{H}_y.$$

3 利用§6.2题和§1.8题的结果，确定在恒定均匀磁场中运动的带电粒子的能量。

4. 设带电粒子在相互垂直的均匀电场和均匀磁场中运动，试确定它的能谱。

5 带电粒子在相互垂直的均匀电场和磁场中运动，试求其波函数。

6. 设带电粒子在均匀磁场和形式为$V(r)=\frac{1}{2}\mu\omega_0^2r^2$的有心场中运动，试确定粒子的能谱。

7. 设带电粒子在均匀的磁场（矢势 $A_x=-\frac{1}{2}\mathscr{H}y$，$A_y=$

$\frac{1}{2}\mathscr{H}x$, $A_z=0$)中运动，试确定它的坐标算符 $\hat{x}$, $\hat{y}$ 与时间的关系。

8*. 设带电粒子在均匀磁场中运动，试确定它的能级和波函数。采用柱坐标系。矢势取 $A_\varphi=\frac{1}{2}\mathscr{H}\rho$, $A_\rho=A_z=0$的形式。

9. 设一在均匀磁场中运动的带电粒子，处在由量子数 n, m, k_z所表征的态中（见上题），试求它的电流密度分量。

10. 试用半经典近似，在柱坐标中，求出在均匀磁场中带电粒子的能级。

11. 试确定在磁场中粒子径向运动的经典可达到区域（见上题）。

12. 估计磁场中带电粒子的轨道在径向方向上的最小“宽度”。

13. 设带电粒子在均匀磁场中作圆周运动，试根据经典力学用坐标 x, y和广义动量 p_x, p_y来表示圆心的坐标。把这个表达式中的坐标和动量当着算符，试求出用上述方法所引进的“轨道中心”坐标的对易关系和相应的测不准关系。并证明“轨道中心”坐标的平方和取分立值 $\frac{2\hbar c}{|e|\mathscr{H}}\left(n+\frac{1}{2}\right)$, 其中 $n=0,1,2,\cdots$。

14. 试证明在随时间变化的均匀磁场中，具有自旋的粒子的波函数，可写成空间函数和自旋函数的乘积。

15. 一个自旋为 $\frac{1}{2}$ 的粒子，在沿 z 轴方向的均匀磁场中运动。磁场的绝对值可以随时间任意变化，$\mathscr{H}=\mathscr{H}(t)$。$t=0$ 时自旋函数的形式为

$$\begin{pmatrix} e^{-i\alpha}\cos\delta \\ e^{i\alpha}\sin\delta \end{pmatrix}.$$

试确定自旋的 x 分量和 y 分量的平均值，并确定这样一个空间方

向；自旋在该方向上的分量，在 t 时刻有完全确定的值。

16. 在 $x>0$ 的半空间中有均匀磁场 $\mathscr{H}_x=\mathscr{H}_y=0$，$\mathscr{H}_z=\mathscr{H}$。但在 $x<0$ 的半空间中没有场。设有动量为 p 的极化中子束从 $x<0$ 的区域投射到 $x=0$ 的平面上，求分界面上中子的反射系数。

17. 自旋为 $\frac{1}{2}$ 的粒子，在均匀磁场中运动。这磁场的绝对值不变，但其方向按下面的规律随时间变化：

$$\mathscr{H}_x=\mathscr{H}\sin\theta\cos\omega t,\quad \mathscr{H}_y=\mathscr{H}\sin\theta\sin\omega t,$$
$$\mathscr{H}_z=\mathscr{H}\cos\theta.$$

设 $t=0$ 时自旋在磁场方向上的分量等于1/2。试确定在时刻 t 粒子跃迁到自旋在磁场方向上的分量等于 $-\frac{1}{2}$ 的态的几率。

18. 在 $t=0$ 时刻，自旋为1/2、自旋取向沿 x 轴正向的粒子，进入具有均匀磁场 H 的空间区域，这磁场沿 z 轴方向。求 t 时刻自旋仍沿 x 轴正向的几率。

19. 一个自旋为1/2的粒子置于磁场（H，0，0）中。$t=0$ 时刻自旋沿 z 轴正向，求自旋方向沿 y 轴正向的时刻 τ。

20. 一自旋为1/2的粒子置于随时间变化的磁场（$He^{-\gamma t}$，0，0）中，这里 H 和 $\gamma(>0)$ 是常数，若在 $t=0$ 时，自旋沿 z 轴正向，求 t 时刻自旋沿 z 轴负向的几率。

21. 自旋为 1/2，磁矩为 μ 的粒子，在如下非均匀磁场中运动：

$$\mathscr{H}_x=\mathscr{H}_0+bz,\quad \mathscr{H}_y=-by,\quad \mathscr{H}_z=0\quad(\nabla\cdot\mathscr{H}=0).$$

（a） 求坐标 x，y，z 的算符随时间变化的表达式。

（b） 设 $t=0$ 时粒子波函数的形式为

$$\psi=\varphi(x,y,z)\exp(ip_0x/\hbar)\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix},$$

试确定坐标的平均值，以及坐标的均方差与时间的关系。

22. 一自旋为1/2的粒子，具有磁矩 $\mu=g\mu_B J$（J 是以 $\hbar$ 为单位

的总角动量，μ_B是玻尔磁子)，处于沿z轴方向的磁场$\mathscr{H}$中，$t\leqslant 0$时，自旋沿z轴正向。在$t=0$时刻，磁场突然转过90°而沿x轴方向。

(i) 对于整个$t>0$，求粒子的波函数；

(ii) 对于$t>0$，求$\hat{J}_x$，$\hat{J}_y$和$\hat{J}_z$的期望值；

(iii) 如果磁场用时间T缓慢地转到沿x轴方向，则对于所有$t>T$，$\hat{J}_z$的期望值近似地等于$\frac{1}{2}$。估算这个说法为正确的最短时间T。

23. 求外场$\mathscr{H}$中两个自旋为$\frac{1}{2}$的粒子组成的体系的能级。描述体系的哈密顿量为

$$\hat{H}=A[1-(\hat{\sigma}_1\cdot\hat{\sigma}_2)]+\frac{1}{2}g\mu_B\mathscr{H}(\hat{\sigma}_{1z}+\hat{\sigma}_{2z}),$$

其中A为常数，g是有效的朗德因子，μ_B是玻尔磁子，而矢量算符$\hat{\sigma}_1$和$\hat{\sigma}_2$的分量是与两个粒子有关的泡利矩阵。

24. 电子偶素是一个电子和一个正电子的束缚态。在磁场$\mathscr{H}$中，对于处在1S态的体系，有效哈密顿量可以写成如下形式：

$$\hat{H}=\hat{H}_0+A(\hat{\sigma}_1\cdot\hat{\sigma}_2)+\mu_B\mathscr{H}(\hat{\sigma}_{1z}-\hat{\sigma}_{2z}),$$

其中各符号与上题相同，1和2分别指电子和正电子。H_0包含动能和有心力场的势能。

(i) 如果在零磁场中，1^1S和1^3S态的间隔为2×10^5Mc/s，且单态最低，试求A值。

(ii) 试讨论限制1^1S态和1^3S态分别一次发射两个和三个量子而衰变的原则。

(iii) 对于$\mathscr{H}$不为零的情形，求能量本征值和本征函数。

(iv) 如果1^1S态的寿命是10^{-10}秒，1^3S态的寿命是10^{-7}秒，试估算使1^3S态的寿命减少到10^{-8}秒的$\mathscr{H}$值。

25*. 设有中性粒子处于空间均匀的磁场中，磁场的方向随时间变化，但绝对值不变。

试在“ξ表象”中写出自旋函数的方程，这里ξ轴沿磁场方向．试证明，若磁场方向足够缓慢地变化，则自旋沿磁场方向的分量取不同值的几率，不随时间变化．

26．求在什么条件下，磁场中带电粒子的哈密顿量

$$H=\frac{1}{2\mu}\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\hat{\boldsymbol{A}}\right)^2$$

可写成如下形式

$$H'=\frac{1}{2\mu}\hat{\boldsymbol{p}}^2-\frac{e}{\mu c}(\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{A}})+\frac{e^2}{2\mu c^2}\hat{\boldsymbol{A}}^2.$$

27 一质量为μ、电荷为e的粒子被限制在x-y平面内半径为a的圆周上运动，除此之外，它是自由的．加上～沿z轴的磁场$\mathscr{H}$．求作为$\mathscr{H}$的函数的基态能量．

§7. 原 子

1.试利用不等式

$$\int|\nabla\psi+Z\psi\nabla r|^2\mathrm{d}\tau\geqslant 0$$

求单电子原子的最小能量和相应的波函数. 证明对于原子的基态，不等式$2T\geqslant|V|$成立.

2.一个电子在电荷为Z的核的库仑场中运动，并处于基态. 试证明在核和电子附近，平均静电势由下式给出：

$$\varphi=e(Z-1)/r+e(Z/a+1/r)\mathrm{e}^{-2Zr/a},$$

$$(a=\hbar^2/\mu e^2).$$

3.波函数$\psi(r)$描写两个粒子（一个质子和一个电子）的相对运动. 假定已确知氢原子质心的坐标等于

$$X=0,\quad Y=0,\quad Z=0.$$

试证明，在此情况下，质子的几率密度为

$$w(r)=\left(\frac{m+M}{m}\right)^3\left|\psi\left(\frac{m+M}{m}r\right)\right|^2,$$

其中m和M分别表示电子和质子的质量.

4.求氢原子$1s$，$2s$，和$2p$态电子的动量分布.

5*.若考虑质量随速度改变的相对论关系（考虑v^2/c^2级项），试求氢原子能级的修正.

6.证明氢原子的四极矩等于

$$Q_0=-\frac{j-\frac{1}{2}}{j+1}\overline{r^2},$$

$$\left\{\overline{r^2}=\frac{n^2}{2}[5n^2+1-3l(l+1)]\left(\frac{\hbar^2}{\mu e^2}\right)^2\right\}$$

7.当氚原子^{3}H发生β衰变时，试求其激发和电离的总几率，

并计算氢原子被激发到第 n 个能级的几率。

8.试求电子的轨道运动在氢原子中心处产生的磁场强度，并对2p态算出这个量的值。

9.若考虑核运动，氢原子磁矩的表示式将有什么变化？

10. 试确定氢原子中 s 电子的超精细结构谱项的间隔。

11. 试确定在角动量不为零的单电子原子中，超精细结构的能量。

12. 试求出核运动所引起的原子能级的移位。对于不同电子利用带有有效电荷的类氢函数作为本征函数，求出氦原子处于三重态和单态$(1s)(np)$时这一移位的量值。

13. 求出在 ^1S, ^3S, ^3P, ^2D, ^4D 态中，总角动量的可能值。

14. 对下列两电子体系，哪些态（谱项）可以实现？

(a) $(ns)(n's)$, (b) $(ns)(n'p)$, (c) $(ns)(n'd)$,

(d) $(np)(n'p)$？

15. 指出下列组态的可能的谱项：

(a) $(np)^3$, (b) $(nd)^2$, (c) $(ns)(n'p)^4$。

16. 确定下列元素的最低谱项：

$O[(1s)^2(2s)^2(2p)^4]$,

$Cl[(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^5]$,

$Fe[(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^6(3d)^6(4s)^2]$,

$Co[(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^6(3d)^7(4s)^2]$,

$As[(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^6(3d)^{10}(4s)^2(4p)^3]$,

$La[(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^6(3d)^{10}(4s)^2(4p)^6$

$(4d)^{10}(5s)^2(5p)^6(5d)(6s)^2]$

提示：必须利用下列经验定则[洪德定则]：

(a)对于一给定的电子组态，最低能量对应于具有最大 S 值的谱项，并且对应于这个S值可能有的最大L值；

(b)若未满壳层少子半满，则原子基态对应于$J=|L-S|$；

若超过半满，则对应于$J=L+S$。

17.试确定下列元素基态的字称：K，Zn，B，C，N，O，Cl。

18.有一N个电子的系统，由N个三量子数组n,l,m_l来表征。试确定与总自旋z分量的一个给定值M_S对应的态的数目。

19.求与组态$(nl)^x$对应的态的数目。

20.试证明。若$x\leqslant 2l+1$，则对于$(nl)^x$组态的L值最大的谱项，当x为偶数时为一单项，其$L=xl-\frac{1}{4}x(x-2)$；当x为奇数时，则为双重项，其$L=xl-\frac{1}{4}(x-1)^2$。

21*.利用单电子问题的波函数，造出与p^3组态对应的本征函数，并用量子数S，L，M_S，M_L表征之。

提示：考虑算符$(\hat{L}_x-i\hat{L}_y)$和$(\hat{S}_x-i\hat{S}_y)$对零级近似的反对称函数的作用。

22*.试求d^3组态中，两个^2D项的本征函数。

23*.两个电子在有心力场中运动。若将电子间的静电相互作用当作微扰，试求$(np)(n'p)$组态诸谱项的一级微扰能量。

提示：久期方程诸根之和等于久期行列式的迹。

24.试利用托马斯-费密模型估计以下各量的数量级：

(a)电子离原子核的平均距离；

(b)原子中两个电子间的平均库仑相互作用能；

(c)一个电子的平均动能；

(d)使原子完全电离所需的能量；

(e)原子中电子的平均速度；

(f)一个电子的平均角动量；

(g)一个电子的平均径向量子数。

25.试根据托马斯-费密模型，求出用电子密度$\rho(r)$来表示

原子能量的近似表达式①。

26 .试证，托马斯-费密方程可由总能量对密度$\rho(r)$变分的极小条件得到。本题应考虑到$\rho(r)$的归一化条件：

$$\int\rho(r)\mathrm{d}^3r=\text{常数} \qquad (1)$$

27 .如果除上题的条件(1)之外，再加上总角动量是常数的条件，则可证明，费密-托马斯原子的转动是刚性的。

28*.若取试探函数为 $\rho=Ae^{-x}/x^3$。$x=\sqrt{(r/\lambda)}$，其中 A由归一化条件 $\int\rho\mathrm{d}\tau=N$ (对中性原子，$N=Z$)决定，而 λ 是变分参数，试用变分法求在托马斯－费密模型中电子密度的最佳近似表达式。试确定原子(或离子)的能量。

注意：当选择试探函数的形式时，要考虑到如下事实：对于小的r值，精确解应该具有$\rho\sim$常数$/r^{3/2}$的形式。

29 .试证明，对于托马斯－费密模型，维里定理成立。

30 .试根据维里定理，证明中性原子的托马斯－费密模型中，电子间的静电相互作用能为电子与核间静电相互作用能的七分之一。

31*.在托马斯－费密近似下，试求使一个原子(离子)完全电离所需的能量。

32*.将一抗磁性原子置于外磁场中，试确定原子中心处感生磁场强度的大小。

33*.在氦原子的情况下，求解上题。

34*.通常的半经典近似量子规则是在这样的情况下得到的，即粒子的运动区域由两个转折点所限定，在转折点附近半经典近似不适用。当讨论处于s态的托马斯-费密分布中电子的运动时，会遇到另一种情况。(同样的结果适用于电子在任何有心力场中的运动，这种有心力场在距力心较近的地方过渡到库仑场；选用托马斯-费密模型只是为了明确起见)一方面，对于点$r=0$附近

①在利用托马斯－费密模型解决的问题中，采用$e=\hbar=\mu=1$的单位制。

小的 r 值，这些电子可以运动的区域是有限的，$r=0$ 点不是转折点。另一方面，要求半经典函数在 $r=0$ 处有限是不合理的，因为在这一点附近，半经典近似不适用。

试求关于托马斯-费密分布的 s 电子的量子规则。

35 .试估计托马斯-费密原子极化率的数量级，即在外加电场作用下产生的托马斯-费密电子分布的偶极矩 d，与该电场强度 $\mathscr{E}$ 之比。

36 .对于给定的 L 和 S 值，试求朗德 g 因子的变化范围。

37 .试证明，光谱项 $4D_{1/2}$，$5F_1$，$6G_{3/2}$ 不存在与场成线性关系的分裂。

38*.在中等场强 $(e\hbar/2\mu c)\mathscr{E}\sim|\Delta E_{jj'}|$ 的情况下，确定单电子原子谱项的分裂。

39*.求处于上题所给条件下的电子的波函数。

40*.试确定强磁场 $[(e\hbar/2\mu c)\mathscr{E}>|E_{nlj}-E_{nlj'}|]$ 中氢原子能级的分裂。要想应用微扰论，磁场中原子的能量必须小于不再为多重能级间的能量差，即

$$\frac{e\hbar\mathscr{E}}{2\mu c}<|E_{nlj}-E_{nlj'}|.$$

41 .试确定在中等场强 $(e\hbar\mathscr{E}/2\mu c\sim|\Delta E_{jj'}|)$ 的情况下，谱项 $^2S^{\gamma}$ $(j=\frac{1}{2}$，$l=0)$ 的超精细结构分量的塞曼分裂。(磁场所引起的分裂与超精细结构间隔同数量级。)

42 .试证明，对于给定的 M_J 值的所有态，由任意磁场所引起的能量改变之总和等于

$$\frac{e\hbar}{2\mu c}\mathscr{E}M_J\Sigma\left[1+\frac{J(J+1)-L(L+1)+S(S+1)}{2J(J+1)}\right]$$

求和遍及满足条件 $L+S\geqslant J\geqslant|L-S|$，$J\geqslant M_J$ 的所有 J 值。

43 .试证明，由方程 $\hat{V}_{SL}=A\hat{S}\cdot\hat{L}$ 所给出的自旋-轨道微扰具有这样的性质：与给定的项（用 L 和 S 表征）对应的所有态的平

均微扰等于零。

44．求在 $(e\hbar\mathscr{H}/2\mu c) << |\Delta E_{JJ'}|$ 的弱磁场中原子能级的分裂，其中 $\Delta E_{JJ'}$ 是多重能级间的距离。

45．设氢原子处于均匀电场中，试证明

（a）在这个场中，量子数为 $l=n-1$，$m=n-1$ 的态的能量在一级近似下不变；

（b）位移项重心的位置不变；

（c）仅仅角动量 z 分量的符号不同的态，有相同的能量。

46*．试计算在弱电场中氢原子能级的裂距（斯塔克效应小于精细结构分裂）。

47．求氢原子在基态时的极化率。

48．求在弱电场中氢原子的磁矩。

49*．设氢原子处在中等强度的电场中（斯塔克效应与精细结构裂距同数量级）。试计算它的 $n=2$ 谱项的分裂。

50．将一个转动惯量为 I，电偶极矩为 $\boldsymbol{d}$ 的平面转子，置于均匀电场 $\mathscr{E}$ 中，$\mathscr{E}$ 位于转动平面内。若把 $\mathscr{E}$ 当作微扰，试计算对转子能级的第一个非零修正。

51．求无限深方势阱中，一个质量为 μ、带电为 e 的处于基态的粒子的极化率。

52*．设三维转子的转动惯量为 I，沿转子轴的电偶极矩为 $\boldsymbol{d}$，将它置于均匀电场中。设电场可当作微扰，试计算对转子基态能量中第一个非零修正。

53．一氢原子处于平行的磁场和电场中。试求下列各情形下谱项的分裂：

（a）弱场（斯塔克分裂和塞曼分裂的能量远小于精细结构裂距的）；

（b）中等强度的场中，主量子数 $n=2$ 的谱项。

54．一氢原子处于主量子数 $n=2$ 态，置于相互垂直的电场和磁场中。设场是强的（电子在外磁场和外电场中的能量远大于精

细结构的裂距），试确定能级的裂距。

55．利用形如$\psi=Ae^{-\alpha r^2}$的试探波函数，求氢原子结合能的上界。

56．利用与上题相同的试探波函数，求一维谐振子基态能量的上界。

57．利用上题结果，采用变分法。求一维谐振子第一激发态能量的上界。

58．有一个双电子体系在电荷为Z的核的场中运动，试用变分法求此体系的基态能量。取有效电荷为Z'的类氢波函数的乘积作为试探函数。并忽略相对论修正。

59．作为一个好的近似，我们可以取氦原子波函数的形式为：

$$\psi=\frac{Z'^3}{\pi a^3}e^{-Z'(r_1+r_2)/a}\left(Z'=\frac{27}{26}\right)\qquad\text{(见上题)}$$

证明原子周围的静电势为

$$\varphi(r)=2e\left(\frac{1}{r}+\frac{Z'}{a}\right)e^{-2Z'r/a}$$

60．试用氦原子基态的近似波函数(见§7.58题)，求出氦的抗磁磁化率。

61*.把交换效应考虑在内，试用变分法确定锂原子基态的能量。我们取下列类氢函数作为电子的本征函数：对于$1s$态电子函数的形式为$\psi_{100}=2Z_1^{3/2}e^{-Z_1r}$，而对于$2s$态电子，函数的形式为

$$\psi_{200}=(cZ_2^{3/2}e^{-Z_2r/2}(1-\gamma Z_2r)$$

其中Z_1和Z_2为变分参数，c由ψ_{200}的归一化条件确定，而γ由ψ_{100}和ψ_{200}间的正交性条件确定。如果用通常的微扰论来解这个问题，则须令$Z_1=Z_2=3$。由于上面引入Z_1和Z_2作为变分参数，故所作讨论已考虑了电子的屏蔽效应。

62．试研究在微扰势u作用下的一个原子。利用微扰论，就可以求得在一级近似下波函数的表达式为：

$$\psi=\psi_0+\sum_{n\neq 0}\frac{u_{n0}}{E_0-E_n}\psi_n$$

而能量表达式为

$$E=E_0+u_{00}+\sum_{n\neq 0}\frac{(u_{n0})^2}{E_0-E_n}$$

为了应用变分法，我们尽可能地简化ψ的形式.由于

$\sum_{n\neq 0}^{\infty} u_{n0}\psi_n=-u_{00}\psi_0+\sum_{n=0}^{\infty} u_{n0}\psi_n=\psi_0(u-u_{00})$，所以$\psi$的近似式可写成：

$$\psi\approx\psi_0\left(1+\frac{u-u_{00}}{E'}\right),$$

式中E'在许多情形下可以认为等于E_0-E_n的平均值.当近似地确定了微扰波函数以后，我们就可以应用变分法来确定能量.

试利用变分法确定在微扰势u作用下原子的能量.用$\psi=\psi_0(1+\lambda u)$形式的试探函数来找极小能量，其中λ是变分参数.

63．利用上题的结果，求出原子极化率的公式.试估算基态的氢原子和氦原子极化率的数值.

64．设原子核内$(r<a)$的势可视为常数（在物理上，就意味着核电荷分布在半径为a的球面上），试确定由于核的有限大小而引起的能级移动.

65．求半径平方的平均值为$\langle r^2\rangle$的任意球对称核电荷分布的有限扩展所引起的氢原子基态能量的一级移动.$\langle r^2\rangle$比a_B^2小得多(a_B是玻尔半径).（与§7.26题比较）.

66*.利用半经典近似，计算在Z很大的原子中，s价电子的$\psi^2(0)$的值.

67*.试用一级微扰论，把电子间的相互作用当作微扰，计算

核电荷为Z的双电子原子或离子的基态能量。

试求出所考虑的原子(或离子)的第一电离电势。

68．计算具有势能$\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2+\alpha x^3+\beta x^4$的“轻微地”非简谐振子的一级和二级能量修正。

69．两个自旋为$\frac{1}{2}$的全同粒子处一同一势场$V=\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2$之中，且它们的相互作用势能为$V'=V_0(\hbar/\mu\omega)^{1/2}\delta(x_1-x_2)$。计算无微扰的两粒子体系的最低的三个能级的一级修正，并指出哪些简并能级可以发生分裂。

70*.设有均匀电场作用在线性谐振子上。这个电场可看作微扰，它与时间的关系为：

$$\mathscr{E}(t)=A\frac{1}{\sqrt{(\pi)\tau}}e^{-(t/\tau)^2}$$

式中A为常数。(由于均匀场的作用等价于平衡点的移动，故这个问题不仅可以用微扰论求解，也可以用§3.24题的方法精确地求解。)

设加上电场以前(即$t=-\infty$)，振子处于基态，求电场作用终了时(即$t=+\infty$)振子被激发的几率，准确到一级近似。

71．试对按下面形式变化的电场求解上题：

$$\mathscr{E}(t)\sim\frac{1}{t^2+\tau^2},$$

它对应于给定的、按经典方式传递的总冲量P。

72．对于与$e^{-t/\tau}$成正比的场求解上题。这个场对应于给定的、按经典方式传递的总冲量P。

73*.设有均匀的周期电场作用在一个氢原子上，该氢原子在$t=0$时处于基态。

试确定使该原子电离所需的电场的最小频率，并用微扰论求每单位时间的电离几率。为简单起见，设末态的电子是自由的。

74*.设电子和核中质子之间有直接的静电相互作用（内转换，略去推迟效应），求当核发生偶极跃迁时，从原子中发射出一个K电子的几率。

用类氢原子中K电子的波函数作为初态波函数，并设终态电子速度比原子速度大得多。

75．一个处于定态ψ_0的原子核，在τ时间内受到一突然的碰撞，这一碰撞传给核一个速度v。

设$\tau \ll T$和$\tau \ll a/v$，其中T和a分别为电子周期和电子壳层线度的数量级，试求由于这一"碰"而使原子跃迁到态ψ_n的几率的一般表达式。

76．利用上题结果，试求由于突然一"碰"而使氢原子（开始时处于基态）激发和电离的总几率，当"碰"时质子得到动量$\boldsymbol{p}$。

讨论所得结果的适用条件。

77．一个负介子μ^-介原子的K轨道中，问它被俘获的几率与核电荷Z的关系如何？

78．设一带电介子穿过一个未受激发的氢原子（它的极化可以忽略），试求作用在该介子上的有效（平均）势φ，并在介子和核之间的距离很大和很小的情况下，求φ的极限表达式。

79．设势能$V(x,y,z)$是坐标的齐次函数（齐次度为ν）：

$$V(\lambda x,\ \lambda y,\ \lambda z) = \lambda^{\nu} V(x,y,z),$$

试证明，在分立谱的一个态中动能的平均值与势能平均值之间的关系为$2\overline{T} = \nu\overline{V}$（维里定理）。

80．试研究核质量的有限性对于具有n个电子的原子能级的影响，设$M=\infty$时的能级为已知。

81．试算出由于核质量的有限性而引起的对双电子原子（或离子）谱项的"交换"修正（即由泡利原理决定的修正），设其中一个电子处于$1s$态，电子间的静电相互作用可忽略。

82．设一带电粒子体系处于宇称完全确定的态中，试证明它的偶极矩的平均值等于零。

83．若N个带电粒子的体系在空间的有限范围内运动，试证明下列关系式(所谓“求和规则”)成立：

$$\frac{2\mu}{\hbar^2 e^2}\sum_n (E_n-E_m)|d_{mn}|^2=N$$

其中d_{mn}为体系的偶极矩的某个分量的矩阵元，求和是对体系的所有态作的，而μ和e是每个粒子的质量和电荷。

84．证明：对于质量为μ的N个相互作用粒子组成的体系，我们有

$$\sum_n (E_n-E_m)\left|\langle n|\sum_j \exp\{i(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_j)\}|m\rangle\right|^2 = N\frac{\hbar^2 q^2}{2\mu}$$

85．推导求和规则：

$$\sum_n (E_n-E_m)|p_{nm}|^2=-\frac{1}{2}\hbar^2 V''_{mm}$$

其中p_{nm}和V''_{mm}是线动量和一维体系势能的二阶导数的矩阵元，这个一维体系具有哈密顿量

$$H=\frac{\hat{p}^2}{2\mu}+V(x)。$$

86．证明求和规则

$$\begin{aligned} S_1&=\sum_{n'} f^{n',l+1}_{n,l}=\frac{(l+1)(2l+3)}{3(2l+1)}, \\ S_2&=\sum_{n'} f^{n',l-1}_{n,l}=\frac{-l(2l-1)}{3(2l+1)}, \end{aligned} \qquad (A)$$

其中

$$f^b_a=\frac{2\mu}{3\hbar^2}(E_b-E_a)[|x_{ab}|^2+|y_{ab}|^2+|z_{ab}|^2] \qquad (B)$$

而x_{ab}，y_{ab}，和z_{ab}是x,y,z的矩阵元。

§8. 分　子

1.假设分子的质心与原子核的质心近似地重合，试写出双原子分子的薛定谔方程。并用固定在核上的运动坐标系来描写电子的运动。自旋效应可忽略。

2.若考虑到电子的自旋态，并以运动坐标系ξ，η，ζ来描写这些态，试求解上题。

3.当核振动很小时，双原子分子的波函数可近似地表为下列三个函数：

$\Phi_{电子}(\xi_i, \eta_i, \zeta_i, \sigma_i, p)$，$f(\rho)$，$\Theta(\theta,\varphi)$的乘积。第一个函数描写核固定时电子的运动，第二个和第三个函数，分别描写分子的振动态和转动态。试求出双原子分子波函数中振动部分和转动部分所满足的方程。

4.试对双原子分子的情况，估计下列诸量的相对数量级：(a)电子能级间、振动能级间和转动能级间的间隔；(b)核间距离和核振动的零点振幅；(c)电子运动和核运动的特征周期及速度。

5.试确定双原子分子N_2，Br_2，LiH，HBr和CN的可能谱项。设这些分子是处于基态的两个原子结合而成的。

6.试求出确定氢原子与氦原子相互作用时电子谱项的公式。设两原子均处于基态。

7.设原子核在下列形式的势场中运动：

$$V(r)=-2D\left(\frac{1}{\rho}-\frac{1}{2\rho^2}\right)，这里\rho=\frac{r}{a}。$$

试求出双原子分子的振动能谱和转动能谱。

8.试将上题中的有效势$V(r)+(\hbar^2/2\mu r^2)K(K+1)$在其极小值附近表成振子势的形式，并求小振动的能级。

9.若$^1H^{35}Cl$的振动转动(红外)光谱带中两相邻谱线的频率差为$\Delta\nu=20.9cm^{-1}$，试求$^1H^{35}Cl$的转动惯量及核间距离。

试算出DCl光谱中相应的$\Delta\nu$值。

10. 试求HF分子的头两个转动能级的能量差与头两个振动能级的能量差之比。HF的转动惯量$I=1.35\times10^{-40}\mathrm{g\cdot cm^2}$，振动频率$\Delta\nu_{振}=3987\mathrm{cm^{-1}}$。

11. 若H_2分子的离解能和零点能分别等于4.46eV和0.26eV，试确定D_2分子的离解能。

12*. 人们常常采用莫尔斯势$V=D(1-e^{-\beta\xi})$；$\xi=(r-a)/a$，作为双原子分子势能的近似形式。试确定$K=0$时的振动能谱。

13. 试证明，双原子分子的总角动量平方的算符可表为：

$$\hat{J}^2=-\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta})+\frac{1}{\sin^2\theta}(\frac{\partial}{\partial\varphi}-i\hat{M}_\zeta\cos\theta)^2\right]+\hat{M}_\zeta^2$$

14. 设ξ，η，ζ轴是与转动刚体刚性联接在一起的正交坐标系的三根轴。试求这个刚体的角动量的ξ，η，ζ分量的算符$\hat{J}_\xi$，$\hat{J}_\eta$，$\hat{J}_\zeta$。

15. 试证明，算符$\hat{J}_\xi$，$\hat{J}_\eta$，$\hat{J}_\zeta$服从下列对易关系：

$$\hat{J}_\xi\hat{J}_\eta-\hat{J}_\eta\hat{J}_\xi=-i\hat{J}_\zeta$$
$$\hat{J}_\eta\hat{J}_\zeta-\hat{J}_\zeta\hat{J}_\eta=-i\hat{J}_\xi$$
$$\hat{J}_\zeta\hat{J}_\xi-\hat{J}_\xi\hat{J}_\zeta=-i\hat{J}_\eta$$

这些关系表明，在转动坐标系中角动量分量的算符的对易关系式，与非运动坐标系中的对易关系式不同之处，仅在于上述方程右边的符号。

16. 在经典力学中，我们有欧勒方程：

$$A\frac{dp}{dt}+(C-B)qr=0,$$

$$B\frac{dq}{dt}+(A-C)rp=0,$$

$$C\frac{dr}{dt}+(B-A)pq=0.$$

或

$$\frac{dJ_\zeta}{dt}+\left(\frac{1}{B}-\frac{1}{C}\right)J_\eta J_\xi=0，\text{等等}.$$

试证明，在量子力学中，最后的关系式取如下形式：

$$\frac{d\hat{J}_\zeta}{dt}+\frac{1}{2}\left(\frac{1}{B}-\frac{1}{C}\right)(\hat{J}_\eta\hat{J}_\xi+\hat{J}_\xi\hat{J}_\eta)=0，\text{等等}.$$

17.具有两个或更多个三次或更高次对称轴的分子（例如CH_4），可看成一个球形陀螺。这种分子的惯量椭球，退化为一个$A=B=C$的球。试确定球形陀螺的能级。

18.具有三次或更高次对称轴的分子（例如SO_2，NH_3，CH_3Cl），以及具有较低对称性或甚至完全没有对称性、但它的三个主转动惯量中有两个相等的分子，都可以看作对称陀螺（$A=B\neq C$）。

试确定对称陀螺的能级。

19.试写出一个对称陀螺的薛定谔方程。

20*.求算符

$$\hat{J}^2=-\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\left(\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}+\frac{\partial^2}{\partial\psi^2}\right)-2\frac{\cos\vartheta}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi\partial\psi}\right]$$

的本征函数。

21.试计算非对称陀螺的哈密顿量的矩阵元。

22.试确定非对称陀螺的$J=1$的能级。

23*.求非对称陀螺的$J=1$的波函数。

24.利用泡利矩阵的性质，试证明，即使考虑了自旋-自旋相互作用，双原子分子的$^2\Sigma$项仍没有分裂。

25. 试确定属于b型键的$^3\Sigma$项的多重分裂①。

① a(或b)型键是指自旋-轨道相互作用能（更恰当地说，自旋-轴相互作用能）大于（或远小于）转动能级之差的情况。

26*.当近似地解薛定谔方程时（见§8.3题），我们并未考虑算符

$$-\frac{1}{2M\rho^2}\left\{\cot\theta\,(\hat{M}_\xi - i\,\hat{M}_\eta\hat{M}_\zeta - i\,\hat{M}_\zeta\hat{M}_\eta) + \frac{2}{\sin\theta}\,\hat{M}_\eta\frac{\partial}{\partial\varphi} + 2\hat{M}_\zeta\frac{\partial}{\partial\theta}\right\} = w$$

因为它的对角矩阵元都等于零。考虑了与同一电子态（n, Λ）和振动态（v）相联系的非对角矩阵元，将导致所谓自旋的转动畸变效应。若把算符w当作微扰，试确定在这微扰的影响下，双重项能级的改变。

27.设D_2分子处于Σ态，试导出其总核自旋角动量的值与电子数K的可能值之间的关系。

28.设磁场很小，即自旋与外磁场的相互作用能比相邻的转动能级之差要小得多。试确定双原子分子谱项的塞曼分裂，设该谱项属于a型键。

29.试确定双原子分子谱项的塞曼分裂，设该谱项属于b型键。且设磁场是这样的，即自旋与外磁场的相互作用能比自旋-轴相互作用小得多。

30.在自旋-轴相互作用能比外磁场所引起的能量分裂小得多的情况下，试求解上题。

31*.确定双原子分子双重项（b型键）在磁场中的塞曼分裂。设磁场是这样的：分子的磁矩与该磁场的相互作用能和自旋-轴相互作用能同数量级。

32.试确定双原子分子的项（a型键）在电场中的分裂。设分子具有恒定的偶极矩$\boldsymbol{p}$。

33.试对属于b型键的项，求解上题。

34.考虑如下一个理想化的原子模型：一个电荷为$-e$、质量为μ的电子沿直线运动，这电子受一吸引力，吸引力的大小等于h乘电子离开固定吸引中心的位移，吸引中心在此直线上，且

一补偿电荷 $+e$。两个这样的全同的原子相距R(R很大)，它们的振动轴平行，而与连接它们中心的直线垂直。

设两原子间的相互作用能只来源于静电能。当体系处于基态时，对于R^{-1}的最低次幂，求吸引力的弥散能。

35*.一个氢原子处于基态，它与一个质子之间的距离远大于玻尔半径。试确定这个氢原子和这个质子之间的相互作用能。

36*.利用变分法估算氢分子离子H_2^+的离解能。

37*.利用微扰论，试确定彼此相隔一较大距离R的两个未激发的氢原子的相互作用。

38.两个氢原子，一个处于基态，一个处于p态，它们之间的距离远大于玻尔半径。试估算它们的相互作用能。

39*.我们来考察一个具有球对称电荷分布的原子体系。上题已证明，在彼此相距很远的这样两个原子之间，通过所谓弥散力相互作用着。弥散为具有量子特性，而且与经典极化力不同，它具有可加性。试证明，这样两个原子之间的相互作用能与其他类似原子的存在无关，即证明原子体系的相互作用能是可加的，即等于各个原子对的相互作用能之和。

40.考虑一个轴对称的分子。设λ是这个分子的轨道量子数，$f_{\alpha\beta}$是α态和β态之间跃迁的振子强度，且已知$f_{\alpha\beta}$由下式给出：

$$f_{\alpha\beta}=\frac{2\mu(E_\alpha-E_\beta)}{3e^2\hbar^2}|P_{\alpha\beta}|^2$$

其中$P_{\alpha\beta}$是电偶极矩的矩阵元。试证明f满足下列求和规则：

$$\sum_{n'} f_{\lambda n,\lambda' n'}=\frac{1+(\lambda'-\lambda)\lambda}{3},\ \lambda'=\lambda,\ \lambda-1\text{或}\lambda+1。\quad (A)$$

§9. 散 射

1*.试求低速粒子被势阱散射的散射截面（德布罗意波长比势阱线度大得多）。

2*.试求慢粒子被排斥势

$$V(r)=V_0(r<a),\ V(r)=0(r>a)$$

散射的散射截面。

3*.用散射相移表出弹性散射截面$\frac{d\sigma}{d\Omega}$按勒让德多项式展开的前三个系数。

4*.试求在势场$V=A/r^2$中的散射相移。并求出小角度的散射截面。

5.试证明，在任意外场中，粒子的散射振幅与其波函数之间的关系为

$$f(\boldsymbol{k})=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}V\psi d\tau.$$

6.试用玻恩近似和经典力学两种方法，计算在排斥场$V=A/r^2$中的微分散射截面，并确定所得公式的适用范围。

7*.试求粒子在吸引场$V(r)=-V_0e^{-r/a}$中，$l=0$的分立能级。确定这个势的散射相移δ_0，并分析δ_0与分立谱之间的关系。

8.试证明在库仑场中散射振幅的极点与分立能级之间存在着一一对应关系。

提示：利用关系式：

$$\exp(2i\delta_l)=\frac{\Gamma(l+1+i/k)}{\Gamma(l+1-i/k)}.$$

9.在玻恩近似下，计算下列势场中的微分散射截面和总散射截面：

(a) $V(r)=V_0\exp(-\alpha^2r^2)$.

(b) $V(r)=V_0\exp(-ar)$.

10.利用玻恩近似求快速电子被 (a)氢原子；(b)氢原子的库仑散射的微分截面和总截面.

11.在玻恩近似下，试计算被势

$$V(r)=A\frac{e^{-kr}}{r}$$

弹性散射的散射截面。讨论这一近似的适用性.

12.在玻恩近似下，试计算被"δ函数"势所散射的散射截面.

13.用半经典近似，对于散射势$V(r)$,推导第l个相移的表达式.

14.若$f_{com}(\theta,\ \varphi)$是质心系中的散射振幅，试确定实验室系中的散射振幅$f_{lab}(\theta',\varphi')$.

15.一个质量为μ的粒子被一非局域势场所散射，即它的薛定谔方程是

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi(r)+\int V(r,\ r')\psi(r')d^3r'=E\psi(r),$$

其中

$$V(r,\ r')=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\lambda u(r)u(r').$$

(i)试证只有s波受相互作用影响.

(ii)求出散射振幅的公式.

提示：写出薛定谔方程的积分形式，再与§9.5题相比较.

(iii)对于$u(r)=\frac{e^{-r/b}}{r}$，求s波的散射相移.

16*.一个以库仑力与转子相互作用的粒子打中一球形转子(即在给定半径a的球面上运动的粒子)。试用微扰论计算粒子被非弹性地散射到θ角，同时转子激发到第l个能级上的散射微分截面.

17*.试求快速粒子（德布罗意波长$\lambda \ll a$）被半径为a的不可穿透的球散射时的总弹性散射截面。

18.试证明散射长度（即$E\to 0$时的散射振幅反号）有下列性质：

（a）在排斥势场中，散射长度是正的；

（b）在吸引势场中，如果没有分立能级，则散射长度是负的；

（c）如果加深势阱深度时出现一个新的能级，则散射长度趋于无穷大。

提示：如果我们把薛定谔方程变成等价的积分方程（$E=0$）：

$$\psi = 1 - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \frac{V(r')\psi(r')}{|r-r'|}\,d\tau',$$

则我们求得ψ的渐近形式

$$\psi = 1 - \frac{a}{r},$$

其中散射长度

$$a = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int \psi V\,d\tau$$

是用势能和$\psi_{E=0}$表示的。

19*.试证明，在非弹性散射的普遍情形下，总散射截面$\sigma = \sigma_{弹} + \sigma_{非弹}$与$\theta=0$时的弹性散射振幅之间的关系为

$$\sigma = -\frac{4\pi}{k}\,\mathrm{Im} f(0).$$

提示：利用这些量按轨道角动量的不同值展成级数的展开式：

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(\eta_l - 1)P_l(\cos\theta),$$

$$\sigma_{弹}=\frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)|1-\eta_l|^2,$$

$$\sigma_{非弹}=\frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(1-|\eta_l|^2).$$

20.我们来讨论所谓"黑"核的极限情形。设核的半径R比中子的德布罗意波长大得多，并假定所有打在原子核上的中子都被吸收，试求出总散射截面和总吸收截面。

21*.试证被势场$V(r)$散射的相移δ_l可由变分原理

$$\delta F_l=0$$

得到，这里

$$F_l=-\frac{\int_0^\infty \mathrm{d}r\tilde{V}(r)\chi_l(r)\{\chi_l(r)-\int_0^\infty \mathrm{d}r'\chi_l(r')\tilde{V}(r')G(r,r')\}}{\left\{\int_0^\infty \mathrm{d}r\tilde{V}(r)\chi_l(r)j_l(kr)\right\}^2},$$

其中$\tilde{V}(r)=(2\mu/\hbar^2)V(r)$，$\chi_l$是波函数的径向部分（参阅，知§9.1题），$j_l$是球贝塞尔函数，而$G(r,r')$则是径向薛定谔方程的格林函数。

22.讨论相互作用能为$V(r)$的两个全同粒子的碰撞。试求在短程力情形下低速全同粒子的有效散射截面。

23.试计算电子-电子散射或者α粒子-α粒子散射的弹性散射截面。

24.中子被质子的散射依赖于中子和质子的总自旋。在低能情形下，三重态($S=1$)的散射截面$\sigma_3=4\pi|f_3|^2\approx 2\times10^{-24}\mathrm{cm}^2$；单态（$S=0$）的截面$\sigma_1=4\pi|f_1|^2\approx78\times10^{-24}\mathrm{cm}^2$。

引进算符

$$\hat{f}=\frac{f_1+3f_3}{4}+\frac{f_3-f_1}{4}(\hat{\sigma}_n\cdot\hat{\sigma}_p).$$

容易看出，对于三重态和单态，这个算符的本征值分别为f_3和f_1。为了确定任意极化的中子的散射截面，必须求出算符f^2的平均值，

$$\sigma = 4\pi \overline{f^2}.$$

设二函数$\begin{pmatrix} e^{-i\alpha}\cos\beta \\ e^{i\alpha}\sin\beta \end{pmatrix}$描述入射中子的自旋态（中子自旋方向的极角为$\Theta = 2\beta$，$\Phi = 2\alpha + \frac{\pi}{2}$；见§4.21题），而用函数$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$描述质子的自旋态（质子的自旋与$z$轴平行），试求在这种情形下中子从质子散射的截面。

25.设碰撞前中子的自旋沿z轴方向，质子的自旋方向与此相反。试求慢中子被质子散射时，其自旋改变方向的几率。

26.慢中子被氢分子散射。如果慢中子的能量比热运动的能量小很多（$\lambda \gg 10^{-8}$cm，即入射中子的波长比氢分子中两质子间的距离大得多），则慢中子被氢分子散射的散射振幅等于被两质子散射的散射振幅之和。

因而有

$$f = \frac{f_1 + 3f_3}{2} + \frac{f_3 + f_1}{4}(\hat{\sigma}_n \cdot \hat{\sigma}_{p1} + \hat{\sigma}_{p2})$$

氢分子中两质子的自旋可能平行(正氢)，也可能反平行(仲氢)。

试求中子被正氢或仲氢散射的散射截面。

27. 未极化的中子被自旋为I的核散射，推导散射截面和散射长度a_+和a_-之间的关系。a_+和a_-分别对应于中子的自旋平行或反平行于核自旋的情况。

28. 一个自旋为$\hbar/2$的中子和铁磁体中的一个原子间的相互作用能可近似地表为

$$V(r) = A\delta(r) + (n \cdot \sigma)f(r),$$

其中n是原子的磁化方向上的单位矢量，

并且

$$f(r) = B,\ r \ll a;\quad f(r) = 0,\ r \gg a.$$

如果$a^2B \ll A$，对于慢中子（$\lambda \gg a$）束的两种可能的自旋取向，试计算散射截面。

试计算慢中子束通过厚度为L、单位体积有N个原子的饱和铁块后的极化强度$P=(I_+-I_-)/(I_++I_-)$。这里I_+和I_-分别是自旋与磁化方向平行和反平行的中子束的透射强度。

29*.试讨论自旋为1/2的粒子被标量（零自旋）粒子的弹性散射。求出有自旋反转的粒子的微分散射截面。讨论S波和P波的散射。

30.我们来讨论下列核反应：

$$A+a\to C\to B+b.$$

试问，在质心系中，或者同样地在复核静止的坐标系中，对于下列三种情形，此核反应的产物的角分布如何：

（a） 复核的自旋等于零；

（b） 反应产物相对运动的轨道角动量等于零；

（c） 反应粒子相对运动的轨道角动量等于零（复核的自旋不为零）。

31*.试求核子-介子系统的总同位旋平方I^2及其z-分量I_z的算符的本征函数。

32*.在质心系中，介子被核子的散射可归结为粒子被固定散射中心的散射。在远离散射中心的地方，自旋的z分量S_z和同位旋的z分量τ_z都具有确定值的入射波，可写成下列形式：

$$e^{ikz}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\delta(\pi-\pi_i)\delta(n-\tau_z).$$

量π_i可取下列值：

对于π^+介子：$\pi_i=1$，$\delta(\pi-1)=\varphi_+$，

对于π^0介子：$\pi_i=0$，$\delta(\pi)=\varphi_0$，

对于π^-介子$\pi_i=-1$，$\delta(\pi+1)=\varphi$，

而τ_z可取值如下：

对于质子：$\tau_z=\frac{1}{2}$，$\delta\left(n-\frac{1}{2}\right)=\psi_p$，

对于中子：$\tau_z=-\frac{1}{2}$，$\delta\left(n+\frac{1}{2}\right)=\psi_n$，

试将入射波按算符$\hat{J}^2$，$\hat{J}_z$，$\hat{I}^2$，$\hat{I}_z$的本征函数展开。

提示：对于介子-核子系统，宇称$(-1)^I$，总角动量J和同位旋I都是运动积分。

因为在这样的系统中，总自旋等于1/2，所以轨道角动量l也是守恒量。如果将入射波按算符的本征函数展开，这些算符的绝对值是不变的，则可以用对l及I的求和来代替对J及I的求和。

33.证明弹性散射过程：

$$\pi^+ + p \to \pi^+ + p$$

只能发生在$I=\frac{3}{2}$的同位旋态上，而

$$\pi^+ + n \to \pi^+ + n$$

能发生在$I=\frac{3}{2}$和$I=\frac{1}{2}$的两个同位旋态上。

34*.试对下列三种情形：

$$\pi^+ + p \to \pi^+ + p,$$
$$\pi^- + p \to \pi^- + p,$$
$$\pi^- + p \to \pi^0 + n,$$

将π介子被核子散射的散射振幅用相移表示出来。

35*.假设同位旋不变性成立，试证明所有可能的介子-核子反应的散射振幅，都可以用上题中那些散射振幅来表示。

试用同位旋为$\frac{3}{2}$和$\frac{1}{2}$的态的散射振幅来表示这些量。

36*.用相移表示出下列反应的总截面：

$$\pi^+ + p \to \pi^+ + p,$$
$$\pi^- + p \to \pi^- + p,$$

$$\pi^- + p \to \pi^0 + n.$$

37*.在低能范围内，当介子的波长比介子-核子的力程大得多时，对散射的主要贡献仅来自S波和P波。

试用相移表示出下列反应的微分散射截面：

$$\pi^+ + p \to \pi^+ + p,$$

$$\pi^- + p \to \pi^- + p,$$

$$\pi^- + p \to \pi^0 + n.$$

38*.π介子束被未极化的质子组成的靶（即靶中$S_z = \frac{1}{2}$与$S_z = -\frac{1}{2}$的质子的数目相等）所散射。可以证明，在散射过程中，原来未极化的质子被极化了。若只考虑S波和P波，试确定质子极化的大小。

39.试利用细致平衡原理，求出中子被质子辐射俘获的截面和氘核的光致离解截面之间的关系。

40.设由π^+介子和π^-介子组成的系统处于轨道角动量l具有确定值的态中。

试找出量子数l为偶数或奇数时，散射过程

$$\pi^- + \pi^+ \to \pi^0 + \pi^0$$

的选择定则。

41.当标量π介子（即自旋为零，宇称为偶的π介子）被S态的“介子-氘”俘获时，试证明散射过程

$$\pi^- + d \to n + n$$

是被禁戒的。

42.试根据过程

$$\pi^- + d \to n + n + \pi^0$$

的几率非常小这一实验事实，证明π^-和π^0介子具有同样的内禀宇称。假设π^-介子俘获导致“介子-氘”的S态。

43.假设$p+p$反应在能域阈附近进行，因而终态的有效相

角动量等于零。试证明，如果π^0在P态中出现，则在$p+p$碰撞中产生一赝标量π^0介子是禁戒的。

44.试问两个核子系统的同位旋的本征函数和本征值是什么？

45.试证明

$$\frac{d\sigma(p+d\to d+n+\pi^+)}{d\sigma(p+d\to d+p+\pi^0)}=2,$$

式中$d\sigma$是相应反应的微分截面。这两个反应的相对能量、偏离角和自旋的相对取向是相同的。

46.当两核子碰撞时，形成氘核并产生π介子的反应为

$$p+p\to d+\pi^+ \qquad (1)$$

和

$$n+p\to d+\pi^0. \qquad (2)$$

试证明它们的微分散射截面有如下关系：

$$\frac{d\sigma(p+p\to d+\pi^+)}{d\sigma(n+p\to d+\pi^0)}=2.$$

47.如果Λ°超子$(T=0)$的衰变遵守选择定则$\Delta T=\frac{1}{2}$，求两种衰变方式$\Lambda^\circ\to\pi^-+p$和$\Lambda^\circ\to\pi^0+N$的分支比。

48.若散射过程

$$n+p\to p+p+\pi^-$$

和

$$n+p\to n+n+\pi^+$$

是在同样的相对能量，偏离角和自旋相对取向的情况下进行的。试证明它们的微分散射截面相同。

49.试证自由电子既不能吸收也不能发射光子。

§10. 产生算符和湮没算符；密度矩阵

1.设 $\varphi_n(j)$ 是一个完备的正交归一的单粒子函数集合，第 j 个粒子的两个自变数，位置坐标 r_j 和自旋坐标 s_j 一并用自变数 j 表示。考虑一 N 个全同粒子体系，设 $P1$，$P2$，…，Pj，…，PN 表示 1，…，j，…N 的一个排列，并设 ϵ_P 是一函数；如果我们考虑的是 N 个费密子体系，则对于偶排列 $\epsilon_P=+1$，对于奇排列 $\epsilon_P=-1$；如果我们考虑的是 N 个玻色子体系，则总有 $\epsilon_P=+1$。运用狄拉克右矢和左矢符号，证明右矢集合

$$|i_1, i_2, \cdots, i_N\rangle = \frac{1}{N!}\sum_P \epsilon_P \varphi_{i_1}(P1)\varphi_{i_2}(P2)\cdots\varphi_{i_N}(PN), \tag{1a}$$

这里求和遍及 1，…，N 的 $N!$ 个全部可能的排列。而左矢集合

$$\langle i_1, i_2, \cdots, i_N| = \frac{1}{N!}\sum_P \epsilon_P \varphi^*_{i_1}(P1)\varphi^*_{i_2}(P2)\cdots\varphi^*_{i_N}(PN), \tag{1b}$$

这里 φ^* 是 φ 的厄密共轭，如果我们利用非零自旋粒子的旋量，则满足正交归一关系

$$\langle i'_1, i'_2, \cdots, i'_N | i_1, i_2, \cdots, i_N\rangle = \frac{1}{N!}\sum_P \epsilon_P \delta(i_1-i'_{P1})\cdots$$

$$\delta(i_N-i'_{PN}) \tag{2}$$

在此我们假定量子数 i 是一个连续参量。如果它是一个分立参量，那么(2)中的狄拉克 δ 函数必须代以克朗内克符号。

进一步证明，集合(1)满足闭合关系。

2.如果 $|\Psi\rangle$ 是一个 N 粒子体系的适当对称化的波函数，且 $\hat{\Omega}$ 是一个算符，它作用于按上题集合 (1) 张开的希尔伯空间中的函数上。试将 $|\Psi\rangle$ 和 $\hat{\Omega}$ 通过这个集合表示出来。

3.考虑对应于 0 粒子，1 粒子，…，N 粒子系的希尔伯空间

的直积空间。这也是一个希尔伯空间（称为巨希尔伯空间——译者）。这巨希尔伯空间由正交归一完备集合

$$|0\rangle,\ |i\rangle,\ |i_1, i_2\rangle,\ \cdots,\ |i_1, i_2, i_3, \cdots, i_N\rangle,\ \cdots, \qquad (1)$$

所确定，其中$|0\rangle$是真空态，而其他各态由§10.1题所确定。产生算符$\hat{a}^+(i)$由方程

$$\hat{a}^+(i)|i_1, \cdots, i_N\rangle = \sqrt{(N+1)}\,|i, i_1, \cdots, i_N\rangle \qquad (2)$$

定义，它的作用是从相应于N粒子的本征矢产生一个相应于$N+1$粒子的本征矢。试通过$\hat{a}^+(i)$和真空态表示$|i_1, i_2, \cdots, i_N\rangle$。

4.若$[\hat{A}, \hat{B}]_\pm = \hat{A}\hat{B} \pm \hat{B}\hat{A}$是$\hat{A}$和$\hat{B}$的对易子和反对易子，且$\hat{a}^+(i)$是上题中所定义的算符，试证

对于玻色子体系 $[\hat{a}^+(i), \hat{a}^+(j)]_- = 0$,

对于费密子体系 $[\hat{a}^+(i), \hat{a}^+(j)]_- = 0$.

5.如果我们按照方程

$$\langle i_1, \cdots, i_N|\hat{a}(i) = \sqrt{(N+1)}\,\langle i, i_1, i_2, \cdots, i_N| \qquad (1)$$

引入一个算符$\hat{a}(i)$，即$\hat{a}^+(i)$的厄密共轭算符，试证明：

(i) 对于玻色子，$[\hat{a}(i), \hat{a}(j)]_- = 0$,

对于费密子，$[\hat{a}(i), \hat{a}(j)]_+ = 0$;

(ii)

$$\hat{a}(i)|i_1, \cdots, i_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\{\delta(i-i_1)|i_2, \cdots i_N\rangle + \cdots$$

$$+(\pm 1)^{N-1}\delta(i-i_N)|i_1, \cdots, i_{N-1}\rangle\}, \qquad (2)$$

其中上面（下面）的符号表示玻色（费密）子体系。方程(2)表明，$\hat{a}(i)$可以解释为湮没算符。

6.证明湮没算符$\hat{a}(i)$和产生算符$\hat{a}^+(i)$满足关系式

对于玻色子，$[\hat{a}(i), \hat{a}^+(j)]_- = \delta(i-j)$,

对于费密子，$[\hat{a}(i), \hat{a}^+(j)]_+ = \delta(i-j)$.

7.如果算符$\hat{\Omega}$的形式为

$$\hat{\Omega} = \sum_k \hat{\Omega}_k^{(1)} + \frac{1}{2}\sum_{k,l}\hat{\Omega}_{kl}^{(2)} \qquad (1)$$

其中 $\bar{\Omega}_k^{(1)}$ 和 $\bar{\Omega}_{kl}^{(2)}$ 分别是单粒子算符和双粒子算符，它们的差别仅在于它们所作用的粒子。试用湮没算符和产生算符表示 $\bar{\Omega}$。

8.考虑一个局限于一有限体积 v 中的体系，于是对于原来正交归一完全集合可用一个平面波的集合表示

$$\varphi_i \to \frac{1}{\sqrt{v}} e^{i(k\cdot r)}, \tag{1}$$

此时，k 构成一个完全集合。在这种情况下，人们通常将 $\hat{a}^+(k)$，$\hat{a}(k)$ 写成 $\hat{a}_k^+$，$\hat{a}_k$。

如果上题中的 $\bar{\Omega}_j^{(1)}$ 和 $\bar{\Omega}_{ij}^{(2)}$ 的形式是

$$\bar{\Omega}_j^{(1)} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_j^2 + V(r_j),\quad \bar{\Omega}_{ij}^{(2)} = U(r_{ij}), \tag{2}$$

这里 r_j 是第 j 个粒子的位置坐标，而 $r_{ij} = |r_i - r_j|$，试用 $\hat{a}_k^+$ 和 $\hat{a}_k$ 表示 $\bar{\Omega}$。

9.给出 $\hat{a}^+(i)\hat{a}(i)|i_1, \cdots, i_N\rangle$ 的表达式。算符

$$\hat{n}(i) = \hat{a}^+(i)\hat{a}(i)$$

的物理意义是什么？

10.试证明，若 $\hat{a}_k^+$ 产生一个动量为 $\hbar k$、能量为 ϵ_k 的粒子，则 $\hat{a}_k^+$ 使这个粒子从自由粒子哈密顿算符

$$\hat{H} = \sum_k \epsilon_k \hat{a}_k^+ \hat{a}_k$$

的任一本征态变到能量相差 ϵ_k 的另一本征态上。

11.我们定义薛定谔场算符为

$$\hat{\Psi}^+(r) = \frac{1}{\sqrt{v}}\sum_k \hat{a}_k^+ e^{i(k\cdot r)},\quad \Psi(r) = \frac{1}{\sqrt{v}}\sum_k \hat{a}_k e^{i(k\cdot r)},$$

其中 v 是体系的体积，而 $\hat{a}_k$ 和 $\hat{a}_k^+$ 是§10.8题中定义的算符。试证[6]：

$$[\hat{\Psi}(r), \Psi^+(r')]_\pm = \delta(r - r'),$$

$$[\hat{\Psi}(\boldsymbol{r}),\ \hat{\Psi}(\boldsymbol{r}')]_{\pm}=[\hat{\Psi}^{+}(\boldsymbol{r}),\ \hat{\Psi}^{+}(\boldsymbol{r}')]_{\pm}=0$$

其中上边（或下边）的符号表示费密子（或玻色子）体系。

这些算符的物理意义是什么？

12.若玻色子体系的哈密顿量有如下形式：

$$\hat{H}=\sum_{i}\left\{-\frac{\hbar^{2}}{2\mu}\nabla_{i}^{2}+V(\boldsymbol{r}_{i})\right\}+\frac{1}{2}\sum_{i,j}U(\boldsymbol{r}_{i},\ \boldsymbol{r}_{j}),$$

用上题的算符 $\hat{\Psi}^{+}(\boldsymbol{r})$ 和 $\hat{\Psi}(\boldsymbol{r})$ 表示 $\hat{H}$。

13.考虑哈密顿量

$$\hat{H}=\hat{H}_{0}+\hat{H}_{1},\quad \hat{H}_{0}=\epsilon\hat{a}^{+}\hat{a},\quad \hat{H}_{1}=\lambda\epsilon(\hat{a}^{+}+\hat{a}).$$

其中 $\hat{a}$ 和 $\hat{a}^{+}$ 是玻色子的湮没算符和产生算符，对于 λ 的二次项，求下列两种情况下的能量移动：(i)把 $\hat{H}_{1}$ 看作微扰；(ii) 精确地求解。

14*.考虑两个相互作用的一维谐振子组成的体系，其哈密顿量为

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^{2}}{2\mu}\frac{\partial^{2}}{\partial x_{1}^{2}}-\frac{\hbar^{2}}{2\mu}\frac{\partial^{2}}{\partial x_{2}^{2}}+\frac{1}{2}\mu\omega^{2}(x_{1}^{2}+x_{2}^{2}+2\lambda x_{1}x_{2}),$$

其中 λ 是实数，且 $\lambda<1$。用适当的产生算符和湮没算符表示 $\hat{H}$ 后，求此体系的能级。

15.设 $\hat{a}_{k}$ 和 $\hat{a}_{-k}$ 是对应着单粒子态 $|\boldsymbol{k}\rangle$ 和 $|-\boldsymbol{k}\rangle$ 的费密子湮没算符。如果按下式定义新的湮没算符

$$\hat{b}_{k}=u_{k}\hat{a}_{k}+v_{k}\hat{a}_{-k}^{+},\quad \hat{b}_{-k}=u_{-k}\hat{a}_{-k}+v_{-k}\hat{a}_{k}^{+},\qquad (1)$$

其中 u_{k}，v_{k}，u_{-k}，v_{-k} 是实系数，求 $\hat{b}_{k}$ 和 $\hat{b}_{-k}$ 还是费密子湮没算符的条件。

如果态 $|0\rangle$ 是由条件

$$\hat{b}_{k}|0\rangle=\hat{b}_{-k}|0\rangle=0$$

来表征的，试计算在态 $|0\rangle$ 中 $\hat{a}_{k}^{+}\hat{a}_{k}$ 的期望值。

16.如果 $\hat{a}_{k}$ 和 $\hat{a}_{-k}^{+}$ 是玻色子算符，那么上题的答案是什么？

17*考虑一个玻色子体系，描述它的哈密顿量为

$$\hat{H}=-\sum_{j=1}^{N}\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_j^2+\sum_{i,j=1}^{N}V(r_{ij}) \tag{1}$$

（与§10.8题比较）。求证，如果相互作用很弱，则体系的较低能量本征值将由下式近似地给出：

$$E=E_0+\sum_k \varepsilon_k n_k \tag{2}$$

其中n_k是某个准粒子的占有数算符的本征值，求E_0和ε_k之表达式。

18*.指出怎样才能将玻色子哈密顿量

$$\hat{H}=\sum_{i=1}^{N}L_{ii}a_i^{\dagger}a_i+\sum_{i\neq j}L_{ij}a_i^{\dagger}a_j,\quad L_{ij}=L_{ji}^{*} \tag{1}$$

化为对角形式：

$$\hat{H}=\sum_{k=1}^{N}E_k b_k^{\dagger}b_k, \tag{2}$$

以及怎样才能求出准粒子的能量E_k。

19*.玻色子的哈密顿量为

$$\hat{H}=\sum_{i,j}L_{ij}a_i^{\dagger}a_j+\frac{1}{2}\sum_{i,j}\left(M_{ij}a_i^{\dagger}a_j^{\dagger}+M_{ij}^{*}a_i a_j\right) \tag{1}$$

其中

$$L_{ij}=L_{ji}^{*},\quad M_{ij}=M_{ji}, \tag{2}$$

指出怎样才能把$\hat{H}$化为对角形式：

$$\hat{H}=E_0+\sum_k E_k b_k^{\dagger}b_k \tag{3}$$

20.人们常常处理这样的体系，它是某个大体系的一部分。

令 x 和 q 分别表示较小体系的坐标和较大体系剩余部分的坐标。这较大体系用一个归一化的波函数 $\Psi(q, x)$ 描写，这函数不一定必须写成仅依赖于 x 和 q 的函数的乘积。令 $\hat{A}$ 是一个只作用于 x 的算符，设 $\hat{H}$ 是描述较小体系的哈密顿量，且设密度矩阵或密度算符 $\hat{\rho}$ 在坐标表象中定义为

$$\langle x|\hat{\rho}|x'\rangle=\int\Psi^*(q, x')\Psi(q, x)\mathrm{d}q \qquad (1)$$

这里积分遍及较大体系剩余部分的全部自由度。

(i)在较大体系用波函数 $\Psi(q, x)$ 描述的情况下，借助于 $\hat{\rho}$ 表示 $\hat{A}$ 的期望值。

(ii)$\hat{\rho}$ 的归一化条件是什么？

(iii)求 $\hat{\rho}$ 的运动方程。

21.若上题中的波函数 $\Psi(q, x)$ 能够写成如下形式

$$\Psi(q, x)=\Phi(q)\chi(x) \qquad (1)$$

则我们所处理是所谓纯态情况。

试证，一个纯态的充要条件是 $\hat{\rho}$ 是幂等的，即

$$\hat{\rho}^2=\hat{\rho}. \qquad (2)$$

22.如果较小体系的坐标是分立的变量，密度矩阵就特别有用。以一个自旋为 $\frac{1}{2}$ 粒子的体系为例，如果我们只考虑它的自旋变量，则 q 可以是粒子的位置坐标。

(i)试证描写自旋为 $\frac{1}{2}$ 的粒子的密度矩阵能够写成

$$\hat{\rho}=\frac{1}{2}\{\hat{I}+(\boldsymbol{P}\cdot\hat{\sigma})\}, \qquad (1)$$

这里 $\hat{\sigma}_x$，$\hat{\sigma}_y$ 和 $\hat{\sigma}_z$ 是泡利矩阵（见§4.14题），$\hat{I}$ 是 2×2 单位矩阵。

(ii)在(1)式中矢量 $\boldsymbol{P}$ 的物理意义是什么？

(iii)如果体系处于一个恒定磁场 $\vec{\mathscr{H}}$ 中，求 $\boldsymbol{P}$ 的运动方程。

23.仿照对自旋为1/2粒子极化的分析（见上题），可用一个二分量波函数$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$来描写光量子，这里$|a|^2$和$|b|^2$是光子在两相互垂直方向上偏振的几率，或者是光子左旋或右旋圆偏振的几率。

如果我们想要确定光子的偏振，可以例如用一个滤光片，我们把它叫作探测器，尽管严格地讲它不是一个探测器，只是一个测量装置。这样一个滤光片相当于得到一个纯态，这个纯态用波函数

$$\psi^{\mathrm{det}}=c_1^{\mathrm{det}}\psi_1+c_2^{\mathrm{det}}\psi_2 \qquad (1)$$

来描述，在上式中

$$\psi_1=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\quad \psi_2=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \qquad (2)$$

它相当于两个偏振态的波函数。这纯态相当于探测器的密度矩阵$\hat{\rho}^{\mathrm{det}}$，其矩阵元是

$$\hat{\rho}_{ij}^{\mathrm{det}}=c_i^{\mathrm{det}}(c_j^{\mathrm{det}})^*, \qquad (3)$$

写成矩阵形式是

$$\hat{\rho}^{\mathrm{det}}=\begin{Vmatrix} |c_1^{\mathrm{det}}|^2 & c_1^{\mathrm{det}}(c_2^{\mathrm{det}})^* \\ (c_1^{\mathrm{det}})^*c_2^{\mathrm{det}} & |c_2^{\mathrm{det}}|^2 \end{Vmatrix} \qquad (4)$$

试求出由$\hat{\rho}^{\mathrm{det}}$描写的探测器对于密度矩阵$\hat{\rho}$所描写的光子的吸收几率的表达式。

24.一个电子和一个正电子的湮没过程的结果产生一对光子A和B，可用下式给出的1×4密度矩阵描述：

$$\hat{\rho}_{\mathrm{AB}}=\frac{1}{4}\{\hat{I}_{\mathrm{A}}\hat{I}_{\mathrm{B}}-(\hat{\omega}_{\mathrm{A}}\cdot\hat{\omega}_{\mathrm{B}})\}, \qquad (1)$$

这里$\hat{I}_{\mathrm{A}}$，$\hat{\omega}_{\mathrm{A}}$（$\hat{I}_{\mathrm{B}}$，$\hat{\omega}_{\mathrm{B}}$）是作用于光子A(B)的偏振波函数上的

2×2矩阵，而 $\hat{\omega}_{Ax}(\hat{\omega}_{Bx})$，$\hat{\omega}_{Ay}(\omega_{By})$ 和 $\hat{\omega}_{Az}(\omega_{Bz})$ 具有与泡利矩阵 $\hat{\sigma}_x$，$\hat{\sigma}_y$ 和 $\hat{\sigma}_z$ 相同的形式。

试计算这两个光子的偏振以及这两个偏振的关联。

25. 当自旋为 $\frac{1}{2}$ 的粒子被一零自旋的靶散射时，一个2×2的散射矩阵 $\hat{S}$ 由下式确定：

$$\psi_f=\hat{S}\psi_i, \tag{1}$$

式中 ψ_i 和 ψ_f 分别是初始的波函数和散射后的波函数。如果

$$\hat{S}=g\hat{I}+h(\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}), \tag{2}$$

式中 $|g|^2+|h|^2=1$，而 $\boldsymbol{n}$ 是单位矢量，若散射前偏振为零，试求散射后的偏振。

§ 11. 相对论波动方程①

为了我们把通常的代换

$$p_\mu \to -i\hbar\partial_\mu, \quad p_\mu \equiv \mathbf{p}, \ iE/c, \tag{1}$$

代入下列经典的相对论哈密顿方程中

$$\sum_\mu \left(p_\mu - \frac{e}{c}A_\mu\right)^2 + m^2c^2 = 0, \quad A_\mu \equiv \mathbf{A}, \ i\phi \tag{2}$$

其中A和ϕ分别是电磁场的矢势和标势，就可得到电磁场中一个质量为m，带电为e的粒子的克莱因-戈登方程：

$$\sum_\mu \left(\partial_\mu - \frac{ie}{\hbar c}A_\mu\right)^2 \psi - \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\psi = 0. \tag{3}$$

在自由粒子的情况下，克莱因-戈登方程为

$$\sum_\mu \partial_\mu^2 \psi - \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\psi = 0,$$

$$\nabla^2\psi - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} - \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\psi = 0 \tag{4}$$

若我们引入电荷密度ρ和电流密度$\boldsymbol{j}$如下式

$$j_\mu \equiv \boldsymbol{j}, \ ic\rho \tag{5}$$

$$j_\mu = \frac{e\hbar}{2mi}(\psi^*\partial_\mu\psi - \psi\partial_\mu\psi^*), \tag{6}$$

在自由粒子情况下，波函数是满足方程(4)的。试证j_μ满足连续性方程：

$$\sum_\mu \partial_\mu j_\mu = 0. \tag{7}$$

注意，我们引入电荷密度，而不引进几率密度。这与ρ/e不

---

① 在本节中，我们采用第四坐标$x_4 = ict$，且用希腊字母指标如μ代表1，2，3，4。用拉丁字母指标k代表从1到3，而不采用重复指标的约定。在本节中，用m表示质量，因为μ被用作指标；并且用∂_μ作为$\partial/\partial x_\mu$的缩写符号。

是正定的事实有关。它所引起的复杂化，在此我们不拟考虑。

将j_μ推广，使它对于带电粒子在电磁场中运动，因而ψ满足方程(3)的情况，仍满足方程(7)。

2.证明在非相对论极限情况下，对于自由粒子来说的克莱因-戈登方程以及相应的j_μ将导致薛定谔方程以及相应的j和ρ的表达式。

3.试求克莱因-戈登方程对应于确定动量值的自由粒子解。并求相应的电荷密度。

4.在上题中，我们曾见到，在克莱因-戈登方程的情况下，存在着一个附加的自由度。这提醒我们应该采用二分量波函数。同时这样也是方便的：如果能得到一个波动方程，它只含时间的一阶导数，那么，给出$t=0$时刻的波函数，也就确定了以后时刻的情况。因此我们写出：

$$\psi=\varphi+\chi \quad i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=mc^2(\varphi-\chi)。 \tag{1}$$

(i)求出φ和χ的一阶微分方程，它们等价于自由粒子的克莱因-戈登方程。

(ii)运用2×2矩阵$\hat{\tau}$和$\hat{1}$把这些方程用旋量形式表出。这里的$\hat{1}$是2×2的单位矩阵，而$\hat{\tau}_1$，$\hat{\tau}_2$和$\hat{\tau}_3$是具有与泡利矩阵$\hat{\sigma}_x$、$\hat{\sigma}_y$和$\hat{\sigma}_z$形式相同的矩阵（见§4.14题）。

(iii)用旋量$\Psi=\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}$表示电荷密度。

5.用上题中的函数φ和χ，求出相应于完全确定动量值的克莱因-戈登方程的自由粒子解。求这些解的非相对论极限。

6.试证明，轨道角动量算符$[r\times p]$与§11.4题所给的克莱因-戈登哈密顿量对易。这证实了一个说法：克莱因-戈登方程描述了一个相对论性零自旋粒子。

7.求一个π介子原子的能级，这个原子是由一个带电Ze的核与一个π^-介子组成的体系，可以假定这个核是无限重的。

8.在§11.1题中，我们曾看到：如果我们从该题中的克莱因-戈登方程(3)或(4)出发，那么，几率密度不一定是正定的。它联系一个事实：给定$t=0$时刻的波函数ψ并不能决定以后时刻的ψ。狄拉克提出，应从多分量波函数或旋量Ψ

$$\Psi=\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \vdots\\ \vdots\end{pmatrix} \tag{1}$$

出发，并要求(a)电荷密度由下式

$$\rho=e\sum_j \psi_j^*\psi_j \tag{2}$$

给出，以及(b)ψ_j满足一阶微分方程，它可写成

$$\frac{1}{c}\frac{\partial\psi_j}{\partial t}+\sum_i\sum_{k=1}^{3}\alpha_{ji}^{(k)}\frac{\partial\psi_i}{\partial x_k}+\frac{imc}{\hbar}\sum_i\beta_{ji}\psi_i=0 \tag{3}$$

或写成矩阵形式

$$\frac{1}{c}\frac{\partial\Psi}{\partial t}+(\hat{\alpha}\cdot\nabla)\Psi+\frac{imc}{\hbar}\hat{\beta}\Psi=0 \tag{4}$$

这里$\hat{\alpha}$是分量为$\hat{\alpha}_1$，$\hat{\alpha}_2$，$\hat{\alpha}_3$的矢量。

为了使ρ满足连续性方程，并使每一个ψ_j满足§11.1题中的方程(4)，试求矩阵$\hat{\alpha}$，$\hat{\beta}$应满足的条件。

9.试证明，如果我们引入矩阵

$$\hat{\gamma}_\mu=\hat{\gamma},\ \hat{\gamma} \tag{1}$$

其中

$$\hat{\gamma}=-i\hat{\beta}\hat{\alpha},\ \hat{\gamma}_4=\hat{\beta} \tag{2}$$

那么上题中的狄拉克方程(4)可以写成如下形式：

$$\left\{\sum_\mu\hat{\gamma}_\mu\hat{p}_\mu-imc\right\}\Psi=0\quad \hat{p}_\mu=-i\hbar\partial_\mu \tag{3}$$

用$\hat{\gamma}_\mu$表示时，四维矢j_μ的表达式是什么？

10.化简由上题定义的矩阵$\hat{\gamma}_\mu$的下列乘积：

$$\sum_\mu \hat{\gamma}_\mu\hat{\gamma}_\mu, \qquad \sum_\mu \hat{\gamma}_\mu\hat{\gamma}_\nu\hat{\gamma}_\mu,$$

$$\sum_\mu \hat{\gamma}_\mu\hat{\gamma}_\lambda\hat{\gamma}_\nu\hat{\gamma}_\mu, \qquad \sum_\mu \hat{\gamma}_\mu\hat{\gamma}_\lambda\hat{\gamma}_\nu\hat{\gamma}_\rho\hat{\gamma}_\mu.$$

11.我们可以从$\hat{\gamma}_\mu$构造如下16个元素：

$$\hat{1},\ \hat{\gamma}_\mu,\ \hat{\gamma}_\mu\hat{\gamma}_\nu(\mu\neq\nu),\ \hat{\gamma}_\mu\hat{\gamma}_\nu\hat{\gamma}_\rho(\mu\neq\nu\neq\rho),$$

$$\hat{\gamma}_1\hat{\gamma}_2\hat{\gamma}_3\hat{\gamma}_4=\hat{\gamma}_5.$$

如果用$\hat{\Gamma}_j(j=1, 2, \cdots, 16)$表示这些元素，求证：

(i) $\hat{\Gamma}_j^2=\hat{1}$,

(ii) $\hat{\Gamma}_j\hat{\Gamma}_k=\lambda\hat{\Gamma}_l$，这里$\lambda=\pm1$或$\pm i$,

(iii) $Tr\hat{\Gamma}_k=0$，除非$\hat{\Gamma}_j=\hat{1}$.

12.求相应于具有完全确定的p_μ值的态的自由粒子狄拉克方程的解。[§11.8题的方程(4)]。

13.试求上题中得到的自由粒子的狄拉克方程的解的非相对论极限，以及电荷密度和电流密度的非相对论极限。

14.一个具有动量$\boldsymbol{p}_1(=0, 0, p_1)$的电子从$z$轴负方向入射到一个势阶上，此电子入射时自旋沿$z$轴正向。势阶由如下的势场描述：

$$z\leqslant0\text{时},\ \boldsymbol{A}=0,\ \phi=0;$$

$$z>0\text{时},\ \boldsymbol{A}=0,\ \phi=V_0/e, \qquad (i)$$

其中V_0是一个常数，它满足不等式

$$0<V_0<E-mc^2$$

在只考虑正能态的情况下，试求反射系数和透射系数的表达式。

15.在海森伯表示中试求由狄拉克方程描写的自由粒子的位置和速度。

16.试确定在洛伦兹变换

$$x'_\mu = \sum_\nu a_{\mu\nu} x_\nu \qquad (1)$$

之下狄拉克波函数如何变换，式中

$$\sum_\mu a_{\mu\nu} a_{\mu\nu'} = \delta_{\nu\nu'} \qquad (2)$$

详细讨论下述各种特殊情况：(a) 从一个惯性系到另一个惯性系的正常洛伦兹变换(第二参考系相对于第一参考系以速度v沿x轴方向运动)；(b) 绕z轴的转动；(c) 空间反演；(d) 时间反转。

17. 试证明：由§11.12题(15)式给出的波函数，即具有完全确定动量值的自由粒子波函数，可利用洛伦兹变换从静止参考系得到。

18. 讨论下述双线性量的变换特性：

$$G_j = \Psi \hat{\Gamma}_j \Psi,$$

式中$\overline{\Psi}$是Ψ的伴随波函数[见§11.8题的(8)式]而$\hat{\Gamma}_j$是在§11.11题中定义的。

19. 从§11.9题(3)式出发，求电磁场中带电粒子运动的狄拉克方程的通常方法，是用$\hat{p}_\mu - (e/c)A_\mu$取代$\hat{p}_\mu$。从而有

$$\left\{\sum_\mu \hat{\gamma}_\mu [\hat{p}_\mu - (e/c)] - imc\right\}\Psi = 0. \qquad (1)$$

如果现在考虑一个质量相同，而电荷相反的粒子的狄拉克方程，则有

$$\left\{\sum_\mu \hat{\gamma}_\mu [\hat{p}_\mu + (e/c)A_\mu] - imc\right\}\Psi_c = 0 \qquad (2)$$

这里我们用Ψ_c表示电荷共轭波函数。

说明如何从Ψ得到Ψ_c。

20. 对于一个满足自由粒子狄拉克方程的粒子，或在有心力

场中运动的粒子，讨论角动量守恒。

21. 一个自旋为 $\frac{1}{2}$ 的带电粒子在弱电磁场中运动，考虑这粒子运动的非相对论极限，并求出这粒子的回磁比。

22. 把在静电势场 $\phi=V(r)/e$ 中运动的电子的狄拉克方程简化成对于正能态的两个大分量的方程，并讨论与薛定谔方程相比出现的附加项。

23. 求自旋-轨道相互作用对氢原子能级的修正。

24. 求均匀磁场中电子的能级。

25 (i)证明自旋为 $\frac{1}{2}$，静质量为零的粒子的波动方程可写成如下形式：

$$c(\hat{\sigma}\cdot\hat{p})\Psi=i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \tag{1}$$

式中 $\hat{\sigma}$ 的分量是泡利矩阵，而 $\hat{p}$ 是线动量算符。

(ii) 在这种情况下，讨论角动量守恒。

(iii) 证明，在正（或负）能态中，粒子的自旋与它的动量是平行（或反平行）的。

解　答

§1. 一维运动

1. $E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}n^2$，　$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi n}{a}x$。

3. $|a(p)|^2=\frac{4n^2\pi a}{\hbar}\left(\frac{p^2a^2}{\hbar^2}-n^2\pi^2\right)^{-2}\times$

$$\times\begin{cases}\cos^2\frac{pa}{2\hbar}, & \text{当}n\text{为奇数},\\ \sin^2\frac{pa}{2\hbar}, & \text{当}n\text{为偶数}。\end{cases}$$

4. 为了求出所要求的几率分布，我们将所讨论的（非定）态的波函数ψ按粒子在“势阱”中的定态波函数ψ_n展开：

$$\psi(x)=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n(x) \tag{1}$$

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

发现粒子处于第n个态的几率等于

$$w_n=|c_n|^2=\left|\int_0^a\psi(x)\psi_n^*(x)\mathrm{d}x\right|^2 \tag{3}$$

而

$$\sum_{n=1}^{\infty}w_n=\int_0^a|\psi(x)|^2\mathrm{d}x。$$

为了得到归一化的几率w_n，我们把原来的波函数ψ归一化。为此，归一化因子$A^2=\left[\int_0^a x\ (x-a)^2\mathrm{d}x\right]^{-1}=30a^{-5}$。将$\psi$和$\psi_n$代入(3)式，就有

$$w_n=\frac{30}{a^5}\cdot\frac{2}{a}\left[\int_0^a x(a-x)\sin\frac{n\pi x}{a}\mathrm{d}x\right]^2$$

算出积分，最后得：

$$w_n=\frac{240}{(n\pi)^6}[1-(-1)^n]^2. \qquad (4)$$

所求得的几率$w_n=c_n^2$仅当$n=1,3,5,\cdots$时才不为零。按照(2)式，与这些n值对应的是偶函数$\psi_n(x)$(相对于势阱的中点$x=a/2$)。于是，在表达式(1)中，就只有偶态（这是理所当然的，因为原来的波函数对$x=a/2$是偶函数）。

我们来验证几率w_n是归一化的。

利用等式

$$\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{(2k-1)^{2m}}=\frac{(2^{2m}-1)\pi^{2m}}{2\cdot(2m)!}|B_{2m}| \qquad (5)$$

式中B_{2m}称为伯努利数，于是有(在我们的情形中，$2m=6$，$B_{2m}=B_6=\frac{1}{42}$)：

$$\sum_{n=1}^{\infty}w_n=\frac{240}{\pi^6}\cdot 2^2\sum_{n=1,3,5,\cdots}\frac{1}{n^6}=\frac{960}{\pi^6}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{(2k-1)^6}$$

$$=\frac{960}{\pi^6}\cdot\frac{(2^6-1)\pi^6}{2\cdot 6!}\cdot\frac{1}{42}=1.$$

这正是我们所要验证的。

从(4)式看出，发现粒子处在量子数为n的偶态中的几率，随n增加而迅速减小。发现粒子处于基态($n=1$)的几率等于

$$w_1=\frac{240}{\pi^6}\cdot 2^2\approx 0.999,$$

所以发现粒子处在所有激发态（$n=3,5,\cdots$）的几率之和等于0.001。这是由于原来的波函数与势阱中粒子的基态波函数

$$\psi_1(x)=\sqrt{\left(\frac{2}{a}\right)}\sin\frac{\pi x}{a}$$

在空间各点非常相近。因此，人们可以说，所考虑的态是一个“近定态”（almost stationary state）①

在我们所讨论的势阱中，粒子的能级由下式给出：

$$E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}n^2\quad(n=1,2,3,\cdots)\qquad(6)$$

根据(4)式和(6)式，在所考虑的非定态中粒子的平均能量等于

$$\bar{E}=\sum_{n=1}^{\infty}E_n w_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}\cdot\frac{240\times 2^2}{\pi^6}\sum_{n=1,3,5\cdots}^{\infty}\frac{1}{n^4}.$$

利用（5）式，求得$\left(2m=4,\ B_4=-\frac{1}{30}\right)$：$\sum_{n=1,3,5\cdots}^{\infty}1/n^4=\pi^4/96$，

所以

$$\bar{E}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}\cdot\frac{10}{\pi^2}\approx 1.014E_1,\qquad(7)$$

其中E_1是基态能量。

若将哈密顿量$H=\hat{T}+U$对（归一化）波函数求平均，最后也可以得到与(7)相同的结果：

$$\bar{E}=\int\psi^* H\psi\,\mathrm{d}x=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\int_0^a\psi\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}\,\mathrm{d}x$$

① 这个词只用在这个特定的问题，不要与惯用语“准稳态”（quasi-stationary state）混淆，后者具有完全不同的意义。

$$=\frac{\hbar^2a^3}{6\mu}A^2=\frac{5\hbar^2}{\mu a^2}. \qquad (7')$$

在所考虑的态中，粒子能量平方的平均值等于：

$$\overline{E^2}=\sum_{n=1}^{\infty}E_n^2\,w_n=\left(\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}\right)^2\cdot\frac{960}{\pi^6}\sum_{n=1,3,5\cdots}\frac{1}{n^2}=$$

$$=30\left(\frac{\hbar^2}{\mu a^2}\right)^2. \qquad (8)$$

按照(7′)和(8)，能量的方均根偏差等于

$$\Delta E=\sqrt{\overline{[(E-\bar{E})^2]}}=\sqrt{[\overline{E^2}-(\bar{E})^2]}=\sqrt{5}\,\frac{\hbar^2}{\mu a^2}, \qquad (9)$$

它的大小是可以与$\bar{E}\approx E_1$相比较的。

这个相当可观的能量方均根偏差值，显然可以用激发态对$\overline{E^2}$有相当大的贡献（由于$E_n^2\sim n^4$）来说明。

5. (i) $\frac{1}{2}$; (ii) $\frac{32}{9\pi^2}$.

6*. 为了避免计算上的困难，我们首先考虑一个十分宽，但深度V_0有限的对称势阱（见图22），而后再取极限$V_0\to\infty$。

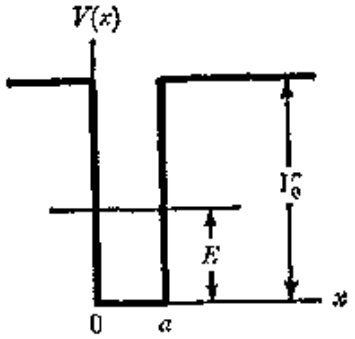


图 22

例如，我们来计算粒子作用在右阱壁上的平均力$\bar{f}$。

外场（阱壁）作用在粒子上的力的算符等于$[-\mathrm{d}V/\mathrm{d}x]$，其中$V(x)$是粒子的势能算符。按照牛顿第三定律，粒子作用在阱壁上的力的大小与这力相等，而方向相反，即

$$f(x)=\frac{\mathrm{d}V(x)}{\mathrm{d}x} \qquad (1)$$

它的量子力学平均值（这是我们所要求的）为

$$\bar{f}=\int_{-\infty}^{\infty}f(x)\,[\psi(x)]^2\mathrm{d}x \qquad (2)$$

式中 $\psi(x)$ 是（实）波函数，$f(x)$是作用在所考虑的（右）壁上的力。

除了在$x=a$点外，$V(x)$处处是常数，而在$x=a$点，$V(x)$突然有一个大小为V_0的跳跃，因此(1)式可写成

$$f(x)=V_0\delta(x-a) \tag{3}$$

其中$\delta(x-a)$是δ函数①。将(3)式代入(2)式，得

$$\bar{f}=V_0[\psi(a)]^2. \tag{4}$$

为了求出 $\psi(a)$，可考虑熟知的有限深矩形对称势阱问题的解。波函数的形式是(见§1.7题，令其中$V_1=V_2=V_0$)：

$$\left.\begin{aligned}&\psi(x)=c_1\exp(\kappa x)\quad(x\leqslant 0)\\ \text{其中}\quad&\kappa=\sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}(V_0-E)}\end{aligned}\right\} \tag{5}$$

$$\left.\begin{aligned}&\psi(x)=c\sin(kx+\delta)\quad(0\leqslant x\leqslant a)\\ \text{其中}\quad&k=\sqrt{\left(\frac{2\mu E}{\hbar^2}\right)},\\ &\sin(ka+\delta)=-\sin\delta=-\frac{\hbar k}{\sqrt{(2\mu V_0)}}\end{aligned}\right\} \tag{6}$$

$$\psi(x)=c_2\exp(-\kappa x)\quad(x\geqslant a). \tag{5'}$$

按照(6)式，我们所感兴趣的$\psi(a)$的值等于：

$$\psi(a)=c\sin(ka+\delta)=-c\frac{\hbar k}{\sqrt{(2\mu V_0)}}. \tag{7}$$

由于我们利用波函数由（2）式计算平均力，所以波函数必须归一化。根据这个要求，考虑到归一化积分$\int_{-\infty}^{\infty}[\psi(x)]^2dx=1$只在区间$0\leqslant x\leqslant a$内才是相当大的，则立即可确定常数$c$。的确，按照（5）式和（5′）式，在这区间外，波函数在数量级为$1/\kappa\approx$

① 的确，由方程(1)，我们得到($\varepsilon\to 0$)：

$$\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon}f(x)dx=V(a+\varepsilon)-V(a-\varepsilon)=V_0;$$

显然，同样结果也可由(3)式得到.

$\hbar/\sqrt{(2\mu V_0)}$ 的很小距离内指数地衰减下来(应记住，我们感兴趣的是$V_0\to\infty$的情形；根据同样的理由，与V_0比起来可以略去E)，所以区间$x\leqslant 0$和$x\geqslant a$对总几率$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^2\,dx$的贡献很小，可以忽略。于是，我们有

$$1=\int_{-\infty}^{\infty}[\psi(x)]^2dx\approx\int_0^a[\psi(x)]^2dx$$

$$=c^2\int_0^a\sin^2(kx+\delta)\,dx$$

$$=c^2\left[\frac{a}{2}-\frac{1}{2k}\sin ka\cdot\cos(ka+2\delta)\right] \qquad (8)$$

现在我们来取极限$V_0\to\infty$。

按照(6)式，当$V_0\to\infty$时有：$\delta\to n\pi$，$(ka+\delta)\to n_1\pi$，因而$ka\to(n_1-n)\pi$（这里，n和n_1为整数），所以(8)式中第二项趋于零。

事实上，

$$-\frac{1}{2k}\sin ka\cdot\cos(ka+2\pi n)=\frac{1}{4k}\sin 2ka$$

$$\longrightarrow-\frac{1}{4k}\sin[2\pi(n_1-n)]=0.$$

因而，对于$V_0=\infty$的势阱，就有

$$c=\sqrt{\left(\frac{2}{a}\right)}. \qquad (9)$$

利用方程(9)、(7)、(6)和(4)，最后得到

$$f=\frac{2E}{a}. \qquad (10)$$

在最后这一结果中不出现V_0，故对$V_0\to\infty$的极限情形，这个结果也是正确的。

显然，所求的力f的符号是正确的（在右阱壁，$f>0$）。(作

用在两个壁上的平均力显然等于零。事实上，总力的算符是

$$V_0\{\delta(x-a)-\delta(x)\},$$

考虑到问题的对称性，我们得

$$\bar{f}_{量}=V_0\{[\psi(a)]^2-[\psi(0)]^2\}=0.$$

（这结果对于在任意形式的势场中的有限运动都是正确的。）

注意，结果(10)不显含$\hbar$，仍保持和经典力学完全一样的形式。事实上，在经典情形下，$\bar{f}_{经典}$（对时间平均！）等于每次碰撞时粒子给予壁的动量$(2\mu v)$，乘以单位时间内碰壁的次数$v/2a$（v是粒子的速度），即

$$\bar{f}_{经典}=2\mu v\cdot\frac{v}{2a}=\frac{2E}{a}.$$

7.
$$-\frac{\hbar}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+(E-V_1)\psi=0\quad(x<0),$$

$$-\frac{\hbar}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+E\psi=0\qquad(0<x<a),$$

$$-\frac{\hbar}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+(E-V_2)\psi=0\quad(x>a).$$

如果引进下列记号：

$$\kappa_1=\frac{\sqrt{[2\mu(V_1-E)]}}{\hbar},\quad \kappa=\frac{\sqrt{(-2\mu E)}}{\hbar},$$

$$\kappa_2=\frac{\sqrt{[2\mu(V_2-E)]}}{\hbar},$$

我们求得三个区域的通解分别为：

$$\psi=A_1\exp(-\kappa_1x)+B_1\exp(\kappa_1x)\qquad(x<0),$$

$$\psi=A\exp(-\kappa x)+B\exp(\kappa x)\qquad(0<x<a),$$

$$\psi=A_2\exp(-\kappa_2x)+B_2\exp(\kappa_2x)\qquad(x>a).$$

现在考虑$E<V_2$的情形。这时κ_1和κ_2都是实数。若在区域$0<x<a$内令$\kappa=ik$，其中k为实数，则可把解写成：

$$\psi=\sin(kx+\delta)\qquad(0<x<a).$$

由于波函数必须是有限的，我们有$A_1=0$，$B_2=0$。

ψ和$\mathrm{d}\psi/\mathrm{d}x$的连续性条件，可方便地写成对数微商$(1/\psi)(\mathrm{d}\psi/\mathrm{d}x)$的连续性条件，即

$$\kappa_1=k\cot\delta$$

$$-\kappa_2=k\cot(ka+\delta)。$$

用k来表示κ_1和κ_2，则上述条件可写为

$$\sqrt{\left(\frac{2\mu V_1}{\hbar^2k^2}-1\right)}=\cot\delta,$$

$$-\sqrt{\left(\frac{2\mu V_2}{\hbar^2k^2}-1\right)}=\cot(ka+\delta)。$$

因为余切函数(cot)的周期为π，所以δ和$ka+\delta$的值可写成：

$$\delta=\arcsin\frac{\hbar k}{\sqrt{2\mu V_1}}+n_1\pi,$$

$$ka+\delta=-\arcsin\frac{\hbar k}{\sqrt{2\mu V_2}}+n_2\pi,$$

其中反正弦函数的取值范围从0到$\pi/2$，消去δ，我们求得确定分立能级的超越方程为

$$ka=n\pi-\arcsin\frac{\hbar k}{\sqrt{(2\mu V_1)}}-\arcsin\frac{\hbar k}{\sqrt{(2\mu V_2)}},$$

$$k=\frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar}>0。$$

满足这个方程的k值，可用图解法方便地求得，即找出直线$y=ak$和下列曲线的交点（见图23）：

$$y=n\pi-\arcsin\frac{\hbar k}{\sqrt{(2\mu V_1)}}-\arcsin\frac{\hbar k}{\sqrt{(2\mu V_2)}}$$

现在我们来考虑对称势阱$V_1=V_2=V$的情况。容易看出，在这情况下，无论V和a的值如何，至少总有一个能级。若

$$\sqrt{\left(\frac{2\mu V}{\hbar}a\right)}\ll1,$$

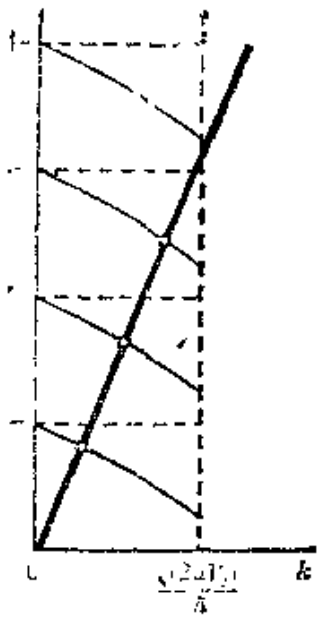


图 23

不难得到这个唯一的分立能级的值。将 $\pi-2\arcsin\sqrt{(E/V)}$ 展成 β 的幂级数，我们就求得 $E=V-\mu a^2V^2/2\hbar^2$。一般来说，分立能级的数目等于 N，N 由下列关系式决定：

$$N>\frac{\sqrt{(2\mu V}a)}{\pi\hbar}>N-1.$$

8. (*b*) 算符 $\hat{H}'$ 的本征值总是正的。设 ψ_0 为最低能态的波函数，则由 (*a*) 有

$$(\hat{Q}+\mathrm{i}\hat{P})\psi_0=0 \text{ 或} \left(\frac{\partial}{\partial Q}+Q\right)\psi_0=0$$

由此得到

$$\psi_0=c_0\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}Q^2}, \qquad \epsilon_0=\frac{1}{2}$$

这样，我们求出振子的能量为

$$\epsilon_n=n+\frac{1}{2} \qquad (n\geqslant 0),$$

相应的波函数为

$$\psi_n=A_n\left(\frac{\partial}{\partial Q}-Q\right)^n\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}Q^2}.$$

归一化常数 A_n 由条件 $\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_n(Q)|^2\mathrm{d}Q=1$ 确定，对于基态，归一化常数 A_0 等于 $1/\sqrt[4]{\pi}$，故

$$\psi_0=\frac{1}{\sqrt[4]{\pi}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}Q^2}.$$

第 n 个态的波函数可用第 $(n-1)$ 个态的波函数表示如下：

$$\psi_n(Q)=c_n(\hat{Q}-\mathrm{i}\hat{P})\psi_{n-1}(Q),$$

式中 c_n 由下列条件确定：

$$c_n^2\int[(\hat{Q}-\mathrm{i}\hat{P})\psi_{n-1}(Q)]^2\mathrm{d}Q=1.$$

用$-i\partial/\partial Q$代替$\hat{P}$，并分部积分，即得

$$c_n^2\int\psi_{n-1}(\hat{P}^2+\hat{Q}^2+1)\psi_{n-1}dQ=c_n^2\cdot 2n=1$$

所以 $c_n=1/\sqrt{(2n)}$，从而

$$\psi_n=c_n\left(Q-\frac{\partial}{\partial Q}\right)\psi_{n-1}$$

$$=c_n\cdot c_{n-1}\cdots c_1\left(Q-\frac{\partial}{\partial Q}\right)^n\psi_0=A_n\left(Q-\frac{\partial}{\partial Q}\right)^n\psi_0.$$

最后我们得到

$$\psi_n=\frac{1}{\sqrt{(2^n n!)}}\sqrt[4]{\frac{1}{\pi}}\left(Q-\frac{\partial}{\partial Q}\right)^n e^{-\frac{1}{2}Q^2}.$$

n次多项式

$$H_n(Q)=e^{\frac{1}{2}Q^2}\left(Q-\frac{\partial}{\partial Q}\right)^n e^{-\frac{1}{2}Q^2}$$

称为厄密多项式。

(c) $\hat{a}\hat{a}^+-\hat{a}^+\hat{a}=1$；$\psi_n=\frac{1}{\sqrt{(n!)}}(\hat{a}^+)^n\psi_0$；

(d) $(\hat{P}+i\hat{Q})^n_{n-1}\cdot[(\hat{P}-iQ)^n_{n-1}]^*=2n$。

我们已取波函数ψ_n为实的，所以$\hat{Q}$和$i\hat{P}=\partial/\partial Q$的矩阵元也是实的，

$$(\hat{Q})^n_{n-1}=\sqrt{\binom{n}{2}},$$

$$(\hat{P})^n_{n-1}=i\sqrt{\binom{n}{2}},$$

或者，回到原来的变量，则有

$$(\hat{x})^n_{n-1}=(\hat{x})^{n-1}_n=\sqrt{\left(\frac{\hbar n}{2\mu\omega}\right)},$$

$$(\hat{p})^n_{n-1}=-(\hat{p})^{n-1}_n=i\sqrt{\left(\frac{\mu n\hbar\omega}{2}\right)}.$$

10.

$$w=\int_1^\infty e^{-y^2}dy\Big/\int_0^\infty e^{-y^2}dy\approx 0.16.$$

11. 当$x=0$时，波函数必须趋于零。当$x>0$时，波函数满足寻常的振子微分方程。容易看出，当n为奇数($n=2k+1$)时，振子的波函数在$x=0$处趋于零，而在$x\geqslant 0$的区域内，它就是所考虑问题的解。因此，

$$E_k=\hbar\omega\left(2k+\frac{3}{2}\right)\qquad(k=0,1,2,\cdots).$$

12. $$\left(\frac{p^2}{2\mu}-\frac{\mu\omega^2\hbar^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial p^2}\right)a_n(p)=E_n a_n(p),$$

$$|a_n(p)|^2=\frac{1}{2^n\cdot n!\sqrt{(\pi\mu\omega\hbar)}}\exp(-p^2/\mu\omega\hbar)H_n^2\left(\frac{p}{\sqrt{(\mu\omega\hbar)}}\right)$$

13. 研究薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\psi}{dx^2}-\left[E-V_0\left(\frac{a}{x}-\frac{x}{a}\right)^2\right]\psi=0$$

的解在$x\to\infty$时的行为表明，ψ的渐近式为$\exp\left(-\frac{1}{2}\xi\right)$，其中$\xi$是一个新的独立变量

$$\xi=\frac{\sqrt{(2\mu V_0)}}{\hbar a}x^2.$$

当$x\to 0$时，ψ正比于$\xi^{\frac{\nu}{2}}$，其中

$$\nu=\frac{1}{2}\left[\sqrt{\left(\frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2}+1\right)}+1\right].$$

作如下替换

$$\psi=\exp\left(-\frac{1}{2}\xi\right)\xi^{\frac{1}{2}\nu}u(\xi)$$

从而求得$u(\xi)$所满足的方程为：

$$\xi u''+\left(\nu+\frac{1}{2}-\xi\right)u'-\left[\frac{\nu}{2}+\frac{1}{4}-\frac{\mu a(E+2V_0)}{2\hbar\sqrt{(2\mu V_0)}}\right]u=0 \quad (1)$$

方程(1)是合流超几何方程，它的通解为

$$u(\xi)=c_1F\left(\alpha,\nu+\frac{1}{2},\xi\right)+c_2F\left(\alpha-\nu+\frac{1}{2},\right.$$

$$\left.\frac{3}{2}-\nu,\xi\right)\cdot\xi^{\frac{1}{2}-\nu}$$

式中α代表方程(1)中方括号内的表式。

由于要求$\psi(0)$必须是有限的，所以

$$c_2=0.$$

此外，还必须要求在$x\to\infty$时波函数是递减的，即要求函数$u(\xi)$化为一多项式。令$\alpha=-n(n=0,1,2,\cdots)$即可做到这一点，于是我们求得能级为：

$$E_n=\frac{2\hbar}{a}\sqrt{\left(\frac{2V_0}{\mu}\right)}\left\{n+\frac{1}{2}+\frac{1}{4}\right.$$

$$\left.\left[\sqrt{\left(\frac{8\mu V_0a^2}{\hbar^2}+1\right)}-\sqrt{\left(\frac{8\mu V_0a^2}{\hbar^2}\right)}\right]\right\}.$$

如果适当选择能量标度的零点，则此能谱与角频率为$\omega=\sqrt{(8V_0/\mu a^2)}$的振子的能谱相同。有趣的是，粒子在势场$V_0(a/x-x/a)^2$中的零点能，总是大于相应振子的零点能。波函数的形式为

$$\psi_n=c_nx^\nu\exp\left[-\sqrt{\left(\frac{\mu V_0}{\hbar^2a^2}\right)}x^2\right]$$

$$F\left[-n,\ \nu+\frac{1}{2},\ \sqrt{\left(\frac{2\mu V_0}{\hbar^2a^2}\right)}x^2\right],$$

式中$\nu=\frac{1}{2}\left[\sqrt{\left(\frac{8\mu V_0a^2}{\hbar^2}+1\right)}+1\right]$，而常数$c_n$应由归一化条件确定。

14*. 在薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\psi}{dx^2}-\left(E+\frac{V_0}{\cosh^2\frac{x}{a}}\right)\psi=0$$

中，作如下替换

$$\psi=\left(\cosh\frac{x}{a}\right)^{-2\lambda}u,\quad \lambda=\frac{1}{4}\left[\sqrt{\left(\frac{8\mu V_0a^2}{\hbar^2}+1\right)}-1\right].$$

u所满足的方程为

$$\frac{d^2u}{dx^2}-\frac{4\lambda}{a}\tanh\frac{x}{a}\frac{du}{dx}+\frac{4}{a^2}(\lambda^2-\kappa^2)u=0,$$

式中

$$\kappa=\sqrt{\left(-\frac{\mu Ea^2}{2\hbar^2}\right)}$$

（我们讨论分立谱，$E<0$）.

如果引入一个新的独立变量

$$z=-\sinh^2(x/a)$$

则u的方程化为超几何方程

$$z(1-z)\frac{d^2u}{dz^2}+\left[\frac{1}{2}-(1-2\lambda)z\right]\frac{du}{dz}-(\lambda^2-\kappa^2)u=0 \qquad (1)$$

超几何方程的一般形式为

$$z(1-z)\frac{d^2u}{dz^2}+[\gamma-(\alpha+\beta+1)z]\frac{du}{dz}-\alpha\beta u=0$$

在我们的情形下，方程中的参数α,β,γ取值如下，

$$\gamma=\frac{1}{2},\quad \alpha=\kappa-\lambda,\quad \beta=-\kappa-\lambda.$$

方程(1)的两个解为：

$$u_1=F\left(-\lambda+\kappa,\ -\lambda-\kappa,\ \frac{1}{2};\ z\right) \qquad (2)$$

$$u_2=\sqrt{(z)}F\left(-\lambda+\kappa+\frac{1}{2},\ -\lambda-\kappa+\frac{1}{2},\ \frac{3}{2};\ z\right) \qquad (3)$$

它们分别给出偶的和奇的波函数 ψ。这些解使得波函数在 $x=0$ ($z=0$)处具有有限值。

为了使波函数

$$\psi=\left(\cosh\frac{x}{a}\right)^{-2\lambda}u$$

在 $x\to\pm\infty$ ($z\to\infty$)时趋于零，(2)式和(3)式中的超几何函数应化为多项式。例如，对 u_1 来说，这个条件意味着 $\lambda-\kappa$ 或者 $\lambda+\kappa$ 必须是一个非负的整数。然而，第二种情况可以抛弃，因为在此情况下，当 $x\to\pm\infty$ 时，波函数指数地增加。由此我们求得 $\lambda-\kappa=k$ ($k=0,1,2,\cdots$)，因而能级为：

$$E_k=-\frac{\hbar^2}{2\mu a^2}\left[\frac{1}{2}\sqrt{\left(\frac{8\mu V_0a^2}{\hbar^2}+1\right)}-2k-\frac{1}{2}\right]^2$$

与此类似，对于(3)式，我们发现，如果

$$\lambda-\kappa-\frac{1}{2}=l\qquad(l=0,1,2,\cdots)$$

则波函数在 $x\to\pm\infty$ 时是有限的这个条件也就满足，因而

$$E_l=-\frac{\hbar^2}{2\mu a^2}\left[\frac{1}{2}\sqrt{\left(\frac{8\mu V_0a^2}{\hbar^2}+1\right)}-(2l+1)-\frac{1}{2}\right]^2.$$

将两式合并，则得

$$E_n=-\frac{\hbar^2}{2\mu a^2}\left[\frac{1}{2}\sqrt{\left(\frac{8\mu V_0a^2}{\hbar^2}+1\right)}-\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]^2$$

$$(n=0,1,2,\cdots).$$

分立能级的数目等于满足不等式

$$N<\frac{1}{2}\sqrt{\left(\frac{8\mu V_0a^2}{\hbar^2}+1\right)}-\frac{1}{2}$$

的最大整数 N。应当注意，这里所得到的能谱与适当选择参数的莫尔斯势中的能谱一致(见 § 8.12题)。

15*. 在波动方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}-\left(E-V_0\cot^2\frac{\pi}{a}x\right)\psi=0$$

中，我们作如下替换

$$\psi=\left(\sin\frac{\pi}{a}x\right)^{-2\lambda}u.$$

令

$$\lambda=\frac{1}{4}\left[\sqrt{\left(\frac{8\mu V_0a^2}{\hbar^2}+1\right)}-1\right],$$

$$\nu=\sqrt{\left[\frac{\mu a^2}{2\hbar^2\pi^2}(E+V_0)\right]},$$

我们得到u的方程为

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}x^2}-4\frac{\pi}{a}\lambda\cot\frac{\pi x}{a}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}+\frac{4\pi^2}{a^2}(\nu^2-\lambda^2)u=0$$

引入新的独立变量

$$z=\cos^2\frac{\pi x}{a},$$

上述方程就化为超几何方程

$$z(1-z)\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}z^2}+\left[\frac{1}{2}-(1-2\lambda)z\right]\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}z}+(\nu^2-\lambda^2)u=0 \quad (1)$$

将这方程与下列一般形式的超几何方程比较：

$$z(1-z)\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}z^2}+[\gamma-(\alpha+\beta+1)z]\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}z}+\alpha\beta u=0,$$

我们求得参数：

$$\gamma=\frac{1}{2},\ \alpha=-\nu-\lambda,\ \beta=\nu-\lambda.$$

方程(1)有两个解，其中一个解

$$u_1=F\left(-\nu-\lambda,\ \nu-\lambda,\ \frac{1}{2};\ z\right)$$

在$z=0$(对应于$x=\frac{a}{2}$)处不等于零，但有限。另一个解

$$u_2=\sqrt{(z)}F\left(-\nu-\lambda+\frac{1}{2},\ \nu-\lambda+\frac{1}{2},\ \frac{3}{2};\ z\right)$$

在 $z=0$ $\left(\text{对应于}x=\frac{a}{2}\right)$处趋于零。为了确定在$z=1$（对应于$x=0$或$x=a$）处解的行为，我们利用关系式

$$F(\alpha,\beta,\gamma;z)=(1-z)^{-\alpha}F\left(\alpha,\gamma-\beta,\gamma;\frac{z}{z-1}\right).$$

这样，我们求得u_1和u_2为：

$$u_1=(1-z)^{\nu+\lambda}F\left(-\nu-\lambda,\ -\nu+\lambda+\frac{1}{2},\ \frac{1}{2};\ \frac{z}{z-1}\right), \qquad (2)$$

$$u_2=\sqrt{(z)}\,(1-z)^{\nu+\lambda-\frac{1}{2}}F\left(-\nu-\lambda+\frac{1}{2},\right.$$

$$\left.-\nu+\lambda+1,\ \frac{3}{2};\ \frac{z}{z-1}\right). \qquad (3)$$

要使得波函数ψ在$x=0$和$x=a$处趋于零，$\frac{z}{z-1}$的幂级数必须是一个多项式。

若$\nu+\lambda$或者$\nu-\lambda-\frac{1}{2}$是非负的整数，则u_1的表达式(2)中的超几何级数就截断为多项式。

然而，只有在第二种情形，即只有当

$$\nu-\lambda-\frac{1}{2}=k \quad (k=0,1,2,\cdots)$$

时，在$x=0$和$x=a$处$\psi=0$这个条件才得到满足。此时，能级由下列方程给出：

$$E_k=[(2k+1)^2+4(2k+1)\lambda-2\lambda]\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}. \qquad (4)$$

对方程(3)作类似的讨论即可看出，能级满足下列条件：

$$\nu-\lambda=l \qquad (l=1,2,3,\cdots) \qquad (5)$$

可以将能级的表达式(4)和(5)合并为

$$E_n=(n^2+4n\lambda-2\lambda)\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2} \quad (n=1,2,3,\cdots).$$

当n为奇数时，求得相应的波函数为

$$\psi_n = c_n\left(\sin\frac{\pi x}{a}\right)^{-2\lambda} F\left(-\frac{n}{2}-2\lambda,\ \frac{n}{2},\ \frac{1}{2};\ \cos^2\frac{\pi x}{a}\right)$$

当n为偶数时，相应的波函数则为

$$\psi_n = c_n\left(\sin\frac{\pi x}{a}\right)^{-2\lambda}\cos\frac{\pi x}{a}\times$$

$$\times F\left(-\frac{n}{2}-2\lambda+\frac{1}{2},\ \frac{n}{2}+\frac{1}{2},\ \frac{3}{2},\ \cos^2\frac{\pi x}{a}\right).$$

基态的归一化波函数为

$$\psi = \sqrt{\frac{\pi\Gamma(2\lambda+1)}{a\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\Gamma\left(2\lambda+\frac{3}{2}\right)}}\left(\sin\frac{\pi x}{a}\right)^{2\lambda+1},$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)=\sqrt{\pi}.$$

现在来考虑$V_0\to 0$的极限情形。这时，问题就归结为粒子在势阱中运动的问题（§1.1题）。λ趋于零时，则得能级为：

$$E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}n^2.$$

这正是我们所预期的。在相反的情形中，即$\lambda\gg 1$，求得较低的那些能级($n\ll\lambda$)为

$$E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\qquad(n=1,2,\cdots),$$

式中

$$\omega=\frac{\pi}{a}\sqrt{\left(\frac{2V_0}{\mu}\right)}.$$

若将势能在$x=\frac{a}{2}$附近展开，并且只保留到二次项，也可得到这个结果.

16. 薛定谔方程为

$$\psi''+\frac{2\mu}{\hbar^2}[E-D+2D\ \exp(-ax)-D\ \exp(-2ax)]\psi=0$$

引入一个新的变数ξ

$$\xi=\frac{2\sqrt{(2\mu D)}}{a\hbar}\exp(-ax)$$

且令

$$s=\frac{\sqrt{[-2\mu(E-D)]}}{a\hbar},\quad n=\frac{\sqrt{(2\mu D)}}{a\hbar}-\left(s+\frac{1}{2}\right),\qquad (1)$$

则薛定谔方程（撇号表示对ξ的微分）变成

$$\psi''+\frac{\psi'}{\xi}+\left(-\frac{1}{4}+\frac{n+s+\frac{1}{2}}{\xi}-\frac{s^2}{\xi^2}\right)\psi=0.$$

作代换

$$\psi=\exp\left(-\frac{1}{2}\xi\right)\xi^s w(\xi),$$

对于w我们得到合流超几何方程，再根据$\xi\to\infty$时ψ有限的要求，我们得到n必是一个非负整数，从而由(1)得到

$$E=\sqrt{\left(\frac{2D}{\mu}\right)}a\hbar\left(n+\frac{1}{2}\right)-\frac{a^2\hbar^2}{2\mu}\left(n+\frac{1}{2}\right)^2,$$

这里n必须是正的且小于$\sqrt{(2\mu D)}/a\hbar-\frac{1}{2}$，因为按定义，$s$是正的。

17．由于δ函数的归一化，我们可写出

$$\delta(x^2-a^2)=\frac{1}{2a}[\delta(x-a)+\delta(x+a)].$$

对于束缚态$E<0$，令$E=-\hbar^2\kappa^2/2\mu$，相应于束缚态的本征函数可写成

$\psi=A\exp(\kappa x)$，$x<-a$；

$\psi=B\exp(\kappa x)+C\exp(-\kappa x)$，$-a<x<a$；

$\psi=D\exp(-\kappa x)$, $a<x$.

采用与推导§1.38题中方程(8)类似的讨论，我们看到，波函数ψ必须既满足条件

$$\psi'(-a+)-\psi'(-a-)=-\frac{P}{a}\psi(-a),$$

$$\psi'(a+)-\psi'(a-)=-\frac{P}{a}\psi(a),$$

又满足在$x=\pm a$处连续的条件.

我们看到，为了能满足后面的两个方程，ψ不是相应于$A=D$, $B=C$的偶函数，就是相应于$A=-D$, $B=-C$的奇函数. 对于能量本征值，我们容易得到如下的方程：

偶宇称：$\text{cath}\kappa a=2\kappa a/P$; (1)

奇宇称：$\tanh\kappa a=2\kappa a/P$. (2)

由(1)和(2)可见：(i)方程(1)总有一个且仅有一个解，这个解当$P\to 0$时，对应于$\kappa\to 0$，因而$E\to 0$；至少总有一个解的事实，正是§1.41题中证明过的普遍定理的特殊情况；(ii)方程(2)仅当$P>2$时有一个解. 当$P\to\infty$时，两个解互相逼近，在这个极限下$\kappa\to\infty$.

18*. 本题在原点处存在着特别引人注目的奇异性. 对于$x>0$和$x<0$来说薛定谔方程的解是明确的，并且按通常的方式导致缔合拉盖尔(Laguerre)多项式. 解可分为偶函数和奇函数，奇函数解在原点处应为零，这并不引起什么困难；但对于偶函数解却要小心从事.

薛定谔方程

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi''+\left(E+\frac{e^2}{|x|}\right)\psi=0 \qquad (1)$$

可写成(现在撇号表示对z的导数)

$$\psi''-\frac{1}{4}\psi+\frac{\alpha}{|z|}\psi=0 \qquad (2)$$

这里

$$E=-\frac{\hbar^2}{2\mu a_B^2\alpha^2},\quad a_B=\frac{\hbar^2}{\mu e^2},\quad z=\frac{2x}{\alpha a_B}. \tag{3}$$

仅当α是整数($\alpha=N$)的情况下，方程(2)的解才在任何地点都表现很好，并且有限；在这种情况下，能级严格地与三维氢原子的完全相同，除了$N=0$是允许值之外；一维氢原子基态能是$-\infty$，由(2)可见相应的波函数是$\exp\left(-\frac{1}{2}|z|\right)$，这是一个偶函数，它的斜率在原点处不连续。另外的波函数为

$$\psi=A\exp\left(-\frac{1}{2}z\right)zF(1-N,\ 2;\ z)$$

$$z=2x/Na_0 \qquad x>0; \tag{4}$$

$$\psi=B\exp\left(\frac{1}{2}z\right)zF(1-N,\ 2;\ -2),$$

$$z=2x/Na_0, \qquad x<0. \tag{5}$$

A和B是归一化常数，而$F(\alpha,\ \beta;\ x)$是合流超几何函数(当$\alpha=N$时，它成为缔合拉盖尔多项式)。存在两种可能性：其一，选取$A=B$，这时我们得到一个偶的本征函数，在原点处斜率不连续；其二，选取$A=-B$，得到一个奇的本征函数，因而$N>0$的能级是双重简并的。

请读者参看劳顿(Loudon)的文章(Am. J. Phys. 27(1959), 649)，该文详细地讨论了，关于一维势能级简并的可能性，以及对适当截断的一维库仑势作各种近似的可能性。

19. 在所考虑的情况下，只有连续谱，且其本征函数是非简并的。

让我们将薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}-[E-Fx]\psi=0,$$

从坐标表象变为动量表象，得

$$\frac{p^2}{2\mu}a(p)-Ea(p)=i\hbar F\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}a(p).$$

这个方程的相当于本征值E的解$a_E(p)=c\exp[-(\mathrm{i}/\hbar F)(p^3/6\mu-Ep)]$，就是动量表象中的一个波函数。将函数$a(p)$归一化到$\delta(E-E')$：

$$\int a_E^*(p)a_{E'}(p)\mathrm{d}p=\delta(E-E'),$$

亦即

$$cc^*\int\exp\left[-\frac{\mathrm{i}p}{\hbar F}(E-E')\right]\mathrm{d}p=cc^*2\pi\hbar F\delta(E-E'),$$

因此

$$c=\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar F)}}.$$

在坐标表象中的波函数为

$$\psi(x)=\frac{\alpha}{2\pi\sqrt{F}}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(\mathrm{i}\frac{u^3}{3}-iuq\right)\mathrm{d}u$$

$$=\frac{\alpha}{\pi\sqrt{F}}\int_0^{\infty}\cos\left(\frac{u^3}{3}-uq\right)\mathrm{d}u$$

$$q=\left(x+\frac{E}{F}\right)\alpha,\quad \alpha=\left(\frac{2\mu F}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}.$$

这个积分可以用爱里函数$\Phi(q)$来表示：

$$\Phi(q)=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_0^{\infty}\cos\left(\frac{u^2}{3}+uq\right)\mathrm{d}u,$$

$$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{\pi F}}\Phi(-q).$$

20*. 所考虑的粒子的势能为

$$V(z)=\begin{cases}\infty, & z\leqslant 0,\\ \mu g z, & z\geqslant 0,\end{cases}$$

其中，如通常那样，取$-g$的方向沿正z轴，而$z=0$是反射平面。

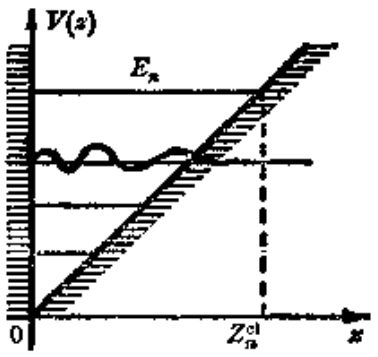


图 24

这个势能以及下面将要求得的能级和波函数都画在图 24 中。我们只限于研究粒子在z方向上的运动，因为在xy平面上的运动是自由的，目前我们对它不感兴趣。这样，在$z\geqslant 0$的区域中，粒子的波函数$\psi(z)$所满足的定态薛定谔方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}z^2}+\mu g z\psi=E\psi, \qquad (1)$$

式中E是粒子的能量。显然，应该求这方程的满足下列边界条件的解：

$$\text{当}z\to\infty\text{时}，\ \psi\to 0, \qquad (2)$$

$$\text{当}z=0\text{时}，\ \psi=0. \qquad (3)$$

为了简化方程(1)，我们引进新的独立变量ζ，它与z的关系为

$$\frac{2\mu^2 g}{\hbar^2}z-\frac{2\mu E}{\hbar^2}=c\zeta \qquad (4)$$

式中c暂时还是一个任意常数。

把这个变量代入方程(1)，(1)式就变为

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\zeta^2}-c^3\left(\frac{\hbar^2}{2\mu^2 g}\right)\zeta\psi(\zeta)=0.$$

很明显，若令$c=(2\mu^2 g/\hbar^2)^{\frac{1}{3}}$，亦即将（4）式写成

$$\zeta=\left(\frac{2\mu^2 g}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}\left(z-\frac{E}{\mu g}\right), \qquad (4')$$

则方程（1）就变成非常简单的形式

$$\psi''(\zeta)-\zeta\psi(\zeta)=0$$

这个方程的对所有 ζ 值（亦即对所有 z 值）都有限的解为

$$\psi=A\Phi(\zeta)=A\frac{1}{\pi}\int_0^\infty\cos\left(u\zeta+\frac{1}{3}u^3\right)du \qquad (5)$$

式中 $\Phi(\zeta)$ 是爱里函数；A 是归一化因子，我们稍后再来确定它。

首先，可以清楚地看到，在图24所示的势阱中，粒子的能级形成分立谱，而且能级数目为无穷大。为了求出这些能级，我们利用边界条件(3)。利用（5）式和（4′）式，（3）式可写成

$$\Phi\left(-\frac{2^{\frac{1}{3}}}{\mu^{\frac{1}{3}}g^{\frac{1}{3}}\hbar^{\frac{2}{3}}}E\right)=0 \qquad (3')$$

令方程（3′）中的宗量等于爱里函数的根。用 $-a_n(n=1,2,3,\cdots)$ 表示这些根：

$$0<a_1<a_2<\cdots<a_n<\cdots,$$

就可以求出超越方程（3′）的解 E_n：

$$-\left(\frac{2}{\mu g^2\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}E_n=-a_n.$$

因此，粒子的能谱为

$$E_n=\left(\frac{\mu g^2\hbar^2}{2}\right)^{\frac{1}{3}}a_n\quad(n=1,2,3,\cdots) \qquad (6)$$

特别是，基态（$n=1$，$a_1\approx2.34$）的能量等于

$$E_1\approx2.34\left(\frac{\mu g^2\hbar^2}{2}\right)^{\frac{1}{3}} \qquad (6')$$

正如在一维有界运动的情形中应有的那样，这里所求得的能级是非简并的。根据(5)，(4′)和（6）式，相应的定态波函数为

$$\psi_n(z)=A_n\Phi(\zeta_n)=A_n\Phi\left(\frac{z}{a}-a_n\right), \qquad (7)$$

式中 a 表示特征长度：

$$a=\left(\frac{\hbar^2}{2\mu^2g}\right)^{\frac{1}{3}}. \qquad (8)$$

归一化因子 A 依赖于 n 和 a。

这个函数在经典区域中是振荡的，函数 ψ_n 的节点数目等于 n

(包括在区域边界$z=0$处的节点)。相邻两节点的距离等于①

$$\overline{\pi\hbar} = \frac{\pi\hbar}{\sqrt{\{2\mu[E-V(z)]\}}}, \tag{9}$$

这距离随z趋于零而减小(即随动能的增加而减小，见图24)。

(7)式中的常数因子由ψ的归一化条件确定。如果我们对ζ归一化，显然这个常数等于②

$$A_n = \frac{1}{\sqrt{\left\{\int_{-\alpha_n}^{\infty}[\Phi(\zeta)]^2 d\zeta\right\}}}, \tag{10}$$

若对z进行归一化，则有[见方程(4′)和(8)]

$$A_n = \frac{1}{\sqrt{a}}\frac{1}{\sqrt{\left\{\int_{-\alpha_n}^{\infty}[\Phi(\zeta)]^2 d\zeta\right\}}}. \tag{10′}$$

现在我们来研究在距经典转折点③

$$z_n^{经典} = \frac{E_n}{\mu g} \tag{11}$$

足够远的地方波函数$\psi_n(z)$的渐近行为，以及$n\gg 1$时，亦即半经典情形下能谱E_n的形式。

按照方程(6)和(8)，长度$z_n^{经典}$和a之间的关系为

$$z_n^{经典} = a\cdot\alpha_n. \tag{11′}$$

我们利用方程(8)，(11)和(11′)，将(4′)式写成

---

① 显然，(9)式给出的量，仅当$n\gg 1$时才有这个意义。在此情形下，横线表示在间隔Δz中的平均，Δz比波长$2\pi\lambda$大得多，但比$V(z)$有显著改变的距离要小得多。

② 因为宗量取实数值时，爱里函数是实的，所以$|\Phi(\zeta)|^2=[\Phi(\zeta)]^2$。

③ 显然$z_n^{经典}$是重量为μg，能量为E_n的经典粒子所能达到的最大高度。

$$\zeta=\frac{z-z_n^{经典}}{a}=\frac{z}{a}-\alpha_n,$$

并考虑函数$\psi_n(z)$的渐近表达式.

(1)在经典不可到达的区域，且 z 值不太靠近$z_n^{经典}$时：

$$z-z_n^{经典}\gg a,\ \text{即}\zeta\gg 1\text{①}$$

利用爱里函数的渐近式

$$\Phi(\zeta)\approx\frac{1}{2\zeta^{\frac{1}{4}}}\exp\left(-\frac{2}{3}\zeta^{\frac{3}{2}}\right),$$

我们求得：

$$\psi_n(z)\approx\frac{A_n}{2}\left(\frac{a}{z-z_n^{经典}}\right)^{\frac{1}{4}}\exp\left[-\frac{2}{3}\left(\frac{z-z_n^{经典}}{a}\right)^{\frac{3}{2}}\right]\qquad(12)$$

(在经典不可到达的区域中，几率$|\psi_n|^2$指数地减少).

(2)在经典运动区域中，且 z 值不太靠近$z_n^{经典}$时：

$$0<z<z_n^{经典}\text{和}|z-z_n^{经典}|\gg a,$$

即

$$-\alpha_n<\zeta<0\text{和}|\zeta|\gg 1.$$

显然，为了满足第二个条件，至少必须有不等式：$\alpha_n\gg 1$.如我们在下面将看到的，这时 α_n 正比于 $n^{\frac{2}{3}}$；这意味着，这里所考虑的 ζ 值的区域，只有对很高的受激（半经典的）能级，亦即 $n\gg 1$时才存在.

所要求的$\Phi(\zeta)$的渐近展开式为

$$\Phi(\zeta)\approx\frac{1}{|\zeta|^{\frac{1}{4}}}\sin\left(\frac{2}{3}|\zeta|^{\frac{3}{2}}+\frac{\pi}{4}\right),\qquad(13)$$

所以

① 由方程(9)和(4')容易证明，不等式$|\zeta|\gg 1$与$|d\lambda/dz|\ll 1$等价.

$$\psi_n(z)\approx A_n\left(\frac{a}{|z-z_n^{经典}|}\right)^{\frac{1}{4}}\sin\left[\frac{2}{3}\left(\frac{|z-z_n^{经典}|}{a}\right)^{\frac{3}{2}}+\frac{\pi}{4}\right]. \tag{14}$$

这样，渐近表示式（12）和（14）给出半经典的波函数。利用（14）式可以得到爱里函数的根$\zeta_n=-\alpha_n$的明显表示式，因而也就可以得到在半经典情形下能级的明显表示式（6）。为此，必须令正弦函数中的宗量等于π的整数倍，

$$\frac{2}{3}|\zeta|^{\frac{3}{2}}+\frac{\pi}{4}=(n+1)\pi\quad(n=0,\ 1,\ 2,\ \cdots),$$

所以

$$\alpha_n=|\zeta_n|=\left[\frac{3}{2}\left(n\pi+\frac{3\pi}{4}\right)\right]^{\frac{2}{3}}, \tag{15}$$

因而[见方程(6)]

$$E_n=\frac{1}{2}(9\pi^2\mu g^2\hbar^2)^{\frac{1}{3}}\left(n+\frac{3}{4}\right)^{\frac{2}{3}}. \tag{16}$$

自然，即使不知道波函数，利用玻尔-索末菲量子化条件也可以得到上述结果（见§1.28题）。

在半经典情形下，也可以求得归一化常数A_n的简单表示式。

的确，因为当$n\gg1$时，波函数(7)在经典区域$0<z<z_n^{经典}$中很快地振荡[见方程(14)]，而在这区域之外指数地减少，所以在方程(10)的积分中，正弦函数的平方可以用它的平均值$\frac{1}{2}$代替，并把ζ的积分区域限制到$\zeta=0$为止。考虑到$n\gg1$，于是得

$$A_n\approx(\alpha_n)^{-\frac{1}{4}}\approx\left(\frac{2}{3\pi n}\right)^{\frac{1}{4}}$$

和[见方程(10)和(10′)]

$$A_n\approx\frac{1}{\sqrt{(a)}}\left(\frac{2}{3\pi n}\right)^{\frac{1}{4}}. \tag{17}$$

现在我们来写出半经典波函数的两相邻节点间的平均距离

$\overline{\pi\lambda}$的表示式[见(9)式]，利用(4′)和(8)式得①

$$\overline{\pi\lambda}=\frac{\pi a}{\sqrt{|\zeta_n|}}=\frac{\pi a}{\sqrt{\left|\frac{z}{a}-\alpha_n\right|}}. \tag{18}$$

因为在半经典区域中$|\zeta_n|\gg 1$，我们有$\pi\overline{\lambda}\ll a$.

在反射平面附近，即当$z/a\ll\alpha_n$时，这个“半波长”为一极小值，且因为$\alpha_n\approx\left(\frac{3\pi}{2}n\right)^{\frac{2}{3}}$，它等于

$$(\overline{\pi\lambda})_{\text{极小}}\approx\left(\frac{2\pi^2}{3}\right)^{\frac{1}{3}}\frac{a}{n^{\frac{1}{3}}}. \tag{18′}$$

最后，由(16)式得公式

$$\Delta\ln E_n=\frac{\Delta E_n}{E_n}=\frac{2}{3}\frac{\Delta n}{n},$$

令其中$\Delta n=1$，就求得两相邻能级间的距离ΔE_n为

$$\Delta E_n=\frac{2}{3}\frac{E_n}{n}. \tag{19}$$

现在，我们来说明经典力学的极限过渡。这一极限可以这样来得到：将量子力学的几率密度$|\psi_n|(z)|^2$在间隔Δz内求平均，而Δz比经典运动范围的线度小得多，但又要比波长大很多倍，也就是说，它必须满足不等式

$$2\pi\overline{\lambda}\ll\Delta z\ll z_n^{\text{经典}}.$$

按照(14)式和(17)式，有

$$|\psi_n(z)|^2=\frac{1}{a}\left(\frac{2}{3\pi n}\right)^{\frac{1}{3}}\sqrt{\left(\frac{a}{|z-z_n^{\text{经典}}|}\right)}$$

① 利用(13)式，考虑到$\overline{\pi\lambda}=\Delta z=a\Delta\zeta$的事实，并根据关系式$\Delta\left(\frac{2}{3}|\zeta|^{\frac{3}{2}}\right)\approx|\zeta|^{\frac{1}{2}}\Delta\zeta=\pi$，可得到同样的结果.

$$\cdot \sin^2\left[\frac{2}{3}\left(\frac{|z-z_n^{经典}|}{a}\right)^{\frac{3}{2}}+\frac{\pi}{4}\right].$$

将这个表示式对区域Δz求平均时，可以将在Δz中振荡多次的正弦函数的平方用它的平均值$\frac{1}{2}$来代替，再乘以Δz，就得到：

$$|\psi_n(z)|^2\Delta z=\left(\frac{2}{3\pi n}\right)^{\frac{1}{2}}\frac{1}{\sqrt{(a|z-z_n^{经典}|)}}\Delta z. \tag{20}$$

在经典极限($\hbar\to 0$, $n\to\infty$)中，这一几率应该变成$\Delta t/\left(\frac{1}{2}T\right)$（因为它是归一化的），它就是在$\Delta z$中的停留时间与经典运动的半周期之比．这意味着，在经典极限中，必须有

$$\overline{|\psi_n(z)|^2}\Delta z=\frac{\Delta t}{\frac{1}{2}T}.$$

利用(16)，从方程(20)中消去$a^{\frac{1}{2}}n^{\frac{1}{6}}\sim(n\hbar)^{\frac{1}{3}}$，并且略去所有的下角标$n$，则得

$$\frac{\Delta z}{\Delta t}=\frac{2}{\frac{1}{2}T}\sqrt{\frac{EH}{\mu g}}, \tag{21}$$

式中$H=|z-z_n^{经典}|$．显然，这个比值应该等于粒子的经典速度

$$\left|\frac{dz}{dt}\right|=v_{经典}=\sqrt{2gH}.$$

因为

$$\frac{1}{2}T=\int_0^{H_{max}}\frac{dH}{v}=\int_0^{(E/\mu g)}\frac{dH}{\sqrt{2gH}}=\sqrt{\frac{2E}{\mu g^2}}, \tag{22}$$

方程$\Delta z/\Delta t=\sqrt{2gH}$的确是成立的．

最后，估计一下以下几个量的数量级是有用的．当把上面所得的结果应用到宏观粒子时，常常会碰到这些量．例如，质量

$\mu=1$g的球，在地球的重力场中($g\approx10^3$cm/s^2)从高度$H=100$cm处自由下落到石板上。

特征“零点能”$\epsilon\sim(\mu g^2\hbar^2)^{\frac{1}{3}}$[见方程(6′)]的数量级是

$$\epsilon\sim(1\times10^6\times10^{-54})^{\frac{1}{3}}=10^{-16}\text{erg}.$$

而球的能量$E=\mu gH\approx1\times10^3\times100=10^5$erg，所以，态的数目(波函数的节点数)$n$和两相邻能级间的距离$\Delta E_n$[见方程(16)和(19)]分别为

$$n\sim\left(\frac{E}{\epsilon}\right)^{\frac{1}{3}}\sim10^{32},$$

$$\Delta E_n\sim\frac{E}{n}\sim10^{-27}\text{erg}.$$

特征长度$a\sim(\hbar^2/\mu^2g)^{\frac{1}{3}}$[见方程(8)]等于

$$a\sim\left(\frac{10^{-54}}{1\times10^3}\right)^{\frac{1}{3}}=10^{-19}\text{cm}.$$

球的(最小)波长等于

$$\lambda\sim\frac{a}{x^{\frac{1}{3}}}\sim10^{-3}\text{cm},$$

这正是它应该取的数值，因为$\lambda_n\sim H$。

这些量的大小给我们这样一个观念：用经典力学定律来描述宏观物体的运动的精确性有多么大。

21．我们把波函数$\psi(x)$写成

$$\psi(x)=\exp\frac{iS(x)}{\hbar},\qquad(1)$$

代入与时间无关的薛定谔方程，得到关于S的方程：

$$\frac{1}{2\mu}\left(\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}x}\right)^2-\frac{i\hbar}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2S}{\mathrm{d}x^2}+V(x)=E$$

或

$$\left(\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}x}\right)^2-i\hbar\frac{\mathrm{d}^2S}{\mathrm{d}x^2}=p^2(x),\qquad(2)$$

其中

$$p(x)=\sqrt{\{[E-V(x)]/2\mu\}}, \tag{3}$$

它是在 x 点粒子的经典动量.

如果

$$\left(\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}x}\right)\gg\hbar\frac{\mathrm{d}^2S}{\mathrm{d}x^2}, \tag{4}$$

则方程(2)近似为

$$\left(\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}x}\right)^2=p^2(x), \tag{5}$$

这正是经典的哈密顿-雅科毕方程. 运用方程(3), 我们可把不等式(4)写成

$$\lambda\gg\frac{\lambda}{2\pi}\left|\frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}x}\right|,$$

这里的$\lambda=\hbar/p$是"局部"德布罗意波长. 这意味着, 只要德布罗意波长的改变量不超过一个波长, (5)式便是一个很好的近似.

运用(3), 我们还可写出不等式

$$p'\gg\mu\hbar\left|\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}x}\right|. \tag{6}$$

这意味着, 只要我们涉及是粒子在梯度较小的势场中以很大的动量运动, 这个近似便是良好的.

如果(6)式得到满足, 我们就能用一个级数展开$S(x)$:

$$S(x)=S_0(x)-\mathrm{i}\hbar S_1(x)+(\mathrm{i}\hbar)^2S_2(x)\cdots \tag{7}$$

这是半经典近似或WKB方法.

将(7)式代入(2)式, 便得到如下方程组:

$$\left(\frac{\mathrm{d}S_0}{\mathrm{d}x}\right)^2=p^2(x) \tag{8a}$$

$$\frac{\mathrm{d}S_1}{\mathrm{d}x}\cdot\frac{\mathrm{d}S_0}{\mathrm{d}x}+\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2S_0}{\mathrm{d}x^2}=0, \tag{8b}$$

……

第一个方程给出

$$\frac{\mathrm{d}S_0}{\mathrm{d}x}=\pm p(x) \tag{9}$$

而第二个方程导致

$$S_1=-\ln C\sqrt{p}\,. \tag{10}$$

其中C是常数.

让我们首先考虑区域$E>V(x)$(叫做经典许可的区域)，且用符号$k(x)=p(x)/\hbar$. 从方程(1)，(7)，(9)和(10)，得到

$$\psi(x)=\frac{A}{\sqrt{p}}\sin\left[\int_a^x k(x')\mathrm{d}x'\right]+\alpha, \tag{11}$$

其中A，a和α是常数.

$E=V(x)$的点是经典转折点. 当然，在转折点附近不等式(6)不再成立. 若在转折点$x=x_i$处我们写下

$$p^2=2\mu[E-V(x)]\approx 2\mu\left|\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}x}\right||x-x_i|, \tag{12}$$

代入条件(6)，经过若干运算后，我们看到，对于满足条件

$$|x-x_i|\gg\frac{\hbar}{2p}=\frac{\lambda}{4\pi} \tag{13}$$

的点x，半经典近似可以应用.

$E<V(x)$的区域是经典力学中难以达到的区域. 如果在这区域中，我们写出$k(x)=\mathrm{i}\kappa(x)$，于是

$$\kappa(x)=\frac{1}{\hbar}\sqrt{\{2\mu[V(x)-E]\}}, \tag{14}$$

则波函数具有下列形式:

$$\psi(x)=\frac{B}{\sqrt{|p|}}\exp\left[-\int_a^x\kappa(x')\mathrm{d}x'\right]+\frac{C}{\sqrt{|p|}}\exp\left[\int_a^x\kappa(x')\mathrm{d}x'\right] \tag{15}$$

如果x_1和x_2为转折点(见图24a)且在区域(a_1, b_1)和(a_2, b_2)中条件(13)不再成立，则在区域Ⅰ($x<a_1$)和区域Ⅱ($x>b_2$)有如下方程:

$$\psi_1(x)=\frac{C}{\sqrt{|p|}}\exp\left[-\int_x^{x_1}\kappa(x')\mathrm{d}x'\right],\quad x<a_1, \tag{16}$$

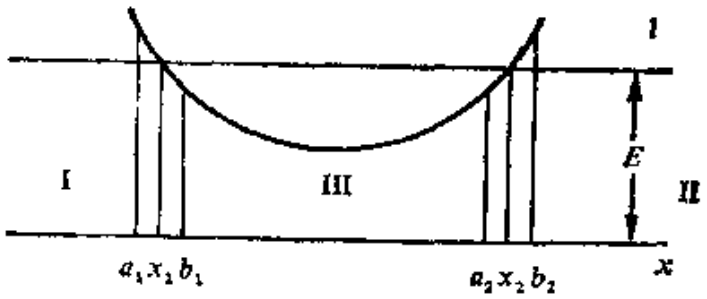


图 24a

$$\psi_{\text{II}}(x)=\frac{B}{\sqrt{|p|}}\exp\left[-\int_{x_2}^{x}\kappa(x')\mathrm{d}x'\right],\quad x>b_2, \tag{17}$$

而在区域Ⅲ($b_1<x<a_2$)中，在（11）式中取$a=x_1$即可得到解。

在区域$a_1<x<b_1$中，我们可对势场采用近似[参见(12)]

$$V(x)=E-(x-x_1)F,\quad F=\left|\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}x}\right|_{x=x_1} \tag{18}$$

这种情况下的薛定谔方程可归结为§1.20题中考虑过的薛定谔方程，波函数在区域Ⅰ，Ⅱ和Ⅲ中的衔接条件也和该题一样，结果是在x_1点，必须有

$$C=\frac{1}{2}A\text{和}\alpha=\frac{1}{4}\pi. \tag{19}$$

同样地，对于x_2点的衔接，我们有

$$B=(-1)^{n+1}\frac{1}{2}A,\quad \alpha=-\int_{x_1}^{x_2}\kappa(x')\mathrm{d}x'-n\pi+\frac{1}{4}\pi. \tag{20}$$

比较方程（19）和(20)，我们得到

$$2\int_{x_1}^{x_2}p(x)\mathrm{d}x=\left(n+\frac{1}{2}\right)h, \tag{21}$$

这就是我们所要求的量子化条件。

我们早已见到，只要离开转折点几个波长远，半经典近似就很适用[见条件(13)]；这意味着，x_1、x_2的间隔必须是许多个波，，量子数n必须很大。

22. 粒子在x点的最大动量等于$\sqrt{[-2\mu V(x)]}$，且对应于空间间隔dx和动量间隔dp的本征态的个数为$dx\,dp/\hbar$。分立能级的总数N将由下式给出：

$$N=\frac{\sqrt{(2\mu)}}{\hbar}\int[-V(x)]^{\frac{1}{2}}dx \qquad (1)$$

这积分遍及$V(x)<0$的x值。

23 (a)$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega(n=0,\ 1,\ 2,\ \cdots)$,

(b)$$E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}\left\{\sqrt{\left(\frac{2\mu a^2V_0}{\pi^2\hbar^2}\right)}+\left(n+\frac{1}{2}\right)\right\}^2-V_0$$

$$(n=0,\ 1,\ 2,\ \cdots).$$

24. $$E_n=-V_0+V_0\left\{\frac{3\hbar}{8a\sqrt{(2\mu V_0)}}\left(n+\frac{1}{2}\right)\right\}^{2/3};$$

分立能级的总数比E_n仍为负值的最大整数n大1。很容易检验：这个数与§1.22题的解中给出的数目差$\frac{1}{2}$，因为半经典近似仅对大的n才有效，所以这个差别是可以忽略的。

25. 在定态ψ_n中动能的平均值由下式给出（假设波函数是实的）

$$T=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\int\psi_n\frac{d^2\psi_n}{dx^2}dx=\frac{\hbar^2}{2\mu}\int\left(\frac{d\psi_n}{dx}\right)^2dx.$$

在半经典近似下，波函数在经典可达到的区域$(a<x<b)$内的形式为

$$\psi_n=\frac{A_n}{\sqrt{(p)}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p\,dx-\frac{\pi}{4}\right),$$

$$p=\sqrt{[2\mu(E_n-V)]},$$

所以

$$\frac{d\psi_n}{dx}=-\frac{\sqrt{p}}{\hbar}A_n\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p\,dx-\frac{\pi}{4}\right)$$

$$-\frac{1}{2}\cdot\frac{A_n}{p^{\frac{1}{2}}}\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p\mathrm{d}x-\frac{\pi}{4}\right).$$

若把这个表达式代入T的积分中，则积分限必须取经典可达到的区域的界限，因为在这区域之外，ψ_n是指数衰减的。将振荡很快的三角函数的平方用它们的平均值$\frac{1}{2}$代替，再略去包含振荡乘积的积分

$$\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p\mathrm{d}x-\frac{\pi}{4}\right)\cdot\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p\mathrm{d}x-\frac{\pi}{4}\right)$$

$$=\frac{1}{2}\sin\left(\frac{2}{\hbar}\int_a^x p\mathrm{d}x-\frac{\pi}{2}\right),$$

我们得

$$\bar{T}=\frac{A_n^2}{4\mu}\int_a^b\left[p+\frac{\hbar^2}{4p^3}\left(\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x}\right)^2\right]\mathrm{d}x.$$

准经典近似的适用条件$|\mathrm{d}\lambda/\mathrm{d}x|=(\hbar/p^2)|\mathrm{d}p/\mathrm{d}x|\ll 1$意味着，在积分号下的第二项比第一项小得多，因此，利用量子化条件，我们得：

$$\bar{T}=\frac{A_n^2}{4\mu}\int_a^b p\mathrm{d}x=\frac{A_n^2}{4\mu}\pi\hbar\left(n+\frac{1}{2}\right).$$

常数A_n由归一化条件

$$\int\psi_n^2\mathrm{d}x\approx A_n^2\int_a^b\frac{1}{p}\cos^2\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^x p\mathrm{d}x-\frac{\pi}{4}\right)\mathrm{d}x$$

$$\approx\frac{A_n^2}{2}\int_a^b\frac{\mathrm{d}x}{p}=1$$

确定。另一方面，将量子化条件

$$\int_a^b p\mathrm{d}x=\int_a^b\sqrt{[2\mu(E-V_0)]}\mathrm{d}x=\pi\hbar\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

对n求微商，得

$$\mu\frac{\mathrm{d}E_n}{\mathrm{d}n}\int_a^b\frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{[2\mu(E_n-V)]}}$$

$$=\mu\frac{\mathrm{d}E_n}{\mathrm{d}n}\int_a^b\frac{\mathrm{d}x}{p}=\pi\hbar,$$

所以

$$A_n^2=\frac{2\mu}{\pi\hbar}\frac{\mathrm{d}E_n}{\mathrm{d}n}.$$

将上式代入平均动能的表示式，则

$$T=\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}E_n}{\mathrm{d}n}\left(n+\frac{1}{2}\right).$$

26. (a)$T=\frac{1}{2}\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$,

(b)$T=\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}\left[\sqrt{\left(\frac{2\mu a^2V_0}{\pi^2\hbar^2}\right)}+\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]\left(n+\frac{1}{2}\right)$.

27. 由维里定理得

$$2T=\nu V,$$

所以

$$E=\frac{2+\nu}{\nu}T.$$

将动能平均值（见上题）

$$T=\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}E_n}{\mathrm{d}n}\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

代入上式，则得

$$E=\frac{2+\nu}{2\nu}\frac{\mathrm{d}E_n}{\mathrm{d}n}\left(n+\frac{1}{2}\right),$$

它的解为

$$E=A\left(n+\frac{1}{2}\right)^{2\nu/(2+\nu)}. \qquad (1)$$

在此情况下，ν是一个整数，常数A可以从如下量子化条件得到

$$I(E)=2\int_0^b\sqrt{[2\mu(E-ax^\nu)]}\,dx=nh\left(n+\frac{1}{2}\right),\qquad(2)$$

式中 $b=E/a$。

对（2）式对E微分，引入新的变量$u=ax^\nu/E$，且应用（1）式，则得

$$A=\sqrt{\left(\frac{\pi}{2\mu}\right)}\hbar a^{1/\nu}\left[\frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}+1/\nu\right)}{\Gamma(1/\nu)}\right]^{2\nu/(2+\nu)}$$

如果$\nu=2$，则$A=\hbar\sqrt{(2a/\mu)}$，（1）式化为标准的表示式

$$E=\hbar\sqrt{(2a/\mu)}\left(n+\frac{1}{2}\right).$$

28 粒子的势能的形式为（见图25，又见20题）：

$$V(z)=\begin{cases}\infty & (z\leqslant 0),\\ \mu gz & (z\geqslant 0).\end{cases}$$

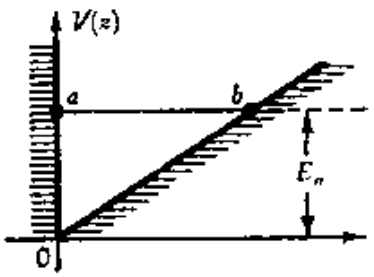


图 25

它有一个转折点是$z=0$，另一个转折点由方程$V(z)=\mu gz=E$确定，其坐标为

$$z=\frac{E}{\mu g}.$$

此时，量子化规则的右边，和通常的表示式$\pi\left(n+\frac{1}{2}\right)$略有不同。其原因如下：通常推导玻尔-索末菲量子化条件时，假定了在两个转折点$z=a$和$z=b$附近，势能可展为$(z-a)$和$(z-b)$的幂级数。而这级数是从线性项开始的。因此在波函数的半经典表示式中，相角在两转折点处从$\frac{\pi}{4}$开始：

$$\sqrt{\frac{c}{p(z)}}\sin\left[\frac{1}{\hbar}\int_a^z p(z)\,dz+\frac{\pi}{4}\right]$$

和

$$\frac{c'}{\sqrt{p(z)}}\sin\left[\frac{1}{\hbar}\int_z^b p(z)\,dz+\frac{\pi}{4}\right]\ (a\leqslant z\leqslant b)。\qquad (1)$$

这两个表示式在区间 $a\leqslant z\leqslant b$ 中应该是一致的，这就导致下面的条件：

$$\frac{1}{\hbar}\int_a^b p\,dz+\frac{\pi}{2}=(n+1)\pi\ (n=0,\ 1,\ 2,\ \cdots)。\qquad (2)$$

（在方程(1)中令两相因子之和等于π的整数倍）。

在本题所考虑的情形下，其中一个转折点($z=a=0$)对应于“垂直势阱壁”，因此(1)式中第一个相因子不是从 $\frac{\pi}{4}$ 开始（这里，与“倾斜”势阱壁情形不同，波函数从右方一直到转折点 $z=a$ 都表为半经典的，而在该点，函数应该趋于零，因而可以得出上面的结论）。(1)式中的第二个相因子和平常一样，仍从 $\frac{\pi}{4}$ 开始。现在若将两个相因子相加，则代替方程(2)得到下面的条件：

$$\frac{1}{\hbar}\int_a^b p\,dz+\frac{\pi}{4}=(n+1)\pi,$$

由此，我们得到所需的量子化条件：

$$\frac{1}{\hbar}\int_a^b p\,dz=\left(n+\frac{3}{4}\right)\pi\ (n=0,\ 1,\ 2,\ \cdots)\qquad (3)$$

在(3)式中代入

$$p=\sqrt{2\mu[E-V(z)]}=\sqrt{2\mu[E-\mu gz]},$$

$$a=0,\ b=\frac{E}{\mu g},$$

经简单计算即得

$$E=E_n=\frac{1}{2}(9\pi^2\mu g^2\hbar^2)^{\frac{1}{3}}\left(n+\frac{3}{4}\right)^{\frac{2}{3}},\qquad (4)$$

这个结果与§1.20题中所得到的半经典的结果完全一致，这是理所当然的。

若从该题中(22)式借用球跳动的经典频率值

$$\omega=\frac{2\pi}{T}=\pi g\sqrt{\frac{\mu}{2E}},$$

再由方程(4)求得两相邻能级($\Delta n=1$)的间隔：

$$\Delta E_n=\frac{\mathrm{d}E_n}{\mathrm{d}n},$$

我们就得到下面的关系：

$$\Delta E=\hbar\omega$$

它表示半经典能级是近似地等间隔的。

29. $$\int_a^b\sqrt{2\mu[E-V(x)]}\,\mathrm{d}x=\left(n+\frac{3}{4}\right)\pi\hbar$$

(与§1.28题的讨论比较)。

30*. 我们从量子化条件

$$\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{\{2\mu[E-V(x)]\}}\,\mathrm{d}x=\pi\hbar\left(n+\frac{1}{2}\right),$$

出发，若势能$V(x)$给定，用它来确定能级，或更确切地说确定$n(E)$。倘若$V(x)$是偶函数，则我们有

$$2\int_0^a\sqrt{\{2\mu[E-V(x)]\}}\,\mathrm{d}x=\pi\hbar\left(n+\frac{1}{2}\right),\qquad(1)$$

式中$x_2=-x_1=a$，$E=V(a)$。积分方程(1)可如下求解①：将(1)式对E微分并将V看作变量来取代x，我们得

$$\frac{\pi\hbar}{\sqrt{(2\mu)}}\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}E}=\int_0^a\frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{(E-V)}}=\int_0^E\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}V}\cdot\frac{\mathrm{d}V}{\sqrt{(E-V)}}.\qquad(2)$$

用$(\alpha-E)^{-\frac{1}{2}}$乘(2)式并对$E$从0到$\alpha$积分，这里$\alpha$是一个待定的参数，我们得

① 参考Landau和Lifshitz, *Mechanics*, Pergamon Press, Oxford, 1960, §12.

$$\int_0^a \frac{\pi\hbar}{\sqrt{2\mu}} \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}E} \cdot \frac{\mathrm{d}E}{\sqrt{(\alpha-E)}} = \int_0^a \mathrm{d}E \int_0^E \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}V} \cdot \frac{\mathrm{d}V}{\sqrt{[(\alpha-E)(E-V)]}}$$

$$= \int_0^a \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}V} \cdot \mathrm{d}V \int_V^a \frac{\mathrm{d}E}{\sqrt{[(\alpha-E)(E-V)]}} = \pi x(\alpha).$$

将$\alpha=V$代入，我们得

$$x(V)=\frac{\hbar}{\sqrt{(2\mu)}}\int_{E_0}^{V}\frac{\mathrm{d}E}{\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}n}\sqrt{(V-E)}},$$

式中$x(V)$是$V(x)$的反函数，$\mathrm{d}E/\mathrm{d}n$被看作E的函数，而E_0是能量标度的零点。

31*. (1)在动量表象中薛定谔方程的形式为

$$\left\{\frac{p^2}{2\mu}+\hat{V}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\right\}G(p)=EG(p),$$

其中$\hat{V}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)=V(x)$是粒子的势能算符。

我们来求这个方程的如下形式的解

$$G(p)=\exp\left[-\frac{1}{\hbar}S(p)\right] \qquad (1)$$

将$S(p)$按 的幂展开：

$$S(p)=S_0(p)+\hbar S_1(p)+\hbar^2 S_2(p)+\cdots \qquad (2)$$

为了把算符$\hat{V}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)$作用在波函数$G(p)$上所得到的表示式按$\hbar$的幂展开，我们设势能可以展成$x$的幂级数。这样，

$$\hat{V}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{V^{(n)}(0)}{n_1}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)^n. \qquad (3)$$

考虑这一级数中的各项对波函数(1)的作用：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}S\right)=\exp\left(-\frac{i}{\hbar}S\right)\frac{\partial S}{\partial p},$$

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)^2\exp\left(-\frac{i}{\hbar}S\right)=\exp\left(-\frac{i}{\hbar}S\right)\left[\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)^2+i\hbar\frac{\partial^2 S}{\partial p^2}\right],$$

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)^3\exp\left(-\frac{i}{\hbar}S\right)=\exp\left(-\frac{i}{\hbar}S\right)\left[\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)^3+i\hbar(1+2)\frac{\partial^2 S}{\partial p^2}\cdot\frac{\partial S}{\partial p}+O(\hbar^2)\right].$$

一般说来，用归纳法不难证明：

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)^n\exp\left(-\frac{i}{\hbar}S\right)$$

$$=\exp\left(-\frac{i}{\hbar}S\right)\left[\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)^n+i\hbar\left(\sum_{k=1}^{n-1}k\right)\frac{\partial^2 S}{\partial p^2}\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)^{n-2}+O(\hbar^2)\right]$$

$$=\exp\left(-\frac{i}{\hbar}S\right)\left[\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)^n+i\hbar\frac{n(n-1)}{2}\frac{\partial^2 S}{\partial p^2}\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)^{n-2}+O(\hbar^2)\right]. \tag{4}$$

由(3)和(4)式，我们得：

$$\hat{V}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}S\right)$$

$$=\exp\left(-\frac{i}{\hbar}S\right)\left[V\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)+\frac{i\hbar}{2}\frac{\partial^2 S}{\partial p^2}V''\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)+\cdots\right].$$

这样，作用函数$S(p)$的方程有如下形式：

$$\frac{p^2}{2\mu}+V\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)+\frac{1}{2}i\hbar\frac{\partial^2 S}{\partial p^2}V''\left(\frac{dS}{dp}\right)+\cdots=E.$$

将S的表示式(2)代入，把$\hbar$的同次幂归并一起，就得到下面的决定S_0和S_1的方程：

$$\frac{p^2}{2\mu}+V\left(\frac{\partial S_0}{\partial p}\right)=E, \tag{5}$$

$$\frac{\partial S_1}{\partial p}V'\left(\frac{\partial S_0}{\partial p}\right)+\frac{1}{2}\frac{\partial^2 S_0}{\partial p^2}V''\left(\frac{\partial S_0}{\partial p}\right)=0. \tag{6}$$

用$x(p)$表示粒子在场$V(x)$中运动时坐标对动量的依赖关系。由方程(5)解出$\partial S_0/\partial p$：

$$\frac{\partial S_0}{\partial p}=x(p),$$

由此

$$S_0=\int x(p)\mathrm{d}p.$$

从方程(6)，我们得：

$$\frac{\partial S_1}{\partial p}=-\frac{1}{2}\frac{\partial^2 S_0}{\partial p^2}\frac{V''(\partial S_0/\partial p)}{V'(\partial S_0/\partial p)}.$$

容易看出，上式右边是函数

$$-\frac{1}{2}\ln\left|V'\left(\frac{\partial S_0}{\partial p}\right)\right|$$

对动量的微商，所以

$$S_1=-\frac{1}{2}\ln\left|V'\left(\frac{\partial S_0}{\partial p}\right)\right|.$$

这样一来，在动量表象中的半经典波函数的最终形式为

$$G(p)=\frac{C}{\sqrt{|V'(\partial S_0/\partial p)|}}\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int x(p)\,\mathrm{d}p\right]. \tag{7}$$

上式分母的意义是很清楚的，只要注意到$|V'(\partial S_0/\partial p)|$是用动量$p$表示的力，即$|\mathrm{d}p/\mathrm{d}t|$。这意味着，在半经典情形下，发现动量在$p$与$p+\mathrm{d}p$之间的几率正比于相应的时间间隔$\mathrm{d}t$：

$$|G|^2\mathrm{d}p=\frac{|C|^2}{|\mathrm{d}p/\mathrm{d}t|}\mathrm{d}p=|C|\,\mathrm{d}t$$

这是理所当然的。

（2） 现在转到问题的第二部分，即证明所求得的波函数$G(p)$可由坐标表象中的半经典波函数的傅里叶变换得到。

在x表象中半经典波函数的形式为

$$\psi(x)=\frac{c_1}{\sqrt{|p(x)|}}\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int p(x)\,\mathrm{d}x\right],$$

其中$p(x)$是动量，它是坐标的函数

$$p(x)=\sqrt{\{2\mu[E-V(x)]\}}\,.$$

在动量表象中相应的函数是①

$$\tilde{G}(p)=\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)}}\int\mathrm{d}x\psi(x)\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px\right)$$

$$=\frac{c_1}{\sqrt{(2\pi\hbar)}}\int\frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{|p(x)|}}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[\int p(x)\mathrm{d}x-px\right]\right\}\tag{8}$$

利用作用量$S=\int p\mathrm{d}x$比$\hbar$大得多这一事实，我们将方程(8)中的指数在其极大值附近展成级数，就能计算(8)中的积分（鞍点法）。

为了找出极大值，令$\varphi(x)=\int p(x)\mathrm{d}x-px$的一阶微商等于零：

$$\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x}=p(x)-p=\sqrt{[2\mu(E-V(x))]}-p=0\tag{9}$$

这个方程的解是$x(p)$，即在场V中粒子坐标作为动量的函数，也就是我们在问题的第一部分中所考虑的函数。

$\varphi(x)$的二阶微商为

$$\frac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}x^2}=-\frac{\mu V'}{\sqrt{[2\mu(E-V)]}}=\mu\frac{(\mathrm{d}p/\mathrm{d}t)(x)}{p(x)}\,.$$

为了求φ''在极大处的值，应把$x(p)$看作x，这时，$p[x(p)]$

①这里用$\tilde{G}(p)$表示这个函数，是为了与在(1)小节中得到的动量表象中的半经典函数区别开来，我们的任务是要证明这两个函数相等。

$=p$，所以

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}x^2}\right)_{x=x(p)}=2\mu\left(\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t}(p)\right)_p^{-1}.$$

因此，$\varphi(x)$在极大值附近的展开式为

$$\varphi(x)=\int_{x_0}^{x(p)}\sqrt{[2\mu(E-V)]}\,\mathrm{d}x-px(p)$$

$$+\mu\left(\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t}(p)\right)_p[x-x(p)]^2.$$

将这些因子代入$\tilde{G}(p)$中，把在极大值 $x=x(p)$ 处缓慢变化的因子$1/\sqrt{|p(x)|}$ 提到积分号外，我们就得到：

$$\tilde{G}(p)=\frac{c_1}{\sqrt{(|p|2\pi\hbar)}}\exp\left\{\frac{1}{\hbar}\left[\int_{x_0}^{x(p)}\sqrt{\{2\mu(E-V)\}}\right.\right.$$

$$\left.\left.\cdot\mathrm{d}x-px(p)\right]\right\}$$

$$\times\int\mathrm{d}x\exp\left\{\frac{\mathrm{i}\mu}{\hbar}\left(\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t}(p)\right)_p[x-x(p)]^2\right\}$$

$$=\frac{c_1}{\sqrt{(2\pi\hbar|p|)}}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[\int_{x_0}^{x(p)}\sqrt{\{2\mu(E-V)\}}\right.\right.$$

$$\left.\left.\cdot\mathrm{d}x-px(p)\right]\right\}\sqrt{\left(\frac{\hbar\pi}{2\mathrm{i}\mu}\frac{|p|}{|\mathrm{d}p/\mathrm{d}t|}\right)}$$

$$=\frac{c_1}{\sqrt{(4\mu\mathrm{i})}}\frac{1}{\sqrt{|\mathrm{d}p/\mathrm{d}t|}}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[\int_{x_0}^{x(p)}\right.\right.$$

$$\left.\left.\sqrt{\{2\mu(E-V)\}}\mathrm{d}x-px(p)\right]\right\}.$$

现在我们来证明，上式方括号中的式子可写成$-\int x(p)\,\mathrm{d}p$。为此，将它对p求微商：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}\left(\int^{x(p)}\sqrt{\{2\mu[E-V(x)]\}}\,\mathrm{d}x-px(p)\right)$$

$$=\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}p}\sqrt{(2\mu\{E-V[x(p)]\})}-p\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}p}-x(p).$$

根据(9)式，前两项互相消去，因而

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}(\cdots)=-x(p).$$

于是得到

$$\int^{x(p)}\sqrt{[2\mu(E-V)]}\,\mathrm{d}x-px(p)=-\int x(p)\mathrm{d}p.$$

这样，函数$\tilde{G}(p)$就有如下的形式：

$$\tilde{G}(p)=\frac{c_1}{\sqrt{(4\mu i)}}\cdot\frac{1}{\sqrt{|\mathrm{d}p/\mathrm{d}t|}}\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int x(p)\mathrm{d}p\right],$$

除常数因子外，它与方程(7)中的$G(p)$相同：

$$\tilde{G}(p)=cG(p),$$

这就是所要证明的。

32. 一个自由的平面转子的哈密顿量，可简化为一个形式为$\hat{M}_z^2/2I$的动能算符，其中$\hat{M}_z$是转子的角动量在转动轴(即z轴)上的分量的算符。

转子的定态薛定谔方程可写为（用$(\hbar/i)(\partial/\partial\varphi)$代替$\hat{M}_z$，$\varphi$是转子绕$z$轴的转角）：

$$-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\varphi^2}=E\psi.$$

令$\sqrt{(2EI/\hbar^2)}$等于整数$m(m=0,\ \pm1,\ \pm2,\ \cdots)$，则得这个方程的满足单值条件（在此情形下就是对$\varphi$的周期性条件）的通解为

$$\psi_m(\varphi)=c_1\sin\ m\varphi+c_2\cos\ m\varphi,$$

式中c_1和c_2是任意常数，按照刚才的考虑，相应的能级等于

$$E_m=\frac{\hbar^2m^2}{2I}.$$

如所预期的，每个$m\neq 0$的能级对转动方向都是二重简并的。同时对应于角动量的一个确定值($M_z=m\hbar$)的归一化的定态波函数，显然等于

$$\psi_m(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{(2\pi)}}\exp(im\varphi).$$

33. $\psi(\varphi,t)=\frac{1}{2}A[1-\cos 2\varphi\exp(-2i\hbar t/I)]$,

式中I是转子的转动惯量。

34. 按照通常的热力学关系$T=-\partial E/\partial a$，金属丝上的张力T与体系的能量E有关。体系的能级由如下方程给出（参考§1.32题）：

$$E_n=\frac{n^2\hbar^2}{2\mu a^2},$$

于是我们得到张力

$$T=\frac{n^2\hbar^2}{\mu a^3}.$$

35. 对于给定的势，哈密顿算符有如下的形式：

$$\hat{H}=\frac{1}{2\mu}p^2+\frac{1}{2}V_0\exp\left(b\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)+\frac{1}{2}V_0\exp\left(-b\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right).$$

因为

$$\exp\left(b\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)a(p)=a(p+b\hbar),$$

所以薛定谔方程可写成一个有限差分方程：

$$\frac{1}{2\mu}p^2a(p)+\frac{1}{2}V_0a(p+b\hbar)+\frac{1}{2}V_0a(p-b\hbar)=Ea(p).$$

36. $$\frac{\hbar^2}{2\mu}k^2a(k)+\sum_{-\infty}^{+\infty}V_na\left(k+\frac{2\pi n}{b}\right)=Ea(k)$$

$$\left[k=\frac{p}{\hbar},\ V(x)=\sum_{-\infty}^{+\infty}V_n\exp\left(-\frac{2\pi nix}{b}\right),V_n=V^*_{-n}\right].$$

37. 在势阱区域($0<x<a$)内波函数的形式为

$\psi=c_1\exp(i\kappa_1 x)+c_2\exp(-i\kappa_1 x)$, $\kappa_1=\frac{\sqrt{(2\mu E)}}{\hbar}$, 而在势垒区域($-b<x<0$)内则为

$\psi=c_3\exp(i\kappa_2 x)+c_4\exp(-i\kappa_2 x)$, $\kappa_2=\frac{\sqrt{[2\mu(E-V_0)]}}{\hbar}$.

因为$\psi(x)=$常数$\times\psi(x+l)$ (这常数的绝对值等于1, 令它等于e^{-ikl}, $l=a+b$); 所以在相邻的一个势垒区域($a<x<a+b$)内, 我们有

$\psi=\exp(ikl)\{c_3\exp[i\kappa_2(x-l)]+c_4\exp[-i\kappa_2(x-l)]\}$.

根据波函数及其一阶微商在$x=0$和$x=a$处连续的要求, 可得到下列四个方程:

$$c_1+c_2=c_3+c_4$$

$$c_1\exp(i\kappa_1 a)+c_2\exp(-i\kappa_1 a)=\exp(ikl)[c_3\exp(-i\kappa_2 b)+c_4\exp(i\kappa_2 b)],$$

$$\kappa_1(c_1-c_2)=\kappa_2(c_3-c_4),$$

$$\kappa_1[c_1\exp(i\kappa_1 a)-c_2\exp(-i\kappa_1 a)]=\kappa_2[c_3\exp(-i\kappa_2 b)-c_4\exp(i\kappa_2 b)]\exp(ikl).$$

这方程组仅当

$$\cos kl=\cos\kappa_1 a\cdot\cos\kappa_2 b-\frac{\kappa_1^2+\kappa_2^2}{2\kappa_1\kappa_2}\sin\kappa_1 a\cdot\sin\kappa_2 b \qquad (1)$$

时才有非零解.

我们来研究两种情形:

(a) $E<V_0$, κ_2是纯虚数.

令虚符号$\kappa_2=i\kappa$, 方程(1)可写为

$$\cos kl=\cos\kappa_1 a\cdot\cosh\kappa b+\frac{\kappa^2-\kappa_1^2}{2\kappa_1\kappa}\sin\kappa_1 a\cdot\sinh\kappa b. \qquad (2)$$

这样, 容许能带由下列关系式确定:

$$-1\leqslant\cos\kappa_1 a\cdot\cosh\kappa b+\frac{\kappa^2-\kappa_1^2}{2\kappa_1\kappa}\sin\kappa_1 a\cdot\sinh\kappa b\leqslant 1.$$

为了讨论允许能带分布的一般规律性，我们来考虑下列极限情况：

$$\sqrt{(2\mu V_0)}\,b\ll 1,\quad a\gg b,\quad E\ll V_0.$$

引进符号$(\mu V_0/\hbar^2)ab=\gamma$，这时方程(2)近似地可表成：

$$\cos ka=\gamma\frac{\sin\kappa_1 a}{\kappa_1 a}+\cos\kappa_1 a \qquad (3)$$

在图26中，我们画出了$[\gamma\sin\kappa_1 a/\kappa_1 a)+\cos\kappa_1 a]$作为$\kappa_1 a$的函数的曲线。容许能带用粗线标在$\kappa_1 a$轴上。

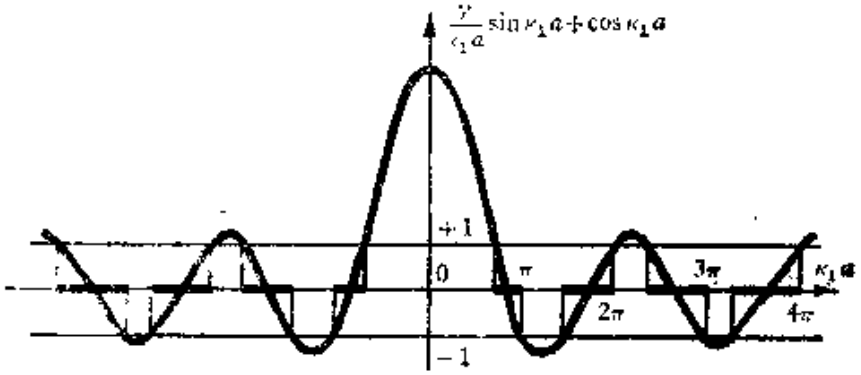


图 26

在每一个$\kappa_1 a=n\pi$点的右边有一禁戒能带。从图上可以清楚地看出，随着带数目的增加，禁戒能带就越来越窄。我们可以容易地估计出禁戒能带的宽度。当

$$\cos(\kappa_1 a-\varphi)=(-1)^n\cos\varphi,\quad \tan\varphi=\frac{\gamma}{\kappa_1 a}$$

时，要(3)式左边取值$(-1)^n$，只有当$\kappa_1 a=n\pi$和$\kappa_1 a=n\pi+2\varphi$时才可能。所以禁戒能带的宽度等于2φ。当n值很大时，

$$2\varphi\approx\frac{\gamma}{n\pi}.$$

(b) $E>V_0$。在这个情况下，容许能带由下列关系式确定：

$$-1\leqslant\cos\kappa_1 a\cdot\cos\kappa_2 b-\frac{\kappa_1^2+\kappa_2^2}{2\kappa_1\kappa_2}\sin\kappa_1 a\cdot\sin\kappa_2 b\leqslant+1.$$

38*. 让我们考虑周期场中粒子运动的一般问题。薛定谔方程写成

$$\psi''+f(x)\psi=0, \tag{1}$$

式中 $$f(x+na)=f(x).$$

设ψ_1和ψ_2是(1)的两个线性无关的解，则很容易得出

$$\psi_1\psi_2''-\psi_2\psi_1''=0,$$

或朗斯基行列式$W(=\psi_1\psi_2'-\psi_2\psi_1')$是与$x$无关的。

由于$f(x)$是周期函数，所以 $\psi_1(x+a)$ 和 $\psi_2(x+a)$必定也是(1)的解，而且可以展成$\psi_1(x)$和$\psi_2(x)$的线性组合：

$$\left.\begin{aligned}\psi_1(x+a)&=c_1\psi_1(x)+c_2\psi_2(x),\\ \psi_2(x+a)&=c_3\psi_1(x)+c_4\psi_2(x),\end{aligned}\right\} \tag{2}$$

从(2)式看出，在 $x+a$ 处的朗斯基行列式等于在x处的朗斯基行列式乘以$c_1c_4-c_2c_3$。因此，$c_1c_4-c_2c_3$应该等于1.

现在我们来求$\psi_1(x)$和$\psi_2(x)$如下形式的解

$$\psi_1(x+a)=\lambda_1\psi_1(x),\quad \psi_2(x+a)=\lambda_2\psi_2(x),$$

或者，根据(2)式，我们必须求方程组

$$\left.\begin{aligned}c_1\psi_1(x)+c_2\psi_2(x)&=\lambda\psi_1(x),\\ c_3\psi_1(x)+c_4\psi_2(x)&=\lambda\psi_2(x)\end{aligned}\right. \tag{3}$$

的解，这导致关于λ的本征值方程：

$$\lambda^2-(c_1+c_4)\lambda+1=0, \tag{4}$$

这里我们应用了$c_1c_4=c_2c_3$的事实。为使 $\psi_1(x)$和 $\psi_2(x)$ 是物理上可接受的解，λ的绝对值必须等于1.当 $\frac{1}{2}(c_2+c_4)<1$，且在 λ_1和λ_2互为复共轭时，这是可能的。所以可写成

$$\left.\begin{aligned}\psi_1(x+a)&=\exp(ika)\ \psi_1(x),\\ \psi_2(x+a)&=\exp(-ika)\ \psi_2(x),\end{aligned}\right. \tag{5}$$

或等价地有

$$\psi_1(x)=\exp(ikx)u_1(x),$$
$$\psi_2(x)=\exp(-ikx)u_2(x), \tag{6}$$

式中$u_1(x)$和$u_2(x)$是周期函数。为了看出(5)式和(6)式的意义，讨论$f(x)$是常数的情况是有益的①。从对这种情况的讨论看出，对某些能量值，(5)式成立。而对于其他能量值没有物理上可接受的解。

现在考虑势能

$$V(x)=\frac{\hbar^2 p}{2\mu a}\sum_{n=-\infty}^{+\infty}\delta(x+na). \tag{7}$$

因为V有奇点，所以，代替通常对$\psi'(x)$应为连续函数的要求，我们对薛定谔方程在包含奇点(从$-\epsilon$到$+\epsilon$，ϵ是正的且趋于零)的小区间积分，得到如下边界条件：

$$\psi'(0+)-\psi'(0-)=\frac{P}{a}\psi(0). \tag{8}$$

利用(6)式，我们可在区间$0<x<a$和$-a<x<0$上写出如下的解：

$$\psi_1(x)=A\exp(i\kappa x)+B\exp(-i\kappa x),\quad \kappa=\sqrt{(2\mu E/\hbar)},\quad 0<x<a,$$
$$\psi_1(x)=\exp(-ikx)\{A\exp[i\kappa(x+a)]+B\exp[-i\kappa(x+a)]\},\quad -a<x<0,$$

并且由(8)式和ψ的连续性条件，我们有

$$A+B=\exp(-ika)[A\exp(i\kappa a)+B\exp(-i\kappa a)],$$
$$i\kappa[A-B]-ik[A\exp(-ika+i\kappa a)-B\exp(-ika-i\kappa a)]=(p/a)(A+B),$$

从而得到方程[比较§1.37题中的(3)]：

①详细的讨论参考H. Jones，《晶体中的布里渊区和电子态的理论》，Amsterdam: North Holland Publishing Company, 1960. 还参考 H.A. Kramers, Physica 2, 483 (1935)

$$\cos ka=\cos \kappa a+\frac{P}{2}\frac{\sin \kappa a}{\kappa a} \qquad (9)$$

在图26中，我们已经画出了(9)式右边的图形。作为κa的函数，将它写成$f(\kappa a)$。能隙宽度曾在§1.16题中计算过。

当$\cos \kappa a=+1$或-1，即$k=0$，π/a，$2\pi/a$，…，或$k=k_n=n\pi/a$时，出现带边。为求带边处的有效质量，必须在下带边将E(或κ)按$(k-k_n)$的幂展开，或在上带边将E(或κ)按(k_n-k)的幂展开。

在上带边处，

$$\kappa_n a=n\pi,$$

或

$$E_n=\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2,$$

且写出

$$\kappa=\frac{n\pi}{a}-\kappa', \quad k=\frac{n\pi}{a}-k',$$

我们得到

$$\kappa'=\frac{k'^2 n\pi a}{P},$$

从而，由关系式

$$E=E_n-\frac{\hbar^2 k'^2}{2\mu^*},$$

即可确定有效质量

$$\mu^*=-\frac{\mu a P}{2\pi^3 n^3}.$$

在下带边处情况要复杂得多，因为对应于这些带边的κ值是一超越方程的解①。

39*. 因为势是周期的，薛定谔方程的解必须满足

$$\psi(x+a)=z\psi(x),$$

① H. Jones，上述引文。

若 $|z|\neq 1$，波函数在某一方向无限地增大。因此，确定容许能带的条件是 $|z|=1$ 或 $z=\exp(i\varphi)$。

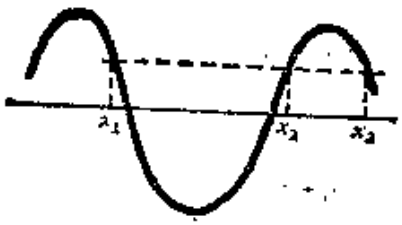


图 27

现在考虑势的一个周期（见图27），它可以分成三个区域：

$$x_1<x<x_2,\quad x_2<x<x_3,\quad x_3<x.$$

在第一个区域中解可写成：

$$\psi_1=\frac{c_1}{\sqrt{p}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{x_1}^{x}p\,dx\right)+\frac{c_2}{\sqrt{p}}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{x_1}^{x}p\,dx\right)$$

或者写成另一种形式：

$$\psi_1=\frac{c_1'}{\sqrt{p}}\exp\left[-i\left(\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{x_2}p\,dx-\frac{\pi}{4}\right)\right]+\frac{c_2'}{\sqrt{p}}\exp\left[i\left(\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{x_1}p\,dx-\frac{\pi}{4}\right)\right],$$

其中

$$c_1'=c_1\exp\left[i\left(\alpha-\frac{\pi}{4}\right)\right],\quad c_2'=c_2\exp\left[-i\left(\alpha-\frac{\pi}{4}\right)\right],$$

$$\alpha=\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}p\,dx. \tag{1}$$

利用半经典情况的边界条件，我们求得第二区域中的解为：

$$\psi_2=\frac{c_2'-c_1'}{i\sqrt{|p|}}\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x}|p|\,dx\right)+\frac{1}{2}\frac{c_2'+c_1'}{\sqrt{|p|}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{x_2}^{x}|p|\,dx\right)$$

或

$$\psi_2=\frac{c_1''\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{x_2}|p|\,dx\right)}{i\sqrt{|p|}}+\frac{1}{2}\frac{c_2''}{\sqrt{|p|}}\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{x_3}|p|\,dx\right)$$

其中

$$c_1''=(c_2'-c_1')\exp\beta,\quad c_2''=(c_1'+c_1')\exp(-\beta),$$

$$\beta=\frac{1}{\hbar}\int_{x_2}^{x_3}|p|\mathrm{d}x.$$

再利用边界条件，我们得到区域$x>x_3$中的解：

$$\psi_{\mathrm{II}}=-\mathrm{i}\frac{\left(c_1''-\frac{1}{\mathrm{i}}c_2''\right)\exp\left(-\frac{1}{4}\pi\mathrm{i}\right)}{\sqrt{p}}\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{x_3}^{x}p\mathrm{d}x\right)$$

$$=\mathrm{i}\frac{\left(c_1''+\frac{1}{4}c_2''\right)\exp\left(\frac{1}{4}\pi\mathrm{i}\right)}{\sqrt{p}}\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{x}^{x_3}p\mathrm{d}x\right).$$

准周期性解的条件是：

$$-\mathrm{i}\left(c_1'-\frac{c_2''}{4}\right)\exp\left(-\frac{1}{4}\pi\mathrm{i}\right)=zc_1,$$

$$-\mathrm{i}\left(c_1''+\frac{c_2''}{4}\right)\exp\left(\frac{1}{4}\pi\mathrm{i}\right)=zc_2.$$

用c_1和c_2来表示c_1''和c_2''，得到下列方程组：

$$c_1\exp(\mathrm{i}\alpha)[\exp(-\beta)+4\exp(\beta)]+\mathrm{i}c_2\exp(-\mathrm{i}\alpha)[\exp(-\beta)-4\exp(\beta)]=4zc_1,$$

$$c_1\exp(\mathrm{i}\alpha)[\exp(-\beta)-4\exp(\beta)]+\mathrm{i}c_2\exp(-\mathrm{i}\alpha)[\exp(-\beta)+4\exp(\beta)]=4\mathrm{i}zc_2.$$

z的值由这方程组有非零解的条件（即令它的系数行列式等于零）确定：

$$z^2-2z\left[\exp(\beta)+\frac{1}{4}\exp(-\beta)\right]\cos\alpha+1=0,$$

所以

$$z_{1,2}=\left[\exp(\beta)+\frac{1}{4}\exp(-\beta)\right]\cos\alpha\pm\sqrt{\left\{\left[\exp(\beta)+\frac{1}{4}\exp(-\beta)\right]^2\cos^2\alpha-1\right\}}.\qquad(2)$$

若根号下的式子是正的，则z是实数而且不等于1。在相反的情形下，z是复数而且它的模等于1：

$$z_{1,2}=\left[\exp(\beta)+\frac{1}{4}\exp(-\beta)\right]\cos\alpha \pm i\sqrt{1-\left[\exp(\beta)+\frac{1}{4}\exp(-\beta)\right]^2\cos^2\alpha},$$

$$|z_{1,2}|^2=\left[\exp(\beta)+\frac{1}{4}\exp(-\beta)\right]^2\cos^2\alpha + 1-\left[\exp(\beta)+\frac{1}{4}\exp(-\beta)\right]^2\cos^2\alpha=1.$$

因此，从方程(2)中平方根下的式子为负的条件

$$\left[\exp(\beta)+\frac{1}{4}\exp(-\beta)\right]^2\cos^2\alpha\leqslant 1, \tag{3}$$

就可以导出确定容许能带的方程。

半经典近似适用的条件是：作用量$\int p\mathrm{d}x$比$\hbar$要大得多，即

$$\alpha\gg 1,\quad \beta\gg 1.$$

据此，若我们略去负指数的项，则方程(3)可写成

$$\exp(2\beta)\cos^2\alpha\leqslant 1$$

或

$$\cos^2\alpha\leqslant\exp(-2\beta) \tag{3'}$$

作为第一级近似，我们有

$$\cos^2\alpha=0,\ \text{或}\ \alpha=n\pi+\frac{\pi}{2}\ (=\alpha_n).$$

由(1)我们得到

$$\int_{x_1}^{x_2}p\mathrm{d}x=\pi\hbar\left(n+\frac{1}{2}\right).$$

这就是玻尔-索末菲量子化定则。

由这个方程的解，我们得到在周期势场中具有不可穿透壁的一个势阱中的一组能级：

$$E_0,\ E_1,\ E_2,\ \cdots,\ E_n,\ \cdots.$$

将方程(3′)的左边在相应于第n个能级的α_n值附近展开，

$$\cos^2\alpha \approx \sin^2\alpha_n (\Delta\alpha_n)^2 \approx (\Delta\alpha_n)^2.$$

由α的定义，我们有

$$\Delta\alpha = \frac{\Delta E}{\hbar}\cdot\frac{\partial}{\partial E}\int_{x_1}^{x_2} p\,\mathrm{d}x = \frac{\Delta E}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\frac{\partial p}{\partial E}\,\mathrm{d}x$$

$$= \frac{\Delta E}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\frac{\mathrm{d}x}{v} = \frac{\Delta E}{\hbar}\cdot\frac{T}{2},$$

式中T是粒子在相应的势阱能级上运动的周期。

注意到$\exp(-2\beta)$是穿过势垒的穿透几率$W(E)$，就可以将方程(3′)写成

$$(\Delta E_n)^2 \leqslant \frac{4\hbar^2}{T_n^2}W(E_n),$$

从而得到带宽：

$$\Delta E_n = \frac{2\hbar}{T_n}\sqrt{[W(E_n)]} \ll \hbar\omega_n.$$

41. 如果我们选取

$$\psi = 4\sqrt{(2\alpha/\pi)}\,\exp(-\alpha x^2) \qquad (1)$$

作为（归一化的）试探波函数，我们得到基态能E_0必须满足不等式：

$$E_0 \leqslant \int \psi^*\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\right]\psi\,\mathrm{d}x, \qquad (2)$$

其中$V(x)<0$。

将(1)式代入(2)式，则得$E_0 \leqslant E_a$，这E_a为

$$E_a = \frac{\hbar^2\alpha}{2\mu}+\sqrt{\left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)}\int\exp(-2\alpha x^2)V(x)\,\mathrm{d}x. \qquad (3)$$

由条件

$$\frac{\partial E_a}{\partial\alpha}=0 = \frac{\hbar^2}{2\mu}+\sqrt{\left(\frac{1}{2\alpha\pi}\right)}\int\exp(-2\alpha x^2)V(x)\,\mathrm{d}x$$

$$-\sqrt{\left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)}\int 2x^2\exp(-2\alpha x^2)V(x)\,\mathrm{d}x \qquad (4)$$

求出α，就可得到E_n的极小值$E_n^{\min}$。

将(3)式和(4)式联立，我们得

$$E_n^{\min}=\sqrt{\left(\frac{4\alpha}{2\pi}\right)}\int\exp(-2\alpha x^2)(1+4\alpha x^2)V(x)\,dx<0,$$

由此得出$E_1<0$，这正是所要证明的。

42. 如果λ很小，我们希望(i)仅有一个束缚态，并且(ii)对应于束态的波函数仅仅非常缓慢地变化。在势能趋于零的区域中这个波函数为

$$\psi=A\exp(\alpha x),\quad x<0;\quad \psi=B\exp(-\alpha x),\quad a<x, \tag{1}$$

其中

$$E=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\alpha^2. \tag{2}$$

我们可以预期αa远小于1，于是波函数的连续性（近似地）意味着：

对于$0<x<a$，$A=B=\sqrt{\alpha}$和$\psi=\sqrt{\alpha}$。 (3)

为求α的值，我们考虑$\alpha a\ll 1$，即对于一级近似可把势看作δ函数势V'：$V'=-b\delta(x)$，其中

$$b=-\lambda\int_0^a V(x)\,dx \tag{4}$$

我们可以从条件（参考§1.38题和§1.17题）

$$\psi'(0+)-\psi'(0-)=\frac{2\mu}{\hbar^2}b\psi(0) \tag{5}$$

求得α。并利用(1)，(3)和(4)式，我们得到

$$\alpha=-\frac{\mu b}{\hbar^2}=\frac{\lambda\mu}{\hbar^2}\int_0^a V(x)\,dx,$$

将上式代入(2)中，则得

$$E=-\frac{\lambda^2\mu}{2\hbar^2}\left[\int_0^a V(x)\,dx\right]^2.$$

§2. 隧道效应

1. 在金属中 ($x<0$)，属于本征值E的波函数的一般形式为：

$$\psi_1=be^{ikx}+ce^{-ikx},\quad k=\sqrt{[2\mu(E+V_0)]}/\hbar.$$

在$x>0$的区域中，本征函数具有从金属发射出来的行波的形式

$$\psi_2=ae^{i\kappa x},\ \text{其中}\ \kappa=\sqrt{(2\mu E)}/\hbar.$$

在金属的界面上，波函数ψ_1和ψ_2以及它们的导数必须连续：

$$\psi_1(0)=\psi_2(0),\ \text{或}a=b+c$$

$$\psi_1'(0)=\psi_2'(0),\ \text{或}ak=(b-c)\kappa.$$

反射波的流密度与入射波的流密度之比给出反射系数

$$R_0=\left(\frac{\kappa-k}{\kappa+k}\right)^2=\left(\frac{\sqrt{(E+V_0)}-\sqrt{E}}{\sqrt{(E+V_0)}+\sqrt{E}}\right)^2$$

$$=\frac{V_0^2}{[\sqrt{(E+V_0)}+\sqrt{E}]^4}.$$

若电子的能量等于零，则反射系数R_0等于1．然而随着能量的增加，R_0很快地减小；当$E\gg V_0$时，

$$R_0\approx\frac{V_0^2}{16E^2}.$$

在另一种极限情形$E\ll V_0$下，

$$R_0\approx 1-4\sqrt{(E/V_0)}.$$

通常金属的$V_0\sim 10$eV，这时，对于0.1eV的电子，反射系数是

$$R_0=0.67.$$

2*. 在薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi''-\left(E+\frac{V_0}{e^{x/a}+1}\right)\psi=0 \qquad (1)$$

中，我们作如下转换：

$$\xi=-e^{-x/a},\quad \psi=\xi^{-ika}u(\xi).\ \text{其中}\ k=\sqrt{(2\mu E)}/\hbar.$$

我们得到函数$u(\xi)$的超几何方程

$$\xi(1-\xi)u''+(1-2ika)(1-\xi)u'-\kappa_0^2a^2u=0$$

$$[\kappa_0=\sqrt{(2\mu V_0)}/\hbar]$$

方程（1）的解在$x\to\infty(\xi\to0)$时有限，并且渐近行为像行波ce^{ikx}，它具有如下形式：

$$\psi=ce^{ikx}F\{i(\kappa-k)a,\ -i(\kappa+k)a,\ 1-2ika,\ -e^{-x/a}\}$$

$$\{\kappa=\sqrt{[2\mu(E+V_0)]}/\hbar\}.$$

要想求出反射系数，必须确定在金属内（$x\to-\infty$）波函数的形式：

$$\psi\approx c\frac{\Gamma(1-2ika)\Gamma(-2ika)}{\Gamma[-i(\kappa+k)a]\Gamma[1-i(k+\kappa)a]}e^{ikx}$$

$$+c\frac{\Gamma(1-2ika)\Gamma(2ika)}{\Gamma[i(\kappa-k)a]\Gamma[1+i(\kappa-k)a]}e^{-ikx}.$$

因此求得反射系数为

$$R_a=\left|\frac{\Gamma(2ika)\Gamma[-i(\kappa+k)a]\Gamma[1-i(\kappa+k)a]}{\Gamma(-2ika)\Gamma[i(\kappa-k)a]\Gamma[1+i(\kappa-k)a]}\right|^2$$

$$=\frac{\sinh^2\pi a(\kappa-k)}{\sinh^2\pi a(\kappa+k)}.$$

在计算R_a时，我们应当利用下列关系：

$$\Gamma(z+1)=z\Gamma(z),$$

$$\Gamma(z)\Gamma(1-z)=\pi/\sin\pi z,$$

$$\Gamma^*(ix)=\Gamma(-ix)$$

（x是实数）。当$a\to0$时，反射系数R_a的公式就变为在直角势阱情形下R_0的表示式（见前题）。

容易验证$R_a<R_0$，即在势场缓慢变化情况下的反射系数，比在势场突变情况下的小，当$a=1$Å，$V_0=10$eV，$E=0.1$eV时，我们求得$R_a=0.23$。

3. 考虑一从左向右运动，而能量$E<V_0$的粒子流。在区域Ⅱ中，波函数是出射波

$$\psi_{\text{Ⅲ}}=Ce^{ikx},\quad k=\sqrt{(2\mu E)}/\hbar.$$

在区域Ⅰ中，既有入射波，又有反射波

$$\psi_{\text{Ⅰ}}=e^{ikx}+Ae^{-ikx}.$$

在区域Ⅱ中，薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi''_{\text{Ⅱ}}-(E-V_0)\psi_{\text{Ⅱ}}=0$$

的通解为

$$\psi_{\text{Ⅱ}}=B_1e^{\kappa x}+B_2e^{-\kappa x},\quad \kappa=\sqrt{[2\mu(V_0-E)]}/\hbar.$$

系数A，B_1，B_2，C由波函数及其一阶导数的连续性决定。

在$x=0$处，这一条件导致关系式

$$1+A=B_1+B_2$$

$$ik(1-A)=\kappa(B_1-B_2).$$

在$x=a$处，类似地有

$$B_1e^{\kappa a}+B_2e^{-\kappa a}=Ce^{ika},$$

$$\kappa(B_1e^{\kappa a}-B_2e^{-\kappa a})=ikCe^{ika}.$$

从这些方程，我们得：

$$A=C\frac{k^2+\kappa^2}{4ik\kappa}e^{ika}(e^{\kappa a}-e^{-\kappa a})=C\cdot\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}\cdot\frac{e^{\kappa a}-e^{-\kappa a}}{4ik\kappa}e^{ika},$$

$$B_1=C\cdot\frac{1}{2}\left(1+\frac{ik}{\kappa}\right)e^{ika-\kappa a},$$

$$B_2=C\cdot\frac{1}{2}\left(1-\frac{ik}{\kappa}\right)e^{ika+\kappa a},$$

$$C=-\frac{4ik}{e^{\kappa a}(1-ik/\kappa)^2-e^{-\kappa a}(1+ik/\kappa)^2}e^{-ika}.$$

因为在$\psi_{\text{Ⅰ}}$中已经取入射波的形式为e^{ikx}，所以透射系数$D=CC^*$。经计算得：

$$D=\frac{4k^2\kappa^2}{(k^2-\kappa^2)\sinh^2\kappa a+4k^2\kappa^2}.$$

注意，当波回经典力学时，即当$\hbar\to 0$时，透射系数趋于零

（$\kappa a\gg 1$（即$V_0-E\gg\hbar^2/2\mu a^2$），透射系数的表示式就简化为：

$$D\approx 16\frac{E}{V_0}\left(1-\frac{E}{V_0}\right)\exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{[2\mu(V_0-E)]}a\right\}.$$

我们考虑两种具体情形：

（a） 能量$E=1\text{eV}$的电子，穿过$V_0=2\text{eV}$和$a=1\text{Å}$的势垒。我们求得D的值是0.777。

（b） 具有同样能量的质子投射在同样的势垒上。在这种情形下，可以证明透射系数小得微不足道，$D=3.6\times10^{-19}$。

4.

$$R=\frac{(k^2-\kappa^2)\sin^2\kappa a}{4k^2\kappa^2+(k^2-\kappa^2)\sin^2\kappa a}\quad\left(k=\frac{\sqrt{(2\mu E)}}{\hbar},\right.$$

$$\left.\kappa=\frac{\sqrt{[2\mu(E-V_0)]}}{\hbar}\right).$$

5. 我们有$V=a\delta(x)$，且必须分头讨论$x<0$和$x>0$的解：

$$\psi_1=e^{ikx}+Ae^{-ikx},\quad k=\frac{\sqrt{(2\mu E)}}{\hbar},\quad x<0;$$

$$\psi_2=Be^{ikx},\quad x>0.$$

边界条件是（参考§1.38题）：

$$\psi_2(0)=\psi_1(0),\quad \psi_2'(0)-\psi_1'(0)=\frac{2\mu a}{\hbar}\psi(0).$$

于是得到

$$A=\frac{-iC}{1+iC},\quad B=\frac{1}{1+iC},\quad C=\frac{\mu a}{k\hbar^2};$$

并得到穿透系数：

$$D=|B|^2=\frac{k^2\hbar}{k^2\hbar^4+\mu^2a^2}.$$

6. 波函数的形式如下：

$$\psi_1 = A\sin kx, \quad 0 < x < a,$$

$$\psi_2 = Be^{\kappa x} + B_2 e^{-\kappa x}, \quad a < x < a+b,$$

$$\psi_3 = C\sin k(2a+b-x), \quad a+b < x < 2a+b,$$

其中

$$k = \frac{\sqrt{(2\mu E)}}{\hbar}, \quad \kappa = \frac{\sqrt{[2\mu(V_0 - E)]}}{\hbar}.$$

由波函数及其导数的连续性条件，可得下列关系式：

$$A\sin ka = B_1 e^{\kappa a} + B_2 e^{-\kappa a}$$

$$Ak\cos ka = \kappa(B_1 e^{\kappa a} - B_2 e^{-\kappa a})$$

$$B_1 e^{\kappa(a+b)} + B_2 e^{-\kappa(a+b)} = C\sin ka$$

$$\kappa(B_1 e^{\kappa(a+b)} - B_2 e^{-\kappa(a+b)}) = -Ck\cos ka.$$

从这些方程消去B_1和B_2，得：

$$\left(\frac{\kappa}{k}\tan ka + 1\right)Ae^{\kappa b} = \left(\frac{\kappa}{k}\tan ka - 1\right)C,$$

$$\left(\frac{\kappa}{k}\tan ka - 1\right)Ae^{-\kappa b} = \left(\frac{\kappa}{k}\tan ka + 1\right)C.$$

由行列式为零的条件：

$$\begin{vmatrix} \left(\frac{\kappa}{k}\tan ka + 1\right)e^{\kappa b} & -\left(\frac{\kappa}{k}\tan ka - 1\right) \\ \left(\frac{\kappa}{k}\tan ka - 1\right)e^{-\kappa b} & -\left(\frac{\kappa}{k}\tan ka + 1\right) \end{vmatrix} = 0,$$

我们得

$$\left(\frac{\kappa}{k}\tan ka + 1\right)e^{\kappa b} = \pm\left(\frac{\kappa}{k}\tan ka - 1\right).$$

这个方程决定能级。

利用不等式

$$\kappa b \gg 1,$$

上面最后一个方程可以近似地写成

$$\tan ka = -\frac{k}{\kappa} \mp 2\frac{k}{\kappa}e^{-\kappa b}.$$

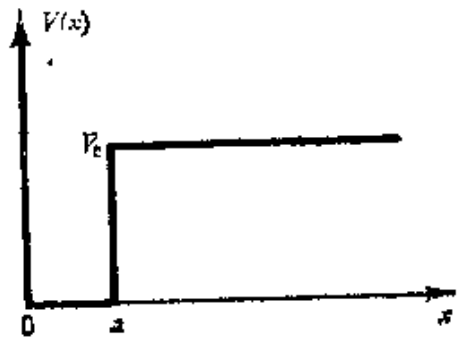


图 28

等式右边是个小量。在零级近似下（$k \ll \kappa$），我们得

$$k_0 = \frac{n\pi}{a}, \quad E_n^{(0)} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2},$$

这就是粒子在“势阱”中的能量（见§1.1题）。对于高一级的近似，我们有

$$k = \frac{n\pi}{a} - \frac{k_0}{a\kappa_0} \mp 2\frac{k_0}{a\kappa_0} e^{-\kappa_0 b} \qquad (n=1,2,3,\cdots),$$

$$E_n = E_n^{(0)} - \frac{2E_n^{(0)}}{a\kappa_0} \mp 4\frac{E_n^{(0)}}{a\kappa_0} e^{-\kappa_0 b},$$

$$\kappa_0 = \sqrt{[2\mu(V_0 - E_n^{(0)})]}/\hbar .$$

前两项 $E_n^{(1)} = E_n^{(0)} - 2\frac{E_n^{(0)}}{a\kappa_0}$ 不依赖于b，它给出在如图28所示的势阱（$b \to \infty$）中粒子能级的近似值。

在这个近似下，能级是二重简并的；这相当于不是在区域Ⅰ中就是在区域Ⅲ中有找到粒子的可能性。若考虑b为有限的情形，我们发现，粒子穿过势垒的可能性会导致能级的分裂。这一分裂指数地减小。在现在所作的近似下，我们来求系数A，B_1，B_2和C。与最低能级

$$E_n^- = E_n^{(1)} - 4\frac{E_n^{(0)}}{a\kappa_0} e^{-\kappa_0 b}$$

对应的系数如下：

$$B_1 = (-1)^{n-1}\frac{k_0}{\kappa_0} e^{-\kappa_0(b+a)} A,$$

$$C = A,$$

$$B_2 = (-1)^{n-1}\frac{k_0}{\kappa_0} e^{\kappa_0 a} A$$

与较高能级

$$E_n^+ = E_n^{(1)} + 4\frac{E_n^{(0)}}{a\kappa_0} e^{-\kappa_0 b}$$

对应的系数为

$$B_1=-(-1)^{n-1}\frac{k_0}{\kappa_0}e^{-\kappa_0(a+b)}A,$$

$$C=-A,$$

$$B_2=(-1)^{n-1}\frac{k_0}{\kappa_0}e^{\kappa_0 a}A.$$

A的值由归一化条件确定，它等于$1/\sqrt{a}$（在计算归一化积分时，区域Ⅱ的贡献可忽略）。

于是，我们求得较低能级的波函数为

$$\psi_1=\frac{1}{\sqrt{a}}\sin kx,$$

$$\psi_2=(-1)^{n-1}\frac{1}{\sqrt{a}}\frac{k_0}{\kappa_0}[e^{-\kappa_0(x-a)}+e^{-\kappa_0(a+b-x)}],$$

$$\psi_3=\frac{1}{\sqrt{a}}\sin k(2a+b-x).$$

对于较高能级，类似地得到：

$$\psi_1=\frac{1}{\sqrt{a}}\sin kx,$$

$$\psi_2=(-1)^{n-1}\frac{1}{\sqrt{a}}\frac{k_0}{\kappa_0}[e^{-\kappa_0(x-a)}-e^{-\kappa_0(a+b-x)}],$$

$$\psi_3=-\frac{1}{\sqrt{a}}\sin(2a+b-x).$$

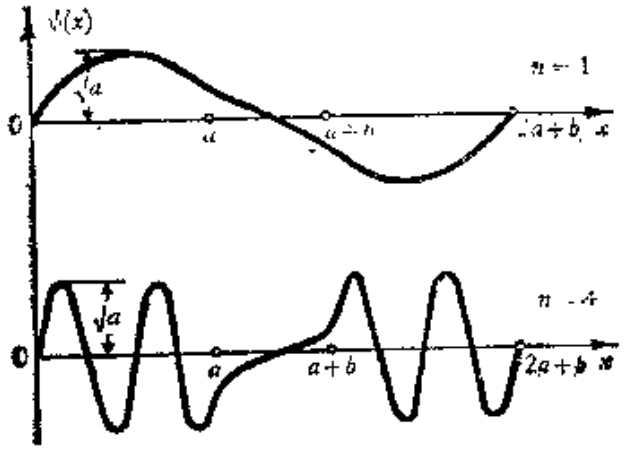
在图29中我们画出对$n=1$和$n=4$的波函数。

7* 当$-a\leqslant x\leqslant 0$时，势能$V(x)$等于$V_0(1+x/a)$。当$0\leqslant x\leqslant a$时，$V(x)$等于$V_0(1-x/a)$，当$|x|\geqslant a$时，$V(x)$等于零。引入符号（E是粒子的能量）

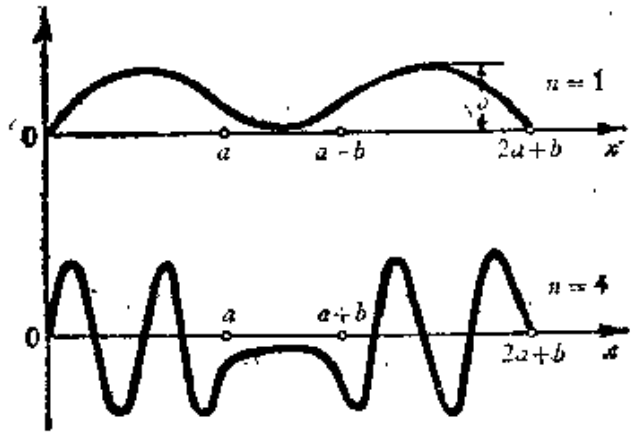
$$k_0=\frac{2\mu E}{\hbar^2},\quad \kappa_0=\frac{2\mu V_0}{\hbar^2},\qquad (1)$$

就可将这些区域中的薛定谔方程写成：

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+k_0^2\psi=0\qquad (|x|\geqslant a)\qquad (2)$$



反对称波函数（上子能级）



对称波函数（下子能级）

图 29

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}-\left(\kappa_0^2-k^2+\kappa_0^2\frac{x}{a}\right)\psi=0 \qquad (-a<x<0) \tag{3}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}-\left(\kappa^2-k^2-\kappa_0^2\frac{x}{a}\right)\psi=0 \qquad (0<x<a) \tag{4}$$

在方程（3）和（4）中分别作下列变数变换：

$$\xi=\left(\frac{a}{\kappa_0^2}\right)^{\frac{2}{3}}\left(\kappa_0^2-k^2+\kappa_0^2\frac{x}{a}\right), \tag{5}$$

$$\eta=\left(\frac{a}{\kappa^2}\right)^{\frac{2}{3}}\left(\kappa^2-k^2-\kappa^2\frac{x}{a}\right), \tag{6}$$

方程（3）和（4）变为

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2}-\zeta\psi=0, \tag{3'}$$

$$\frac{d^2\psi}{d\eta^2}-\eta\psi=0. \tag{4'}$$

(3') 或 (4') 这种形式的方程的通解是两个爱里函数 u 和 v 的线性组合。

假设粒子从左边入射到势垒上（即在 $x\geqslant a$ 处只有出射波），并取入射波的系数为1，于是我们有波函数：

$$\left.\begin{aligned}
&\psi=e^{i\kappa_0 x}+Ae^{-i\kappa_0 x} && (x\leqslant -a),\\
&\psi=Bu(\zeta)+Cv(\zeta) && (-a\leqslant x\leqslant 0),\\
&\psi=Du(\eta)+Ev(\eta) && (0\leqslant x\leqslant a),\\
&\psi=Fe^{i\kappa_0 x} && (x\geqslant a).
\end{aligned}\right\} \tag{7}$$

在 $x=-a$，$x=0$ 和 $x=a$ 点把 $\psi(x)$ 和 $d\psi/dx$ 连接起来，我们得到关于六个未知常数 A，B，C，D，E，F 的六个方程：

$$\left.\begin{aligned}
&e^{-ik_0 a}+Ae^{ik_0 a}=Bu(-\lambda)+Cv(-\lambda),\\
&i\sqrt{\lambda}\,(e^{-ik_0 a}-Ae^{ik_0 a})=Bu'(-\lambda)+Cv'(-\lambda),\\
&Bu(\mu)+Cv(\mu)=Du(\mu)+Ev(\mu),\\
&Bu'(\mu)+Cv'(\mu)=-Du(\mu)-Ev'(\mu),\\
&Du(-\lambda)+Ev(-\lambda)=Fe^{ik_0 a},\\
&Du'(-\lambda)+Ev'(-\lambda)=-i\sqrt{\lambda}\,Fe^{ik_0 a}.
\end{aligned}\right\} \tag{8}$$

在这方程组中引用了符号①

$$\lambda=k_0^2 a^{\frac{4}{3}}\kappa_0^{-\frac{4}{3}}=(\kappa_0 a)^{\frac{4}{3}}\left(\frac{k_0}{\kappa_0}\right)^2, \tag{9}$$

$$\mu=a^{\frac{4}{3}}\kappa_0^{-\frac{4}{3}}(\kappa_0^2-k_0^2)=(\kappa_0 a)^{\frac{4}{3}}\left(1-\frac{k_0^2}{\kappa_0^2}\right). \tag{10}$$

因为粒子在势垒之外左边和右边的速度是相等的，所要求的透射系数 γ 按定义是在 $x>a$ 和 $x<-a$ 处的流密度之比，所以，γ 显然等于 $|F|^2$。解方程组（8），并设爱里函数 u 和 v 被归一化而满足

① 注意不要把质量 μ 与（10）式中定义的无量纲参数 μ 混淆。

$$u'(t)v(t)-u(t)v'(t)=1,$$

我们得出

$$\gamma=|F|^2$$

$$=\lambda\cdot\{[v(u)u'(-\lambda)-v(\mu)v'(-\lambda)]^2+[v(\mu)u(-\lambda)-u(\mu)v(-\lambda)]^2\}^{-1}$$
$$\times\{v'(\mu)u'(-\lambda)-u'(\mu)v'(-\lambda)]^2+\lambda[v'(\mu)u(-\lambda)-u'(\mu)v(-\lambda)]^2\}^{-1}$$

(11)

方程（11）同方程（9），(10)，（1）一起，就可以解答我们的问题。若t是实数，则函数$u(t)$和$v(t)$是实的。函数$u(t)$和$v(t)$以及它们的导数已有表可查。

现在来求在半经典情形下，关于势垒穿透性的极限表示式。

众所周知，若粒子的波长

$$\lambda\!\!\!^{-}=\frac{\hbar}{\sqrt{\{2\mu[E-V(x)]\}}}$$

在距离$\Delta x\sim\lambda\!\!\!^{-}$范围内变化很小，则粒子的运动可看作半经典的。

在$x<-a$和$x>a$的区域中，运动是自由的，因而也是半经典的$\left(\lambda\!\!\!^{-}=\frac{1}{k_0}=\text{常数，所以}d\lambda\!\!\!^{-}/dx=0\right)$。在$-a\leqslant x\leqslant 0$和$0\leqslant x\leqslant a$这两个区域中，根据方程（1），（5）和（6），分别有

$$\lambda\!\!\!^{-}=\left(\frac{a}{\kappa_0^2}\right)^{\frac{1}{3}}\frac{1}{i\sqrt{\xi}},\quad \frac{d\lambda\!\!\!^{-}}{dx}=\frac{d\lambda\!\!\!^{-}}{d\xi}\cdot\frac{d\xi}{dx}=-\frac{1}{2i\xi^{\frac{3}{2}}},$$

和

$$\lambda\!\!\!^{-}=\left(\frac{a}{\kappa_0^2}\right)^{\frac{1}{3}}\frac{1}{i\sqrt{\eta}},\quad \frac{d\lambda\!\!\!^{-}}{dx}=\frac{d\lambda\!\!\!^{-}}{d\eta}\cdot\frac{d\eta}{dx}=\frac{1}{2i\eta^{\frac{3}{2}}}.$$

这样一来，半经典性条件$|d\lambda\!\!\!^{-}/dx|\ll 1$就导致下面的要求

$$|\xi|\gg 1\text{和}|\eta|\gg 1$$

(12)

我们来讨论能量$E<V_0$的区域（即$k_0<\kappa_0$，$\mu>0$）。

对于能量E，我们用$2l$表示势垒的宽度。显然，我们有

$$l=a\frac{V_0-E}{V_0}=a\left(1-\frac{k_0^2}{\kappa_0^2}\right),\quad a-l=a\frac{k_0^2}{\kappa_0^2}. \tag{13}$$

当然，在经典转折点$x=\pm l$（这里$\xi=0$，$\eta=0$）附近，半经典性条件（12）不成立。然而，我们可以表述一个“完整的”半经典性的条件（重要区域中的半经典性），这个条件保证势垒的穿透是“半经典的”。为此，显然必须要求非半经典行为的区域Δx（相当于区间$\Delta\xi\sim1$，$\Delta\eta\sim1$）比l和$(a-l)$要小得多。

我们有

$$(\Delta x)_{\text{非半经典}}=\left(\frac{\Delta\xi}{\left|\frac{d\xi}{dx}\right|}\right)_{\text{非半经典}}\sim\left(\frac{a}{\kappa_0^2}\right)^{\frac{1}{3}}.$$

按照方程（13），（9）和（10），条件$(\Delta x)_{\text{非半经典}}\ll l$导致要求$\mu\gg1$，而条件$(\Delta x)_{\text{非半经典}}\ll(a-l)$导致要求$\lambda\gg1$。

注意，为了满足不等式$\lambda\gg1$，在任何情形下都必须使$k_0a=a/\lambda_0\gg1$；只要将λ的定义（9）改写成$\lambda=(k_0a)^{\frac{1}{2}}(k_0/\kappa_0)^{\frac{1}{2}}$的形式就可以看出这点。同样地可以证明，对于能量$E>V_0$（即$k_0>\kappa_0$，$\mu<0$）的情况，半经典性条件就是不等式$|\mu|\gg1$，并且当满足这个条件时，不等式$\lambda\gg1$就自动地成立。从（10）式可以看出，$k_0\geq\kappa_0$时的不等式$|\mu|\gg1$，在任何情形下都要求满足上述“半经典的”半经典性条件$k_0a\equiv a/\lambda\gg1$。

于是，对于$E>V_0$和$E<V_0$这两种情况，半经典透射系数ν可以从$|\mu|\gg1$，$\lambda\gg1$时的方程（11），亦即利用$u(t)$和$v(t)$的渐近展开式得到。

这些渐近展开式有如下的形式（在任何地方都只取首项：$t>0$和$t\gg1$，$x\equiv\frac{2}{3}t^{\frac{3}{2}}$）：

$$\left.\begin{aligned} &u(t)\approx t^{-\frac{1}{4}}e^{x},\ u'(t)\approx t^{\frac{1}{4}}e^{x};\\ &v(t)\approx\frac{1}{2}t^{-\frac{1}{4}}e^{-x},\ v'(t)\approx-\frac{1}{2}t^{\frac{1}{4}}e^{-x}; \end{aligned}\right\} \tag{14}$$

$$\left.\begin{aligned} &u(-t)\approx t^{-\frac{1}{4}}\cos\left(x+\frac{\pi}{4}\right),\\ &u'(-t)\approx t^{\frac{1}{4}}\sin\left(x+\frac{\pi}{4}\right);\\ &v(-t)\approx t^{-\frac{1}{4}}\sin\left(x+\frac{\pi}{4}\right),\\ &v'(-t)\approx -t^{\frac{1}{4}}\cos\left(x+\frac{\pi}{4}\right). \end{aligned}\right\} \tag{15}$$

我们来计算下面两种情形下的半经典势垒穿透系数：

Ⅰ，$E<V_0$，$\mu\gg1$，$\lambda\gg1$。

Ⅱ，$E>V_0$，$|\mu|\gg1$　（因而$\lambda\gg1$）。

在第Ⅰ种情况下，用（14）式替换（11）式中的$u(\mu)$等等，用（15）式替换（11）式中的$u(-\lambda)$等等，并且在相加时略去指数衰减项$\sim e^{-x}$（注意，考虑这些项，一般说来，是没有意义的，因为比起$\sim e^{x}$项来，我们甚至已略去指数上升的项$\sim 1/x e^{x}$），容易求得：

$$\gamma\approx\exp\left[-\frac{8}{3}\mu^{3/2}\right]=\exp\left[-\frac{8}{3}\frac{a\sqrt{2\mu}}{\hbar V_0}(V_0-E)^{3/2}\right] \tag{16}$$

正如在半经典情形下应该成立的那样，$\gamma\ll1$（而且当$\hbar\to0$时，$\gamma\to0$）。

最后，利用大家熟知的半经典公式

$$\gamma=\exp\left(-2\int_{-l}^{l}\sqrt{\left\{\frac{2\mu}{\hbar}[V(x)-E]\right\}}\,dx\right),$$

可以得到与方程（16）完全相同的结果。

在第Ⅱ种情形，用(15)式替换$u(\mu)=u(-|\mu|)$，…和$u(-\lambda)$，

…… 即在现在的近似下得到显然的结果$\gamma\approx 1$。

最后，我们指出两个相当平凡的极限情形。

当固定a和E时，如果$V_0\to 0$，则得$\lambda\to\infty$，$\mu\to\infty$，所以按照情形Ⅱ、$\gamma\to 1$。

当固定a和V_0时，如果$E\to 0$，则得$\lambda\to 0$，所以像在任何其他形式的势垒的情形中一样，我们总有$\mu\to(\kappa_0 a)^{\frac{1}{2}}$，$\gamma\to 0$［见方程(11)］。

8*. 改变§1.14题中波函数的表示式中E和V_0的符号，就可以得到$E<V_0$情形下的波函数。

属于能量E的波函数的普遍形式是

$$\psi=c_1\left(\cosh\frac{x}{a}\right)^{-2\lambda}F\left(-\lambda+\frac{ika}{2},\quad -\lambda-\frac{ika}{2},\quad \frac{1}{2},\right.$$

$$\left.-\sinh^2\frac{x}{a}\right)+c_2\left(\cosh\frac{x}{a}\right)^{-2\lambda}\sinh\frac{x}{a}F\left(-\lambda+\frac{ika}{2}+\frac{1}{2},\right.$$

$$\left.-\lambda-\frac{ika}{2}+\frac{1}{2},\quad \frac{3}{2};\ \sinh^2\frac{x}{a}\right),\qquad (1)$$

式中

$$\lambda=\frac{1}{4}\left[\sqrt{(1-8\mu V_0 a^2/\hbar^2)}-1\right],\quad k=\sqrt{(2\mu E)}/\hbar.$$

系数c_1和c_2由下述条件确定：当$x\to\infty$时，波函数的渐近式为

$$\psi\sim e^{ikx}.$$

为了求（1）式的渐近式，我们利用关系式

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

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

$$\left.\beta+1-\alpha;\ \frac{1}{z}\right).$$

由此得：

$$\psi_{x\to-\infty}\sim(-1)^{2\lambda}\left[(c_1A_1-c_2A_2)\left(-\frac{1}{2}\right)^{-ika}e^{ikx}\right.$$

$$\left.+(c_1B_1-c_2B_2)\left(-\frac{1}{2}\right)^{ika}e^{-ikx}\right], \qquad (2)$$

$$\psi_{x\to+\infty}\sim\left[(c_1A_1+c_2A_2)\left(\frac{1}{2}\right)^{-ika}e^{-ikx}\right.$$

$$\left.+(c_1B_1+c_2B_2)\left(\frac{1}{2}\right)^{ika}e^{ikx}\right], \qquad (3)$$

这里，为了简单起见，我们引进下列符号：

$$A_1=\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\Gamma(-ika)}{\Gamma(-\lambda-ika/2)\Gamma\left(\lambda+\frac{1}{2}-ika/2\right)},$$

$$A_2=\frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\Gamma(-ika)}{\Gamma\left(-\lambda+\frac{1}{2}-ika/2\right)\Gamma(\lambda+1-ika/2)},$$

$$B_1=\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\Gamma(ika)}{\Gamma(-\lambda+ika/2)\Gamma\left(\lambda+\frac{1}{2}+ika/2\right)},$$

$$B_2=\frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\Gamma(ika)}{\Gamma\left(-\lambda+\frac{1}{2}+ika/2\right)\Gamma(\lambda+1+ika/2)}.$$

表达式（2）和（3）中系数c_2前面的符号不同，是由于$\sinh(x/a)$为一奇函数，所以，当x的值由正变为负时，表达式（1）中的第二项就改变符号。

在$+\infty$处只有出射波这一要求，导致系数c_1和c_2之间有下列关系：

$$c_1A_1+c_2A_2=0.$$

于是，透射系数具有如下形式：

$$D=\frac{|c_1B_1+c_2B_2|^2}{|c_1A_1-c_2A_2|^2}.$$

将系数A_1，A_2，B_1，B_2代入上式，经过简单的运算最后得：

当$\frac{8\mu V_0a^2}{\hbar^2}<1$时，

$$D=\frac{\sinh^2\pi ka}{\sinh^2\pi ka+\cos^2\left\{\frac{1}{2}\pi\sqrt{\left[1-\left(8\mu V_0a^2\right)\hbar^{-2}\right]}\right\}},$$

当$\frac{8\mu V_0a^2}{\hbar^2}>1$时，

$$D=\frac{\sinh^2\pi ka}{\sinh^2\pi ka+\cosh^2\left\{\frac{1}{2}\pi\sqrt{\left[\left(8\mu V_0a^2\right)\hbar^{-2}-1\right]}\right\}}.$$

9. 若用μ和E表示粒子的质量和能量（$E<V_0$），则在半经典近似下，熟知的透射系数表达式为

$$D\approx\exp\left\{-2\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{\left\{\frac{2\mu}{\hbar^2}[V(x)-E]\right\}}\mathrm{d}x\right\}. \tag{1}$$

式中x_1和x_2是经典转折点的坐标，它们由方程$V(x_{1,2})=E$决定：

$$x_2=-x_1=a\sqrt{\left(1-\frac{E}{V_0}\right)}. \tag{2}$$

将势能$V(x)$和（2）式代入（1）式，令$x/x_1=t$，将积分中的变数变换，再利用$\int_{-1}^{1}\sqrt{(1-t^2)}\,\mathrm{d}t=\frac{\pi}{2}$，最后得

$$D\approx\exp\left\{-\pi\sqrt{\left(\frac{2\mu}{V_0}\right)}\frac{a(V_0-E)}{\hbar}\right\}. \tag{3}$$

这个公式适用的判据是，指数为一个很大的量，

$$\pi\sqrt{\left(\frac{2\mu}{V_0}\right)}\cdot\frac{a(V_0-E)}{\hbar}\gg1. \tag{4}$$

容易证明，对于现在所讨论的势垒来说，满足条件（4），

同时也就保证了可以令（1）式中的指数函数前面的因子等于1。

实际上，若除了转折点邻近的区域之外，势场$V(x)$在势垒的整个区域内都满足半经典性条件，则上述因子是等于1的。这个半经典性条件的形式为：

$$\left|\frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}x}\right|=\left|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{\hbar}{\sqrt{\{2\mu[E-V(x)]\}}}\right)\right|\ll 1, \qquad (5)$$

式中λ是德布罗意波长。

不等式（5）可以变为

$$\left|\frac{t}{(t^2-1)^{\frac{3}{2}}}\right|\ll\sqrt{\frac{2\mu}{V_0}}\,\frac{a(V_0-E)}{\hbar}, \qquad (5')$$

这里$t=\frac{x}{x_1}$。

从（4）式可直接看出，仅在$t=\pm 1$（即$x=\pm x_1$）附近，半经典性条件（5）或（5′）才不成立，而非半经典性区域的宽度大致为

$$|\Delta x|=|x-x_{1,2}|\sim\frac{a^{\frac{1}{3}}\hbar^{\frac{2}{3}}}{\mu^{\frac{1}{3}}(V_0-E)^{\frac{1}{6}}V_0^{\frac{1}{6}}}. \qquad (6)$$

对于所要求的场$V(x)$的“完整”半经典性条件，显然必须有：

$$|\Delta x|\ll a.$$

利用（6）式和（4）式，很容易验证条件（7）是满足的，所以（1）式和（3）式中指数函数前面的因子等于1。

10. 电子的势能形式如图14所示。透射系数为

$$D\approx\exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\int_0^{x_0}\sqrt{[2\mu(|E|-Fx)]}\,\mathrm{d}x\right\}$$

式中点$x=0$和$x=x_0=\frac{|E|}{F}$限定了按照经典力学粒子不能到达的区域。算出指数上的积分，则得

$$D\approx\exp\left[-\frac{4}{3}\frac{\sqrt{(2\mu)}}{\hbar F}|E|^{\frac{3}{2}}\right]. \qquad (1)$$

为了确定这个结果的适用范围，我们注意到，在经典转折点x_0附近的区域$x-x_0\lesssim(\hbar/2\mu F)^{\frac{1}{3}}$内，半经典的考虑是不适用的。当这个区域远小于势垒宽度$x_0=|E|/F$时，亦即

$$\left(\frac{\hbar^2}{2\mu F}\right)^{\frac{1}{3}}\ll\frac{|E|}{F}\text{ 或 }\sqrt[3]{\frac{(2\mu)}{\hbar F}}|E|^{\frac{1}{3}}\gg 1$$

时，公式（1）是适用的。

这样一来，这个要求就与透射系数很小（$D\ll 1$）的要求等价。

透射系数D随$|E|$的增加而迅速减小，但随F的增加而增加（见表1）。

表1. 透射系数

F	10^6	5×10^6	10^7	2×10^7	3×10^7	5×10^7	10^8V/cm
无电像力							
$E=-2$V	10^{-84}	1.3×10^{-17}	3.5×10^{-9}	6×10^{-5}	1.5×10^{-3}	0.02	0.14
$E=-3$V	10^{-154}	1.3×10^{-31}	3.5×10^{-16}	19×10^{-9}	7×10^{-6}	8×10^{-4}	0.029
$E=-5$V	10^{-432}	4×10^{-67}	6×10^{-34}	2.5×10^{-17}	10^{-11}	2.5×10^{-7}	5×10^{-4}
有电像力							
$E=-2$V	10^{-80}	8×10^{-15}	1.3×10^{-6}	0.013	1*	1*	1*
$E=-3$V	10^{-150}	5×10^{-28}	7×10^{-14}	2.3×10^{-6}	7×10^{-4}	0.07	1*
$E=-5$V	10^{-328}	8×10^{-65}	10^{-31}	2×10^{-15}	6×10^{-10}	10^{-5}	0.01

* 当透射系数等于1时，甚至按经典力学的假设，电子也可能离开金属。

11* 总势能等于：

$$V=-Fx-\frac{e^2}{4x}.$$

必须注意，当x的值很小时（与原子距离同数量级），这个表示式是不适用的。然而，对于透射系数的计算来说，这个区域内势的准确形式是不重要的。

透射系数为

$$D\approx\exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{[2\mu(|E|-Fx-e^2/4x)]}\,\mathrm{d}x\right\}.$$

$$=\exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} p\mathrm{d}x\right).$$

转折点x_1和x_2是由经典粒子的动量在x_1点和x_2点必须为零的条件来确定，即

$$p=\sqrt{[2\mu(|E|-Fx-e^2/4x)]}=0,$$

$$x_{1,2}=|E|\pm\sqrt{\frac{(E^2-e^2F)}{2F}};$$

积分

$$\int_{x_1}^{x_2} p\mathrm{d}x=\sqrt{(2\mu)}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{[|E|-Fx-e^2/4x]}\,\mathrm{d}x$$

是一个完全椭圆积分。取$(F/|E|)x=\xi$作为独立变量，这个积分就变为具有一个参数的函数：

$$\int_{x_1}^{x_2} p\mathrm{d}x=\frac{2}{3}\sqrt{(2\mu)}\frac{|E|^{\frac{3}{2}}}{F}\varphi(y),\quad y=\frac{\sqrt{(e^2F)}}{2|E|},$$

其中

$$\varphi(y)=\frac{3}{2}\int_{\xi_1}^{\xi_2}\sqrt{\left(1-\frac{y^2}{\xi}-\xi\right)}\,\mathrm{d}\xi,$$

积分限ξ_1和ξ_2是根号下表示式的根。引入符号

$$k_0=\frac{4}{3}\sqrt{(2\mu)}\frac{|E|^{\frac{3}{2}}}{F},$$

我们得 $D=\exp[-k_0\varphi(y)]$。

注意，若忽略电像力（$y=0$；见§2.10题），则透射系数变为$D=\exp(-k_0)$。$\varphi(y)$的值列在表2中。电像力对穿过势垒的透射系数的影响，可由表1看出。

12*. 对于区域$x<-b$中的波函数，我们有

$$\psi=\frac{c}{\sqrt{|p|}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_x^{-b}|p|\mathrm{d}x\right)$$

表 1

y	0	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
$\varphi(y)$	1.000	0.951	0.904	0.849	0.781	0.696	0.603	0.494	0.345	0.000

（这个解在无限远处必须趋于零）。在区域$-b<x<-a$中，我们有

$$\psi=\frac{c}{\sqrt{p}}\exp\left(-\frac{i\pi}{4}+\frac{i}{\hbar}\int_{-b}^{x}p\mathrm{d}x\right)+\frac{c}{\sqrt{p}}\exp\left(\frac{i\pi}{4}-\frac{i}{\hbar}\int_{-b}^{x}p\mathrm{d}x\right)=\frac{c}{\sqrt{p}}\exp\left(-\frac{i\pi}{4}+\frac{i}{\hbar}\int_{-b}^{-a}p\mathrm{d}x-\frac{i}{\hbar}\int_{x}^{-a}p\mathrm{d}x\right)+\frac{c}{\sqrt{p}}\exp\left(\frac{i\pi}{4}-\frac{i}{\hbar}\int_{-b}^{-a}p\mathrm{d}x+\frac{i}{\hbar}\int_{x}^{-a}p\mathrm{d}x\right).$$

在区域$-a<x<+a$，我们有

$$\psi=\frac{c}{\sqrt{|p|}}\exp\left(-\frac{i\pi}{4}+\frac{i}{\hbar}\int_{-b}^{-a}p\mathrm{d}x\right)\left[\frac{1}{2}\exp\left(-\frac{i\pi}{4}-\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{x}|p|\mathrm{d}x\right)+\exp\left(\frac{i\pi}{4}+\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{x}|p|\mathrm{d}x\right)\right]+\frac{c}{\sqrt{|p|}}\exp\left(\frac{i\pi}{4}-\frac{i}{\hbar}\int_{-b}^{-a}p\mathrm{d}x\right)\left[\frac{1}{2}\exp\left(\frac{i\pi}{4}-\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{x}|p|\mathrm{d}x\right)+\exp\left(-\frac{i\pi}{4}+\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{x}|p|\mathrm{d}x\right)\right]$$

$$=\frac{c}{\sqrt{|p|}}\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-b}^{-a}p\mathrm{d}x\right)\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}|p|\mathrm{d}x+\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{+a}|p|\mathrm{d}x\right)+\frac{2c}{\sqrt{|p|}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-b}^{-a}p\mathrm{d}x\right)$$

$$\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}|p|\mathrm{d}x-\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{+a}|p|\mathrm{d}x\right).$$

同样对于 $+a<x<+b$，我们得

$$\begin{aligned}\psi=&\frac{c}{\sqrt{p}}\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-b}^{-a}p\mathrm{d}x\right)\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}|p|\mathrm{d}x\right)\\&\times\left[\frac{1}{2}\exp\left(-\frac{i\pi}{4}-\frac{1}{\hbar}\int_{+a}^{x}p\mathrm{d}x\right)\right.\\&\left.+\frac{1}{2}\exp\left(\frac{i\pi}{4}+\frac{1}{\hbar}\int_{+a}^{x}p\mathrm{d}x\right)\right]\\&+\frac{2c}{\sqrt{p}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-b}^{-a}p\mathrm{d}x\right)\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}|p|\mathrm{d}x\right)\\&\times\left[\exp\left(-\frac{i\pi}{4}+\frac{1}{\hbar}\int_{+a}^{x}p\mathrm{d}x\right)\right.\\&\left.+\exp\left(\frac{i\pi}{4}-\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}|p|\mathrm{d}x\right)\right]\\=&\frac{c}{\sqrt{p}}\left[\frac{1}{2}\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}p\mathrm{d}x\right)\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}|p|\mathrm{d}x\right.\right.\\&\left.-\frac{i\pi}{4}\right)+2\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}p\mathrm{d}x\right)\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}|p|\mathrm{d}x\right.\\&\left.\left.+\frac{i\pi}{4}\right)\right]\times\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{+a}^{+b}p\mathrm{d}x+\frac{i}{\hbar}\int_{x}^{b}p\mathrm{d}x\right)\\&+\frac{c}{\sqrt{p}}\left[\frac{1}{2}\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-b}^{-a}p\mathrm{d}x\right)\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}|p|\mathrm{d}x\right.\right.\\&\left.+\frac{i\pi}{4}\right)+2\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}p\mathrm{d}x\right)\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}|p|\mathrm{d}x\right.\\&\left.\left.-\frac{i\pi}{4}\right)\right]\times\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{+a}^{+b}p\mathrm{d}x-\frac{i}{\hbar}\int_{x}^{+b}p\mathrm{d}x\right).\end{aligned}$$

最后，将光解扩展到 $x>+b$ 的区域，我们有：

$$\psi=\frac{c}{\sqrt{|p|}}\left[\frac{1}{2}\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^b p\mathrm{d}x\right)\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^b p\mathrm{d}x\right)\right.$$

$$\times\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}|p|\mathrm{d}x\right)+2\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^b p\mathrm{d}x\right)$$

$$\left.\times\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^b p\mathrm{d}x\right)\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}|p|\mathrm{d}x\right)\right]$$

$$\times\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_b^x|p|\mathrm{d}x\right)$$

$$+\frac{c}{\sqrt{|p|}}\left|-\sin^2\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^b p\mathrm{d}x\right)\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}|p|\mathrm{d}x\right)\right.$$

$$\left.+4\cos^2\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^b p\mathrm{d}x\right)\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}|p|\mathrm{d}x\right)\right]$$

$$\times\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_b^x|p|\mathrm{d}x\right).$$

为使这个解在$x\to+\infty$时趋于零，必须使系数

$$\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_b^x|p|\mathrm{d}x\right)$$

亦趋于零，即

$$-\sin^2\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^b p\mathrm{d}x\right)\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}|p|\mathrm{d}x\right)$$

$$+4\cos^2\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^b p\mathrm{d}x\right)\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}|p|\mathrm{d}x\right)=0$$

或

$$\cot\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^b p\mathrm{d}x\right)=\pm\frac{1}{2}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}|p|\mathrm{d}x\right).$$

假设势垒的透明度很小，我们便得到确定能级的下述条件：

$$\frac{1}{\hbar}\int_a^b p\mathrm{d}x=\pi\left(n+\frac{1}{2}\right)\pm\frac{1}{2}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}|p|\mathrm{d}x\right).$$

我们用$E_n^{(0)}$表示单个势阱的能级

$$\frac{1}{\hbar}\int_a^b\sqrt{[2\mu(E_n^{(0)}-V)]}\mathrm{d}x=\pi\left(n+\frac{1}{2}\right).$$

双势阱中的能级$E_n=E_n^{(0)}+\Delta E_n$可以这样求得：根据刚才得到的量子化条件，将$\sqrt{[2\mu(E_n-V)]}$按ΔE_n展开，且只保留ΔE_n的线性项，

$$\Delta E_n\frac{\partial}{\partial\hbar}\int_a^b\frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{[2\mu(E_n^{(0)}-V)]}}=\pm\frac{1}{2}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}|p|\mathrm{d}x\right)$$

或

$$\Delta E_n=\pm\frac{\hbar\omega}{2\pi}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{a}|p|\mathrm{d}x\right),$$

式中ω是单个势阱中经典运动的角频率：

$$\frac{2\pi}{\omega}=2\mu\int_a^b\frac{\mathrm{d}x}{p}.$$

于是，能级E_n的分裂等于$2|\Delta E_n|$。

13. $\tau=\frac{\pi^2}{\omega}\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}|p|\mathrm{d}x\right)$.

14. 我们把在第n个势垒$b_n<x<a_{n+1}$区域中的波函数写成如下形式：

$$\psi=\frac{C_n}{\sqrt{|p|}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{b_n}^{x}|p|\mathrm{d}x\right)+\frac{D_n}{\sqrt{|p|}}\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_{b_n}^{x}|p|\mathrm{d}x\right)$$

$$=\frac{C_n}{\sqrt{|p|}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{b_n}^{a_{n+1}}|p|\mathrm{d}x+\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{a_{n+1}}|p|\mathrm{d}x\right)$$

$$+\frac{D_n}{\sqrt{|p|}}\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_{b_n}^{a_{n+1}}|p|\mathrm{d}x-\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{a_{n+1}}|p|\mathrm{d}x\right);$$

将这函数推广到第$n+1$个势垒的区域$b_{n+1}<x<a_{n+2}$域中，则得

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{|p|}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{b_{n+1}}^{x}|p|\mathrm{d}x\right)\left[\frac{C_n}{2}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{b_n}^{a_{n+1}}|p|\mathrm{d}x\right)\right.$$

$$\times\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{a_{n+1}}^{b_{n+1}}|p|\mathrm{d}x\right)+D_n\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_{b_n}^{a_{n+1}}|p|\mathrm{d}x\right)$$

$$\left.\times\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_{a_{n+1}}^{b_{n+1}}|p|\mathrm{d}x\right)\right]+\frac{1}{\sqrt{|p|}}\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_{b_{n+1}}^{x}|p|\mathrm{d}x\right)$$

$$\times\left[-C_n\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{b_n}^{a_{n+1}}|p|\mathrm{d}x\right)\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_{a_{n+1}}^{b_{n+1}}|p|\mathrm{d}x\right)\right.$$

$$\left.+2D_n\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_{b_n}^{a_{n+1}}|p|\mathrm{d}x\right)\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{a_{n+1}}^{b_{n+1}}|p|\mathrm{d}x\right)\right].$$

我们引入下列符号：

$$\frac{1}{\hbar}\int_{b_1}^{a_2}|p|\mathrm{d}x=\frac{1}{\hbar}\int_{b_2}^{a_3}|p|\mathrm{d}x=\cdots=\frac{1}{\hbar}\int_{b_{N-1}}^{a_N}|p|\mathrm{d}x=\tau,$$

$$\frac{1}{\hbar}\int_{a_1}^{b_1}|p|\mathrm{d}x=\frac{1}{\hbar}\int_{a_2}^{b_2}|p|\mathrm{d}x=\cdots=\frac{1}{\hbar}\int_{a_N}^{b_N}|p|\mathrm{d}x=\sigma.$$

于是在第$(n+1)$个势垒的区域中ψ的前述表示式变为

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{|p|}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{b_{n+1}}^{x}|p|\mathrm{d}x\right)$$

$$\times\left[\frac{C_n}{2}\exp(-\tau)\cos\sigma+D_n\exp(\tau)\sin\sigma\right]$$

$$+\frac{1}{\sqrt{|p|}}\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_{a_{n+1}}^{x}|p|\mathrm{d}x\right)$$

$$\times\left[-C_n\exp(-\tau)\sin\sigma+D_n\exp(\tau)\cos\sigma\right]$$

$$= \frac{C_{n+1}}{\sqrt{|p|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{b_{n-1}}^{x} |p|\mathrm{d}x\right)$$

$$+ \frac{D_{n+1}}{\sqrt{|p|}} \exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_{b_{n+1}}^{x} |p|\mathrm{d}x\right),$$

其中

$$C_{n+1} = \frac{1}{2} C_n e^{-\tau}\cos\sigma + D_n e^{\tau}\sin\sigma,$$

$$D_{n+1} = -C_n e^{-\tau}\sin\sigma + 2D_n e^{\tau}\cos\sigma.$$

系数C_{n+1}, D_{n+1}, 与C_n, D_n之间的关系可以方便地写成矩阵形式:

$$\begin{pmatrix} C_{n+1} \\ D_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}e^{-\tau}\cos\sigma & e^{\tau}\sin\sigma \\ -e^{-\tau}\sin\sigma & 2e^{\tau}\cos\sigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_n \\ D_n \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} C_n \\ D_n \end{pmatrix}. \tag{1}$$

相继地应用关系式(1)N次，我们得到C_N, D_N和C_0, D_0之间的关系为

$$\begin{pmatrix} C_N \\ D_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}e^{-\tau}\cos\sigma & e^{\tau}\sin\sigma \\ -e^{-\tau}\sin\sigma & 2e^{\tau}\cos\sigma \end{pmatrix}^N \begin{pmatrix} C_0 \\ D_0 \end{pmatrix} = A^N \begin{pmatrix} C_0 \\ D_0 \end{pmatrix}.$$

当$x<a_1$和$x>b_N$时，定态波函数都必须减小，因此必须要求$C_0=D_N=0$。容易看出，这就要求矩阵元$(A^N)_{22}$等于零。条件$(A^N)_{22}=0$，就决定了我们所讨论的问题的能谱。为了计算这矩阵元，考虑下列矩阵：

$$S = e^{At} = 1 + At + \frac{t^2}{2!}A^2 + \frac{t^3}{3!}A^3 + \cdots + \frac{t^N}{N!}A^N + \cdots.$$

很容易直接证明，矩阵S满足下列方程：

$$\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t} = AS, \tag{2}$$

初始条件为

$$S(0) = 1.$$

我们更详细地写出方程(2)：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix}$$

或

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}S_{11}}{\mathrm{d}t}=\alpha S_{11}+\beta S_{21} \\ \dfrac{\mathrm{d}S_{21}}{\mathrm{d}t}=\gamma S_{11}+\delta S_{21}. \end{cases} \quad \begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}S_{12}}{\mathrm{d}t}=\alpha S_{12}+\beta S_{22} \\ \dfrac{\mathrm{d}S_{22}}{\mathrm{d}t}=\gamma S_{12}+\delta S_{22}. \end{cases}$$

由于决定能谱的条件可写成

$$(A^N)_{12}=\left(\frac{\mathrm{d}^N S_{22}}{\mathrm{d}t^N}\right)_{t=0}=0,$$

所以只要考虑第二对方程就够了.

令 $S_{12}=f\mathrm{e}^{\lambda t}$，$S_{22}=g\mathrm{e}^{\lambda t}$，则得

$$f\lambda=\alpha f+\beta g,$$
$$g\lambda=\gamma f+\delta g.$$

λ 的值由下列方程决定：

$$\begin{vmatrix} \alpha-\lambda & \beta \\ \gamma & \delta-\lambda \end{vmatrix}=0,\quad \lambda^2-\lambda\left(2\mathrm{e}^{\tau}+\frac{1}{2}\mathrm{e}^{-\tau}\right)\cos\sigma+1=0,$$

它给出两个根λ_1和λ_2. 由于$\lambda_1\lambda_2=1$，我们可将$\lambda_{1,2}$写成

$$\lambda_{1,2}=\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}u},$$

式中 u 满足

$$\cos u=\left(\mathrm{e}^{\tau}+\frac{1}{4}\mathrm{e}^{-\tau}\right)\cos\sigma.$$

如果 $\lambda_1\neq\lambda_2$，则满足初始条件 $S_{12}(0)=0$，$S_{22}(0)=1$ 的解，具有如下形式：

$$S_{12}=\beta(\mathrm{e}^{\lambda_1 t}-\mathrm{e}^{\lambda_2 t})/(\lambda_1-\lambda_2),$$
$$S_{22}=\frac{(\lambda_1-\alpha)\mathrm{e}^{\lambda_1 t}-(\lambda_2-\alpha)\mathrm{e}^{\lambda_2 t}}{\lambda_1-\lambda_2},$$

决定所讨论问题的能谱的条件可写为

$$(A^N)_{22}=\left(\frac{\mathrm{d}^N S_{22}}{\mathrm{d}\bar{t}^N}\right)=\frac{1}{\lambda_1-\lambda_2}\{(\lambda_1-\alpha)\lambda_1^N$$
$$-(\lambda_2-\alpha)\lambda_2^N\}=0.$$

我们可以把 $\lambda_{1,2}=e^{\pm iu}$ 代入上式，并且在确定 cos$u$ 的方程中略去 $e^{-\tau}$（这相当于假设穿透性很小）：

$$\cos u\approx e^{\tau}\cos\sigma.$$

在这假设下，确定能级的条件变得非常简单：

$$\frac{\sin(N+1)u}{\sin u}=0.$$

这个方程有如下的根：

$$u=\frac{n\pi}{N+1},$$

但 $u=0$，π，2π 除外。

于是，cos$u$有N个不同的值：

$$\cos u=\cos\frac{n\pi}{N+1}\approx e^{\tau}\cos\sigma\quad(n=1,2,\cdots,N).$$

更详细地写出，则为

$$\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{a_1}^{b_1}p\mathrm{d}x\right)=\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{b_1}^{a_2}|p|\mathrm{d}x\right)\cos\frac{\pi n}{N+1}$$
$$(n=1,2,\cdots,N).$$

由于

$$\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{b_1}^{a_2}|p|\mathrm{d}x\right)$$

是一很小的量，上面的方程可写为

$$\frac{1}{\hbar}\int_a^b p\mathrm{d}x=\pi\left(m+\frac{1}{2}\right)$$
$$+\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{b_1}^{a_2}|p|\mathrm{d}x\right)\cos\frac{\pi n}{N+1}$$
$$(m=0,1,2,\cdots)\,(n=1,2,\cdots,N)\qquad(3)$$

这是确定势场 $V(x)$ 中能级的条件。它与单个势阱的量子化条件

非常相似，考虑到(3)式，可得出结论：粗略地说，势场 $V(x)$ 中的能谱，就是单个势阱中的能谱．不过前者的每一个能级再分裂为N个子能级．我们来确定能级移动值ΔE_m：

$$\frac{1}{\hbar}\int_{a_1}^{b_1}\sqrt{[2\mu(E_n^{(0)}-V)]}\,\mathrm{d}x+\frac{\mu}{\hbar}\int_{a_1}^{b_1}\frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{[2\mu(E_n^{(0)}-V)]}}\Delta E_m$$

$$=\pi\left(m+\frac{1}{2}\right)+\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{b_1}^{a_1}|p|\mathrm{d}x\right)\cos\frac{n\pi}{N+1},$$

$$(n=1,2,\cdots,N);$$

引入新的符号

$$\frac{\pi}{\omega}=\mu\int_{a_1}^{b_1}\frac{\mathrm{d}x}{p}=\mu\int_{a_1}^{b_1}\frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{[2\mu(E_n^{(0)}-V)]}},$$

则得

$$\Delta E_m=\frac{\hbar\omega}{\pi}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{b_1}^{a_1}|p|\mathrm{d}x\right)\cos\frac{n\pi}{N+1}$$

$$(n=1,2,\cdots,N).$$

其高和最低子能级之间的距离等于

$$\frac{2\hbar\omega}{\pi}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{b_1}^{a_1}|p|\mathrm{d}x\right)\cos\frac{n\pi}{N+1}.$$

15*．本题的情形下，在$x<-b$的区域中，只有向$-\infty$传播的波，即

$$\psi=\frac{c}{\sqrt{p}}\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{-b}p\mathrm{d}x\right).$$

把这个解扩展到$x>b$的区域中，便得到波函数的表示式如下：

$$\psi=\frac{c}{\sqrt{p}}\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{b}^{x}p\mathrm{d}x\right)+\frac{1}{2}\exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_{a}^{b}|p|\mathrm{d}x\right)$$

$$+\mathrm{i}\frac{\pi}{2}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}p\mathrm{d}x\right)$$

$$+2\exp\left(\frac{2}{\hbar}\int_a^b |p|\mathrm{d}x-\mathrm{i}\frac{\pi}{2}\right)\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}p\mathrm{d}x\right)\Big]$$

$$+\frac{c}{\sqrt{p}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_x^b p\mathrm{d}x\right)$$

$$\times\Big[\frac{1}{8}\exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_a^b |p|\mathrm{d}x\right)\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}p\mathrm{d}x\right)$$

$$-\mathrm{i}\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}p\mathrm{d}x\right)+2\exp\left(\frac{2}{\hbar}\int_a^b |p|\mathrm{d}x\right)$$

$$\times\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}p\mathrm{d}x\right)\Big]_{\circ}$$

准定态能级由无来自$+\infty$的波这一条件确定。

在上面的表示式中令第二项为零，则得

$$\cot\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}p\mathrm{d}x\right)=\mathrm{i}\Big[\frac{1}{8}\exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_a^b |p|\mathrm{d}x\right)$$

$$+2\exp\left(\frac{2}{\hbar}\int_a^b |p|\mathrm{d}x\right)\Big]^{-1}\circ$$

考虑到

$$\exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_a^b |p|\mathrm{d}x\right)$$

是一个小量，则得

$$\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}p\mathrm{d}x=\pi\left(n+\frac{1}{2}\right)-\frac{\mathrm{i}}{2}\exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_a^b |p|\mathrm{d}x\right),$$

由此即得确定准定态能级$E_n^{(0)}$及其宽度Γ的条件：

$$\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a}\sqrt{[2\mu(E_n^{(0)}-V)]}\mathrm{d}x=\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi,\ (n=0,1,2,\cdots),$$

$$\frac{\hbar\omega}{2\pi}\exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_a^b |p|\mathrm{d}x\right)=\Gamma,$$

其中

$$\omega=\pi\left(\mu\int_a^b \frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{[2\mu(E_n^{(0)}-V)]}}\right)^{-1}.$$

求得透射系数的值为

$$D(E)=\Big[4\exp\Big(\frac{4}{\hbar}\int_a^b |p|\mathrm{d}x\Big)\cos^2\Big(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a} p\mathrm{d}x\Big)$$

$$+\sin^2\Big(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{+a} p\mathrm{d}x\Big)\Big]^{-2}.$$

当E的值和某一个准定态能级一致时，$D(E_n^{(0)})=1$．当$|\Delta E|<|E_n^{(0)}|$时，我们有

$$D(E^{(0)}+\Delta E)=\frac{\Gamma^2}{\Gamma^2+(\Delta E)^2}.$$

在准定态能级附近$D(E)$的行为如图30所示．

16．(i)考虑一任意形状的一维势垒（见图31）．设有一能量$E>V_0$（V_0是势垒高度）的粒子从左边入射到势垒上．

于是当$x\to+\infty$时，只有出射波

$$\psi=Ae^{ik_2x}\qquad\left(k_2=\frac{1}{\hbar}\sqrt{[2\mu(E-V_0)]}\right).\qquad(1)$$

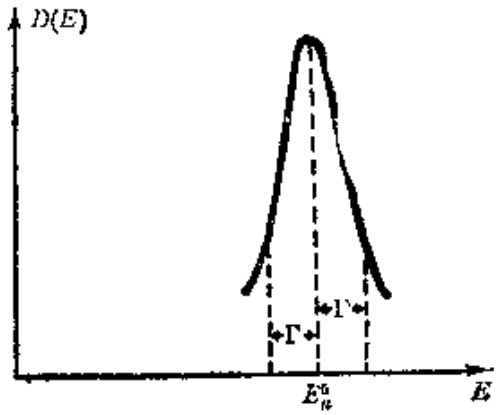


图 30

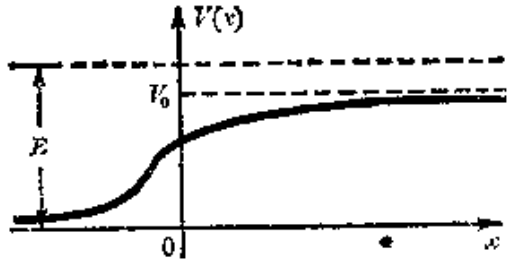


图 31

当$x\to-\infty$时，波函数是入射波和反射波的叠加：

$$\psi=e^{ik_1x}+Be^{-ik_1x}\quad\left[k_1=\frac{1}{\hbar}\sqrt{(2\mu E)}\right]. \tag{2}$$

为了证明所要求的关系式，我们利用粒子数守恒定律（连续性方程）：

$$\frac{\partial|\psi|^2}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0, \tag{3}$$

式中

$$\boldsymbol{j}=-\frac{\hbar}{2\mu}(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*) \tag{4}$$

是几率流密度。

在所讨论的定态问题中，$\frac{\partial|\psi|^2}{\partial t}=0$，所以$\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0$。由于是一维运动，这个方程可写为

$$\frac{\partial j_x}{\partial x}=0\quad\text{或}\quad j=j_x=\text{常数}. \tag{5}$$

这样一来，粒子数守恒定律就意味着，流密度$j=j_x$对于所有的x都是相同的。

我们来计算在$x=+\infty$和$x=-\infty$处的j。利用方程(1)，(2)和(4)，容易求得

$$j(+\infty)=\frac{\hbar k_2}{\mu}|A|^2,\quad j(-\infty)=\frac{\hbar k_1}{\mu}(1-|B|^2).$$

根据方程(5)，让这两个量相等，就有

$$\frac{k_2}{k_1}|A|^2+|B|^2=1. \tag{6}$$

(6)式中的第一项不是别的，正是透射波与反射波的流密度j之比。根据定义，它就是透射系数D。而第二项等于反射波与入射波的j值之比，也就是反射系数R。所以(6)式就是所要证明的等式。

(7)积分方程的证明，可利用下式：

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}|x|=2\delta(x).$$

反射系数R按V的最低次由下式给出：

$$R=\left|\frac{\mu}{\hbar^2}\int V(y)\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ky}\mathrm{d}y\right|^2.$$

§3. 对易关系；海森伯关系；波包的扩散；算符

1. $\hat{A}\hat{B}\hat{C}-\hat{B}\hat{C}\hat{A}=\hat{A}\hat{B}\hat{C}-\hat{B}\hat{C}\hat{A}+\hat{B}\hat{A}\hat{C}-\hat{B}\hat{A}\hat{C}$,

或
$$[\hat{A},\hat{B}\hat{C}]_-=[\hat{A},\hat{B}]_-\hat{C}+\hat{B}[\hat{A},\hat{C}]_-.$$

我们指出，所求得的公式与两函数乘积的微商公式很相似，并且在所有的项中，组成原来乘积的算符[$\hat{B}$ 和 $\hat{C}$]的次序保持不变.

2. $$\left[\sum_i \hat{A}_i,\sum_k \hat{B}_k\right]_-=\left(\sum_i \hat{A}_i\right)\left(\sum_k \hat{B}_k\right)-\left(\sum_k \hat{B}_k\right)\left(\sum_i \hat{A}_i\right)$$

$$=\sum_i\sum_k \hat{A}_i\hat{B}_k-\sum_i\sum_k \hat{B}_k\hat{A}_i=\sum_{i,k}[\hat{A}_i,\hat{B}_k]_-.$$

证毕.

3. 利用归纳法，可以证明，当$n\geqslant 1$时，

$$[\hat{p},\hat{x}^n]_-=-ni\hbar\,\hat{x}^{n-1},$$
$$[\hat{x},\hat{p}^n]_-=ni\hbar\,\hat{p}^{n-1}.$$

把$f(x)$和$g(x)$展成泰勒级数，就得到所给出的关系式.

4. 让我们来考虑算符

$$\hat{a}(s)=\exp(s\hat{L})\,\hat{a}\exp(-s\hat{L}),$$

其中s是一辅助参量. $\hat{a}(s)$ 所满足的微分方程为

$$\frac{d\hat{a}(s)}{ds}=\hat{L}\exp(s\hat{L})\,\hat{a}\exp(-s\hat{L})-\exp(s\hat{L})\,\hat{a}\exp(-s\hat{L})\,\hat{L}$$
$$=[\hat{L},\hat{a}(s)]_-.$$

对这方程再求导一次，

$$\frac{d^2\hat{a}(s)}{ds^2}=\left[\hat{L},\frac{d\hat{a}(s)}{ds}\right]=[\hat{L},[\hat{L},\hat{a}(s)]_-]_-.$$

容易看出，导数$d^n\hat{a}(s)/ds^n$等于算符$\hat{L}$与算符$\hat{a}(s)$相继对易n次的结果.

现在把算符

$$\exp(\hat{L})\hat{a}\exp(-\hat{L})=\hat{a}(1)$$

写成泰勒级数的形式

$$\hat{a}(1)=\hat{a}(0)+\frac{\mathrm{d}\hat{a}(0)}{\mathrm{d}s}+\frac{1}{2!}\frac{\mathrm{d}^2\hat{a}(0)}{\mathrm{d}s^2}+\cdots,$$

并把在$s=0$点处对s的导数用算符$\hat{L}$与$\hat{a}(0)=\hat{a}$的相继对易式表示，即得所要证明的关系式。

5. 设$\hat{\varphi}(\lambda)=\exp(\lambda\hat{A})\exp(\lambda\hat{B})$。我们有

$$\begin{aligned}\frac{\partial\hat{\varphi}(\lambda)}{\partial\lambda}&=\hat{A}\exp(\lambda\hat{A})\exp(\lambda\hat{B})+\exp(\lambda\hat{A})\hat{B}\exp(\lambda\hat{B})\\&=(\hat{A}+\hat{B})\hat{\varphi}(\lambda)+[\exp(\lambda A),\hat{B}]_-\exp(\lambda B).\end{aligned}\tag{1}$$

对于$[\exp(\lambda\hat{A}),\hat{B}]_-$我们有

$$[\exp(\lambda\hat{A}),\hat{B}]_-=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n}{n!}[\hat{A}^n,\hat{B}]_-=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n}{(n-1)!}K\hat{A}^{n-1}$$

$$=\lambda K\exp(\lambda\hat{A}),\tag{2}$$

这里我们应用了$[\hat{A},\hat{B}]_-$是一个c数，因而与$\hat{A}$对易这一事实。

将(1)式和(2)式联立，有

$$\frac{\partial\hat{\varphi}(\lambda)}{\partial\lambda}=(\hat{A}+\hat{B}+\lambda K)\hat{\varphi}(\lambda).$$

这方程的通解为

$$\hat{\varphi}(\lambda)=\exp\left[\lambda(\hat{A}+\hat{B})+\frac{1}{2}\lambda^2K\right]\hat{C},$$

式中$\hat{C}$是一个任意的常算符（与λ无关——译者）。令$\lambda\to0$，我们得到$\hat{C}$是单位算符，于是得到所要求的结果。

6. 证明如下，方程的左边和右边满足同一微分方程

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\Omega}}{\mathrm{d}\alpha}=-\hat{B}\hat{\Omega}+[\hat{A},\hat{B}]_-e^{-\alpha\hat{B}},$$

且当$\alpha=0$时，两边同时趋于零。

7. 首先，我们考虑分立波函组 ψ_i 的情形。在函数 $\psi(\psi=\sum a_i\psi_i)$ 所表征的态中，算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的平均值为

$$\bar{A}=\sum_{i,k}a_i^*A_{ik}a_k,$$

$$\bar{B}=\sum_{i,k}a_i^*B_{ik}a_k.$$

考虑非负的量

$$J(\lambda)=\sum_i\Big[\sum_k(A_{ik}+i\lambda B_{ik})a_k\Big]^*\Big[\sum_l(A_{il}+i\lambda B_{il})a_l\Big]\geqslant 0,$$

式中 λ 是实参数。

将 λ 的同次幂的项归并在一起，再利用算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的厄密性 $(A_{ik}=A_{ki}^*,\ B_{ik}=B_{ki}^*)$，求得

$$J(\lambda)=\sum_{i,k,l}[a_i^*A_{ki}A_{il}a_l+i\lambda a_i^*(A_{ki}B_{il}-B_{ki}A_{il})a_l$$

$$+\lambda^2a_i^*B_{ki}B_{il}a_l]=\bar{A}^2+\lambda\bar{C}+\lambda^2\bar{B}^2.$$

这里，$\hat{C}$ 是厄密算符。

$$\hat{C}=i(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}).$$

二次式 $J(\lambda)$ 是非负的，所以 $4\bar{A}^2\bar{B}^2\geqslant(\bar{C})^2$。注意到算符 $\Delta\hat{A}=\hat{A}-\bar{\hat{A}}$ 和 $\Delta\hat{B}=\hat{B}-\bar{\hat{B}}$ 满足与 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 相同的对易关系，

$$\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}-\Delta\hat{B}\Delta\hat{A}=i\hat{C},$$

我们便得到

$$\sqrt{\overline{(\Delta\hat{A})^2}\,\overline{(\Delta\hat{B})^2}}\geqslant\frac{|\bar{C}|}{2}.$$

对于连续波函数组的情形，这个关系式的证明可以按相似的线索来进行。含有实数 λ 的表示式

$$J(\lambda)=\int[(\hat{A}+i\lambda\hat{B})\psi]^*[(\hat{A}+i\lambda\hat{B})\psi]d\tau$$

是非负的，并可改写为：

$$J(\lambda)=\int[(\hat{A}\psi)^*-i\lambda(\hat{B}\psi)^*][\psi+i\lambda(\hat{B}\psi)]d\tau.$$

$$=\int[\psi^*\hat{A}^2\psi+i\lambda\psi^*(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A})\psi+\lambda^2\psi^*\hat{B}^2\psi]d\tau,$$

在上式中，利用了算符$\hat{A}$的厄密性：

$$\int(\hat{A}\psi)^*\varphi\,d\tau=\int\psi^*\hat{A}\varphi d\tau.$$

其余部分的证明同前。

8. $$(\Delta\hat{q})^2(\Delta\hat{F})^2\geqslant\frac{\hbar}{4}\left|\frac{\partial F}{\partial\hat{p}}\right|^2.$$

9. 在定态中振子的能量为

$$E=\int\psi(x)\left(\frac{\hat{p}^2}{2\mu}+\frac{kx^2}{2}\right)\psi(x)dx=\frac{\overline{\hat{p}^2}}{2\mu}+\frac{k\overline{\hat{x}^2}}{2},$$

因为

$$\overline{\hat{p}^2}=(\hat{p}-\bar{p})^2+(\bar{p})^2=(\Delta\hat{p})^2+(\bar{p})^2,$$
$$\overline{\hat{x}^2}=(\Delta\hat{x})^2+(\bar{x})^2.$$

和

$$\bar{x}=0,\quad\bar{p}=0.$$

我们有

$$E=\frac{(\Delta\hat{p})^2}{2\mu}+\frac{k(\Delta\hat{x})^2}{2}.$$

从海森伯关系$(\Delta\hat{p})^2(\Delta\hat{x})^2\geqslant\frac{\hbar^2}{4}$，得

$$E\geqslant\frac{\hbar^2}{8\mu(\Delta\hat{x})^2}+\frac{k(\Delta\hat{x})^2}{2}.$$

上式的右边，当

$$\Delta(\hat{x})^2=\frac{\hbar}{2}\sqrt{\left(\frac{1}{\mu k}\right)}$$

时有极小值，所以

$$E_{\min}\sim\frac{\hbar}{2}\sqrt{\left(\frac{k}{\mu}\right)}=\frac{\hbar\omega}{2},$$

其中 $\omega=\sqrt{(k/\mu)}$ 是振子的频率。

10. 在所考虑的情形下，可以忽略其他电子对原子核场的屏蔽作用。K 电子的能量是

$$E=\frac{p^2}{2\mu}-\frac{Ze^2}{r}.$$

由于 $p\sim\hbar r$，这里 r 是电子的定位区域的线度，我们有

$$E\sim\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}-\frac{Ze^2}{r}. \qquad (1)$$

当 $r=\hbar^2/Ze^2\mu=a/Z$ ($a=0.529\times10^{-8}$cm，是第一轨道玻尔半径)时，此式取极小值。

于是 K 电子的能量为

$$E\sim-\frac{Z^2}{2}\cdot\frac{\mu e^4}{\hbar^2}=-Z^2\times13.5\text{eV}.$$

若考虑质量改变所引起的相对论修正，(1)式就变为

$$E\geqslant(\mu_0^2c^4+c^2p^2)^{\frac{1}{2}}-\frac{Ze^2}{r}-\mu_0c^2$$

$$\geqslant\left(\mu_0^2c^4+\frac{c^2\hbar^2}{r^2}\right)^{\frac{1}{2}}-\frac{Ze^2}{r}-\mu_0c^2.$$

因此，K 电子的能量满足下式：

$$E\geqslant\mu_0c^2[(1-\alpha^2Z^2)^{\frac{1}{2}}-1],\ \text{其中}\ \alpha=\frac{e^2}{\hbar c}.$$

11. 设第一个和第二个电子的定位区域的线度分别为 r_1 和 r_2。利用海森伯关系，则得电子的动量

$$p_1\sim\frac{\hbar}{r_1},\quad p_2\sim\frac{\hbar}{r_2},$$

所以动能的数量级为

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{r_1^2}+\frac{1}{r_2^2}\right).$$

电子与电荷为 Z 的核之间的相互作用势能为

$$-Ze^2\left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right).$$

而电子之间的相互作用能为$e^2/(r_1+r_2)$。为了求基态能量，我们须求出总能量

$$E(r_1,r_2)=\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{r_1^2}+\frac{1}{r_2^2}\right)$$

$$-Ze^2\left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right)+\frac{e^2}{r_1+r_2}$$

的极小值。当

$$r_1=r_2=\frac{\hbar^2}{\mu e^2}\cdot\frac{1}{Z-\frac{1}{4}}$$

时，总能量取极小值。所以，带两个电子而核电荷为Z的离子，其基态能量等于

$$E\sim-\left(Z-\frac{1}{4}\right)^2\frac{\mu e^4}{\hbar^2}=-2\left(Z-\frac{1}{4}\right)^2\text{里德伯}.$$

$$1\text{里德伯}=\frac{1}{2}\cdot\frac{\mu e^4}{\hbar^2}=13.5\,\text{eV}.$$

计算结果和实验数据的比较表明，若考虑到所作计算极为简单，则应该认为两者符合得很好。

	H^-	He	Li^+	Be^{++}	B^{+++}	C^{++++}
$E_{\text{计算}}$(里德伯)	−1.125	−6.125	−15.12	−28.12	−45.12	−66.12
$E_{\text{实验}}$(里德伯)	−1.05	−5.807	−14.56	−27.31	−44.06	−64.4

12. 不可能。

13. 论证中的错误在于把粒子在空间定域的精确度Δx与势阱的线度a等量齐观（在数量级上）。实际上，粒子在空间定域的精确度Δx由坐标的几率分布$|\psi(x)|^2$的“宽度”决定(类似地，动量的不确定度由动量的几率分布$|G(p)|^2$的宽度给出)。考虑

到归一化积分$\int|\psi|^2\mathrm{d}x$，我们看出，发现粒子在阱内或阱外的几率分别为κa和$(1-\kappa a)$，其中$\kappa a=\mu a^2V_0/\hbar^2\ll1$。

利用粗略的经典类比，人们可以说，粒子在阱外停留的时间，比在阱内长得多。这是一个典型的量子效应，因为阱外区域是经典力学上不可到达的区域。我们可以用氘核作为三维情形的例子；它的半径远大于中子和质子的相互作用力程，所以粒子有相当大一部分时间处在势阱之外。

坐标分布的有效宽度的数量级（与§1.7题比较）为

$$(\Delta x)_{有效}\sim\frac{1}{\kappa}\gg a. \tag{1}$$

另一方面，我们可以证明，动量分布的有效宽度等于（与§1.3题比较）：

$$(\Delta p)_{有效}\sim\hbar\kappa \tag{2}$$

将(1)式和(2)式相乘，理所当然，我们得到海森伯关系：

$$(\Delta p)_{有效}(\Delta x)_{有效}\sim\hbar. \tag{3}$$

现在我们来较准确地计算(3)式中$\hbar$的系数。为此，我们计算动量和坐标的均方偏差：

$$\Delta p=\sqrt{\overline{[(p-\bar{p})^2]}}\ 和\ \Delta x=\sqrt{\overline{[(x-\bar{x})^2]}} \tag{4}$$

的乘积。

当然，我们有

$$\overline{(p-\bar{p})^2}=\overline{p^2}-(\bar{p})^2, \tag{5'}$$

$$\overline{(x-\bar{x})^2}=\overline{x^2}-(\bar{x})^2. \tag{5''}$$

根据已知波函数，可得

$$\bar{x}=\int_{-\infty}^{\infty}x[\psi(x)]^2\mathrm{d}x=0,$$

$$\bar{p}=\int_{-\infty}^{\infty}p[G(p)]^2\mathrm{d}p=0. \tag{6}$$

设$a^2\ll\hbar^2/\mu V_0$，容易证明

$$\overline{x^2}=\int_{-\infty}^{\infty} x^2[\psi(x)]^2\mathrm{d}x\approx\frac{1}{2\kappa^2} \tag{7}$$

在坐标表象中也可容易地算出量

$$\overline{p^2}=\int_{-\infty}^{\infty} p^2[G(p)]^2\mathrm{d}p,$$

即利用方程

$$\overline{p^2}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)\hat{p}^2\psi(x)\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\cdot\frac{\partial}{\partial x}\right)^2\psi(x)\mathrm{d}x$$

$$=-\hbar^2\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)\cdot\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}\mathrm{d}x.$$

利用分部积分，可使上式简化为

$$\overline{p^2}=\hbar^2\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right)^2\mathrm{d}x$$

再将波函数代入，在同样的近似下，得到

$$\overline{p^2}\approx\hbar^2\kappa^2. \tag{8}$$

注意，这个$\overline{p^2}$值决不对应于经典力学上可达到的区域（即阱内）中的动能：

$$V_0-|E|\approx V_0,$$

而是对应于小得多的值$|E|$．这个结果可以定性地预料到，因为粒子大部分时间是在不可达到的区域中（在这里，粒子的“动能”是负的），这就对平均动能$\overline{(E-V)}=\left(\frac{1}{2\mu}\right)\overline{p^2}$贡献了一个大的负值．

由方程(4)和(8)得出

$$\Delta p=\hbar\kappa,\quad \Delta x=\frac{1}{\sqrt{2}\kappa},$$

因而

$$\Delta p\Delta x=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}.$$

必须记住，$\Delta p\Delta x$的最小可能值等于$\hbar/2$，它对应于“高斯

实包" $\sim(-b,b)$。

14 在这种情况下，垂直于轨迹的动量分量与总动量之比非常小：$\Delta p/p\sim 6\times10^{-7}$。这个条件表明，轨迹的概念是完全合理的。我们不应期望会对经典力学规律有任何偏离。

15. 由测不准关系，对于方位角 φ

$$\Delta\varphi\cdot\Delta M\gtrsim\hbar,$$

这里M是角动量。我们看到：当$\Delta M/M\leqslant 32\%$时，φ成为完全不确定的($\Delta\varphi\geqslant\pi$)（见下题）。

16. 如下所述，似乎我们能够违背测不准关系：

$$\Delta M_z\cdot\Delta\varphi\gtrsim\hbar, \qquad (1)$$

我们可以选择一个M_z具有完全确定值的本征态，因而$\Delta M_z=0$。从物理上考虑，$\Delta\varphi\leqslant\pi$，这样好象违背了(1)。

有两种解释：首先，我们可以说（见§3.15题），$\Delta\varphi\geqslant\pi$意味着$\varphi$是完全不确定的，因为$\Delta\varphi\geqslant\pi$对应于$\Delta\varphi=\infty$。这是一种物理上的论证，但它不能完全消除困难。当我们注意到推导(1)式时假定了$\hat{M}_z$和$\hat{\varphi}$是厄密算符，这个困难便被排除（见§3.1题）。然而，$\hat{M}_z$并不是厄密算符，因为关系式

$$\int_0^{2\pi} f(\varphi)\hat{M}_z g(\varphi)\mathrm{d}\varphi=\int_0^{2\pi} g(\varphi)\hat{M}^* f(\varphi)\mathrm{d}\varphi$$

仅当$f(\varphi)$和$g(\varphi)$是φ的周期函数时才成立，并不是对所有的$f(\varphi)$和$g(\varphi)$都成立。对本题的更详细的讨论，可参看Judge 和 Lew 写的短文[Physics Letters 5(1963), 189和190]。

17 自由粒子的波函数$\psi(x,t)$对$\psi(x,0)$的依赖关系如下：

$$\psi(x,t)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_{-\infty}^{+\infty} a(p)\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(px-\frac{p^2}{2\mu}t\right)\right]\mathrm{d}p,$$

其中

$$a(p)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x,0)\exp\left(-i\frac{p}{\hbar}x\right)\mathrm{d}x$$

$$=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(x)\exp\left(\frac{\mathrm{i}(p_0-p)x}{\hbar}\right)\mathrm{d}x.$$

又对满足条件

$$\left|\frac{p_0-p}{\hbar}\right|\delta\lesssim 1 \tag{4}$$

的那些 p 值，函数 $a(p)$ 才显著地不为零。若这个条件(A)满足，则当 x 在区间 $-\delta<x<+\delta$ 内变化时，振荡因子 $\exp[\mathrm{i}(p_0-p)x/\hbar]$ 变化很小；因此，$\psi(x,t)$ 可近似地写为

$$\psi(x,t)\approx\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}}\int_{p_0-\hbar/\delta}^{p_0+\hbar/\delta}a(p)\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(px-\frac{p^2}{2\mu}t\right)\right]\mathrm{d}p,$$

或者

$$\psi(x,t)\approx\frac{\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(p_0x-\frac{p_0^2}{2\mu}t\right)\right]}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}}\int_{-\hbar/\delta}^{\hbar/\delta}a(p+p_0)$$

$$\times\exp\left\{+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[p\left(x-\frac{p_0}{\mu}t\right)-\frac{p^2}{2\mu}t\right]\right\}\mathrm{d}p$$

由上式得出结论：仅当 p 值在区间 $-\hbar/\delta<p<+\hbar/\delta$ 内变化，而振荡因子

$$\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[p\left(x-\frac{p_0}{\mu}t\right)-\frac{p^2}{2\mu}t\right]\right\}$$

变化很小时，波函数 $\psi(x,t)$ 才显著地不为零。因此在 t 时刻，波包线度的数量级为：

$$\delta_t\sim\delta+\frac{\hbar}{2\mu\delta}t$$

18. 为了解决这一问题，必须找满足薛定谔方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi \tag{1}$$

的波函数 $\psi(x,t)$，在 $t=0$ 时它取给定值 $\psi(x,0)$。如果 $\hat{H}$ 不显含时间，则方程(1)有解

$$\psi_n(x,\ t)=\psi_n(x)\exp\left(-\mathrm{i}\frac{E_n}{\hbar}t\right),$$

式中 $\psi_n(x)$ 是算符 $\hat{H}$ 的与时间无关的本征函数。

$$\hat{H}\psi_n(x)=E_n\psi_n(x). \tag{2}$$

我们来求 $\psi(x,\ 0)$ 用函数组 $\psi_n(x)$ 展开时的展开系数，

$$\psi(x,\ 0)=\sum_n a_n\psi_n(x),\quad a_n=\int\psi_n^*(x)\psi(x,\ 0)\mathrm{d}x,$$

函数 $\sum_n a_n\psi_n(x)\exp[-\mathrm{i}(E_n/\hbar)t]$ 满足方程 (1)，且 $t=0$ 时等于 $\psi(x,\ 0)$。

于是，我们有

$$\psi(x,\ t)=\sum_n a_n\psi_n(x)\exp\left(-\mathrm{i}\frac{E_n}{\hbar}t\right)$$

或

$$\psi(x,\ t)=\int G_t(\xi,\ x)\ \psi(\xi,\ 0)\mathrm{d}\xi, \tag{3}$$

其中

$$G_t(\xi,\ x)=\sum_n\psi_n^*(\xi)\psi_n(x)\exp\left(-\mathrm{i}\frac{E_n}{\hbar}t\right).$$

因此，要想解决我们的问题，必须算出格林函数 $G_t(\xi,\ x)$，并利用方程(3)。

(a) 在自由粒子情形下，本征函数为

$$\psi_p(r)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\exp\left[\mathrm{i}\frac{(p\cdot r)}{\hbar}\right],\quad E_p=\frac{p^2}{2\mu},$$

相应的格林函数为

$$G_t(\rho,\ r)=\iiint\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[p\cdot(r-\rho)-\frac{p^2t}{2\mu}\right]\right\}$$

$$=\left(\frac{\mu}{2\pi\mathrm{i}\hbar t}\right)^{\frac{3}{2}}\exp\left[\frac{\mathrm{i}\mu}{2\hbar t}(r-\rho)^2\right].$$

因为初始函数为

$$\psi(\boldsymbol{r},0)=\frac{1}{(\pi\delta^2)^{\frac{3}{4}}}\exp\left[\frac{\mathrm{i}(\boldsymbol{p}_0\cdot\boldsymbol{r})}{\hbar}-\frac{r^2}{2\delta^2}\right]$$

我们有：

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\iiint\left(\frac{\mu}{2\pi\mathrm{i}\hbar t}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{1}{(\pi\delta^2)^{\frac{3}{4}}}\exp\left[-\frac{\rho^2}{2\delta^2}+\frac{\mathrm{i}(\boldsymbol{p}_0\cdot\boldsymbol{\rho})}{\hbar}+\frac{\mathrm{i}\mu}{2\hbar t}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{\rho})^2\right]\mathrm{d}^3\boldsymbol{\rho},$$

由此得：

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{(\pi\delta^2)^{\frac{3}{4}}\left(1+\frac{\hbar^2t^2}{\mu^2\delta^4}\right)^{\frac{3}{4}}}\times\exp\left\{-\frac{\left(\boldsymbol{r}-\frac{\boldsymbol{p}_0t}{\mu}\right)^2}{2\delta^2\left(1+\frac{\hbar^2t^2}{\mu^2\delta^4}\right)}\left(1-\frac{\mathrm{i}\hbar t}{\mu\delta^2}\right)-\frac{\mathrm{i}p_0^2t}{2\mu\hbar}+\frac{\mathrm{i}(\boldsymbol{p}_0\cdot\boldsymbol{r})}{\hbar}\right\}.$$

我们得到几率密度为

$$\psi^*(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{\left[\pi\delta^2\left(1+\frac{\hbar^2t^2}{\mu^2\delta^4}\right)\right]^{\frac{3}{2}}}\exp\left\{-\frac{\left(\boldsymbol{r}-\frac{\boldsymbol{p}_0t}{\mu}\right)^2}{\delta^2\left(1+\frac{\hbar^2t^2}{\mu^2\delta^4}\right)}\right\}.$$

由这个表示式明显地看出，波包的重心以速度$\boldsymbol{p}_0/\mu$运动。波包原来线度的数量级为δ，后来随着时间按下式增加：

$$\delta_t=\delta\sqrt{\left(1+\frac{\hbar^2t^2}{\mu^2\delta^4}\right)},$$

但对r的分布，则和以前一样，仍旧是高斯型的。现在来估计时间τ，在此时间内波包线度的改变量差不多等于它原来的线度，

即

$$\tau\sim\frac{\delta^2\mu}{\hbar}.$$

当 $t\gg\tau$ 时，波包的线度随时间线性地增加

$$\delta_t\sim\frac{\hbar}{\mu\delta}t.$$

我们来讨论一些具体的例子.

对于原来局限在 $\delta\sim10^{-8}$cm 区域内的电子，τ 的数量级是 10^{-16}s. 对于 $\mu=1$g，$\delta=10^{-3}$cm 的"经典粒子"，$\tau=10^{17}$s$\sim$30亿年.

(b) 在均匀场 $V=-Fx$ 中作一维运动的粒子的波函数(见§1.19题)为

$$\psi_E(x)=A\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[i\left(\frac{u^3}{3}-uq\right)\right]\mathrm{d}u,\quad q=\left(x+\frac{E}{F}\right)a,$$

其中

$$a=\left(\frac{2\mu F}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}},\quad A=\frac{a}{2\pi\sqrt{F}}.$$

我们来计算格林函数:

$$G_t(\xi,x)=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}E\exp\left(-i\frac{Et}{\hbar}\right)\psi_E^*(\xi)\psi_E(x)$$

$$=A^2\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}E\exp\left(-i\frac{Et}{\hbar}\right)\iint_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}u\mathrm{d}v$$

$$\cdot\exp\left[-i\left(\frac{v^3}{3}-v\eta\right)+i\left(\frac{u^3}{3}-uq\right)\right]$$

其中

$$\eta=\left(\xi+\frac{E}{F}\right)a.$$

我们首先对 E 积分:

$$G_t(\xi,x)=A^2\iint_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}u\,\mathrm{d}v\exp\left(-i\frac{v^3}{3}+i\frac{u^3}{3}+iv\xi a-iux\right)$$

$$\times\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}E\,\exp\left[-\mathrm{i}\,\frac{Ea}{F}\left(u+\frac{Ft}{a\hbar}-v\right)\right]$$

$$=A^2\int_{-\infty}^{+\infty}\int\mathrm{d}u\mathrm{d}v\,\exp\left(-\mathrm{i}\frac{v^3}{3}+\mathrm{i}\frac{u^3}{3}+\mathrm{i}v\xi a\right.$$

$$\left.-\mathrm{i}ux a\right)\cdot\frac{2\pi F}{a}\delta\left(u+\frac{Ft}{a\hbar}-v\right).$$

利用 δ 函数的性质，就能算出对 v 的积分，而后把指数上的式子整理成便于对 u 积分的形式：

$$G_t(\xi,x)=\frac{2\pi F}{a}A^2\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}u\,\exp\left\{-\mathrm{i}\frac{Ft}{a\hbar}\left[u+\frac{Ft}{2a\hbar}\right.\right.$$

$$\left.+\frac{a^2\hbar}{2Ft}(x-\xi)\right]^2-\frac{\mathrm{i}}{12}\left(\frac{Ft}{a\hbar}\right)^3+\frac{\mathrm{i}}{2}\frac{Ft}{\hbar}(x+\xi)$$

$$\left.+\frac{\mathrm{i}a^3\hbar}{4Ft}(x-\xi)^2\right\}.$$

最后求得格林函数为：

$$G_t(\xi,x)=\left(\frac{\mu}{2\pi\hbar\,\mathrm{i}t}\right)^{\frac{3}{2}}\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{12}\left(\frac{Ft}{\hbar a}\right)^3+\frac{\mathrm{i}Ft}{2\hbar}(x+\xi)\right.$$

$$\left.+\frac{\mu}{2\hbar t}(x-\xi)^2\right].$$

当 $F\to 0$ 时，这个式子变为自由粒子的一维运动的格林函数。在 $t=0$ 时给定的波函数为

$$\psi(x,0)=\frac{1}{(\pi\delta^2)^{\frac{1}{4}}}\exp\left(-\frac{x^2}{2\delta^2}+\frac{\mathrm{i}p_0x}{\hbar}\right).$$

利用(3)式，就可以确定此波函数随时间的变化。计算结果为

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\left[\pi\delta^2\left(1+\frac{\hbar^2t^2}{\mu^2\delta^4}\right)\right]^{\frac{1}{4}}}\exp\left\{-\frac{\left(x-\frac{p_0t}{\mu}-\frac{Ft^2}{2\mu}\right)^2}{2\delta^2\left(1+\frac{\hbar^2t^2}{\mu^2\delta^4}\right)}\right.$$

$$\cdot\left(1-\frac{i\hbar t}{\mu\delta^2}\right)+\frac{i}{\hbar}(p_0+Ft)\,x-\frac{i}{\hbar}\int_0^t\frac{(p_0+Ft)^2}{2\mu}\,dt\Bigg\}.$$

对于在均匀场中作三维运动的普遍情况，若初始波函数为

$$\psi(\boldsymbol{r},0)=\frac{1}{(\pi\delta^2)^{\frac{3}{4}}}\exp\left[-\frac{r^2}{2\delta^2}+\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}_0\cdot\boldsymbol{r})\right],$$

则得

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{\left[\pi\delta^2\left(1+\frac{\hbar^2t^2}{\mu^2\delta^4}\right)\right]^{\frac{3}{4}}}\exp\left\{-\frac{\left(\boldsymbol{r}-\frac{\boldsymbol{p}_0t}{\mu}-\frac{\boldsymbol{F}t^2}{2\mu}\right)^2}{2\delta^2\left(1+\frac{\hbar^2t^2}{\mu^2\delta^4}\right)}\right.$$

$$\left.\cdot\left(1-\frac{i\hbar t}{\mu\delta^2}\right)+\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}_0+\boldsymbol{F}t)\cdot\boldsymbol{r}-\frac{i}{\hbar}\int_0^t\frac{(\boldsymbol{p}_0+\boldsymbol{F}t)^2}{2\mu}\,dt\right\}.$$

由此表示式可以得出结论：几率密度分布仍保持高斯形式，波包的质心按经典力学定律作匀加速运动，波包大小随时间的变化与场不存在时的情况一样（见上面）。

（c） 薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi_n''+\frac{\mu\omega^2}{2}x^2\psi_n=E\psi_n$$

的本征函数有如下形式：

$$\psi_n(x)=c_n\exp\left(-\frac{\alpha^2x^2}{2}\right)H_n(\alpha x),$$

其中

$$\alpha=\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}},\quad c_n^2=\frac{1}{2^nn!}\cdot\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}},$$

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

根据(2)式，所要求的波函数 $\psi(x,t)$ 满足如下关系式：

$$\psi(x,t)=\sum_n a_n\psi_n(x)\exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right),\qquad(4)$$

式中

$$a_n=c_nc\int_{-\infty}^{+\infty}H_n(\alpha x)\exp\left[-\frac{\alpha^2(x-x_0)^2}{2}+\frac{ip_0x}{\hbar}-\frac{\alpha^2x^2}{2}\right]dx.$$

为了计算a_n，我们利用厄密多项式的母函数的表示式：

$$\exp(-\lambda^2+2\lambda\eta)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n}{n!}H_n(\eta). \qquad (5)$$

容易看出，(a_n/c_nc) 是表示式

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(-\lambda^2+2\lambda\alpha x-\frac{\alpha^2(x-x_0)^2}{2}+\frac{ip_0x}{\hbar}-\frac{\alpha^2x^2}{2}\right)dx$$

按 λ 的幂的展开式中 $\lambda^n/n!$ 的系数。由此得出

$$a_n=c_nc\sqrt{(\pi)}\left(\alpha x_0+\frac{ip_0}{\alpha\hbar}\right)^n\exp\left[-\frac{\alpha^2x_0^2}{2}+\frac{1}{4}\left(\alpha x_0+\frac{ip_0}{\alpha\hbar}\right)^2\right].$$

将这个式子代入 (4) 式之后，再利用 (5) 式，就可以完成对 n 求和。若引进符号

$$x_0+\frac{ip_0}{\alpha^2\hbar}=Q\exp(-i\delta),$$

则得

$$\psi(x,t)=c\exp\left\{-\frac{\alpha^2}{2}[x-Q\cos(\omega t+\delta)]^2-i\omega Q\alpha^2\sin(\omega t+\delta)-\frac{i\omega t}{2}+\frac{\alpha^2Q^2}{4}i[\sin^2(\omega t+\delta)-\sin2\delta]\right\}.$$

在此情形下，运动时波包不会扩散。和前面一样，波包的重心作

经典力学定律运动，即作简谐振动，其振幅为 Q，频率为 ω，已得到关于 ψ 的表示式，也可求得在 t 时刻动量的平均值为

$$P(t)=\frac{\alpha}{2}Q\alpha^{\frac{1}{2}}\sin(\omega t+\delta),$$

这就是简谐运动的粒子的经典动量。

表示式

$$\exp\left\{-\frac{i\omega t}{2}+\frac{\alpha}{4}\frac{Q^2}{\hbar}i[\sin 2(\omega t+\delta)-\sin 2\delta]\right\}$$

可等成：

$$\exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\int_0^t\frac{P(t)}{2\mu}\,dt\right\}.$$

19. 受扰动场作用的振子的薛定谔方程可写为：

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\mu\omega^2x^2}{2}\psi-f(t)x\psi.$$

引入新的坐标 $x_1=x-\xi(t)$，于是有

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=i\hbar\dot{\xi}\frac{\partial\psi}{\partial x}-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2(x_1+\xi)^2-f(t)(x_1+\xi)\psi.$$

令

$$\psi=\exp\left(\frac{i\mu\dot{\xi}x_1}{\hbar}\right)\varphi(x_1,t),$$

我们得到关于 φ 的方程

$$i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t}=-\frac{\hbar}{2\mu}\frac{\partial^2\varphi}{\partial x_1^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x_1^2\varphi+(\mu\ddot{\xi}+\mu\omega^2\xi-f)x_1\varphi-L\varphi,$$

其中 $L=\frac{1}{2}\mu\dot{\xi}^2-\frac{1}{2}\mu\omega^2\xi^2+f(t)\xi$ 是拉格朗日函数。在上式中，$(\mu\ddot{\xi}+\mu\omega^2\xi-f)x_1\varphi$ 这一项等于零，因为 ξ 作为时间的函数，满足受扰动场作用的振子的经典运动方程

$$\mu\ddot{\xi}+\mu\omega^2\xi=f(t).$$

为此再引入另一个函数 χ：$\varphi=\chi\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_0^t L\,dt\right)$，则得函数 χ 的

方程为

$$i\hbar\frac{\partial\chi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2\chi}{\partial x_1^2}+\frac{\mu\omega^2x_1^2}{2}\chi.$$

它与自由振子的运动方程相同。这样一来，受扰动力作用的振子的波函数可写为

$$\psi(x,t)=\chi[x-\xi(t),t]\exp\left[\frac{i\mu}{\hbar}\dot{\xi}(x-\xi)+\frac{1}{\hbar}\int_0^t L\mathrm{d}t\right].$$

20*. 我们将薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\mu\omega^2(t)}{2}x^2\psi \qquad (1)$$

的解写成如下形式

$$\psi(x,t)=\int G(x,t;\ x',\tau)\psi(x',\tau)\mathrm{d}x'.$$

容易证明，格林函数 $G(x,t;\ x',\tau)$ 应该满足方程 (1) 和初始条件

$$\lim_{t\to\tau+0}G(x,t;\ x',\tau)=\delta(x-x'). \qquad (2)$$

为了试图满足这两个条件，令

$$G(x,t;\ x',\tau)\sim\exp\left\{-\frac{1}{2\hbar}[a(t)x^2-2b(t)x+c(t)]\right\}. \qquad (3)$$

将(3)式代入方程(1)，得到下列决定 a，b 和 c 的方程

$$\left.\begin{aligned}\frac{1}{\mu}\frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t}&=-\frac{a^2}{\mu^2}-\omega^2(t),\\ \frac{\mathrm{d}b}{\mathrm{d}t}&=-\frac{a}{\mu}b,\\ \frac{\mathrm{d}c}{\mathrm{d}t}&=i\hbar\frac{a}{\mu}-\frac{b}{\mu}.\end{aligned}\right\} \qquad (4)$$

方程组(4)的解为

$$a=\mu\frac{\dot{Z}}{Z},\quad b=\frac{\text{常数}}{Z},\quad c=i\hbar\ln Z-\frac{1}{\mu}\int^t b^2\mathrm{d}t. \qquad (5)$$

其中 Z 是方程

$$\ddot{Z}=-\omega^2(t)Z$$

的解。适当地选择积分常数，使满足初始条件(2)。为此，我们利用 δ 函数的一个可能的表示式

$$\delta(x-x')=\lim_{t\to\tau}\sqrt{\left[\frac{\mu}{2\pi\hbar\, i(t-\tau)}\right]}\exp\left[\frac{i\mu}{2\hbar\,(t-\tau)}(x-x')^2\right] \tag{6}$$

(见 §3.18题a)。

为了使 $t\to\tau$ 时，(3)式变为(6)式，必须而且只需

$$Z=0,\ \dot{Z}=1,\ \text{当 } t=\tau \text{ 时},$$

$$b=-\frac{\mu x'}{Z}$$

$$c=i\hbar\ln Z+\mu x'^2\frac{Y}{Z},$$

其中 Y 是方程 $\ddot{Y}=-\omega^2(t)Y$ 的解，并满足初始条件：当 $t=\tau$ 时，$Y=1$，$\dot{Y}=0$

注意，因为 $Z\dot{Y}-Y\dot{Z}=-1$，我们有

$$\frac{Y}{Z}=-\int\frac{dt}{Z^2}.$$

于是，我们求得本问题的格林函数的表示式如下：

$$G(x,t;x',\tau)=\sqrt{\left(\frac{\mu}{2\pi i\hbar Z}\right)}\exp\left[\frac{i\mu}{2\hbar Z}(\dot{Z}x^2-2xx'+Yx'^2)\right].$$

在 $\omega=$常数的情况下，我们有

$$Z=\frac{1}{\omega}\sin\omega(t-\tau),\quad Y=\cos\omega(t-\tau).$$

此时，格林函数等于

$$G(x,t;x',\tau)=\sqrt{\left[\frac{\mu\omega}{2\pi\hbar\, i\sin\omega(t-\tau)}\right]}\exp\left\{\frac{i\mu\omega}{2\hbar\sin\omega(t-\tau)}\right.$$

$$\left.\times[\cos\omega(t-\tau)x^2-2xx'+\cos\omega(t-\tau)x'^2]\right\}.$$

21*.

$$|\psi(x,t)|^2=\frac{\alpha}{\sqrt{(2\pi)}}\frac{1}{\sqrt{\left(\cos^2\omega t+\frac{\alpha^2\hbar^2}{\mu^2\omega^2}\sin^2\omega t\right)}}$$

$$\cdot\exp\left\{-\frac{\alpha^2[x-Q\cos(\omega t+\delta)]^2}{\cos^2\omega t+\frac{\alpha^2\hbar^2}{\mu^2\omega^2}\sin^2\omega t}\right\}$$

式中

$$x_0+\frac{ip_0}{\mu\omega}=Q\exp(-i\delta).$$

在 $\alpha=\sqrt{(\mu\omega/\hbar)}$ 的情况下，我们得到 §3.18题 c 的结果。

22*. $G(x,t;x',\tau)$

$$=\sqrt{\left(\frac{\mu}{2\pi i\hbar Z}\right)}\exp\left\{\frac{i\mu}{2\hbar Z}[\dot{Z}(x-\xi)^2-2(x-\xi)x'\right.$$

$$\left.+Yx'^2+\frac{i\mu}{\hbar}\xi(t)(x-\xi)+\frac{1}{\hbar}\int_\tau^t L\,dt\right\}.$$

在这个式子中，ξ 满足方程 $\mu\ddot{\xi}=-\mu\omega^2\xi+f(t)$ 以及初始条件 $\xi(\tau)=0$，$\dot{\xi}(\tau)=0$，而 L 是拉格朗日函数

$$L=\frac{1}{2}\mu\dot{\xi}^2-\frac{1}{2}\mu\omega^2\xi^2+f\xi.$$

23*. 从 n 态到 m 态的跃迁几率由下列关系式给出（我们采用 $\hbar=1$，$\mu=1$，$\omega=1$ 的单位制）：

$$P_{mn}(t,0)=|G_{mn}(t,0)|^2,\qquad (1)$$

式中

$$G_{mn}(t,0)=\iint\psi_m^*(x)G(x,t;x',0)\psi_n(x')\,dx\,dx'.$$

利用母函数

$$\exp\left[-\frac{1}{2}(2z^2+x^2-4zx)\right]=\sum_{n=0}^{\infty}\sqrt{\left[\frac{\sqrt{(\pi)}}{n!}2^n\right]}z^n\psi_n(x)$$

我们可以构造出函数 $G(u, v)$：

$$G(u, v)=\iint \exp\left[-\frac{1}{2}(2v^2+x^2-4vx)-\frac{1}{2}(2u^2+x'^2-4ux')\right]G(x, t; x', 0)\,dx\,dx'$$

$$=\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}\sqrt{\left(\frac{\pi 2^{n+m}}{n!m!}\right)}v^m u^n G_{mn}(t, 0). \qquad (2)$$

从(2)式可知，$G_{ij}(t, 0)$ 就是 $G(u, v)$ 按 u 和 v 的幂级数展开式中除常数因子 $\sqrt{(\pi 2^{i+j}/i!j!)}$ 外的系数，其绝对值的平方决定跃迁几率。

我们来计算 $G(u, v)$；为此，将格林函数 G 的表示式代入(2)式(见§3.22题)。

代入之后，得到

$$G(u, v)=\frac{1}{\sqrt{(2\pi iZ)}}\exp\left(i\int_0^t L\,dt-i\xi\xi+\frac{i\dot{Z}}{2Z}\xi^2-u^2-v^2\right)\times\iint\exp\left\{-\frac{1}{2}\left[\left(1-\frac{i\dot{Z}}{Z}\right)x^2+\frac{2i}{Z}xx'+\left(1-\frac{iY}{Z}\right)-2\left(2v-\frac{i\dot{Z}}{Z}\xi+i\dot{\xi}\right)x-2\left(2u+\frac{i\xi}{Z}\right)x'\right]\right\}dx\,dx'.$$

当 $\omega=$常数时，ξ, Z, Y 的形式为

$$\xi(t)=\int_0^t \sin(t-t')f(t')\,dt',\quad Z=\sin t,\quad Y=\cos t.$$

为了计算积分，利用公式

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int dx\,dy\,\exp\left[-\frac{1}{2}(ax^2+2bxy+cy^2-2px-2qy)\right]$$

$$=\frac{2\pi}{\sqrt{(ac-b^2)}}\exp\left[\frac{aq^2-2bpq+cp^2}{2(ac-b^2)}\right].$$

经过一些简单计算后，我们求得函数 $G(u, v)$ 的表示式为

$$G(u, v)=\sqrt{(\pi)}\exp[iF(t)]\exp(-w/2)$$

$$\cdot\exp\left(-\frac{AB}{w}uv+Au+Bv\right),$$

式中

$$A=i\int_0^t e^{-i\omega t'}f(t')dt',\quad B=e^{-i\omega t}A,\quad 2w$$

$$=|A|\cdot|B|=\xi^2+\xi^2,$$

$F(t)$ 是时间的实函数。

为了将 $G(u, v)$ 展成幂级数，利用关系式

$$\exp\left\{\alpha+\beta-\frac{\alpha\beta}{w}\right\}=\sum_{m,n=0}^{\infty}c(m, n|w)\frac{\alpha^m}{m!}\cdot\frac{\beta^n}{n!},$$

其中

$$c(m, n|w)=\sum_{l=0}^{\min(m,n)}\frac{m!n!}{l!(m-l)!(n-l)!}(-w)^{-l}.$$

展开即得

$$G(u, v)=\sqrt{(\pi)}^{-}e^{iF(t)}e^{-\frac{1}{2}w}\sum_{m,n=0}^{\infty}c(m, n|w)$$

$$\cdot\frac{(Bv)^m}{m!}\cdot\frac{(Au)^n}{n!}. \qquad (3)$$

由(2)式和(3)式得

$$G_{m,n}(t, 0)=\frac{e^{-\frac{1}{2}w}\cdot A^nB^m}{\sqrt{(2^{n+m}m!n!)}}c(m, n|w)e^{iF(t)},$$

而所要求的跃迁几率等于

$$P_{mn}(t, 0)=\frac{e^{-w}\cdot w^{m+n}}{m!n!}\{c(m, n|w)\}^2.$$

对于 $n=0$ 的特殊情形，由于 $c(m,\ 0|w)=1$，跃迁几率等于

$$P_{m0}(t,\ 0)=\frac{e^{-w}\cdot w^m}{m!}$$

在算出跃迁几率后，就能决定在 t 时刻振子能量的平均值和能量平方的平均值。

这些平均值由下列方程给出：

$$E=\sum_{m=0}^{\infty}P_{mn}(t,\ 0)\cdot\left(m+\frac{1}{2}\right),$$

$$E^2=\sum_{m=0}^{\infty}P_{mn}(t,\ 0)\cdot\left(m+\frac{1}{2}\right)^2.$$

为了计算这两个性质相似的级数之和，我们考虑下列表示式：

$$\left(1-\frac{\alpha}{w}\right)^m\cdot e^{\alpha}=\Phi(m,\ \alpha|w).$$

容易证明：

$$\Phi(m,\ \alpha|w)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{n!}\ c(m,\ n|w).$$

从方程

$$\sum_{m=0}^{\infty}\frac{e^{-w}\cdot w^m}{m!}\ \Phi(m,\ \alpha|w)\ \Phi(m,\ \beta|w)=e^{\alpha\beta/w}$$

可知

$$\sum_{m=0}^{\infty}\frac{e^{-w}\cdot w^m}{m!}\ c(m,\ n|w)\ c(m,\ n'|w)=\delta_{nn'}n!w^{-n},$$

由此直接得到物理意义明显的关系式

$$\sum_{m=0}^{\infty}P_{mn}=1.$$

现在我们考虑方程

$$\sum_{m=0}^{\infty}m\frac{e^{-w}\cdot w^m}{m!}\Phi(m,\alpha|w)\Phi(m,\beta|w)$$

$$=\left\{w-\alpha-\beta+\frac{\alpha\beta}{w}\right\}e^{\alpha\beta/w}$$

将它两边对 α 求导 n 次，对 β 求导 m 次，然后令 $\alpha=\beta=0$，则得

$$\sum_{m=0}^{\infty}mP_{mn}=n+w.$$

由此看出，在 t 时刻振子能量的平均值 $\bar{E}=E_n+w$。其中 w 是在时间间隔 t 内力 $f(t)$ 所作的功，

$$w=\int_0^t f(t)\dot{\xi}dt=\int_0^t(\ddot{\xi}+\xi)\dot{\xi}dt$$

$$=\frac{1}{2}(\dot{\xi}^2+\xi^2)_{t=t}-\frac{1}{2}(\dot{\xi}^2+\xi^2)_{t=0}.$$

用类似方法求得

$$D^2=2wE_n.$$

24*. 体系的哈密顿量为

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2\mu}+\frac{\mu\omega^2}{2}[x-x_0(t)]^2.$$

我们的问题是要找出波函数 $\psi(x,t)$，它满足方程

$$\hat{H}\psi=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \tag{1}$$

和初始条件

$$\psi(x,0)=\psi_0(x). \tag{2}$$

设 $\hat{U}(t,t_0)$ 是使 $\psi(t_0)$ 变为 $\psi(t)$ 的算符，

$$\psi(t)=\hat{U}\psi(t_0).$$

将此代入薛定谔方程(1)，并考虑到 $\psi(t_0)$ 可以是任意函数，则得

$$\hat{H}\hat{U}=i\hbar\frac{\partial\hat{U}}{\partial t}.$$

取这个方程的厄密共轭，则有

$$\hat{U}^{+}\hat{H}=-i\hbar\frac{\partial\hat{U}^{+}}{\partial t}.$$

我们现在引进海森伯表象中的算符 $\hat{x}$ 和 $\hat{p}$：

$$\hat{x}(t,\ t_0)=\hat{U}^{+}(t,\ t_0)\,\hat{x}\hat{U}(t,\ t_0),$$

$$\hat{p}(t,\ t_0)=\hat{U}^{+}(t,\ t_0)\,\hat{p}\hat{U}(t,\ t_0).$$

不难得到关于 $\hat{x}(t,\ t_0)$ 和 $\hat{p}(t,\ t_0)$ 的下列方程，

$$\dot{\hat{x}}(t,\ t_0)=\frac{i}{\hbar}\hat{U}^{+}[\hat{H},\ \hat{x}]_{-}\hat{U},$$

$$\dot{\hat{p}}(t,\ t_0)=\frac{i}{\hbar}\hat{U}^{+}[\hat{H},\ \hat{x}]_{-}\hat{U},$$

(其中点"·"表示对 t 求导数).

算出对易式，即得 $\hat{x}(t,\ t_0)$ 和 $\hat{p}(t,\ t_0)$ 的方程组：

$$\dot{\hat{x}}=\frac{1}{\mu}\hat{p},\quad \dot{\hat{p}}=-\mu\omega^2[\hat{x}-x_0(t)]\ \text{或}+\ddot{\hat{x}}\omega^2\hat{x}=\omega^2x_0.$$

这些方程具有"经典的"形式。

因为它们是线性的，故可以象 c 数方程组那样求解：

$$\hat{x}=\hat{c}_1\sin\omega(t-t_0)+\hat{c}_2\cos\omega(t-t_0)+x_1,$$

$$\hat{p}=\mu\omega\hat{c}_1\cos\omega(t-t_0)-\mu\omega\hat{c}_2\sin\omega(t-t_0)+p_1,$$

其中 x_1 和 p_1 是非齐次方程组 (2) 的解，当 $t=t_0$ 时，它们变为零：

$$\left.\begin{aligned}x_1(t,\ t_0)&=\omega\int_{t_0}^{t}x_0(t')\sin\omega(t-t')\,dt'\\ p_1(t,\ t_0)&=\mu\omega^2\int_{t_0}^{t}x_0(t')\cos\omega(t-t')\,dt'\end{aligned}\right\}\qquad(3)$$

从海森伯表象中这些算符的定义，可得

$$\hat{x}(t_0, t_0)=\hat{x},\quad \hat{p}(t_0, t_0)=\hat{p}.$$

满足这些初始条件，即得

$$\left.\begin{aligned}\hat{x}(t, t_0)&=\hat{x}\cos\omega(t-t_0)+\frac{\hat{p}}{\mu\omega}\sin\omega(t-t_0)+x_1(t, t_0),\\ \hat{p}(t, t_0)&=\hat{p}\cos\omega(t-t_0)-\mu\omega\hat{x}\sin\omega(t-t_0)+p_1(t, t_0)\end{aligned}\right\}\tag{4}$$

利用这些方程，很容易找到我们问题的解。

我们写出初始函数所满足的方程：

$$\hat{H}_0\psi_0=E_0\psi_0.\tag{5}$$

这里

$$\hat{H}_0=\frac{\hat{p}^2}{2\mu}+\frac{\mu\omega^2\hat{x}^2}{2}.$$

为了确定 $\hat{U}(t, t_0)$，我们可写出

$$\psi(t)=\hat{U}(t, 0)\psi_0 \text{ 或 } \psi_0=\hat{U}(0, t)\psi(t),$$

其中 $\psi(t)$ 就是我们所要求的函数。

将 ψ_0 的这个表示式代入方程(5)中，则得

$$\hat{U}^+(0, t)\hat{H}_0\hat{U}(0, t)\,\psi(t)=E_0\psi(t).\tag{6}$$

这方程中出哈密顿量，就是由算符 $\hat{x}(0, t)$，$\hat{p}(0, t)$ 构成的哈密顿量 $\hat{H}_t$。

$$\hat{U}^+(0, t)\hat{H}_0\hat{U}(0, t)=\frac{\hat{p}^2(0, t)}{2\mu}+\frac{\mu\omega^2\hat{x}^2(0, t)}{2}.$$

利用由(3)式和(4)式导出的关系式：

$$\hat{x}=\hat{x}(0, t)\cos\omega t+\frac{\hat{p}(0, t)}{\mu\omega}\sin\omega t+x_1(t, 0)$$

$$\hat{p}=\hat{p}(0, t)\cos\omega t-\mu\omega\hat{x}(0, t)\sin\omega t+p_1(t, 0),$$

或者经简单的代换，可以证明

$$\frac{\hat{p}^2(0, t)}{2\mu}+\frac{\mu\omega^2\hat{x}^2(0, t)}{2}=\frac{[\hat{p}-p_1(t, 0)]^2}{2\mu}$$

$$+\frac{\mu\omega^2[\hat{x}-x_1(t, 0)]^2}{2}.$$

因此，$\psi(t)$的方程(6)具有如下形式：

$$\frac{[\hat{p}-p_1(t,0)]^2}{2\mu}\psi+\mu\omega^2\frac{[\hat{x}-x_1(t,0)]^2}{2}\psi=E_0\psi,$$

它的解为

$$\psi(x,t)=\exp\{ip_1(t,0)[x-x_1(t,0)]/\hbar\}\psi_0[x-x_1(t,0)]. \tag{7}$$

(因为在我们的方程中t是参数，所以ψ可以包含一个以任意方式依赖于t的相因子。然而这不会影响所要求的几率。)

我们也可采用另一种方法来确定$\psi(t)$，例如，采用求薛定谔方程的格林函数的方法（与§3.20题比较）。

由于初态具有完全确定的能量，所以我们选取了上面所用的方法。

我们所求得的函数(7)就是以前的，在与运动粒子联结在一起的坐标系中粒子的经典位置[见方程(2)和(3)]的零级分布。

为了求激发到第n态的几率w_n，应该把$\psi(t)$按在时刻$t(t>T)$的哈密顿量的本征函数展开。这些归一化的本征函数有如下的形式：

$$\psi_n(x)=\left(\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\frac{1}{\sqrt{(2^n n!)}}\exp\left[-\frac{\mu\omega}{2\hbar}(x-x_0)^2\right]$$

$$\cdot H_n\left[\sqrt{\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)}(x-x_0)\right], \tag{8}$$

式中

$$H_n(\xi)=(-1)^n\exp(\xi^2)\frac{\mathrm{d}^n\exp(-\xi^2)}{\mathrm{d}\xi^n} \tag{9}$$

是厄密多项式。所求展开式的系数等于

$$c_n(t)=\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x,t)\psi_n^*(x)\mathrm{d}x.$$

将(7)式的$\psi(x,t)$和由方程(8)与(9)给出的$\psi_n^*=\psi_n$代入上式，并对$\xi=(x-x_0)\sqrt{\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)}$积分，最后得到

$$c_n=\frac{1}{\sqrt{(2^n n!\pi)}}\exp\left[\mathrm{i}\frac{p_1(t,0)(x_t-x_1)}{\hbar}\right]$$

$$\times\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[\mathrm{i}\frac{p_1(t,0)}{\sqrt{(\mu\hbar\omega)}}\xi\right]\exp\left\{-\frac{1}{2}\left[\xi+\frac{x_0-x_1}{\sqrt{(\hbar/\mu\omega)}}\right]^2\right\}$$

$$\times\exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right)H_n(\xi)\mathrm{d}\xi$$

$$=\frac{(-1)^n}{\sqrt{(2^n n!\pi)}}\exp\left[-\frac{\mu\omega(x_1-x_0)^2}{2\hbar}+\mathrm{i}\frac{p_1(x_0-x_1)}{\hbar}\right]$$

$$\times\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\xi\exp\left\{\xi\left[\mathrm{i}\frac{p_1}{\sqrt{(\mu\omega\hbar)}}+\sqrt{\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)}(x_1-x_0)\right]\right\}$$

$$\times\frac{\mathrm{d}^n\exp(-\xi^2)}{\mathrm{d}\xi^n}=\frac{1}{\sqrt{(2^n n!\pi)}}\exp\left[-\frac{\mu\omega(x_1-x_0)^2}{2\hbar}\right.$$

$$\left.+\mathrm{i}\frac{p_1(x_0-x_1)}{\hbar}\right]\times\left[\mathrm{i}\frac{p_1}{\sqrt{(\mu\omega\hbar)}}+\sqrt{\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)}(x_1-x_0)\right]^n$$

$$\times\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left\{-\xi^2+\xi\left[\mathrm{i}\frac{p_1}{\sqrt{(\mu\omega\hbar)}}+\sqrt{\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)}(x_1-x_0)\right]\right\}\mathrm{d}\xi$$

$$=\frac{1}{\sqrt{(2^n n!)}}\left[\mathrm{i}\frac{p_1}{\sqrt{(\mu\omega\hbar)}}+\sqrt{\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)}(x_1-x_0)\right]^n$$

$$\times\exp\left\{-\frac{\mu\omega(x_1-x_0)^2}{2\hbar}+\mathrm{i}\frac{p_1(x_1-x_0)}{\hbar}\right.$$

$$\left.+\frac{1}{4}\left[\sqrt{\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)}(x_1-x_0)+\mathrm{i}\frac{p_1}{\sqrt{(\mu\omega\hbar)}}\right]^2\right\}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{(2^n n!)}}\left[\sqrt{\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)}(x_1-x_0)+\mathrm{i}\frac{p_1}{\sqrt{(\mu\omega\hbar)}}\right]^n$$

$$\times\exp\left[-\frac{\frac{p_1^2}{2\mu}+\frac{\mu\omega(x_1-x_0)^2}{2}}{2\omega\hbar}-\mathrm{i}\frac{p_1(x_1-x_0)}{2\hbar}\right]$$

因此

$$w_n=|c_n|^2=\frac{1}{n!}\left[\frac{\frac{p_1^2}{2\mu}+\frac{\mu\omega^2(x_1-x_0)^2}{2}}{\hbar\omega}\right]^n$$

$$\cdot\exp\left[-\frac{\frac{p_1^2}{2\mu}+\frac{\mu\omega^2(x_1-x_0)^2}{2}}{\hbar\omega}\right].$$

注意，$\left[p_1^2/2\mu+\frac{1}{2}\mu\omega^2(x_1-x_0)^2\right]$是在此过程中传递给经典粒子的能量，这粒子原来是静止的。若用 ϵ 表示这个量，则得

$$w_n=\frac{(\epsilon/\hbar\omega)^n}{n!}\exp(-\epsilon/\hbar\omega),$$

这是 n 的平均值为

$$\bar{n}=\frac{\epsilon}{\hbar\omega}$$

的泊松分布。

现在来讨论极限情况。

如果平衡点变化得很快，则 x_1 和 p_1 近似地等于

$$x_1=x_0(1-\cos\omega t),\quad p_1=\mu\omega x_0\sin\omega t.$$

将这些值代入 c_n 的表示式中，得到

$$c_n=\frac{(-1)^n}{\sqrt{(2^n n!)}}\left[x_0\sqrt{\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)}\right]^n\exp\left(-in\omega t-\frac{\mu\omega^2x_0^2}{2\hbar\omega}\right.$$

$$\left.+i\frac{\mu\omega x_0^2}{\hbar}\sin\omega t\cos\omega t\right).$$

这个结果与把初始波函数按 $t>0$ 时的哈密顿量的本征函数展开所得的结果，只差一个相因子$\exp[(i\mu\omega x_0^2/\hbar)\sin\omega t\cos\omega t]$。(这一表示式可由 c_n 的一般表示式中令 $x_1=0$，$p_1=0$ 而得到。)

如果平衡点缓慢地变化，则在零级近似下，我们有 $x_1\approx x_0$，$p_1=0$，因而

$$\psi(x,t)\approx\psi_0[x-x_0(t)].$$

这个方法也可用来解决其他参数随时间改变的振子问题。

25*. 由给定哈密顿量描述的粒子，其经典运动方程是

$$\mu\ddot{x}+\mu\gamma\dot{x}=F(t),$$

所以，我们所研究的是一个受到与时间有关的阻力 $F(t)$ 影响的粒子。

现在我们仿照§3.19题进行讨论，引入一新的自变量

$$x_1=x-\xi(t),$$

和一新的波函数

$$\psi=\chi\exp\frac{i}{\hbar}\left\{\mu\dot{\xi}x_1e^{\gamma t}+\int^t L(\tau)d\tau\right\},$$

式中 $L(\tau)$ 是经典的拉格朗日函数

$$L=e^{\gamma t}\left[\frac{1}{2}\mu\dot{\xi}^2+F(t)\xi\right].$$

我们可以求得对于 χ 的方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}e^{-\gamma t}\frac{\partial^2\chi}{\partial x_1^2}=i\hbar\frac{\partial\chi}{\partial t}, \tag{A}$$

这是一个受阻力影响的自由粒子的薛定谔方程。

分离变量，求得方程(A)的解如下：

$$\chi_k=A\exp\left[\pm ikx_1+\frac{i\hbar k^2}{2\mu\gamma}e^{-\gamma t}\right].$$

在考虑 $F(t)$ 的情况下，我们有 $x_1=x$，并且 χ_k 构成一个完全的正交归一集合；归一化常数 $A=L^{-\frac{1}{2}}$，这里 L 是一维体积。将 ψ 按 χ_k 展开，最后得

$$\psi(x,t)=B(t)\exp\left\{-\frac{[x-(\hbar k_0/\mu)(1-e^{-\gamma t})/\gamma]^2}{\sigma^2+\hbar^2(1-e^{-\gamma t})^2/\mu^2\gamma^2\sigma^2}\right\}.$$

式中 $B(t)$ 是与时间有关的归一化常数。可见，波包中心的运动，很象一个经典的点粒子在粘滞介质中以速度 $\hbar k_0/\mu$ 运动。

当 $t\to\infty$ 时，我们得

$$\psi(x,t\to\infty)=B_\infty\exp\left[-\frac{\{x-(\hbar k_0/\gamma\mu)\}^2}{\sigma^2+\hbar^2/\mu^2\sigma^2\gamma^2}\right].$$

关于这里所处理的问题的一般讨论，请参考 L. H. Buch和 H. H. Denman的论文 (Am. J.Phys. 42 (1974), 304)。

28 用 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 表示所要考虑的算符，用 $\hat{H}$ 表示系统的哈密顿

算符．于是，我们有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\hat{A}\hat{B})=\frac{\partial}{\partial t}(\hat{A}\hat{B})+\frac{1}{i\hbar}[\hat{H},\ \hat{A}\hat{B}]_{-}.$$

利用§3.1题的结果，经过简单的变换之后，把$\mathrm{d}\hat{A}/\mathrm{d}t=\dot{\hat{A}}$和$\mathrm{d}\hat{B}/\mathrm{d}t=\dot{\hat{B}}$的项归并，即得所要求的微分规则

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\hat{A}\hat{B})=\dot{\hat{A}}\hat{B}+\hat{A}\dot{\hat{B}}.$$

29．在海森伯表象中，我们有

$$\hat{x}(t)=\exp(i\hat{H}t/\hbar)\hat{x}\exp(-i\hat{H}t/\hbar) \tag{1}$$

在我们的情况下，$\hat{H}=\hat{p}^2/2\mu$，所以

$$\hat{x}(t)=\exp[\mathrm{i}(\hat{p}^2t/2\mu\hbar)]\hat{x}\exp[-\mathrm{i}(\hat{p}^2t/2\mu\hbar)].$$

我们将在动量表象中进行计算．这时

$$\hat{x}=\mathrm{i}\hbar(\partial/\partial p)$$

因而

$$\hat{x}\exp(-\mathrm{i}\hat{p}^2t/2\mu\hbar)=i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\exp(-\mathrm{i}\hat{p}^2t/2\mu\hbar)$$

$$=\exp(-i\hat{p}^2t/2\mu\hbar)ih\left(-\frac{\partial}{\partial p}+\frac{pt}{\mu}\exp(-\mathrm{i}\hat{p}^2t/2\mu\hbar)\right),$$

或者

$$\hat{x}\exp(-\mathrm{i}\hat{p}^2t/2\mu\hbar)=\exp(-\mathrm{i}\hat{p}^2t/2\mu\hbar)\left(\hat{x}+t\frac{\hat{p}}{\mu}\right)$$

将此式代入方程(1)，得

$$\hat{x}(t)=\hat{x}+t\frac{\hat{p}}{\mu},$$

这个算符间的关系式，与对应的经典量之间的关系式完全相同．

30．算符的运动方程为

$$\left.\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\hat{x}}{\mathrm{d}t}&=\frac{1}{i\hbar}[\hat{H},\hat{x}(t)]_{-},\\ \frac{\mathrm{d}\hat{p}}{\mathrm{d}t}&=\frac{1}{i\hbar}[\hat{H},\hat{p}(t)]_{-}.\end{aligned}\right\} \tag{1}$$

在海森伯表象中，(1) 式左边的导数，是对显含在海森伯算符中的时间求导数。因为算符 $\exp(\pm i\hat{H}t/\hbar)$ 与哈密顿量对易，故可将方程 (1) 改写为

$$\left.\begin{aligned}\frac{d\hat{x}}{dt}&=\frac{i}{\hbar}\exp(i\hat{H}t/\hbar)[\hat{H},\hat{x}]_-\exp(-i\hat{H}t/\hbar),\\ \frac{d\hat{p}}{dt}&=\frac{i}{\hbar}\exp(i\hat{H}t/\hbar)[\hat{H},\hat{p}]_-\exp(-i\hat{H}t/\hbar).\end{aligned}\right\}\tag{2}$$

算出对易式之后，我们得

$$\left.\begin{aligned}\frac{d\hat{x}}{dt}&=\frac{\hat{p}(t)}{\mu}\\ \frac{d\hat{p}}{dt}&=-\mu\omega^2\hat{x}(t)\end{aligned}\right\}\tag{3}$$

由于这些方程是线性的，所以它们可以象其他任何通常的 c 数量方程组那样求解。于是得到

$$\left.\begin{aligned}\hat{x}(t)&=c_1\cos\omega t+c_2\sin\omega t,\\ \hat{p}(t)&=c_2\mu\omega\cos\omega t-c_1\mu\omega\sin\omega t.\end{aligned}\right\}\tag{4}$$

积分常数 c_1 和 c_2 仅对时间而言才是常数。它们可由初始条件确定。实际上，从海森伯算符的定义可得

$$\hat{L}(t)|_{t=0}=\exp(i\hat{H}t/\hbar)\hat{L}\exp(-i\hat{H}t/\hbar)|_{t=0}=\hat{L}.$$

因此

$$\hat{x}(t)|_{t=0}=\hat{x}=c_1$$

$$\hat{p}(t)|_{t=0}=\hat{p}=c_2\mu\omega.$$

由此最后得到

$$\left.\begin{aligned}\hat{x}(t)&=\hat{x}\cos\omega t+\frac{\hat{p}}{\mu\omega}\sin\omega t\\ \hat{p}(t)&=\hat{p}\cos\omega t-\mu\omega\hat{x}\sin\omega t\end{aligned}\right\}\tag{5}$$

这些方程在任何海森伯表象中都成立。在坐标表象的特殊情形下，我们得

$$\left.\begin{aligned}\hat{x}_s(t)&=x\cos\omega t+\frac{\hbar}{i\mu\omega}\sin\omega t\,\frac{\partial}{\partial x},\\ \hat{p}_s(t)&=\frac{\hbar}{i}\cos\omega t\,\frac{\partial}{\partial x}-\mu\omega x\sin\omega t.\end{aligned}\right\}\tag{6}$$

31. $i\hbar\dfrac{\partial\psi_{int}}{\partial t}=(\hat{H}_1)_{int}\psi_{int}$, $i\hbar\dot{\hat{L}}_{int}=[\hat{L}_{int},\hat{H}_0]$.

33. 若量A不显含时间，则A对时间的导数所对应的算符有如下形式

$$\dot{\hat{A}}=\frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{A}]=\frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{A}-\hat{A}\hat{H}).\tag{1}$$

在波函数为ψ_n的分立谱的定态中，$\dot{A}$的平均值等于算符(1)的矩阵的相应的对角元素，

$$\dot{A}_n=\int\psi_n^*\dot{\hat{A}}\psi_n d\tau=\dot{A}_{nn}=\frac{1}{\hbar}(HA-AH)_{nn}.\tag{2}$$

由于在能量表象中哈密顿量是对角的，而且在分立谱的情形下，A的矩阵元是有限的，所以方程(2)的右边恒等于零。这就证明了所要的关系式$\bar{\dot{A}}=0$。($\dot{A}$的这一性质的经典类比是，任何有界量A的时间平均值为零.)

这个方程的一个具体例子，可在§5.16题中找到。

34. 经典力学的维里定理可表述如下：若一力学系统的势能是它的（笛卡尔）坐标的齐次函数，且系统的运动限制在有限空间内，则动能T和势能V的时间平均之间存在如下关系：

$$nV=2T.\tag{1}$$

这里横线表示对时间的平均，n表示齐次函数$V(x_1,x_2,\cdots,x_i,\cdots,x_{3N})$的自由度，其中$N$是这系统中点粒子的数目，所以根据关于齐次函数的欧勒定理，我们有

$$\cdots=\sum_{i=1}^{3N}x_i\frac{\partial V}{\partial x_i}.\tag{2}$$

在量子力学中，定理（1）仍然成立，不过要把平均理解为量子力学中（对波函数）的平均，这里我们将用符号< >表示量子力学的平均。

采用矩阵方法来证明是方便的（注意，利用坐标表象中的薛定谔方程来证明要烦琐得多，这种方法在§7.83题中用来证明求和定理）。我们有

$$2\hat{T}-n\hat{V}=\sum_{i=1}^{3N}\left(\frac{\hat{p}_i^2}{\mu_i}-\hat{x}_i\frac{\partial\hat{V}}{\partial x_i}\right)。\tag{3}$$

利用算符关系

$$\hat{x}_i=\frac{\hat{p}_i}{\mu_i},\quad \hat{\dot{p}}=-\frac{\partial\hat{V}}{\partial x_i},$$

将方程（3）写成如下的形式：

$$2\hat{T}-n\hat{V}=\sum_{i=1}^{3N}(\hat{x}_i\hat{p}_i+\hat{x}_i\hat{\dot{p}}_i)。\tag{3'}$$

当然，这个算符关系在任何表象中都成立。

现在换到能量表象中去，并以哈密顿量 $\hat{H}=\hat{T}+\hat{V}$ 的正交归一本征函数组ψ_n为基。因为假设运动是有界的，所以这些函数将属于分立能谱。因此，我们所处理的是其所有矩阵元都是有限的矩阵。这一点在我们的证明里是很重要的。

我们来写出算符(3')的对角矩阵元(m,m)，或者换句话说，写出算符(3')对定态波函数ψ_m的平均值。

根据矩阵乘法和加法的规则，得

$$\langle 2T-nV\rangle_{\psi_m}=(2T-nV)_{mm}$$

$$=\sum_{i=1}^{3N}\sum_{l}[(\hat{x}_i)_{ml}(p_i)_{lm}+(x_i)_{ml}(\hat{p}_i)_{lm}]。\tag{4}$$

此外，我们有熟知的矩阵关系

$$(\dot{x}_i)_{mt}=\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E_m-E_t)(x_i)_{mt},$$

$$(\dot{p}_i)_{tm}=\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E_t-E_m)(p_i)_{tm},$$

式中E_m和E_t是系统的能级。

这样一来，方程(4)中两重求和号下的式子等于零，于是求得关系式(1)在量子力学中的推广，

$$n\langle V\rangle=2\langle T\rangle。$$

在特殊情形下，若$n=2$（谐振子），我们有$\langle V\rangle=\langle T\rangle$；若$n=-1$（库仑相互作用），$\langle V\rangle=-2\langle T\rangle$。

35. 其p_0是粒子动量的平均值。

36. 为了证明这一点，利用算符关系

$$\bar{\boldsymbol{p}}=\frac{\mathrm{i}\mu}{\hbar}(\hat{H}\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}\hat{H})。$$

当哈密顿量不显含时间和不存在磁场时，这个关系是正确的。在分立谱的态ψ中，$\hat{\boldsymbol{p}}$的平均值是

$$\bar{\boldsymbol{p}}=\frac{\mathrm{i}\mu}{\hbar}\int\psi^*(\hat{H}\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}\hat{H})\psi\mathrm{d}\tau。$$

因为$\hat{H}$是厄密算符，我们有

$$\bar{\boldsymbol{p}}=\frac{\mathrm{i}\mu}{\hbar}\int(\hat{H}^*\psi^*\cdot\boldsymbol{r}\psi-\psi^*\boldsymbol{r}\hat{H}\psi)\mathrm{d}\tau。$$

对于定态有

$$\hat{H}\psi=E\psi,\quad \hat{H}^*\psi^*=E\psi^*,$$

故最后求得

$$\bar{\boldsymbol{p}}=0。$$

37. (a) $\hat{x}(t)=x-\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu}t\frac{\partial}{\partial x}$，

(b) $\hat{x}(t)=x\cos\omega t-\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu\omega}\sin\omega t\frac{\partial}{\partial x}$。

38. $\overline{(\Delta x)_t^2} = \overline{(\Delta x)_0^2} + \frac{t}{\mu}[\overline{(\Delta p)(\Delta x)} + \overline{(\Delta x)(\Delta p)}]_0$

$$+ \frac{t^2}{\mu^2}\overline{(\Delta p)_0^2}$$

注意，从所得的关系式，容易确定 $\overline{(\Delta x)^2}$ 取极小值的时刻 τ。函数 $\overline{(\Delta x)_t^2}$ 是对 τ 点的对称函数。当波函数在 $t=0$ 时具有形式 $\psi(x)=\varphi(x)\exp(ip_0x/\hbar)$ [$\varphi(x)$ 是实函数] 的情况下，$\tau=0$（见§3.18题a）。

39. (a) $\overline{(\Delta x)_t^2} = \overline{(\Delta x)_{t=0}^2} + \frac{\hbar^2t^2}{\mu^2}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)^2 dx$

(b) $\overline{(\Delta x)_t^2} = \overline{(\Delta x)_{t=0}^2}\cos^2\omega t + \frac{\hbar^2}{\mu^2\omega^2}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)^2$

$\cdot \sin^2\omega t dx$。

40. $\hat{a}(t)$ 和 $\hat{a}^+(t)$ 的运动方程是（见§3.27题）

$$i\hbar\dot{\hat{a}} = [\hat{a}, \hat{H}]_-, \quad i\hbar\dot{\hat{a}}^+ = [\hat{a}^+, \hat{H}]_-$$

利用哈密顿量的表示式

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

和对易关系式

$$[\hat{a}, \hat{a}^+]_- = 1$$

（这两个式子都是由§1.8题的方程推导出来的），我们得到

$$i\hbar\dot{\hat{a}} = \hbar\omega\hat{a}, \quad i\hbar\dot{\hat{a}}^+ = -\hbar\omega\hat{a}^+。$$

由此得

$$\hat{a}(t) = \hat{a}e^{-i\omega t}, \quad \hat{a}^+(t) = \hat{a}^+e^{i\omega t}。$$

41. 这体系的哈密顿量

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2\hat{x}^2 - f(t)\hat{x}$$

可用算符 $\hat{a}$ 和 $\hat{a}^+$ 表述（见§1.8题）如下：

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1,$$

式中

$$\hat{H}_0=\hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a}+\frac{1}{2}\right),\ \hat{H}_1=-f(t)\sqrt{(\hbar/2\mu\omega)}(\hat{a}+\hat{a}^+).$$

我们找出薛定谔方程的如下形式的解

$$\psi(t)=\exp(-\mathrm{i}\hat{H}_0t/\hbar)\varphi(t). \tag{1}$$

此时，$\varphi(t)$满足方程

$$\mathrm{i}\hbar\dot{\varphi}=\hat{H}_1(t)\varphi, \tag{2}$$

其中（见上题）

$$\hat{H}_1(t)=\exp(\mathrm{i}\hat{H}_0t/\hbar)\hat{H}_1\exp(-\mathrm{i}\hat{H}_0t/\hbar)$$
$$=-f(t)\sqrt{(\hbar/2\mu\omega)}\,[\hat{a}\exp(-\mathrm{i}\omega t)+\hat{a}^+\exp(\mathrm{i}\omega t)] \tag{3}$$

由(2)式和(3)式，可以写出

$$\varphi(t)=\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[\int_{-\infty}^{t}f(t')\sqrt{\left(\frac{\hbar}{2\mu\omega}\right)}\hat{a}\exp(-\mathrm{i}\omega t')\,\mathrm{d}t'\right.\right.$$
$$\left.\left.+\int_{-\infty}^{t}f(t')\sqrt{\left(\frac{\hbar}{2\mu\omega}\right)}\hat{a}^+\exp(-\mathrm{i}\omega t')\,\mathrm{d}t'\right]\right\}$$
$$\cdot\varphi(-\infty),$$

当$t=+\infty$时，我们有

$$\varphi(\infty)=\exp[\mathrm{i}C(\hat{a}+\hat{a}^+)]\varphi(-\infty), \tag{4}$$

式中

$$C=\sqrt{\left(\frac{1}{2\mu\hbar\omega}\right)}\int_{-\infty}^{+\infty}f(t')\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t'}\,\mathrm{d}t',$$

因为$f(t)$是t的偶函数，所以C是实的。

如果利用§3.5题的结果和对易关系$[\hat{a},\hat{a}^+]_-=1$，则由(4)式得

$$\varphi(\infty)=\exp\left(-\frac{1}{2}C^2\right)\exp(\mathrm{i}C\hat{a}^+)\exp(\mathrm{i}C\hat{a})\varphi(-\infty). \tag{5}$$

如果ψ_n是振子的本征函数，我们有（见§1.8题）

$$(\hat{a}^+)^n\psi_0=\sqrt{n!}\,\psi_n,\ \hat{a}\psi_0=0. \tag{6}$$

当$t=-\infty$时，振子处于基态，由(1)式可以写出$\varphi(-\infty)=\psi_0$，利

用(5)式和(6)式得

$$\varphi(\infty)=\exp\left(-\frac{1}{2}C^2\right)\sum\frac{(iC)^n}{\sqrt{n_1}}\psi_n,$$

由此可见，在$t=+\infty$时，跃迁到第n，激发态的几率W_{n0}为泊松分布

$$W_{n0}=e^{-\nu}\frac{\nu^n}{n_1},$$

其中

$$\nu=\frac{1}{2\hbar\mu\omega}\left|\int_{-\infty}^{+\infty}f(t)e^{i\omega t}dt\right|^2.$$

(a) 对于$f(t)=f_0\exp(-t^2/\tau^2)$，我们得

$$\nu=\frac{\pi f_0^2\tau^2}{2\hbar\mu\omega}\exp\left(-\frac{1}{2}\omega^2\tau^2\right).$$

(b) 对于$f(t)=\frac{f_0}{(t/\tau)^2+1}$，我们得

$$\nu=\frac{\pi^2 f_0^2\tau^2}{2\hbar\mu\omega}e^{-2\omega\tau}.$$

42. 把要找的第一个算符记为$\hat{M}_{(p)}$，于是有

在r表象中$\left(\frac{\hat{1}}{r}=\frac{1}{r}\right)$：$\frac{\hat{1}}{r}\psi(r)=\varphi(r)$，(1)

在p表象中$\left(\frac{\hat{1}}{r}=\hat{M}_{(p)}\right)$：$\hat{M}_{(p)}g(p)=f(p)$，(2)

其中$g(p)$和$f(p)$是函数$\psi(r)$和$\varphi(r)$（在p表象中的波函数）的傅里叶分量，它们之间的关系为：

$$g(p)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\int\psi(r)\exp\left[-\frac{i(p\cdot r)}{\hbar}\right]d^3r,\quad(3)$$

$$f(p)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\int\varphi(r)\exp\left[-\frac{i(p\cdot r)}{\hbar}\right]d^3r.\quad(4)$$

除了本题外，其它某些问题也需要知道$\frac{1}{r}$的傅里叶变换．我

们用最简单的办法来求它。把$\frac{1}{r}$写成

$$\frac{1}{r}=\int a(\boldsymbol{k})\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})]d^3\boldsymbol{k}. \tag{5}$$

用拉普拉斯算符∇^2作用于这个方程的两边，显然有等式

$$\nabla^2\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})]=-k^2\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})] \tag{6}$$

及

$$\nabla^2\left(\frac{1}{r}\right)=-4\pi\delta(\boldsymbol{r}), \tag{7}$$

式中$\delta(\boldsymbol{r})$是δ函数。(7)式容易证明如下：将∇^2写成$\nabla\cdot\nabla$，再将(7)式两边对一小体积积分并利用高斯定理即得。然后，将拉普拉斯算符作用于(5)式两边，即得

$$-4\pi\delta(\boldsymbol{r})=-\int k^2a(\boldsymbol{k})\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})]\mathrm{d}^3\boldsymbol{k}.$$

根据傅里叶定理和δ函数的定义，得

$$k^2a(\boldsymbol{k})=\frac{1}{(2\pi)^3}\int 4\pi\delta(\boldsymbol{r})\exp[-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\frac{1}{2\pi^2},$$

所以

$$a(\boldsymbol{k})=a(k)=\frac{1}{2\pi^2k^2};$$

最后得

$$\frac{1}{r}=\frac{1}{2\pi^2}\int\frac{\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})]}{k^2}\mathrm{d}^3\boldsymbol{k}. \tag{8}$$

为了确定$M_{(p)}$的形式，将表示式(1)代入式(4)，再利用(8)式[在(8)式中代入$\boldsymbol{k}=\boldsymbol{p}'/\hbar$]即得：

$$\begin{aligned}f(\boldsymbol{p})&=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\int\frac{1}{r}\psi(\boldsymbol{r})\exp[-\mathrm{i}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar]d^3\boldsymbol{r}\\&=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\cdot\frac{1}{2\pi^2\hbar}\iint\frac{\psi(\boldsymbol{r})}{(\boldsymbol{p}')^2}\exp\\&\quad\cdot\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\cdot\boldsymbol{r}\right]\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}'\,d^3\boldsymbol{r}.\end{aligned}$$

对r积分并利用(3)式，我们得

$$f(p)=\frac{1}{2\pi^2\hbar}\int\frac{g(p-p')\mathrm{d}^3p'}{(p')^2}$$

选$p-p'$作为新的积分变数，用方程(2)来表示$f(p)$，最后得

$$\hat{M}_{(p)}g(p)=\frac{1}{2\pi^2\hbar}\int\frac{g(p')\mathrm{d}^3p'}{(p-p')^2}$$

(从推导中容易看出，积分是对整个p'空间进行的)。

这样，$\left(\frac{\hat{1}}{r}\right)\equiv\hat{M}(\vec{p})$是具有核

$$G(p,p')=\frac{1}{2\pi^2\hbar(p-p')^2}$$

的积分算符。

用完全相似的方法可求得r表象中的算符$\left(\frac{\hat{1}}{p}\right)$，将它记为$\hat{L}(\vec{r})$，

$$\hat{L}(\vec{r})\psi(r)=\frac{1}{2\pi^2\hbar}\int\frac{\psi(r')\mathrm{d}^3r'}{(r-r')^2},$$

即$\left(\frac{\hat{1}}{p}\right)=\hat{L}(\vec{r})$是具有核

$$G(r,r')=\frac{1}{2\pi^2\hbar(r-r')^2}$$

的积分算符。

43. 设$\psi(x)$为一函数，令算符$\left(\frac{\hat{1}}{p}\right)$(这里和以后都略去$p$的角标$x$)作用其上。设$\varphi(x)$为此运算的结果：

$$\varphi=\left(\frac{\hat{1}}{p}\right)\psi. \tag{1}$$

现在的问题是，对于给定的$\psi(x)$找出一种确定$\varphi(x)$的方法。为了解决这个问题，我们变换到动量表象中去。设ψ和φ在动量表象中相应的函数是$f(p)$和$g(p)$，于是方程(1)可写为

$$g(p)=\frac{1}{p}f(p). \tag{1'}$$

方程(1')表明，一般地说，函数$g(p)$在$p=0$有一个极点，因而不能满足量子力学中对波函数的一般要求。要想不违反这个要求，必须使$p=0$时$f(p)$趋于零：

$$f(0)=0. \tag{2}$$

因为$f(p)$是函数$\psi(x)$的第p个傅里叶分量，故在坐标表象中，条件(2)可写成

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)\mathrm{d}x=0. \tag{2'}$$

以后我们将假定条件(2)是满足的，因为只有在这种情况下算符$\frac{\hat{1}}{p}$才能唯一地被确定。

为了解决我们的问题，必须将方程(1')变换到坐标表象中去。因此，以$\exp(\mathrm{i}px/\hbar)/\sqrt{(2\pi\hbar)}$乘(1')的两边，再对所有的$p$值积分：

$$\varphi(x)=\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f(p)}{p}\exp\left(\frac{\mathrm{i}px}{\hbar}\right)\mathrm{d}p, \tag{3}$$

为了方便，我们把方程(3)中的积分看作在复变数p的平面上沿实轴的积分。由于条件(2)成立，被积函数在$p=0$处无极点，所以可将积分路径移至$p=0$点下面的区域内（在$\mathrm{Im}\ p<0$的区域）而不改变结果：

$$\varphi(x)=\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)}}\int_{\circ}\frac{f(p)}{p}\exp(\mathrm{i}px/\hbar)\mathrm{d}p \tag{3'}$$

现在将这方程中的$f(p)$用$\psi(x)$来表示：

$$f(p)=\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x')\exp(-\mathrm{i}px'/\hbar)\mathrm{d}x'. \tag{4}$$

改变积分次序，我们有

$$\varphi(x)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x')\mathrm{d}x'\times$$

$$\int_{(v)} \frac{\exp[ip(x-x')/\hbar]}{p}\,dp. \tag{5}$$

首先计算(5)中对动量的积分

$$\int_{(v)} \frac{\exp[ip(x-x')/\hbar]}{p}\,dp. \tag{6}$$

这个积分的值依赖于$(x-x')$的符号。当$x>x'$时，在上半平面加一半径无限大的半圆，使构成闭合迴路。沿上半平面半圆的积分为零，所以积分(6)等于$2\pi i$乘迴路内极点$p=0$处的留数。这个留数等于1，故得

$$\int_{(v)} \frac{\exp[ip(x-x')/\hbar]}{p}\,dp=2\pi i \quad (x>x') \tag{7}$$

当$x<x'$时，我们在下半平面加一半径无限大的半圆，使构成闭合迴路。由于迴路内无极点，显然

$$\int_{(v)} \frac{\exp[ip(x-x')/\hbar]}{p}\,dp=0 \quad (x<x') \tag{8}$$

将(7)式和(8)式代入方程(5)中，求得

$$\varphi(x)=\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x')dx' \tag{9}$$

这就是我们的问题的解。

类似地，$\frac{\hat{1}}{p}$是形式为

$$\frac{\hat{1}}{p}=\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{x}\cdots dx' \tag{10}$$

的积分算符。这个结果是很自然的，因为我们求得的是动量算符$\hat{p}=(\hbar/i)(\partial/\partial x)$的逆算符。事实上，将算符$\hat{p}$作用在方程(1)上有

$$\hat{p}\varphi(x)=\hat{p}\cdot\frac{\hat{1}}{p}\psi(x)=\psi(x). \tag{11}$$

利用方程(9)来检验这个结果，我们同样求得

$$\hat{p}\varphi(x)=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{x}\psi(x')\mathrm{d}x'\right]=\psi(x). \qquad (11')$$

关于(9)式和(10)式，必须注意到下述情况。我们还可以用另一种方法来改变方程(3)的积分路径，例如，将它移到上半平面。在这种情况下，经过相应的计算，我们得到的就不是(9)式，而是方程

$$\varphi(x)=-\frac{i}{\hbar}\int_{x}^{\infty}\psi(x')\mathrm{d}x'. \qquad (9')$$

$\varphi(x)$的表示式(9′)和(9)之差为：

$$\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x')\mathrm{d}x', \qquad (12)$$

对于满足条件(2)的函数，上式等于零。这样，关于算符$\hat{\frac{1}{p}}$的运算的定义(9)就与(9′)相同，并且一般说来是唯一的。

当条件(2)不被满足时，定义(9)和(9′)不同，这表示算符$\hat{\frac{1}{p}}$的运算不是唯一的。

用相似的计算方法，不难求得在p表象中算符$\hat{\frac{1}{x}}$的下列表示式：

$$\hat{\frac{1}{x}}=-\frac{i}{\hbar}\int_{-}^{p}\cdots\mathrm{d}p' \qquad (13)$$

因此，这算符也是一个积分算符；算符方程(13)与下列关系式意义相同：

$$\hat{\frac{1}{x}}f(p)=-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{p}f(p')\mathrm{d}p'.$$

44. 选势阱的左端为原点；于是，在阱内粒子的定态波函数是

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

式中a是阱的宽度；在阱外$\psi=0$。

所要求的坐标x的矩阵元等于

$$x_{mn}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^*(x)x\psi_n(x)\,dx=\int_0^a x\psi_m(x)\psi_n(x)\,dx. \tag{2}$$

将（1）式代入（2）式，经过简单计算，得：

$$x_{mn}=\frac{2}{a}\cdot\frac{1}{2}\int_0^a x\left[\cos\frac{\pi(m-n)x}{a}-\cos\frac{\pi(m+n)x}{a}\right]dx$$

$$=\frac{a}{\pi^2}\left\{\frac{1-\cos[\pi(m+n)]}{(m+n)^2}-\frac{1-\cos[\pi(m-n)]}{(m-n)^2}\right\}$$

$$=\frac{4a}{\pi}\frac{[(-1)^{m-n}-1]mn}{(m^2-n^2)^2}. \tag{3}$$

从方程（3）可清楚地看出，在坐标的非对角($m\neq n$)矩阵元中，只是差$(m-n)$为奇数的那些矩阵元，亦即与有宇称改变的跃迁对应的那些矩阵元才不等于零［我们记住，所有的波函数（1）都具有完全确定的宇称（相对势阱的中心），其中与$n=1,3,5\cdots$对应的为偶宇称，与$n=2,4,6\cdots$对应的为奇宇称］。而对角矩阵元$(m=n)$不等于零。可以求出它们的数值，例如，在(3)式中进行极限过渡$(m-n)\to 0$并利用 $1-\cos x\approx\frac{1}{2}x^2$。结果为

$$x_{mm}=\frac{1}{2}a$$

（这结果是立刻可以看出来的，因为x_{mm}是x在第m个态中的平均值，而这个平均值等于$a/2$。）

上面得到的选择定则可由下面的简单考虑看出。坐标x的矩阵是量$(x-a/2)$和$a/2$两矩阵之和，只有当乘积$\psi_m\psi_n$是奇宇称，亦即$(m-n)$为奇数时，第一个矩阵的元素才不为零，因为$(x-a/2)$相对于阱的中心来说是一个奇函数。而第二个矩阵的元

素显然等于$\frac{1}{2}a\delta_{mn}$，也就是说，它是一对角矩阵。由此立即可得上面求出的选择定则。

为了求动量矩阵$(p_x)_{mn}=p_{mn}$，我们利用熟知的关系式

$$p_{mn}=\mu(\dot{x})_{mn}=\mu\frac{i}{\hbar}(E_m-E_n)x_{mn}. \tag{4}$$

式中μ是粒子的质量，$E_n=(\pi^2\hbar^2/2\mu a^2)n^2$是阱中粒子的能级。

将方程(3)中的x_{mn}代入(4)式，得

$$p_{mn}=\frac{2i\hbar}{a}\cdot\frac{[(-1)^{m-n}-1]mn}{(m^2-n^2)}. \tag{5}$$

容易证明，这个矩阵的对角元素等于零。这是自然的，因为这些矩阵元就是动量在相应定态中的平均值，由于粒子作束缚运动，所以它们等于零。显然，非对角矩阵元p_{mn}的选择定则与x_{mn}的相同。

最后，我们指出，由方程(5)可得$p^*_{mn}=p_{nm}$，即动量算符是厄密的。对x_{mn}也是如此。

45. 在公式

$$L^2=\frac{\int\psi^*\hat{L}^2\psi d\tau}{\int\psi^*\psi d\tau}$$

中，分母当然是正的，所以我们必须证明分子也是正的。

因为$\hat{L}$是厄密的，我们得

$$\int\psi^*\hat{L}\hat{L}\psi d\tau=\int(\hat{L}\psi)(\hat{L}^*\psi^*)d\tau=\int|\hat{L}\psi|^2d\tau>0,$$

这正是所要证明的。

46. (1)不是线性的。事实上，用$\hat{K}$表示复共轭算符，则有

$$\hat{K}(c_1\psi_1+c_2\psi_2)=c_1^*\hat{K}\psi_1+c_2^*\hat{K}\psi_2$$
$$\neq c\hat{K}\psi_1+c_2\hat{K}\psi_2.$$

(2) 不是厄密的。

任何厄密算符都满足条件

$$\int\psi^*\hat{L}\varphi d\tau=\int\varphi\hat{L}^*\psi^*d\tau. \tag{1}$$

在现在的情形下，我们有

$$\int\psi^*\hat{K}\varphi d\tau=\int\psi^*\varphi^*d\tau,$$

$$\int\varphi\hat{K}^*\psi^*d\tau=\int\varphi\psi d\tau,$$

所以不满足条件(1)。

（3） 算符$\hat{K}$是自己的复共轭，即它是实的。事实上

$$\hat{K}\psi=\psi^*$$

所以

$$\hat{K}^*\psi^*=\psi.$$

用φ表示ψ^*，则有：

$$\hat{K}^*\varphi=\varphi^*=\hat{K}\varphi,$$

或

$$\hat{K}^*=\hat{K}.$$

（复共轭算符将i变为$-i$，而它的复共轭则将$-i$变为i，所以这两个算符是相同的）。

47。 利用对于$f(x)$的泰勒展开式，可以证明

$$\hat{T}=e^{ia\hat{p}/\hbar}$$

48。 把所要求的展开式写成幂级数

$$\sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n\hat{L}_n,$$

其中$\hat{L}_n$是待定的算符。

于是，我们有

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

两边乘以 $(\hat{A}-\lambda\hat{B})$（例如，左乘），则得

$$1=\sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n(\hat{A}-\lambda\hat{B})\hat{L}_n=\hat{A}\hat{L}_0+\sum_{n=1}^{\infty}\lambda^n(\hat{A}\hat{L}_n-\hat{B}\hat{L}_{n-1}).$$

比较两边λ的同次幂项的系数，得到：

$$\hat{A}\hat{L}_0=1,\quad \hat{A}\hat{L}_n-\hat{B}\hat{L}_{n-1}=0,$$

从而

$$\hat{L}_0=\hat{A}^{-1},\quad \hat{L}_n=\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{L}_{n-1}.$$

这样一来，我们有

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

在$\hat{A}$和$\hat{B}$是数的情形下，上式就变成通常的展开式

$$\frac{1}{A-\lambda B}=\frac{1}{A}+\lambda\frac{B}{A^2}+\lambda^2\frac{B^2}{A^3}+\cdots.$$

49. 一般说来，仅根据算符$\hat{A}$和$\hat{B}$的对易性或非对易性，不可能对这个问题给出确定的回答.

事实上，一方面，要使与这些算符对应的量同时具有完全确定的值，算符的对易性严格地说来不是必需的. 例如，对于球对称场中的运动来说，凡总角动量的平方等于零的各种状态，角动量的三个分量都同时具有完全确定的值（等于零），尽管这三个算符中任意两个都是彼此不对易的.

算符$\hat{A}$和$\hat{B}$的非对易性（第一种情形）并不排斥它们的某些本征值可以同时实现.

另一方面，单从$\hat{A}$和$\hat{B}$的对易性这个事实（第二种情形），一般地说，不可能断定：在态ψ_A中，量B具有完全确定的值.

问题在于，算符$\hat{A}$和$\hat{B}$的对易性，仅对于$\hat{A}$和$\hat{B}$同时具有完全确定值的态（我们用ψ_{AB}表示这种态的波函数）的完备组的存在是充分的，但不能保证任何给定的波函数ψ_A属于函数组ψ_{AB}. 这与简并现象有关. 在简并的情形下，A的一个值对应若干个B的值，所以，一般说来，波函数ψ_A是函数ψ_{AB}的线性叠加：

$$\psi_A=\sum_{B'}c_{B'}\psi_{AB'},$$

仅对系数的某种特定的选择($c_{B'}=\delta_{B'B}$)，上式才化为ψ_{AB}。

我们来讨论两种简单情形：

（1） 设有一个在球对称场中运动的粒子，处于总角动量平方M^2具有完全确定值的态，其角动量的z分量 M_z 或者具有完全确定的值，或者没有。

的确，M^2 的所有非零值，对 M_z 的不同值来说都是简并的（这是由于算符$\hat{M}_x$和$\hat{M}_y$与 $\hat{M}^2$ 对易，而与$\hat{M}_z$不对易）；因此，ψ_{M^2}是下述形式的叠加：

$$\psi_{M^2}=\sum_{M_z}c_{M_z}\psi_{M^2M_z}.$$

在特殊情况下，尽管算符$\hat{M}_z$与 $\hat{M}^2$对易，我们仍然能找到这样的态ψ_{M^2}，在这些态中M_z肯定地没有完全确定的值；具有完全确定的M_z值或M_y值的态，就属于这样的态($M^2=0$的态除外，这时还有$M_x=M_y=M_z=0$)。

（2） 除基态能级外，氢原子的每一个能级E 相应于角动量平方M^2的若干个值，所以，一般地说，具有完全确定能量的态，不能用完全确定的 M^2 值来表征，而是具有不同 M^2 值的态的叠加，并且只有当对叠加系数作某种特定的选择时，它才能化为函数ψ_{E,M^2}。因此，从能量E是完全确定的这一事实，并不能推断 M^2 也是完全确定的，尽管$\hat{M}^2$和能量算符$\hat{H}$是对易的。

因此，一般地说，$\hat{A}$和 $\hat{B}$ 的对易性并不能回答我们原来的问题。为了解决我们的问题，应当把算符$\hat{B}$作用在函数ψ_A上。若方程

$$\hat{B}\psi_A=\lambda\psi_A$$

被满足（λ是一个数），则ψ_A是$\hat{B}$的本征函数，且在态ψ_A中，量 B 有完全确定的值(λ)；在相反情况下，在态 ψ_A 中，B 没有完全确定的值。

只有在没有简并的特殊情况下，(例如，对于至少在一边有界的一维运动)，从$\hat{A}$和$\hat{B}$的对易性自动得出，$\hat{A}$的任一本征函数同时也是$\hat{B}$的一个本征函数，反之亦然．所以，对任一态，量A和B或者同时具有完全确定的值，或者都没有完全确定的值．

50．我们用一个字母x标记体系所有的坐标（或者，更一般地说，所选取的表象的所有独立变数），用$H(x)$表示体系的哈密顿量，而其波函数则用$\psi(x)$表示．设所考虑的变换将一组坐标x变为另一组x'，

$$x \to x'. \tag{1}$$

设$\hat{O}$为变换(1)的算符．哈密顿量对这变换的不变性意味着

$$\hat{H}(x') = \hat{H}(x). \tag{2}$$

让$\hat{O}$作用在$\hat{H}\psi$上．

从$\hat{O}$的定义及方程(2)得到

$$\hat{O}\hat{H}(x)\psi(x) = \hat{H}(x')\psi(x') = \hat{H}(x)\psi(x') = \hat{H}(x)\hat{O}\psi(x),$$

这等价于算符方程：

$$\hat{O}\hat{H} = \hat{H}\hat{O}. \tag{3}$$

引进算符$\hat{O}^{-1}$，它是$\hat{O}$的逆算符：

$$\hat{O}\hat{O}^{-1} = \hat{1}, \tag{4}$$

式中$\hat{1}$是单位算符，即恒等变换算符．用$\hat{O}^{-1}$右乘方程(3)，得

$$\hat{O}\hat{H}\hat{O}^{-1} = \hat{H}. \tag{3'}$$

这个关系式和对易关系（3）是等同的，它表示在$\hat{O}$变换下$\hat{H}$的不变性．

51．这里的问题是求出在给定的外场中，相互作用的点粒子体系的一组运动积分（不包括宇称）．在经典力学中，这一问题的解决办法是找出这样的坐标（或时间）变换，在这种变换下所考虑体系的拉氏函数不变．

在量子力学中，这一问题的解决在形式上甚至还要简单些：运动积分是这样一些力学量，其算符与体系的哈密顿量是对易的（而且不显含时间）．这些算符彼此之间的对易性，一般说来，并

不依赖于外场的形式。算符对$\hat{M}_x$和$\hat{M}_y$，$\hat{M}_x$和$\hat{p}_y$，$\hat{p}_x$和$\hat{I}$（$\hat{I}$是反演算符）等等是不对易的，而$\hat{M}_x$和$\hat{I}$，$\hat{M}_x$和$\hat{p}_x$等等则总是对易的。

我们只限于讨论外场为势场（磁场等等除外）的情形，并用角标$i=1,2,\cdots N$标记粒子，于是系统的哈密顿量可写为($i,k=1,2,\cdots,N$)

$$\hat{H}=\sum_{i=3}^{N}\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu_i}\nabla_i^2\right)+U_{互}(\cdots,|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_k|,\cdots)$$

$$+U_{外}(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N)=\hat{H}_0+U_{外},$$

其中$U_{互}$是体系中粒子间的相互作用势能。

所有我们感兴趣的算符

$$\hat{\boldsymbol{P}}(\hat{P}_x,\hat{P}_y,\hat{P}_z),\ \hat{\boldsymbol{M}}(\hat{M}_x,\hat{M}_y,\hat{M}_z),M^2,\hat{I},$$

显然都和$\hat{H}_0$（它与一束缚点粒子系对应；算符$\hat{M}_x$，$\hat{M}_y$…彼此之间的非对易性，显然导致能量本征值和总角动量本征值对于M_x…这些量的简并）对易，所以，我们只需讨论这些算符与外场的势能算符

$$U_{外}=\sum_{i=1}^{N}U_{i外}(\boldsymbol{r}_i)$$

的对易性。

把每一个运动积分A都写作$A=$常数。

（1） $U_{外}=0$，$\dfrac{\partial\hat{H}}{\partial t}=0$.

因此，整个体系的运动积分是：能量E，角动量的三个分量M_x，M_y，M_z，角动量平方M^2，动量的三个分量P_x，P_y，P_z(即$\boldsymbol{P}$)以及宇称I. 这时，能级是简并的，体系的每一个态，都由为数不多的（对易的）力学量的完全集所表征，例如

$$P_x,P_y,P_z$$

或

$$E, M^2, M_z, \text{ 等等。}$$

当外场存在时，也有类似的情况。

（2） 取圆柱体的轴为z轴。

$$U_{外}=\sum_{i=1}^{N} U_i(\rho_i),$$

所以算符

$$\hat{P}_z=\frac{\hbar}{i}\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial z_i},\ \hat{M}_z=\frac{\hbar}{i}\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial \varphi_i},\ \hat{I}$$

都与$U_{外}$对易（因而也与$\hat{H}$对易）

因为$\frac{\partial \hat{H}}{\partial t}=0$，最后得：

$$E=\text{常数},\ P_z=\text{常数},\ M_z=\text{常数},\ I=\text{常数}。$$

（3） 取均匀平面为xy平面。

$$U_{外}=\sum_{i=1}^{N} U_i(|z_i|),\ \frac{\partial H}{\partial t}=0。$$

算符

$$\hat{P}_x=\frac{\hbar}{i}\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial x_i},\ \hat{P}_y=\frac{\hbar}{i}\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial y_i},$$

$$\hat{M}_z=\frac{\hbar}{i}\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial \varphi_i}=\frac{\hbar}{i}\sum_{i=1}^{N}\left(x_i\frac{\partial}{\partial y_i}-y_i\frac{\partial}{\partial x_i}\right),$$

以及$\hat{I}$，都与$U_{外}$（即也与$\hat{H}$）对易。因此，$E=$常数，$M_z=$常数，$P_x=$常数，$P_y=$常数，$I=$常数。

（4） 取球心为坐标原点。

$$U_{外}=\sum_{i=1}^{N}U_i(r_i),\quad \frac{\partial \hat{H}}{\partial t}=0.$$

用球坐标表出的算符 $\hat{M}_x$，$\hat{M}_y$，$\hat{M}_z$，$\hat{M}^2$ 只作用在变数 θ_i，φ_i 上，因而它们与 $U_{外}$ 和 $\hat{H}$ 对易。

因此，$E=$常数，$M_x=$常数，$M_y=$常数，$M_z=$常数，$M^2=$常数，$I=$常数。

（5） 令半平面是在 y 轴一侧的 xy 平面。

$$U_{外}=\sum_{i=1}^{N}U_i(x_i,|z_i|),\hat{P}_y=\frac{\hbar}{i}\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial y_i}.$$

于是，我们有

$$E=\text{常数},\quad P_y=\text{常数}.$$

（6） 设两个点在 z 轴上。

$$U_{外}=\sum_{i=1}^{N}U_i(\rho_i,z_i),\quad \hat{M}_z=\frac{\hbar}{i}\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial\varphi_i}.$$

于是，我们有 $E=$常数，$M_z=$常数。

在特殊情形下，两个点带有相同的电荷（符号和大小均相同），$U_i=U_i(\rho_i,|z_i|)$，因而，宇称 I 也是守恒的。

（7） 设场的方向沿 z 轴。

用 $\mathscr{E}(t)$ 表示场的强度，e_i 表示体系中粒子的电荷，则有：

$$U_{外}=-\mathscr{E}(t)\sum_{i=1}^{N}e_iz_i$$

（若用 g 替换 $\mathscr{E}$，用质量 m_i 替换电荷 e_i，则同一式子对引力场也成立）

$$U_{外}与\hat{M}_z=\frac{\hbar}{i}\sum_{i=1}^{N}\left(x_i\frac{\partial}{\partial y_i}-y_i\frac{\partial}{\partial x_i}\right),\quad \hat{P}_x=\frac{\hbar}{i}\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial x_i},$$

$P_y=\frac{\hbar}{i}\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial y_i}$ 对易。因此，

$M_z=$常数，$P_x=$常数，$P_y=$常数。

（8） 取z轴沿导线的轴。

$$U_{外}(t)=f(t)\sum_{i=1}^{N}U_i(\rho_i),\ M_z=\frac{\hbar}{i}\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial\varphi_i},$$

$$P_z=\frac{\hbar}{i}\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial z_i}.$$

因此得

$$M_z=\text{常数},\ P_z=\text{常数},\ I=\text{常数}.$$

（9） 取坐标原点在椭球中心，由于椭球有三个互相垂直的对称平面，所以

$$U_{外}=\sum_{i=1}^{N}U_i(|x_i|,|y_i|,|z_i|).$$

于是哈密顿量H与反射算符I对易（且不显含时间）。因此，

$$E=\text{常数},\ I=\text{常数}.$$

（10） 取z轴沿螺线的轴，设螺距为a，且用φ表示绕轴的转角。

当ρ_i固定时，对

$$\varphi_i\to\varphi_i+\delta\varphi\quad(i=1,2,\cdots,N),\ z_i\to z_i+\frac{\delta\varphi}{2\pi}a$$

的变换而言，函数$U_{外}=\sum_{i=1}^{N}U_i(\rho_i,\varphi_i,z_i)$是不变的（因为当$\delta\varphi=2\pi$时，也必有$\delta z=a$），

$$\delta U_{外}=\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial U_{外}}{\partial\varphi_i}\delta\varphi+\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial U_{外}}{\partial z_i}\delta z$$

$$=\delta\varphi\left(\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial\varphi_i}+\frac{a}{2\pi}\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial z_i}\right)U_{外}=0$$

换句话说，算符$\hat{U}_{外}$（因而哈密顿算符$\hat{H}$）与算符

$$\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial\varphi_i}+\frac{a}{2\pi}\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial z_i}=\frac{1}{\hbar}\left(\hat{M}_z+\frac{a}{2\pi}\hat{P}_z\right)$$

是对易的。

于是，我们有

$$M_z+\frac{a}{2\pi}P_z=常数。$$

以及$E=$常数$\left(因为\dfrac{\partial\hat{H}}{\partial t}=0\right)$。

(11) 取棱柱的侧边沿z轴方向。

$$U_{外}=\sum_{i=1}^{N}U_i(x_i,y_i),\ \frac{\partial\hat{H}}{\partial t}=0,\ \hat{P}_z=\frac{\hbar}{i}\sum_{i=1}^{N}\frac{\partial}{\partial z_i},$$

所以

$$E=常数,\ P_z=常数。$$

在特殊情形下，即当棱柱截面是一个正$2n$多边形（n是整数）时，棱柱有两个互相垂直的对称轴，所以$U_{外}=\sum U_i(|x_i|,|y_i|)$（$z$轴穿过多边形的中心），又因为$\hat{I}$与$\hat{H}$对易，故宇称$I$是守恒的。

(12) 取z轴沿圆锥体的轴。

若圆锥体是单叶的，则

$$U_{外}=\sum_{i=1}^{N}U_i(\rho_i,z_i),$$

所以，$E=$常数，$M_z=$常数。

若圆锥体是双叶的，把坐标原点取在它的顶点上，则有：

$$U_{外}=\sum_{i=1}^{N}U_i(\rho_i,|z_i|),$$

因此，也有$I=$常数。

(13) 设z轴沿环的轴，且xy平面落在它的赤道平面上。

在柱坐标下，我们有

$$U_{外}=\sum_{i=1}^{N}U_i(\rho_i,|z_i|),$$

于是

$E=$常数，$M_z=$常数，$I=$常数。

52. 考虑两个惯性参考系：$K(x,t)$和$K'(x',t')$(为简单起见，我们只考虑一维运动；显然可以把所得结果推广到三维情形)，它们以相对速度u运动（见图32）

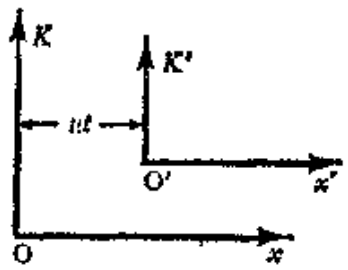


图 32

设在K'系中，粒子在力场中的势能是$V'(x',t')$。由伽利略变换

$$\left.\begin{aligned}x&=x'+ut\\t&=t'\end{aligned}\right\},\tag{1}$$

求得在K系中的势能为

$$V'(x-ut,t)=V(x,t).\tag{2}$$

对于在K'系中质量为μ的粒子，薛定谔方程可写为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2\psi'}{\partial x'^2}+V'\psi'=i\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t'}.\tag{3}$$

我们要证明，在K系中薛定谔方程

$$-\frac{\hbar}{2\mu}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+V\psi=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \tag{4}$$

也成立，其中V由等式(2)确定；根据函数ψ的物理意义，ψ与ψ'完全相似；量$|\psi(x,t)|^2=w(x,t)$是在时刻t在x点找到粒子的几率密度；这可从原来规定的ψ与ψ'之间的联系得出。

的确，在给定时刻和给定地点找到粒子的事实，与参考系的选择无关。因而可令两个相应的几率相等：

$$w'(x',t')=w(x,t), \tag{5}$$

或者根据方程(1)，有

$$w'(x-ut,t)=w(x,t). \tag{5'}$$

由此可见，这两个波函数彼此只能相差一个绝对值为1的相因子：

$$\psi(x,t)=\exp(\mathrm{i}S)\psi'(x',t')=\exp[\mathrm{i}S(x,t)]\psi'(x-ut,t) \tag{6}$$

其次，在K'系中粒子的速度为v'，则在K系中相应的速度是$v=v'+u$，所以对于动量$p=\mu v$和$p'=\mu v'$，我们有

$$p=p'+\mu u. \tag{7}$$

从p和p'之间的这一联系，得出与(5)类似的关系：

$$w'(p',t')=w(p,t), \tag{8}$$

或者根据方程（7）和(1)，有：

$$w'(p-\mu u,t)=w(p,t). \tag{8'}$$

现在来推导由（6）式确定的函数$\psi(x,t)$所满足的方程。

在方程（3）中作代换

$$\psi'=\exp[-\mathrm{i}S(x,t)]\psi(x,t), \tag{9}$$

把（2）式代入，并利用（1）式引入独立变量(x,t)，则得

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\hbar}{\mu}\frac{\partial S}{\partial x}-u\right)\frac{\partial\psi}{\partial x}+\left[V(x,t)+\mathrm{i}\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}+\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2-\hbar u\frac{\partial S}{\partial x}-\hbar\frac{\partial S}{\partial t}\right]\psi=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}. \tag{10}$$

到目前为止，函数$S(x,t)$（或者说$\exp[iS(x,t)]$）起着任意相因子的作用。现在来选择这个函数，以使方程(10)变为薛定谔方程(4)。为此，比较（10）和（4）即可看出，函数S应当满足下列方程：

$$\frac{\hbar}{\mu}\frac{\partial S}{\partial x}-u=0. \tag{11}$$

$$i\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}+\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2-\hbar u\frac{\partial S}{\partial x}-\hbar\frac{\partial S}{\partial t}=0. \tag{11'}$$

这些方程很容易积分。由（11）式得出

$$S=\frac{\mu u}{\hbar}x+\varphi(t),$$

式中$\varphi(t)$是t的任意函数。

将这个表示式代入（11′）式中，就能确定$\varphi(t)$，最后得

$$S=\frac{\mu u}{\hbar}x-\frac{\mu u^2}{2\hbar}t, \tag{12}$$

这里忽略了S中的任意可加常数，因为它只在ψ中引入一个无关紧要的相因子[见方程(6)]。

由(6)式和(12)式，最后得出在K系中的波函数为

$$\psi(x,\ t)=\exp\left[\mathrm{i}\left(\mu ux-\frac{1}{2}\mu u^2t\right)/\hbar\right]\psi'(x-ut,\ t). \tag{13}$$

如所预期的，这个波函数是K'系中的波函数ψ'与$\exp(i\mu ux/\hbar-i\mu u^2t/2\hbar)$的乘积，而后者描述在$K'$系中固定的粒子相对于$K$系的自由运动。

我们注意到，所求得的波函数自动地满足条件(8′)。的确，在t时刻，动量p的几率密度等于

$$w(p,\ t)=|c(p,\ t)|^2,$$

式中

$$c(p,\ t)=\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x,\ t)\exp[-\mathrm{i}px/\hbar]\mathrm{d}x. \tag{14}$$

将(13)式中的$\psi(x,\ t)$代入上式，不难得到

$$c(p,\ t)=\exp\left[\mathrm{i}\left(\frac{1}{2}\mu u^2-pu\right)t/\hbar\right]$$

$$\times\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi'(x',\ t)\exp[-\mathrm{i}(p-\mu u)x'/\hbar]\mathrm{d}x'.$$

上式右边的积分显然是$c'(p-\mu u,\ t)$[见方程(14)]。于是我们有

$$c(p,\ t)=\exp\left[\mathrm{i}\left(\frac{1}{2}\mu u^2-pu\right)t/\hbar\right]c'(p-\mu u,\ t).$$

这方程两边取绝对值的平方，即得要求的关系式(8′)。

这样一来，我们就证明了在伽利略变换下非相对论性薛定谔方程的不变性。

53. 根据薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi,$$

任何态都按下面的规律随时间变化：

$$\psi(\xi,\ t)=\exp(-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar)\psi(\xi,\ 0),\qquad(1)$$

这里，ξ表示体系的波函数所依赖的一组独立变量。

在海森伯表象中，算符$\hat{A}$的形式为

$$\hat{A}(t)=\exp(\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar)\hat{A}\exp(-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar),\qquad(2)$$

式中$\hat{A}$是物理量A在薛定谔表象中的算符。按题设条件，有

$$\hat{A}\psi(\xi,\ 0)=A\psi(\xi,\ 0).\qquad(3)$$

将$\psi(\xi,\ 0)=\exp(\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar)\psi(\xi,\ t)$代入上式，然后从左边以算符$\exp(-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar)$作用之，则得

$$\exp(-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar)\hat{A}\exp(\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar)\psi(\xi,\ t)=A\psi(\xi,\ t).\qquad(4)$$

把这方程左边的算符与(2)式比较，则得

$$\hat{A}(-t)\psi(\xi,\ t)=A\psi(\xi,\ t).$$

我们这里所作的证明，对于哈密顿量$\hat{H}$不显含时间的情况是成立的。为了推广到哈密顿量显含时间的情况，必须在证明中用

算符$U(t, t_0)$代替$\exp(-i\hat{H}t/\hbar)$，这个算符$\hat{U}(t, t_0)$使t_0时刻的波函数变为t时刻的波函数。

54. 体系的状态由满足波动方程

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}(t)\psi \qquad (1)$$

的波函数$\psi(t)$来描写。此外，我们还有

$$\hat{H}(t)\psi_n(t)=E_n(t)\psi_n(t)。 \qquad (2)$$

由于是有界运动，所以"能级"E_n的谱是分立的(这里，"能级"的概念只有纯粹形式上的意义，因为哈密顿量显含时间，能量是不守恒的)，又由于我们只讨论一维运动的情形，所以没有简并。后一事实又意味着波函数$\psi_n(t)$是实的(无关紧要的相因子除外)。

按照我们所考虑的问题，我们将波函数$\psi(t)$按哈密顿量的瞬时本征函数$\psi_n(t)$展开。假设已知$t=0$时的波函数，则$t\geqslant 0$的波函数的展开式可写为

$$\psi=\sum_n c_n(t)\psi_n(t)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E(t')dt'\right]。 \qquad (3)$$

这一展开式的系数$c_n(t)$也就是在所要求的表象中的波函数。写出在这个表象中的波动方程，就是要找出联结系数c_n及其时间导数$\dot{c}_n$的方程组。

将(3)式代入方程(1)，我们得

$$i\hbar\sum_n\left(\dot{c}_n\psi_n+c_n\dot{\psi}_n-\frac{i}{\hbar}c_n\psi_nE_n\right)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_n(t')dt'\right]$$

$$=\hat{H}\sum_n c_n\psi_n\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_n(t')dt'\right]。$$

根据方程(7)，这个方程的右边同方程左边最后一项抵消。两边以$\psi_k^*=\psi_k$左乘之，并对体系的坐标q积分，利用ψ_n的正交归一性，我们得

$$c_k=-\sum_n{}' c_n\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t(E_k-E_n)\mathrm{d}t'\right]\int\psi_k\dot{\psi}_n\mathrm{d}q \qquad (4)$$

我们首先来求这个方程中最后的一个积分。首先，当$n=k$时，因为$\int\psi_k^2\mathrm{d}q=1$，可以有$\int\psi_k\dot{\psi}_k\mathrm{d}q=\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int\psi_k^2\mathrm{d}q=0$。其次，将方程(2)对$t$微商后，再以$\psi_k^*=\psi_k$左乘之，并对$q$积分，于是，当$n\neq k$时，我们有

$$\int\psi_k\frac{\partial\hat{H}}{\partial t}\psi_n\mathrm{d}q+\int\psi_k\hat{H}\dot{\psi}_n\mathrm{d}q=E_n\int\psi_k\dot{\psi}_n\mathrm{d}q. \qquad (5)$$

因为哈密顿量是厄密的和实的，利用方程(2)，得

$$\int\psi_k\hat{H}\dot{\psi}_n\mathrm{d}q=\int(\hat{H}\psi_k)\dot{\psi}_n\mathrm{d}q=E_k\int\psi_k\dot{\psi}_n\mathrm{d}q.$$

将这结果代入方程(5)，我们得

$$\int\psi_k\dot{\psi}_n\mathrm{d}q=-\frac{\int\psi_k(\partial\hat{H}/\partial t)\psi_n\mathrm{d}q}{E_k-E_n}\quad(n\neq k). \qquad (6)$$

最后，将(6)式代入方程(4)(我们记住，$n=k$的相同项等于零)，并引进符号

$$E_k-E_n=\hbar\omega_{kn},\quad\int\psi_k(\partial\hat{H}/\partial t)\psi_n\mathrm{d}q=(\partial H/\partial t)_{kn} \qquad (7)$$

我们得到所要求的方程组

$$\dot{c}_k=\sum_n{}'\frac{c_n}{\hbar\omega_{kn}}\left(\frac{\partial H}{\partial t}\right)_{kn}\exp\left(\mathrm{i}\int_0^t\omega_{kn}\mathrm{d}t'\right), \qquad (8)$$

这里，求和号上的一撇，表示不对$n=k$的项求和。按照(7)式，量$(\partial H/\partial t)_{kn}$是哈密顿量对时间的导数的相应于$k\to n$跃迁的矩阵元。

从我们的推导中清楚地看出，方程(8)与原始波动方程(1)完全等价。

我们将所得到的方程同通常的含时微扰论的原始方程加以比较。这时，我们有$\hat{H}(t)=\hat{H}_0+\hat{H}_1(t)$，其中$\hat{H}_0$是哈密顿量中与

时间无关的部分，其本征值为$E_n^{(0)}$，对应的本征函数为$\psi_n^{(0)}(q)$。后者可以选作我们的表象的基：

$$\psi=\sum_n a_n(t)\psi_n^{(0)}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n^{(0)}t\right) \tag{9}$$

（显然，展式(3)是这个展式的自然推广）。

将(9)式代入方程(1)，经类似的推导，我们就得到关于系数a_n的下列方程组：

$$\dot{a}_k=\frac{1}{i\hbar}\sum_n a_n(H_1)_{kn}\exp(i\omega_{kn}^{(0)}t), \tag{10}$$

式中

$$(H_1)_{kn}=\int\psi_k^{(0)}\hat{H}_1(t)\psi_n^{(0)}dq,\quad \hbar\omega_{kn}=E_k^{(0)}-E_n^{(0)}, \tag{11}$$

方程(10)和类似的方程(8)不同，其求和中还包括了$n=k$的项，而且跃迁频率$\omega_{kn}^{(0)}$与时间无关。

象方程组(8)一样，方程组(10)也与原始波动方程(1)完全等价。显然，一般说来，无论求哪一个方程组的精确解，都象求解原始方程(1)一样困难。然而，如果在方程(8)和(10)的右边有小的因子，就可以在准确到二级小量的限度内，从c_n或a_n的未受微扰的（即初始的）值，亦即由已知的量，求出未知的c_n或a_n，因而方程组(8)和(10)在求近似解时是很方便的。

显然，当矩阵元$(H_1)_{kn}$足够小时，亦即当哈密顿量的与时间有关的项$H_1(t)$很小时，方程组(10)是适用的（"普通的"微扰论）。然而，方程组(8)的适用性，要求矩阵元$(\partial H/\partial t)_{kn}$很小，亦即要求哈密顿量$\hat{H}(t)$变化足够慢。在后一情况下，所用的逐次近似法，有时也称为绝热微扰论（见下题），它是玻恩和福克在1926—1928年发展起来的。

55. 我们从上面中的严格方程(8)出发。一般地说，要是

体系的哈密顿量不依赖于时间($\partial H/\partial t=0$)，那末，根据上题中的方程组(7)和(8)，对于所有的 k，就会有 $c_k=$常数。若导数 $\partial H/\partial t$ 足够小，但不为零，则可以认为(8)式右边的量 c_n 近似地为一常数，而对于我们的问题，可令 $c_n\approx\delta_{nm}$。这样一来，当 $k\neq m$ 时，我们有

$$\dot{c}_k\approx-\frac{1}{\hbar\omega_{km}}\left(\frac{\partial H}{\partial t}\right)_{km}\exp\left(\mathrm{i}\int_0^t\omega_{km}\mathrm{d}t'\right) \qquad (1)$$

(当 $k=m$ 时，在同样的近似下，显然我们有 $\dot{c}_m=0$)。在给定的边界条件下，将方程(1)积分，则得

$$c_k(t)=\frac{1}{\hbar}\int_0^t\frac{1}{\omega_{km}}\left(\frac{\partial H}{\partial t}\right)_{km}\exp\left(\mathrm{i}\int_0^{t'}\omega_{km}\mathrm{d}t''\right)\mathrm{d}t'$$

$$(k\neq m). \qquad (2)$$

从推导中可看出，倘若与初态不同的那些态的几率幅很小，即

$$\text{当}k\neq m\text{时}，\ |c_k(t)|\ll 1, \qquad (3)$$

则此浸渐公式是成立的。为了估计 $|c_k(t)|$ 的数量级，只需假定方程(2)中 ω_{km} 和 $(\partial H/\partial t)_{km}$ 近似地是常数；这样，方程(2)就简化为

$$|c_k|\sim\left|\frac{(\partial H/\partial t)(1/\omega_{km})}{(E_k-E_m)}\right|(k\neq m).$$

上式右边是在 $m\to k$ 的跃迁中，在数量级为玻尔周期 $1/\omega_{km}$ 的时间内哈密顿量的改变量，与 m 态和 k 态的能量差之比。由(3)式可知，若这一比值很小，则可应用浸渐微扰论。

这样一来，对某一跃迁来说，若在数量级为玻尔周期的时间内，哈密顿量的改变比“跃迁能量”小得多，则这个跃迁的几率也很小。这一性质按照它的经典对应，有时称之为浸渐不变性。

56. 当 $t\geqslant 0$ 时，振子的哈密顿量为

$$\hat{H}(t)=\frac{1}{2\mu}\hat{p}^2+\frac{1}{2}\mu\omega^2[x-a(t)]^2, \qquad (1)$$

式 $a(t)$ 是平衡点的坐标，在我们的问题中，它等于 v_0t，而 $v_0=$常

数是平衡点的运动速度。哈密顿量(1)的“瞬时”本征函数为

$$\psi_n=\left(\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\frac{1}{\sqrt{(2^n n!)}}\exp\left\{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}[x-a(t)]^2\right\}$$

$$\times H_n\left\{\sqrt{\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)}[x-a(t)]\right\},$$

用这些函数计算出来的算符

$$\frac{\partial\hat{H}}{\partial t}=-\mu\omega^2[x-a(t)]\dot{a}=-\mu\omega^2 v_0[x-a(t)]$$

的矩阵元，显然仅对$n=0\to n=1$的跃迁才不为零（记住，初态是基态），这时它们等于

$$\left(\frac{\partial H}{\partial t}\right)_{10}=-\mu\omega^2 v_0\sqrt{\left(\frac{\hbar}{2\mu\omega}\right)}. \tag{2}$$

从方程(1)可清楚地看出，当平衡点移动时，振子的能谱一般是不变的，即所有ω_{km}都是常数。

由于这个结果，以及由于量(2)是常数，我们完全可以算出上题中的(2)式。这样，令$\omega_{10}=\omega$，求得第一激发态的几率振幅为

$$c_1(t)\approx\frac{1}{i\hbar\omega^2}\mu\omega^2 v_0\sqrt{\left(\frac{\hbar}{2\mu\omega}\right)}[\exp(i\omega t)-1]$$

$$=iv_0\sqrt{\left(\frac{\mu}{2\hbar\omega}\right)}[\exp(i\omega t)-1].$$

于是，在时刻t找到振子处于第一激发态的几率为

$$w_1(t)=|c_1(t)|^2=\frac{\mu v_0^2}{\hbar\omega}(1-\cos\omega t);$$

它是随时间振荡的。在所考虑的过程中(即$t\geqslant T$)发生激发的几率等于：

$$w_1(T)=\frac{\mu v_0^2}{\hbar\omega}(1-\cos\omega T).$$

为了保证可以用浸渐近似，要求不等式$w_1(t)\ll 1$对任何t都成立，即要求下列条件

$$v_0 \ll \sqrt{\frac{\hbar\omega}{\mu}} \qquad (3)$$

成立。换句话说，浸渐近似适用的条件是，平衡点运动的速度比振子在基态的特征速度小得多。

57．（i）波函数$\psi(x, t)$满足方程

$$i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} \quad (0 \leqslant x \leqslant a) \qquad (1)$$

及边界条件

$$\psi(0, t) = \psi(a, t) = 0,$$

其中

$$a = a(t) = a_0 f(t) \qquad [f(t)是一个给定的函数].$$

引入新的变量$y = x/f(t)$，方程（1）变为

$$i\hbar[f(t)]^2 \frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} = \frac{i\hbar y}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(f^2)\frac{\partial\psi}{\partial y}, \qquad (2)$$

$\psi(y, t)$满足对不动壁的通常的边界条件：

$$\psi(0, t) = \psi(a_0, t) = 0. \qquad (3)$$

再引入一个新的变量$\tau = \int_c^t \mathrm{d}t/[f(t)]^2$，其中$c$是一常数，并令$f(t) \equiv \varphi(\tau)$，则得

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\tau} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}[\ln\varphi(\tau)]y\frac{\partial\psi}{\partial y}. \qquad (4)$$

这样，问题就归结为在通常的边界条件(3)之下解方程(4)，而(4)中的哈密顿量显含“时间”τ：

$$\hat{H}(y, \tau) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}[\ln\varphi(\tau)]y\frac{\partial}{\partial y}. \qquad (4')$$

显然，对任意函数$f(t) \equiv \varphi(\tau)$求解方程（4）是不可能的。但是，如果$f(t)$只是缓慢地随时间变化，则可以用微扰论找到近似解。因此，这个边界条件缓慢变化的问题，可归结为哈密顿量的与时间有关的小微扰。

我们指出，由于哈密顿量(4′)的非厄密性，必须将微扰论的

公式稍加推广。这个非厄密性问题，也会由于函数$\psi(y, t)$或$\psi(y, \tau)$的积分显含时间而出现。的确，对任何时刻t，我们都有

$$\int_0^a |\psi(x, t)|^2 \mathrm{d}x = 1, \quad \mathrm{d}x = f(t)\mathrm{d}y,$$

所以

$$\int_0^{a_0} |\psi(y, t)|^2 \mathrm{d}y = \frac{1}{f(t)}. \tag{5}$$

(ii) 从(2)式或(4)式直接看出，选择什么样的$f(t)$，变量y和t（或y和τ）才可以分离。这种特殊情况当

$$f(t) = \sqrt{\left(1 + \frac{t}{t_0}\right)} \tag{6}$$

时才会发生，式中t_0是任意常数。[特别是，这样选择的$f(t)$满足初始条件$f(0)=1$或$a(0)=a_0$.]确实，将(6)式代入方程(2)，并取$t+t_0=t'$以改变时标的零点，我们得

$$i\hbar t' \frac{\partial \psi}{\partial t'} + \frac{\hbar^2 t_0}{2\mu} \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = \frac{i\hbar}{2} y \frac{\partial \psi}{\partial y}. \tag{7}$$

这个方程中的变量显然是可以分离的，我们有

$$\psi_n(y, t') = Y_n(y) T_n(t'), \tag{8}$$

式中n是本征函数的编号。

这里，我们不去解关于$Y_n(y)$和$T_n(t')$的方程。我们仅指出，Y_n是满足边界条件$Y_n(0) = Y_n(a_0) = 0$的厄密函数的叠加。而从方程(5)、(6)和(8)容易得出$T_n(t')$的绝对值对时间的依赖关系：

$$|T_n(t')| = \text{常数} \times (t')^{-\frac{1}{4}} = \text{常数} \times \left(1 + \frac{t}{t_0}\right)^{-\frac{1}{4}}. \tag{9}$$

由于$Y_n(y)$的正交性，时间依赖关系(9)对于总波函数$\psi(x, t)$的绝对值的方均根值$[|\psi|^2]^{\frac{1}{2}}$也是正确的，而$\psi(x, t)$是特征(8)的叠加。

$$\psi(x,\ t)=\sum_{n=1}^{\infty}C_nY_n\left[\frac{x}{f(t)}\right]T_n(t+t_0).$$

显然，利用方程

$$\int_0^{a(t)}|\psi(x,\ t)|^2\mathrm{d}x=常数,$$

可以看出，几率密度的相应减小，简单地是由于势阱宽度的增加。

58*. 令阱壁的坐标是 $x_1=0$ 和 $x_2=a(t)$。"瞬时"波函数和定态能级为

$$\psi(x)=\sqrt{\frac{2}{a(t)}}\sin\frac{n\pi x}{a(t)},\ E_n=\frac{\pi^2\hbar^2n^2}{2\mu[a(t)]^2}$$

$$(n=1,\ 2,\ 3,\ \cdots)。\qquad (1)$$

为了计算方便，首先讨论一个很大的，但深度 V_0 有限的势阱，然后再取极限 $V_0\to\infty$（比较§1.6题）。如果在有限深对称势阱问题的解中，只取按 $1/\sqrt{V_0}$ 展开的展式中的主要项，则容易得到

$$\psi_n(x)\approx\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left[\frac{n\pi}{a}x-\left(2\frac{x}{a}-1\right)\frac{n\pi}{a}\frac{\hbar}{\sqrt{2\mu V_0}}\right]\qquad (2)$$

[对能级来说，可直接利用(1)式]。我们来计算与 $n\to m$ 的跃迁相应的 $\partial\hat{H}/\partial t$ 的矩阵元。显然，$\partial\hat{H}/\partial t=\partial V_{右}/\partial t$，其中 $V_{右}=V(x-a)$ 是右壁的势。其次，我们有

$$\frac{\partial V_{右}}{\partial x}=V_0\delta[x-a(t)],$$

$$\frac{\partial V_{右}}{\partial t}=\frac{\partial V_{右}}{\partial a}\cdot\frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t}=-\frac{\partial V_{右}}{\partial x}\dot{a}$$

$$=-V_0\delta[x-a(t)]\dot{a},\qquad (3)$$

所以，$\partial H/\partial t$ 在诸"瞬时"函数(2)之间的矩阵元等于 $(\epsilon\to0)$：

$$\left(\frac{\partial H}{\partial t}\right)_{mn}=\int_0^{a+\epsilon}\psi_m(x)\frac{\partial\hat{H}}{\partial t}\psi_n(x)\mathrm{d}x$$

$$=-V_0\dot{a}\int_0^{a+\varepsilon}\psi_m(x)\psi_n(x)\delta(x-a)\,dx$$

$$=-V_0\dot{a}\psi_m(a)\psi_n(a)。\qquad(4)$$

在(2)式中令$x=a$，得

$$\psi_n(a)=\sqrt{\frac{2}{a}}(-1)^{n+1}\sin\frac{n\pi}{a}\sqrt{\frac{\hbar}{2\mu V_0}},$$

将它代入(4)式后，我们得

$$\left(\frac{\partial H}{\partial t}\right)_{mn}=(-1)^{n+m+1}mn\frac{\pi^2\hbar^2\dot{a}(t)}{\mu[a(t)]^3}。\qquad(5)$$

于是，在浸渐微扰论的一级近似下，我们得到瞬时函数的系数c_m（见§3.55题）。

$$\dot{c}_m=2(-1)^{n+m+1}\frac{mn}{m^2-n^2}\cdot\frac{\dot{a}}{a}\exp\left[i\frac{\pi^2\hbar}{2\mu}(m^2-n^2)\int_0^t\frac{dt'}{a^2}\right]$$

$$(m\neq n)。\qquad(6)$$

积分上式，考虑初始条件$c_m(0)=\delta_{mn}$，则得$c_m(t)$的表示式：

$$c_m(t)=2(-1)^{n+m+1}\frac{mn}{m^2-n^2}\int_0^t dt'\frac{\dot{a}}{a}\exp\left[i\frac{\pi^2\hbar}{2\mu}(m^2-n^2)\right.$$

$$\left.\int_0^{t'}\frac{dt''}{a^2}\right]\qquad(m\neq n)。\qquad(7)$$

现在，我们来讨论在什么条件下，(7)式导致由初态n到完全确定的m态的跃迁几率。首先注意到有两种可能性：(a)壁的运动在$t=T$时停止；(b)壁的运动持续到任何时刻t。

在第一种情形，仅当$t\leqslant T$时，方程(7)才成立。对于大的t值，当壁恢复静止之后，瞬时函数就变为准确的函数，因而系数c_m不再依赖于时间。因为$\psi(x,t)$在$t=T$时应该连续，我们得

$$c_m(t>T)=c_m(T),\qquad(8)$$

式中$c_m(T)$是从方程(7)得到的在$t=T$时刻的c_m值。由于发现粒子在第m态的几率$|c_m(t>T)|^2$不随时间变化，所以在这情形下，总是有完全确定的跃迁几率。这个几率为

$$w_{n\to m}=|c_m(T)|^2$$

$$= \frac{4n^2m^2}{(m^2-n^2)^2}\left|\int_0^t \mathrm{d}t' \frac{\dot{a}}{a} \exp\left[\mathrm{i}\frac{\pi^2\hbar}{2\mu}(m^2-n^2)\right.\right.$$

$$\left.\left.\int_0^{t'} \frac{\mathrm{d}t''}{a^2}\right]\right|^2. \tag{9}$$

现在，我们来考虑另一种情形，即壁的运动持续向右至 $t\to\infty$ 的情形。我们只讨论势阱的宽度趋于有限极限时的运动，即当 $t\to\infty$ 时，$a(t)\to a_\infty$。

在这种情况下，在任何时刻 t，体系的能谱都是分立的。而且能级的相对位置不变(没有所谓谱项的交叉)。跃迁几率由方程(9)决定，其中T应趋于无穷。为了解决这个几率是否存在的问题，我们假设阱壁按如下规律趋近于它的极限位置：

$$a_\infty - a(t) \sim \frac{1}{t^\nu} \quad (\nu>0). \tag{10}$$

在这情况下，当 t 足够大时，处处都可以用 a_∞ 代替 a。于是导致如下形式的积分：

$$\int^\infty \frac{\mathrm{d}t}{t^{\nu+1}} \exp(\mathrm{i}\omega_\infty t), \tag{11}$$

式中 $\omega_\infty = \pi^2\hbar(m^2-n^2)/2\mu a_\infty^2$。我们只写出积分的上限，是为了强调积分号下的式子在$t\to\infty$时也成立。在我们的情形下($\nu>0$)，这积分总是趋于某个上界，这就保证了跃迁几率的存在。

我们来讨论早先得到的公式(9)，并求出能够应用我们已用过的浸渐近似的条件。若T比$n\to m$跃迁的玻尔周期小得多，即如果

$$T \ll \frac{\mu a^2}{\hbar|m^2-n^2|},$$

则(9)式中的指数显然≈1，所以

$$w_{n\to m} \approx \frac{4n^2m^2}{(m^2-n^2)^2}\left(\int_0^T \frac{\dot{a}}{a}\,\mathrm{d}t'\right)^2 \sim \frac{4n^2m^2}{(m^2-n^2)^2}\left(\frac{\Delta a}{a}\right)^2, \tag{9'}$$

式中$\Delta a \equiv a(T)-a(0)$。

绝热近似适用的条件是$w_{n\to m}\ll 1$，在我们的情形下，这条件就是

$$\frac{|\Delta a|}{a}\ll\frac{|m^2-n^2|}{mn}.$$

更重要的是长时间作用的情形：

$$T\gg\frac{\mu a^2}{\hbar|m^2-n^2|}.$$

在这种情况下，方程(9)中积分号下的指数很快地振荡，所以这个积分约等于

$$\frac{|a|}{a}\cdot\frac{\mu a^2}{\hbar|m^2-n^2|},$$

因而

$$w_{n\to m}\sim\frac{n^2m^2}{(m^2-n^2)^4}\left(\frac{\mu a\dot{a}}{\hbar}\right)^2. \tag{9''}$$

从(9)或(9")式可以看出，跃迁几率随$|m-n|$的增加而急剧地减小。绝热近似适用的条件$w_{n\to m}\ll 1$，现在成为

$$|\dot{a}|\ll\frac{(m^2-n^2)^2}{mn}\cdot\frac{\hbar}{\mu a}.$$

当$n\sim m\sim 1$时，这个不等式意味着，壁的运动速度应比处于阱中最低能级上的粒子的特征速度[$v\sim\sqrt{(E_1/\mu)}\sim\hbar/\mu a$]小得多(与§3.56题比较)。

注意，当壁运动时，初态的量子数(n)是一个"绝热不变量"，而处于该能级(E_n)的粒子的能量可急剧地改变[见方程(1)]。

还要注意，(9)式对于初态、末态的量子数n和m的交换是对称的，这就是说，(9)式也给出$m\to n$跃迁的几率$w_{m\to n}$。这是由于量子力学的可逆性，即量子力学方程对于时间的正负号的改变是对称的。

59. 12.3Å，0.287Å和0.0186Å

60. 150eV和0.082eV

61. 一旦$\hbar/\mu\dot{a}\sim d$，粒子[illegible]显地显示出波性。

62. $E=h^2/2\mu d^2\approx 0.2\times10^{-2}$eV到$1.3\times10^{-2}$eV。

63. 粒子的运动范围或“障碍”的线度必须远大于它的德布罗意波长（比较波动光学情况）。这样，我们得到：对于电子，这个线度必须$\gg 1\times10^{-10}$cm，而对于质子，这个线度必须$\gg 3\times10^{-14}$cm。

64. $\lambda=hc/E=2.07\times10^{-14}$cm。核的特征线度的数量级是$10^{-12}$cm，因此，为了研究核的结构，我们需要波长远小于$10^{-12}$cm的粒子。

§4. 角动量；自旋

1. (i) $[\hat{J}_+, J_-]_- = 2\hbar \hat{J}_z$, $[\hat{J}_\pm, \hat{J}_z]_- = \mp\hbar \hat{J}_\pm$.

(iii) $\hat{J}_z\{\hat{J}_\pm|a,b\rangle\} = (b \pm \hbar)\{\hat{J}_\pm|a,b\rangle\}$, (1)

$\hat{J}^2\{\hat{J}_\pm|a,b\rangle\} = a\{\hat{J}_\pm|a,b\rangle\}$. (2)

(iv) $\langle j',m'|\hat{J}_z|j,m\rangle = m\hbar\delta_{jj'}\delta_{mm'}$.

由(1)式可以导出$\hat{J}_+|j,m\rangle = c|j,m+1\rangle$，因而$\langle j,m|\hat{J}_-\hat{J}_+|j,m\rangle = |c|^2$. 由于$\hat{J}_-\hat{J}_+ = \hat{J}^2 - \hat{J}_z(\hat{J}_z+1)$，我们求得$|c|^2/\hbar^2 = j(j+1) - m(m+1)$. 因此，当取$c$的相位为零时，

$$\langle j,m+1|\hat{J}_+|j,m\rangle = \hbar\{(j+1) - m(m+1)\}^{1/2}, \quad (3)$$

而其它的所有矩阵元为零. 类似地可得

$$\langle j,m-1|\hat{J}_-|j,m\rangle = \hbar\{j(j+1) - m(m-1)\}^{\frac{1}{2}}. \quad (4)$$

根据$\hat{J}_\pm$的定义，我们求得$\hat{J}_x$和$\hat{J}_y$的非零矩阵元为

$$\langle j,m+1|\hat{J}_x|j,m\rangle = \frac{1}{2}\hbar\sqrt{\{j(j+1) - m(m+1)\}}$$

$$= \langle j,m|\hat{J}_x|j,m+1\rangle = i\langle j,m+1|\hat{J}_y|j,m\rangle$$

$$= -i\langle j,m|\hat{J}_y|j,m+1\rangle,$$

改写成矩阵形式：

$$\hat{J}_x/\hbar \equiv \begin{array}{c} \\ m \\ j \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ -j \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccccccc} m' & j & j-1 & j-2 & \cdots & -j+1 & -j \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{[2j\cdot 1]} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \sqrt{[2j\cdot 1]} & 0 & \sqrt{[(2j-1)\cdot 2]} & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{[(2j-1)\cdot 2} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \sqrt{[1\cdot 2j]} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \sqrt{[1\cdot 2j]} & 0 \end{pmatrix} \end{array},$$

$$\hat{J}_y/\hbar \equiv \begin{array}{c} \\ m \\ j \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ -j \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{ccccccc} m' & j & j-1 & j-2 & \cdots & -j+1 & -j \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0 & -i\sqrt{[2j\cdot 1]} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ i\sqrt{[2j\cdot 1]} & 0 & -i\sqrt{[(2j-1)\cdot 2]} & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & i\sqrt{[(2j-1)\cdot 2]} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -i\sqrt{[1\cdot 2j]} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & i\sqrt{[1\cdot 2j]} & 0 \end{pmatrix} \end{array},$$

$$\hat{J}_z/\hbar \equiv \begin{array}{c|cccccc} & m' & j & j-1 & j-2 & -j+1 & -j \\ m & & & & & & \\ j & & j & 0 & 0 \cdots & 0 & 0 \\ \cdot & & 0 & j-1 & 0 \cdots & 0 & 0 \\ \cdot & & 0 & 0 & j-2 \cdots & 0 & 0 \\ \cdot & & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdot & & 0 & 0 & 0 \cdots & -j+1 & 0 \\ -j & & 0 & 0 & 0 \cdots & 0 & -j \end{array}.$$

2 所要求的算符（记作$\hat{R}_{\varphi_0}$）必须将体系坐标的任意函数$\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_i, \cdots, \boldsymbol{r}_N)$变为同一函数$\psi$，但其中每个坐标转过给定的角度。

当绕方向$\boldsymbol{n}$（$\boldsymbol{n}$是单位矢量）转过无穷小角度$\mathrm{d}\varphi$时，第i个粒子的径矢$\boldsymbol{r}_i$将增加$\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i$，这里

$$\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i = \mathrm{d}\varphi[\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{r}_i].$$

若绕同一轴$\boldsymbol{n}$转过有限角$\int \mathrm{d}\varphi = \varphi_0$，则$\boldsymbol{r}_i$的有限改变为

$$\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_i = \int \mathrm{d}\varphi[\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{r}_i] = [\boldsymbol{n} \times \int \boldsymbol{r}_i \mathrm{d}\varphi] \equiv \mathrm{d}\boldsymbol{r}_i, \qquad (1)$$

我们来考虑最一般的算符$\hat{R}$，它是表示体系中粒子作任意有限位移的算符。（严格地说，这些位移应满足条件$\nabla \cdot \delta\boldsymbol{r} = 0$。）

按照$\hat{R}$的定义，我们有

$$\hat{R}\psi(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_i,\cdots,\boldsymbol{r}_N)$$
$$=\psi(\boldsymbol{r}_1+\delta\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_i+\delta\boldsymbol{r}_i,\cdots,\boldsymbol{r}_N+\delta\boldsymbol{r}_N). \qquad (2)$$

将方程(2)的右边展成泰勒级数，这个展式可写成下面的形式：

$$\psi(\boldsymbol{r}_1+\delta\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_i+\delta\boldsymbol{r}_i,\cdots,\boldsymbol{r}_N+\delta\boldsymbol{r}_N)$$

$$=\psi(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_i,\cdots,\boldsymbol{r}_N)+\sum_{i=1}^{N}\left(\delta\boldsymbol{r}_i\frac{\partial\psi}{\partial\boldsymbol{r}_i}\right)$$

$$+\frac{1}{2!}\left[\sum_{i=1}^{N}\left(\delta\boldsymbol{r}_i\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}_i}\right)\right]^2\psi+\cdots$$

$$=\left\{1+\sum_{i=1}^{N}\left(\delta\boldsymbol{r}_i\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}_i}\right)+\frac{1}{2!}\left[\sum_{i=1}^{N}\left(\delta\boldsymbol{r}_i\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}_i}\right)\right]^2+\cdots\right\}$$

$$\times\psi(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_i,\cdots,\boldsymbol{r}_N). \qquad (3)$$

比较方程(2)和(3)，我们可以确信，方括号内的式子就是算符$\hat{R}$。

因为这个表示式是指数函数的幂级数展开式，所以可将$\hat{R}$写成下面的符号形式[我们引进粒子的动量算符$\hat{\boldsymbol{P}}_i=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}_i}$]：

$$\hat{R}=\exp\left[\sum_{i=1}^{N}\left(\delta\boldsymbol{r}_i\cdot\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}_i}\right)\right]=\exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_{i=1}^{N}(\delta\boldsymbol{r}_i\cdot\hat{\boldsymbol{P}}_i)\right]. \qquad (4)$$

在所有粒子都平移一距离$\boldsymbol{a}$的特殊情况下，我们有

$$\delta\boldsymbol{r}_1=\delta\boldsymbol{r}_2=\cdots=\delta\boldsymbol{r}_i=\cdots=\delta\boldsymbol{r}_N=\boldsymbol{a},$$

方程(4)化为

$$\hat{R}_a\equiv\hat{T}_a=\exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{P}}\right),$$

式中$\hat{\boldsymbol{P}}=\sum_{i=1}^{N}\hat{\boldsymbol{P}}_i$是粒子系的总动量算符。

现在回到所要求的转过有限角度的情况。

若取n轴沿柱坐标系(ρ,φ,z)的z轴，并且作替换$\delta\varphi_i=\varphi_0$，$\delta\rho_i=\delta z_i=0$，我们有

$$\left(\delta\boldsymbol{r}_i\cdot\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}_i}\right)=\delta\varphi_i\frac{\partial}{\partial\varphi_i}+\delta\rho_i\frac{\partial}{\partial\rho_i}+\delta z_i\frac{\partial}{\partial z_i}=\varphi_0\frac{\partial}{\partial\varphi_i}.$$

将这个式子代入方程(4)，并考虑到$(\hbar/\mathrm{i})(\partial/\partial\varphi_i)$是第$i$个粒子的角动量的$z$分量的算符，我们得

$$\hat{R}_{\varphi_0}=\exp\left(\varphi_0\sum_i\frac{\partial}{\partial\varphi_i}\right)=\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\varphi_0\hat{M}_z\right),\qquad(5)$$

式中$\hat{M}_z=\sum_{i=1}^{N}\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\varphi_i}$是粒子系沿转动轴的角动量分量的算符。

最后，写成矢量形式，我们有$(M_z\equiv M_n=n\boldsymbol{M}\cdot)$：

$$\hat{R}_{\varphi_0,n}=\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\varphi_0(\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{M}})\right].$$

3. 大家知道，在坐标系的无穷小转动下，波函数的变换如下：

$$\psi'(\boldsymbol{r})=\{1+\mathrm{i}(\mathrm{d}\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{l}})\}\psi(\boldsymbol{r})\qquad(1)$$

这里$\mathrm{d}\boldsymbol{\alpha}$是一矢量，它的方向沿转动轴，大小等于转动角，$\hat{\boldsymbol{l}}$是轨道角动量算符。

首先考虑绕z轴转$\mathrm{d}\alpha$角的情形。对于这样的转动，我们有

$$\psi'(r,\theta,\varphi)=\psi(r,\theta,\varphi+\mathrm{d}\alpha)=\psi(r,\theta,\varphi)+\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\mathrm{d}\alpha.\qquad(2)$$

比较(1)式和(2)式，得

$$l_z=-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}.$$

为了找出算符l_z在球坐标中的表示式，使坐标系绕x轴作一

转动。于是有

$$\psi'(r,\theta,\varphi)=\psi(r,\theta+d\theta,\varphi+d\varphi)$$

$$=\left\{1+\left(\frac{d\theta}{d\alpha}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{d\varphi}{d\alpha}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)d\alpha\right\}\psi(r,\theta,\varphi),$$

由此得

$$l_x=-i\left(\frac{d\theta}{d\alpha}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{d\varphi}{d\alpha}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right).$$

现在来计算 $\frac{d\theta}{d\alpha}$ 和 $\frac{d\varphi}{d\alpha}$。容易看出：

$$z'-z=-yd\alpha,$$

$$y'-y=zd\alpha$$

又因为 $z'=r\cos\theta$，$y'=r\sin\theta\sin\varphi$，我们有

$$\frac{d\theta}{d\alpha}=-\sin\varphi,\quad\frac{d\varphi}{d\alpha}=-\cot\theta\cdot\cos\varphi,$$

于是得

$$l_x=i\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\cdot\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right).$$

仿此可求得

$$l_y=-i\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}-\cot\theta\cdot\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right).$$

4. 如果算符Ω把函数φ变成为一个新的函数ψ

$$\psi=\Omega\varphi,$$

那么在被转动的坐标系中必有关系式

$$\psi'=\Omega'\varphi',$$

因此[见§4.2题的方程(2)]

$$\hat{R}\psi=\psi',\quad\hat{R}\varphi=\varphi'.$$

即得所要求的关系式。

5. 可以证明（见§3.47题和§4.2题），体系的动量和角动量，可以简单地与体系的无穷小平移算符和无穷小转动算符联系起来（更确切地说，它们正比于这些算符与单位算符之差）[1]。

任一平移都与任一其他平移对易，所以动量各分量的算符也是对易的。然而，两个绕不平行的轴的转动，彼此是不对易的，这对应于角动量各分量的算符的非对易性。

10 $\hat{l}_{z'}=\hat{l}_x\cos(x,z')+\hat{l}_y\cos(y,z')+\hat{l}_z\cos(z,z')$。

12. 如果对于自旋波函数，我们采用$|l,m\rangle$表象（见§4.1题）并且用欧勒角θ,ψ,φ表征转动，经过如下的三次相继转动可以从原先的自旋波函数$\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_0\\ \psi_{-1}\end{pmatrix}$得到新的自旋波函数$\begin{pmatrix}\psi'_1\\ \psi'_0\\ \psi'_{-1}\end{pmatrix}$：

$$\begin{pmatrix}\psi'_1\\ \psi'_0\\ \psi'_{-1}\end{pmatrix}=\hat{R}_3\hat{R}_2\hat{R}_1\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_0\\ \psi_{-1}\end{pmatrix},$$

其中$\hat{R}_1$相应于绕z轴转过φ角，$\hat{R}_2$相应于绕x轴转过θ角，而$\hat{R}_3$相应于绕z轴转过ψ角。

在所采用的表象中，$\hat{R}_1$和$\hat{R}_3$由下面的关系式给出（比较§4.2题的解(5)和§4.1题中的角动量算符的矩阵表示）：

$$\hat{R}_1=\begin{pmatrix}e^{i\varphi}&0&0\\ 0&1&0\\ 0&0&e^{-i\varphi}\end{pmatrix},\quad \hat{R}_3=\begin{pmatrix}e^{i\psi}&0&0\\ 0&1&0\\ 0&0&e^{-i\psi}\end{pmatrix}.$$

为求$\hat{R}_2$，我们利用$\hat{R}_2=\exp(i\theta\hat{M}_x/\hbar)$的事实和§4.1题中给出的$\hat{M}_x$的矩阵表示，得到

---

① 参考：例如，H. A. Kramers, *Quantum Mechanics* (Amsterdam: North Holland Publishing Company, 1957) 或 A. S. Davydov, *Quantum Mechanics* (Oxford: Pergamon Press, 1965)。

$$\hat{R}_2=\begin{pmatrix} \cos^2\frac{1}{2}\theta & \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\sin\theta & -\sin^2\frac{1}{2}\theta \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta & \cos\theta & -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta \\ -\sin^2\frac{1}{2}\theta & \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta & \cos^2\frac{1}{2}\theta \end{pmatrix}.$$

最后我们得到

$$\begin{pmatrix} \psi_1' \\ \psi_0' \\ \psi_{-1}' \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\psi+\varphi)}\cos^2\frac{1}{2}\theta & \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\sin\theta & -\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\psi-\varphi)}\sin^2\frac{\theta}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\sin\theta & \cos\theta & -\frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\sin\theta \\ -\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\psi-\varphi)}\sin^2\frac{\theta}{2} & \frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\psi}\sin\theta & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\psi+\varphi)}\cos^2\frac{1}{2}\theta \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_0 \\ \psi_{-1} \end{pmatrix}.$$

13. 利用上题结果，对于$M=1$的情形，我们得

$$w(+1)=\cos^4\frac{\theta}{2},\ w(0)=\frac{1}{2}\sin^2\theta,\ w(-1)=\sin^4\frac{\theta}{2};$$

对于$M=0$，

$$w(+1)=\frac{1}{2}\sin^2\theta,\ w(0)=\cos^2\theta,\ w(-1)=\frac{1}{2}\sin^2\theta;$$

最后，对于$M=-1$

$$w(+1)=\sin^4\frac{\theta}{2},\ w(0)=\frac{1}{2}\sin^2\theta,\ w(-1)=\cos^4\frac{\theta}{2}.$$

14. $\hat{\sigma}_x=\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\hat{\sigma}_y=\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}$, $\hat{\sigma}_z=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$.

与§4.1题中的表象相比，我们看到$\frac{1}{2}\hbar\hat{\sigma}$可理解为$j=\frac{1}{2}$的角动量算符，即自旋为$\frac{1}{2}$的粒子的算符。

16. 利用§4.2题的结果，求得此变换算符$\hat{T}$（参考§4.12题）为

$$\hat{T}=e^{-\frac{1}{2}i\psi\hat{\sigma}_z}e^{-\frac{1}{2}i\theta\hat{\sigma}_y}e^{-\frac{1}{2}i\varphi\hat{\sigma}_z}$$

$$=\begin{pmatrix} e^{-\frac{1}{2}i(\varphi+\psi)}\cos\frac{1}{2}\theta & -ie^{-\frac{1}{2}i(\psi-\varphi)}\sin\frac{1}{2}\theta \\ -ie^{\frac{1}{2}i(\varphi-\psi)}\sin\frac{1}{2}\theta & e^{\frac{1}{2}i(\varphi+\psi)}\cos\frac{1}{2}\theta \end{pmatrix}.$$

17. 欧勒角θ，φ和ψ通过如下关系式与α,β,γ和Φ相联系：

$$\cos\frac{1}{2}\Phi=\cos\frac{1}{2}\theta\cos\frac{1}{2}(\varphi+\psi),$$

$$\alpha\sin\Phi=\sin\frac{1}{2}\theta\cos\frac{1}{2}(\varphi-\psi),$$

$$\beta\sin\frac{1}{2}\Phi=\sin\frac{1}{2}\theta\sin\frac{1}{2}(\varphi-\psi),$$

$$\gamma\sin\frac{1}{2}\Phi=\cos\frac{1}{2}\theta\sin\frac{1}{2}(\varphi+\psi).$$

因此，利用上题结果，我们得到

$$\hat{T}=\cos\frac{1}{2}\Phi+i(\alpha\hat{\sigma}_x+\beta\hat{\sigma}_y+\gamma\hat{\sigma}_z)\sin\frac{1}{2}\Phi.$$

19. $$w\left(+\frac{1}{2}\right)=\cos^2\frac{\theta}{2},\quad w\left(-\frac{1}{2}\right)=\sin^2\frac{\theta}{2}.$$

自旋分量的平均值等于$\frac{1}{2}\cos\theta$。

20. 我们利用在坐标轴转动下自旋函数分量的变换矩阵。这矩阵在§4.16题的解答中已给出。利用这个矩阵，得到新坐标系中的自旋函数为

$$\psi_1'=\exp\left[\frac{1}{2}\,i(\varphi+\psi)+i\alpha\right]\cos\frac{\theta}{2}\cdot\cos\delta,$$

$$+i\exp\left[\frac{1}{2}\,i(\psi-\varphi)+i\beta\right]\sin\frac{\theta}{2}\cdot\sin\delta,$$

$$\psi_2'=i\exp\left[\frac{1}{2}\,i(\varphi-\psi)+i\alpha\right]\sin\frac{\theta}{2}\cdot\cos\delta$$

$$+\exp\left[-\frac{1}{2}\,i(\varphi+\psi)+i\beta\right]\cos\frac{\theta}{2}\sin\delta.$$

我们求得自旋沿z'轴方向的几率为

$$w_1=\psi_1'^{*}\psi_1'=\cos^2\frac{\theta}{2}\cdot\cos^2\delta+\sin^2\frac{\theta}{2}\cdot\sin^2\delta$$

$$+\frac{1}{2}\sin\theta\cdot\sin2\delta\cdot\sin(\varphi+\alpha-\beta).$$

由这个公式得出结论：自旋分量的值沿轨道方向的几率只依赖于差值$(\alpha-\beta)$，而不单独依赖于α和β。

21．自旋方向由角度

$$\theta=2\delta,\quad \Phi=\frac{\pi}{2}+\beta-\alpha$$

决定。

22．可能。在混合系综情形下，对于非均匀磁场的任一方向，粒子束总是分裂成两束。在纯系综情形下，适当调节仪器，可以使其中一束消失。

23．给出总自旋平方的算符

$$\hat{\boldsymbol{S}}^2=\hat{\boldsymbol{S}}_1^2+\hat{\boldsymbol{S}}_2^2+2(\hat{\boldsymbol{S}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{S}}_2)$$

$$=\frac{3}{2}\hbar^2\hat{1}_1\cdot\hat{1}_2+\frac{1}{2}\hbar^2[\hat{\sigma}_{1x}\hat{\sigma}_{2x}+\hat{\sigma}_{1y}\hat{\sigma}_{2y}+\hat{\sigma}_{1z}\hat{\sigma}_{2z}]$$

$$=\frac{3}{2}\hbar^2\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}_2$$

$$+\frac{1}{2}\hbar^2\left[\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}_2+\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}_2\right.$$

$$+\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}_2\Big],$$

式中脚标1和2用以区别两个粒子，具有脚标1(2)的算符只作用在第一个（第二个）粒子的旋量上，而 $\hat{1}$ 是单位算符 $\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$。

我们引入单位旋量 α 和 β：

$$\alpha\equiv\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix},\qquad \beta\equiv\begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix}.$$

于是，两个自旋为 $\frac{1}{2}$ 的粒子的体系的一般旋量可写成

$$\Psi=a\alpha_1\alpha_2+b\alpha_1\beta_2+c\beta_1\alpha_2+d\beta_1\beta_2,$$

可求得 Ψ 是 $\hat{S}_z=\hat{S}_{1z}+\hat{S}_{2z}=\frac{1}{2}\hbar(\hat{\sigma}_{1z}+\hat{\sigma}_{2z})$ 的本征函数，若 $b=c$，或 $b=-c$。解本征值方程 $\hat{S}^2\Psi=\lambda\Psi$，最后得到下列联合的本征函数：

$\Psi_1=\alpha_1\alpha_2$，　$S^2=2\hbar^2$，　$S_z=\hbar$；

$\Psi_2=\alpha_1\beta_2+\beta_1\alpha_2$，　$S^2=2\hbar^2$，　$S_z=0$；

$\Psi_3=\beta_1\beta_2$，　$S^2=2\hbar^2$，　$S_z=-\hbar$；

$\Psi_4=\alpha\beta_2-\beta_1\alpha_2$，　$S^2=0$，　$S_z=0$。

27. 对于两粒子体系，可能的波函数为

$$\psi_{1,1}=\alpha_1\alpha_2,\ \psi_{1,-1}=\beta_1\beta_2,\ \psi_{1,0}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_1\beta_2+\beta_1\alpha_2);$$

$$\psi_{0,0}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_1\beta_2-\beta_1\alpha_2).$$

这里，前三个波函数对应于三重态，而最后一个对应于独态。对应于这些波函数的偶极-偶极相互作用能为

$\langle V\rangle_{1,1}=\langle V\rangle_{1,-1}=-2A/d^3$；$\langle V\rangle_{1,0}=4A/d^3$；

$\langle V\rangle_{0,0}=0$。

$t=0$时的波函数为$\sqrt{2}[\psi_{1,0}+\psi_{0,0}]$，而$t$时刻的波函数为

$$\psi=\sqrt{2}[\psi_{1,0}\exp(-4iAt/d^3\hbar)+\psi_{0,0}],$$

同时，我们看到，在经过时间$\hbar d^3/4\pi A$之后，波函数将是$\psi=-\sqrt{2}[\psi_{1,0}-\psi_{0,0}]$，这对应于自旋转向。

28. 像§4.23题一样进行讨论，可得四个四重态旋量：

$$\Psi_1=\alpha_1\alpha_2\alpha_3, \qquad S^2=\frac{15}{4}\hbar^2,\ S_z=\frac{3}{2}\hbar;$$

$$\Psi_2=\alpha_1\alpha_2\beta_3+\alpha_1\beta_2\alpha_3+\beta_1\alpha_2\alpha_3, \qquad S^2=\frac{15}{4}\hbar^2,\ S_z=\frac{1}{2}\hbar;$$

$$\Psi_3=\alpha_1\beta_2\beta_3+\beta_1\alpha_2\beta_3+\beta_1\beta_2\alpha_3, \qquad S^2=\frac{15}{4}\hbar^2,\ S_z=-\frac{1}{2}\hbar;$$

$$\Psi_4=\beta_1\beta_2\beta_3, \qquad S^2=\frac{15}{4}\hbar^2,\ S_z=-\frac{3}{2}\hbar;$$

和两个简并的双重态旋量(λ和μ是两个任意常数)：

$$\Psi_5=\alpha_1\alpha_2\beta_3+\lambda\alpha_1\beta_2\alpha_3-(1+\lambda)\beta_1\alpha_2\alpha_3,$$

$$S^2=\frac{3}{4}\hbar^2,\ S_z=\frac{1}{2}\hbar;$$

$$\Psi_6=\alpha_1\beta_2\beta_3+\mu\beta_1\alpha_2\beta_3-(1+\mu)\beta_1\beta_2\alpha_3,$$

$$S^2=\frac{3}{4}\hbar^2,\ S_z=-\frac{1}{2}\hbar.$$

31. 明显地写出相应的4×4矩阵，就得到

$$(\hat{\sigma}_i\cdot\hat{\sigma}_l)=2\hat{P}_{il}-\hat{I}_{il}, \qquad (1)$$

其中$\hat{I}_{il}$是4×4单位矩阵。

利用(1)式和上题中得到的结果，可直截了当地进行证明。

32. 旋量函数的分量与对称旋量的分量之间存在着如下关系：

$$\psi^{11}=\psi_1,\ \psi^{12}=\psi^{21}=\frac{1}{\sqrt{2}}\psi_0,\ \psi^{22}=\psi_{-1}, \qquad (1)$$

式中ψ_1，ψ_0和ψ_{-1}是自旋为1的旋量的分量(参考§4.12题)。二阶旋量像两个一阶旋量的乘积一样变换，即

$$\psi'^{11}=\alpha^2\psi^{11}+2\alpha\beta\psi^{12}+\beta^2\psi^{22},$$
$$\psi'^{12}=\alpha\gamma\psi^{11}+(\alpha\delta+\beta\gamma)\psi^{12}+\beta\delta\psi^{22},$$
$$\psi'^{22}=\gamma^2\psi^{11}+2\gamma\delta\psi^{12}+\delta^2\psi^{22}.$$

如果用自旋函数的分量替换旋量的分量，应用方程(1)，我们得到

$$\psi'_1=\alpha^2\psi_1+\sqrt{2}\,\alpha\beta\psi_0+\beta^2\psi_{-1},$$
$$\psi'_0=\sqrt{2}\,\alpha\gamma\psi_1+(\alpha\delta+\beta\gamma)\psi_0+\sqrt{2}\,\beta\delta\psi_{-1}, \qquad (2)$$
$$\psi'_{-1}=\gamma^2\psi_1+\sqrt{2}\,\gamma\delta\psi_0+\delta^2\psi_{-1}.$$

当我们把系数

$$\alpha=\exp\left[\frac{1}{2}\,i(\varphi+\psi)\right]\cos\frac{\theta}{2},$$
$$\beta=i\sin\frac{\theta}{2}\exp\left[-\frac{1}{2}\,i(\varphi-\psi)\right],$$
$$\gamma=i\sin\frac{\theta}{2}\exp\left[\frac{1}{2}\,i(\varphi-\psi)\right],$$
$$\delta=\exp\left[-\frac{1}{2}\,i(\varphi+\psi)\right]\cos\frac{\theta}{2},$$

的值[3]代入关系式(2)，便得到§4.12题的结果。

33. 为了找出所要求的几率，我们采用一个形式的方法。在这个方法中，考虑的不是一个角动量为j的粒子，而是由$2j$个自旋为$\frac{1}{2}$的粒子组成的系统。由于在我们的问题中粒子的角动量的分量为j，所以在等效的$2j$个粒子的系统中，所有粒子自旋的z分量必须等于$+\frac{1}{2}$。每一个粒子沿z轴的自旋分量为$+\frac{1}{2}\left(\text{或}-\frac{1}{2}\right)$的几率是$\cos^2\frac{\theta}{2}\left(\text{或}\sin^2\frac{\theta}{2}\right)$(见§4.19题)。为了使这些粒子的总

[3] 注意，这儿个系数表示式中的ψ是欧拉角，而不是上面的波函数。——译者

角动量的z分量的值等于m，必须使$j+m$个粒子的z分量是$+\frac{1}{2}$，

其余$j-m$个粒子的z分量为$-\frac{1}{2}$。将

$$\left(\cos^2\frac{\theta}{2}\right)^{j+m}\times\left(\sin^2\frac{\theta}{2}\right)^{j-m}$$

乘以$(2j)!/(j+m)!(j-m)!$，就得到所要求的几率$w(m)$。$(2j)!/(j+m)!(j-m)!$是把$2j$个粒子分成这样两群的分法的数目。于是，我们得到

$$w(m)=\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}\left(\cos^2\frac{\theta}{2}\right)^{j+m}\left(\sin^2\frac{\theta}{2}\right)^{j-m}.$$

容易验证$\sum_{-j}^{+j}w(m)=1$。

34. 我们考虑$s=1$的情况，这时波函数则是一个三分量的列矩阵。

（i） 是的。

（ii） 不。不是所有的态都对应于指向确定方向的自旋。这是因为，如果我们想要得到表征自旋方向的两个角（假若存在的话），就必须满足三个方程，而这一般地是不可能的。

35*. 角动量为J的体系的状态，可用$2J$阶对称旋量来描述。为了解决这个问题，必须建立分量

$$\psi^{\overbrace{11\cdots1}^{j+M}\overbrace{22\cdots2}^{j-M}}\text{和}\psi'^{\overbrace{11\cdots1}^{j+M'}\overbrace{22\cdots2}^{j-M'}}$$

之间的关系。从图33容易看出

$$\psi'^{\overbrace{11\cdots1}^{J+M'}\overbrace{22\cdots2}^{J-M'}}=\frac{(J+M')!(J-M')!}{(2J)!}$$

$$\times\sum_{\nu=\nu_1}\frac{(2J)!}{\nu!(M'-M+\nu)!(J+M-\nu)!(J-M'-\nu)!}\alpha^{\nu}\beta^{M'-M+\nu}\gamma^{J+M-\nu}\delta^{J-M'-\nu}$$

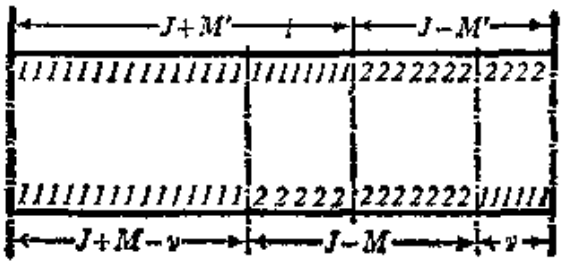


图 33

$$\times \psi^{\overbrace{11\cdots1}^{J+M}\overbrace{22\cdots2}^{J-M}},$$

式中$\alpha,\beta,\gamma,\delta$是凯莱-克莱因(Cayley-Klein)参量。

由于

$$\psi^{\overbrace{11\cdots1}^{J+M}\overbrace{22\cdots2}^{J-M}}=\sqrt{\left[\frac{(J+M)!(J-M)!}{(2J)!}\right]}\ \psi(M),$$

$$\psi'^{\overbrace{11\cdots1}^{J+M'}\overbrace{22\cdots2}^{J-M'}}=\sqrt{\left[\frac{(J+M')!(J-M')!}{(2J)!}\right]}\ \psi'(M'),$$

并且 $\psi(M)=1$，我们有

$$\psi'(M')=\sqrt{[(J+M')!(J-M')!(J+M)!(J-M)!]}$$

$$\times\sum_{\nu=0}\frac{\gamma^{\nu}\beta^{M'-M+\nu}\alpha^{J+M-\nu}\delta^{J-M'-\nu}}{\nu!(M'-M+\nu)!(J+M-\nu)!(J-M'-\nu)!}.$$

由此得

$$P(M,M')=(J+M')!(J-M')!(J+M)!(J-M)!\left(\cos\frac{\theta}{2}\right)^{4J}$$

$$\times\left\{\sum_{\nu=0}\frac{(-1)^{\nu}\left(\tan\frac{\theta}{2}\right)^{2\nu-M+M'}}{\nu!(M'-M+\nu)!(J+M-\nu)!(J-M'-\nu)!}\right\}^{2}.$$

求和时，必须令导致负数阶乘的项为零，换句话说，只对满足下列不等式

$$\nu \geqslant M - M',$$
$$\nu \leqslant J + M,$$
$$\nu \leqslant J - M'$$

的那些 ν 求和。

36*. 首先来求算符 $\hat{j}_z$ 的本征函数。为此，把算符 $\hat{j}_z$ 写成矩阵形式，

$$\hat{j}_z = \begin{pmatrix} \hat{l}_z + \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \hat{l}_z - \frac{1}{2} \end{pmatrix},$$

因为 $\hat{l}_z = -\mathrm{i}(\partial/\partial\varphi)$，故决定 $\hat{j}_z$ 的本征函数和本征值的方程是

$$\begin{pmatrix} -\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = m \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

或者

$$-\mathrm{i}\frac{\partial\psi_1}{\partial\varphi} + \frac{1}{2}\psi_1 = m\psi_1,$$

$$-\mathrm{i}\frac{\partial\psi_2}{\partial\varphi} - \frac{1}{2}\psi_2 = m\psi_2.$$

由此得

$$\psi_1 = f_1(r,\theta)\exp\left[\mathrm{i}\left(m - \frac{1}{2}\right)\varphi\right],$$

$$\psi_2 = f_2(r,\theta)\exp\left[\mathrm{i}\left(m + \frac{1}{2}\right)\varphi\right]$$

式中 f_1 和 f_2 是 r,θ 的任意函数，m 是半奇整数。

从形式为

$$\begin{pmatrix} f_1(r,\theta)\exp\left[\mathrm{i}\left(m-\frac{1}{2}\right)\varphi\right] \\ f_2(r,\theta)\exp\left[\mathrm{i}\left(m+\frac{1}{2}\right)\varphi\right] \end{pmatrix}$$

的所有可能的函数中，必须选择同时是算符 l^2 的本征函数的那些函数。这样的本征函数的形式为：

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_1(r)Y_{l,\,m-\frac{1}{2}}(\theta,\varphi) \\ R_2(r)Y_{l,\,m+\frac{1}{2}}(\theta,\varphi) \end{pmatrix}.$$

最后，我们要适当地选择 R_1 和 R_2，使得这个函数是总角动量平方的算符的本征函数。为此，将方程 $\hat{j}^2\psi=j(j+1)\psi$ 写成矩阵形式：

$$\begin{pmatrix} \hat{l}^2+\frac{3}{4}+\hat{l}_z & \hat{l}_x-\mathrm{i}\hat{l}_y \\ \hat{l}_x+\mathrm{i}\hat{l}_y & \hat{l}^2+\frac{3}{4}-\hat{l}_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_1(r)Y_{l,\,m-\frac{1}{2}}(\theta,\varphi) \\ R_2(r)Y_{l,\,m+\frac{1}{2}}(\theta,\varphi) \end{pmatrix}$$

$$=j(j+1)\begin{pmatrix} R_1(r)Y_{l,\,m-\frac{1}{2}}(\theta,\varphi) \\ R_2(r)Y_{l,\,m+\frac{1}{2}}(\theta,\varphi) \end{pmatrix}$$

并且考虑球谐函数的性质

$$(\hat{l}_x+\mathrm{i}\hat{l}_y)Y_{l,m}=\sqrt{[(l+m+1)(l-m)]}\,Y_{l,m+1},$$

$$(\hat{l}_x-\mathrm{i}\hat{l}_y)Y_{l,m}=\sqrt{[(l-m+1)(l+m)]}\,Y_{l,m-1}.$$

这样，由已写出的矩阵关系可知，R_1，R_2 必须满足下列两个齐次方程：

$$\left[l(l+1)-j(j+1)+m+\frac{1}{4}\right]R_1+\sqrt{\left[\left(l+\frac{1}{2}\right)^2-m^2\right]}R_2=0,$$

$$\sqrt{\left[\left(l+\frac{1}{2}\right)^2-m^2\right]}R_1+\left[l(l+1)-j(j+1)-m+\frac{1}{4}\right]R_2=0.$$

为了使这些方程有解，j必须等于$l+\frac{1}{2}$或$l-\frac{1}{2}$。

设$j=l+\frac{1}{2}$，我们得

$$R_1=\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}+m\right)}R(r),\quad R_2=\sqrt{\left(l-m+\frac{1}{2}\right)}R(r).$$

于是

$$\psi\left(l,\ j=l+\frac{1}{2},\ m\right)=R(r)\begin{pmatrix}\sqrt{\left(\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}\right)}Y_{l,m-\frac{1}{2}}\\ \sqrt{\left(\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}\right)}Y_{l,m+\frac{1}{2}}\end{pmatrix}$$

$$(l=0,1,2,\cdots);$$

与此相似，当$j=l-\frac{1}{2}$时，我们有

$$\psi\left(l,\ j=l-\frac{1}{2},\ m\right)=R(r)\begin{pmatrix}-\sqrt{\left(\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}\right)}Y_{l,m-\frac{1}{2}}\\ \sqrt{\left(\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}\right)}Y_{l,m+\frac{1}{2}}\end{pmatrix}.$$

$$(l=1,2,3,\cdots)$$

因子$1/\sqrt{(2l+1)}$的出现，是归一化的结果。

37.

$$l_z\left(j=l+\frac{1}{2}\right)=\frac{2ml}{2l+1},\qquad s_z\left(j=l+\frac{1}{2}\right)=\frac{m}{2l+1},$$

$$l_z\left(j=l-\frac{1}{2}\right)=\frac{2m(l+1)}{2l+1},\qquad s_z\left(j=l-\frac{1}{2}\right)=-\frac{m}{2l+1}.$$

	几率	
	$j=l+\frac{1}{2}$	$j=l-\frac{1}{2}$
轨道角动量分量$m-\frac{1}{2}$ 自旋分量$\frac{1}{2}$	$\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}$	$\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}$
轨道角动量分量$m+\frac{1}{2}$ 自旋分量$-\frac{1}{2}$	$\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}$	$\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}$

38. 在Θ和Φ方向上，自旋分量的算符的本征函数可由下列关系式求得：

$$(\sigma_x\sin\Theta\cos\Phi+\sigma_y\sin\Theta\sin\Phi+\sigma_z\cos\Theta)\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix},$$

由此得出：

$$\alpha\sin\Theta\exp(i\Phi)-\beta\cos\Theta=\beta. \tag{1}$$

由上式，我们求出比值α/β，

$$\frac{\alpha}{\beta}=\cot\frac{\Theta}{2}\exp(-i\Phi). \tag{2}$$

另一方面，从函数$\psi\left(l,\ j=l+\frac{1}{2},\ m\right)$和$\psi\left(l,j=l-\frac{1}{2},\ m\right)$的明显形式，我们得

$$\frac{\alpha}{\beta}=c_j\frac{Y_{l,m-\frac{1}{2}}(\theta,\varphi)}{Y_{l,m+\frac{1}{2}}(\theta,\varphi)}=c_j\frac{P_l^{m-\frac{1}{2}}(\cos\theta)}{P_l^{m+\frac{1}{2}}(\cos\theta)}\exp(-i\varphi), \tag{3}$$

式中

$$c_j=\sqrt{\left(\frac{l+m+\frac{1}{2}}{l-m+\frac{1}{2}}\right)}\quad\text{当 } j=l+\frac{1}{2}\text{时，}$$

$$c_j=-\sqrt{\binom{l-m+\frac{1}{2}}{l+m+\frac{1}{2}}}\quad \text{当 } j=l-\frac{1}{2}\text{时。}$$

比较(2)式和(3)式，得 $\Phi=\varphi$，也就是说，在空间某一点的自旋方向，处在通过z轴和该点的平面内。Θ 角由下列条件决定：

$$\cot\frac{\Theta}{2}=c_j\frac{P_l^{m-\frac{1}{2}}(\cos\theta)}{P_l^{m+\frac{1}{2}}(\cos\theta)}.$$

39. 体系的波函数 $\Psi(J,M)$ 是单个粒子的波函数的乘积之和。

$$\Psi(J,M)=c_1\psi_1^{(1)}\psi_{M-1}^{(2)}+c_0\psi_0^{(1)}\psi_M^{(2)}+c_{-1}\psi_{-1}^{(1)}\psi_{M+1}^{(2)},$$

这里波函数的下角标表示角动量分量的值。

系数 c_i 应该由下面的条件决定：

$$\hat{J}^2\Psi(J,M)=J(J+1)\Psi(J,M). \qquad (1)$$

第一个粒子的波函数可以方便地写成如下形式：

$$\psi_1^{(1)}=\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix},\quad \psi_0^{(1)}=\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix},\quad \psi_{-1}^{(1)}=\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}.$$

当波函数采用这样的符号时，算符 $\hat{l}_1$ 是一个 3×3 矩阵

$$\hat{l}_{1x}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix},\quad \hat{l}_{1y}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&-i&0\\i&0&-i\\0&i&0\end{pmatrix},$$

$$\hat{l}_{1z}=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix},$$

而对于算符 $\hat{J}^2$，我们得到：

$$\hat{J}^2=\hat{l}_1^2+\hat{l}_2^2+2(\hat{l}_1\cdot\hat{l}_2)$$

$$=\begin{pmatrix}l(l+1)+2+2\hat{l}_{2z}&\sqrt{2}\hat{l}_{2-}&0\\\sqrt{2}\hat{l}_{2+}&l(l+1)+2&\sqrt{2}\hat{l}_{2-}\\0&\sqrt{2}\hat{l}_{2+}&l(l+1)+2-2\hat{l}_{2z}\end{pmatrix}.$$

式中

$$l_+=l_x+il_y,\quad l_-=l_x-il_y.$$

利用算符l_+和l_-的下列性质：

$$l_+\psi_m=\sqrt{[(l+m+1)(l-m)]}\,\psi_{m+1},$$

$$l_-\psi_m=\sqrt{[(l+m)(l-m+1)]}\,\psi_{m-1},$$

我们发现，条件(1)导致下面两个方程：

$$[J(J+1)-l(l+1)-2M]c_1=\sqrt{2}\sqrt{[(l+M)(l-M+1)]}c_0,$$

$$[J(J+1)-l(l+1)+2M]c_{-1}=\sqrt{2}\sqrt{[(l+M+1)(l-M)]}c_0$$

(第三个方程是恒等式)。

解这些方程，对于$c(J,M)$，我们求得

$$\begin{pmatrix} c_1(l+1,M) & c_0(l+1,M) & c_{-1}(l+1,M)\\ c_1(l,M) & c_0(l,M) & c_{-1}(l,M)\\ c_1(l-1,M) & c_0(l-1,M) & c_{-1}(l-1,M)\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} \sqrt{\left[\frac{(l+M)(l+M+1)}{2(2l+1)(l+1)}\right]} & \sqrt{\left[\frac{(l+M+1)(l-M+1)}{(2l+1)(l+1)}\right]} & \sqrt{\left[\frac{(l-M)(l-M+1)}{2(2l+1)(l+1)}\right]}\\ -\sqrt{\left[\frac{(l+M)(l-M+1)}{2l(l+1)}\right]} & \frac{M}{\sqrt{[l(l+1)]}} & \sqrt{\left[\frac{(l+M+1)(l-M)}{2l(l+1)}\right]}\\ \sqrt{\left[\frac{(l-M)(l-M+1)}{2l(2l+1)}\right]} & -\sqrt{\left[\frac{(l+M)(l-M)}{l(2l+1)}\right]} & \sqrt{\left[\frac{(l+M)(l+M+1)}{2l(2l+1)}\right]}\end{pmatrix}$$

因为这个矩阵是正交的，它的逆矩阵和转置矩阵相同，所以

函数$\psi_1^{(1)}\psi_{M-1}^{(2)}$，$\psi_0^{(1)}\psi_M^{(2)}$，$\psi_{-1}^{(1)}\psi_{M+1}^{(2)}$中的每一个，都可以用$\Psi(l+1,M)$，$\Psi(l,M)$，$\Psi(l-1,M)$的线性组合来表示，而组合系数就是矩阵中相应的列。①

40. J($\hat{J}^2$是运动积分)的数值完全确定的态，可由$L=J-\frac{1}{2}$和$L=J+\frac{1}{2}$的态组成。反演($x\to -x$，$y\to -y$，和$z\to -z$)不会改变整个体系的哈密顿算符(宇称是一个运动积分)。但在$L=J-\frac{1}{2}$与$L=J+\frac{1}{2}$的态中，宇称是不同的。由此可知，在给定J值的态中，与粒子相对运动对应的轨道角动量L，也应该具有完全确定的值。

44. $\tilde{\mu}_x=\tilde{\mu}_y=0$，

$$\tilde{\mu}_z=M_J\left[\frac{1}{2}(g_1+g_2)+\frac{1}{2}(g_1-g_2)\cdot\frac{J_1(J_1+1)-J_2(J_2+1)}{J(J+1)}\right].$$

45. -0.26。

46. -1.91。

47. (a)0.88；(b)0.5；(c)0.69；(d)0.31。

48. D态的权重是0.05。

49. 态$^2P_{1/2}$，$^3P_0$和$^3P_1$能够出现，其他的无意义。

50. α粒子的自旋和B核的自旋都等于零，所以与α粒子和产出核的相对运动对应的轨道角动量L等于1。由此推出，若原来的核具有偶宇称，则这一体系处于奇宇称的态中(α粒子具有偶宇称)。

52. 这是不可能的。

54. 利用能量、动量和角动量守恒定律，以及光子自旋为1

① 参考R. S. Dorfman的文章[Am. J. Phys. 40 (1972) 356]中给出的注释。在那里讨论了应用这个方法时可能引起的符号上的混淆。

且指向运动方向的事实。我们得到答案：(i)不可能。(ii) 可能。

55. 因为任何粒子都有$(2I+1)$个可能的自旋取向，所以由A和B两个粒子组成的体系的独立的自旋函数的总数是$(2I+1)^2$。

这些函数具有$\chi_i^{(A)}\chi_k^{(B)}$的形式，其中$i,k=-I,-I+1,\cdots,I-1,I$)，它们对于自旋是不对称的。若将它们对称化，则得下面的结果：当$i=k$时，有$(2I+1)$个形式为$\chi_i^{(A)}\chi_i^{(B)}$的函数（对称的)；当$i\neq k$时，有$(2I+1)^2-(2I+1)=2I(2I+1)$个函数，其中有一半，亦即有$I(2I+1)$个函数的形式是$\chi_i^{(A)}\chi_k^{(B)}+\chi_k^{(A)}\chi_i^{(B)}$（对称的)；另外$I(2I+1)$个函数具有反对称的形式$\chi_i^{(A)}\chi_k^{(B)}-\chi_k^{(A)}\chi_i^{(B)}$。这样一来，我们总共得到$(I+1)(2I+1)$个对于交换$A$粒子和$B$粒子的自旋是对称的函数，和$I(2I+1)$个反对称的函数。由此得到所要求的比值为$(I+1)/I$。

56. -1。

57. 除$\langle Q_{zz}\rangle$外，所有的$\langle Q_{ik}\rangle$都等于零。

$$\langle Q_{zz}\rangle = \langle r^2\rangle \frac{2l(l+1)-6m^2}{(2l-1)(2l+3)}.$$

58*. 非对角元素的平均值为零，而$\langle Q_{xx}\rangle=\langle Q_{yy}\rangle=-\frac{1}{2}\langle Q_{zz}\rangle$。其中

$$\langle Q_{zz}\rangle = \langle r^2\rangle\frac{1}{2}\left[1-\frac{3m_j^2}{j(j+1)}\right].$$

60. 四极矩由方程

$$Q_0 = \int(3\cos^2\theta-1)r^2|\psi_{j,\,m_j=j}|^2 d^3r \qquad (1)$$

确定的。如果$j=l+\frac{1}{2}$，我们有

$$\psi_{l+\frac{1}{2},m_j=\cdot}=R(r)\ Y_{l,l}(\theta,\varphi)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},$$

而当 $j=l-\frac{1}{2}$ 时，

$$\psi_{l-\frac{1}{2},m_j=j}=\frac{R(r)}{\sqrt{(2l+1)}}\begin{pmatrix}-Y_{l,l-1}(\theta,\varphi)\\ \sqrt{2l}\,Y_{l,0}(\theta,\varphi)\end{pmatrix}.$$

由 (1) 式得

$$Q_0=-\langle r^2\rangle_{\mathrm{AV}}\frac{2j-1}{2j+2}.$$

§5. 有心力场

1. $\hat{p}_1+\hat{p}_2=\hat{P}=-i\hbar\nabla_R$,

$\hat{l}_1+\hat{l}_2=\hat{L}=[R\times\hat{P}]+[r\times\hat{p}]$,

其中

$$\hat{p}=-i\hbar\nabla_r.$$

2. 令$R_{nl}=\chi_{nl}/r$，则关于R_{nl}的方程变为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\chi''_{nl}-\left[E_{nl}-V(r)-\frac{\hbar^2l(l+1)}{2\mu r^2}\right]\chi_{nl}=0. \quad (1)$$

这个方程在形式上和在区域$0\leqslant r<\infty$中，有效势场为

$$V_{有效}=V(r)+\frac{\hbar^2l(l+1)}{2\mu r^2}$$

的一维运动的薛定谔方程相同。由于$r=0$时$\chi_{nl}=rR_{nl}$趋于零，故对于这种一维运动问题，我们可设$r<0$时，$V=+\infty$.

3. 将哈密顿算符写成

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+1)}{r^2},$$

其中

$$\hat{H}_0=-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+V(r).$$

能量的最小值和相应的本征函数由下式联系：

$$E_l^{min}=\int\psi_l^*\left\{\hat{H}_0+\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+1)}{r^2}\right\}\psi_l d\tau,$$

$$E_{l+1}^{min}=\int\psi_{l+1}^*\left\{\hat{H}_0+\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{(l+1)(l+2)}{r^2}\right\}\psi_{l+1}d\tau$$

后一式可改写成

$$E_{l+1}^{min}=\int\psi_{l+1}^*\left\{\hat{H}_0+\frac{\hbar^2l(l+1)}{2\mu r^2}\right\}\psi_{l+1}d\tau$$

$$+\int \frac{\hbar^2}{\mu}\cdot\frac{(l+1)}{r^2}\psi_{l+1}^*\psi_{l+1}\mathrm{d}\tau.$$

现在将此式中第一项与$E_l^{\min}$作比较。因为ψ_l对应于算符

$$\hat{H}_0+\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{l(l+1)}{r^2}$$

的最小本征值，所以

$$\int\psi_{l+1}^*\left\{\hat{H}_0+\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+1)}{r^2}\right\}\psi_{l+1}\mathrm{d}\tau$$

$$>\int\psi_l^*\left\{\hat{H}_0+\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+1)}{r^2}\right\}\psi_l\mathrm{d}\tau$$

至于积分$\int\frac{\hbar^2}{\mu}\frac{(l+1)}{r^2}\psi_{l+1}^*\psi_{l+1}\mathrm{d}\tau$，它总是大于零。因此，$E_l^{\min}<E_{l+1}^{\min}$，即本题得证。

4. 势能为$V(r)=\frac{1}{2}\mu\omega^2r^2$。

波函数的径向部分R满足方程

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

作变换$\chi=Rr$，并采用符号

$$k=\frac{\sqrt{(2\mu E)}}{\hbar},\quad\frac{\mu\omega}{\hbar}=\lambda,$$

我们有

$$\chi''+\left\{k^2-\lambda^2r^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right\}\chi=0. \tag{1}$$

考虑到$r\to0$和$r\to\infty$时χ的渐近行为，可以令χ的解取如下形式：

$$\chi=r^{l+1}\exp\left(-\frac{1}{2}\lambda r^2\right)u(r) \tag{2}$$

将(2)代入(1)式，得到确定函数$u(r)$的方程：

$$u''+2\left(\frac{l+1}{r}-\lambda r\right)u'-\left[2\lambda\left(l+\frac{3}{2}\right)-k^2\right]u=0. \tag{3}$$

引进新的独立变量$\xi=\lambda r^2$，方程(3)就变为如下的微分方程：

$$\xi\frac{d^2u}{d\xi^2}+\left\{\left(l+\frac{3}{2}\right)-\xi\right\}\frac{du}{d\xi}+\left\{\frac{1}{2}\left(l+\frac{3}{2}\right)-\frac{1}{2}s\right\}u=0$$

其中

$$s=\frac{k^2}{2\lambda}=\frac{E}{\hbar\omega}.$$

这个方程的解是合流超几何函数

$$u=F\left\{\frac{1}{2}\left(l+\frac{3}{2}-s\right),\ l+\frac{3}{2};\ \xi\right\}.$$

要求当 $r\to\infty$ 时 R 为零，因而得

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

故求得能级为 $E_{n,l}=\hbar\omega\left(l+2n_r+\frac{3}{2}\right)$，波函数为

$$\varphi_{n_rlm}=r^l\exp\left(-\frac{1}{2}\lambda r^2\right)F\left\{-n_r,\ l+\frac{3}{2},\ \lambda r^2\right\}\cdot Y_{lm}(\theta,\varphi).$$

5. 波函数为

$$\Phi_{n_1n_2n_3}(x,y,z)=\varphi_{n_1}(x)\varphi_{n_2}(y)\varphi_{n_3}(z)$$

其中

$$\varphi_n(x)=\frac{1}{\sqrt{(2^n\lambda^{n-\frac{1}{2}}n_!)}}\cdot\frac{1}{\sqrt[4]{\pi}}\left(\lambda x-\frac{\partial}{\partial x}\right)^n\cdot\exp\left(-\frac{1}{2}\lambda x^2\right).$$

相应的能级是（见§1.8题）

$$E_{n_1n_2n_3}=\hbar\omega\left(n_1+n_2+n_3+\frac{3}{2}\right).$$

对于 $n_r=0$，$l=1$ 的情况，φ_{n_rlm} 和 $\Phi_{n_1n_2n_3}$ 之间的关系为：

$$\varphi_{011}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_{100}+i\Phi_{010}),$$

$$\varphi_{010}=\Phi_{001},$$

$$\psi_{01,-1}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_{100}-i\Phi_{010})。$$

6. $Z_n=(n+1)(n+2)$,

式中 $n=2n_r+l$。

7. 对于^4_2He,

$$\rho(r)=\frac{4}{[r_0\sqrt{(2\pi)}]^3}\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{r}{r_0}\right)^2\right],$$

式中

$$r_0=\sqrt{\left(\frac{\hbar}{2\mu\omega}\right)},\ R=r_0。$$

对于$^{16}_8O$,

$$\rho(r)=\frac{4}{[r_0\sqrt{(2\pi)}]^3}\left(1+\frac{r^2}{r_0^2}\right)\cdot\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{r}{r_0}\right)^2\right],$$

$R=1.94r_0$。

8. 径向函数满足的方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{l(l+1)}{r^2}R+\{V(r)-E\}R=0,$$

式中 μ 为约化质量，$\mu=M_pM_n/(M_p+M_n)\approx\frac{M}{2}$，因为 $M_p\approx M_n=M$。

令 $l=0$，$R=\chi(r)/r$，则得

$$\frac{d^2\chi}{dr^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}[E+A\exp(-r/a)]\chi=0。$$

引入新变量

$$\xi=\exp(-r/2a),$$

我们得到

$$\frac{d^2\chi}{d\xi^2}+\frac{1}{\xi}\frac{d\chi}{d\xi}+\left(c^2-\frac{k^2}{\xi^2}\right)\chi=0,$$

其中

$$c^2=\frac{8\mu}{\hbar^2}Aa^2;$$

$$\kappa^2=-\frac{8\mu}{\hbar^2}Ea^2>0.$$

这个方程的通解为

$$\chi=B_1J_k(c\xi)+B_2J_{-k}(c\xi),$$

其中 J_k 是贝塞耳函数。当 $r\to\infty(\xi=0)$ 时，定态波函数应趋于零。所以$B_2=0$，因而

$$R=\frac{B_1}{r}J_k[c\exp(-r/2a)].$$

为了使$r=0$时R有限，应该有

$$J_k(c)=0.$$

这个方程给出了a与A之间的联系。这时，为了得到基态下a和A的值，c必须是贝塞耳函数的第一个根（径向波函数不含有任何节点）：

$a\times10^{13}$, cm	k	c	A,(MeV)
1	0.45	3.1	100
2	0.91	3.7	36
4.4	2.02	5.1	14

9. 在波函数$\psi(r)$所描写的态中，能量的平均值E由下式给出

$$E=\frac{\hbar^2}{2\mu}\int(\nabla\psi)^2d\tau+\int V\psi^2d\tau.$$

按照变分原理，如果ψ是准确的基态波函数，则E便取基态的能量值。如果ψ为依赖于一个或多个参数$\alpha,\beta,\cdots$的函数，则能量E将是这些参数的函数，$E(\alpha,\beta,\cdots)$。当$\alpha=\alpha_0$，$\beta=\beta_0,\cdots$时，我们将得到基态能量和波函数的最好的近似，而$\alpha_0,\beta_0,\cdots$满足下列条件：

$$\left(\frac{\partial E(\alpha,\beta,\cdots)}{\partial\alpha}\right)_{\substack{\alpha=\alpha_0\\ \beta=\beta_0}}=0,\quad \left(\frac{\partial E(\alpha,\beta,\cdots)}{\partial\beta}\right)_{\substack{\alpha=\alpha_0\\ \beta=\beta_0}}=0,\cdots$$

$E(\alpha_0,\beta_0\cdots)$这个量总是大于基态能量，试探函数的类型选择得越恰当，它就越接近基态能量。

在我们的情形下，$\psi=[1/\sqrt{4\pi}]R(r)$，其中 $R=c\exp(-\alpha r/2a)$。由归一化条件得$c^2=\alpha^3/2a^3$，所以

$$E(\alpha)=c^2\cdot\frac{\hbar^2}{2\mu}\int_0^\infty\left(\frac{\alpha}{2a}\right)^2\exp(-\alpha r/a)r^2dr$$

$$-c^2A\int_0^\infty\exp\left(-\frac{\alpha r}{a}-\frac{r}{a}\right)r^2dr$$

$$=\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\alpha}{2a}\right)^2-A\left(\frac{\alpha}{\alpha+1}\right)^3.$$

求$E(\alpha)$的极小值：

$$\frac{dE(\alpha)}{d\alpha}=\frac{\hbar^2\alpha}{4\mu a^2}-\frac{3A\alpha^2}{(\alpha+1)^4}=0.$$

由此得

$$\frac{(\alpha_0+1)^4}{\alpha_0}=\frac{12A\mu a^2}{\hbar^2}=22.3,\quad \alpha_0=1.34.$$

对于这个参数，能量值为

$$E=-2.14\text{MeV}.$$

在所给定的 A 和 a 的数值下，本题的精确解给出 $E=-2.2$MeV（见上题）。

10. 当$r<a$时，波函数的径向部分的方程为

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)-\frac{l(l+1)}{r^2}R+k^2R=0,\qquad(1)$$

其中

$$k^2=\frac{2\mu E}{\hbar^2},$$

而当$r=a$时，$R=0$。

我们引进一个新的函数$\chi(r)$来代替R：

$$\frac{\chi(r)}{\sqrt{r}}=R(r).$$

将上式代入方程(1)，则得$\chi(r)$的方程

$$\chi''+\frac{1}{r}\chi'+\left\{k^2-\frac{\left(l+\frac{1}{2}\right)}{r^2}\right\}\chi=0,$$

这个方程的解是半奇整数阶的贝塞耳函数：

$$\chi(r)=J_{l+\frac{1}{2}}(kr),$$

$$R(r)=\frac{c}{\sqrt{r}}J_{l+\frac{1}{2}}(kr).$$

定态的能量值$E=\hbar^2k^2/2\mu$由$r=a$时贝塞耳函数等于零的条件决定：

$$J_{l+\frac{1}{2}}(ka)=0,$$

而c由归一化条件决定。

确定角动量$l=0$的粒子的能级是最简单的。在这种情况下，

$$J_{\frac{1}{2}}(kr)=\sqrt{\frac{2}{\pi kr}}\sin kr,$$

而能量由下式给出：

$$E_0=\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{n^2\pi^2}{a^2}.$$

11．此问题归结为解势为

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

的一维势阱的问题。若在§1.7题中，令$V_1=\infty$，$V_2=V_0$，我们就得到确定分立谱能级的方程：

$$ka=n\pi-\arcsin\frac{\hbar k}{\sqrt{(2\mu V_0)}},\quad k=\frac{\sqrt{(2\mu E)}}{\hbar}.$$

利用作图法，容易求得这些能级（见图34）。

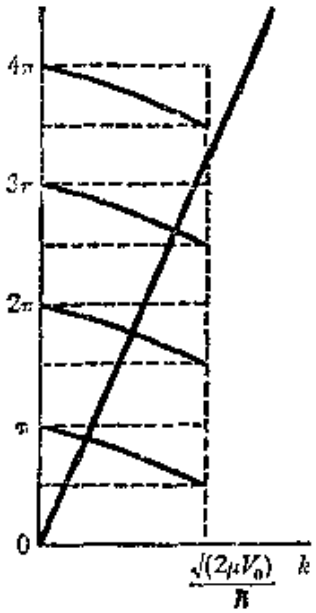


图34

第一个分立能级出现时的势阱深度为

$$V_0=\pi^2\hbar^2/8\mu a^2.$$

12. 波函数是$\psi=f(r)\cos\theta$，其中

$$f(r)=A\left[\frac{\sin\alpha r}{\alpha^2r^2}-\frac{\cos\alpha r}{\alpha r}\right],\quad r<a,$$

$$=Be^{-\beta r}\left[\frac{1}{\beta r}+\frac{1}{\beta^2r^2}\right],\quad r>a$$

其中$\alpha^2=(2\mu/\hbar^2)(E+V_0)$，$\beta^2=-2\mu E/\hbar^2$，而$A$和$B$是常数。通过$f(r)$在$r=a$处的连续性要求，把这两个常数联系起来。

13. 当把势阱边缘弄“圆滑”之后，所有的能级将向上移动，即$\Delta E>0$。l值较大的态将经受较大的能级移动，因为角动量值较大的粒子，处在势阱边缘附近的时间相对来说要大一些。

14*. 径向波函数满足方程

$$\chi''+\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-V)\chi=0.$$

在区域Ⅰ中，$V=0$，$r=0$时趋于零的解为

$$\chi=A\sin kr,\quad k^2=\frac{2\mu E}{\hbar^2}.$$

在区域Ⅱ中($V=V_0$)，通解的形式是

$$\chi=B_+\exp[\kappa(r-r_1)]+B_-\exp[-\kappa(r-r_1)],$$

$$\kappa^2=\frac{2\mu(V_0-E)}{\hbar^2}.$$

系数B_+和B_-由χ及χ'在区域Ⅰ和Ⅱ的边界上的连续性条件决定：

$$A\sin kr_1=B_++B_-,$$

$$Ak\cos kr_1=\kappa(B_+-B_-).$$

因此：

$$\left.\begin{aligned} B_+ &= \frac{A}{2}\left(\sin kr_1 + \frac{k}{\kappa}\cos kr_1\right) \\ B_- &= \frac{A}{2}\left(\sin kr_1 - \frac{k}{\kappa}\cos kr_1\right) \end{aligned}\right\} \tag{1}$$

在区域Ⅲ中，又有$V=0$，此时解为

$$\chi = C_+\exp[ik(r-r_2)] + C_-\exp[-ik(r-r_2)].$$

在区域Ⅱ和Ⅲ的边界上，由连续性条件得

$$B_+\exp[\kappa(r_2-r_1)] + B_-\exp[-\kappa(r_2-r_1)] = C_+ + C_-,$$

$$\kappa\{B_+\exp[\kappa(r_2-r_1)] - B_-\exp[-\kappa(r_2-r_1)]\} = ik(C_+ - C_-).$$

由此得：

$$C_+ = \frac{1}{2}B_+\left(1 + \frac{\kappa}{ik}\right)\exp[\kappa(r_2-r_1)] + \frac{1}{2}B_-\left(1 - \frac{\kappa}{ik}\right)\exp[-\kappa(r_2-r_1)],$$

$$C_- = \frac{1}{2}B_+\left(1 - \frac{\kappa}{ik}\right)\exp[\kappa(r_2-r_1)] + \frac{1}{2}B_-\left(1 + \frac{\kappa}{ik}\right)\exp[-\kappa(r_2-r_1)].$$

利用(1)式，我们可以用A来表示C_+和C_-：

$$C_+ = \frac{1}{4}A\sin kr_1\left(1 + \frac{\kappa}{ik}\right)\exp[\kappa(r_2-r_1)] \cdot \left\{1 + \frac{1-\frac{\kappa}{ik}}{1+\frac{\kappa}{ik}}\exp[-2\kappa(r_2-r_1)] + \frac{k}{\kappa}\cot kr_1 \cdot \left\{1 - \frac{1-\frac{\kappa}{ik}}{1+\frac{\kappa}{ik}}\exp[-2\kappa(r_2-r_1)]\right\}\right\}. \tag{2}$$

(1)式和(2)式决定了粒子的定态波函数的形式。波函数的行为主要依赖于粒子的能量。现在我们来讨论C_+和C_-对能量的依赖关系。假设$\kappa(r_2-r_1)\gg1$，于是所有包含因子$\exp[-2\kappa(r_2-r_1)]$的项都可以略去，因而有

$$C_+\approx\frac{A}{4}\sin kr_1\left(1+\frac{\kappa}{ik}\right)\exp[\kappa(r_2-r_1)]$$

$$\cdot\left\{1+\frac{k}{\kappa}\cot kr_1\right\},$$

$$C_-=C_+^*.$$

若大括号中的量不是太小，则系数C_+和C_-显著地大于A，亦即波函数仅在区域Ⅲ中明显地不为零（见图35a）。对于某些能量值，(2)式大括号中的式子的值很小，这时C_+和C_-可以取非常小的值。这样一些能量将落在E_n值附近，E_n满足超越方程

$$1+\sqrt{\left(\frac{E_n}{V_0-E_n}\right)}\cot\sqrt{\left(\frac{2\mu E_n}{\hbar^2}\right)}r_1=0,$$

并称为准稳能级。

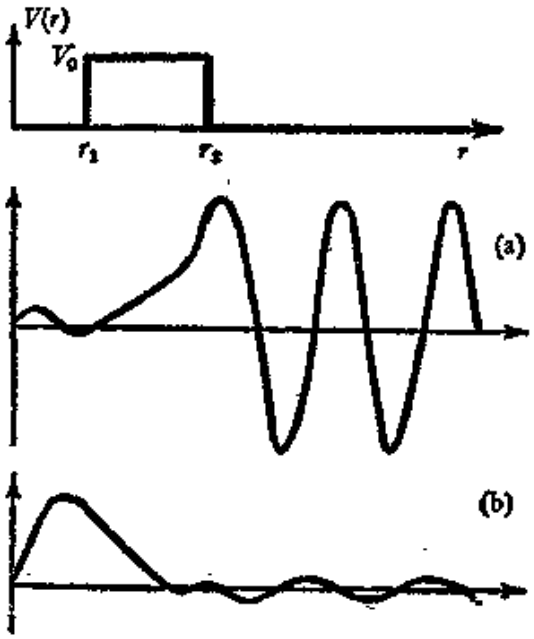


图35

容易证明，对于由图36所描绘的（$r_2\to\infty$）势阱问题，E_n确实是分立能级。

因此，落在准稳能级附近窄狭带内的能量值，对应于这样的波函数，这波函数在区域Ⅲ中小得可以忽略(图35b)。



图36

在区域Ⅰ中，找到能量严格确定的粒子的几率等于零。事实上，具有确定能量的粒子，其波函数属于连续谱，而且$|\varphi(r,E)|^2$在区域Ⅲ中的积分是发散的，但在区域Ⅰ中的积分却是有限的。这个论断对于准稳能级附近的态来说，也是正确的。因此，为了求得粒子从区域Ⅰ中出来的几率，必须考虑由能量相近的许多定态叠加得到的态，亦即位于区域Ⅰ中的“波包”，并研究它随时间的“扩散”。我们将取$t=0$时的波函数为χ_0，它在区域Ⅲ中实际上等于零，而在区域Ⅰ和Ⅱ中与准稳能级的波函数相同。

将$\chi_0(r)$按定态波函数展开：

$$\chi_0(r)=\int_0^\infty \varphi(E)\chi_E(r)\mathrm{d}E. \tag{3}$$

假设函数$\chi_E(r)$是按能量尺度归一化的。在时刻t粒子的态为

$$\chi_0(r,t)=\int\varphi(E)\chi_E(r)\exp(-\mathrm{i}Et/\hbar)\mathrm{d}E.$$

我们考虑粒子经过时间t后回到初态$\chi_0(r)$的几率：

$$W(t)=\left|\int_0^\infty \chi_0(r)\chi_0(r,t)\,\mathrm{d}r\right|^2$$

$$=\left|\int_0^\infty |\varphi(E)|^2\exp(-\mathrm{i}Et/\hbar)\mathrm{d}E\right|^2. \tag{4}$$

因此，这个问题归结为求初态的能量分布$|\varphi(E)|^2$。

从(3)式可知：

$$\varphi(E)=\int_0^\infty \chi_0(r)\chi_E(r)\mathrm{d}r. \tag{5}$$

与前述一致，可考虑具有图36所示势场的辅助问题。取其本征函数作为$\chi_0(r)$，当$r<r_1$时

$$\chi_0(r)=a\sin k_0 r\left(k_0^2=\frac{2\mu E_0}{\hbar^2}-\right)$$

而当$r>r_1$时。

$$\chi_0(r)=-\frac{k_0}{\kappa_0}a\exp[-2\kappa(r-r_1)],\quad \kappa^2=\kappa_0^2-k_0^2.$$

k_0的值由下面的条件决定：

$$\sin k_0r_1=-\frac{k_0}{\kappa_0},\quad \cos k_0r_1=\frac{\kappa}{\kappa_0},$$

而归一化常数 $a=\sqrt{[2\kappa/(1+\kappa r_1)]}$。

在区域Ⅰ，Ⅱ，Ⅲ中，函数 $\chi_E(r)$ 是确定的，除了差一个常数因子A之外。我们必须这样来选择常数A，使得 $\chi_E(r)$ 是按能量尺度归一化的。$\chi_E(r)$的渐近形式由系数 C_+ 和 C_- 的值决定。由归一化条件

$$\int_0^\infty \chi_E(r)\chi_{E'}^*(r)\,dr=\delta(E-E')$$

得出

$$|C_+|=|C_-|=\frac{1}{\hbar}\sqrt{\left(\frac{\mu}{2\pi k}\right)}.$$

于是，利用(2)式便可确定 A 对能量的依赖关系。以前，我们已经指出，几乎对所有的能量值来说，比值

$$\frac{|C_\pm|}{A(E)}=\frac{(1/\hbar)/(\mu/2\pi k)}{A(E)}$$

都是很大的，只有当 E 在某一准稳能级附近时，它才很小。因此，函数$\varphi(E)$在$E_0=\hbar^2k_0^2/2\mu$附近具有很尖锐的极大值。在其他准稳能级区域内，即使 $A(E)$ 又重新增长，但由于函数 $\chi_0(r)$ 与属于其他准稳能级的本征函数 $\chi_E(r)$ 差不多是完全正交的，方程(5)中的积分将接近于零。这样，在几率 $W(t)$ 的表示式(4)中，只有E_0附近的E值才有显著的贡献。

经上述初步讨论之后，我们就可以着手计算 $\varphi(E)$。首先求A对E的依赖关系。由C_+和C_-的方程(2)得

$$C_+=C_-^*=\frac{1}{2}B_+\left(1+\frac{\kappa}{ik}\right)\exp[\kappa(r_2-r_1)]$$

$$+\frac{1}{2}B_-\left(1-\frac{\kappa}{ik}\right)\exp[-\kappa(r_2-r_1)].$$

此外，B_+和B_-可用A表示：

$$B_+=\frac{A}{2}\left(\sin kr_1+\frac{k}{\kappa}\cos kr_1\right),$$

$$B_-=\frac{A}{2}\left(\sin kr_1-\frac{k}{\kappa}\cos kr_1\right).$$

在准稳能级附近，令$k-k_0=\Delta k$，并设下面的不等式成立：

$$|\Delta k|\ll k_0 \text{ 和 } |\Delta k|\ll\kappa, \tag{6}$$

这时，B_+和B_-中的主要项是

$$B_+=\frac{A}{2}\frac{\kappa_0}{\kappa^2}(1+\kappa r_1)\Delta k,$$

$$B_-=-A\frac{k_0}{\kappa_0}.$$

假设$\exp[-\kappa(r_2-r_1)]\ll 1$，我们有

$$|C_+|=\frac{A}{4}\frac{\kappa_0^2}{k\kappa^2}(1+\kappa r_1)\exp[\kappa(r_2-r_1)]$$

$$\times\sqrt{\left[(\Delta k)^2+\left(\frac{4\kappa^3}{\kappa_0^4}\cdot\frac{k^2}{1+\kappa r_1}\exp[-2\kappa(r_2-r_1)]\right)^2\right]}$$

由于$|C_+|=(1/\hbar)\sqrt{(\mu/2\pi k)}$，我们得

$$A(E)=\frac{\frac{1}{\hbar}\sqrt{\left(\frac{\mu}{2\pi k}\right)}\frac{4k\kappa^2}{\kappa_0^2(1+\kappa r_1)}\exp[-\kappa(r_2-r_1)]}{\sqrt{\left[(\Delta k)^2+\left(\frac{4\kappa^3}{\kappa_0^4}\cdot\frac{k^2}{1+\kappa r_1}\exp[-2\kappa(r_2-r_1)]\right)^2\right]}}$$

现在，如果像前面一样，假设不等式(6)成立，就可以容易地算出确定$\varphi(E)$的积分(5)。函数$\chi_E(r)$在区域Ⅰ和Ⅱ中与$[A(E)/a]\chi_0$没有什么差别，而在区域Ⅲ中，一般地说，它对求$\varphi(E)$是不重要的，因为当$r>r_1$时$\chi_0(r)$指数地下降。

由此，我们有

$$\varphi(E)=\frac{A(E)}{a}\int_0^\infty \chi_0^2(r)\mathrm{d}r=\frac{A(E)}{a}.$$

经过简单的变换，我们得

$$\varphi^2(E)=\frac{\hbar^2}{2\pi\tau}\cdot\frac{1}{(E-E_0)+\hbar^2/4\tau^2},$$

其中

$$E-E_0=\frac{\hbar^2}{\mu}k_0\Delta k$$

而

$$\tau=\frac{\mu}{8\hbar}\cdot\frac{\kappa_0^3}{\kappa^3k^3}\exp[2\kappa(r_2-r_1)](1+\kappa r_1).$$

算出方程(4)中的积分，即得衰减律

$$W(t)=\exp(-t/\tau).$$

在势垒内发现粒子仍处于初态的几率$W(t)$，经过时间

$$\tau=\frac{1}{16}\cdot\frac{\hbar}{V_0}\left(\frac{V_0^2}{E(V_0-E)}\right)^{\frac{3}{2}}\exp[2\kappa(r_2-r_1)](1+\kappa r_1)$$

后便减少到$1/e$。

15*. 在电荷为$+Ze$的核场中，μ^-介子的定态薛定谔方程可写成下面的形式（在这种情形下，我们对体系的质心运动不感兴趣，可以用通常的方法把它消去），

$$\nabla^2\psi(r)+\frac{2\mu'}{\hbar^2}[E-V(r)]\psi(r)=0. \qquad (1)$$

（注意，应用非相对论波动方程是合理的，因为下面将看到，μ子的动能是10MeV的数量级，比它的静止质量$\mu c^2\sim100$MeV小得多。）

方程(1)中r是μ子相对于核中心的径矢，$\mu'=\mu M/(\mu+M)$是μ子-原子核体系的约化质量，E是相对运动的能量（因为即使对于最轻的核，也有$M_{核}/\mu\geq10$，所以μ'实际上也与μ子的质量相同，故以后将略去μ的撇号）。

如果规定在 $r=\infty$ 处势能为零，则势能 $V(r)$ 的形式为

$$V(r)=\begin{cases}-\dfrac{Ze^2}{R}\left(\dfrac{3}{2}-\dfrac{1}{2}\cdot\dfrac{r^2}{R^2}\right) & \text{当 } r\leqslant R,\\ -\dfrac{Ze^2}{r} & \text{当 } r\geqslant R.\end{cases}\tag{2}$$

[求解均匀带电球体内部和外部的势 $\varphi(r)$ 这一初等静电问题，并考虑到关系式

$$V(r)=-e\varphi(r),$$

立即可得表示式(2)。]

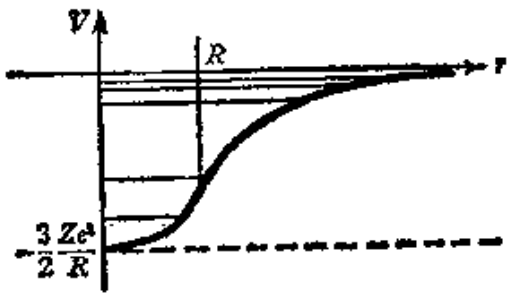


图37

势能曲线 $V(r)$ 以及 μ 子的能级，如图37所示。

从方程（2）可以看出，在核外，μ 子在电荷为 $+Ze$ 的吸引库仑场中运动，而在核内，它在频率为

$$\omega=\sqrt{\left(\frac{Ze^2}{\mu R^3}\right)}\tag{3}$$

的各向同性的谐振子势中运动。

这一点从比较振子势能 $\frac{1}{2}\mu\omega^2r^2$ 与势能表示式(2)中的 $Ze^2r^2/2R^3$ 项，便可立即看出；这个势能中的 $-\frac{3}{2}Ze^2/R$ 项，显然是不重要的常数项。

注意，对于所有实际的原子核，这个特征频率都近似地相同。事实上，众所周知

$$R\approx r_0A^{\frac{1}{3}},\tag{4}$$

其中 $r_0\approx1.2\times10^{-13}$cm，$A$ 是核的质量数，所以

$$\frac{Z}{R^3}\sim\frac{Z}{A},$$

但是，对于所有的核，这个比值都大致不变$\left(\text{实际上等于}\frac{1}{2}\right)$。据此，当在下面考虑$Z\to 0$和$Z\to\infty$的极限情形时，将假设比值$\frac{Z}{R^3}$为一常数。对于任意$R$值，解方程(1)是相当麻烦的，我们将不去求它，而只限于考虑两种极限情形（同时，只限于我们最感兴趣的μ子束缚态，显然，由此可以求出负能量E的分立谱）：

（a） $R\to 0$，（b） $R\to\infty$(但$Z/R^3=$常数!)

第一种情形(a)相当于（核+μ子）构成的“类氢”系统，所以μ子的能级由巴耳末公式给出：

$$E_n^{库仑}=-\frac{Z^2\mu e^4}{2\hbar^2 n^2}\quad (n=1,2,3,\cdots) \tag{5}$$

而且波函数也具有“类氢”形式（用μ子的质量μ替换电子的质量）

在情形(b)中，系统是一各向同性的谐振子，其能级由下式给出：

$$E_n^{振子}=\hbar\omega\left(n+\frac{3}{2}\right)\quad (n=0,1,2,3,\cdots) \tag{6}$$

其中ω由(3)式决定。

现在我们写下振子基态的归一化波函数

$$\psi_0=\left(\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{3}{4}}\exp\left(-\frac{\mu\omega r^2}{2\hbar}\right),$$

以及在这态中半径r的平均值：

$$\bar{r}=\int r|\psi_0|^2 4\pi r^2 dr=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\sqrt{\left(\frac{\hbar}{\mu\omega}\right)}. \tag{7}$$

容易证明，对于真实的核（R是有限的），情形(a)的适用范围由不等式$R\ll a$确定，这里

$$a=\frac{\hbar^2}{Z\mu e^2} \tag{8}$$

是在电荷为Ze的原子核场中，质量为μ的μ子的第一玻尔轨道半

径，而情形(b)的适用范围则由不等式$R\gg a$确定。

在这些论断中，第一个论断是明显的；它意味着“振子”区域的线度，比起对吸引库仑场中的运动是重要的距离，要小得多。第二个论断可这样得出：“振荡行为”意味着极限半径R远大于运动区域的线度$\sim\sqrt{\hbar/\mu\omega}$；这个特征量就是所谓振子零点振动的振幅，从其意义可以看出，在这个距离r上，势能$\frac{1}{2}\mu\omega^2r^2$与振子的零点能$\frac{3}{2}\hbar\omega$同数量级：

$$r=\sqrt{\frac{3}{\mu\omega}}\sim\sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}.$$

当然，量r也有同样的数量级。利用（3）式和（8）式，从不等式$R\gg\sqrt{\hbar/\mu\omega}$就可以导出$R\gg a$。

我们来考察极限情形（a）和（b）在多大程度上能应用到真实的原子核上。为此，我们来计算比值$\frac{R}{a}$。

从（4）式和（8）式，我们有

$$\frac{R}{a}=\frac{r_0A^{\frac{1}{3}}}{\hbar^2}\frac{Z\mu e^2}{}\approx2^{\frac{1}{3}}\frac{\mu}{\mu_e}\cdot\frac{r_0}{a_0}Z^{\frac{2}{3}},\tag{9}$$

这里，为了方便起见，引用了电子的质量μ_e，而

$$a_0=\frac{\hbar^2}{\mu_e e^2}\approx0.53\times10^{-8}\text{cm}.$$

式中还令$A\approx2Z$；对我们的估计来说，这是足够精确的。

将$r_0/a_0\approx2.3\times10^{-5}$和$\mu/\mu_e\approx210$代入，则得

$$\frac{R}{a}=1,\quad\text{当}Z\approx45\text{时}.$$

因此，对于轻核，即$Z\ll45$，μ子的运动是“类氢”的。当$Z\gg15$时，另一个极限情形（振荡行为）开始变得重要，然而对于很重的核（$Z\approx80\sim100$），这一极限情形也只是很粗略的近似。

若令$A=2Z$，并利用（7）式和（3）式计算r，则得$r\approx 7\times 10^{-13}$cm；这个量并不小，接近于重核的半径。由此显而易见，我们碰到的不是极限情形，而是一种中间情形。

我们还要指出，对于$Z\approx 80$—90的原子核，由本题的解所给出的较低能级之间的特征距离，约为6MeV（这个结果，与任何近似无关），而按公式（3）算得振子的$\hbar\omega$大致等于10MeV。归一化积分$\int|\psi_0|^2 dV=1$（对于基态）中属于区域$r\leqslant R$的那一部分，约等于0.55；所以，粗略地说，即使对于重核，μ^-子也有约55%的时间是在核内。

最后，从能级图可看出，关于μ子运动是非相对论性的这一假设是正确的。

16. 从量子数为n_1，l_1，m_1（能量，角动量及角动量的z分量）的态跃迁到n_2，l_2，m_2态的几率，正比于算符∇的相应的矩阵元

$$\nabla_{n_1l_1m_1,n_2l_2m_2}=\int \psi^*_{n_1l_1m_1}\nabla\psi_{n_2l_2m_2}d\tau \qquad (1)$$

的绝对值的平方，其中$d\tau=dxdydz$。矩阵元(1)是在E，M^2，M_z表象中梯度算符（或者，除差一个乘数因子外，即为动量算符）的矩阵元。

按照算符方程

$$\nabla=\frac{i}{\hbar}\hat{p}=\frac{i}{\hbar}\mu\hat{\dot{r}},$$

矩阵元(1)正比于速度算符$\hat{\dot{r}}$的矩阵元，而从熟知的矩阵方程（见§3.42题和44题）得出

$$(\hat{\dot{r}})_{n_1n_2}=i\frac{E_{n_1}-E_{n_2}}{\hbar}(r)_{n_1n_2},$$

其中E_{n_1}和E_{n_2}是能级，所以梯度的矩阵就归结为径矢r的矩阵：

$$\int\psi^*_{n_1l_1m_1}\nabla\psi_{n_2l_2m_2}d\tau=-\frac{(E_{n_1}-E_{n_2})\mu}{\hbar^2}\int\psi^*_{n_1l_1m_1}r\psi_{n_2l_2m_2}d\tau. \qquad (2)$$

由此立刻看出，在梯度（或动量）的矩阵中，只有对 n，亦即对能量是非对角的那些矩阵元才不为零，因而在分立谱的定态中，粒子梯度或动量的平均值（即能量表象中的对角矩阵元）等于零。（上述事实显然与体系内的运动是有限的这一事实有关：若 $\boldsymbol{p}_{平均}\neq 0$，粒子就会跑到无穷远。）在连续谱的情形下，运动是无限的，即运动在无界的空间中进行，这时（2）式中的积分是发散的，我们的结论便不再成立，对于平面波 $\psi\sim\exp[i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar)]$，动量的平均值由下式给出：

$$\boldsymbol{p}_{平均}=\boldsymbol{p}\neq 0.$$

若 $E_{n_1}\neq E_{n_2}$，则梯度矩阵(∇)所服从的关于 l 和 m 的选择定则，与矩阵($\boldsymbol{r}$)的相同。即只有 $l_2-l_1=\pm 1$，而 $m_1-m_2=0$（对于 z 和 $\partial/\partial z$ 的选择定则）或 $m_1-m_2=\pm 1$（对于 x，$\partial/\partial x$，y 和 $\partial/\partial y$ 的选择定则）的那些矩阵元，才不等于零。

17*. 在所考虑的态中，波函数可以写成

$$\psi_{nlm}=\frac{\chi_{nl}(r)}{r}Y_{lm}(\theta,\varphi),$$

式中 $\chi_{nl}(r)$ 满足§5.2题的方程(1)，它具有 $V(r)=-e^2/r$。令 $\rho=r/a_B$，其中 $a_B=\hbar^2/\mu e^2$ 是玻尔半径，并利用 $E_{nl}=-e^2/2a_Bn^2$，可把关于 χ_{nl} 的方程写成

$$\chi''_{nl}+\left[\frac{2}{\rho}-\frac{1}{n^2}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]\chi_{nl}=0, \tag{1}$$

这里，撇号表示对 ρ 微分。

用 $\rho^{p+1}\chi'_{nl}-\frac{1}{2}(p+1)\rho^p\chi_{nl}$ 乘方程(1)并对 ρ 积分，经过几次分部积分后，便得递推公式

$$\frac{p+1}{n^2}\langle\rho^p\rangle-(2p+1)\langle\rho^{p-1}\rangle+\frac{p}{4}[(2l+1)^2-p^2]\langle\rho^{p-2}\rangle=0. \tag{2}$$

$p=0$ 得 $\langle\rho^{-1}\rangle=n^{-2}$。

$p=1$得 $\langle\rho\rangle=\frac{1}{2}[3n^2-l(l+1)]$。

$p=2$得 $\langle\rho^2\rangle=\frac{1}{2}[5n^2+1-3l(l+1)]n^2$。

为求$p<-1$时ρ^p的平均值，首先必须求出ρ^{-2}的平均值。把方程(1)中的χ_{nl}看作参数l的函数时，便可做到这点。由氢原子的理论可以证明，对于束缚态来说，$n-l$必须是整数，在方程(1)中必须把$n-l$看作是固定的，而n则是l的线性函数。将方程(1)除以χ_{nl}，再对l求导数，

$$\frac{\partial}{\partial l}\left(\frac{\chi''_{nl}}{\chi_{nl}}\right)=-\frac{\partial}{\partial l}\left[-\frac{1}{n^2}+\frac{2}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]$$

$$=-\frac{2}{n^3}+\frac{2l+1}{\rho^2}。\tag{3}$$

用χ^2_{nl}乘方程(3)，再对ρ从0到∞积分，得

$$\langle\rho^{-2}\rangle=n^{-3}\left(l+\frac{1}{2}\right)^{-1}。$$

然后从递推公式(2)，得到

$$\langle\rho^{-3}\rangle=\left[n^3l\left(l+\frac{1}{2}\right)(l+1)\right]^{-1},$$

$$\langle\rho^{-4}\rangle=\frac{3n^3-l(l+1)}{n^5l\left(l+\frac{1}{2}\right)(l+1)\left(2l^2+2l-\frac{3}{2}\right)}。$$

18. 在$\chi=rR$所满足的方程

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

中作变换

$$\chi=A\exp[i(S/\hbar)],$$

式中A和S是实数。

若令方程的实部和虚部分别等于零，则有

$$2A'S'+S''A=0,\tag{1}$$

$$S'^2-\frac{\hbar^2A''}{A}=2\mu[E-V(r)]-\frac{\hbar^2l(l+1)}{r^2}. \qquad (2)$$

从第一个方程求得

$$A=\frac{常数}{\sqrt{S'}}.$$

设$\hbar^2$是一个小量，则我们可以近似地求解第二个方程；然而，应当记住，当过渡到经典力学($\hbar\to0$)时，必须假定$\hbar l$是有限的，因为$\hbar l$是经典力学中的角动量。对小的r值，当方程(2)右边的主要项是$\hbar^2l(l+1)/r^2$时，我们有$S'\approx\hbar\sqrt{[l(l+1)]}/r$，$A\sim\sqrt{r}$。因此，我们近似地求得$\hbar^2A''/A\approx-\hbar^2/4r^2$。如果我们考虑了这一项，并将它代入方程(2)中，就会得到S的一个更好的近似式(但对大的r值，就不存在这一修正)。这样，我们得到

$$S=\int\sqrt{\left\{2\mu[E-V(r)]-\frac{\hbar^2\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{r^2}\right\}}\,dr \qquad (3)$$

$$A=\frac{常数}{\sqrt{\left\{2\mu[E-V(r)]-\frac{\hbar^2\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{r^2}\right\}}}.$$

19. (i)对于$V(r)=0$，§5.1题中方程(1)的解是

$$\chi_l(r)=j_l(kr),$$

式中已令$E=\hbar^2k^2/2\mu$。而j_l是一球贝塞耳函数。对于大的r值，我们得

$$\chi_l(r)\longrightarrow\sin\left(kr-\frac{1}{2}l\pi\right).$$

(ii) 利用上题的方程(3)，求得

$$\chi=\frac{常数}{\left\{1-\frac{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{k^2r^2}\right\}^{1/4}}\sin\left\{k\int_{r_1}^{r}dr\sqrt{\left\{1-\frac{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{k^2r^2}\right\}}+\frac{\pi}{4}\right\},$$

(1)

这里 $r_t=\left(l+\frac{1}{2}\right)\Big/k$ 是转折点，相位$\frac{\pi}{4}$来自通常的论据（参考§1.21题）。

对于较大的r，我们从表示式（1）得

$$\chi_l(r)\longrightarrow\sin\left(kr-\frac{1}{2}\pi kr_t+\frac{1}{4}\pi\right)=\sin\left(kr-\frac{1}{2}l\pi\right)$$

这与精确的表示式相同。我们注意到，如果不对上题方程（2）中的$\hbar^2A''/A$进行修正，我们便不能得出这个精确的一致。

20*. 量子化条件为

$$\int_{r_1}^{r_2}\sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E+\frac{e^2}{r}-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{r^2}\right]}\,dr=\left(n_r+\frac{1}{2}\right)\pi,$$

或令$E=-\hbar^2k^2/2\mu a_B^2$，$a_B=\hbar^2/\mu e^2$，$\rho=r/a_B$，则

$$\kappa\int_{\rho_1}^{\rho_2}\frac{d\rho}{\rho}\sqrt{\{(\rho-\rho_1)(\rho_2-\rho)\}}=\left(n_r+\frac{1}{2}\right)\pi,\qquad(1)$$

式中转折点ρ_1和ρ_2由下面的方程给出：

$$\rho_{1,2}=\kappa^{-2}\left[1\mp\sqrt{\left\{1-\kappa^2\left(l+\frac{1}{2}\right)^2\right\}}\right].\qquad(2)$$

式(1)中的积分可以直接计算，也可以用在复r平面上取围道积分的方法计算（参考 D. ter Haar, *Elements of Hamiltonian Mechanics*, Pergamon, Oxford, 1971, p.138），计算结果是

$$\frac{1}{2}\kappa\rho_1\left[\sqrt{\frac{\rho_2}{\rho_1}}-1\right]^2=\left(n_r+\frac{1}{2}\right)\pi.$$

再利用（2）式，可写出

$$\kappa=\frac{1}{n_r+l+1},$$

由此，我们得

$$E=-\frac{\mu e^4}{2\hbar^2n^2}\qquad n=n_r+l+1.$$

21. 由于有心力场中的简并性，状态数与分立能级的数目不同，因此，我们首先对给定的角动量M来确定能级的个数，这是一个一维问题。且我们可用

$$V_{有效}(r)=V(r)+\frac{M^2}{2\mu r^2}$$

来取代§1.22题方程(1)中的$V(x)$，对于给定的M，状态总数就是

$$\frac{\sqrt{(2\mu)}}{h}\int\left[-V(r)-\frac{M^2}{2\mu r^2}\right]^{1/2}\mathrm{d}r,$$

将这个式子对$M/\hbar$积分，便求得能级总数N（在半经典情况下，这个积分取代对l求和），

$$N=\int\left(\mathrm{d}\frac{M}{\hbar}\right)\sqrt{\frac{2\mu}{h}}\int\left[-V(r)-\frac{M^2}{2\mu r^2}\right]^{1/2}\mathrm{d}r$$

$$=-\frac{\mu}{\pi\hbar^2}\int rV(r)\mathrm{d}r,$$

式中积分遍及$V(r)<0$的所有值。

§6. 粒子在磁场中的运动

1. 若按经典力学来考虑电子的运动，则在均匀磁场中电子的轨迹是一螺旋线，其轴沿磁场方向。在垂直磁场的平面内运动是周期性的，其频率为拉莫尔频率($\omega_L=e\mathscr{H}/2\mu c$)的两倍。考虑量子力学中波包的运动。在磁场中粒子的薛定谔方程可写为

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\Psi+\frac{\hbar}{i}\omega_L\left(x\frac{\partial\Psi}{\partial y}-y\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right)+\frac{1}{2}\mu\omega_L^2(x^2+y^2)\Psi.$$

为了解此问题，变换到转动坐标系中去是方便的：

$$\left.\begin{aligned}x&=x'\cos\omega_L t'-y'\sin\omega_L t'\\y&=x'\sin\omega_L t'+y'\cos\omega_L t'\\z&=z'\\t&=t'\end{aligned}\right\}\qquad(1)$$

$$\Psi(x,y,z,t)=\Psi'(x',y',z',t').$$

于是我们有

$$\frac{\partial}{\partial t'}=\frac{\partial}{\partial t}+\omega_L\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right),\quad\nabla'^2=\nabla^2.$$

采用新变量时薛定谔方程可写为：

$$i\hbar\frac{\partial\Psi'}{\partial t'}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla'^2\Psi'+\frac{1}{2}\mu\omega_L^2(x'^2+y'^2)\Psi'.$$

这个方程的解可以用分离变量x',y',z'的方法得到。函数$\varphi(z')$所满足的方程描述沿z轴的自由运动。确定函数$\psi(x,y,t)$的方程的解为

$$\psi(x,y,t)=\sum A_{nm}\chi_n\left[x'\sqrt{\left(\frac{\mu\omega_L}{\hbar}\right)}\right]\chi_m\left[y'\sqrt{\left(\frac{\mu\omega_L}{\hbar}\right)}\right]\times\exp[-i\omega_L t(n+m+1)].$$

这里x'和y'是由（1）式确定的坐标x、y，和时间的函数，χ_n是谐振子的波函数，系数A_{nm}应这样选择，使满足初始条件。当t经过了一个经典运动周期$T=\pi/\omega_L$后，$\psi(x,y,t)$的表示式只改变符号。的确，这时x'和y'改变了符号，再考虑到振子本征函数的性质

$$\chi_n(-\xi)=(-1)^n\chi_n(\xi),$$

我们就得到

$$\psi(x,y,t+\pi/\omega_L)=\sum A_{nm}(-1)^n\chi_n\left(x'\sqrt{\frac{\mu\omega_L}{\hbar}}\right)$$

$$\times(-1)^m\chi_m\left(y'\sqrt{\frac{\mu\omega_L}{\hbar}}\right)\exp[-i\omega_L t(n+m+1)]$$

$$\times\exp[-i\pi(n+m+1)]=-\psi(x,y,t)$$

因此，在垂直于磁场的平面内，波包的形状将周期性的变化，变化的周期等于粒子在磁场中的经典运动的周期。沿磁场方向，波包的扩散完全和在自由运动时一样。如果取初始波函数为

$$\psi(x,y,0)=\exp\left\{-\frac{\alpha^2}{2}[(x-x_0)^2+(y-y_0)^2]+\frac{ip_{0x}}{\hbar}x+\frac{ip_{0y}}{\hbar}y\right\},$$

我们就可以求得波函数$\psi(x,y,t)$的明显表示式。若令所有的$A_{n-m}=0$（但令$A_{00}=1$），我们发现，这样的波包在xy平面内不扩散，它的重心描绘一条经典轨道。

2. 为了求算符$\hat{v}$，需要取矢量r同哈密顿量对易式，

$$\hat{v}=\frac{1}{\hbar}(\hat{H}r-r\hat{H}),$$

因为

$$\hat{H}=\frac{1}{2\mu}\left(\hat{p}-\frac{e}{c}A\right)^2+V(r),$$

我们得

$$\mu\hat{v}=\left(\hat{p}-\frac{e}{c}A\right).$$

现在我们来求这些算符的对易规则，

$$\hat{v}_x\hat{v}_y-\hat{v}_y\hat{v}_x=\frac{e}{\mu^2c}\left[-(p_xA_y-A_yp_x)+(p_yA_x-A_xp_y)\right]$$

$$=\frac{ie\hbar}{\mu^2c}\left(\frac{\partial A_y}{\partial x}-\frac{\partial A_x}{\partial y}\right)=\frac{ie\hbar}{\mu^2c}\mathscr{H}_z.$$

通过循环置换，可以得到其余两个对易关系.

3. 取z轴沿磁场方向，磁场强度用$\mathscr{H}$表示.

粒子的速度分量满足下列对易规则（见上题）

$$\hat{v}_x\hat{v}_y-\hat{v}_y\hat{v}_x=\frac{i\hbar e}{\mu^2c}\mathscr{H}_z,\quad \hat{v}_y\hat{v}_z-\hat{v}_z\hat{v}_y=0,\quad \hat{v}_z\hat{v}_x-\hat{v}_x\hat{v}_z=0.$$

能量算符等于

$$\hat{H}=\frac{\mu\hat{v}_x^2}{2}+\frac{\mu\hat{v}_y^2}{2}+\frac{\mu\hat{v}_z^2}{2}.$$

我们把$\hat{H}$看成两个对易算符

$$\hat{H}_1=\frac{\mu\hat{v}_x^2}{2}+\frac{\mu\hat{v}_y^2}{2},\quad \hat{H}_2=\frac{\mu\hat{v}_z^2}{2}$$

之和. $\hat{H}$的本征值等于$\hat{H}_1$和$\hat{H}_2$的本征值之和. 让我们先来求$\hat{H}_1$的本征值. 为此，引进新的符号$\hat{v}_x=\alpha\hat{Q}$，$\hat{v}_y=\alpha\hat{P}$，其中$\alpha=\sqrt{(e\hbar\mathscr{H}/\mu^2c)}$. 变量$\hat{Q}$，$\hat{P}$的对易规则为$\hat{P}\hat{Q}-\hat{Q}\hat{P}=-i$，而算符$\hat{H}_1=\hbar(e\mathscr{H}/2\mu c)(\hat{P}^2+\hat{Q}^2)$. 根据§1.8题，$\hat{H}_1$的本征值为

$$E_{1n}=\hbar\frac{e\mathscr{H}}{\mu c}\left(n+\frac{1}{2}\right)\qquad(n=0,1,2,\cdots).$$

$\hat{H}_1$的诸本征值形成一连续谱. 因而，带电粒子在磁场中运动的能量是

$$E_{nv_z}=\hbar\frac{e\mathscr{H}}{\mu c}\left(n+\frac{1}{2}\right)+\frac{\mu\hat{v}_z^2}{2}.$$

4. 取z轴沿磁场方向，x轴沿电场方向. 磁场的矢势取作$A_y=\mathscr{H}x$，$A_x=0$，$A_z=0$的形式. 此时，哈密顿算符可写成

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}_x^2}{2\mu}+\frac{\left(p_y-\frac{e}{c}\mathscr{H}x\right)^2}{2\mu}+\frac{\hat{p}_z^2}{2\mu}-e\mathscr{E}x.$$

引进符号

$$\frac{e\mathscr{H}}{c}x-p_y-\frac{\mu c\mathscr{E}}{\mathscr{H}}=\hat{\pi},$$

则得$\hat{H}$的表示式为

$$H=\frac{p_z^2}{2\mu}+\frac{\hat{\pi}^2}{2\mu}-\frac{p_y c\mathscr{E}}{\mathscr{H}}-\frac{\mu c^2\mathscr{E}^2}{2\mathscr{H}^2}+\frac{p_x^2}{2\mu}.$$

p_x和$\hat{\pi}$之间的对易关系是

$$p_x\hat{\pi}-\hat{\pi}p_x=-\mathrm{i}\frac{\hbar e\mathscr{H}}{c}.$$

由此求得算符 $\hat{H}_1=\frac{p_x^2}{2\mu}+\frac{\hat{\pi}^2}{2\mu}$的本征值为

$$E_{1n\hbar}=\frac{e\mathscr{H}}{\mu c}\left(n+\frac{1}{2}\right).$$

这和振动频率二倍于拉莫尔频率的振子的能级相同。因为哈密顿算符后面两项中的p_y和p_z，与$\hat{H}_1$对易，故算符

$$\hat{H}_2=\frac{p_z^2}{2\mu}-\frac{p_y c\mathscr{E}}{\mathscr{H}}-\frac{\mu c^2\mathscr{E}^2}{\mathscr{H}^2}$$

可以与$\hat{H}_1$同时对角化。

于是，粒子的能谱是

$$E_{np_yp_z}=\hbar\frac{e\mathscr{H}}{\mu c}\left(n+\frac{1}{2}\right)+\frac{p_z^2}{2\mu}+\frac{p_y c\mathscr{E}}{\mathscr{H}}-\frac{\mu c^2\mathscr{E}^2}{\mathscr{H}^2}.$$

将此结果和前题的结果比较表明，电场解除了仅有磁场存在时所出现的简并，亦即在电场中能级依赖于三个量子数。

5. $\psi_{np_yp}(x,y,z)$

$$=\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p_y y+p_z z)\right]\exp\left[-\frac{e\mathscr{H}}{2\hbar c}\left(x-\frac{cp_y}{e\mathscr{H}}-\frac{\mu c^2\mathscr{E}^2}{\mathscr{H}^2}\right)^2\right]$$

$$\times H_n\left[\sqrt{\left(\frac{e\mathscr{H}}{c\hbar}\right)}\left(x-\frac{cp_y}{e\mathscr{H}}-\frac{\mu c\mathscr{E}}{e\mathscr{H}^2}\right)\right].$$

6. $E_{nmk}=\hbar\sqrt{(\omega_1^2+\omega_0^2)}(2n+|m|+1)$

$$+m\hbar\omega_L+\hbar\omega_0\left(k+\frac{1}{2}\right),$$

其中

$$\omega_L=\frac{e\mathscr{H}}{2\mu c},n=0,1,2,\cdots,m=0,\pm1,\pm2,\cdots,k=0,1,2,\cdots.$$

7. $$x(t)=\left(\frac{i\hbar}{\mu\omega}\frac{\partial}{\partial y}+\frac{x}{2}\right)\cos\omega t+\left(-\frac{i\hbar}{\mu\omega}\frac{\partial}{\partial x}+\frac{y}{2}\right)\sin\omega t+\left(-\frac{i\hbar}{\mu\omega}\frac{\partial}{\partial y}+\frac{x}{2}\right),$$

$$y(t)=\left(-\frac{i\hbar}{\mu\omega}\frac{\partial}{\partial y}-\frac{x}{2}\right)\sin\omega t+\left(-\frac{i\hbar}{\mu\omega}\frac{\partial}{\partial x}+\frac{y}{2}\right)\cos\omega t+\left(\frac{i\hbar}{\mu\omega}\frac{\partial}{\partial x}+\frac{y}{2}\right),$$

其中$\omega=eH/\mu c$（为拉莫尔进动频率的两倍）.

8*. 在柱坐标ρ,φ,z中，薛定谔方程的形式为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left\{\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial\psi}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right\}+\frac{ie\hbar}{2\mu c}\mathscr{H}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}+\frac{e^2\mathscr{H}^2}{8\mu c^2}\rho^2\psi=E\psi.$$

我们把它的解写成

$$\psi(\rho,\varphi,z)=\frac{1}{\sqrt{(2\pi)}}R(\rho)\exp(ik_zz)\exp(im\varphi).$$

引进γ和β：

$$\gamma=\frac{e\mathscr{H}}{2c\hbar},\quad\beta=\frac{2\mu E}{\hbar^2}-k_z^2.$$

在确定径向函数$R(\rho)$的方程

$$R''+\frac{1}{\rho}R'+\left(\beta-\gamma^2\rho^2-2\gamma m-\frac{m^2}{\rho^2}\right)R=0$$

中，引进新的独立变量$\xi=\gamma\rho^2$，则得

$$\xi R''+R'+\left(-\frac{\xi}{4}+\lambda-\frac{m^2}{4\xi}\right)R=0,\qquad(1)$$

其中

$$\lambda=\frac{p}{4\gamma}-\frac{m}{2}.$$

当$\xi\to\infty$时，待求函数的行为和$\exp(-\xi/2)$相似，而当ξ很小时，它正比于$\xi^{|m|/2}$。我们可将微分方程（1）的解写成如下形式：

$$R=\exp(-\xi/2)\xi^{|m|/2}w(\xi).$$

函数$w(\xi)$可由方程

$$\xi w''+(1+|m|-\xi)w'+\left(\lambda-\frac{|m|+1}{2}\right)w=0$$

得出，这个方程的解是一个合流超几何函数

$$w=F\left[-\left(\lambda-\frac{|m|+1}{2}\right),\ |m|+1,\xi\right].$$

为了使波函数有限，必须使 $\lambda-\frac{1}{2}(|m|+1)$ 这个量等于非负的整数n。因此，能级由下式确定：

$$E=\hbar\frac{e\mathscr{H}}{\mu c}\left(n+\frac{|m|}{2}+\frac{m}{2}+\frac{1}{2}\right)+\frac{\hbar^2k_z^2}{2\mu}.$$

9. 在柱坐标中，我们有

$$J_\rho=0$$

$$J_\varphi=\left(\frac{e\hbar m}{\mu\rho}-\frac{e^2\mathscr{H}}{2\mu c}\rho\right)|\psi_{nmk_z}|^2,$$

$$J_z=\frac{e\hbar k_z}{\mu}|\psi_{nmk_z}|^2.$$

10 径向波函数R的方程变为

$$u''+\left[\frac{2\mu}{\hbar^2}E-k_z^2-\frac{1}{\rho^2}\left(m+\frac{e\mathscr{H}}{2\hbar c}\rho^2\right)^2\right]u=0,$$

其中 $u=\sqrt{\rho}R$，$m^2-\frac{1}{4}$被换成 m^2［这一替换与 $l(l+1)\to\left(l+\frac{1}{2}\right)^2$ 的替换很相似，因而可以采用解§5.18题时所指出的方法］。

表达式

$$V_{有效}(\rho)=\frac{\hbar^2}{2\mu\rho^2}\left(m+\frac{e\mathscr{H}}{2\hbar c}\rho^2\right)^2$$

可看作一维运动时的有效势能。

根据量子化条件

$$\int_{\rho_1}^{\rho_2}\sqrt{\left[\frac{2\mu}{\hbar^2}E-k_z^2-\frac{1}{\rho^2}\left(m+\frac{e\mathscr{H}}{2\hbar c}\rho^2\right)^2\right]}\,\mathrm{d}\rho=\pi\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

我们得到能谱

$$E-\frac{\hbar^2k_z^2}{2\mu}=\frac{e\hbar\mathscr{H}}{\mu c}\left(n+\frac{|m|}{2}+\frac{m}{2}+\frac{1}{2}\right).$$

由$V_{有效}(\rho)$的极小值算得的能量

$$E'=\frac{e\hbar\mathscr{H}}{\mu c}\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

乃是径向运动的能量，而能量

$$E''=\frac{e\hbar\mathscr{H}}{2\mu c}(m+|m|)$$

则相当于转动能量。当满足条件$E'\ll E''$或 $n\ll(m+|m|)/2$ 时，才能过渡到经典的圆轨道。显然，这个条件只有当 m为正数时才能满足，所以可将它写成$n\ll m$。

11. 令根号下的等式等于零，则对于$m>0$，我们得到

$$\rho_{1,2}=\sqrt{\left(\frac{2\hbar c}{e\mathscr{H}}\right)}\left[\sqrt{\left(n+m+\frac{1}{2}\right)}\pm\sqrt{\left(n+\frac{1}{2}\right)}\right].$$

12. $\Delta\rho\sim\sqrt{\left(\frac{\hbar c}{e\mathscr{H}}\right)}$.

14. 泡利方程的形式为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}=\hat{H}_0\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}-\mu_0(\hat{\sigma}\cdot\mathscr{H})\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix},$$

其中$\hat{H}_0=(1/2\mu)[\hat{p}-(e/c)A]^2+eV$，而$\mu_0$是粒子的磁矩。我们把波函数写成下面的形式，

$$\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}=\varphi(x,y,z,t)\begin{pmatrix}s_1(t)\\ s_2(t)\end{pmatrix}.$$

其中函数φ是方程

$$i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t}=\hat{H}_0\varphi$$

的解。于是，我们得到关于自旋函数$\begin{pmatrix}s_1\\ s_2\end{pmatrix}$的方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}s_1\\ s_2\end{pmatrix}=-\mu_0(\hat{\sigma}\cdot\mathscr{H})\begin{pmatrix}s_1\\ s_2\end{pmatrix}.$$

15. 因为$\mathscr{H}_x=\mathscr{H}_y=0$，$\mathscr{H}_z=\mathscr{H}(t)$，我们有

$$i\hbar\frac{\partial s_1}{\partial t}=-\mu_0\mathscr{H}(t)s_1,$$

$$i\hbar\frac{\partial s_2}{\partial t}=\mu_0\mathscr{H}(t)s_2.$$

这两个方程的解为

$$s_1=c_1\exp\left[-\frac{i\mu_0}{\hbar}\int_0^t\mathscr{H}(t)\mathrm{d}t\right],$$

$$s_2=c_2\exp\left[-\frac{i\mu_0}{\hbar}\int_0^t\mathscr{H}(t)\mathrm{d}t\right].$$

常数c_1和c_2可从初始条件求得，

$$c_1=\exp(-i\alpha)\cos\delta,\quad c_2=\exp(i\alpha)\sin\delta.$$

从自旋函数s_1和s_2的形式可以得出结论：自旋在z轴上的正向或反向投影的几率不随时间改变。自旋的x分量的平均值由下列方程得出：

$$\bar{s}_x=\frac{\hbar}{2}\sin2\delta\cdot\cos\left[\frac{2\mu_0}{\hbar}\int_0^t\mathscr{H}(t)\mathrm{d}t-2\alpha\right].$$

相似地可得到

$$\bar{s}_y=-\frac{\hbar}{2}\sin 2\delta\cdot\sin\left[\frac{2\mu_0}{\hbar}\int_0^t\mathscr{H}(t)dt-2\alpha\right].$$

自旋分量等于$+\frac{1}{2}$的方向，由极角$\Theta=2\delta$，$\Phi=2\left[\alpha-\frac{\mu_0}{\hbar}\int_0^t\mathscr{H}(t)dt\right]$来表示．因此，这个方向随着时间而描绘出一个锥面．在恒定磁场强度的情况下，“自旋所沿的”直线，将以频率$2\mu_0\mathscr{H}/\hbar$绕磁场方向匀速旋转．

16．沿任意方向极化的入射粒子束的态，总可以认为是两个态的叠加，一个态是$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$，自旋方向沿着$+z$轴，另一个态是$\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$，自旋方向则与之相反．我们首先讨论入射束中中子自旋方向沿z轴的情形．这时，入射波、反射波和折射波分别有下面的形式：$A\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\exp[i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})]$，$B\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\exp[i(\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{r})]$，$C\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\exp[i(\boldsymbol{k}_2\cdot\boldsymbol{r})]$．$\boldsymbol{k}$，$\boldsymbol{k}_1$，$\boldsymbol{k}_2$诸量与中子的总能量$E$和磁矩$\mu_0$之间的关系为

$$k=\frac{p}{\hbar},\quad\frac{\hbar^2k^2}{2\mu}=E,\quad\frac{\hbar^2k_1^2}{2\mu}=E,\quad\frac{\hbar^2k_2^2}{2\mu}=E+\mu_0\mathscr{H}.$$

根据波函数及其对x的微商在散射平面($x=0$)上的连续性条件，可得

$$k_y=k_{1y}=k_{2y},\quad k_z=k_{1z}=k_{2z},$$
$$A+B=C,$$
$$k_zA+k_{1z}B=k_{2z}C.$$

从这些关系式可导出$k_{1z}=-k_z$，即入射角φ等于反射角φ_1．为简单起见，令$k_y=0$．解这些方程，我们有

$$\frac{B}{A}=\frac{k_z-k_{2z}}{k_z+k_{2z}},\quad\frac{C}{A}=\frac{2k_z}{k_z+k_{2z}},$$

$$k_{2z}=k_z\sqrt{\left(1+\frac{2\mu}{\hbar^2k_z^2}\mu_0\mathscr{H}\right)}.$$

因此，反射系数R等于

$$R=\left(\frac{B}{A}\right)^2=\left(\frac{k_z-k_{2z}}{k_z+k_{2z}}\right)^2.$$

如果中子自旋的取向沿着$-z$ 轴，则在这种情况下得

$$k_{2z}=k_z\sqrt{\left(1-\frac{2\mu}{\hbar^2k_z^2}\mu_0\mathscr{H}\right)},$$

其他的结果不变。因为中子的μ_0是负的，所以折射角$\varphi_{2\uparrow}>\varphi>\varphi_{2\downarrow}$（见图38）。

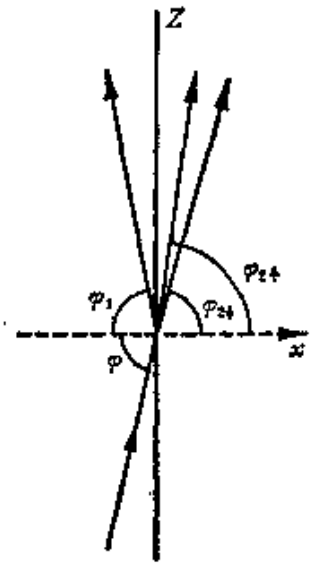


图 35

在中子自旋任意取向的情况下，在$x>0$的区域中波函数可写为

$$C_\uparrow\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\exp\left[-i(\boldsymbol{k}_\uparrow\cdot\boldsymbol{r})\right]+C_\downarrow\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\exp\left[i(\boldsymbol{k}_\downarrow\cdot\boldsymbol{r})\right],$$

其中$C_\uparrow$和$C_\downarrow$是初始自旋态按态$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$和$\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$展开的展开系数。简单的估计表明，甚至当$\mathscr{H}\sim10^4$奥斯特时，也仅对很慢的中子（热中子）($\lambda\sim1$Å)，而且入射角$\varphi$与$\frac{\pi}{2}$仅差几分之一度时，才会发生显著的反射。

17．在z表象中，自旋函数$\begin{pmatrix}s_1\\s_2\end{pmatrix}$的薛定谔方程可写为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}s_1\\s_2\end{pmatrix}=-\mu\begin{pmatrix}\mathscr{H}_z & \mathscr{H}_x-i\mathscr{H}_y\\ \mathscr{H}_x+i\mathscr{H}_y & -\mathscr{H}_z\end{pmatrix}\begin{pmatrix}s_1\\s_2\end{pmatrix},$$

式中μ是粒子的磁矩。

引进符号

$$\frac{\mu}{\hbar}\mathscr{H}\cos\theta=a,\quad\frac{\mu}{\hbar}\mathscr{H}\sin\theta=b.$$

用这种符号时，确定分量s_1和s_2的方程可写为

$$\frac{ds_1}{dt}=ias_1+ib\exp(-i\omega t)s_2$$

$$\frac{ds_2}{dt}=ib\exp(i\omega t)s_1-ias_2.$$

这个方程组的解为

$$s_1=A\exp(ip_1t)+B\exp(ip_2t)$$

$$s_2=\exp(i\omega t)\left[\frac{-a+p_1}{b}A\exp(ip_1t)\right.$$

$$\left.+\frac{-a+p_2}{b}B\exp(ip_2t)\right]$$

其中

$$p_1=\sqrt{\left(\frac{\omega^2}{4}+a^2+b^2+\omega a\right)}-\frac{\omega}{2},$$

$$p_2=-\sqrt{\left(\frac{\omega^2}{4}+a^2+b^2+\omega a\right)}-\frac{\omega}{2}.$$

A和B这两个量由初始条件和归一化条件 $|s_1|^2+|s_2|^2=1$ 确定。经过简单计算后，求得跃迁几率

$$P\left(\frac{1}{2},\ -\frac{1}{2}\right)=\frac{\sin^2\theta}{1+q^2-2q\cos\theta}\sin^2$$

$$\left[\frac{t}{2}\omega(1-2q\cos\theta+q^2)^{1/2}\right],$$

其中q是拉莫尔进动频率与转动磁场的频率之比

$$q=-\frac{2\mu\mathscr{H}}{\hbar\omega}=\frac{\omega_L}{\omega}.$$

如果磁场沿进动方向转动，则q是正的；如果沿相反方向转动，则q是负的。

若θ很小，即$\sqrt{(\mathscr{H}_x^2+\mathscr{H}_y^2)}/\mathscr{H}_z\ll 1$，则跃迁几率近似地等于

$$P\left(\frac{1}{2},\ -\frac{1}{2}\right)=\frac{\theta^2}{(1-q)^2+q\theta^2}\sin^2$$

$$\left\{\frac{t}{2}\omega[(1-q)^2+q\theta^2]^{1/2}\right\}.$$

由此式知，共振($\omega=\omega_L$)时，亦即$q=+1$时，磁矩相对于磁场重新取向的几率等于 $P\left(\frac{1}{2},\ -\frac{1}{2}\right)\approx\sin^2\frac{t\omega}{2}\theta$，对某些$t$值，它实际上可等于1。

在所讨论的情况下，如果改变磁场的转动方向，或者改变σ_z的符号，可求得跃迁几率为

$$P\left(\frac{1}{2},\ -\frac{1}{2}\right)=\frac{\theta^2}{4}\sin^2\omega t,$$

它远小于1。根据这个明显的定性的差异，可以确定粒子磁矩的符号。

19. $\tau=\dfrac{\pi\hbar}{4\mu_0 H}(4k+1)$，$k=0,\ 1,\ 2,\ \cdots$

20. $\sin^2\left\{\dfrac{\mu_0 H}{\gamma\hbar}(1-e^{-\gamma t})\right\}$，式中$\mu_0$是粒子的磁矩。

21.① (a) $x(t)=\dfrac{p_x}{m}t+x,$

$$y(t)=-\frac{\mu k}{2m}t^2\sigma_y+\frac{p_y}{m}t+y,$$

$$z(t)=\frac{\mu k}{2m}t^2\sigma_z+\frac{p_z}{m}t+z.$$

(b) $\bar{z}(t)=(\bar{z})_0+\dfrac{\mu k}{2m}t^2(\alpha\alpha^*-\beta\beta^*),$

$$\bar{y}(t)=(\bar{y})_0-\frac{\mu k}{2m}t^2(i\beta^*\alpha-i\beta\alpha^*),$$

$$\bar{x}(t)=(\bar{x})_0+\frac{p_0}{m}t,$$

$$(\overline{\Delta z})_t^2=\overline{(\Delta z)^2}+\frac{\mu^2k^2}{4m^2}t^4[1-(\alpha\alpha^*-\beta\beta^*)^2]$$

$$+\frac{\hbar^2t^2}{m^2}\int\left(\frac{\partial\varphi}{\partial z}\right)^2d\tau,$$

$$(\overline{\Delta y})_t^2=(\overline{\Delta y})_t^2+\frac{\mu^2k^2}{4m^2}t^4[1-(i\beta^*\alpha-i\beta\alpha^*)^2]$$

① 这里，我们用m表示粒子的质量，以区别与磁矩μ之名。

$$+\frac{\hbar^2t^2}{m^2}\int\left(\frac{\partial\varphi}{\partial y}\right)^2\mathrm{d}\tau,$$

$$\overline{(\Delta x)_t^2}=\overline{(\Delta x)_0^2}+\frac{\hbar^2t^2}{m^2}\int\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)^2\mathrm{d}\tau.$$

注意：我们可以讨论，譬如说，这样一个粒子系，其自旋的z分量，在$t=0$时具有确定值$+\frac{1}{2}$，即$\alpha=1$，$\beta=0$。由得到的结果容易看出，当这些粒子在非均匀磁场中运动时，如果在它们的路径上放上一个屏，则这些粒子将在屏上形成两个斑点。这两个斑点的z坐标将同号，而y坐标则反号。

22.（i） 对于$t>0$，二分量波函数的运动方程（我们有$\hat{J}=\frac{1}{2}\hat{\sigma}$）为

$$\frac{1}{2}g\mu_B\hat{\sigma}_x\mathscr{H}\psi=i\hbar\dot{\psi}$$

或

$$-i\omega_0\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\dot{a}\\\dot{b}\end{pmatrix},\qquad(1)$$

其中

$$\omega_0=g\mu_B\mathscr{H}/2\hbar.$$

由(1)式，我们得

$$a=\cos\omega_0t,\qquad b=-i\sin\omega_0t.$$

(ii) $\langle\hat{J}_x\rangle=0,\langle\hat{J}_y\rangle=-\frac{1}{2}\sin2\omega_0t,\langle\hat{J}_z\rangle=\frac{1}{2}\cos2\omega_0t.$

(iii) $T\gtrsim\omega_0^{-1}$。

23. 单态能量的本征值是$-3A$。

三重态能量的本征值是$A+\frac{1}{2}g\mu_B\mathscr{H}M_z$，$(M_z=0,\pm1)$。

24.（i）由上题结果，在$\mathscr{H}=0$的情况下，我们见到

$$4A/\hbar=2\times10^5\mathrm{Mc/s}\text{或}A=5\times10^{-17}\mathrm{erg}.$$

(ii) 单量子衰变是不可能的，因为动量不守恒。

二量子衰变意味着，两光子必须反向背道而驰以保持动量守恒。因为光子的角动量是$\hbar$，方向是沿传播方向的，所以两个光子的总角动量必然是0或2。因此，单态可按二光子发射，但对于三重态的衰变则至少要发射三个光子。

(iii) 当磁场为零时，自旋本征函数为（见§4.27题）

$$\psi_{1,1}=\alpha_1\alpha_2,\quad \psi_{1,0}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_1\beta_2+\beta_1\alpha_2),\quad \psi_{1,-1}=\beta_1\beta_2,$$

$$\psi_{0,0}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_1\beta_2-\beta_1\alpha_2),$$

式中$\alpha=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$，$\beta=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$自旋能量为

$$E_{0,0}=-3A,\quad E_{1,0}=E_{1,\pm1}=A.$$

当磁场不为零时，必须解本征值方程

$$\begin{vmatrix} A-\lambda & 0 & 0 & 0\\ 0 & A-\lambda & 0 & 2\mu_B\mathscr{H}\\ 0 & 0 & A-\lambda & 0\\ 0 & 2\mu_B\mathscr{H} & 0 & -3A-\lambda \end{vmatrix}=0$$

有本征值$\lambda_{1,2}=\lambda_{1,\pm1}=A$，$\lambda_{3,4}=-A\pm2[A^2+\mu_B^2\mathscr{H}^2]^{1/2}$，且本征函数是$\psi_{1,\pm1}$和

$$\psi_3=\gamma\psi_{1,0}+[-2+2\sqrt{(1+\gamma^2)}\,]\psi_{0,0}$$
$$\psi_4=[2-2\sqrt{(1+\gamma^2)}\,]\psi_{1,0}+\gamma\psi_{0,0},\qquad (1)$$

其中$\gamma=2\mu_B\mathscr{H}/A$。

(iv) 磁场的存在，将导致单态和三重态的混合［见(iii)］，从而减小三重态的寿命。

对于给定的$\mathscr{H}$值，为了求寿命τ，我们写出

$$\frac{1}{\tau}=\frac{P_1}{\tau_1}+\frac{P_3}{\tau_3},\qquad (2)$$

式中P_1和P_3是体系处于单态或三重态的几率，这体系最初当$\mathscr{H}=0$时处于三重态。因为，当$\mathscr{H}=0$时，三个态$\psi_{1,0}$，$\psi_{1,\pm1}$的几率相

等，又因为$\mathscr{H}\neq 0$时，单态混入ψ_{10}的比例是［见（1）式］

$$[-2+2\sqrt{(1+\gamma^2)}\ ]^2/\gamma^2,$$

所以我们求得

$$P_3=1-\frac{4[\sqrt{(1+\gamma^2)}-1]^2}{3\gamma^2},$$

$$P_1=\frac{4[-1+\sqrt{(1+\gamma^2)}\ ]^2}{3\gamma^2}.$$

因为$\tau_1=10^{-10}$s，$\tau_3=10^{-7}$s以及$A=5\times10^{-17}$erg，从（2）式求得使τ减少到10^{-8}s的$\mathscr{H}$值：$\mathscr{H}\sim400$奥斯特。

25* 我们用极角θ，φ来表征磁场的方向。θ，φ都是时间的函数。中性粒子的哈密顿算符可写为

$$\hat{H}=-\mu\mathscr{H}(\hat{J}_x\sin\theta\cos\varphi+\hat{J}_y\sin\theta\ \sin\varphi+\hat{J}_z\cos\theta),$$

其中$\mathscr{H}$是磁场强度的绝对值。用$\hat{J}_\xi$表示沿磁场方向的角动量算符：

$$\hat{J}_\xi=\hat{J}_x\sin\theta\cos\varphi+\hat{J}_y\sin\theta\sin\varphi+\hat{J}_z\cos\theta,$$

并引入算符$\hat{J}_\xi$的本征函数$\psi_m(t)$，即

$$\hat{J}_\xi\psi_m(t)=m\psi_m(t).$$

我们将找出薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi$$

的如下形式的解：

$$\psi=\Sigma a_m(t)\psi_m(t).$$

我们已知（见§4.19题）

$$\psi_m(t)=\exp(-i\hat{J}_z\varphi)\exp(-i\hat{J}_y\theta)\psi_m^{(0)},$$

其中$\psi_m^{(0)}$满足关系式

$$\hat{J}_z\psi_m^{(0)}=m\psi_m^{(0)}.$$

我们首先来计算$\dot{\psi}_m(t)$。利用关系式

$$\exp(i\hat{J}_y\theta)\hat{J}_z\exp(-i\hat{J}_y\theta)=\hat{J}_z\cos\theta-\hat{J}_x\sin\theta,$$

$$\hat{J}_x\psi_m^{(0)}=\frac{1}{2}\sqrt{[(j+m)(j-m+1)]}\ \psi_{m-1}^{(0)}+$$

$$+\frac{1}{2}\sqrt{[(j+m+1)(j-m)]}\,\psi^{(0)}_{m+1}\,,$$

$$J_y\psi^{(0)}_m=\frac{1}{2}\sqrt{[(j+m)(j-m+1)]}\,\psi^{(0)}_{m-1}$$

$$-\frac{i}{2}\sqrt{[(j+m+1)(j-m)]}\,\psi^{(0)}_{m+1}\,.$$

我们有

$$\dot{\psi}_m(t)=(-i\dot{\varphi}m\cos\theta)\psi_m(t)$$

$$+\frac{1}{2}\sqrt{[(j+m+1)(j-m)]}(i\dot{\varphi}\sin\theta-\dot{\theta})\psi_{m+1}(t)$$

$$+\frac{1}{2}\sqrt{[(j+m)(j-m+1)]}(i\dot{\varphi}\sin\theta+\dot{\theta})\psi_{m-1}(t)\,.$$

将这个$\dot{\psi}_m(t)$代入下列表示式：

$$i\hbar\sum_m\{\psi_m(t)\dot{a}_m(t)+a_m(t)\dot{\psi}_m(t)\}$$

$$=-\mu\mathscr{H}\sum_m ma_m(t)\psi_m(t)\,,$$

我们得到确定系数a_m随时间变化的方程组

$$i\hbar\frac{da_m}{dt}+m\mu\mathscr{H}a_m=-m\hbar\dot{\varphi}\cos\theta a_m$$

$$+\frac{1}{2}\hbar(\dot{\varphi}\sin\theta+i\dot{\theta})\sqrt{[(j+m)(j-m+1)]}\,a_{m-1}$$

$$+\frac{1}{2}\hbar(\dot{\varphi}\sin\theta-i\dot{\theta})\sqrt{[(j-m)(j+m+1)]}\,a_{m+1}\,.$$

如果

$$\dot{\varphi}\ll\frac{\mu\mathscr{H}}{\hbar}\,,\qquad\dot{\theta}\ll\frac{\mu\mathscr{H}}{\hbar}\,,$$

即磁场方向变化的角速度比进动频率小得多，则可略去方程组右边的项，于是得到

$$a_m \sim \exp\left(-i\frac{m\mu\mathscr{H}}{\hbar}t\right).$$

在这种情况中，角动量分量取不同值的几率，不随时间改变.

26. 若将哈密顿量写成如下形式

$$\hat{H}=\frac{1}{2\mu}\left(\hat{p}-\frac{e}{c}\hat{A}\right)\left(\hat{p}-\frac{e}{c}\hat{A}\right),$$

容易证实，$\hat{H}$和$\hat{H}'$相同的条件是：矢量算符$\hat{\boldsymbol{p}}\equiv\frac{\hbar}{i}\nabla$和$\hat{\boldsymbol{A}}(x,y,z)$的相同分量是对易的，亦即

$$(\nabla\cdot\boldsymbol{A})\equiv\mathrm{div}\boldsymbol{A}=0.$$

27 对于矢势，我们采用 $A_\varphi=\frac{1}{2}$，$A_\rho=A_z=0$的规范（ρ，φ和z是柱坐标；参考§6.8题），得哈密顿量

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial\psi}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right)$$

$$-\frac{ie\hbar}{2\mu c}\mathscr{H}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}+\frac{e^2\mathscr{H}^2}{8\mu c^2}\rho^2\psi=E\psi,$$

对于一个被限制在沿$\rho=a$的圆周上运动的粒子，它变为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu a^2}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\varphi^2}-\frac{ie\hbar}{2\mu c}\mathscr{H}\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}\varphi}+\frac{e^2\mathscr{H}^2}{8\mu c^2}a^2\psi=E\psi.$$

此方程的解为

$$\psi=\exp(im\varphi)\qquad(m=0,\ \pm1,\ \pm2,\ \cdots)$$

相应的能量本征值为

$$E_m=\frac{1}{2\mu}\left[\frac{m\hbar}{a}+\frac{ea\mathscr{H}}{2c}\right]^2.$$

我们还看到，基态能量作为$\mathscr{H}$的函数由下式给出：

$$E_{基}=\frac{1}{2\mu}\left(\frac{m\hbar}{a}+\frac{ea\mathscr{H}}{2c}\right)^2,$$

$$-\frac{ea^2\mathscr{H}}{2\hbar c}-\frac{1}{2}\leqslant m\leqslant-\frac{ea^2\mathscr{H}}{2\hbar c}+\frac{1}{2}.$$

这意味着$E_{基}$是$\mathscr{H}$的周期函数，周期为$2\hbar c/ea^2$，并且在$\mathscr{H}=(2m+1)\hbar c/ea^2$处斜率不连续。

§7. 原 子

1. 由给定的不等式，我们得到

$$\int|\nabla\psi|^2\mathrm{d}\tau+z\int(\nabla|\psi|^2\cdot\nabla r)\mathrm{d}\tau+z^2\int(\nabla r)^2|\psi|^2\mathrm{d}\tau\geqslant 0.$$

对第二项分部积分，并利用$(\nabla r)^2=1$和$\nabla^2 r=2/r$，我们有

$$\frac{1}{2}\int|\nabla\psi|^2\mathrm{d}\tau-\int\frac{Z}{r}|\psi|^2\mathrm{d}\tau\geqslant-\frac{Z^2}{2}\int|\psi|^2\mathrm{d}\tau.$$

不等式左边是哈密顿算符（采用$e=\hbar=\mu=1$单位制）$\hat{H}=-\frac{1}{2}\nabla^2-Z/r$在态$\psi$中的平均值。在波函数为$\psi_0$的态中，能量可达到其下限$-\frac{Z^2}{2}$，而$\psi_0$满足下列一阶微分方程：

$$\nabla\psi_0+Z\psi_0\nabla r=0.$$

由此得出

$$\psi_0\sim\exp(-Zr).$$

4. 首先，我们根据普遍公式

$$\varphi(p)=\frac{1}{2(2\pi\hbar)^{3/2}}\iiint\exp[-\mathrm{i}(p\cdot r)/\hbar]\psi(r)\mathrm{d}\tau.$$

来计算动量表象中的波函数。对于1s态，我们求得

$$\varphi_{1s}(p)=\frac{1}{\pi}\left(\frac{2a}{\hbar}\right)^{3/2}\frac{1}{[(p^2a^2/\hbar^2)+1]^2}.$$

类似地，对于2s态我们求得

$$\varphi_{2s}(p)=\frac{1}{2\pi}\left(\frac{2a}{\hbar}\right)^{3/2}\frac{\frac{p^2a^2}{\hbar^2}-\frac{1}{4}}{\left(\frac{p^2a^2}{\hbar^2}+\frac{1}{4}\right)^3}.$$

2p态对应于三个本征函数（$m_z=-1$，0，$+1$）

$$\varphi_{2p}^{(0)}(p)=-\frac{1}{\pi}\left(\frac{a}{\hbar}\right)^{3/2}\frac{p_z a}{\hbar\left[(p^2a^2/\hbar^2)+\frac{1}{4}\right]^3},$$

$$\varphi_{2p}^{(\pm 1)}(p)=-\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left(\frac{a}{\hbar}\right)^{3/2}\frac{(p_x\pm ip_y)a}{\hbar\left[(p^2a^2/\hbar^2)+\frac{1}{4}\right]^3}.$$

利用这些表示式，我们求得归一化的动量分布：

$$w(\boldsymbol{p})=|\varphi(\boldsymbol{p})|^2.$$

5*. 在相对论力学中，哈密顿函数有如下形式

$$H=\sqrt{(\mu^2c^4+p^2c^2)}-\mu c^2+V(r)$$

$$\approx\frac{p^2}{2\mu}+V(r)+H_1,$$

其中

$$H_1=-\frac{p^4}{8\mu^3c^2}.$$

现在将 $\boldsymbol{p}$ 当作算符 $\hat{p}=-i\hbar\nabla$ 而把 H_1 当作小的微扰。于是，在所作的近似中，我们得到薛定谔方程为 $[\hat{p}^2/2\mu+V(r)]\psi=E\psi$，而在态 n、l、m 中，所要求的能量修正为

$$\nabla E_1=-\frac{1}{8\mu^3c^2}\int\psi^*\hat{p}^4\psi\,d\tau$$

$$=-\frac{1}{2\mu c^2}\int\psi^*[E-V(r)]^2\psi\,d\tau$$

$$=\frac{3E^2}{2\mu c^2}-\frac{(\mu c^4/\hbar^2)^2}{n^3\mu c^2(2l+1)}$$

$$=\left[\frac{3}{8n^4}-\frac{1}{(2l+1)n^3}\right]\frac{\mu e^4}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2.$$

7. 在 β 衰变时，氚核转变为 ^{3}He 核。β 衰变对原子中电子的影响主要表现在，在很短的时间 $t(\ll\hbar^3/\mu e^4)$ 内，原子中电子的势能从 $V=-e^2/r$ 变为 $V=-2e^2/r$。可以把时间 t 估计为 β 粒子飞

过原子的时间：

$$t\sim\frac{a_0}{v},$$

其中$a_0=\hbar^2/\mu c^2$，v是β粒子的速度。由于β粒子能量的数量级为几千电子伏，我们求得$t\sim 0.1\hbar^3/\mu e^4$。在这个时间t内，电子的波函数还来不及改变，因为由薛定谔方程可得

$$\delta\psi\sim\frac{e^2}{r}\frac{t}{i\hbar}\psi\ll\psi.$$

将电子的波函数ψ按电子在$Z=2$的场中的本征函数展开，

$$\psi=\sum_n c_n\psi_n+\int c_k\psi_k d^3k$$

展开系数

$$c_n=\int\psi\psi_n d\tau,$$

$$c_k=\int\psi\psi_k d\tau.$$

就确定了激发几率

$$w_n=\Sigma|c_n|^2$$

和电离几率

$$w_{电离}=\int|c_k|^2 d^3k.$$

由于ψ是球对称的，故仅当态n，k为s态($l=0$)时，c_n和c_k才不等于零。

因为

$$R_{n0}^{(s)}=2\left(\frac{Z}{n}\right)^{3/2}\exp(-Zr/n)$$

$$F\left(-n+1,\ 2,\ \frac{2Zr}{n}\right),$$

我们求得

$$c_n=\int_0^\infty R_{n0}^{(Z)}\,R_{10}^{(Z')}r^2\mathrm{d}r$$

$$=\frac{8}{(Z'+Z/n)^3}\left(\frac{ZZ'}{n}\right)^{3/2}$$

$$\cdot F\left(-n+1,\ 3,\ 2,\ \frac{Z}{nZ'+Z}\right).$$

令$Z=2$，$Z'=1$，对于$n=1$，我们得

$$c_1=\frac{16\sqrt{2}}{27},$$

即^{3}He离子处于基态的几率$w_1=|c_1|^2=\left(\frac{8}{9}\right)^3=0.70$. 因而，激发和电离的总几率等于$1-w_1=0.30$. 对于

$$n=2,\qquad c_2=-\frac{1}{2},\qquad w_2=0.25.$$

利用公式

$$F(\alpha,\beta,\gamma,x)=(1-x)^{\gamma-\alpha-\beta}F(\gamma-\alpha,\gamma-\beta,\gamma,x)$$

我们求得

$$w_n=|c_n|^2\frac{2^9n^5(n-2)^{2n-4}}{(n+2)^{2n+4}}.$$

用这个公式求得头几个能级的激发几率之值为

$$w_1=\left(\frac{8}{9}\right)^5,\ w_2=\frac{1}{4},\ w_3=\frac{2^9\times3^5}{5^{10}}\approx1.3\%,$$

$$w_4=\frac{2^{23}}{6^{12}}\approx0.39\%.$$

8. 设电子处于角动量的z分量具有完全确定值m的定态中. 这种态的波函数为

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)=R_{nl}(r)P_l^{(m)}(\cos\theta)\exp(\mathrm{i}m\varphi).$$

在球坐标系r,θ,φ中，电子处于态ψ_{nlm}时，电流密度具有下面的形式

$$J_r=J_\theta=0,$$

$$J_\varphi=-\frac{|e|\hbar m}{\mu r\sin\theta}|\psi_{nlm}|^2.$$

显然，磁场强度矢量的方向将沿 z 轴，强度为$\mathrm{d}J$的环形电流，在O点（见图39）产生一磁场，其强度等于

$$\mathrm{d}\mathscr{H}_z=\frac{\mathrm{d}J}{rc}2\pi\sin^2\theta;$$

由于 $\mathrm{d}J=J_\varphi r\,\mathrm{d}\theta\mathrm{d}r$，所以

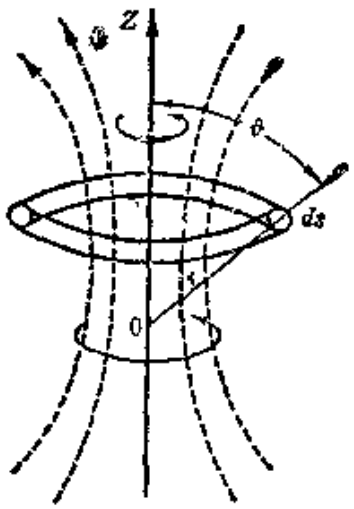


图 39

$$\mathscr{H}_z=-\frac{2\pi|e|\hbar m}{\mu c}\int_0^\infty\frac{R^2}{r}\mathrm{d}r\int_0^\pi\left|P_l^{(m)}\right|^2\sin\theta\mathrm{d}\theta$$

$$=-\frac{m|e|\hbar}{\mu c}\int_0^\infty\frac{R^2}{r}\mathrm{d}r.$$

这个结果也可用别的方法得到：从电动力学知道，运动电荷产生的磁场强度为（这里忽略了推迟效应）

$$\mathscr{H}=\frac{e}{\mu c}\frac{1}{r^3}\left[\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}\right]=\frac{e}{\mu c}\frac{1}{r^3}\boldsymbol{l},$$

其中$\boldsymbol{r}$是由观察点出发的径矢，$\boldsymbol{l}$是角动量。

在量子论中，为了求得磁场强度的平均值，必须计算下列积分：

$$\bar{\mathscr{H}}_z=-\frac{|e|\hbar}{\mu c}\int\psi^*\frac{l_z}{r^3}\psi\mathrm{d}\tau;$$

因为 $l_z\psi=m\psi$，所以

$$\bar{\mathscr{H}}_z=-m\frac{|e|\hbar}{\mu c}\cdot\overline{\frac{1}{r^3}}$$

$$=-m\frac{|e|\hbar}{\mu c}\left(\frac{\mu e^2}{\hbar^2}\right)^3\frac{1}{n^3l\left(l+\frac{1}{2}\right)(l+1)}.$$

在我们的情形下，由于

$$\int\psi^*_{nlm}\hat{l}_x\psi_{nlm}\mathrm{d}\tau=\int\psi^*_{nlm}\hat{l}_z\psi_{nlm}\mathrm{d}\tau=0$$

所以$\mathscr{H}_x$，$\mathscr{H}_y$的平均值等于零．对于$2p$态($m=1$)，我们有：

$$\bar{\mathscr{H}}_z=-\frac{1}{12}\frac{|e|\hbar}{2\mu c}\left(\frac{\mu e^4}{\hbar^2}\right)^3$$，即$\bar{\mathscr{H}}_z\sim10^4$奥斯特。

9　粒子的磁矩为

$$\mathscr{M}=\frac{e}{2\mu c}\int\psi^*\hat{l}\psi\mathrm{d}\tau.$$

在两个粒子的情况下，我们引进一些新的变量：质心坐标（X，Y，Z）和相对坐标(x，y，z)．

用新变量时磁矩的平均值为

$$\bar{\mathscr{M}}_z=\frac{e}{2c}\int\psi^*\left\{\left(\frac{1}{m}+\frac{1}{M}\right)\left(X\frac{\partial}{\partial y}-Y\frac{\partial}{\partial x}\right)\right.$$

$$+\frac{1}{m+M}\left(x\frac{\partial}{\partial Y}-y\frac{\partial}{\partial X}\right)$$

$$\left.+\frac{m-M}{mM}\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)\right\}\psi\mathrm{d}\tau.$$

$\bar{\mathscr{M}}_x$和$\bar{\mathscr{M}}_y$有相似的表示式．

在定态中，坐标x，y，z和动量$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$，$-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}$，$-i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$的平均值为零．因此，上式简化为

$$\bar{\mathscr{M}}_z=-\frac{e}{2mc}\left(1-\frac{m}{M}\right)\left\{\psi^*\left[-i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)\right]\psi\mathrm{d}\tau\right.$$

在本题中，m是电子的质量，M是核的质量．

10，$\Delta E=0.00844\times2.79\frac{Z^3}{n^3}\mathrm{cm}^{-1}$．

对于氢原子的基态($Z=n=1$)，我们有

$$\Delta E=0.0235\mathrm{cm}^{-1}$$

11* 为了确定能量，必须求出电子所产生的磁场强度．由于电子的轨道运动，在核所在处将产生一磁场，根据毕奥-萨伐尔定律，其强度为

$$\mathscr{H}_l=\frac{1}{c}\frac{[r\times j]}{r^3}$$

其中r是由核指向电子的径矢，$j=-ev$（$-e$是电子的电荷）、v是进动轨道角动量l．于是得

$$\mathscr{H}_l=-\frac{e\hbar}{\mu c}\frac{1}{r^3}l,$$

由于电子除电荷之外还有自旋，所以原子核所在处的总磁场强度为

$$\hat{\mathscr{H}}=\hat{\mathscr{H}}_l+\hat{\mathscr{H}}_s=\frac{e\hbar}{\mu c}\frac{1}{r^3}\left[s-\frac{3(r\cdot s)r}{r^2}-l\right].$$

因此，超精细结构的能量算符可写为

$$w=-\beta(i\cdot\hat{\mathscr{H}}),$$

其中i是核自旋的算符，而$\beta\hat{i}$是核磁矩的算符．我们把w当作小的微扰．未受微扰的态用量子数n，$j\left(j=l+\frac{1}{2},\ j=l-\frac{1}{2}\right)$，$l$来表征（设存在$LS$耦合）．

为了确定超精细结构的能量，必须在量子数为

$$f,\ j,\ l(\hat{f}=\hat{j}+\hat{i})$$

的态中求算符w的平均值．利用公式

$$(\hat{A})^{lm'}_{fm}=\frac{(\hat{f}\cdot\hat{A})^{l}_{f}}{f(f+1)}(\hat{f})^{lm'}_{fm},$$

我们得到

$$(\hat{\mathscr{H}})^{nljm_j'}_{nljm_j}=-\frac{e\hbar}{\mu c}\left(\frac{1}{r^3}\right)^{nljm_j}_{nljm_j}\frac{l(l+1)}{j(j+1)}(\hat{j})^{jm_j'}_{jm_j}.$$

利用这个关系式，容易证明算符w可写成

$$w=-\frac{e\hbar}{\mu c}\beta\frac{1}{r^3}\frac{l(l+1)}{j(j+1)}(\hat{i}\cdot\hat{j}),$$

由此得出，超精细结构的能量 E 由下式确定：

$$E=\frac{c\hbar}{2\mu c}\beta\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle\frac{l(l+1)}{j(j+1)}[f(f+1)-j(j+1)-i(i+1)].$$

于是，我们看到，量子数 n, l, j 所表征的每一个谱项，都由于超精细结构而分裂成 $2i+1$ 个分量（如果 $j>i$）。不同 f 值给出超精细结构多重项的间隔定则。

我们指出，简单地数出在给定同位素的光谱中超精细结构多重态分量的数目，就可以确定核的自旋。图40中画出了钠 D 线的超精细结构。

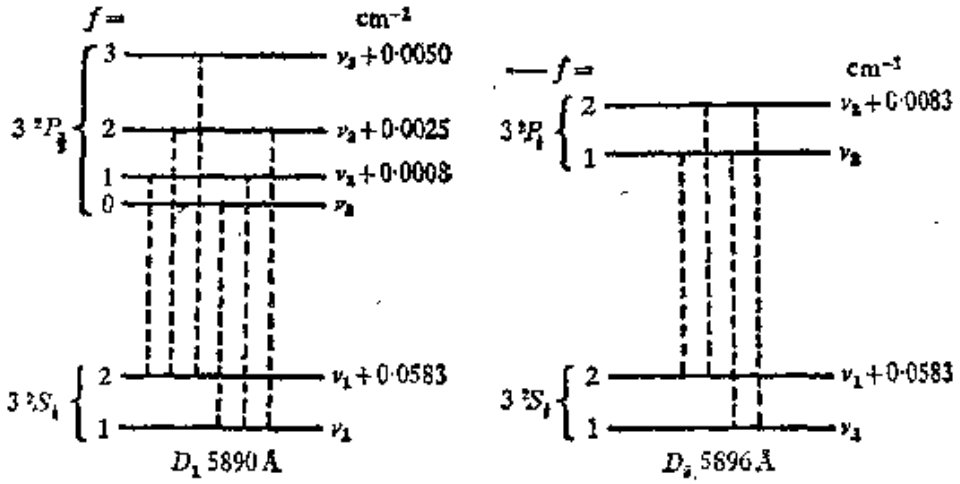


图 40

精细结构，亦即双重线的存在（D_1 线=5890Å，相应于 $3^2P_{\frac{3}{2}}\to 3^2S_{\frac{1}{2}}$ 跃迁，D_2 线=5896Å，相应于 $3^2P_{\frac{1}{2}}\to 3^2S_{\frac{1}{2}}$ 跃迁），是自旋轨道相互作用的结果（见§11.23题）。

12. 我们来讨论核的动能算符 $\hat{T}$。在质心系中

$$\boldsymbol{P}+\Sigma\boldsymbol{p}_i=0$$

式中 $\boldsymbol{P}$ 是核的动量，$\boldsymbol{p}_i$ 是电子的动量，$\hat{T}$ 可写为

$$\hat{T}=\frac{\hat{P}^2}{2M}=\frac{(\Sigma\hat{\boldsymbol{p}}_i)^2}{2M}=\sum\frac{\hat{\boldsymbol{p}}_i^2}{2M}+\sum_{i>k}\frac{(\hat{\boldsymbol{p}}_i\cdot\hat{\boldsymbol{p}}_k)}{M}.$$

由于电子的质量与核质量之比 $m/M\ll 1$，我们可以利用微扰论，把所要求的能级移位写成

$$\Delta E=\int\psi^*\hat{T}\psi\mathrm{d}\tau,$$

式中 ψ 是在质量无限大的固定的原子核的场中电子的波函数。

$\hat{T}$ 的表示式中的第一项与所有电子的动能仅差一因子 m/M。按维里定理，这个动能与原子的能量大小相等符号相反。因此，ΔE 是两项之和：

$$\Delta E=\Delta E_1+\Delta E_2,$$

$$\Delta E_1=-\frac{m}{M}E,\quad \Delta E_2=\frac{1}{M}\int\psi^*\sum_{i>k}(\hat{p}_i\cdot\hat{p}_k)\psi\mathrm{d}\tau.$$

现在我们较详细地讨论 ΔE_2。如果取 ψ 为各个电子的波函数的乘积，则 ΔE_2 变为零，因为束缚态中电子动量的平均值恒等于零。然而，若用适当的方式将这种波函数对称化，则 ΔE_2 将不为零。氦原子的对称化波函数可写为

$$\psi(r_1,r_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(r_1)\psi_2(r_2)\pm\psi_1(r_2)\psi_2(r_1)],$$

其中上面的“+”号表示仲氦（总自旋 $S=0$），下面的“−”号表示正氦（$S=1$）。

将上式代入 ΔE_2 的方程中，我们得到

$$\Delta E_2=\pm\frac{1}{M}\left|\int\psi_1^*\hat{p}\psi_2\mathrm{d}\tau\right|^2.$$

仅当 $\Delta l=0,\ \pm1$ 时，动量的矩阵元才不为零。因此，对于 $1snd$，$1snf$，…态，ΔE_2 等于零。

对于 $1s$ 电子和 np 电子，如果分别取有效电荷为 Z_1 和 Z_2 的类氢波函数

$$\psi_{1s}(r)=\sqrt{\left(\frac{Z_1^3}{\pi}\right)}\exp(-Z_1r),$$

$$\psi_{n,l}(r)=Y_{l,m}\frac{2Z_2^2}{3}\sqrt{\frac{(n^2-1)}{n^2}}\,r\exp(-Z_2r/n)$$

$$\times F\left(-n+2,\ 1;\ \frac{2Z_2r}{n}\right),$$

则得

$$\Delta E_2=\pm\frac{m}{M}\cdot\frac{64}{3}(Z_1Z_2)^5\frac{(Z_1n-Z_2)^{2n-4}}{(Z_1n+Z_2)^{2n+4}}n^3(n^2-1),$$

其中“+”号表示仲氢项 $1snp\ ^1P$，“−”号表示正氢项 $1snp^3\ P$。

13. $^1S_0$，$^3S_1$，$^3P_{0,1,2}$，$^2D_{\frac{3}{2},\frac{5}{2}}$，$^4D_{\frac{1}{2},\frac{3}{2},\frac{5}{2},\frac{7}{2}}$。

14. (a) $^1S_0\ ^3S_1$；
(b) $^1P_1\ ^3P_{0,1,2}$；
(c) $^1D_2\ ^3D_{1,2,3}$；
(d) $^1S_0\ ^3S_1\ ^1P_1$，$^3P_{0,1,2}\ ^1D_2\ ^3D_{1,2,3}$。

15. (a) $^4S\ ^2P\ ^2D$；
(b) $^1S\ ^3P\ ^1D\ ^3F\ ^1G$；
(c) $^2S\ ^2P\ ^4P\ ^2D$。

16. O^3P_2，$Cl^2P_{\frac{3}{2}}$，Fe^5D_4，$Co^4F_{\frac{9}{2}}$，$As^4S_{\frac{3}{2}}$，$La^2D_{\frac{3}{2}}$。

17. K，Zn，C，O 是偶的；B，N，Cl 是奇的。

18. 如果所有三量子数组都不同，则态的数目等于从 $\frac{1}{2}N+M_s$ 中取出的组合数，即

$$g(M_s)=C_N^{\frac{1}{2}N+M_s}.$$

如果有 N' 对全同的三量子数组 n，l 和 m_l，则

$$g(M_s)=C_{N-2N'}^{\frac{1}{2}(N-2N')+M_s}.$$

19. 态的数目等于

$$\frac{N_l(N_l-1)\cdots(N_l-x+1)}{x!},$$

其中 $N_l=2(2l+1)$。

21*. 我们把由单电子问题的函数所组成的反对称波函数

$$\Phi=\frac{1}{N!}\begin{vmatrix}\psi_{n^1 l^1 m_l^1 m_s^1}(\xi_1) & \psi_{n^1 l^1 m_l^1 m_s^1}(\xi_2)\cdots\psi_{n^1 l^1 m_l^1 m_s^1}(\xi_N)\\ \psi_{n^2 l^2 m_l^2 m_s^2}(\xi_1) & \psi_{n^2 l^2 m_l^2 m_s^2}(\xi_2)\cdots\psi_{n^2 l^2 m_l^2 m_s^2}(\xi_N)\\ \cdots\cdots & \cdots\cdots\\ \psi_{n^N l^N m_l^N m_s^N}(\xi_1) & \psi_{n^N l^N m_l^N m_s^N}(\xi_2)\cdots\psi_{n^N l^N m_l^N m_s^N}(\xi_N)\end{vmatrix}$$

简单地记为

$$\Phi(n^1\ l^1\ m_l^1\ m_s^1,\ n^2\ l^2 m_l^2\ m_s^2,\ \cdots,\ n^N\ l^N m_l^N\ m_s^N).$$

我们来讨论对称算符

$$(\hat{L}_x-\mathrm{i}\hat{L}_y)=\sum_{i=1}^{N}(\hat{l}_x^i-\mathrm{i}\hat{l}_y^i)$$

对反对称波函数

$$\Phi(n^1\ l^1\ m_l^1\ m_s^1,\ n^2\ l^2 m_l^2\ m_s^2,\ \cdots,\ n^N\ l^N m_l^N\ m_s^N)$$

的作用。容易看出

$$\begin{aligned}&(\hat{L}_x-\mathrm{i}\hat{L}_y)\Phi(n^1\ l^1 m_l^1\ m_s^1,\ n^2\ l^2 m_l^2\ m_s^2,\ \cdots,\ n^N\ l^N m_l^N\ m_s^N)\\&=\sqrt{[(l^1+m_l^1)(l^1-m_l^1+1)]}\,\Phi(n^1l^1m_l^1-1m_s^1,\ n^2l^2m_l^2m_s^2,\ \cdots)\\&+\sqrt{[(l^2+m_l^2)(l^2-m_l^2+1)]}\,\Phi(n^1l^1m_l^1m_s^1,\ n^2l^2m_l^2-1m_s^2,\ \cdots)\\&+\cdots+\sqrt{[(l^N+m_l^N)(l^N-m_l^N+1)]}\,\Phi(n^1l^1m_l^1m_s^1,\ \cdots,\\&\qquad n^Nl^Nm_l^N-1m_s^N).\end{aligned}$$

算符$\hat{S}_x-\mathrm{i}\hat{S}_y$的作用给出类似的结果，此时 m_l 不变，但m_s变为m_s-1。

如果波函数是四个对易算符 $\hat{S}^2$，$\hat{L}^2$，$\hat{S}_z$，$\hat{L}_z$ 的本征函数，则算符 $(\hat{L}_x-\mathrm{i}\hat{L}_y)$ 和 $(\hat{S}_x-\mathrm{i}\hat{S}_y)$ 的作用导致如下结果：

$$\left.\begin{aligned}&(\hat{L}_x-\mathrm{i}\hat{L}_y)\Phi(SLM_SM_L)\\&\quad=\sqrt{[(L+M_L)(L-M_L+1)]}\,\Phi(SLM_SM_L-1),\\&(\hat{S}_x-\mathrm{i}\hat{S}_y)\Phi(SLM_SM_L)\\&\quad=\sqrt{[(S+M_S)(S-M_S+1)]}\,\Phi(SLM_S-1M_L).\end{aligned}\right\}\quad(1)$$

作了这些准备后，就可着手解决我们的问题了。

在所考虑的情况下，我们处理的是等效电子，所以处处都可以略去量子数 n，l。自旋角动量的 z 分量的值，用 m_l 的上角标（±）表示。

对于 p^3 组态，我们得到下列按 M_S 和 M_L（仅限于非负值）的值对态的分类，同时得到下列谱项。

M_S	M_L			
$\frac{3}{2}$	0	$\Phi(1^+, -1^+, 0^+)$	$[^4S]$	Φ_1
$\frac{1}{2}$	0	$\Phi(1^+, -1^+, 0^-)$	^4S	Φ_2
		$\Phi(1^-, -1^+, 0^+)$	^2P	Φ_3
		$\Phi(1^+, -1^-, 0^+)$	^2D	Φ_4
$\frac{1}{2}$	1	$\Phi(1^+, 1^-, -1^+)$	^2P	Φ_5
		$\Phi(1^+, 0^+, 0^-)$	^2D	Φ_6
$\frac{1}{2}$	2	$\Phi(1^+, 1^-, 0)$	$[^2D]$	Φ_7

然后我们来计算算符 $(\hat{L}_x - i\hat{L}_y)$，$(\hat{S}_x - i\hat{S}_y)$ 对上面列举的某些态的作用，

$$(\hat{L}_x - i\hat{L}_y)\,\Phi_5 = \sqrt{2}\,(\Phi_3 - \Phi_2),$$

$$(\hat{L}_x - i\hat{L}_y)\,\Phi_6 = \sqrt{2}\,(\Phi_2 - \Phi_4),$$

$$(\hat{L}_x - i\hat{L}_y)\,\Phi_7 = \sqrt{2}\,(\Phi_5 - \Phi_6),$$

$$(\hat{S}_x - i\hat{S}_y)\,\Phi_1 = \Phi_2 + \Phi_3 + \Phi_4,$$

其中 Φ_1 是 $M_S = \frac{3}{2}$，$M_L = 0$ 的态 ^4S 的波函数，根据 (1) 式，算符 $(\hat{S}_x - i\hat{S}_y)$ 作用导致下列结果：

$$(\hat{S}_x-i\hat{S}_y)\Phi\left({}^4S,\ \frac{3}{2},\ 0\right)=\sqrt{3}\,\Phi\left({}^4S,\ \frac{1}{2},\ 0\right).$$

因为

$$(\hat{S}_x-i\hat{S}_y)\Phi_1=\Phi_2+\Phi_3+\Phi_4,$$

我们有

$$\Phi\left({}^4S,\ \frac{1}{2},\ 0\right)=\frac{1}{\sqrt{3}}(\Phi_2+\Phi_3+\Phi_4).$$

类似地，我们求得${}^2D$项的波函数如下：

$$\Phi\left({}^2D,\ \frac{1}{2},\ 2\right)=\Phi_7,$$

$$\Phi\left({}^2D,\ \frac{1}{2},\ 1\right)=\frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_5-\Phi_6),$$

$$\Phi\left({}^2D,\ \frac{1}{2},\ 0\right)=\frac{1}{\sqrt{6}}(\Phi_3-2\Phi_2+\Phi_4).$$

态${}^2P,\ \frac{1}{2},\ 1\left(M_S=\frac{1}{2},\ M_L=1\right)$是态$\Phi_5$和$\Phi_6$的线性组合，它与态${}^2D,\ \frac{1}{2},\ 1$是正交的。由此，我们得到

$$\Phi\left({}^2P,\ \frac{1}{2},\ 1\right)=\frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_5+\Phi_6)$$

以及

$$\Phi\left({}^2P,\ \frac{1}{2},\ 0\right)=\frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_3-\Phi_4).$$

用同样的方法，可以得到与角动量的z分量的负值对应的波函数。

22*. 从下表可知，为了确定两个${}^2D$项的本征函数，必须先求出${}^2H$，${}^2G$，${}^4F$，${}^2F$项的本征函数。

M_S	M_L			
$\frac{1}{2}$	5	$\Phi(2^+,\ 2^-,\ 1^+)$	Φ_1	$[{}^2H]$

$$\frac{1}{2}\quad 4\quad \Phi(2^+,\ 2^-,\ 0^+)\quad \Phi_2 \qquad \left[\begin{array}{c} {}^2H \\ {}^2G \end{array}\right]$$
$$\Phi(2^+,\ 1^+,\ 1^-)\quad \Phi_3$$

$$\frac{1}{2}\quad 3\quad \Phi(2^+,\ 2^-,\ -1^+)\quad \Phi_4 \qquad \left[\begin{array}{c} {}^2H \\ {}^2G \\ {}^4F \\ {}^2F \end{array}\right]$$
$$\Phi(2^+,\ 1^+,\ 0^-)\quad \Phi_5$$
$$\Phi(2^+,\ 1^-,\ 0^+)\quad \Phi_6$$
$$\Phi(2^-,\ 1^+,\ 0^+)\quad \Phi_7$$

$$\frac{1}{2}\quad 2\quad \Phi(2^+,\ 2^-,\ -2^+)\quad \Phi_8 \qquad \left[\begin{array}{c} {}^2H \\ {}^2G \\ {}^4F \\ {}^2F \\ {}^2D \\ {}^2D \end{array}\right]$$
$$\Phi(2^+,\ 1^+,\ -1^-)\quad \Phi_9$$
$$\Phi(2^+,\ 1^-,\ -1^+)\quad \Phi_{10}$$
$$\Phi(2^-,\ 1^+,\ -1^+)\quad \Phi_{11}$$
$$\Phi(2^+,\ 0^+,\ 0^-)\quad \Phi_{12}$$
$$\Phi(1^+,\ 1^-,\ 0^+)\quad \Phi_{13}$$

$$\frac{3}{2}\quad 3\quad \Phi(2^+,\ 1^+,\ 0^+)\quad \Phi_{14}\quad [{}^4F]$$

$$\frac{3}{2}\quad 2\quad \Phi(2^+,\ 1^+,\ -1^+)\quad \Phi_{15}\quad [{}^4F]。$$

首先，我们来确定算符 $(\hat{L}_x-i\hat{L}_y)$ 和 $(\hat{S}_x-i\hat{S}_y)$ 作用在这些态上的结果：

$$(\hat{L}_x-i\hat{L}_y)\Phi_1=-2\Phi_3+\sqrt{6}\,\Phi_2,$$
$$(\hat{L}_x-i\hat{L}_y)\Phi_2=-2\Phi_7+2\Phi_6+\sqrt{6}\,\Phi_4,$$
$$(\hat{L}_x-i\hat{L}_y)\Phi_3=-\sqrt{6}\,\Phi_6+\sqrt{6}\,\Phi_5,$$
$$(\hat{S}_x-i\hat{S}_y)\Phi_{14}=\Phi_7+\Phi_6+\Phi_5,$$
$$(\hat{L}_x-i\hat{L}_y)\Phi_4=-2\Phi_{11}+2\Phi_{10}+2\Phi_8$$
$$(\hat{L}_x-i\hat{L}_y)\Phi_5=\sqrt{6}\,\Phi_{12}+\sqrt{6}\,\Phi_9$$
$$(\hat{S}_x-i\hat{S}_y)\Phi_{15}=\Phi_{11}+\Phi_{10}+\Phi_9$$
$$(\hat{L}_x-i\hat{L}_y)\Phi_6=2\Phi_{13}-\sqrt{6}\,\Phi_{12}+\sqrt{6}\,\Phi_{10},$$

$$(\hat{L}_x-i\hat{L}_y)\Phi_7=-2\Phi_{10}-\sqrt{6}\,\Phi_{11}.$$

态 $^4H,\ \frac{1}{2},\ 5\left(M_S=\frac{1}{2},\ M_L=5\right)$ 的波函数等于 Φ_1，即 $\Phi\left(^2H,\ \frac{1}{2},\ 5\right)=\Phi_1$. 将算符 $(\hat{L}_x-i\hat{L}_y)$ 作用于它，我们得到

$$(\hat{L}_x-i\hat{L}_y)\Phi\left(^2H,\ \frac{1}{2},\ 5\right)=\sqrt{10}\,\Phi\left(^2H,\ \frac{1}{2},\ 4\right).$$

因为

$$(\hat{L}_x-i\hat{L}_y)\Phi_1=-2\Phi_3+\sqrt{6}\,\Phi_2,$$

所以

$$\Phi\left(^2H,\ \frac{1}{2},\ 4\right)=\frac{1}{\sqrt{10}}[\sqrt{6}\,\Phi_2-2\Phi_3].$$

为解决我们的问题所需要的 ^4H 项的其他态，可以类似地求得：

$$\Phi\left(^2H,\ \frac{1}{2},\ 3\right)=\frac{1}{\sqrt{30}}[\sqrt{6}\,\Phi_4-2\Phi_5+4\Phi_6-2\Phi_7],$$

$$\Phi\left(^2H,\ \frac{1}{2},\ 2\right)=\frac{1}{\sqrt{30}}[\Phi_8-\Phi_9+3\Phi_{10}-2\Phi_{11}$$

$$-3\Phi_{12}+\sqrt{6}\,\Phi_{13}].$$

态 $\Phi\left(^2G,\frac{1}{2},4\right)$ 是态 Φ_2 和 Φ_3 的线性组合，它与态 $\Phi\left(^2H,\ \frac{1}{2},4\right)$ 是正交的. 根据这些条件，我们可以确定波函数 $\Phi\left(^2G,\ \frac{1}{2},\ 4\right)$：

$$\Phi\left(^2G,\ \frac{1}{2},\ 4\right)=\frac{\exp(i\alpha)}{\sqrt{10}}[\,2\Phi_2+\sqrt{6}\,\Phi_3].$$

因为不同谱项的态之间没有相位关系，故可令 $\alpha=0$.

谱项 ^2G 的另外一些态，可用算符 $(\hat{L}_x-i\hat{L}_y)$ 顺序地作用来直接求得. 由此，我们有

$$\Phi\left({}^2G,\ \frac{1}{2},\ 4\right)=\frac{1}{\sqrt{10}}[\,2\Phi_2+\sqrt{6}\,\Phi_3]$$

$$\Phi\left({}^2G,\ \frac{1}{2},\ 3\right)=\frac{1}{\sqrt{20}}[\sqrt{6}\,\Phi_4+3\Phi_5-\Phi_6-2\Phi_7]$$

$$\Phi\left({}^2G,\ \frac{1}{2},\ 2\right)=\sqrt{\frac{3}{140}}\Big|\,2\Phi_8+3\Phi_9+\Phi_{10}-4\Phi_{11}$$
$$+4\Phi_{12}+\sqrt{\frac{2}{3}}\,\Phi_{13}\Big|.$$

为了解决我们的问题，还需确定函数$\Phi\left({}^4F,\ \frac{1}{2},\ 2\right)$和$\Phi\left({}^2F,\ \frac{1}{2},\ 2\right)$.

由于$\Phi\left({}^4F,\ \frac{3}{2},\ 3\right)=\Phi_{14}$，故将算符$(\hat{S}_x-i\hat{S}_y)$作用于其上，便得到态$\Phi\left({}^4F,\ \frac{1}{2},\ 3\right)$:

$$(\hat{S}_x-i\hat{S}_y)\Phi\left({}^4F,\ \frac{3}{2},\ 3\right)=\sqrt{3}\ \Phi\left({}^4F,\ \frac{1}{2},\ 3\right)$$
$$=(\hat{S}_x-i\hat{S}_y)\Phi_{14},$$
$$\Phi\left({}^4F,\ \frac{1}{2},\ 3\right)=\frac{1}{\sqrt{3}}[\Phi_6+\Phi_8+\Phi_7].$$

用算符$(\hat{L}_x-i\hat{L}_y)$作用于态$\Phi\left({}^4F,\ \frac{1}{2},\ 3\right)$上，我们得到态$\Phi\left({}^4F,\ \frac{1}{2},\ 2\right)$:

$$\Phi\left({}^4F,\ \frac{1}{2},\ 2\right)=\frac{1}{\sqrt{3}}[\Phi_9+\Phi_{10}+\Phi_{11}].$$

波函数$\Phi\left({}^2F,\ \frac{1}{2},\ 3\right)$由它与$\Phi\left({}^2H,\ \frac{1}{2},\ 3\right)$，$\Phi\left({}^2G,\ \frac{1}{2},\ 3\right)$，

$\Phi\left({}^4F,\ \frac{1}{2},\ 3\right)$三个函数的正交性条件确定。用这个方法得到的归一化波函数$\Phi\left({}^2F,\ \frac{1}{2},\ 3\right)$等于

$$\Phi\left({}^2F,\ \frac{1}{2},\ 3\right)=\frac{1}{\sqrt{12}}[-\sqrt{6}\,\Phi_4+\Phi_5+\Phi_6-2\Phi_7].$$

最后，我们得

$$\Phi\left({}^2F,\ \frac{1}{2},\ 2\right)=\frac{1}{\sqrt{12}}[-2\Phi_8+\Phi_9-\Phi_{10}+\sqrt{6}\,\Phi_{13}].$$

现在，我们得到$M_S=\frac{1}{2}$，$M_L=2$的四个态：

$$\Phi\left({}^2H,\ \frac{1}{2},\ 2\right)=\frac{1}{\sqrt{30}}[\Phi_8-\Phi_9+3\Phi_{10}-2\Phi_{11}-3\Phi_{12}+\sqrt{6}\,\Phi_{13}],$$

$$\Phi\left({}^2G,\ \frac{1}{2},\ 2\right)=\sqrt{\frac{3}{140}}\left[2\Phi_8+3\Phi_9+\Phi_{10}-4\Phi_{11}+4\Phi_{12}+\sqrt{\frac{2}{3}}\Phi_{13}\right]$$

$$\Phi\left({}^4F,\ \frac{1}{2},\ 2\right)=\frac{1}{\sqrt{3}}(\Phi_9+\Phi_{10}+\Phi_{11})$$

$$\Phi\left({}^2F,\ \frac{1}{2},\ 2\right)=\frac{1}{\sqrt{12}}[-2\Phi_8+\Phi_9-\Phi_{10}+\sqrt{6}\,\Phi_{13}].$$

在这同一组中，还包含有两个${}^2D$态。这两个相互正交的${}^2D$态，也与上面写出的四个态正交。

从正交归一条件，我们得到下列正交归一函数：

$$\Phi\left(a^2D,\ \frac{1}{2},\ 2\right)=\frac{1}{2}(-\Phi_8-\Phi_9+\Phi_{10}+\Phi_{12}),$$

$$\Phi\left(b^2D,\ \frac{1}{2},\ 2\right)=\frac{1}{\sqrt{84}}[-5\Phi_8+3\Phi_9+\Phi_{10}-4\Phi_{11}-3\Phi_{12}-2\sqrt{6}\,\Phi_{13}].$$

用算符$(\hat{L}_x-i\hat{L}_y)$和$(\hat{S}_x-i\hat{S}_y)$作用，容易得到${}^2D$态的其余波函数，这些波函数与角动量的其他两个分量值对应。

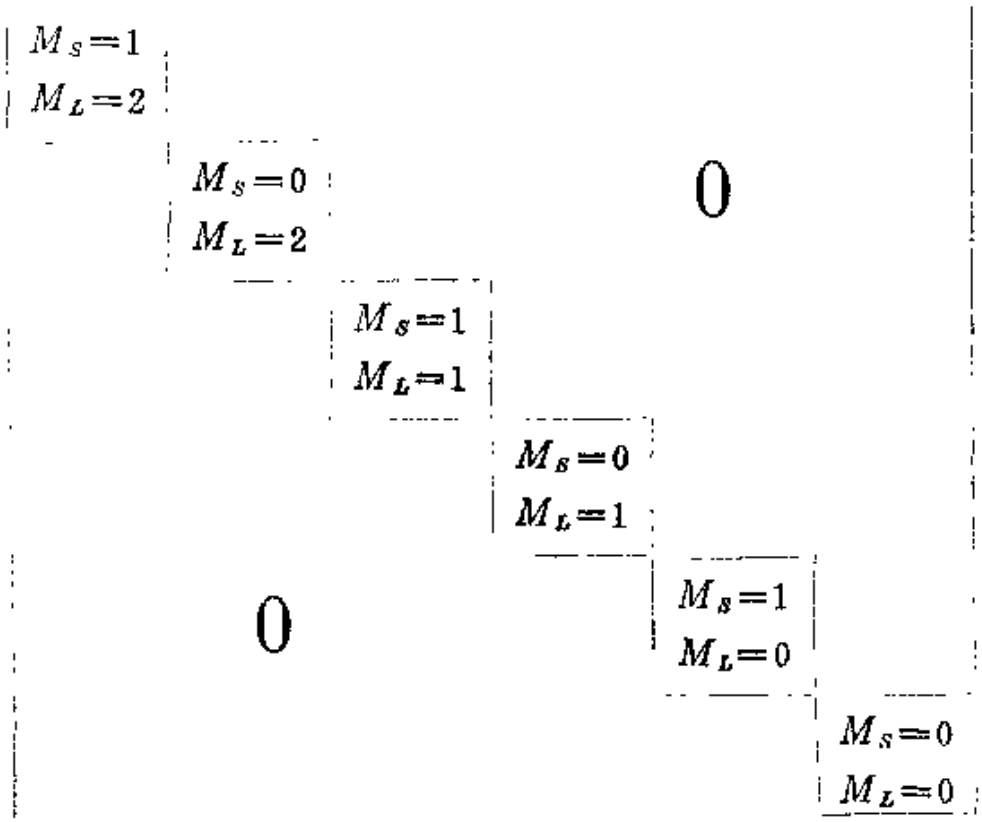
23* 首先，我们将属于组态 $np\,n'p$ 的所有态作成表。我们只讨论M_S和M_L的非负值的情况。

pp'		M_S	
		1	0
M_L	2	$\Phi_1(1^+,\ 0^+)$	$\Phi_2(1^+,\ 1^-)$ $\Phi_3(1^-,\ 1^+)$
	1	$\Phi_4(1^+,\ 0^+)$ $\Phi_5(0^+,\ 1^+)$	$\Phi_6(1^+,\ 0^-)$ $\Phi_7(0^+,\ 1^-)$ $\Phi_8(1^-,\ 0^+)$ $\Phi_9(0^-,\ 1^+)$
	0	$\Phi_{10}(1^+,\ -1^+)$ $\Phi_{11}(0^+,\ 0^+)$ $\Phi_{12}(-1^+,\ 1^+)$	$\Phi_{13}(1^+,\ -1^-)$ $\Phi_{14}(0^+,\ 0^-)$ $\Phi_{15}(-1^+,\ 1^-)$ $\Phi_{16}(1^-,\ -1^+)$ $\Phi_{17}(0^-,\ 0^+)$ $\Phi_{18}(-1^-,\ 1^+)$

从这个表可以看到，该组态有下列谱项：^1S，^3S，^1P，^3P，^1D和^3D。

解题时，我们将用上表中的函数作为零级近似波函数。

因为能量与M_S和M_L的值无关，所以微扰矩阵有如下形式：



我们将用$\hat{V}$表示微扰算符。在第一个子矩阵中，只有一个^3D谱项。因而

$$E^{(1)}(^3D)=V_{11}.$$

在第二个子矩阵中（$M_L=2$，$M_S=0$），有^3D和^1D这两个谱项的组合：

$$E^{(1)}(^3D)+E^{(1)}(^1D)=V_{22}+V_{33}.$$

在第三个子矩阵（$M_L=1$，$M_S=1$）中，有^3D和^3P这两个谱项的组合：

$$E^{(1)}(^3D)+E^{(1)}(^3P)=V_{44}+V_{55}.$$

在第四个子矩阵（$M_L=1$，$M_S=0$）中，有四个谱项^3D，^1D，^3P，^1P：

$$E^{(1)}(^3D)+E^{(1)}(^1D)+E^{(1)}(^3P)+E^{(1)}(^1P)$$
$$=V_{66}+V_{77}+V_{88}+V_{99}.$$

在第五个子矩阵（$M_L=0$，$M_S=1$）中，有^3D，^3P和^3S三个谱项：

$$E^{(1)}(^3D)+E^{(1)}(^3P)+E^{(1)}(^3S)=V_{10,10}+V_{11,11}+V_{12,12}.$$

最后，在第六个子矩阵（$M_L=0$，$M_S=0$）中，有6个谱项^3D，^3P，^3S，^1D，^1P，和^1S的组合：

$$E^{(1)}(^3D)+E^{(1)}(^1D)+E^{(1)}(^3P)+E^{(1)}(^1P)$$
$$+E^{(1)}(^3S)+E^{(1)}(^1S)=V_{13,13}+V_{14,14}$$
$$+V_{15,15}+V_{16,16}+V_{17,17}+V_{18,18}.$$

从以上这些方程容易得到用对角矩阵元表示的谱项值的表示式：

$$E^{(1)}(^3D)=V_{11},$$
$$E^{(1)}(^1D)=V_{22}+V_{33}-V_{11},$$
$$E^{(1)}(^3P)=V_{44}+V_{55}-V_{11},$$
$$E^{(1)}(^1P)=V_{66}+V_{77}+V_{88}+V_{99}+V_{11}-V_{22}$$
$$-V_{33}-V_{44}-V_{55},$$

等等。

24. (a) $Z^{-\frac{1}{3}}\frac{\hbar^2}{\mu e^2}$, (b) $Z^{\frac{1}{3}}\frac{\mu e^2}{\hbar^2}$, (c) $Z\frac{\mu e^4}{\hbar^2}$,

(d) $Z^{\frac{7}{3}}\frac{\mu e^4}{\hbar^2}$, (e) $Z^{\frac{1}{3}}\frac{e^2}{\hbar}$, (f) $Z^{\frac{1}{3}}\hbar$, (g) $Z^{\frac{1}{3}}$.

25. 总能量由电子的动能 T，电子和核的相互作用能 V_{ne}，以及电子之间的相互作用能 V_{ee} 等三部分能量相加而得。后两部分可写为：

$$V_{ne}=-\int\frac{Z}{r}\rho\mathrm{d}\tau,$$

$$V_{ee}=\frac{1}{2}\int\frac{\rho(\boldsymbol{r})\rho(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}\tau\mathrm{d}\tau'.$$

为了计算动能，我们来考虑原子的一个无限小的体积元 $\mathrm{d}\tau$。动量在 $\boldsymbol{p}$ 与 $\boldsymbol{p}+\mathrm{d}\boldsymbol{p}$ 之间的电子数正比于相体积，且等于

$$\mathrm{d}n=\frac{8\pi p^2\mathrm{d}p\mathrm{d}\tau}{(2\pi)^3}=\frac{p^2\mathrm{d}p\mathrm{d}\tau}{\pi^2}$$

对 p 积分，从 0 积到某一最大值 $p=p_0$，即得电子密度

$$\rho=\frac{p_0^3}{3\pi^2}.$$

在体积 $\mathrm{d}\tau$ 中电子的动能为

$$\mathrm{d}T=\int_0^{p_0}\frac{p^2}{2}\mathrm{d}n=\frac{p_0^5}{10\pi^2}\mathrm{d}\tau.$$

若将上式中的 p_0 用 ρ 表示，并对原子的体积积分，我们就得到电子的动能

$$T=\frac{1}{10\pi^2}(3\pi^2)^{\frac{5}{3}}\int\rho^{\frac{5}{3}}\mathrm{d}\tau.$$

最后，我们求得总能量

$$E=T+V_{ne}+V_{ee}$$

$$=\frac{(3\pi^2)^{\frac{5}{3}}}{10\pi^2}\int\rho^{\frac{5}{3}}\mathrm{d}\tau-Z\int\frac{\rho}{r}\mathrm{d}\tau+\frac{1}{2}\iint\frac{\rho(\boldsymbol{r})\rho(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}\tau\mathrm{d}\tau'.$$

26. 原子的总能量由方程

$$E=-\int\frac{Z}{r}\rho\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}+\frac{1}{2}\int\frac{\rho(\boldsymbol{r})\rho(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'$$

$$+\frac{(3\pi^2)^{\frac{5}{3}}}{10\pi^2}\int\rho^{\frac{5}{3}}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}, \tag{1}$$

给出（参考上题），于是我们得

$$\delta E=-\int\frac{Z}{r}\delta\rho\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}+\int\frac{\rho(\boldsymbol{r})\delta\rho(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'$$

$$+\frac{(3\pi^2)^{\frac{5}{3}}}{6\pi^2}\int\rho^{\frac{3}{2}}\delta\rho\mathrm{d}^3\boldsymbol{r},$$

且有补充条件

$$\int\delta\rho\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=0. \tag{2}$$

利用拉格朗日乘子，得

$$\rho(\boldsymbol{r})=\left\{\frac{6\pi^2}{(3\pi^2)^{5/2}}[V(\boldsymbol{r})-\lambda]\right\}^{3/2} \tag{3}$$

其中

$$V(\boldsymbol{r})=\frac{Z}{r}-\int\frac{\rho(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}. \tag{4}$$

为适合于泊松方程，得 ($V_0=\lambda$)

$$\nabla^2(V-V_0)=4\pi Z\rho, \tag{5}$$

从(3)式和(5)式，便得到托马斯-费密方程

$$\nabla^2(V-V_0)=\frac{2^{\frac{7}{2}}}{3\pi}[V-V_0]^{\frac{3}{2}}.$$

27. 为解此题，考虑电子在动量空间的分布，这动量空间相应于在坐标空间的点 $\boldsymbol{r}$ 有一位移 $\boldsymbol{D}(\boldsymbol{r})$. 总动能由下列方程给出：

$$E_K=\frac{1}{4\pi^3}\int\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\int\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}\ \frac{\boldsymbol{p}^2}{2}=\int\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\left(\frac{P_0^5}{10\pi^2}+\frac{P_0^3D^2}{6\pi^2}\right). \tag{1}$$

其中 $P_0(\boldsymbol{r})$ 是无位移的费密球半径；$P_0(\boldsymbol{r})$ 与密度 $\rho(\boldsymbol{r})$ 之间的关

系为

$$\rho(r)=\frac{1}{4\pi^3}\int \mathrm{d}^3p=\frac{1}{3\pi^2}P_0^3. \qquad (2)$$

(1)式和(2)式中的积分都是对整个费密球的。

取代上题中的(1)式，由(1)式和(2)式现在得到

$$E=-\int_r^Z \rho\,\mathrm{d}^3r+\frac{1}{2}\int\frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|}\mathrm{d}^3r\,\mathrm{d}^3r$$

$$+\frac{(3\pi^2)^{\frac{2}{3}}}{10\pi^2}\int\rho^{\frac{5}{3}}\mathrm{d}^3r+\frac{1}{2}\int\mathrm{d}^3r\,D^2\rho.$$

除补充条件(2)之外，现在还有下列条件：

$$\delta J=0,$$

这里，J 是总角动量，

$$J=\int\rho(r)[r\times D(r)]\mathrm{d}^3r=\int D(r)r\sin\theta\rho(r)\mathrm{d}^3r,$$

其中 θ 是极角。

利用拉格朗日乘子并对 D 求变分，容易得到

$$D=\lambda r\sin\theta,$$

这就表明，托马斯-费密模型是一个以匀角速度 λ 转动着的刚性球。

28*. 体积元用 x 表示时，可写成

$$\mathrm{d}\tau=4\pi r^2\mathrm{d}r=8\pi\lambda^3x^5\mathrm{d}x.$$

我们可求得动能

$$T=\frac{12(3\pi^2)^{\frac{2}{3}}}{25\pi}\lambda^3A^{\frac{5}{3}}$$

以及电子与核的相互作用能

$$V_{ne}=-8\pi A\lambda^2Z.$$

为了计算 $V_{ee}=\frac{1}{2}\iint\frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|}\mathrm{d}\tau\mathrm{d}\tau'$，我们先求出电子所产生的势 φ_e。解泊松方程

$$\nabla^2\varphi_e=4\pi\rho,$$

我们得

$$\varphi_e=-\frac{16\pi A\lambda^2}{x^2}[1-e^{-x}(x+1)]。$$

现在利用格林定理计算V_{ee}，我们得

$$V_{ee}=-\frac{1}{2}\int\varphi_e\rho d\tau=16\pi^2A^2\lambda^5。$$

由归一化条件决定A：

$$\int\rho d\tau=16\pi A\lambda^3=N。$$

将A的值代入T，V_{ee}，V_{ne}的表示式中，则得

$$T=\frac{12}{25\pi}\left(\frac{3\pi N}{16}\right)^{\frac{5}{3}}\frac{1}{\lambda^2}，$$

$$V_{ne}=-\frac{ZN}{2\lambda}，$$

$$V_{ee}=\frac{N^2}{16\lambda}。$$

当λ取下面的值时，

$$\lambda=\frac{9}{25}\left(\frac{3\pi N}{16}\right)^{\frac{1}{3}}\frac{1}{Z-N/8}，$$

得$E=T+V_{ne}+V_{ee}$的最小值，它等于

$$E=\frac{25}{36}\left(\frac{16}{3\pi}\right)^{\frac{1}{3}}N^{\frac{1}{3}}\left(Z-\frac{N}{8}\right)^2\text{原子单位}。$$

对于中性原子，

$$E=\frac{25\times49}{36\times64}\left(\frac{16}{3\pi}\right)^{\frac{1}{3}}Z^{\frac{7}{3}}=0.758Z^{\frac{7}{3}}\text{原子单位}。$$

29 设$\rho(r)$是托马斯-费密模型中电子密度的表示式。于是$\rho(r)$将使原子的能量

$$E=\frac{(3\pi^2)^{\frac{2}{3}}}{10\pi}\int\rho^{\frac{5}{3}}d\tau-Z\int\frac{\rho}{r}d\tau$$

$$+\frac{1}{2}\iint\frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|}d\tau d\tau'$$

取极小值。如果在上式中用函数$\lambda^3\rho(\lambda r)$代替ρ，且$\lambda^3\rho(\lambda r)$所满足的归一化条件与$\rho(r)$相同，则得

$$E(\lambda)=\lambda^2T+\lambda V,$$

式中T是原子中电子的动能，V是势能。因为当$\lambda=1$时，$E(\lambda)$应有一极小值，所以下式应成立，

$$2T+V=0,$$

此即维里定理。

30. 电子间的相互作用能可写作

$$V_{ee}=-\frac{1}{2}\int\varphi_e\rho d\tau=\frac{Z}{2}\int\frac{\rho}{r}d\tau-\frac{1}{2}\int\varphi\rho d\tau \qquad (1)$$

其中φ_e是电子产生的势，φ是包括核的场在内的自洽场的势

$$\varphi=\varphi_e+\frac{Z}{r}$$

在托马斯-费密模型中，下列关系式成立：

$$\frac{p_0^2}{2}=\varphi-\varphi_0,\quad \rho=\frac{p_0^3}{3\pi^2},$$

其中p_0是动量的极限值，φ_0是在原子边界上的势。如果消去p_0，并用ρ来表示公式(1)中的φ，就得到

$$V_{ee}=\frac{Z}{2}\int\frac{\rho}{r}d\tau-\frac{(3\pi^2)^{\frac{1}{3}}}{4}\int\rho^{\frac{4}{3}}d\tau-\frac{\varphi_0N}{2}.$$

上式中前两项与电子和核的相互作用能

$$V_{ne}=-Z\int\frac{\rho}{r}d\tau$$

及动能

$$T=\frac{3(3\pi^2)^{\frac{1}{3}}}{10}\int\rho^{\frac{4}{3}}d\tau$$

分别仅差一数值因子。因此，我们有

$$V_{ee}=-\frac{1}{2}V_{ne}-\frac{5}{6}T-\frac{\varphi_0N}{2}.$$

将维里定理

$$2T=-V_{ne}-V_{ee}$$

中的T值代入上式，最后得

$$V_{ee}=-\frac{1}{7}V_{ne}-\frac{6}{7}\varphi_0 N.$$

对于中性原子($N=Z$)，$\varphi_0=0$，故

$$V_{ee}=-\frac{1}{7}V_{ne}.$$

31*. 完全电离的能量等于电子的总能量，但符号相反。利用维里定理，我们求得（见上题）

$$E_{\text{电离}}=-\frac{3}{7}V_{ne}+\frac{3}{7}\varphi_0 N.$$

表示式

$$V_{ne}=-Z\int\frac{\rho}{r}\mathrm{d}\tau$$

可利用下列公式改写，引进电子所产生的势φ_e，

$$\nabla^2\varphi_e=4\pi\rho,$$

并利用格林定理，则得

$$V_{ne}=-\frac{Z}{4\pi}\int\frac{\nabla^2\varphi_e}{r}\mathrm{d}\tau=Z\varphi_e(0)$$

[在原子的边界上面积分等于零，且$\nabla^2(1/r)=-4\pi\delta(r)$]。

于是，我们得

$$E_{\text{电离}}=-\frac{3}{7}Z\varphi_e(0)+\frac{3}{7}N\varphi_0.$$

若改用托马斯-费密单位，

$$r=xbZ^{-\frac{1}{3}},\quad b=\frac{1}{2}\left(\frac{3\pi}{4}\right)^{\frac{2}{3}},\quad \varphi-\varphi_0=\frac{Z^{\frac{4}{3}}}{b}\frac{\chi(x)}{x},$$

我们求得

$$\varphi_e(r)=\varphi-\frac{Z}{r}=\varphi_0-\frac{Z^{\frac{4}{3}}}{b}[1-\chi(x)].$$

因为对小的x，有

$$\chi(x)=1-ax+\frac{4}{3}x^{\frac{3}{2}}.$$

对于中性原子$a=a_0=1.58$(对于正离子$a>a_0$)，所以最后得到

$$E_{\text{电离}}=\frac{3}{7}\frac{Z^{\frac{1}{3}}}{b}a-\frac{3}{7}\frac{(Z-N)^2Z^{\frac{1}{3}}}{bx_0},$$

其中x_0是$(Z-N)$次电离的原子的半径。

32*. 对于抗磁性原子，不仅总角动量为零，而且电子的总轨道角动量和总自旋角动量都分别为零。由于进动，电子获得附加速度

$$v'=\frac{e}{2\mu c}[\mathscr{H}\times r].$$

若用A表示外磁场的矢势$A=\frac{1}{2}[\mathscr{H}\times r]$，则上式可写成

$$v'=\frac{e}{\mu c}A.$$

由电子壳层的进动而引起的电流密度等于：

$$J=\frac{e}{\mu c}A\rho(r),$$

其中$\rho(r)$是在r处的电荷密度（电子的电荷为$-e$）。首先，我们来计算感应磁场所产生的矢势A'：

$$A'(r)=\frac{e}{2\mu c}\int[\mathscr{H}\times r']\frac{\rho(r')}{|r-r'|}\mathrm{d}\tau'.$$

利用公式

$$\frac{1}{r_{12}}=\frac{1}{\sqrt{R^2+r^2-2Rr[\cos\theta\cos\theta+\sin\theta\sin\theta\cos(\Phi-\varphi)]}}$$

$$=\sum_{l,m}\sqrt{\left(\frac{4\pi}{2l+1}\right)}Y^*_{lm}(\theta,\Phi)Y_{lm}(\theta,\varphi)\begin{cases}\dfrac{r^l}{R^{l+1}}, & r<R,\\ \dfrac{R^l}{r^{l+1}}, & R<r,\end{cases}$$

$$Y_{l0}(0)$$

我们得到A'的表示式为

$$A'(r)=\frac{e}{6\mu c^2}[\mathscr{H}\times r]\cdot\left[\frac{1}{r^3}\int_{r'<r}r'^2\rho(r')\mathrm{d}\tau'\right.$$

$$+\int_{r'>r}\frac{\rho(r')}{r'}\,d\tau'\Big].$$

利用这个表示式，容易计算沿Z轴方向的磁场强度。它等于

$$\mathscr{H}_z'=\left(\frac{e\mathscr{H}}{2\mu c^2r^5}\right)\left(Z^2-\frac{1}{3}r^2\right)\int_{r'<r}r'^2\rho(r')\,d\tau'$$

$$+\frac{e\mathscr{H}}{3\mu c^2}\int_{r'>r}\frac{\rho(r')}{r'}\,d\tau'.$$

在原子中心感应的磁场，亦即作用在核上的磁场为

$$\mathscr{H}_z'(0)=\frac{e\mathscr{H}}{3\mu c^2}\int\frac{\rho(r')}{r'}\,d\tau'=\frac{e\mathscr{H}}{3\mu c^2}\varphi(0),$$

它依赖于电子所产生的静电势$\varphi(0)$。

在托马斯-费密模型中，我们有

$$\varphi(0)=-1.588\frac{Ze}{b},\quad \text{其中}b=0.858\frac{a}{Z^{\frac{1}{3}}},\ a=\frac{\hbar^2}{\mu e^2},$$

因而

$$\mathscr{H}_z'(0)=-0.319\times10^{-4}Z^{\frac{1}{3}}\mathscr{H}.$$

33*. $$\mathscr{H}_z'(0)=-\frac{27e\mathscr{H}}{24\mu c^2a}=-0.599\times10^{-4}\mathscr{H}.$$

34*. 为了导出所求的量子化规则，必须按照推导通常的玻尔-索末菲量子化规则的方法那样来进行。特别是，在半经典近似不成立的点附近，必须求出精确的函数。在重叠区域（即精确函数和半经典函数都适用的区域），把这些函数和半经典函数作比较，就可求得量子化规则。

不难了解，在我们感兴趣的半经典情形（$n\gg1$）中，$n\to\infty(E\to0)$的库仑函数是精确函数，而区间$Z^{-1}\ll r\ll Z^{-\frac{1}{3}}$是重叠区域（我们用原子单位）。的确，对于距离$r\ll Z^{-\frac{1}{3}}$，自洽场$\varphi(r)$（服从托马斯-费密分布的电子在其中运动）与核的库仑场$\varphi(r)\approx\frac{Z}{r}$一致。而对于距离$r\gg Z^{-1}$，半经典近似是适用的。

$l=0$，$n\to\infty(E\to0)$时的库仑函数为

$$\psi = c\frac{J_1[\sqrt{(8r)}]}{\sqrt{r}}\text{（库仑单位），}$$

或

$$\psi = Z^{\frac{3}{2}}c\frac{J_1[\sqrt{(8Zr)}]}{\sqrt{(Zr)}}\text{（原子单位）。}\qquad(1)$$

当$r \gg Z^{-1}$或$Zr \gg 1$时，我们可用贝塞耳函数J_1的渐近表示式

$$\psi = Z^{\frac{3}{2}}c\frac{\sin\left[\sqrt{(8Zr)}-\frac{\pi}{4}\right]}{(2\pi^2Z^3r^3)^{\frac{1}{4}}} = c_1\frac{\sin\left[\sqrt{(8Zr)}-\frac{\pi}{4}\right]}{r^{\frac{3}{4}}}\qquad(2)$$

半经典函数可写成如下形式：

$$\psi_{半} = c_{半}\frac{\sin\left(\int_0^r p_r\mathrm{d}r + \alpha\right)}{r\sqrt{p_r}}.\qquad(3)$$

我们的问题是要确定相位α。在我们感兴趣的区域中，径向动量$p_r = \sqrt{\{2[E-V(r)]\}}$（对于我们所考虑的$l=0$的情形，没有离心势）等于$\sqrt{(2Z/r)}$，因为$|V(r)| \sim Z/r \gg |E|$；这个不等式之所以成立，是由于服从托马斯-费密分布的一个电子，其能量的数量级为$Z^{\frac{1}{3}}$。因此，我们有

$$\int_0^r p_r\mathrm{d}r = \sqrt{(2Z)}\int_0^r \frac{\mathrm{d}r}{\sqrt{r}} = \sqrt{(8Zr)},$$

而波函数等于

$$\psi_{半} \approx c_{半}\frac{\sin[\sqrt{(8Zr)}+\alpha]}{r(2Z/r)^{\frac{1}{4}}} = c'_{半}\frac{\sin[\sqrt{(8Zr)}+\alpha]}{r^{\frac{3}{4}}}.$$

比较这两个函数，我们得$\alpha = -\frac{\pi}{4}$，因而半经典函数可写为

$$\psi_{半} = c_{半}\frac{\sin\left(\int_0^r p_r\mathrm{d}r - \frac{\pi}{4}\right)}{r\sqrt{p_r}}.\qquad(4)$$

另一方面，在转折点 r_0（r_0限制了在大r值处粒子的运动）附近，满足边界条件的函数有如下形式：

$$\psi_{半}=c''_{半}\frac{\sin\left(\int_r^{r_0}p_r\mathrm{d}r+\frac{\pi}{4}\right)}{r\sqrt{p_r}}. \tag{5}$$

为了使(4)式和(5)式等同，必须使正弦函数的相位之和等于π的整数倍，这就给出了我们所要找的量子化规则：

$$\int_0^{r_0}p_r\mathrm{d}r=n\pi \quad 或 \quad \int_0^{r_0}\sqrt{\{2\mu[E-V(r)]\}}\,\mathrm{d}r=\pi\hbar n. \tag{6}$$

因此，我们得到的量子化规则，不同于玻尔-索末菲量子化规则。

不难看出，在整个空间都是库仑场 $V(r)=-Ze^2/r$的特殊情况下，量子化规则(6)导致通常形式的能谱：

$$E_n=-\frac{Z^2\mu e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}.$$

[把由方程$E-V(r)=E+\frac{Ze^2}{r}=0$得出的$r_0$，即 $r_0=-Ze^2/E$ 代入方程(6)，并进行初等积分，即可证实这个结果。]

35. 当所加的电场与托马斯-费密场（即原子中的托费斯-费密分布的电场）同数量级时，分布的相对变化与1同数量级。因此，在这种情况下，原子的偶极矩与托马斯-费密(TF)值同数量级：对于一个电子来说，与托马斯-费密半径同数量级；对整个原子来说，则与Zr_{TF}同数量级。

设偶极矩和场成正比，则对于任何不太强的电场$\mathscr{E}$，我们得：

$$d=Zr_{TF}\frac{\mathscr{E}}{\mathscr{E}_{TF}},$$

式中$\mathscr{E}_{TF}$是托马斯-费密电场强度，其数量级可估计如下：

$$\left|\mathscr{E}_{\text{TF}}\right| = \left|\frac{d\varphi(r)}{dr}\right|_{r\sim r_1} = \frac{\mathscr{E}}{b}\cdot\frac{\mathscr{E}}{b}\left|\frac{d}{dx}\left|\frac{\chi(x)}{x}\right|\right|_{x\sim 1}.$$

这里，我们引进了托马斯-费密单位，并用普适系数 $\chi(x)$ 来表示势。导数 $d[\chi(x)/x]/dx$ 在 $x\sim 1$ 时也与 1 同数量级。这样，我们求得 $\mathscr{E}_{\text{TF}}\sim Z^{\frac{5}{3}}$，而托马斯-费密半径的数量级为 $Z^{-\frac{1}{3}}$。于是，得

$$d\sim Z\cdot Z^{-\frac{1}{3}}\frac{\mathscr{E}}{Z^{\frac{5}{3}}} = \frac{\mathscr{E}}{Z},$$

或

$$\frac{d}{\mathscr{E}}\sim\frac{1}{Z},$$

若用通常的单位，则为

$$\frac{d}{\mathscr{E}}\sim\frac{\hbar^2}{Z\mu^2e^3} = \left(\frac{\hbar^2}{Z^{\frac{1}{3}}\mu e^2}\right)^3,$$

即极化率的数量级为原子的托马斯-费密半径的立方．[这个结果与用各种原子模型（例如，汤姆逊（Thomson）模型，带电球模型等等）的电子的经典理论求得的结果完全类似．]

最后，我们指出，若采用原子单位，则价电子极化率的数量级也为1，因为这种电子在场 $V(r)\sim-\frac{e^2}{r}$ 中运动。由于 $Z\gg 1$，原子的极化率将由价电子决定，而不是由托马斯-费密电子决定。

36. $$\frac{L-2S+1}{L-S+1}\leqslant g\leqslant\frac{L+2S}{L+S},\quad \text{若}L\geqslant S,$$

$$\frac{2S+2-L}{S-L+1}\leqslant g\leqslant\frac{L+2S}{L+S},\quad \text{若}L\leqslant S.$$

38*. 原子在磁场中的能量与自旋轨道相互作用同数量级．因此，自旋轨道相互作用算符为 $\varphi(r)(\hat{e}\cdot\hat{\mathbf{s}})$（见§11.23题），它与

算符$(e\hbar/2\mu c)(\hat{l}_z+2\hat{s}_z)\mathscr{H}$有相同数量级，两者之和

$$V=\varphi(r)(\hat{l}\cdot\hat{s})+\frac{e\hbar}{2\mu c}\mathscr{H}(\hat{l}_z+2\hat{s}_z)$$

可当作小的微扰。在未受微扰的态中，轨道角动量的平方和z分量，以及自旋的平方和z分量都是运动恒量。但是，取另外一组运动恒量对我们更方便。我们将用量子数n，l，j，m_j来表征未受微扰的定态($\hat{l}^2$，$\hat{j}^2$，$\hat{j}_z$与$\hat{H}_0$对易)。在库仑场的情况中，简并度等于$2n^2$；在任意有心力场情况中，简并度为$2(2l+1)$。我们没有必要解这样高次的久期方程。我们指出，在受微扰的态中，轨道角动量的平方和总角动量的z分量是运动恒量。因此，受微扰问题的波函数，能由有相同n，l，m_j值的函数$\psi^{(0)}_{nlj m_j}$组成，即

$$\psi=c_1\psi^{(0)}\left(n,l,j=l-\frac{1}{2},\ m_j\right)$$

$$+c_2\psi^{(0)}\left(n,l,j=l+\frac{1}{2},\ m_j\right)$$

或

$$\psi=c_1\frac{R^{(0)}_{nl}}{\sqrt{(2l+1)}}\begin{pmatrix}\sqrt{\left(l+m_j+\frac{1}{2}\right)}\,Y_{l,m_j-\frac{1}{2}}\\ \sqrt{\left(l-m_j+\frac{1}{2}\right)}\,Y_{l,m_j+\frac{1}{2}}\end{pmatrix}$$

$$+c_2\frac{R^{(0)}_{nl}}{\sqrt{(2l+1)}}\begin{pmatrix}\sqrt{\left(l+m_j+\frac{1}{2}\right)}\,Y_{l,m_j-\frac{1}{2}}\\ -\sqrt{\left(l+m_j+\frac{1}{2}\right)}\,Y_{l,m_j+\frac{1}{2}}\end{pmatrix}.$$

算符$\hat{V}$的矩阵元等于

$$(\hat{V})^{nlj=l+\frac{1}{2}m_j}_{nlj=l+\frac{1}{2}m_j}=A\frac{l}{2}+\mathscr{H}\mu_0 m_j\left(1+\frac{1}{2l+1}\right),$$

$$(\hat{V})^{nlj=l-\frac{1}{2}m_j}_{nlj=l-\frac{1}{2}m_j}=-A\frac{l+1}{2}+\mathscr{H}\mu_0 m_j\left(1-\frac{1}{2l+1}\right),$$

$$(\hat{V})^{nlj=l-\frac{1}{2}m_j}_{nlj=l+\frac{1}{2}m_j} = (\hat{V})^{nlj=l+\frac{1}{2}m_j}_{nlj=l-\frac{1}{2}m_j}$$
$$= \frac{\mathscr{H}\mu_0}{2l+1}\sqrt{\left[\left(l+\frac{1}{2}\right)^2-m_j^2\right]},$$

其中

$$A=\int_0^\infty R_{nl}(r)\varphi(r)R_{nl}(r)r^2dr \quad 和 \quad \mu_0=\frac{e\hbar}{2\mu c}$$

能量E的值，可由解下列久期方程得到：

$$\begin{vmatrix} E_{nl}^{(0)}+A\frac{l}{2}+\mathscr{H}\mu_0 m_j\left(1+\frac{1}{2l+1}\right)-E, & \frac{\mathscr{H}\mu_0}{2l+1}\sqrt{\left[\left(l+\frac{1}{2}\right)^2-m_j^2\right]} \\ \frac{\mathscr{H}\mu_0}{2l+1}\sqrt{\left[\left(l+\frac{1}{2}\right)^2-m_j^2\right]}, & E_{nl}^{(0)}-A\frac{l+1}{2}+\mathscr{H}\mu_0 m_j\left(1-\frac{1}{2l+1}\right)-E \end{vmatrix}=0.$$

我们用E_+和E_-表示考虑了自旋轨道相互作用的单电子原子的能量，其中E_+是属于态$j=l+\frac{1}{2}$的，而E_-则属于$j=l-\frac{1}{2}$。

根据§11.23题，可知

$$E_+=E_{nl}^{(0)}+A\frac{l}{2}, \quad E_-=E_{nl}^{(0)}-A\frac{l+1}{2}.$$

解久期方程，得

$$E=\frac{1}{2}(E_++E_-)+\mathscr{H}\mu_0 m_j$$
$$\pm\sqrt{\left[\frac{1}{4}(E_+-E_-)^2+\mathscr{H}\mu_0\frac{m_j}{2l+1}(E_+-E_-)+\frac{1}{4}\mathscr{H}^2\mu_0^2\right]}.$$

我们来讨论某些极限情况。

（a） 在弱场情况下，即当$\mu_0\mathscr{H}\ll(E_+-E_-)$时，我们得到下面的能量表示式

$$E=E_{+}+\mathscr{H}\mu_0 m_j\frac{2l+2}{2l+1},$$

$$E=E_{-}-\mathscr{H}\mu_0 m_j\frac{2l}{2l+1}.$$

第一个能量值相应于 $j=l+\frac{1}{2}$ 态的第 n 个能级的能量，而第二个则相应于 $j=l-\frac{1}{2}$ 态的第 n 个能级的能量（见§7.44题）。

（b） 在强场情况下，即当 $\mu_0\mathscr{H}\gg(E_{+}-E_{-})$ 时，我们有

$$E=\frac{1}{2}(E_{+}+E_{-})+\mathscr{H}\mu_0 m_j\pm\frac{1}{2}\mathscr{H}\mu_0\pm\frac{m_j}{2l+1}(E_{+}-E_{-}).$$

用 E_c 表示无外场存在时能级重心的能量，即

$$Ec=\frac{E_{+}(l+1)+E_{-}l}{2l+1}$$

$\left(\text{态}E_{+}\text{和}E_{-}\text{的统计权重之比为}\frac{l+1}{l}\right)$。用 ΔE 表示 $E_{+}-E_{-}$ 的差。用这些符号，我们得到

$$E=E_c+\mathscr{H}\mu_0\left(m_j\pm\frac{1}{2}\right)\pm\frac{\Delta E}{2l+1}\left(m_j\mp\frac{1}{2}\right).$$

容易验证，这个表示式与§7.40题中的表示式是一致的。

式中上边的符号对应于 $m_l=m_j-\frac{1}{2}$，$m_s=-\frac{1}{2}$ 的态。而下边的符号对应于 $m_l=m_j+\frac{1}{2}$，$m_s=-\frac{1}{2}$ 的态。

39*. 对于上能级，$c_1=\sqrt{\left[\frac{1}{2}(1+\gamma)\right]}$，

$$c_2=\sqrt{\left[\frac{1}{2}(1-\gamma)\right]}.$$

对于下能级，$c_1=\sqrt{\left[\frac{1}{2}(1-\gamma)\right]}$，

$$c_2=-\sqrt{\left[\frac{1}{2}(1+\gamma)\right]}.$$

其中

$$\gamma=\frac{\frac{1}{2}\Delta E+\frac{m_j}{2l+1}\mathscr{H}\mu_0}{\sqrt{\left[\frac{1}{4}(\Delta E)^2+\frac{m_j}{2l+1}\Delta E\mathscr{H}\mu_0+\frac{1}{4}\mathscr{H}^2\mu_0^2\right]}}.$$

我们来讨论某些极限情况。

（a） 设磁场弱到可以忽略，亦即$\Delta E\gg\mathscr{H}\mu_0$，于是$\gamma\approx1$。对于上能级有：$c_1=1$，$c_2=0$，而对于下能级有：$c_1=0$，$c_2=1$。

（b） 强磁场：$\Delta E\ll\mathscr{H}\mu_0$。在这种情况下，$\gamma=-\frac{m_j}{l+\frac{1}{2}}$，对于上能级，有

$$c_1=\sqrt{\left(\frac{l+m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}\right)},\quad c_2=\sqrt{\left(\frac{l-m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}\right)}$$

而对于下能级，有

$$c_1=\sqrt{\left(\frac{l-m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}\right)},\quad c_2=-\sqrt{\left(\frac{l+m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}\right)}.$$

将这些c_1和c_2值代入波函数的表示式中(见§7，38题)，我们得到：对于上能级

$$\psi=R_{nl}^{(0)}\begin{pmatrix}Y_{l,m-\frac{1}{2}}(\theta,\varphi)\\0\end{pmatrix},$$

对于下能级

$$\psi=R_{nl}^{(0)}\begin{pmatrix}0\\ Y_{l,m-\frac{1}{2}}(\theta,\varphi)\end{pmatrix}.$$

40* 因为在磁场中的能量远大于自旋轨道相互作用能，所以在一级近似下，我们可以忽略后者。

在这种情况下，l_z和s_z是运动恒量，能量的分裂由下式确定：

$$E^{(1)}=\frac{e\hbar}{2\mu c}\mathscr{H}(m_l+m_s).$$

在二级近似下，我们应该考虑自旋和轨道相互作用。这时，除在磁场中的分裂外，还要加上多重态分裂，它等于算符

$$\frac{e^2}{2\mu^2c}\cdot\frac{1}{r}(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s})$$

在给定的m_l和m_s值的态中的平均值（见§11.23题）。当角动量某一分量的值给定时，其他两个分量的平均值等于零，因此

$$(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{s})=m_lm_s.$$

于是考虑自旋轨道相互作用后，能级的分裂为

$$E^{(1)}=\frac{e\hbar}{2\mu c}\mathscr{H}(m_l+m_s)+\frac{e^2\hbar^2}{2\mu^2c^2}\overline{\frac{1}{r^3}}m_lm_s.$$

我们把用场不存在时的精细结构裂距表示的$\overline{\frac{1}{r^3}}$值代入上式，从而得到（见§11.23题），

$$\frac{e^2\hbar^3}{2\mu^2c^2}\overline{r^{-3}}=\frac{E_{n,l,j=l+\frac{1}{2}}-E_{n,l,j=l-\frac{1}{2}}}{l+\frac{1}{2}}=\frac{\Delta E}{l+\frac{1}{2}}.$$

最后，得到$E^{(1)}$的表示式为：

$$E^{(1)}=\frac{e\hbar}{2\mu c}\mathscr{H}(m_l+m_s)+\frac{\Delta E}{l+\frac{1}{2}}m_lm_s.$$

图41中绘出了在强磁场中碱金属原子1s和2p项的分裂。

41．在我们的情形下，微扰能量等于

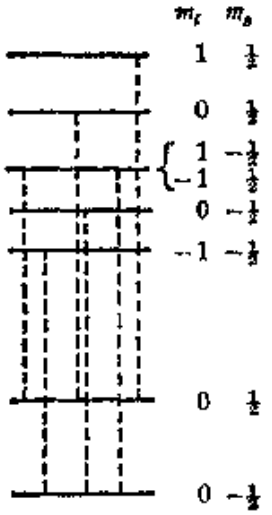


图 41

$$V=\frac{e\hbar}{\mu c}\beta\frac{1}{r^3}\mathbf{i}\cdot\left[\frac{3(\mathbf{r}\cdot\mathbf{s})\mathbf{r}}{r^2}-\mathbf{s}\right]+\frac{e\hbar}{\mu c}\mathscr{H}s_z+\beta\mathscr{H}i_z.$$

在这个表示式中，可以略去最后一项，因为核的磁矩比电子的磁矩要小得多（$\beta<et/2\mu c$）。

用解§7.38题一样的方法来处理，我们求得久期方程

$$\begin{vmatrix} E_+ + \frac{\mu_0\mathscr{H}m_f}{i+\frac{1}{2}} - E & \frac{\mathscr{H}\mu_0}{i+\frac{1}{2}}\sqrt{\left[\left(i+\frac{1}{2}\right)^2-m_f^2\right]} \\ \frac{\mathscr{H}\mu_0}{i+\frac{1}{2}}\sqrt{\left[\left(i+\frac{1}{2}\right)^2-m_f^2\right]} & E_- - \frac{\mathscr{H}\mu_0}{i+\frac{1}{2}}m_f - E \end{vmatrix}=0,$$

这里E_+和E_-是考虑了超精细结构的能项，其中E_+属于$f=i+\frac{1}{2}$的态，而E_-属于$f=i-\frac{1}{2}$的态；m_f是总角动量的z分量（$m_f=f, f-1,\cdots,-f$），而$\mu_0=e\hbar/2\mu c$。解此久期方程，我们得

$$E=\frac{E_++E_-}{2}\pm\frac{\Delta E}{2}\sqrt{\left(1+\frac{2\xi}{i+\frac{1}{2}}m_f+\xi^2\right)},$$

其中$\Delta E=E_+-E_-$，而$\xi=2\mu_0\mathscr{H}/\Delta E$。

我们来求产生上式所确定的分裂的磁场强度的数量级。按照假设，$\mathscr{H}\sim|\Delta E_{ff'}|/\mu_0$。在钠原子的情况下，

$$\Delta E_{ff'}=0.0583\text{cm}^{-1}=1.962\times10^{-15}\text{erg},$$

因为

$$\mu_0=0.922\times10^{-20}\text{Oe}\cdot\text{cm}^3$$

所以，场强$\mathscr{H}$的数量级为600Oe。

下面讨论两种极限情况。

（a） 在弱场情况下，即当$\mu_0\mathscr{H}\ll\Delta E$时，求得能量的表示式如下：

$$E=E_+ + \mathscr{H}\mu_0 \frac{1}{i+\frac{1}{2}} m_j,$$

$$E=E_- - \mathscr{H}\mu_0 \frac{1}{i+\frac{1}{2}} m_j.$$

（b） 在强场情况下，即当$\mathscr{H}\mu_0\gg\Delta E$时，我们有

$$E=\frac{1}{2}(E_+ + E_-) \pm \mathscr{H}\mu_0.$$

44 表示式$(e\hbar/2\mu c)(\hat{L}_z+2\hat{S}_z)\mathscr{H}$是一个小微扰。我们来考虑罗素-桑德斯耦合。在此情况下，$\hat{H}_0$与算符$\hat{J}^2$，$\hat{J}_z$，$\hat{L}^2$，$\hat{S}^2$对易。未受微扰的态，其能量由量子数J，L，S表征。每一个这样的能级，对于矢量算符$\hat{J}$的方向而言，都是简并的，简并度等于$2J+1$。

因为算符$(\hat{L}_z+2\hat{S}_z)$的对$\hat{J}_z$是非对角的矩阵元，等于零，所以所要修正简单地等于算符$(\hat{L}_z+2\hat{S}_z)$在量子数J，J_z，L，S所表征的态中的平均值。为了要计算这个平均值，在§4.44题的公式(1)中令$g_1=1$，$g_2=2$，$\hat{J}_1=\hat{\mathbf{L}}$，$\hat{J}_2=\hat{\mathbf{S}}$。结果为

$$L_z+2S_z=J_z\left[\frac{3}{2}+\frac{S(S+1)-L(L+1)}{2J(J+1)}\right]=gJ_z.$$

按刚才所说的，我们求得所要求的能级分裂为

$$E^{(1)}_{LS}=\frac{e\hbar\mathscr{H}}{2\mu c}gJ_z.$$

46* 在未受微扰的态中，氢原子的归一化本征函数为（见§4.36题）

$$\left.\begin{aligned}\psi_{nlj=l+\frac{1}{2}m_j}&=\frac{R_{n,j}}{\sqrt{2j}}\begin{pmatrix}\sqrt{(j+m_j)}\,Y_{j-\frac{1}{2},\,m_j-\frac{1}{2}}\\ -\sqrt{(j-m_j)}\,Y_{j-\frac{1}{2},\,m_j+\frac{1}{2}}\end{pmatrix}=u_-,\\ \psi_{nlj=l-\frac{1}{2}m_j}&=\frac{R_{n,j+1}}{\sqrt{2j}}\begin{pmatrix}\sqrt{(j+1+m_j)}\,Y_{j+\frac{1}{2},\,m_j-\frac{1}{2}}\\ -\sqrt{(j+1-m_j)}\,Y_{j+\frac{1}{2},\,m_j+\frac{1}{2}}\end{pmatrix}=u_+\end{aligned}\right\}\tag{1}$$

能量由n，j两个量子数决定。在有均匀电场存在时（$\mathscr{E}_x=\mathscr{E}_y=0$，$\mathscr{E}_z=\mathscr{E}$），$j_z$仍是运动恒量，但轨道角动量不再是运动恒量。对于在$m_j$值不同的态之间的跃迁，微扰算符$\hat{V}=e\mathscr{E}z$的矩阵元等于零。算符$\hat{V}$的对角元素也等于零，即

$$\sum_\sigma\int u_+^*zu_+\mathrm{d}\tau=\sum_\sigma\int u_-^*zu_-\mathrm{d}\tau.\tag{2}$$

因此，为了求出能量裂距，必须算出从态n，j，m_j，$l=j+\frac{1}{2}$跃迁到态n，j，m_j，$l=j-\frac{1}{2}$时$\hat{V}$的矩阵元。这些矩阵元等于

$$\begin{aligned}V_{21}=V_{12}&=e\mathscr{E}\sum_\sigma\int u_-^*zu_+\mathrm{d}\tau\\&=\int_0^\infty r^3R_{n,j-\frac{1}{2}}(r)R_{n,j+\frac{1}{2}}(r)\mathrm{d}r\cdot\frac{1}{\sqrt{[j(j+1)]}}\\&\times\Big\{\sqrt{[(j+m_j)(j-m_j+1)]}\int Y^*_{j-\frac{1}{2},\,m-\frac{1}{2}}Y_{j+\frac{1}{2},m-\frac{1}{2}}\cos\theta\mathrm{d}\Omega\\&-\sqrt{[(j-m_j)(j+m_j+1)]}\int Y^*_{j-\frac{1}{2},\,m+\frac{1}{2}}Y_{j+\frac{1}{2},m+\frac{1}{2}}\cos\theta\mathrm{d}\Omega\Big\}\end{aligned}\tag{3}$$

首先对角度积分。根据公式

$$\cos\theta Y_{lm}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}Y_{l+1,m}(\theta,\varphi)$$
$$+\sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}}Y_{l-1,m}(\theta,\varphi),$$

我们求得(3)式的大括号中的式子等于

$$\frac{1}{2\sqrt{j(j+1)}}[(j+m_j)(j-m_j+1)-(j+m_j+1)(j-m_j)]$$
$$=\frac{m_j}{\sqrt{j(j+1)}}.$$

然后对 r 积分，我们得到

$$-\frac{3}{2}n\sqrt{n^2-\left(j+\frac{1}{2}\right)^2}.$$

于是，我们最后求得微扰矩阵元(3)为

$$V_{12}=V_{21}=-\frac{3}{4}n\frac{\sqrt{n^2-\left(j+\frac{1}{2}\right)^2}}{j(j+1)}m_j e\mathscr{E}.$$

解久期方程，便得到所要求的能量修正：

$$\begin{vmatrix}-\epsilon & V_{12}\\ V_{21} & -\epsilon\end{vmatrix}=0,\qquad \epsilon=\pm V_{12},$$
$$\epsilon=\pm\frac{3}{4}\sqrt{n^2-\left(j+\frac{1}{2}\right)^2}\frac{nm_j}{j(j+1)}e\mathscr{E}.$$

当 n 值给定时，$j=n-\frac{1}{2}$ 的谱项在电场中没有分裂，因为它对量子数 l 不是简并的$\left(l\text{ 有固定值，}l=j-\frac{1}{2}=n-1\right)$。所有其余的精细结构项，都分裂为 $2j+1$ 个等间隔的能级 $(m_j=-j,\cdots,+j)$。

47. $\alpha=\frac{9}{2}a_B^3$，式中a_B是玻尔半径。

48. $\mu_0 = \dfrac{e\hbar}{2\mu c}\cdot\dfrac{\left(j+\frac{1}{2}\right)^2}{j(j+1)}m_j$。

49*. 在所考虑的情形下，自旋轨道相互作用 V_1，质量改变所引起的相对论修正 V_2，以及均匀外电场中电子的能量 $V_3=-e\mathscr{E}z$，都同数量级。因此，我们将把它们的和当作对原来体系的小微扰。在计算时，我们将从轨道角动量 L，它的 z 分量 m_l 和自旋的 z 分量 m_s（电场沿 z 轴）有完全确定值的态出发。计算 V_1，V_2，V_3 的矩阵元，我们得到（用原子单位）

$$(V_1)^{l'm_l'}_{lm_l}=\begin{cases}\dfrac{1}{2}\alpha^2\dfrac{m_l(m-m_l)}{n^3l\left(l+\frac{1}{2}\right)(l+1)}\delta_{ll'} & \text{当 } m_l'=m_l,\\[2ex] \dfrac{1}{4}\alpha^2\dfrac{\sqrt{\left[\left(l+\frac{1}{2}\right)-m^2\right]}}{n^3l\left(l+\frac{1}{2}\right)(l+1)}\delta_{ll'} & \text{当 } m_l'=m+\frac{1}{2},\\[2ex] & m_l=m-\frac{1}{2}\text{ 或者反过来},\\[2ex] 0 & \text{在其他情况下}.\end{cases}$$

$$(V_2)^{l'm_l'}_{lm_l}=-\frac{1}{2}\frac{\alpha^2}{n^3}\left(\frac{1}{l+\frac{1}{2}}-\frac{3}{4n}\right)\delta_{ll'}\delta_{m_lm_l'},$$

$$(V_3)^{l'm_l'}_{lm_l}=-\frac{3n}{2}\sqrt{\left[\frac{(n^2-l^2)(l^2-m_l^2)}{4l^2-1}\right]}e\mathscr{E}\delta_{l',l-1}\delta_{m_l'm_l}。$$

若 $n=2$，则在电场中量子数 $l=1$，$m=m_l+m_s=\pm\frac{3}{2}\left(j=\frac{3}{2}\right)$ 的态的能量将不改变。由 V_1 和 V_2 引起的这一能级移动等于 $\alpha^2/128$ 原子单位（见 §11.23题）。

量子数 $n=2$，$m=\pm\frac{1}{2}$ 的能级的分裂，可由解下列久期方程

求得

$$\begin{vmatrix} -\frac{11}{4}\delta-E^{(1)} & \delta\sqrt{2} & 0 \\ \delta\sqrt{2} & -\frac{7}{4}\delta-E^{(1)} & -3e\mathscr{E} \\ 0 & -3e\mathscr{E} & -\frac{15}{4}\delta-E^{(1)} \end{vmatrix}=0,$$

其中$3\delta=\alpha^2/32$原子单位，是无外场时$n=2$能级的精细结构分裂。在这方程中引进量ϵ，它与$E^{(1)}$的关系为

$$E^{(1)}=\epsilon-\frac{11}{4}\delta$$

[$-\frac{11}{4}\delta$是三个能级的重心的能量，$(E_1^{(1)}+E_2^{(1)}+E_3^{(1)})/3=-\frac{11}{4}\delta$]。于是得到

$$\begin{vmatrix} -\epsilon & \delta\sqrt{2} & 0 \\ \delta\sqrt{2} & \delta-\epsilon & -3e\mathscr{E} \\ 0 & -3e\mathscr{E} & -\delta-\epsilon \end{vmatrix}=0,$$

或

$$\epsilon^3-\epsilon[3\delta^2+9(e\mathscr{E})^2]-2\delta^3=0.$$

我们将在弱场($e\mathscr{E}\ll\delta$)和强场($e\mathscr{E}\gg\delta$)两种情况下求解这个方程。在第一种情形下，得到

$$\epsilon_1=-\delta-\sqrt{3}e\mathscr{E}-\frac{(e\mathscr{E})^2}{\delta},$$

$$\epsilon_2=-\delta+\sqrt{3}e\mathscr{E}-\frac{(e\mathscr{E})^2}{\delta},$$

$$\epsilon_3=2\delta+2\frac{(e\mathscr{E})^2}{\delta}.$$

在第二种情况下，

$$\epsilon_1=-3e\mathscr{E}-\frac{1}{2}\frac{\delta^2}{e\mathscr{E}}+\frac{1}{9}\frac{\delta^3}{(e\mathscr{E})^2},$$

$$\epsilon_2=-\frac{2}{9}\frac{\delta^3}{(e\mathscr{E})^2},$$

$$\epsilon_3=3e\mathscr{E}+\frac{1}{2}\frac{\delta^3}{e\mathscr{E}}+\frac{1}{9}\frac{\delta^3}{(e\mathscr{E})^2}.$$

50. 将微扰能量算符

$$\hat{H}'=-(\boldsymbol{d}\cdot\mathscr{E}_0)=-d\mathscr{E}\cos\varphi,$$

加在未受微扰问题的哈密顿量上（见§1.32题），则薛定谔方程可写为

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\varphi^2}+\frac{2I}{\hbar^2}(E+d\mathscr{E}\cos\varphi)\psi=0,$$

其中φ是转动角，E是转子的能量。未受微扰问题的能级

$$E_m^{(0)}=\frac{\hbar^2m^2}{2I}\qquad(m=0,\pm1,\pm2,\cdots)$$

除最低能级外，其余能级对于角动量$M_z=m\hbar$的方向是二重简并的。然而，由于在考虑二级微扰论之前这个简并不被消除，所以这时我们可以应用非简并能级的微扰论。（$m=\pm1$的能级除外。）换句话说，未受微扰的波函数

$$\psi_m^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(im\varphi)$$

对于零级近似仍是好的函数。

微扰算符的矩阵元等于

$$H'_{m'm}=\int_0^{2\pi}\psi_{m'}^{(0)*}\hat{H}'\psi_m^{(0)}\,\mathrm{d}\varphi$$

$$=-\frac{e\mathscr{E}}{2\pi}\int_0^{2\pi}\exp[\mathrm{i}(m'-m)\varphi]\cos\varphi\mathrm{d}\varphi$$

$$=\begin{cases}0, & \text{当 } m'\neq m\pm1 \text{ 时},\\ -\dfrac{d\mathscr{E}}{2}, & \text{当 } m'=m\pm1 \text{ 时}.\end{cases}$$

由此看出，所有能级的一级能量修正都等于零。

$$E_m^{(1)}=H'_{mm}=0.$$

第m个能级的二级修正显然是

$$E_m^{(2)}=\frac{|H'_{m,m-1}|^2}{E_m^{(0)}-E_{m-1}^{(0)}}+\frac{|H'_{m,m+1}|^2}{E_m^{(0)}-E_{m+1}^{(0)}}=\frac{Id^2\mathscr{E}^2}{\hbar^2(4m^2-1)},$$

因此，在弱电场中，平面转子的能级精确到微扰论的二级近似时为

$$E_m=E_m^{(0)}+E_m^{(1)}+E_m^{(2)}=\frac{\hbar^2m^2}{2I}+\frac{Id^2\mathscr{E}^2}{\hbar^2(4m^2-1)}.$$

这个结果可以简单地得到解释。如果按通常的方法引入转子的极化率α作为感生偶极矩与外电场强度之比，我们就得到在外电场$\mathscr{E}$中，感生偶极矩的能量等于极化时所作的功：$-\alpha\int_0^{\mathscr{E}}\mathscr{E}\,\mathrm{d}\mathscr{E}$，它等于$-\frac{1}{2}\alpha\mathscr{E}^2$。把这个附加能量与刚才求得的第一个非零的能量修正相比较，我们就得到如下的极化率公式：

$$\alpha_m=-\frac{2Id^2}{\hbar^2(4m^2-1)}.$$

我们看到，当$m\neq0$时，极化率是负的，即转子的电矩$\boldsymbol{d}$的取向与电场$\mathscr{E}$反平行。当$m=0$时，情形正相反。

当平面转子快速转动时，这个结果与反平行极化的经典效应完全一致，而当平面转子慢速转动时，则与平行的经典效应完全一致。这里“快”的意思是指转子转动得足够快，以致它可以在场中完全翻转过来。

51. 如果阱宽为a，则极化率由下式给出

$$\alpha=\frac{4096}{\pi^4\hbar^2}\mu e^2a^4\sum_{p=1}^{\infty}\frac{p^2}{(4p^2-1)^5}.$$

当我们利用二级微扰论时，此式可由在外电场$\mathscr{E}$中能级移动的表

示式 $\Delta E=-\frac{1}{2}\alpha\mathscr{E}^2$ 得出。

52. 选$\mathscr{E}$的方向作为球坐标系的极轴，则微扰算符可写为

$$\hat{V}=V=-(\boldsymbol{d}\cdot\mathscr{E})=-d\mathscr{E}\cos\theta, \qquad (1)$$

式中 θ 是转子的轴（平行于 $\boldsymbol{d}$）与电场$\mathscr{E}$的夹角。

转子的未受微扰的定态的波函数为

$$\psi_{lm}^{(0)}(\theta,\ \varphi)=Y_{lm}(\theta,\ \varphi)$$

$$=\sqrt{\left[\frac{(2l+1)(l+m)!}{4\pi(l-m)!}\right]}P_l^m(\cos\theta)\exp(im\varphi) \qquad (2)$$

式中 θ 是刚引进的极角，φ 是转子轴的方位角。

函数(2)是正交归一化的：

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}Y_{lm}^*(\theta,\ \varphi)Y_{l'm'}(\theta,\ \varphi)\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi=\delta_{ll'}\delta_{mm'}. \qquad (3)$$

作为特例，基态的波函数为

$$\psi_{00}^{(0)}(\theta,\ \varphi)=Y_{00}=\sqrt{\frac{1}{4\pi}}. \qquad (4)$$

未受微扰的定态能级等于

$$E_l^{(0)}=\frac{l(l+1)\hbar^2}{2I},\quad E_0^{(0)}=0. \qquad (5)$$

我们将写出从基态(0，0)跃迁到激发态(l，m)时微扰算符的矩阵元：

$$V_{lm}^{00}=(V_{00}^{lm})^*=\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}[\psi_{00}^{(0)}(\theta,\ \varphi)]^*\hat{V}\psi_{lm}^{(0)}(\theta,\ \varphi)$$

$$\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi.$$

若利用方程(1)，(2)，(4)以及正交归一化条件(3)，并利用 $\sqrt{4\pi/3}\,Y_{10}(\theta,\ \varphi)$ 代替 $\cos\theta$，则得

$$(V_{lm}^{00})^*=V_{00}^{ml}=-(\boldsymbol{d}\cdot\mathscr{E})\sqrt{\left(\frac{4\pi}{3}\right)}\sqrt{\frac{1}{(4\pi)}}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}Y_{lm}^*(\theta,\ \varphi)$$

$$\cdot Y_{10}(\theta,\ \varphi)\sin\theta d\theta d\varphi$$

$$=-\frac{(\boldsymbol{d}\cdot\boldsymbol{\mathscr{E}})}{\sqrt{3}}\delta_{l1}\delta_{m0}. \qquad (6)$$

因此，只有一个矩阵元是非零的，它就是从基态 $l=m=0$ 到态 $l=1$，$m=0$ 的矩阵元。由于这个矩阵元是非对角的，所以能级的一级修正等于零。

按照微扰论的普遍公式，并利用方程(5)和(6)，则二级修正为

$$E_0^{(2)}=\sum_l{}'\sum_m\frac{|V_{lm}^{00}|^2}{E_0^{(0)}-E_l^{(0)}}=\frac{|V_{10}^{00}|^2}{E_0^{(0)}-E_1^{(0)}}=-\frac{(\boldsymbol{d}\cdot\boldsymbol{\mathscr{E}})^2 I}{3\hbar^2}. \qquad (7)$$

因此，三维转子基态能级的移动是负的；这一结果对任何量子力学体系基态能量的二级修正都是正确的。

微扰论适用的条件为：能级移动(7)比基态与第一激发态之间的能量差 $|E_0^{(0)}-E_1^{(0)}|$ 要小得多。

由此条件，我们得到

$$\mathscr{E}\ll\sqrt{3}\,\frac{\hbar^2}{dI}.$$

正如我们所预期的，这个不等式也表示微扰能 $(\sim\mathscr{E}d)$ 比相邻能级之间的距离 $(\sim\hbar^2/I)$ 要小得多。

我们利用归一化的球谐函数之间的递推公式

$$\cos\theta Y_{l,m}=\sqrt{\left[\frac{(l+1)^2-m^2}{(2l+3)(2l+1)}\right]}Y_{l+1,m}$$

$$+\sqrt{\left(\frac{l^2-m^2}{4l^2-1}\right)}Y_{l-1,m},$$

求得在 lm 态中的极化率公式

$$\alpha_{lm}=\frac{2I\mu^2}{\hbar^2}\left[\frac{(l+1)^2-m^2}{(2l+3)(2l+1)(l+1)}-\frac{l^2-m^2}{(2l+1)(2l-1)l}\right].$$

在上式中令 $m=0$，$l\to 0$，则能求出 $l=0$ 时 α_{lm} 的值。

认为刚性偶极子是“可极化”的，是很荒谬的。我们考虑 $l=1$ 的情况。当 $m=0$ 时，偶极子呈抗磁性；当 $m=\pm1$ 时，则呈顺磁性（即“正常的”）。

因为能量移动仅依赖于 $|m|$，所以存在部分简并性。最后，我们指出

$$\sum_{m=-l}^{+l} a_{lm}=0.$$

53. (a) $$E^{(1)}=\frac{m_j}{8j(j+1)}\frac{e\hbar}{\mu c}\left\{(2j+1)^2\mathscr{H}\right.$$

$$\left.\pm\sqrt{(2j+1)^2\mathscr{H}^2+\frac{36n^2}{\alpha^2}\left[n^2-\left(j+\frac{1}{2}\right)^2\right]\mathscr{E}^2}\right\}$$

$$\left(\alpha=\frac{e^2}{\hbar c}\right)$$

（见§7.46题和49题）。

(b) $$E^{(1)}\left(n=2,\ m_j=\pm\frac{3}{2}\right)=-\frac{\alpha^2}{128}\left(\frac{\mu e^4}{\hbar^2}\right)\pm\frac{e\hbar}{\mu c}\mathscr{H},$$

$$E^{(1)}\left(n=2,\ m_j=\pm\frac{1}{2}\right)=\epsilon-\frac{11}{384}\alpha^2\left(\frac{\mu e^4}{\hbar^2}\right)$$

其中 ϵ 由下列三次方程的解确定：

$$\epsilon^3\mp2\beta\epsilon^2-\epsilon(3\delta^2+9F^2-\beta^2)\pm2\delta^2\beta-2\delta^3=0,$$

式中

$$\beta=\frac{e\hbar}{2\mu c}\mathscr{H},\quad F=e\mathscr{E}\left(\frac{\hbar^2}{\mu e^2}\right),\quad \delta=\frac{\alpha^2}{96}\left(\frac{\mu e^4}{\hbar^2}\right).$$

在强场（$\delta\ll F$，$\delta\ll\beta$）情况下，我们有（见§7.49题）。

$$\epsilon_1=\pm\beta-3F-\frac{1}{2}\cdot\frac{9F\mp\beta}{9F^2\mp3F\beta}\delta^2,$$

$$\epsilon_2=\pm\frac{2\beta}{9F^2-\beta^2}\delta^2,$$

$$\epsilon_3=\pm\beta+3F+\frac{1}{2}\frac{9F\pm\beta}{9F\pm3F\beta}\delta^4.$$

54. 令Z轴沿磁场方向，而x轴沿电场方向。在此磁场和电场中，电子的势能算符由下式给出：

$$w=\frac{e\hbar}{2\mu c}(l_z+2s_z)\mathscr{H}+e\mathscr{E}x.$$

我们将此表示式当作小微扰，并以量子数n，l，m，σ来表征未受微扰的定态（m和σ分别为轨道角动量的z分量和自旋的z分量），x的非零矩阵元为

$$(x)^{l-1,m}_{l,m-1}=(x)^{l,m-1}_{l-1,m}$$

$$=\frac{3}{4}n\sqrt{\left[\frac{(n^2-l^2)(l-m+1)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}\right]}a,$$

$$(x)^{l,m}_{l-1,m-1}=(x)^{l-1,m}_{l,m}$$

$$=-\frac{3}{4}n\sqrt{\left[\frac{(n^2-l^2)(l+m-1)(l+m)}{(2l+1)(2l-1)}\right]}a$$

$$\left(a=\frac{\hbar^2}{\mu e^2}\right).$$

我们来讨论$n=2$的情况。为明确起见，设自旋的z分量等于$+\frac{1}{2}$，引用记号$\beta=(e\hbar/2\mu c)\mathscr{H}$，$\gamma=(3/\sqrt{2})e\mathscr{E}a$之后，微扰算符的矩阵有如下形式：

$$\begin{pmatrix} 2\beta & 0 & 0 & -\gamma \\ 0 & \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma \\ -\gamma & 0 & \gamma & \beta \end{pmatrix}.$$

我们按l和m值递减的次序对态进行编号。量子数$l=1$，$m=0$的态不与其他的态组合。这个态的能量$E_1^{(1)}=\beta$。微扰矩阵的其余三个本征值由下列久期方程的解确定：

$$E^3-3\beta E^2+2(\beta^2-\gamma^2)E+2\gamma^2\beta=0.$$

解此方程，得到

$$E_2^{(1)}=\beta,\quad E_{3,4}^{(1)}=\beta\pm\sqrt{(\beta^2+2\gamma^2)},$$

或者将 β 和 γ 的值代入得

$$E_2^{(1)}=\frac{e\hbar}{2\mu c}\mathscr{H},\quad E_{3,4}^{(1)}=\frac{e\hbar}{2\mu c}\left[\mathscr{H}\pm\sqrt{\left(\mathscr{H}^2+\frac{36}{a^2}\mathscr{E}^2\right)}\right].$$

55. $E\leqslant -4e^2/3\pi a_B$，其中 $a_B=\hbar^2/\mu e^2$ 是玻尔半径。

56. $E_0\leqslant\frac{1}{2}\hbar\omega$.

57. 在这种情况下，必须利用一个试探波函数，此波函数与上题中求得的波函数正交。这个试探波函数的最简单的形式是 $\psi=Bx\exp(-Cx^2)$。从而我们求得 $E_1\leqslant\frac{3}{2}\hbar\omega$.

58. 哈密顿量有如下形式（我们将采用原子单位 $e=\hbar=\mu=1$）：

$$\hat{H}=-\frac{1}{2}\nabla_1^2-\frac{1}{2}\nabla_2^2-\frac{Z}{r_1}-\frac{Z}{r_2}+\frac{1}{r_{12}}.$$

按照变分原理，需要算出积分

$$E(Z')=\int\psi^*(\boldsymbol{r}_1,\ \boldsymbol{r}_2)\hat{H}\psi(\boldsymbol{r}_1,\ \boldsymbol{r}_2)\mathrm{d}\tau_1\mathrm{d}\tau_2,$$

然后由条件 $\mathrm{d}E/\mathrm{d}Z'=0$ 决定 Z'。

在我们的情形下，有

$$\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=c\exp[-Z'(r_1+r_2)],$$

式中归一化常数 $c=Z'^3/\pi$。

前四项的积分容易算出：

$$\int\psi^*(\boldsymbol{r}_1,\ \boldsymbol{r}_2)\left(-\frac{1}{2}\nabla_1^2-\frac{1}{2}\nabla_2^2-\frac{Z}{r_1}-\frac{Z}{r_2}\right)\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\mathrm{d}\tau_1\mathrm{d}\tau_2$$
$$=Z'^2-2ZZ'.$$

至于含有 $1/r_{12}$ 的积分，用椭圆坐标来计算是方便的：

$$s=r_1+r_2,\quad t=r_1-r_2,\quad u=r_{12},$$

$$d\tau_1 d\tau_2 = \pi^2(s^2-t^2)u\,ds\;dt\;du,$$
$$-u \leqslant t \leqslant u,\quad 0 \leqslant u \leqslant s \leqslant \infty.$$

计算结果是

$$\int \psi^2(r_1, r_2)\frac{1}{r_{12}}d\tau_1 d\tau_2$$
$$= \pi^2 c^2 \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_{-u}^{+u} dt\ \exp(-2Z's)\ \frac{s^2-t^2}{u}u = \frac{5}{8}Z'.$$

最后我们得到

$$E(Z') = Z'^2 - 2ZZ' + \frac{5}{8}Z'.$$

由 $E(Z')$取极小值的条件，我们求得

$$Z' = Z - \frac{5}{16}.$$

对于这个 Z' 值，基态能量为

$$E = -\left(Z - \frac{5}{16}\right)^2.$$

为了看出所得结果的精确度如何，我们来计算氦（$Z=2$）的电离电势，并将所得结果和实验值比较，氦的电离电势 I_{He}，等于一次电离的氦原子和中性氦原子处于基态时的能量之差，I_{He} 的值为

$$I_{He} = 0.847\text{原子单位} = 1.695\text{里德伯}.$$

（1 原子单位=2 里德伯=27 电子伏）。I_{He} 的实验值为1.810里德伯.

其他双电子体系，如 Li^+，Be^{++}，等等的电离电势的实验值也已知道。其实验值和理论值比较如下：

元　　素	He ($Z=2$)	Li^+ ($Z=3$)	Be^{++} ($Z=4$)	B^{+++} ($Z=5$)	C^{++++} ($Z=6$)
$I_{理论}$（里德伯）	1.6952	5.445	11.196	18.945	28.695
$I_{实验}$（里德伯）	1.810	5.560	11.307	19.061	28.816

由表可见，基态能量的计算结果和实验结果满意地符合。

60. 氦原子处于基态时，它的轨道角动量和自旋角动量都等于零。因此，氦具有抗磁性。1 摩尔氦的抗磁磁化率由下式给出：

$$\chi=-\frac{e^2N_A}{6\mu c^2}(\overline{r_1^2+r_2^2}),$$

式中

$$\overline{r_1^2+r_2^2}=\int(r_1^2+r_2^2)\psi^2d\tau_1d\tau_2,$$

而 N_A 是阿伏伽德罗数。氦原子基态波函数的近似表示式是

$$\psi(r_1,\ r_2)=\frac{Z'^3}{\pi a^3}\exp[-Z'(r_1+r_2)/a].$$

利用此波函数计算平均值$\overline{r_1^2+r_2^2}$，得到

$$\overline{r_1^2+r_2^2}=\frac{6a^2}{Z'^2}$$

将此值代入抗磁磁化率的表示式中，则得：

$$\chi=-1.67\times10^{-6}.$$

而实验值是

$$\chi=-(1.90\pm0.02)\times10^{-6}$$

61.* 为了方便起见，引进以下符号：

$$Z_1=\alpha,\ Z_2=2\beta,\ 2Z_1^{\frac{3}{2}}=a,\ \sqrt{2}Z_2^{\frac{3}{2}}=b.$$

由波函数的正交归一化条件，我们得到：

$$\gamma Z_2=\frac{1}{2}(\alpha+\beta),\qquad b^2=\frac{12\beta^5}{\alpha^2-\alpha\beta+\beta^2}.$$

利用这些新变数，可将 ψ_1 和 ψ_2 写为

$$\psi_1=\psi_{100}=ae^{-\alpha r}Y_{00},$$

$$\psi_2=\psi_{200}=b\left[1-\frac{1}{3}(\alpha+\beta)r\right]e^{-\beta r}Y_{00}.$$

锂原子基态的近似波函数可表为如下形式：

$$\Phi=\frac{1}{\sqrt{3!}}\begin{vmatrix}\psi_1(1)\eta_+(\sigma_1) & \psi_1(2)\eta_+(\sigma_2) & \psi_1(3)\eta_+(\sigma_3)\\ \psi_1(1)\eta_-(\sigma_1) & \psi_1(2)\eta_-(\sigma_2) & \psi_1(3)\eta_-(\sigma_3)\\ \psi_2(1)\eta_+(\sigma_1) & \psi_2(2)\eta_+(\sigma_2) & \psi_2(3)\eta_+(\sigma_3)\end{vmatrix},$$

其中$\eta_+\left(\frac{1}{2}\right)=1$，$\eta_+\left(-\frac{1}{2}\right)=0$，$\eta_-\left(\frac{1}{2}\right)=0$，$\eta_-\left(-\frac{1}{2}\right)=1$。在这个态中，$S=\frac{1}{2}$，$M=\frac{1}{2}$。

在我们的问题中，哈密顿算符为（用原子单位$e=\hbar=\mu=1$）

$$H=\sum_{i=1}^{3}\left(-\frac{1}{2}\nabla_i^2-\frac{Z}{r_i}\right)+\frac{1}{r_{12}}+\frac{1}{r_{23}}+\frac{1}{r_{31}}.$$

我们来计算在态Φ中的能量。

电子在$1s$态中的动能为

$$T_1=\int\left(-\psi_1\frac{1}{2}\nabla^2\psi_1\right)d\tau=\int_0^\infty\left(\frac{d\psi_1}{dr}\right)^2r^2dr=\frac{1}{2}\alpha^2,$$

而在$2s$态中则为

$$T_2=\frac{\beta^2}{6}+\frac{\beta^2}{\alpha^2-\alpha\beta+\beta^2}.$$

内电子与核的相互作用能为

$$V_1=-\int\frac{Z\psi_1^2}{r}d\tau=Z\alpha^2\int_0^\infty\frac{e^{-2\alpha r}}{r}r^2dr=-Z\alpha,$$

外电子与核的相互作用能为（对于锂，$Z=3$）

$$V_2=-\frac{Z\beta}{2}+\frac{Z\beta^2}{2}\cdot\frac{\alpha-2\beta}{\alpha^2-\alpha\beta+\beta^2}.$$

内电子间的库仑相互作用能为

$$K_{11}=\iint\frac{1}{r_{12}}|\psi_1(r_1)|^2|\psi_1(r_2)|^2d\tau_1d\tau_2=\frac{5}{8}\alpha.$$

外电子和内电子的相互作用能等于

$$2K_{12}=2\iint\frac{1}{r_{12}}|\psi_1(r_1)|^2|\psi_2(r_2)|^2d\tau_1d\tau_2$$

$$=2\alpha-\frac{2\alpha^3}{(\alpha+\beta)^2}-\frac{\alpha^4\beta(3\alpha+\beta)}{(\alpha+\beta)^3(\alpha^2-\alpha\beta+\beta^2)}.$$

自旋平行的两个电子的交换相互作用能为

$$A=2a^2b^2\int_0^\infty \exp\left[-(\alpha+\beta)r_2\right]\left[1-\frac{1}{3}(\alpha+\beta)r_2\right]r_2^2\mathrm{d}r_2$$

$$\times\int_{r_2}^\infty \exp\left[-(\alpha+\beta)r_1\right]\left[1-\frac{1}{3}(\alpha+\beta)r_1\right]r_1\mathrm{d}r_1$$

$$=\frac{4\alpha^3\beta^5}{(\alpha+\beta)^5(\alpha^2-\alpha\beta+\beta^2)}.$$

令 $\beta=\lambda\alpha$，则得：

$$2T_1+T_2=T=\alpha^2\varphi_1(\lambda),$$

$$2V_1+V_2+K_{11}+2K_{12}-A=-\alpha\varphi_2(\lambda),$$

$$E=\alpha^2\varphi_1(\lambda)-\alpha\varphi_2(\lambda).$$

当 α 和 λ 的值满足条件

$$\frac{\partial E}{\partial\alpha}=0,\qquad \frac{\partial E}{\partial\lambda}=0$$

或

$$2\alpha\varphi_1(\lambda)-\varphi_2(\lambda)=0,\quad \alpha\varphi_1'(\lambda)-\varphi_2'(\lambda)=0$$

时，能量取极小值；消去 α，则得：

$$\frac{\varphi_1'(\lambda)}{\varphi_1(\lambda)}-\frac{2\varphi_2'(\lambda)}{\varphi_2(\lambda)}=0,\quad \lambda=0.2846.$$

相应的 α 和 β 的值为

$$\alpha=2.694,\quad \beta=0.767.$$

将求得的变分参数的值代入 E 中，则得锂原子基态的能量为

$E=-7.414$ 原子单位或 $E=-200.8\mathrm{eV}$.

实验值 $E_{实验}=-202.54\mathrm{eV}$. 应用微扰论，亦即令 $\alpha=3$，$\beta=\frac{3}{2}$，我们得到基态能量值 $E=-7.05$ 原子单位，或用 eV 表示，

$$E=-190.84\mathrm{eV},$$

其精确度比变分法差.

62. 总能量的平均值等于

$$\bar{H}=\frac{\int\psi_0^*(1+\lambda u)\hat{H}\psi_0(1+\lambda u)\mathrm{d}\tau}{\int\psi_0^*\psi_0(1+\lambda u)^2\mathrm{d}\tau}. \tag{1}$$

对分子中的式子分部积分，则上式可简化。

电子的动能算符为

$$\hat{T}=-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\nabla_i^2,$$

其中 n 是电子的数目，而 ∇_i^2 是第 i 个电子的拉普拉斯算符。(我们采用原子单位。) 把动能平均值的表示式写成对 ψ_0^* 和 ψ_0 对称的形式：

$$\bar{T}=-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{2}\int\{\psi_0^*(1+\lambda u)\nabla_i^2(1+\lambda u)\psi_0$$

$$+\psi_0(1+\lambda u)\nabla_i^2(1+\lambda u)\psi_0^*\}\mathrm{d}\tau$$

将积分号下的式子微分，我们得到：

$$\bar{T}=-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{2}\int[\psi_0^*(1+\lambda u)^2\nabla_i^2\psi_0+\psi_0(1+\lambda u)^2\nabla_i^2\psi_0^*$$

$$+2\lambda\psi_0\psi_0^*(1+\lambda u)\nabla_i^2u+2\lambda(1+\lambda u)\ (\nabla_i(\psi_0^*\psi_0)\cdot\nabla_iu)]\mathrm{d}\tau. \tag{2}$$

为了变换上式中最后两项，我们利用下面的等式，

$$\{\nabla_i\cdot[\psi_0^*\psi(1+\lambda u)\nabla_iu]\}$$

$$=\psi_0^*\psi_0(1+\lambda u)\nabla_i^2u+(1+\lambda u)(\nabla_i(\psi_0^*\psi_0)\cdot\nabla_iu)$$

$$+\lambda\psi_i^*\psi(\nabla_iu\cdot\nabla_iu). \tag{3}$$

将(3)式对整个组态空间积分，则得

$$\int\{\psi_0^*\psi_0(1+\lambda u)\nabla_i^2u+(1+\lambda u)(\nabla_i(\psi_0^*\psi_0)\cdot\nabla_iu)\}\mathrm{d}\tau$$

$$=-\lambda\int\psi_0^*\psi(\nabla_i u\cdot\nabla_i u)\mathrm{d}\tau \qquad (4)$$

将(4)式代入(2)式，得

$$\overline{T}=-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{2}\int[\psi_0^*(1+\lambda u)^2\nabla_i^2\psi_0+\psi_0(1+\lambda u)^2\nabla_i^2\psi_0^*]\mathrm{d}\tau$$

$$+\frac{1}{2}\lambda^2\sum_{i=1}^{n}\int\psi_0^*\psi_0(\nabla_i u\cdot\nabla_i u)\mathrm{d}\tau.$$

哈密顿算符$\hat{H}$等于$\hat{H}=\hat{H}_0+u=\hat{T}+\hat{V}+u$。因为$\hat{V}$和$(1+\lambda u)$对易，故(1)式可写成如下形式：

$$\overline{H}=E_0+$$

$$\frac{1}{2}\int(1+\lambda u)^2(\psi_0^*\hat{H}\psi_0+\psi_0\hat{H}\psi_0^*)\mathrm{d}\tau+\frac{1}{2}\lambda^2\sum_{i=1}^{n}\int\psi^*\psi_0(\nabla_i u\cdot\nabla_i u)\mathrm{d}\tau$$

$$\int(1+\lambda u)^2\psi_0^*\psi_0\mathrm{d}\tau$$

由于$\hat{H}_0\psi_0=E_0\psi_0$，我们有

$$\overline{H}=E_0+\int\psi_0^*u(1+\lambda u)^2\psi_0\mathrm{d}\tau+\frac{1}{2}\lambda^2\sum_{i=1}^{n}\psi_0^*\psi_0(\nabla_i u\cdot\nabla_i u)\mathrm{d}\tau$$

$$\int(1+\lambda u)^2\psi_0^*\psi_0\mathrm{d}\tau$$

或

$$\overline{H}=E_0+$$

$$\frac{(u)_{00}+2\lambda(u^2)_{00}+\lambda^2(u^3)_{00}+\frac{1}{2}\lambda^2\sum_{i=1}^{n}[(\nabla_i u\cdot\nabla_i u)]_{00}}{1+2\lambda(u)_{00}+\lambda^2(u^2)_{00}}, \qquad (5)$$

其中$(u)_{00}=\int\psi_0^*u\psi_0\mathrm{d}\tau$，$(u^2)_{00}=\int\psi_0^*u^2\psi_0\mathrm{d}\tau$等等。我们把(5)式

中的第二项展成幂级数，略去$(u^3)_{00}$，$(u)_{00}^3$等项。

我们求得能量修正ΔE的近似表示式为：

$$\Delta E \approx (u)_{00}+2\lambda(u^2)_{00}-2\lambda(u)_{00}^2+\frac{1}{2}\lambda^2\sum_{i=1}^{n}[(\nabla_i u\cdot\nabla_i u)]_{00} \tag{6}$$

变分参数λ由下列条件决定：

$$\frac{d\Delta E}{d\lambda}=2(u^2)_{00}-2(u)_{00}^2+\lambda\sum_{i=1}^{n}[(\nabla_i u\cdot\nabla_i u)]_{00}=0$$

由此得到λ的表示式为

$$\lambda=2\frac{(u)_{00}^2-(u^2)_{00}}{\sum_{i=1}^{n}[(\nabla_i u\cdot\nabla_i u)]_{00}}.$$

将此值代入(6)式中，我们得到所要求的关系式

$$\Delta E\approx(u)_{00}-2\frac{[(u)_{00}^2-(u^2)_{00}]}{\sum_{i=1}^{n}[(\nabla_i u\cdot\nabla_i u)]}. \tag{7}$$

63 如果原子处在强度为$\mathscr{E}$，方向沿z轴的均匀电场中，则微扰算符为

$$u=-\mathscr{E}\sum_{i=1}^{n}z_i=-\mathscr{E}z,$$

它的矩阵元$(u)_{00}$等于零（采用原子单位）。

根据上题中的(7)式，我们有

$$\Delta E\approx-2\mathscr{E}^2\frac{[(z^2)_{00}]}{n},$$

式中n是电子的数目。

由此得，原子的极化率为

$$\alpha=\frac{4[(z^2)_{00}]^2}{n}.$$

必须指出，因为这个公式是用只引进一个变分参数 λ 的办法得到的，故它只对氢原子和氦原子才是一个合理的近似。对于有几个电子壳层的原子，各壳层的形变将不相同。因此，为了用变分法得到较满意的结果，应对每个壳层引进各自的变分参数。

对于氢原子，我们有

$$(z^2)_{00}=\frac{1}{3}(r^2)_{00}=\frac{1}{3}\cdot\frac{4\pi}{\pi}\int_0^\infty \exp(-2r)r^4dr=1,$$

因而

$$\alpha=4\text{ 原子单位}.$$

在 CGS 单位制中，

$$\alpha=4\left(\frac{\hbar^2}{\mu e^2}\right)\text{cm}^3.$$

对于氦原子，我们取基态波函数为（见 §7.59题）

$$\psi_0=\frac{Z_{\text{有效}}^3}{\pi}\exp[-Z_{\text{有效}}(r_1+r_2)],$$

式中

$$Z_{\text{有效}}=\frac{27}{16}.$$

计算结果为

$$\alpha=0.98\text{原子单位}\quad\text{或}\quad\alpha=0.98\left(\frac{\hbar^2}{\mu e^2}\right)\text{cm}^3.$$

由这个α值求得在正常情形下氦的介电常数

$$\epsilon=1.00049,$$

而实验值为1.00074。

计算值和实验值相差较大，主要是由于我们对未受微扰的波函数，作了较粗糙的近似。

64. 球心处的点电荷所产生的库仑势与分布在球面上的电

荷产生的势在球外是完全相同的，只要两种情形下的总电荷相同。在球内，两种势的差为

$$\Delta\varphi=-Ze\left(\frac{1}{r}-\frac{1}{a}\right).$$

原子中电子势能的改变为

$$\Delta V=-Ze^2\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{1}{r_i}-\frac{1}{a}\right)\epsilon(r_i),$$

其中，我们引进了辅助函数

$$\epsilon(r)=\begin{cases}1 & r<a,\\ 0 & r>a.\end{cases}$$

根据一级微扰论，能级的移动为

$$\Delta E=-Ze^2\int|\psi|^2\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{1}{r_i}-\frac{1}{a}\right)\epsilon(r_i)\mathrm{d}\tau_1\cdots\mathrm{d}\tau_N.$$

除一个变量外，对所有其他的变量积分，我们得

$$\int|\psi(r_1,r_2,\cdots,r_N)|^2\mathrm{d}\tau_2\cdots\mathrm{d}\tau_N=\frac{1}{N}\rho(r),$$

其中$\rho(r)$是电子密度。

因此，得

$$\Delta E=-Ze^2\int\rho(r)\left(\frac{1}{r}-\frac{1}{a}\right)\epsilon(r)\mathrm{d}\tau.$$

由于$\rho(r)$在$r<a$的区域中改变很小，可将它移出积分号外，并令它等于它在原点的值，则得

$$\Delta E=-Ze^2\rho(0)\frac{2\pi}{3}a^2. \qquad (1)$$

65. 我们把方程

$$\Delta E=\int|\psi_0|^2\Delta V\mathrm{d}^3r \qquad (1)$$

当作能级移动公式（见上题），其中ΔV是实际势能与库仑势能

之差，而 ψ_0 则是基态波函数。如果$\rho(r)$是核电荷密度，而且它是归一化的，因而

$$\int\rho(r)\mathrm{d}^3r=Ze. \tag{2}$$

此外，半径平方的平均值$\langle r^2\rangle$满足方程

$$\int\rho(r)r^2\mathrm{d}^3r=Ze\langle r^2\rangle. \tag{3}$$

对于ΔV，我们有方程

$$\Delta V(r)=-\frac{Ze}{r}+\frac{1}{r}\int_0^r\rho(r')\mathrm{d}^3r'-\int_0^\infty\frac{\rho(r')\mathrm{d}^3r'}{r'}. \tag{4}$$

将(4)式代入(1)式，分部积分，并利用ψ_0在核电荷密度复盖范围内变化很小的事实，再运用(2)式和(3)式，我们得到

$$\Delta E=-\frac{2\pi Ze^2}{3}|\psi_0(0)|^2\langle r^2\rangle. \tag{5}$$

如果和上题一样，电荷分布在球壳上，那末(5)式将化为上题的(1)式。

66*. s电子的波函数为

$$\psi_n(r)=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\frac{\chi_n(r)}{r},$$

式中$\chi_n(r)$满足方程

$$\chi_n''+\frac{2\mu}{\hbar^2}[E_n-V(r)]\chi_n=0$$

和归一化条件$\int_0^\infty\chi_n^2\mathrm{d}r=1$。

在半经典近似下，χ_n的方程有解

$$\chi_n=\frac{A_n}{\sqrt{p_n}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_0^r p_n\,\mathrm{d}r+\varphi\right), \tag{1}$$

其中

$$p_n=\sqrt{\{2\mu[E_n-V(r)]\}}.$$

然而，这个解在 r 很小的区域是不适用的。的确，如果 r 很小

($r \ll \hbar^2/Z^{\frac{1}{3}}\mu e^2$)，则首先可略去对核场的屏蔽，而设$V(r)=-Ze^2/r$；其次，与$V(r)$相比，还可忽略$E_n$。若将$p=\sqrt{(2\mu Ze^2/r)}$代入半经典近似的适用性条件

$$\frac{\mathrm{d}(\hbar/p)}{\mathrm{d}r} \ll 1,$$

则得

$$r \gg \frac{\hbar^2}{Z\mu e^2}.$$

为了得到适用于小r值的χ_n的表示式，我们仍由原方程出发，用$-Ze^2/r$代替其中的$V(r)$，而忽略E_n：

$$\chi_n'' + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(\frac{Ze^2}{r}\right)\chi_n = 0.$$

此方程有如下的解：

$$\chi_n = C_n\sqrt{r}\,J_1\left[2\sqrt{\left(\frac{2\mu Ze^2 r}{\hbar^2}\right)}\right]. \qquad (2)$$

为了找出常数C_n和A_n间的联系，我们注意到，半经典解(1)的适用区域

$$r \gg \frac{\hbar^2}{2\mu e^2},$$

与略去对核场的屏蔽时解(2)的适用区域

$$r \ll \frac{\hbar^2}{Z^{\frac{1}{3}}\mu e^2},$$

当Z的值很大时相互重叠；因此，在区域

$$\frac{\hbar^2}{Z\mu e^2} \ll r \ll \frac{\hbar^2}{Z^{\frac{1}{3}}\mu e^2}.$$

中，解(1)和解(2)应该一致。

我们来证明解(1)和解(2)在共同适用区域中相同。为此，在

(1)中令 $p=\sqrt{(2\mu Ze^2/r)}$，于是得

$$\chi_n=\frac{A_n\sqrt{r}}{\sqrt[4]{(2\mu Ze^2)}}\cos\left[\frac{2\sqrt{(2\mu Ze^2r)}}{\hbar}+\varphi\right],$$

$$\frac{\hbar^2}{Z\mu e^2}\ll r\ll\frac{\hbar^2}{Z^{\frac{1}{3}}\mu e^2} \tag{3}$$

条件$r\gg\hbar^2/Z\mu e^2$意味着(2)式中的贝塞耳函数的宗量很大．但对大的宗量值（$x\gg1$），我们有

$$J_1(x)\approx\sqrt{\frac{2}{\pi x}}\cos\left(x-\frac{3\pi}{4}\right).$$

因此，解(2)的形式为

$$\chi_n=C_n\sqrt{r}\sqrt{\left[\frac{\hbar}{\pi\sqrt{(2\mu Ze^2r)}}\right]}\cos$$

$$\left[\frac{2\sqrt{(2\mu Ze^2r)}}{\hbar^2}-\frac{3\pi}{4}\right],$$

$$\frac{\hbar}{Z\mu e^2}\ll r\ll\frac{\hbar^2}{Z^{\frac{1}{3}}\mu e^2}.$$

将此式与(3)式比较，得

$$\varphi=-\frac{3\pi}{4},\ A_n=C_n\sqrt{\frac{\hbar}{\pi}}.$$

现在可以求$\psi^2(0)$．当$x\ll1$时，我们有$J_1(x)=x/2$．利用(2)式，得

$$\left.\frac{\chi_n}{r}\right|_{r\to0}=C_n\sqrt{\left(\frac{2\mu Ze^2}{\hbar^2}\right)}=\sqrt{\left(\frac{2\pi\mu Ze^2}{\hbar^3}\right)}A_n.$$

因而

$$\psi_n^2(0)=\frac{\mu Ze^2}{2\hbar^3}A_n^2.$$

常数A_n由归一化条件确定：

$$\int_0^\infty \chi_n^2 \mathrm{d}r = A_n^2 \int_0^\infty \frac{\cos^2\left(\frac{1}{\hbar}\int_0^r p_r \mathrm{d}r - \frac{3\pi}{4}\right)}{\sqrt{\{2\mu[E_n - V(r)]\}}} \mathrm{d}r$$

$$\approx \frac{A_n^2}{2} \int \frac{\mathrm{d}r}{\sqrt{\{2\mu[E_n - V(r)]\}}} = 1.$$

量子化条件为

$$\int \sqrt{\{2\mu[E_n - V(r)]\}}\, \mathrm{d}r = \pi(n+\gamma)\hbar,$$

它确定E_n作为n的函数，若将它对n微分，则得

$$\mu \frac{\mathrm{d}E_n}{\mathrm{d}n} \int \frac{\mathrm{d}r}{\sqrt{\{2\mu[E_n - V(r)]\}}} = \pi\hbar.$$

将上式与归一化条件比较，则得

$$A_n^2 = \frac{2\mu}{\pi\hbar} \frac{\mathrm{d}E_n}{\mathrm{d}n},$$

于是最后得

$$\psi_n^2(0) = \frac{Ze^2\mu^2}{\pi\hbar^4} \frac{\mathrm{d}E_n}{\mathrm{d}n}. \qquad (4)$$

对于无屏蔽的库仑场，我们有

$$E_n = -\frac{Z^2}{2n^2} \frac{\mu e^4}{\hbar^2}$$

于是由(4)式求得 $\psi_n^2(0) = \frac{Z^3}{\pi n^3}\left(\frac{\mu e^2}{\hbar^2}\right)^3$. 它与严格计算得到的结果相同。在原子光谱学中，常用到下列价电子激发态能级的公式

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{(n-\sigma)^2},$$

式中σ是所谓量子亏损，它和n只有微弱的依赖关系。利用 E_n 的这个公式，我们得

$$\psi^2(0) = \frac{Z}{\pi} \frac{\mu^3 e^6}{\hbar^6} \frac{(1 - \mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}n)}{(n-\sigma)^3}.$$

67*. 用r_1和r_2表示电子相对于核的径矢，我们就有类氦的

双电子体系的定态薛定谔方程：

$$\hat{H}\Psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=E\Psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2), \tag{1}$$

式中哈密顿量$\hat{H}$具有如下形式：

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}(\nabla_{r_1}^2+\nabla_{r_2}^2)-Ze^2\left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right)+\frac{e^2}{r_{12}}. \tag{2}$$

把最后一项当作微扰，并记为H'．我们将按原子单位（$\hbar=e=\mu=1$）进行计算．

由于未受微扰的哈密顿量 $\hat{H}_0=\hat{H}-\hat{H}'$，是两个单电子哈密顿量之和，所以，所讨论的体系的未受微扰的基态波函数，等于在电荷为Z的核场中的两个类氢函数之乘积（由于类氢原子的基态远低于激发态，显然类氦体系的基态，可以由相应的类氢体系的基态构成）：

$$\begin{aligned}\Psi^{(0)}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=\psi_0(\boldsymbol{r}_1)\psi_0(\boldsymbol{r}_2)&=\frac{Z^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}}\exp(-Zr_1)\\&\cdot\frac{Z^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}}\exp(-Zr_2)\\&=\frac{Z^3}{\pi}\exp[-Z(r_1+r_2)],\end{aligned} \tag{3}$$

而未受微扰的基态能量，等于两个类氢原子的基态能量之和：

$$E^{(0)}=-\frac{Z^2}{2}-\frac{Z^2}{2}=-Z^2. \tag{4}$$

所要求的对基态能量的一级修正，等于微扰能量 $\hat{H}'$在未受微扰的态(3)中的平均值：

$$\begin{aligned}E^{(1)}=H'&=\iint\Psi_0^*(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\hat{H}'\Psi_0(\boldsymbol{r}_2,\ \boldsymbol{r}_2)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2\\&=\frac{Z^6}{\pi^2}\iint\exp\left[-2Z(r_1+r_2)\right]\frac{1}{r_{12}}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2\end{aligned} \tag{5}$$

此积分可用各种方法来计算，我们将采用较简单的一种方法．

$1/r_{12}=1/|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|$这个量是勒让德多项式的母函数：

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}=\begin{cases}\dfrac{1}{r_1}\sum_{l=0}^{\infty}\left(\dfrac{r_2}{r_1}\right)^l P_l(\cos\theta)\text{，当}r_1\geqslant r_2\text{时} & (6')\\ \dfrac{1}{r_2}\sum_{l=0}^{\infty}\left(\dfrac{r_1}{r_2}\right)^l P_l(\cos\theta)\text{，当}r_1\leqslant r_2\text{时} & (6'')\end{cases}$$

其中θ是$\mathbf{r}_1$和$\mathbf{r}_2$之间的夹角。我们来积分(5)式，例如，先对r_2积分，并按方程(6′)和(6″)分开积分区域，则得

$$E^{(1)}=\frac{Z^6}{\pi^2}\int \mathrm{d}^3\mathbf{r}_1\exp(-2Zr_1)$$

$$\times\left\{\int_{r_2=0}^{r_1}\mathrm{d}^3\mathbf{r}_2\exp(-2Zr_2)\ \frac{1}{r_1}\sum_{l=0}^{\infty}\left(\frac{r_2}{r_1}\right)^l P_l(\cos\theta)\right.$$

$$\left.+\int_{r_2=r_1}^{\infty}\mathrm{d}^3\mathbf{r}_2\exp(-2Zr_2)\frac{1}{r_2}\sum_{l=0}^{\infty}\left(\frac{r_1}{r_2}\right)^l P_l(\cos\theta)\right\}.$$

若取球坐标系的极轴沿$\mathbf{r}_1$并利用勒让德多项式的正交关系

$$\int_0^{\pi}P_l(\cos\theta)\sin\theta\mathrm{d}\theta=\int_0^{\pi}P_l(\cos\theta)P_0(\cos\theta)\sin\theta\mathrm{d}\theta$$

$$=\frac{2}{2l+1}\delta_{l0}.$$

则对角度积分后，大括号中的式子只剩下两项，

$$E^{(1)}=\frac{Z^6}{\pi^2}\int\mathrm{d}\mathbf{r}_1\exp(-2Zr_1)\cdot 4\pi\left\{\frac{1}{r_1}\int_0^{r_1}\exp(-2Zr_2)r_2^2\,\mathrm{d}r_2\right.$$

$$\left.+\int_{r_1}^{\infty}\exp(-2Zr_2)r_2\mathrm{d}r_2\right\}.$$

把余下的初等积分算出，最后得到

$$E^{(1)}=\frac{5}{8}Z. \qquad (7)$$

这个修正量的正号，意味着电子是相互排斥的，这是理所当然的。

根据(4)式和(7)式，我们得到类氦原子或离子在一级近似下的基态能量为

$$E\approx E^{(0)}+E^{(1)}=-\left(Z^2-\frac{5}{8}Z\right). \qquad (8)$$

或者用通常的单位

$$E\approx-\left(Z^2-\frac{5}{8}Z\right)\frac{\mu e^4}{\hbar^2}=-\left(Z^2-\frac{5}{8}Z\right)\times 27.1\text{eV} \qquad (8')$$

一次电离电势V_1是把一个电子刚好激发到连续谱的态所需要的能量。

显然，这个量等于由(8)式给出的总电离能$-E$，与单电子原子或离子的电离能（等于$\frac{1}{2}Z^2$原子单位）之差。

$$V_1=\left(Z^2-\frac{5}{8}Z\right)-\frac{1}{2}Z^2=\left(\frac{1}{2}Z^2-\frac{5}{8}Z\right)\text{原子单位}$$

$$=\left(\frac{1}{2}Z^2-\frac{5}{8}Z\right)\times 27.1\text{eV}. \qquad (9)$$

从(8)式可以看出，只要$Z\gg 1$，微扰论就可用于本题的情况（在这里所讨论的简单例子中，我们并不要求很严格地考虑微扰论的适用性条件；但如果我们需求出波函数的一级修正或能量的二级修正，就必须严格地加以考虑。）

值得注意的是，尽管我们的计算相对来说是粗糙的，但对于$Z=2$（氦原子）的情况，计算求得的结合能值与实验值相符的精确度约为5%。对于更大的Z值（$Z=3$：Li^+，$Z=4$：Be^{++}，…），自然会符合得更好。

由(9)式算得的一次电离电势V_1与实验值符合得不那么好，例如，对于氦（$Z=2$），两者之差约为15%。

68. 对于一级修正来说，三次项对能级变化无贡献。受微扰的本征值为

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega+\frac{3}{4}\beta(2n^2+2n+1)\left(\frac{\hbar}{\mu\omega}\right)^3$$

$$-\frac{1}{8}\frac{\alpha^2}{\hbar\omega}(30n^2+30n+11)\left(\frac{\hbar}{\mu\omega}\right)^5$$

$$-\frac{1}{8}\frac{\beta^2}{\hbar\omega}(34n^3+51n^2+59n+21)\left(\frac{\hbar}{\mu\omega}\right)^4.$$

69. 无微扰体系的三个最低能级是：

$E=E_0=\hbar\omega$的无简并的单态；

$E=E_1=2\hbar\omega$ 的四重简并的能级，对应于一个三重简并的三重态和一个无简并的单态；

$E=E_2=3\hbar\omega$ 的五重简并的能级，对应于一个三重简并的三重态和两个无简并的单态。

至V_0的一级近似，三重态的能量保持不变。最后的能量本征值和它们的剩余简并度是（注意，与 E_2 相应的两个单态仍具有相同的能量）：

$E_0'=\hbar\omega+V_0/\sqrt{(2\pi)}$，$g_0=1$；$E_{1t}'=2\hbar\omega$，$g_{1t}=3$；

$E_{1s}'=2\hbar\omega+V_0/\sqrt{(2\pi)}$，$g_{1s}=1$；$E_{2t}'=3\hbar\omega$，$g_{2t}=3$；

$E_{2s}'=3\hbar\omega+3V_0/4\sqrt{(2\pi)}$，$g_{2s}=2$。

70*. 首先，我们指出，特征时间参数τ应这样引入到微扰场中，使得电场在整个微扰期间按经典方式传给振子的总冲量P与τ无关：

$$P=\int_{\infty}^{+\infty}e\mathscr{E}(t)\,dt=\frac{eA}{\sqrt{\pi}\tau}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-\left(\frac{t}{\tau}\right)^2\right]dt=eA=\text{常数} \tag{1}$$

从图形上看，这意味着对所有的τ值，曲线下的面积都相同（见图42）.

从分立谱的第n个定态跃迁到第k个定态的几率等于

$$w_{nk}=\frac{1}{\hbar^2}\left|\int_{-\infty}^{\infty}V_{kn}\exp(i\omega_{kn}t)\,dt\right|^2, \tag{2}$$

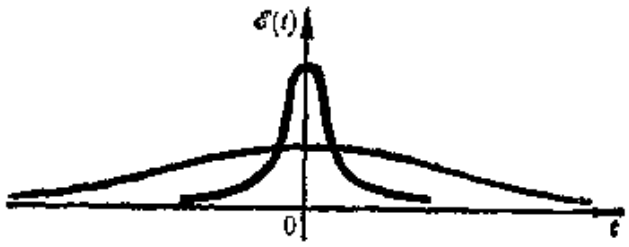


图 42

这里，$V_{kn}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_k^{(0)*}\hat{V}\,\psi_n^{(0)}\mathrm{d}x$ 是微扰 $\hat{V}$ 的矩阵元，$\omega_{kn}=\frac{1}{\hbar}[E_k^{(0)}-E_n^{(0)}]$，其中$\psi_k^{(0)}$，$\psi_n^{(0)}$，$E_k^{(0)}$，$E_n^{(0)}$是相应的（未受微扰的）定态波函数和能级。

我们用e，μ和ω表示振子的电荷，质量和本征频率，用 x 表示，离开平衡位置的位移。在所考虑的均匀电场中，微扰算符为

$$\hat{V}(x,t)=-ex\mathcal{E}\sim x.$$

众所周知，在能量表象中，振子的坐标矩阵只有下面这些矩阵元不为零：$x_{n,n+1}=x_{n+1,n}=\sqrt{[(n+1)\hbar/2\mu\omega]}$。因为我们已假设振子原来处于基态($n=0$)，所以涉及到的只是下面的非零微扰矩阵元：

$$V_{01}=V_{10}=-\frac{P}{\sqrt{\pi}\tau}\sqrt{\left(\frac{\hbar}{2\mu\omega}\right)}\exp[-(t/\tau)^2]. \qquad (3)$$

于是，在一级微扰论中，均匀场只能使振子跃迁到第一个激发态 ($k=n+1=1$)。[为了计算跃迁到第二个激发态的几率，必须用二级微扰论。(因为，由$n=0\to n=2$的跃迁，通过中间态$n=1$)，余类推；每一个激发能态对应于某一级的微扰论，而中间态的数目也相应地增加。由坐标矩阵的特性可知，每一个中间态都紧跟在前一个之后——例如，$0\to1\to2\to3$.]

将(3)式以及 $\omega_{kn}=\omega_{10}=(1/\hbar)[E_1^{(0)}-E_0^{(0)}]=\omega$ 代入方程(2)，得到激发几率

$$w_{01}=\frac{P^2}{2\pi\tau^2\mu\hbar\omega}\left|\int_{-\infty}^{\infty}\exp[i\omega t-(t/\tau)^2]dt\right|^2. \tag{4}$$

按下列熟知的公式计算上式的积分：

$$\int_{-\infty}^{\infty}\exp(i\beta x-\alpha x^2)\,dx=\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}\exp(-\beta^2/4\alpha),$$

最后得

$$w_{01}=\frac{P^2}{2\mu\hbar\omega}\exp\left[-\frac{1}{2}(\omega\tau)^2\right]. \tag{5}$$

我们看到，对于给定的按经典方式传递的总冲量 P，激发几率随着微扰的有效持续时间τ的延长而急剧地减小；当 $\tau\gg1/\omega$时（微扰持续时间比振子的经典周期大得多），这个几率就非常小；这时，我们所处理的是所谓浸渐微扰.

另一方面，对于快速微扰（$\tau\ll1/\omega$），激发几率(5) 实际上是一个常数。在$\tau\to0$的极限情形下，我们可以利用熟知的 δ 函数表示式：

$$\lim_{\tau\to0}\mathscr{E}(t)=A\delta(t)=\frac{P}{e}\delta(t),$$

这时，我们所处理的是所谓瞬时微扰，其几率为

$$\lim_{\tau\to0}w_{01}=\frac{P^2}{2\mu\hbar\omega}, \tag{5'}$$

它等于经典的传递能量$P^2/2\mu$与振子的能级间距$\hbar\omega$之比。

微扰论适用性的判据是，激发几率应远小于振子处于基态的几率，即

$$w_{01}\ll(1-w_{01})\text{或}w_{01}\ll1. \tag{6}$$

从(5)式可看出，满足条件(6)的充分条件是

$$\frac{P^2}{2\mu}=\frac{(eA)^2}{2\mu}\ll\hbar\omega. \tag{6'}$$

然而，很清楚，当微扰场的浸渐变化的程度足够高时，亦即当$\tau\gg\omega^{-1}$时，条件(6′)是过分强的，因而即使当$P^2/2\mu$与$\hbar\omega$同一数量级时，微扰论也是适用的.

我们强调指出，当条件(6′)满足时，振子的激发是一种量子效应。的确，由于能量守恒定律，在经典力学中，振子被激发而能量增加$\hbar\omega$，一般是不可能的。但在量子力学中，这种激发却是可能的，虽然从(5)式和(5′)式可以看到它的几率很小。当然，这并不违反能量守恒定律，因为在量子力学中，$P^2/2\mu$这个量一般说来不能按经典力学的方式解释为场传递给振子的能量。

71. 本题中微扰的形式定性地与上题的高斯微扰相同。容易证明，条件$P=\int_{-\infty}^{\infty} e\mathscr{E}(t)\,dt=$常数导致场的下列变化规律：

$$\mathscr{E}(t)=\frac{P}{e}\cdot\frac{\tau}{\pi}\frac{1}{\tau^2+t^2}. \tag{1}$$

我们可以不作任何修改地引用上题中(3)式以前的所有公式，而(3)式现在变为

$$V_{01}=V_{10}=-P\frac{\tau}{\pi}\sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}\frac{1}{\tau^2+t^2}. \tag{2}$$

因此，代替上题中的(4)式，我们得到跃迁到第一个激发态的几率为

$$w_{01}=\frac{P^2\tau^2}{2\pi^2\mu\hbar\omega}\left|\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\exp(i\omega t)\,dt}{t^2+\tau^2}\right|^2. \tag{3}$$

(3)式中的积分用留数定理来算最为简便。为此，我们采用复平面中的变量t，并且沿实轴[它相应于(3)式的积分路径]开始。在上半平面内补加一个半径为无穷大的半圆，使积分路径闭合；对这个闭合回路积分的结果，与(3)式中的积分结果相同，沿着弧线的积分由于含有因子$\exp(i\omega t)$而趋于零（当然还需要被积函数的其余部分在$|t|\to\infty$时也趋于零）。在回路内被积函数唯一的奇点（在我们的情形

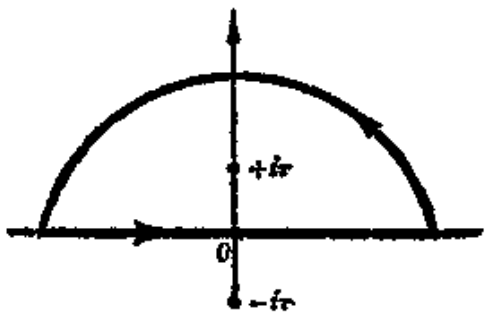


图 43

下是一个一阶极点）是 $t=+i\tau$，对 t 的积分等于 $2\pi i$ 乘上该点的留数：

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\exp(i\omega t)\,dt}{t^2+\tau^2}=2\pi i\,\mathrm{Res}\left.\frac{\exp(i\omega t)}{t^2+\tau^2}\right|_{t=i\tau}$$

$$=2\pi i\frac{\exp(-\omega\tau)}{2i\tau}=\frac{\pi}{\tau}\exp(-\omega\tau).$$

将这结果代入(3)式，最后得

$$w_{01}=\frac{P^2}{2\mu\hbar\omega}\exp(-2\omega\tau). \qquad (4)$$

关于这个跃迁几率对微扰持续时间 τ 的定性依赖关系，以及微扰论的适用性的讨论，都可以完全象上题一样进行。我们指出，在瞬时微扰($\tau\to 0$)的极限情况下，由方程(1)和 δ 函数的一个可能的表示式 $\lim_{\tau\to 0}\mathscr{E}(t)=(1/e)\,P\delta(t)$ 可以看出，激发几率趋于 $P^2/2\mu\hbar\omega$，这和上题的结果(5′)完全一致。这个结果是应该预料到的，因为对于 $\int_{-\infty}^{\infty}\mathscr{E}(t)\,dt$ 的给定值，在突然的微扰作用下，跃迁几率不依赖于“脉冲”函数 $\mathscr{E}(t)$ 的具体形式。若注意到有许多不同的“脉冲”函数，它们都导致同一函数 $\delta(t)$，则形式上也表明了这一结果。

72. 代替上题中的(1)式到(4)式，我们现在有

$$\mathscr{E}(t)=\frac{P}{e\tau}e^{-t/\tau};\quad V_{10}=V_{01}=-\frac{P}{\tau}\sqrt{\left(\frac{\hbar}{2\mu\omega}\right)}e^{-t/\tau};$$

$$w_{10}=\frac{P^2}{2\tau^2\mu\hbar\omega}\left|\int_0^{\infty}e^{i\omega t-t/\tau}dt\right|^2=\frac{P^2}{2\mu\hbar\omega(1+\omega^2\tau^2)}.$$

73*. 在频率为 ω 的周期性微扰的作用下，每单位时间从分立谱的一个态跃迁到连续谱中与一无穷小能量间隔对应的态时，跃迁几率的普遍公式为

$$dw_{nv}=\frac{2\pi}{\hbar}|F_{vn}|^2\delta(E_v-E_n^{(0)}-\hbar\omega)\,dv \qquad (1)$$

在此式中，n是表征分立谱的态的一组量子数，ν是表示连续谱的态的一组量子数，$d\nu$为相应的无穷小间隔，$E_n^{(0)}$和E_ν分别是未受微扰的分立谱和连续谱的能级，而$F_{\nu n}$是所考虑跃迁的微扰算符的矩阵元，后面将更精确地定义它。分立谱的波函数归一化为1，而连续谱的波函数则归一化为$\delta(\nu-\nu')$。

用$\boldsymbol{r}$和$-e$分别表示原子中电子的径矢和电荷，$\mathscr{E}_0$表示均匀电场强度的振幅。根据题设条件，微扰算符$\hat{V}$的形式为：

$$\begin{aligned}\hat{V}&=e(\mathscr{E}(t)\cdot\boldsymbol{r})=e(\mathscr{E}_0\cdot\boldsymbol{r})\sin\omega t\\&=\hat{F}\exp(-i\omega t)+\hat{F}^*\exp(i\omega t)\end{aligned}\tag{2}$$

其中

$$\hat{F}=\frac{1}{2}e(\mathscr{E}_0\cdot\boldsymbol{r}).\tag{2'}$$

在方程(1)中出现的δ函数，表示可能的跃迁有共振特性，即电子只能跃迁到能量[严格地说，方程(3)只是一个近似的考虑，见本题末的讨论。]为

$$E_\nu=E_n^{(0)}+\hbar\omega\tag{3}$$

的连续谱的一个态中去（吸收一个频率为ω的“量子”）。由于对处于基态的氢原子来说$(E_\nu-E_n^{(0)})_{min}=\mu e^4/2\hbar^2$，故电离所需的最小频率由下式给出：

$$\omega_{min}=\frac{\mu e^4}{2\hbar^3}=\omega_0.$$

现在，我们来计算矩阵元

$$F_{\nu n}=\int\psi_\nu^*\hat{F}\psi_n^{(0)}d\tau.\tag{4}$$

把方程(2')和下列两式代入上式中：

$$\psi_n^{(0)}=\psi_{100}=(\pi a^3)^{-\frac{1}{2}}\exp(-r/a),\quad \psi_\nu\approx\psi_k$$

$$=(2\pi)^{-\frac{3}{2}}\exp[i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})],$$

这里我们用到了前面提到的波函数的归一化。

我们将选定自由电子的波矢量 $\boldsymbol{k}$ 作为我们的一组量子数 ν；显然，严格地说，仅当 $\omega \gg \omega_0$，即电子快速转动时，用平面波表示 ψ 才是正确的。经过上述代换后，方程(4)变为：

$$F_{\nu n}=\frac{ie}{2}(2\pi)^{-\frac{3}{2}}(\pi a^3)^{-\frac{1}{2}}\int \exp[-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})-r/a](\mathscr{E}_0\cdot\boldsymbol{r})\,d^3r \tag{4'}$$

为了求此积分，我们引进球坐标系 $(r,\ \theta,\ \varphi)$，其极轴沿 $\boldsymbol{k}$ 方向，并用 Θ 表示 $\boldsymbol{k}$ 和 $\mathscr{E}_0$ 之间的夹角，于是得

$$(\mathscr{E}_0\cdot\boldsymbol{r})=\mathscr{E}_0 r[\cos\Theta\cos\theta+\sin\Theta\sin\theta\cos(\varphi-\varphi_0)],$$

其中 φ_0 是球坐标系中 $\mathscr{E}_0$ 的方位角。将此式代入方程 (4′)，对 φ 积分后，显然第二项为零，因而我们得出 $(\cos\theta=x)$：

$$F_{\nu n}=\frac{ie}{2^{\frac{1}{2}}\pi^2 a^{\frac{3}{2}}}2\pi\mathscr{E}_0\cos\Theta\int_{-1}^{1}\left[\int_0^{\infty}\exp(-ikrx-r/a)r^3dr\right]xdx$$

$$=\frac{ie\mathscr{E}_0\cos\Theta}{\pi(2a)^{\frac{1}{2}}}\int_{-1}^{1}\frac{3!xdx}{(1/a+ikx)^4}=-\frac{e\mathscr{E}_0\cos\Theta}{\pi(2a)^{\frac{1}{2}}}\cdot\frac{16ka^7}{(1+k^2a^2)^3}.$$

把此式的绝对值的平方代入方程(1)中，并把 $d\nu$ 写成

$$d\nu=d^3\boldsymbol{k}=k^2dkd\Omega_k=k^2\frac{dk}{dE_\nu}d\Omega_k dE_\nu=\frac{\mu k}{\hbar^2}d\Omega_k dE_\nu$$

(利用了方程 $E_\nu=\hbar^2k^2/2\mu$)，我们得到

$$dw_{n\nu}=\frac{2^6}{\pi}\cdot\frac{\mu a^7e^2}{\hbar^3}\cdot\frac{\mathscr{E}_0^2k^3\cos^2\Theta}{(1+k^2a^2)^6}\delta(E_\nu-E_n^{(0)}-\hbar\omega)d\Omega_k dE_\nu,$$

其中 $d\Omega_k$ 是立体角元，其轴沿着 $\boldsymbol{k}$。最后对 E_ν 积分 $dw_{\nu n}$，就求出电子的末态波矢 $\boldsymbol{k}$ 在 $d\Omega_k$ 内时的电离几率。在这个积分中，显然

我们只需考虑$E_v=E_n^{(0)}+\hbar\omega$这个点，即$k^2=2\mu E_v/\hbar^2=2\mu(\omega-\omega_0)/\hbar$，故$(1+k^2a^2)\approx\frac{\omega}{\omega_0}$（已令$E_n^{(0)}=-\mu e^4/2\hbar^2=-\hbar\omega_0$）。如果，同时还考虑到$a=\hbar^2/\mu e^2$，最后求得

$$dw_k=\frac{64a^3}{\pi\hbar}\mathscr{E}_0^2\left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^6\left(\frac{\omega}{\omega_0}-1\right)^{\frac{3}{2}}\cos^2\Theta d\Omega_k. \qquad (5)$$

这样一来，由于高频电场的作用，从原子打出的电子的角分布，正如根据原子初态的球对称性而应该期望的那样，具有绕某个特殊方向（即场$\mathscr{E}$的方向）的轴对称性。角分布对于平面$\Theta=\frac{\pi}{2}$也是对称的，在此平面上角分布等于零（在垂直于场$\mathscr{E}$的方向上无电子飞出）；换句话说，朝前（$\Theta\approx0$）和向后（$\Theta\approx\pi$）发射的几率相同。

最后这个结果也是很自然的，因为场$\mathscr{E}(t)$的振荡频率远大于原子中电子的本征频率ω_0。然而，注意到这个结果（在经典力学中此结果定性地说也是清楚的）可以从量子力学的计算自动地得到这一点是有益的。(5)式中出现的对于$\mathscr{E}_0$和$-\mathscr{E}_0$的方向对称的因子$\cos^2\Theta$，是由矩阵元F_{vn}的构造引起的。此矩阵元一般不依赖于时间，因而与足够高频的场无关。然而，事实上这个高频特性包含在能量的δ函数中，对于频率低于ω_0的场，几率(1)严格地等于零。（换句话说，如果$\omega<\omega_0$，表示式(1)中的δ函数一般地说排除具有实k值的矩阵元(4′)出现的可能性，这意味着，在此情况下，电子跃迁到连续谱是不可能的。）

如果对所有可能的角度积分(5)式，并利用$4\pi\overline{\cos^2\Theta}=4\pi/3$这一结果，我们就得到每单位时间内原子电离的总几率$w_i$，它是场的频率的函数：

$$w_i(\omega)=\frac{256}{3}\cdot\frac{a^3}{\hbar}\mathscr{E}_0^2\left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^5\left(\frac{\omega}{\omega_0}-1\right)^{\frac{3}{2}}. \qquad (6)$$

若$\omega\gtrsim\omega_0$，即接近于电离的阈值，则当ω增加时，这个几率

从零开始按 $(\omega-\omega_0)^{\frac{1}{2}}$ 增加。若 $\omega\gg\omega_0$，则随着 ω 的增加，它按 $\omega^{-\frac{11}{2}}$ 急剧地减少。微分 (6) 式，容易看出，在 $\omega=\frac{4}{3}\omega_0$ 处，这个几率有一极大值。

最后，我们来简要地讨论所用微扰论的适用限度。首先，从方程 (1) 可知，从 $t=0$ 起计算的时间 t，应该足够大。受微扰电子的末态能量的不确定度 ΔE_1，通过测不准关系式 $\Delta E_1\cdot t\sim\hbar$ 与 t 值联系起来。

另一方面，时间 t 不能太大，因为原子的初态波函数的畸变，仍应比较小。这相当于要求，对于任何中间的时间 t，电离几率 $w_i(t)$ 必须小于1。当我们改变三个量 t，ε_0 或 ω 中之一，而保持另外两个量不变时，可利用方程 (6) 求得微扰论的适用范围。

74*. 采用原子单位，电子初态波函数的形式为

$$\psi_0=\frac{Z^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}}\exp(-Zr)$$

由于末态电子的速度很大，故可用一平面波来描述末态：

$$\psi_1=\frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\exp[i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})].$$

微扰相互作用（仍用原子单位）为：

$$V=-\sum_{\nu}\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_\nu|},$$

式中求和是对核中所有的质子进行的。

我们用 Ψ_0 和 Ψ_1 表示核的初态和末态，故可将微扰矩阵元写成如下形式：

$$V_{01}=-\iint \mathrm{d}V\,\mathrm{d}\tau\psi^*\frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\exp[-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})]$$

$$\cdot\sum_p \frac{1}{|r-r_p|}\Psi_0\times\frac{Z^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}}\exp(-Zr). \qquad (1)$$

式中$d\tau$是核的体积元，dV是电子的体积元。

把库仑相互作用势展成傅里叶积分：

$$\sum_p \frac{1}{|r-r_p|}=\frac{1}{2\pi^2}\int\frac{d^3q}{q^2}\sum_p\exp[i(q\cdot r-r_p)]$$

$$=\frac{1}{2\pi^2}\int\frac{d^3q}{q^2}\exp[i(q\cdot r)]\sum_p\exp[-i(q\cdot r_p)]. \qquad (2)$$

将这个展开式代入(1)式，并改变积分次序，则得

$$V_{01}=-\frac{Z^{\frac{3}{2}}}{2^{\frac{5}{2}}\pi^4}\int\frac{d^3q}{q^2}\int d\tau\Psi_1^*\sum_p\exp[-i(q\cdot r_p)]\Psi_0$$

$$\times\int dV\exp[-i(k\cdot r)+i(q\cdot r)-Zr].$$

由方程(2)看出$q_{有效}\cdot r\sim 1$。由于$r\gg r_p$（K轨道的线度比核的线度大很多），我们有$|q\cdot r_p|\ll 1$。因此，可以将积分中的指数展成$(q\cdot r_p)$的幂级数，并略去三次方以上的项，得

$$\int d\tau\Psi_1^*\sum_p\exp[-i(q\cdot r_p)]\Psi_0$$

$$\approx\int d\tau\Psi_1^*\left[Z-i\left(q\cdot\sum_p r_p\right)\right]\Psi_0$$

$$=-i\left(q\int d\tau\Psi_1^*\sum_p r_p\right)\Psi_0=-i(q\cdot d_{01})$$

这里利用了核的波函数Ψ_1^*和Ψ_0的正交性，并且用d_{01}表示核偶极矩的矩阵元。

若对电子的坐标积分，我们得

$$\int dV\exp[i(q-k\cdot r)-Zr]=\frac{8\pi Z}{[Z^2+(q-k)^2]^2}.$$

于是得

$$V_{01}=\mathrm{i}\frac{Z^{\frac{5}{2}}\sqrt{2}}{\pi^3}\boldsymbol{d}_{01}\cdot\int\frac{\mathrm{d}^3\boldsymbol{q}}{q^2}\frac{\boldsymbol{q}}{[Z^2+(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{k})^2]^2}.$$

对 q 积分时，引进新的变量$\boldsymbol{q}'=\boldsymbol{q}-\boldsymbol{k}$，

$$\int\frac{\boldsymbol{q}'+\boldsymbol{k}}{(\boldsymbol{q}'+\boldsymbol{k})^2}\cdot\frac{\mathrm{d}^3\boldsymbol{q}'}{[Z^2+q'^2]^2}.$$

在 $q'=0$ 附近被积函数有极大值。这个极大值的宽度的数量级为 Z。由于末态电子的速度比它在原子中的速度大得多，我们有$k\gg Z$。所以在一级近似下，可以略去含$\boldsymbol{q}'$的项，我们求得

$$\frac{\boldsymbol{k}}{k^2}\int\frac{d^3\boldsymbol{q}'}{(Z^2+q^2)^2}=\frac{\pi^2\boldsymbol{k}}{Zk^2}.$$

这样，最后得到

$$V_{01}=\mathrm{i}\frac{\sqrt{2}}{\pi}Z^{\frac{1}{2}}\frac{(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{d}_{01})}{k^2}.$$

电子在立体角$\mathrm{d}\Omega$内飞离的几率等于

$$\mathrm{d}w=2\pi|V_{01}|^2k^2\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}E}\mathrm{d}\Omega=2\pi\frac{2}{\pi^2}Z^3\frac{|(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{d}_{01})|^2}{k^4}k\mathrm{d}\Omega$$

$$=\frac{4Z^3}{\pi}\frac{|(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{d}_{01})|^2}{k^8}\mathrm{d}\Omega$$

其中我们利用了在恒定微扰作用下，跃迁几率的普遍公式。

将这表示式对所有角度积分，我们得到单位时间内发射出一个电子的总几率

$$w=\frac{16}{3}\cdot\frac{Z^8}{k}|\boldsymbol{d}_{01}|^2,$$

若用通常的单位，则

$$w=\frac{16}{3}\cdot\frac{\mu^3e^6}{\hbar^7}\cdot\frac{z^3e^2}{v\hbar}|\boldsymbol{d}_{01}|^2.$$

另一方面，偶极辐射的几率

$$w_{辐}=\frac{4}{3}\frac{\omega^3}{\hbar c^3}|\boldsymbol{d}_{01}|^2,$$

式中ω是辐射频率。

这样，我们就求出定义为

$$\alpha = \frac{w}{w+w_{\text{辐}}} = \frac{w/w_{\text{辐}}}{1+w/w_{\text{辐}}}$$

的内转换系数

$$\alpha = \frac{4\left(\frac{Ze^2}{\hbar c}\right)^3 \frac{e^2}{\hbar v}\left(\frac{\mu c^2}{\hbar\omega}\right)^3}{1+4\left(\frac{Ze^2}{\hbar c}\right)^3 \frac{e^2}{\hbar v}\left(\frac{\mu c^2}{\hbar\omega}\right)^3}.$$

75. 第一个不等式意味着原子的波函数，亦即电子壳层的波函数，在碰撞期间 τ 内来不及显著地变化。第二个不等式意味着，在碰撞期间内，可以假设核实际上是固定的。为了求出待求的跃迁几率，必须将电子壳层的初始波函数 ψ_0（见第一个条件）按运动核的壳层的本征函数展成级数；在这些函数中的每一个都描述运动原子的一个定态。（当然，这组函数也包括属于连续谱的函数，亦即描写电离原子的态的函数。）根据量子力学的普遍法则，这个展开式的展开系数也决定了原子处于相应的态的几率。

上述展开式可以在核最初是静止的坐标系中求得，或者，更方便些，在与碰撞后的核一起运动的坐标系中求得。在后一种坐标系中，可能的末态的本征函数，就是静止原子的一组通常的定态波函数：

$$\psi_n(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_i, \cdots, \boldsymbol{r}_N), \tag{1}$$

式中 $\boldsymbol{r}_i$ 是壳层中第 i 个电子相对于核的坐标，下角标 n 代表表征原子定态的所有量子数。当过渡到现在所取的坐标系时，初始波函数可变成如下形式

$$\psi_0' = \exp\left(-i\mu\boldsymbol{v}\cdot\sum_i \boldsymbol{r}_i/\hbar\right)\psi_0 (\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_i, \cdots, \boldsymbol{r}_N), \tag{2}$$

其中 μ 是电子的质量。

实际上，指数因子是电子壳层重心的波函数，在我们所选的坐标系中，这个重心显然以速度 $-\boldsymbol{v}$ 运动，而 $\psi_0(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N)$

是壳层在它自己的质心系中的波函数。(我们有

$$\psi_{质心}=\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{P}_{质心}\cdot\boldsymbol{R}_{质心})\right]$$

$$=\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(\sum_i-\mu_i\boldsymbol{v}\cdot\frac{\sum_i\mu_i\boldsymbol{r}_i}{\sum_i\mu_i}\right)\right\},$$

因为 $\mu_1=\mu_2=\cdots=\mu$。由此得到所要求的 $\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r})]$ 的表示式。) 由于第二个条件，可取(2)式中的坐标 $\boldsymbol{r}_i$ 的原点与(1)式中的相同，

所要求的ψ_0'的展开式为

$$\psi_0'(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_i,\cdots\boldsymbol{r}_N)=\sum_n c_n\psi_n(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots\boldsymbol{r}_i,\cdots,\boldsymbol{r}_N)。$$

将这方程的两边乘以

$$\psi_n^*\mathrm{d}\tau_1\cdots\mathrm{d}\tau_i\cdots\mathrm{d}\tau_N(\mathrm{d}\tau_i=\mathrm{d}x_i\mathrm{d}y_i\mathrm{d}z_i),$$

对所有的电子坐标积分，并对所有的电子自旋求和，且假定函数 $\psi_n,\psi_m,\cdots$是正交归一化的，则我们得到

$$c_n=\int\cdots\int\psi_n^*(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_i,\cdots\boldsymbol{r}_N)$$

$$\times\exp\left[\mathrm{i}\left(\boldsymbol{q}\cdot\sum_i\boldsymbol{r}_i\right)\right]\psi_0(\boldsymbol{r}_1,\cdots\boldsymbol{r}_i,\cdots,\boldsymbol{r}_N)$$

$$\mathrm{d}\tau_1\cdots\mathrm{d}\tau_i\cdots\mathrm{d}\tau_N。$$

所要求的跃迁到 n 态的跃迁几率等子

$$w_n=|c_n|^2=\left|\int\psi_n^*\exp\left[\mathrm{i}\left(\boldsymbol{q}\cdot\sum_{i=1}^N\boldsymbol{r}_i\right)\right]\psi_0\mathrm{d}\tau\right|^2,\qquad(3)$$

这里我引进了符号：

$$\boldsymbol{q}=-\frac{\mu\boldsymbol{v}}{\hbar},\quad\mathrm{d}\tau=\prod_{i=1}^N\mathrm{d}\tau_i。$$

我们容易把所得的结果推广到跃迁到连续谱的情形，亦即原子电离的情形。

注意，若$qa\ll1$，由于一“碰”而使原子激发的几率(3)，正比于相应的光学跃迁几率。的确，在这种情形下，可以将(3)式中的指数因子展开，且只保留前两项：

$$\exp\left[\mathrm{i}\left(\boldsymbol{q}\cdot\sum_i\boldsymbol{r}_i\right)\right]\approx1+\mathrm{i}\left(\boldsymbol{q}\cdot\sum_i\boldsymbol{r}_i\right).$$

第一项没有贡献，因为ψ_0和ψ_n彼此正交。若选z轴沿$\boldsymbol{q}$的方向，则得

$$w_n\approx q^2\left|\int\psi_n^*\left(\sum_i z_i\right)\psi_0\mathrm{d}\tau\right|^2,$$

它正比于光学跃迁$0\to n$的几率。

76. 根据上题的(3)式，氢原子跃迁到第n个定态的几率等于

$$w_n=\left|\int\psi_n^*\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r})]\psi_0\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\right|^2, \tag{1}$$

式中$\psi_0=(\pi a^3)^{-\frac{1}{2}}\exp(-r/a)$ ($a=\hbar^2/\mu e^2$是第一玻尔半径)，$\boldsymbol{q}=-\frac{\mu\boldsymbol{v}}{\hbar}$($\boldsymbol{v}$是质子的反冲速度)。因为$\boldsymbol{v}=\frac{\boldsymbol{p}}{M}$，其中$M$是质子的质量，我们有

$$\boldsymbol{q}=-\frac{\mu}{M}\frac{\boldsymbol{p}}{\hbar}. \tag{2}$$

所要求的原子激发和电离的总几率显然等于$1-w_0$，这里w_0是原子停留在基态的几率。按照(1)式，它等于

$$w_0=\left|\int\psi_0^2\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r})]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\right|^2,$$

将ψ_0代入之后，它变为

$$w_0=\frac{1}{(\pi a^3)}\left|\int\exp\left[-\frac{2r}{a}+\mathrm{i}(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r})\right]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\right|^2. \tag{3}$$

这个方程中的积分已在上面计算过（见§7.74题）。它等于

$$\int \exp\left[-\frac{2r}{a}+i(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r})\right]d^3\boldsymbol{r}=\frac{16\pi a^3}{(4+q^2a^2)^2}.$$

因此，原子停留在基态的几率为

$$w_0=\frac{1}{\left(1+\frac{1}{4}q^2a^2\right)^6}, \tag{4}$$

因而，原子激发和电离的总几率等于

$$1-w_0=1-\frac{1}{\left(1+\frac{1}{4}q^2a^2\right)^6}. \tag{5}$$

如所预期的，在冲击很弱$\left(\frac{1}{2}qa\ll 1\right)$和很强$\left(\frac{1}{2}qa\gg 1\right)$的极限情形下，几率(5)分别趋于零或趋于1．相应的极限表示式为

$$\frac{1}{2}qa\ll 1:\ 1-w_0\approx q^2a^2,$$

$$\frac{1}{2}qa\gg 1:\ 1-w_0\approx 1-\left(\frac{2}{qa}\right)^6.$$

我们指出，不必计算关于w_0的(3)式，便可以定性地看出上述结果：这个量很小或者接近于1，取决于因子$\exp[i(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r})]$在因子$\exp(-2r/a)$的范围内振荡的快慢，而振荡的快慢正好由$qa/2$这个量来量度．

在上题中，我们曾把所用近似的适用性判据用式子表示出来．但是，由于原子的电离在本题中起重要作用，所以必须将第一个判据，即关于碰撞的瞬时性(冲击性)的判据，稍加改变．也就是说，碰撞的持续时间τ，必须比最重要的跃迁的玻尔周期小得多：

$$\tau\ll\frac{\hbar}{|E_k-E_0|}, \tag{6}$$

式中E_0和E_k是初态和末态的能量，在我们的情况下，$E_0=-\mu e^4/2\hbar^2$，E_k为电子飞出时的动能．

E_k的有效值，可以用方程(1)来估计。

因为当$qa \gg 1$时，只对那样一些态，其波函数ψ_n包含$\exp[i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})]$类型的因子，且$\boldsymbol{k}\approx\boldsymbol{q}$，(1)式中的积分才显著地不为零（因为只有在这个情况下，被积函数中快速振荡的因子才彼此抵消）。此时，我们有

$$(E_k)_{\text{有效}} \sim \frac{\hbar^2 q^2}{\mu} \sim \frac{\mu}{M} E_r, \tag{7}$$

式中E_r是质子的反冲能量。

当$qa \ll 1$时，(1)式中的积分值实际上由函数ψ_0和ψ_n^*的重叠程度决定，这是容易理解的。因而仅对$k \lesssim 1/a$的那些末态，才有显著的跃迁几率，故

$$(E_k)_{\text{有效}} \sim \frac{\hbar^2}{\mu a^2} \sim E_0. \tag{8}$$

或者方程(6)和(7)，或者方程(6)和(8)（依赖于qa的值，即p的值）给出所要求的“冲击”近似的适用条件。

77. 由于俘获负介子的质子近似地均匀分布于核的体积中，所要求的几率显然等于比值

$$\frac{\int_{V_{\text{核}}} |\psi(\boldsymbol{r})|^2 \mathrm{d}V}{\int |\psi(\boldsymbol{r})|^2 \mathrm{d}V} \tag{9}$$

式中ψ是处于K轨道的介子的波函数。

分母中的积分遍及整个空间，而分子中的积分则遍及核体积$V_{\text{核}}$，$V_{\text{核}}$近似地正比于Z[$V_{\text{核}} = \frac{4}{3}\pi R^3 = \frac{4\pi}{3}\left(r_0 A^{\frac{1}{3}}\right)^3 = \frac{4\pi}{3} r_0^3 A \approx \frac{4\pi}{3} r_0^3 \times 2Z$，其中$r_0$=常数$\approx 1.2 \times 10^{-13}$cm]。

设核半径R比介子的K轨道的半径$a = \hbar^2/Z\mu e^2$小得多，其中μ为介子的质量，并考虑到介子波函数仅在与a同数量级的距离内有显著的变化，我们得$\int_{V_{\text{核}}} |\psi(\boldsymbol{r})|^2 \mathrm{d}V \approx |\psi(0)|^2 \cdot V_{\text{核}}$，其中

$\psi(0)$为介子波函数在原点处（即在核内）的值。

如果我们利用归一化的波函数［此波函数使(1)式的分母等于1］

$$\psi(r)=\sqrt{\frac{1}{\pi a^3}}\exp(-r/a),$$

则可直接看出（因$a\sim 1/Z$），比值(1)，亦即待求的几率，正比于

$$Z^3\cdot Z=Z^4.$$

注意，近似假设$a\gg R$对重核不成立。

的确，由于

$$R\approx r_0A^{\frac{1}{3}}\approx r_0(2Z)^{\frac{1}{3}},$$

其中

$$r_0\approx\frac{1}{2}\left(\frac{1}{137}\right)^2\text{原子单位},$$

而$\mu\approx 200$原子单位，所以不等式$a\gg R$相当于（见§5.15题）。

$$Z\ll 45.$$

78. 要推导的势φ是质子产生的势$\varphi_p=e/r$和电子产生的势$\bar{\varphi}_e$｛对氢原子的基态波函数$\psi_0=[1/\sqrt{\pi a^3}]\exp(-r/a)$求平均，其中$a=\hbar^2/\mu e^2$｝之和：

$$\varphi(r)=\varphi_p(r)+\bar{\varphi}_e(r)=\frac{e}{r}-e\int\frac{\psi_0^2(r')}{|r-r'|}\,d^3r', \qquad (1)$$

当然，势$\bar{\varphi}_e$与密度$\rho(r')=-e^2\psi_0^2(r')$的静态电子“云”所产生的势是相同的。这样，我们可以简单地把$\bar{\varphi}_e$作为泊松方程

$$\frac{1}{r}\frac{d^2(r\bar{\varphi}_e)}{dr^2}=-4\pi\rho(r)=4\pi e\,\frac{1}{\pi a^3}\exp(-2r/a)$$

的球对称解而求出；将这个方程由r到∞积分两次，便容易求出$\bar{\varphi}_e$。利用$1/|r-r'|$按勒让德函数的展开式：

若$r'<r$，则$\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}=\frac{1}{r}\sum_{l=0}^{\infty}P_l(\cos\theta')\left(\frac{r'}{r}\right)^l$，

若$r'>r$，则$\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}=\frac{1}{r'}\sum_{l=0}^{\infty}P_l(\cos\theta')\left(\frac{r}{r'}\right)^l$，

就很容易求出(1)式中的积分，上式中θ'是$\boldsymbol{r}'$和$\boldsymbol{r}$之间的夹角。

如果把对r'的积分区域分成两部分($r'\leqslant r$和$r'\geqslant r$)，我们看到，由于勒让德多项式的正交性，在这两部分中对θ'积分时，求和$\sum_{l=0}^{\infty}$只剩下第一项($l=0$)，于是得

$$\varphi(r)=\frac{e}{r}-\frac{4e}{a^3}\left(\frac{1}{r}\int_0^r\exp(-2r'/a)r'^2\mathrm{d}r'\right.$$

$$\left.+\int_r^{\infty}\exp(-2r'/a)r'\mathrm{d}r'\right).$$

显然，势φ。(因而φ)是球对称的。积分后，得到

$$\varphi(r)=e\left(\frac{1}{r}+\frac{1}{a}\right)\exp(-2r/a).$$

在$r\ll a$和$r\gg a$的极限情况下，我们得到明显的结果：$\varphi\approx e/r$(质子的库仑场)和$\varphi\approx(e/a)\exp(-2r/a)$(质子几乎完全被电子屏蔽)。

79. 假设$\psi(x,y,z)$是薛定谔方程的属于分立能谱的解。让我们来讨论具有一个参数的归一化函数组$\lambda^{\frac{3}{2}}\psi(\lambda x,\lambda y,\lambda z)$。

表示式

$$I(\lambda)=\lambda^3\iiint\left[\frac{\hbar^2}{2\mu}|\nabla\psi(\lambda x,\lambda y,\lambda z)|^2\right.$$

$$\left.+V(x,y,z)|\psi(\lambda x,\lambda y,\lambda z)|^2\right]\times\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z,$$

作为 λ 的函数，当$\lambda=1$时，应有极值，即

$$\left(\frac{dI}{d\lambda}\right)_{\lambda=1}=0.$$

引进新的积分变量$\lambda x,\lambda y,\lambda z$，我们得

$$I(\lambda)=\lambda^2T+\lambda^{-v}V.$$

由此求得

$$2T-vV=0.$$

这个维里定理容易推广到多粒子体系的情况。

80．设μ是电子的质量，ξ_0,η_0,ζ_0是核的坐标，$\xi_i,\eta_i,\zeta_i(i=1,2,\cdots,n)$是第 i 个电子的坐标。

引进质心坐标

$$X=\frac{M\xi_0+\mu\sum_{i=1}^{n}\xi_i}{M+n\mu}\quad(Y,Z\text{的式子与此相似})\tag{1}$$

和相对坐标（$i=1,2,\cdots,n$）

$$x_i=\xi_i-\xi_0\quad(y_i,z_i\text{的式子与此相似}).\tag{2}$$

于是，我们得

$$\frac{\partial}{\partial\xi_i}=\frac{\mu}{M+n\mu}\frac{\partial}{\partial X}+\frac{\partial}{\partial x_i},$$

$$\frac{\partial}{\partial\xi_0}=\frac{M}{M+n\mu}\frac{\partial}{\partial X}-\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial}{\partial x_i}.\tag{3}$$

原子的哈密顿量（在固定坐标系中）为

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial\xi_0^2}+\frac{\partial^2}{\partial\eta_0^2}+\frac{\partial^2}{\partial\zeta_0^2}\right)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial^2}{\partial\xi_i^2}+\frac{\partial^2}{\partial\eta_i^2}+\frac{\partial^2}{\partial\zeta_i^2}\right)+V,\tag{4}$$

式中V是原子的势能，它只依赖于相对坐标(2)。

如果在(4)式中引进新变量(1)，(2)和(3)，$\hat{H}$将分为两项，一项只依赖于质心坐标，另一项只依赖于相对坐标。我们对质心运动不感兴趣，可按照通常的方法把它们分出，便得到在质心系中的薛定谔方程：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\sum_{i=1}^{n}\nabla_i^2-\frac{\hbar^2}{2M}\sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_i\partial x_k}+\frac{\partial^2}{\partial y_i\partial y_k}+\frac{\partial^2}{\partial z_i\partial z_k}\right)+V(x_1,\cdots,x_n)\right]\Psi(x_1,\cdots,x_n)$$
$$=E\Psi(x_1,\cdots,x_n) \tag{5}$$

所要求的有限质量M的效应（换句话说，核运动的效应），是由方括号中的第二项引起的。显然，这一效应引起一数量级为μ/M的修正（与$M=\infty$的原子谱项比较）。

把$i=k$和$i\neq k$的项归在一起，并引进约化质量

$$\mu_r=\frac{\mu M}{\mu+M}, \tag{6}$$

则得

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu_r}\sum_{i}\nabla_i^2-\frac{\hbar^2}{M}\sum_{i<k}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_i\partial x_k}+\frac{\partial^2}{\partial y_i\partial y_k}+\frac{\partial^2}{\partial z_i\partial z_k}\right)+V(x_1,\cdots,x_n)\right]\Psi(x_1,\cdots,x_n)$$
$$=E\Psi(x_1,\cdots,x_n). \tag{7}$$

从这个方程立即看出，M为有限值的效应首先导致用约化质量μ_r代替电子质量μ；其次，它导致一附加的微扰项

$$\hat{H}'=-\frac{\hbar^2}{M}\sum_{i<k}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_i\partial x_k}+\frac{\partial^2}{\partial y_i\partial y_k}+\frac{\partial^2}{\partial z_i\partial z_k}\right). \tag{8}$$

在对薛定谔方程所作的这些修正中，第一个代表所谓运动核的“基本”效应或“正常”效应；这个效应，在氢原子中也存在。显然，正常效应对所有谱项的影响均相同，它使原子的所有

光谱线的频率按下列比例

$$\frac{\mu_r}{M}=\frac{M}{M+\mu}\approx 1-\frac{\mu}{M}$$

减小。

然而，第二个效应对原子的不同态则很不相同。事实上，由于$\mu/M\ll 1$，这里可应用一级微扰论。它对原子能级的修正为

$$\Delta E=\int \Psi^{(0)*}\hat{H}\Psi^{(0)}\mathrm{d}\tau, \tag{9}$$

式中$\Psi^{(0)}$是$M=\infty$时原子的波函数，

$$\mathrm{d}\tau=\prod_{i=1}^{n}\mathrm{d}\tau_i=\prod_{i=1}^{n}\mathrm{d}x_i\mathrm{d}y_i\mathrm{d}z_i$$

是原子的组态空间的体积元。

将(8)式代入方程(9)，交换求和与积分的次序，进行分部积分，并考虑到在无穷远处$\Psi\to 0$，我们得到：

$$\Delta E=\frac{\hbar^2}{M}\sum_{i<k}\sum\int(\nabla_i\Psi^{(0)*}\cdot\nabla_k\Psi^{(0)})\mathrm{d}\tau, \tag{10}$$

显然，它强烈地依赖于$\Psi^{(0)}$的形式。

在特殊情形下，若电子的运动是完全独立的，也就是说，若原子的未受微扰的波函数简单地是各电子波函数的乘积：

$$\Psi^{(0)}=\prod_{i=1}^{n}\varphi_i(x_i,y_i,z_i), \tag{11}$$

则所考虑的效应一般地将会消失。实际上，将(11)式代入(10)式，并考虑归一化关系式$\int\varphi_i^*\varphi_i\mathrm{d}\tau_i=1$，我们就得到

$$\Delta E=\frac{\hbar^2}{M}\sum_{i<k}\sum\left(\int\varphi_i\nabla\varphi_i^*\mathrm{d}\tau_i\cdot\int\varphi_k^*\nabla\varphi_k\,\mathrm{d}\tau_k\right)=0,$$

这是因为上式中的两个积分均为零（见§5.16题）。

实际上，原子中电子的运动不是相互独立的；因此，称这个效应为有限质量的“特殊”效应，以区别于“正常”效应；它是$n\geqslant 2$的原子所特有的；一般地说，这种效应不仅不等于零，而且在很多情形下显著地超过“正常”效应。

电子运动之间的关联，部分地（微不足道）是由于电子之间的静电相互作用，部分地（主要的）则是由于它们是全同粒子；因此，可以把特殊效应的这个部分（即主要部分，它本质上是一种量子效应），称为“交换”效应。

的确，原子的总波函数（忽略自旋道道相互作用，因而可写为坐标函数和自旋函数的乘积）对于任何两个电子的交换，应该是反对称的。因此，电子壳层的总自旋S的每一个值（因而自旋函数的每一种交换对称性）对应于壳层的坐标函数的一个完全确定的交换对称性。利用粗略的经典类比，我们可以把这种情况说成是：电子的择尤运动，是在平行方向上（坐标函数对称时的情况），或者在反平行方向上（坐标函数反对称时的情况）。因为原子的质心是静止的，显然，在第一种情况下，核的运动应该是较明显的，而在第二种情形下，核的运动是很小的。换句话说，在第一种情形下，特殊效应（更确切地说是交换效应）将加在正常效应上，而在第二种情形下，其作用方向相反。

注意，这两种效应对于极轻的元素的所谓锐线的同位素分位，都起着决定性的作用（因为不同的同位素的质量M不同，而且元素越轻，这种差别就越显著）。

关于运动核的交换效应，我们将在下题中以双电子原子（或离子）为例，作出定量的讨论。

81. 忽略电子间的静电相互作用，等效于把双电子系统的未受微扰的坐标函数选作类氢函数的乘积的叠加。由于总波函数对两个电子应该是反对称，所以坐标函数的形式应是

$$\Psi^{(0)}(1,2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_{i00}(1)\varphi_{nlm}(2)$$

$$\pm\varphi_{nlm}(1)\varphi_{100}(2)], \tag{1}$$

其中1和2，简单地表示电子的所有坐标，而$\varphi_{100}\equiv u$和$\varphi_{nlm}\equiv v$是对应于给定量子数的类氢的电子函数；并且第一个对应于某一有效电荷Z_i，第二个对应于有效电荷Z_o（一般说来，$Z_o\neq Z_i$；下标"i"和"o"表示"内部"和"外部"电子，这与φ_{100}和φ_{nlm}——它们描写原子内电子的基态和激发态——的定性的意义一致）；$1/\sqrt{2}$是归一化因子。

公式(1)中"+"号显然对应于双电子原子的反对称自旋态（仲项，$S=0$），"−"号对应于对称的自旋态（正项，$S=1$）

将函数(1)代入上题中的公式(10)（$i,k=1,2$），我们得

$$\Delta E=-\frac{\hbar^2}{M}\iint v^*(2)\{\nabla u^*(1)[u(1)\nabla v(2)\pm v(1)\nabla u(2)]\}\mathrm{d}\tau_1\mathrm{d}\tau_2.$$

第一项为零，因为（见§5.16题）

$$\int v^*(i)\nabla v(i)\mathrm{d}\tau_i=0,$$

对于$u(i)$亦如此。第二项给出

$$\Delta E=\pm\frac{\hbar^2}{M}\int(v(1)\nabla u^*(1)\mathrm{d}\tau_1\int v^*(2)\nabla u(2))\mathrm{d}\tau_2$$

$$=\pm\frac{\hbar^2}{M}\left|\int v(i)\nabla u^*(i)\mathrm{d}\tau_i\right|^2. \tag{2}$$

这就是所要求的，对于有限核质量的一级交换修正的一般表达式。

我们来求(2)式的选择定则。函数u和v满足下列方程（用原子单位）：

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla^2-\frac{Z_i}{r}\right)u=E_iu \tag{3}$$

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla^2-\frac{Z_o}{r}\right)v=E_nv, \tag{4}$$

其中

$$E_u=-\frac{Z_o^2}{2n^2},\quad E_l=-\frac{Z_i^2}{2}. \tag{5}$$

用rv^*乘方程(3)，用ru乘方程(4)的复数共轭，然后相减，并对整个空间积分，则得

$$\frac{1}{2}\int r(u\nabla^2v^*-v^*\nabla^2u)\mathrm{d}\tau$$

$$=(Z_i-Z_o)\int_r uv^*\mathrm{d}\tau+(E_l-E_u)\int ruv^*\mathrm{d}\tau \tag{6}$$

变换这个方程的左边，我们得：

$$\frac{1}{2}\int r(u\nabla^2v^*-v^*\nabla^2u)\mathrm{d}\tau=\frac{1}{2}\int r(\nabla\cdot(u\nabla v^*-v^*\nabla u))\mathrm{d}\tau$$

$$=-\frac{1}{2}\int(u\nabla v^*-v^*\nabla u)\mathrm{d}\tau$$

$$=\int v^*\nabla u\mathrm{d}\tau$$

这里，我们利用了下列方程：

$$\int r(\nabla\cdot A)\mathrm{d}\tau=-\int A\mathrm{d}\tau \text{ 和 } \int \mathrm{grad}\chi\mathrm{d}\tau=\oint \chi\mathrm{d}^2S.$$

(这两个方程的正确性容易从下面看出：两边乘以常矢量，再对所得的方程积分，并利用高斯定理。) 于是(6)式变为

$$\int v\nabla u^*\mathrm{d}\tau=(Z_i-Z_o)\int_r u^*v\mathrm{d}\tau+(E_l-E_u)\int ru^*v\mathrm{d}\tau \tag{7}$$

(若$Z_i=Z_o$，因而u和v是同一哈密顿量的本征函数，则方程(7)与§5.16题的关系式(2)相同)

右边两个积分的选择定则由这些积分中的球谐函数$Y_{lm}(\theta,\varphi)$的正交性决定。显然，除非

$$l_u-l_v=\pm1.$$

两个积分都为零。因为我们已经假定有一个电子处于1s态(实际情形常常如此)，即$l_u=0$，所以我们得出结论，除非$l_v=1$，也就是说，除非第二个电子处于p态，(7)式的左边为零，从而交

换修正项(2)也为零。换句话说，只有对双电子原子或离子（He，Li^+，Be^{++}，…）的 P 项，运动核的特殊（或者说，交换）效应才存在，至少在 μ/M 的一级近似下。

至于特殊效应的符号，从(2)式可以看出，对于仲项 $\Delta E>0$，即特殊效应与正常效应的符号相同，而对于正项，它们的符号相反。这与上题末尾得到的定性的结论完全一致，因为处在仲态，粗略地说两电子主要是在相同的方向上运动，而在正态则主要在相反的方向上运动。

为了求出特殊效应的数值，我们利用公式(2)和(7)式。由(7)式得

$$\left|\int v\nabla u^*\mathrm{d}\tau\right|^2=\left|(Z_i-Z_o)\int\frac{x}{r}u^*v\mathrm{d}\tau+(E_i-E_n)\int xu^*v\mathrm{d}\tau\right|^2$$
$$+\left|(Z_i-Z_o)\int\frac{y}{r}u^*v\mathrm{d}\tau+(E_i-E_n)\int yu^*v\mathrm{d}\tau\right|^2$$
$$+\left|(Z_i-Z_o)\int\frac{z}{r}u^*v\mathrm{d}\tau+(E_i-E_n)\int zu^*v\mathrm{d}\tau\right|^2. \qquad (8)$$

上式中的积分容易算出。我们在球坐标系中写出类氢函数，并用原子单位代替库仑单位[这意味着将 r（库仑单位）用 Zr（原子单位）代替，R_{nl}（库仑单位）用 $Z^{-\frac{3}{2}}R_{nl}$(原子单位）代替]，于是得到：

$$u\equiv\psi_{100}(\boldsymbol{r})=R_{10}(r)Y_{00}(\theta,\ \varphi) \qquad (9)$$
$$v\equiv\psi_{nlm}(\boldsymbol{r})=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\ \varphi), \qquad (10)$$

其中 Y_{lm} 是归一化的球谐函数，R_{nl} 是归一化的径向函数（根据选择定则，在 v 中取 $l=1$）：

$$R_{n1}=Z_o^{\frac{3}{2}}\ \frac{2}{3!n^3}\sqrt{\left[\frac{(n+1)!}{(n-2)!}\right]}2Z_or\exp(-Z_or/n)$$
$$\cdot F\left(-n+2,\ 4,\ \frac{2Z_or}{n}\right) \qquad \text{（原子单位）} \qquad (11)$$

$$R_{10}=2Z_i^{\frac{3}{2}}\exp(-Z_i r) \quad \text{（原子单位）} \tag{12}$$

由（9）式和（10）式看出，（8）式中的积分等于

$$\int_\tau^x u^* v\,d\tau=\int \sin\theta\cos\varphi Y_{00}Y_{1m}d\Omega\int_0^\infty R_{10}R_{n1}r^2dr,$$

$$\int zu^*v\,d\tau=\int \cos\theta Y_{00}Y_{1m}d\Omega=\int_0^\infty R_{10}R_{n1}r^3dr, \text{ 等等.}$$

如果利用 $Y_{00}=1/\sqrt{4\pi}$，$\sin\theta\cos\varphi=\frac{1}{2}(8\pi/3)(Y_{11}+Y_{1,-1})$

等等，以及球谐函数的正交归一性，则对角度的积分是很简单的。至于径向积分，按照(11)式和(12)式，它们包含有指数函数，幂函数和合流超几何函数。可在标准文献中查出这些积分。最后我们得到关于 P 项的特殊效应的表达式如下（用普通单位）：

$$\Delta E=\pm\frac{64}{3}\frac{\mu}{M}(Z_iZ_o)^5\frac{(Z_in-Z_o)^{2n-4}}{(Z_in+Z_o)^{2n+4}}n^5(n^2-1)\frac{\mu e^4}{\hbar^2},$$

式中 n 是 p 电子的主量子数，Z_i 和 Z_o 分别对应于 $1s$ 和 np 电子的有效核电荷。这些量通常用变分法来确定。例如，对于 Li^+ 离子的 2^3P 项，$Z_i=2.98$，$Z_o=2.16$[这些有效电荷的值，与根据下面的初步考虑所期待的值相当一致：(i)Li 核的裸电荷为 3；(ii)粗略地说，外电子轨道($n=2$)的线度比内电子轨道的线度大 $2^2=4$ 倍；(iii)外电子的 $l=1$，因此它并不很深地穿入内电子轨道的内部。换言之，内电子把核对外电子的作用屏蔽掉了，所以，我们可以期望 $Z_i\approx3$，$Z_o\approx2$.]

82. N粒子体系的偶极矩的平均值为

$$\langle \boldsymbol{d}\rangle=\int\cdots\int \psi^*(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N)\left(\sum_{i=1}^N e_i\boldsymbol{r}_i\right)$$

$$\cdot\psi(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N)d\tau_1\cdots d\tau_N$$

式中 e_i 是第 i 个粒子的电荷，$\sum_{i=1}^{N} e_i r_i = d$，是体系的偶极矩算符，在坐标表象中，它的作用可简单地归结为用 $\boldsymbol{d}=\sum_i e_i \boldsymbol{r}_i$ 去乘；积分遍及所有粒子的组态空间。如果体系处于有确定宇称的态，则 $\psi\psi^*$ 对所有粒子坐标来说为偶函数，然而偶极矩 $\boldsymbol{d}$ 对这些坐标来说却是奇的；因此，积分号下的整个表示式是奇的。由于每一个坐标的积分限都是无穷的，亦即积分遍及一对称的区域，显然有$\langle \boldsymbol{d} \rangle = 0$。

这个结果可用另外的（不太严格的）方法得到。因为反射算符与角动量分量的算符是对易的，而在半经典情况下，角动量分量算符彼此对易，亦即，如果$M_i \gg \hbar$，则在任何具有确定宇称的态中，体系的角动量矢量 $\boldsymbol{J}$（在特殊情况下，是体系的自旋 $\boldsymbol{I}$）有完全确定的值。

非零角动量 $\boldsymbol{J}$ 在空间规定了一个确定的方向，这一方向也必然是（平均）偶极矩$\langle \boldsymbol{d} \rangle$的方向：

$$\langle \boldsymbol{d} \rangle = 常数 \cdot \boldsymbol{J}. \qquad (1)$$

因为$\langle \boldsymbol{d} \rangle$是一极矢量，而 $\boldsymbol{J}$ 是一轴矢量，所以反射后方程（1）的（物理上所必须的）不变性，意味着（1）式中的常数应该是赝标量（在我们的情形下，显然不是这样）。

因此，这个常数必须等于零，亦即$\langle \boldsymbol{d} \rangle = 0$。

83. 由质量为 μ，电荷为 e 的粒子组成的体系，其偶极矩的 x 分量的算符为 $\hat{d}_x = e\sum_{i=1}^{N} x_i$，它的出现在求和规则中的矩阵元 $(d_x)_{mn}$ 等于

$$(d_x)_{mn} = \int \psi_m^*(\boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_N)\hat{d}_x \psi_n(\boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_N)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1 \cdots \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_N,$$

式中 ψ_m，ψ_n，…是所讨论的粒子体系的定态波函数(无时间因子)

的一个完全正交归一系。

引进偶极矩分量的时间微分算符 $\dot{d}$（以后略去附标x），并利用公式

$$\dot{d}_{nm}=i\frac{E_n-E_m}{\hbar}d_{nm},$$

式中 E_n 是粒子系的能级，我们容易得出下列一串等式

$$\sum_n (E_n-E_m)|d_{mn}|^2=\sum_n (E_n-E_m)d_{nm}d_{mn}$$

$$=\frac{1}{2}\frac{\hbar}{i}\sum_n \dot{d}_{nm}d_{mn}-\frac{1}{2}\frac{\hbar}{i}\sum_n \dot{d}_{mn}d_{nm}$$

$$=\frac{1}{2}\frac{\hbar}{i}(d\dot{d}-\dot{d}d)_{mm},$$

这里，我们利用了$\hat{d}$是厄密算符这一事实（$d^*_{nn}=d_{nn}$），并利用了矩阵的乘法规则。

若考虑到 $\hat{d}$ 的定义，并注意到当 $i\neq k$ 时，坐标算符 $\hat{x}_i$ 与速度算符

$$\hat{\dot{x}}_k=-\frac{\hbar}{i\mu}\frac{\partial}{\partial x_k},$$

对易，而

$$x_i\hat{\dot{x}}_i-\hat{\dot{x}}_ix_i=\frac{\hbar}{\mu},$$

我们就得到

$$\sum_n (E_n-E_m)|d_{mn}|^2=\frac{1}{2}\frac{\hbar}{i}e^2\sum_{i=1}^{N}(x_i\dot{x}_i-\dot{x}_ix_i)_{mm}$$

$$=\frac{\hbar^2e^2}{2\mu}N,$$

这正是所要证明的。

我们着重指出，这个和与 m 无关，即对于所有的“初始”态，它都是相同的。

84. 考虑双重对易子

$$\left[[H,\ \sum_j \exp\{i(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_j)\}]_-,\ \sum_j \exp\{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{k})\}\right]_-$$

的 mm 矩阵元，便可得到证明。

注意，由这里得到的求和规则，偶极近似，即令 $\exp\{i(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_j)\}\cong 1+i(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_j)$，便可得到上题的结果。

85. 我们写出（参考§7.82题）

$$\sum_n (E_n-E_m)|p_{nm}|^2=\frac{\hbar}{2i}(p\dot{p}-\dot{p}p)_{mm}$$

$$=\frac{\hbar}{2i}([p,\dot{p}]_-)_{mm}$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2}V''_{mm},$$

这里我们应用了关系式

$$i\hbar\dot{p}=[p,\ H]_-=[p,\ V]_-=-i\hbar V',$$

$$[p,\ V']_-=-i\hbar V''.$$

86. 在具有势能V的有心力场中，薛定谔方程为

$$\nabla^2\psi+\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-V)\psi=0.$$

如果我们写出具有量子数 n 和 l 的本征态的波函数

$$\psi_l^n=F_l^{(n)}(r)(ax+by+cz)^l,$$

我们得到

$$a^2+b^2+c^2=0,$$

并且$F_l^{(n)}$满足方程（撇号表示对 r 的微商）

$$F_l''+\frac{2l+2}{r}F_l'+\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-V)F_l=0 \qquad (1)$$

和

$$\int_0^\infty F_l^{(n)}F_l^{(n')}r^{2l+2}dr=\delta_{nn'}. \qquad (2)$$

容易看出本题(B)式所给出的$f_{ll'}^{k}$满足方程

$$(2l+1)f_{n,l}^{n',l+1}=\frac{2\mu(E_{n',l+1}-E_{n,l})}{3\hbar^2}(l+1)$$

$$\cdot\left[\int_0^\infty r^{2l+4}F_{l+1}^{(n')}\ F_l^{(n)}\mathrm{d}r\right]^2 \qquad (3)$$

对于$F_l^{(n)}$来说，用$r^{2l+4}F_{l+1}^{(n')}$乘(1)式；对于$F_{l+1}^{(n')}$来说，用$r^{2l+4}F_l^{(n)}$乘(1)式，然后对两表示式的差作遍及r的积分，我们得

$$\frac{2\mu}{\hbar^2}(E_{n,l+1}-E_{n,l})\int_0^\infty F_l^{(n)}\ F_{l+1}^{(n')}\ r^{2l+4}\mathrm{d}r$$

$$=\int_0^\infty (F_{l+1}^{(n')}\ F_l^{(n)''}-F_l^{(n)}\ F_{l+1}^{(n')''})r^{2l+4}\mathrm{d}r$$

$$+\int_0^\infty [(2l+1)F_{l+1}^{(n')}\ F_l^{(n)'}-(2l+4)F_l^{(n)}F_{l+1}^{(n')'}]r^{2l+3}\mathrm{d}r\,.$$

利用(3)式，对于(A)中的第一个求和

$$S_1=-\frac{2}{3}\ \frac{l+1}{2l+1}\sum_{n'}\left[\int_0^\infty r^{2l+4}F_{l+1}^{(n')}\ F_l^{(n)}\ \mathrm{d}r\right]$$

$$\cdot\left[\int_0^\infty r^{2l+3}F_{l+1}^{(n')}\ F_l^{(n)'}\ \mathrm{d}r\right].$$

如果P和Q是r的函数，用$F_k^{(n)}$将这些函数展开，则得

$$\int_0 PQr^{2k+2}\mathrm{d}r=\sum_{n'}\left[\int_0^\infty PF_k^{(n')}\ r^{2k+2}\mathrm{d}r\right]$$

$$\cdot\left[\int_0^\infty QF_k^{(n')}\ r^{2k+2}\mathrm{d}r\right]. \qquad (4)$$

若令

$$P=F_l^{(n)}\ ,\quad Q_1=\frac{1}{r}F_l^{(n)}\ ,\quad k=l+1.$$

便得到

$$S_1=-\frac{2}{3}\frac{l+1}{2l+1}\int PQ_1r^{2l+4}\mathrm{d}r=\frac{1}{3}\frac{(l+1)(2l+3)}{2l+1},$$

于是证毕.

S_2 的表示式可以类似地证明. 这时利用（4）式并取

$$P_2=r^2F_l^{(n)}\ ,\ Q_2=\frac{1}{r^{2l}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}(r^{2l+1}F_l^{(n)}),\ k=l-1.$$

注意 $S_1+S_2=1$，正如所要证明的.

§8. 分　　子

1. 假设我们忽略分子的质心与原子核的质心之间的差别，并设质心固定在坐标原点，则双原子分子的薛定谔方程有如下形式：

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\sum_i\left(\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_i^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_i^2}\right)\right.$$
$$-\frac{\hbar^2}{2M\rho^2}\left[\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho^2\frac{\partial}{\partial\rho}\right)+\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right.$$
$$\left.\left.+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]+V(x_i,\ y_i,\ z_i,\ \rho,\ \theta,\ \varphi)\right\}$$
$$\cdot\psi(\cdots x_i,\ y_i,\ z_i,\ \cdots\rho,\ \theta,\ \varphi)=E\psi.$$

这里 x_i, y_i, z_i 是第 i 个电子在固定参考系中的坐标，θ, φ 角确定两核间的联线在空间中的方位，ρ 是两核间的距离，而 M 是两核的约化质量。处理这个方程的困难在于，静电相互作用势能 V 中含有角度 θ 和 φ。为了把薛定谔方程变为较方便的形式，我们引进与两核一起转动的新坐标 ξ, η, ζ。ζ 轴沿两核的联线，ξ 轴在 xy 平面内。我们这样来选取 ξ 轴的正方向，以使 z, ζ, ξ 轴形成一右手系。新旧坐标间的关系为

$$\xi_i=-x_i\sin\varphi+y_i\cos\varphi,$$
$$\eta_i=-x_i\cos\theta\cos\varphi-y_i\cos\theta\sin\varphi+z_i\sin\theta,$$
$$\zeta_i=x_i\sin\theta\cos\varphi+y_i\sin\theta\sin\varphi+z_i\cos\theta.$$

若用撇号表示保持 x_i, y_i 和 z_i 为常数时的微商，以区别于保持 ξ_i, η_i 和 ζ_i 为常数时的微商，我们求得

$$\frac{\partial'}{\partial\theta}=\frac{\partial}{\partial\theta}+\sum_i\left(\zeta_i\frac{\partial}{\partial\eta_i}-\eta_i\frac{\partial}{\partial\zeta_i}\right),$$

$$\frac{\partial'}{\partial\varphi}=\frac{\partial}{\partial\varphi}-\sum_i\left[\sin\theta\left(\zeta_i\frac{\partial}{\partial\xi_i}-\xi_i\frac{\partial}{\partial\zeta_i}\right)\right.$$

$$+\cos\theta\left(\xi_i\frac{\partial}{\partial\eta_i}-\eta_i\frac{\partial}{\partial\xi_i}\right)\Big]$$

容易看出

$$\sum_i\left(\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_i^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_i^2}\right)=\sum_i\left(\frac{\partial^2}{\partial\xi_i^2}+\frac{\partial^2}{\partial\eta_i^2}+\frac{\partial^2}{\partial\zeta_i^2}\right).$$

在新坐标系中的势能为

$$V=\frac{Z_1Z_2e^2}{\rho}+\sum_{i<k}\frac{e^2}{r_{ik}^*}-\sum_{k=1}^{n}\frac{Z_1e^2}{r_{1k}^*}-\sum_{k=1}^{n}\frac{Z_2e^2}{r_{2k}^*},$$

式中

$$r_{ik}^*=\sqrt{[(\xi_i-\xi_k)^2+(\eta_i-\eta_k)^2+(\zeta_i-\zeta_k)^2]}$$

是在新坐标系中第 i 个电子与第 k 个电子之间的距离，而

$$r_{1k}^*=\sqrt{\left[\xi_k^2+\eta_k^2+\left(\zeta_k+\rho\frac{M_2}{M_1+M_2}\right)^2\right]}$$

是第一个核与第 k 个电子之间的距离，

$$r_{2k}^*=\sqrt{\left[\xi_k^2+\eta_k^2+\left(\zeta_k-\rho\frac{M_1}{M_1+M_2}\right)^2\right]}$$

是第二个核与第 k 个电子之间的距离。这样一来，在新坐标系中，势能的表示式就与角度 θ 和 φ 无关。考虑到刚才所列举的所有关系式，薛定谔方程可写为：

$$\left\{\frac{\hbar^2}{2\mu}\sum_i\left(\frac{\partial^2}{\partial\xi_i^2}+\frac{\partial^2}{\partial\eta_i^2}+\frac{\partial^2}{\partial\zeta_i^2}\right)-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{r^2}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)\right.\right.$$

$$+\cot\theta\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-i\hat{L}_\xi\right)+\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-i\hat{L}_\xi\right)^2$$

$$\left.+\frac{1}{\sin^2\theta}\left(\frac{\partial}{\partial\varphi}-i\sin\theta\hat{L}_\eta-i\cos\theta\hat{L}_\zeta\right)^2\right]$$

$$\left.+V(\xi_i,\ \eta_i,\ \zeta_i;\ \rho)-E\right\}\psi(\xi_i,\ \eta_i,\ \zeta_i;\ \rho,\ \theta,\varphi)=0.$$

上式中 $\hat{L}_\xi$，$\hat{L}_\eta$ 和 $\hat{L}_\zeta$ 是在 ξ，η，ζ 坐标系中，电子轨道角动量

分量的算符，它们以$\hbar$作单位。

2. 在固定坐标系x, y, z中，第i个电子的自旋变量用s_i'来表示，而在运动坐标系ξ, η, ζ中，则用s_i来表示。含有自旋变量s_i的函数$\psi(\cdots s_i\cdots)$与含有s_i'的函数$\psi(\cdots s_i'\cdots)$，通过下列线性变换联系起来：

$$\psi(\cdots s_i\cdots)=\sum_{s_1'\cdots s_i'\cdots}S(s_1,\cdots,s_i,\cdots,s_1',\cdots,s_i'\cdots)\psi(\cdots s_i'\cdots)$$
$$=\hat{S}\psi(\cdots s_i'\cdots),$$

式中

$$S(s_1,\ s_2,\ \cdots,\ s_i,\ \cdots,\ s_1',\ \cdots,\ s_i',\ \cdots)$$
$$=S(s_1;\ s_1')S(s_2;\ s_2')\cdots S(s_i;\ s_i')\cdots,$$

而且

$$S\left(\frac{1}{2};\ \frac{1}{2}\right)=\cos\frac{\theta}{2}\exp\left[\frac{1}{2}\mathrm{i}\left(\varphi+\frac{1}{2}\pi\right)\right],$$

$$S\left(\frac{1}{2};\ -\frac{1}{2}\right)=\mathrm{i}\sin\frac{\theta}{2}\exp\left[\frac{1}{2}\mathrm{i}\left(\varphi+\frac{1}{2}\pi\right)\right],$$

$$S\left(-\frac{1}{2};\ \frac{1}{2}\right)=\mathrm{i}\sin\frac{\theta}{2}\exp\left[\frac{1}{2}\mathrm{i}\left(\varphi+\frac{1}{2}\pi\right)\right],$$

$$S\left(-\frac{1}{2};\ -\frac{1}{2}\right)=\cos\frac{\theta}{2}\exp\left[\frac{1}{2}\mathrm{i}\left(\varphi+\frac{\pi}{2}\right)\right].$$

我们所要求的薛定谔方程可写为

$$[\hat{S}\hat{H}\hat{S}^{-1}-E]\psi(\cdots\xi_i,\ \eta_i,\ \zeta_i,\ s_i\cdots;\ \rho,\ \theta,\ \varphi)=0,$$

式中$\hat{H}$是解上题时得到的哈密顿算符。

经过一些简单的运算，最后求得薛定谔方程为：

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\sum\left(\frac{\partial^2}{\partial\xi_i^2}+\frac{\partial^2}{\partial\eta_i^2}+\frac{\partial^2}{\partial\zeta_i^2}\right)-\frac{\hbar^2}{2Mr^2}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)\right.\right.$$
$$\left.+\cot\theta\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-\mathrm{i}\hat{M}_\xi\right)+\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-\mathrm{i}\hat{M}_\xi\right)^2\right.$$

$$+\frac{1}{\sin^2\theta}\left(\frac{\partial}{\partial\varphi}-i\sin\theta\hat{M}_\eta-i\cos\theta\hat{M}_\zeta\right)^2\Big]$$

$$+V-E\Big\}\psi(\cdots\xi_i,\ \eta_i,\ \zeta_i,\ s_i\cdots;\ \rho,\ \theta,\ \varphi)=0$$

与上题不同，这里$\hat{M}_\zeta$，$\hat{M}_\eta$和$\hat{M}_\zeta$是电子的总角动量（轨道和自旋）分量的算符。

3. 假设具有固定中心的问题已解决，即电子谱项$E_{电子}(\rho)$和波函数$\Phi_{电子}$已知，为明确起见，我们讨论情形a；令在波函数$\Phi_{电子}$所描述的态中，总角动量（轨道和自旋）沿分子轴的分量等于Ω。用$\Phi_{电子}^*$左乘薛定谔方程：

$$\hat{H}\Phi_{电子}(\xi_i,\ \eta_i,\ \zeta_i;\ \sigma_i;\ \rho)f(\rho)\Theta(\theta,\ \varphi)$$
$$=E\Phi_{电子}(\xi_i,\ \eta_i,\ \zeta_i;\ \sigma_i;\ \rho)f(\rho)\Theta(\theta,\ \varphi),$$

然后对具有固定中心的坐标系中的坐标积分，并对σ_i求和。若注意到

$$\int\Phi_{电子}^*\hat{M}_\zeta\Phi_{电子}d\tau=\int\Phi_{电子}^*\hat{M}_\eta\Phi_{电子}d\tau=0,$$

我们有：

$$\left[B\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho^2\frac{\partial}{\partial\rho}\right)-E_{电子}(\rho)-V'(\rho)-E_{转动}+E\right]f(\rho)=0,$$

$$B\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\left(\frac{\partial}{\partial\varphi}-i\Omega\cos\theta\right)^2\right]$$
$$\cdot\Theta(\theta,\ \varphi)+E_{转动}\Theta(\theta,\ \varphi)=0.$$

在以上两个方程中，我们引进了下列符号

$$V'(\rho)=\frac{1}{M}\int\Phi_{电子}^*\left[\frac{1}{\rho^2}(\hat{M}_\xi^2+\hat{M}_\eta^2)-\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}\right]\Phi_{电子}d\tau,$$

$$B=\frac{\hbar^2}{2M}\cdot\frac{1}{\rho^2}.$$

B这个量称为转动常数。

4. 在分子的量子力学中，基本物理事实是比值M/μ的数值很大，其中M和μ分别为核和电子的质量。正是由于这个很大

的（数量级为1000到10,000）无量纲参数存在，导致本题中所涉及的各量的数量级之间有相当大的差别。

用 a 表示双原子分子的线度的数量级。显然，核间距离有同样的数量级。的确，根据 a 的意义，两核之间的距离不可能比 a 大，但由于核的相互静电排斥，它也不会比 a 小很多。（相似地，容易得出 a 应与一个原子的线度同数量级的结论。然而，对于我们要作的估计，关于 a 的数量级的这个事实并不起什么作用。）

(a) 首先，我们来估计价电子能量以及电子能级间间隔的数量级。价电子不同于每个核处的内闭壳层中的电子，它是在线度约为 a 的空间区域中运动，所以，动量的不确定度 Δp 的数量级为 $\hbar/a$。因此，电子的零点能（或相邻电子能级之能量差）的数量级为 $E_{电}$：

$$E_{电}\sim\frac{(\Delta p)^2}{\mu}\sim\frac{\hbar^2}{\mu a^2}. \tag{1}$$

现在来讨论分子中核的振动。至少对基态和低激发态来说，具有质量（或者更确切地说，核的约化质量）M 和倔强系数 K 的谐振子可作为这种振动的模型。我们根据下述事实来估计 K：核间距离改变 a 的数量级，应该引起电子波函数改变一个数量级，亦即它必然引起能量改变，其数量级为

$$Ka^2\sim E_{电}.$$

由此，按通常的方法，我们得到分子中核振动的频率 $\omega\sim\sqrt{K/M}$，利用（1）式我们求得振动能级之间的间隔：

$$E_{振}\approx\hbar\omega\sim\hbar\left(\frac{E_{电}}{Ma^2}\right)^{\frac{1}{2}}\sim\frac{\hbar^2}{(\mu M)^{\frac{1}{2}}a^2}\sim\left(\frac{\mu}{M}\right)^{\frac{1}{2}}E_{电}. \tag{2}$$

最后，分子转动能级显然可以当作转动惯量为 $I\sim Ma^2$ 的转子的能级来处理，所以，转动能级之间的间隔等于：

$$E_{转}\sim\frac{\hbar^2}{I}\sim\frac{\hbar^2}{Ma^2}\sim\frac{\mu}{M}E_{电}. \tag{3}$$

由(1)式，(2)式和(3)式清楚地看出，$E_{电}$，$E_{振}$和$E_{转}$的数量

级形成一个等比级数，其公比为$(\mu/M)^{\frac{1}{2}}\sim10^{-2}$。

(b) 用b表示分子中核的零点振动的振幅。它的数量级为$\sqrt{(\hbar/M\omega)}$。这个估计可用不同的方法得到，例如，可使振子能量的数量级($\sim\hbar\omega$)与偏移距离b的势能($\sim M\omega^2b^2$)相等，然后将(2)式中的ω代入，则得：

$$b\sim\left(\frac{\mu}{M}\right)^{\frac{1}{4}}a. \tag{4}$$

另面，分子中核振动的振幅b，与核间的平衡距离a之比的数量级为$(\mu/M)^{\frac{1}{4}}\ll1$。在分子理论中，这个量可当作一个小的展开参数。根据前面所得结果，$E_{电}$，$E_{振}$和$E_{转}$分别是这个小参数的零级、二级和四级小量。

(c) 分子中电子运动的周期和核振动的周期的数量级分别为

$$T_{电}\sim\frac{1}{\omega_{电}}\sim\frac{\hbar}{E_{电}}\sim\frac{\mu a^2}{\hbar}, \tag{5}$$

$$T_{振}\sim\frac{1}{\omega_{振}}\sim\frac{(\mu M)^{\frac{1}{2}}a^2}{\hbar}. \tag{6}$$

相应的特征速度显然等于

$$v_{电}\sim\frac{a}{T_{电}}\left[\text{或}\sim\sqrt{\left(\frac{E_{电}}{\mu}\right)}\right]\sim\frac{\hbar}{\mu a}, \tag{7}$$

$$v_{振}\sim\frac{b}{T_{振}}\left[\text{或}\sim\sqrt{\left(\frac{E_{振}}{M}\right)}\right]\sim\frac{\hbar}{\mu^{\frac{1}{4}}M^{\frac{3}{4}}a}. \tag{8}$$

由(5)式到(8)式我们得到：

$$\frac{T_{振}}{T_{电}}\sim\left(\frac{M}{\mu}\right)^{\frac{1}{2}}\gg1,\qquad\frac{v_{振}}{v_{电}}\sim\left(\frac{\mu}{M}\right)^{\frac{3}{4}}\ll1. \tag{9}$$

后一不等式表明，分子中的核运动比电子运动慢得多。因此，有可能在浸渐近似下考虑核的运动。

5. N_2分子(原子均处于^4S态)：$^1\Sigma_g^+$，$^3\Sigma_u^+$，$^5\Sigma_g^+$，$^7\Sigma_u^+$。

Br_2 分子（原子均处于 ^2P 态）：

$$2^1\Sigma_g^+,\ {}^1\Sigma_u^-,\ {}^1\Pi_g,\ {}^1\Pi_u,\ {}^1\Delta_g;$$

$$2^3\Sigma_u^+,\ {}^3\Sigma_g^-,\ {}^3\Pi_g,\ {}^3\Pi_u,\ {}^3\Delta_u.$$

LiH 分子（Li 原子处于 ^2S_g 态，氢原子处于 ^2S_g 态）：

$$^1\Sigma^+,\ {}^3\Sigma^+.$$

HBr 分子（Br 原子处于 ^2P_u 态）：

$$^1\Sigma^+,\ {}^3\Sigma^+,\ {}^1\Pi,\ {}^3\Pi.$$

CN 分子（C 原子处于 ^3P_g 态，N 原子处于 ^4S_u 态）：

$$^2\Sigma^+,\ {}^4\Sigma^+,\ {}^6\Sigma^+,\ {}^2\Pi,\ {}^4\Pi,\ {}^6\Pi.$$

（谱项符号前面的数字表示该谱项的多重数）。

6. 处于基态的氦原子，其特征是，它的两个电子都处于最低能级（仲氦）。氦原子基态的总本征函数近似地可以写为：

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\psi_a(1)\psi_a(2)[\eta_+(\sigma_1)\eta_-(\sigma_2)-\eta_+(\sigma_2)\eta_-(\sigma_1)],$$

式中 ψ_a 是一氢原子的波函数。

氢原子有本征函数

$$\psi_b(3)\eta_+(\sigma_3)\ 或\ \psi_b(3)\eta_-(\sigma_3).$$

如果两原子相距很远，则这系统的波函数可写成乘积的形式：

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\psi_a(1)\psi_a(2)\psi_b(3)[\eta_+(\sigma_1)\eta_-(\sigma_2)$$
$$-\eta_+(\sigma_2)\eta_-(\sigma_1)]\eta_+(\sigma_3).$$

考虑到电子间的交换，则这系统的本征函数对于任何两电子的交换应该是反对称的，所以只存在一个反对称的本征函数，它也就是我们所讨论的系统的零级近似本征函数：

$$\begin{aligned}\Psi=\frac{1}{\sqrt{6(1-S)}}\{&\psi_a(1)\psi_a(2)\psi_b(3)[\eta_+(1)\eta_-(2)\\&-\eta_+(2)\eta_-(1)]\eta_+(3)+\psi_a(3)\psi_a(1)\psi_b(2)\\&\cdot[\eta_+(3)\eta_-(1)-\eta_+(1)\eta_-(3)]\eta_+(2)\\&+\psi_a(2)\psi_a(3)\psi_b(1)[\eta_+(2)\eta_-(3)\\&-\eta_+(3)\eta_-(2)]\eta_+(1)\}.\end{aligned}\qquad(1)$$

(1)式中$1/\sqrt{6(1-S)}$是归一化因子，而

$$S=\int\psi_a(1)\psi_a(2)\psi_b(3)\psi_a(2)\psi_a(3)\psi_b(1)\mathrm{d}\tau_1\mathrm{d}\tau_2\mathrm{d}\tau_3$$

$$=\int\psi_a(1)\psi_a(2)\psi_b(3)\psi_a(1)\psi_a(3)\psi_b(2)\mathrm{d}\tau_1\mathrm{d}\tau_2\mathrm{d}\tau_3$$

$$=\int\psi_a(1)\psi_a(3)\psi_b(2)\psi_a(2)\psi_a(3)\psi_b(1)\mathrm{d}\tau_1\mathrm{d}\tau_2\mathrm{d}\tau_3.$$

应用通常的微扰论，我们有

$$\epsilon=\sum_\sigma\int\Psi\hat{H}\Psi\mathrm{d}\tau,$$

式中Ψ是零级近似的本征函数，$\hat{H}$是微扰能量，而求和遍及所有的自旋变量。应该注意到，对Ψ的不同部分，$\hat{H}$有不同的表示式，也就是说，对于$\psi_a(1)\psi_a(2)\psi_b(3)$，微扰能量等于

$$\hat{H}=e^2\left(\frac{2}{R}-\frac{1}{r_{a3}}-\frac{1}{r_{b1}}-\frac{1}{r_{b2}}+\frac{1}{r_{13}}+\frac{1}{r_{23}}\right),$$

而对于$\psi_a(1)\psi_a(3)\psi_b(2)$，则它等于

$$\hat{H}=e^2\left(\frac{2}{R}-\frac{1}{r_{a2}}-\frac{1}{r_{b1}}-\frac{1}{r_{b3}}+\frac{1}{r_{12}}+\frac{1}{r_{32}}\right).$$

如果注意到只是电子的编号不同的那些积分都是相同的，则我们有：

$$\epsilon=\frac{K-A}{1-S},\qquad(2)$$

式中

$$K=e^2\int\left(\frac{2}{R}+\frac{1}{r_{13}}+\frac{1}{r_{23}}-\frac{1}{r_{a3}}-\frac{1}{r_{b1}}-\frac{1}{r_{b2}}\right)$$
$$\cdot\psi_a^2(1)\psi_a^2(2)\psi_b^2(3)\mathrm{d}\tau_1\mathrm{d}\tau_2\mathrm{d}\tau_3,$$

$$A=e^2\int\left(\frac{2}{R}+\frac{1}{r_{13}}+\frac{1}{r_{23}}-\frac{1}{r_{a3}}-\frac{1}{r_{a2}}-\frac{1}{r_{b2}}\right)$$
$$\times\psi_a(1)\psi_a(2)\psi_b(3)\psi_a(1)\psi_a(3)\psi_b(2)\mathrm{d}\tau_1\mathrm{d}\tau_2\mathrm{d}\tau_3.$$

一般说来，积分K，A，S与氢分子问题中相应的积分属于同一

类型。积分的计算表明，(2)式相当于排斥作用。这个结果不仅对氦，而且对所有惰性气体都是正确的。

7. 把质心运动分离出来之后，原子核的相对运动的波函数满足下列方程：

$$\nabla^2\psi+\frac{2M}{\hbar^2}\left[E+2D\left(\frac{1}{\rho}-\frac{1}{2\rho^2}\right)\right]\psi=0,$$

其中M是核的约化质量。在球坐标中分离变量，并令

$$\psi=\frac{\chi(\rho)}{\rho}Y_{KM}(\theta,\ \varphi),$$

则得到 χ 满足的微分方程

$$\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}\rho^2}+\left[-\lambda^2+\frac{2\gamma^2}{\rho}-\frac{\gamma^2+K(K+1)}{\rho^2}\right]\chi=0$$

$$\lambda=\sqrt{\left(-\frac{2Ma^2E}{\hbar^2}\right)},\qquad \gamma^2=\frac{2Ma^2}{\hbar^2}D.$$

作变换 $\chi(\rho)=\rho^s\mathrm{e}^{-\lambda\rho}u(\rho)$，其中

$$s=\frac{1}{2}+\sqrt{\left[\gamma^2+\left(K+\frac{1}{2}\right)^2\right]},$$

则上面的方程变为超几何方程

$$\rho u''+(2s-2\lambda\rho)u'-(-2s\lambda+2\gamma^2)u=0.$$

这个方程的解为

$$u=cF\left(s-\frac{\gamma^2}{\lambda},\ 2s,\ 2\lambda\rho\right).$$

它在 $\rho=0$ 处是有限的。在分立谱的态中，波函数 χ 在 $r\to\infty$ 时，应趋于零。为此，必须使 u 的表示式变成一多项式：

$$s-\frac{\gamma^2}{\lambda}=-v,$$

式中 v 是非负的整数。由此条件，可得能级

$$E_{vK}=-\frac{\hbar^2}{2Ma^2}\left\{v+\frac{1}{2}+\sqrt{\left[\gamma^2+\left(K+\frac{1}{2}\right)^2\right]}\right\}^2.$$

无量纲的参数 γ^2 正比于核的约化质量 M，所以 $\gamma^2 \gg 1$。若 v 和 K 不很大：

$$v \ll \gamma, \qquad K \ll \gamma.$$

则 E_{vK} 的表示式为

$$E_{vK} = -D + \hbar\omega_0\left(v+\frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2}{2Ma^2}\left(K+\frac{1}{2}\right)^2 - \frac{3\hbar^2}{2Ma^2}\left(v+\frac{1}{2}\right)^2 - \frac{3\hbar^3\left(K+\frac{1}{2}\right)\left(v+\frac{1}{2}\right)}{2M^2a^4\omega_0},$$

式中

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{2D}{Ma^2}}.$$

离解能近似地等于

$$E_0 = D - \frac{\hbar\omega_0}{2}.$$

在 E_{vK} 的表示式中，第二项和第三项分别给出振动能量和转动能量，第四项计及振动的非简谐性，而最后一项，即第五项则计及原子核的振动和转动之间的相互作用对能量的修正。

因为采用原子单位($e=\mu=\hbar=1$)，D的数量级是 1，故由所得到的表示式可得出：

$$D : \hbar\omega_0 : \frac{\hbar^2}{2Ma^2} \sim 1 : \sqrt{\frac{\mu}{M}} : \frac{\mu}{M},$$

式中 μ 是电子的质量。

由此可见，电子运动不同的两个量子态间的能量差（与D同数量级），比不同振动态之间的能量差大得多，而后者又比转动态之间的能量差大得多。

8 我们来求有效势

$$W=-2D\left(\frac{1}{\rho}-\frac{1}{2\rho^2}\right)+\frac{A^2}{\rho^2}$$

的极小值。式中

$$A^2=\frac{\hbar^2K(K+1)}{2Ma^2};$$

令上式的微商等于零：

$$W'=-2D\left(-\frac{1}{\rho_0^2}+\frac{1}{\rho_0^3}\right)-\frac{2A^2}{\rho_0^3}=0,$$

可得

$$\rho_0=1+\frac{A^2}{D}.$$

现在将有效势在所求得的平衡位置附近展开：

$$W(\rho)\approx-2D\left(\frac{1}{\rho_0}-\frac{1}{2\rho_0^2}\right)+\frac{A^2}{\rho_0^2}+\frac{D+A^2}{\rho_0^4}(\rho-\rho_0)^2,$$

如果这里只保留到A^2项，则得

$$W(\rho)\approx-D+A^2+(D-3A^2)(\rho-\rho_0)^2.$$

把这个表示式代入χ的方程

$$\frac{d^2\chi}{d\rho^2}+\frac{2Ma^2}{\hbar^2}[E+D-A^2-(D-3A^2)(\rho-\rho_0)^2]\chi=0.$$

我们便求得能级：

$$E_{vK}=-D+A^2+\hbar\omega\left(v+\frac{1}{2}\right).$$

在同样的近似下，我们有

$$\omega=\omega_0\left(1-\frac{3}{2}\frac{A^2}{D}\right),\quad \omega_0=\sqrt{\frac{2D}{Ma^2}}.$$

最后得到能量E_{vK}为

$$E_{vK}=-D+\hbar\omega_0\left(v+\frac{1}{2}\right)+\frac{\hbar^2K(K+1)}{2Ma^2}-\frac{3}{2}\frac{\hbar K(K+1)\left(v+\frac{1}{2}\right)}{M^2a^4\omega_0}.$$

由于在这些计算中并未考虑到非谐性的影响，所以上式中没有出现在解上题时曾得到的项$-(3\hbar^2/2Ma^2)\left(v+\frac{1}{2}\right)$。

9. 在红外光谱带中，我们遇到的是电子基态中振动和转动量子数改变的跃迁。在下列两个态之间的跃迁：$v',J'\to v'',J''$，其频率为

$$\omega=\omega_0(v'-v'')+\frac{\hbar}{2Ma^2}[J''^2+J'-J''^2-J''].$$

根据J的选择定则，要求$J''=J'\pm1$。

于是，我们得到下列频率：

$$\omega=\omega_0(v'-v'')-\frac{\hbar}{2Ma^2}2(J'+1)\quad\begin{pmatrix}J''=J'+1\\J'=0,1,2,\cdots\end{pmatrix}$$

和

$$\omega=\omega_0(v'-v'')+\frac{\hbar}{2Ma^2}2J'\quad\begin{pmatrix}J''=J'-1,\\J'=1,2,\cdots\end{pmatrix}.$$

这两组频率在分子光谱学中分别标为P支和R支。

由所得到的表示式可以看出：当给定v'和v''值时，两相邻谱线的频率差（以cm^{-1}为单位）等于

$$\Delta\nu=\frac{\Delta\omega}{2\pi c}=\frac{\hbar}{2\pi cMa^2}.$$

$H^{35}Cl$分子的转动惯量

$$I=Ma=\frac{\hbar}{2\pi c\Delta\nu}=2.65\times10^{-40}\text{g}\cdot\text{cm}^2.$$

利用约化质量的值

$$M=M_H\frac{1\times35}{1+35}=0.972M_H=1.61\times10^{-24}\text{g}.$$

我们求得在HCl分子中两个核之间的距离

$$a=\sqrt{\frac{I}{M}}=1.29\times10^{-8}\text{cm}$$

在DCl和HCl分子中平衡距离a是相同的，因为势能曲线的形状

是由电子态决定的。由此得

$$\frac{\Delta\nu_{DCl}}{\Delta\nu_{HCl}}=\frac{M_{HCl}}{M_{DCl}};\quad \Delta\nu_{DCl}=10.7\text{cm}^{-1}.$$

10. 头两个转动能级之间的距离由下式给出：

$$\Delta\nu_{转}=\frac{\hbar}{2\pi cI}=41.5\text{cm}^{-1}.$$

由此得

$$\frac{\Delta\nu_{转}}{\Delta\nu_{振}}=0.0104.$$

11. D_2分子的离解能等于4.54eV。

12*. 若引进新的变量$\xi=(r-a)/a$则径向函数$\frac{\chi}{r}$的方程可以写成：

$$\frac{d^2\chi}{d\xi^2}+\frac{2Ma^2}{\hbar^2}(E-V)\chi=0.$$

若令$z=a\exp(-2\beta\xi)$，则得

$$\chi''+\frac{1}{z}\chi'+\left(-\frac{s^2}{z^2}-\frac{1}{4}+\frac{v+s+\frac{1}{2}}{z}\right)\chi=0,$$

式中

$$s=\sqrt{\left[\frac{Ma^2(D-E)}{2\beta^2\hbar^2}\right]},\quad v+s+\frac{1}{2}=\frac{Ma^2D}{a\beta^2\hbar^2},$$

$$a^2=\frac{2Ma^2D}{\beta^2\hbar^2}.$$

作变换$\chi=\exp(-z/2)z^su(z)$，上面的方程变为合流超几何方程$zu''+(2s+1-z)u'+nu=0$，它的解是合流超几何函数

$$u=F(-v,2s+1,z).$$

当s值为正时（分立谱），这个函数满足下列条件：$r\to+\infty$时，χ趋于零。当$r\to-\infty$时，波函数应趋于零①。为满足这个条件，F

① 严格地讲，在$r=0$处波函数应为零。这在最后的结果中只引起很小的改变（见D. ter Haar, *Phys. Rev.* 70, 222(1946)）。

必须化为一多项式，亦即 v 必须是一个非负的整数。这个条件便决定了能谱

$$E_v=\hbar\omega\left(v+\frac{1}{2}\right)-\frac{\hbar^2\omega^2}{4D}\left(v+\frac{1}{2}\right)^2,$$

式中

$$\omega=4\beta\sqrt{\frac{D}{2Ma^2}}.$$

因此，振动能级之间的距离随量子数v的增加而减小。

离解能等于

$$E_0=D-\frac{\hbar\omega}{2}+\frac{\hbar^2\omega^2}{16D}.$$

14. 我们用欧勒角(θ,φ,ψ)作为表征转动的参数。在这种情况下，在固定坐标系中某一点的坐标 x，y，z 与它在运动坐标系中的坐标ξ,η,ζ由下式联系起来：

$$\left.\begin{aligned}
\chi&=\xi(\cos\psi\cos\varphi-\sin\psi\sin\varphi\cos\theta)\\
&\quad-\eta(\cos\psi\sin\varphi+\sin\psi\cos\varphi\cos\theta)+\zeta\sin\psi\sin\theta\\
y&=\xi(\sin\psi\cos\varphi+\cos\psi\sin\varphi\cos\theta)\\
&\quad+\eta(-\sin\psi\sin\varphi+\cos\psi\cos\varphi\cos\theta)-\zeta\cos\psi\sin\theta\\
z&=\xi\sin\varphi\sin\theta+\eta\cos\varphi\sin\theta+\zeta\cos\theta
\end{aligned}\right\}\qquad(1)$$

为了求出算符$\hat{J}_\xi,\hat{J}_\eta,\hat{J}_\zeta$的形式，我们利用算符$\hat{J}_\xi=-\mathrm{i}(\partial/\partial\alpha)$这一事实，其中$\alpha$是在垂直于$\xi$轴的平面中的角度。因为 ξ,η,ζ 坐标系绕某一轴，例如ξ轴，转过一无穷小角度 $\mathrm{d}\alpha$时，诸角的值会改变，所以我们可将$\hat{J}_\xi$（以$\hbar$为单位）写成下式：

$$\hat{J}_\xi=-\mathrm{i}\left(\frac{\partial\theta}{\partial\alpha}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\partial\varphi}{\partial\alpha}\frac{\partial}{\partial\varphi}+\frac{\partial\psi}{\partial\alpha}\frac{\partial}{\partial\psi}\right).$$

当绕ξ轴转过无穷小角度$\mathrm{d}\alpha$时，我们有

$$\left.\begin{aligned}
\xi&=\xi',\\
\eta&=\eta'-\zeta'\mathrm{d}\alpha,\\
\zeta&=\eta'\mathrm{d}\alpha+\zeta',
\end{aligned}\right\}\qquad(2)$$

以及

$$z=\xi'\sin(\varphi+d\varphi)\sin(\theta+d\theta)+\eta'\cos(\varphi+d\varphi)\sin(\theta+d\theta)$$
$$+\zeta'\cos(\theta+d\theta). \tag{3}$$

另一方面，将(2)式代入(1)式。我们得

$$z=\xi'\sin\varphi\sin\theta+\eta'(\cos\varphi\sin\theta+\cos\theta d\alpha)$$
$$+\zeta'(\cos\theta-\cos\varphi\sin\theta d\alpha) \tag{4}$$

比较(3)式和(4)式，即得

$$\frac{d\theta}{d\alpha}=\cos\varphi,\quad \frac{d\varphi}{d\alpha}=-\sin\varphi\cot\theta.$$

类似地我们有：$d\psi/d\alpha=\sin\varphi/\sin\theta$。

最后，我们求得J_ζ的表示式：

$$J_\zeta=-i\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}-\sin\varphi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}+\frac{\sin\varphi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\psi}\right).$$

用同样的方法可以求得另外两个算符的表示式

$$J_\eta=-i\left(-\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}-\cos\varphi\cot\frac{\partial}{\partial\varphi}+\frac{\cos\varphi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\psi}\right).$$

$$J_\zeta=-i\frac{\partial}{\partial\varphi}.$$

17. $E_J=\frac{\hbar^2}{2A}J(J+1)$。

每一个能级相对于固定参考系和本体参考系中的角动量方向都是$(2J+1)$重简并的。

18. 因为

$$H=\frac{1}{2A}J^2+\frac{1}{2}\left(\frac{1}{C}-\frac{1}{A}\right)J^2\zeta,$$

我们有

$$E=\frac{1}{2A}J(J+1)+\frac{1}{2}\left(\frac{1}{C}-\frac{1}{A}\right)k^2,J_\zeta=k,|k|\leqslant J.$$

在这种情形下，能级是$2(2J+1)$重简并的。在固定参考系中对角动量方向的简并度仍与以前一样，是$(2J+1)$重简并的。

19. $$-\frac{\hbar^2}{2A}\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial u}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial\varphi^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial\psi^2}\right)\right.$$

$$\left.-2\frac{\cos\theta}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 u}{\partial\psi\partial\varphi}\right\}-\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{C}-\frac{1}{A}\right)\frac{\partial^2 u}{\partial\varphi^2}=Eu.$$

20*. 因为$\hat{J}^2$与$\hat{J}_\zeta=-\mathrm{i}(\partial/\partial\varphi)$和$\hat{J}_z=-\mathrm{i}(\partial/\partial\psi)$对易，所以可将本征函数写成

$$\Phi_{kJM_J}=\Theta_{kJM_J}(\theta)\exp(\mathrm{i}M_J\psi)\exp(\mathrm{i}k\varphi),$$

式中M_J和k分别是角动量在固定的z轴方向上和运动着的ζ轴方向上的分量。

由于φ和ψ对称地出现在公式(14)中，且$|k|\leqslant J$，所以$|M_J|\leqslant J$。

我们来讨论算符

$$\hat{J}_\xi+\mathrm{i}\hat{J}_\eta=-\mathrm{i}\exp(-\mathrm{i}\varphi)\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-\mathrm{i}\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}-\frac{\mathrm{i}}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\psi}\right),\quad(1)$$

$$\hat{J}_\xi-\mathrm{i}\hat{J}_\eta=-\mathrm{i}\exp(\mathrm{i}\varphi)\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+\mathrm{i}\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}-\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\psi}\right).\quad(2)$$

容易证明，

$$\hat{J}_\zeta(\hat{J}_\xi-\mathrm{i}\hat{J}_\eta)\Phi_{kJM_J}=(k+1)(\hat{J}_\xi-\mathrm{i}\hat{J}_\eta)\Phi_{kJM_J};$$

即$(\hat{J}_\xi-\mathrm{i}\hat{J}_\eta)\Phi_{kJM_J}$是算符$\hat{J}_\zeta$的本征函数，相应的本征值为$k+1$。

令$k=J$，我们有

$$(\hat{J}_\xi-\mathrm{i}\hat{J}_\eta)\Phi_{JJM_J}=0.$$

上式可表成如下形式：

$$\left(\frac{\partial}{\partial\theta}+\mathrm{i}\cot\theta\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\psi}\right)\Theta_{JJM_J}(\theta)\exp(\mathrm{i}M_J\psi)\exp(\mathrm{i}J\varphi)$$

$$=0.$$

由此得到确定Θ_{JJM_J}的一阶常微分方程

$$\frac{\mathrm{d}\Theta_{JJM_J}}{\mathrm{d}\theta}+\frac{M_J-J\cos\theta}{\sin\theta}\Theta_{JJM_J}=0.$$

这个方程的通解为

$$\left.\begin{aligned}\Theta_{JM_J}&=c\frac{(\sin\theta)^J}{\left(\tan\frac{1}{2}\theta\right)^M}-\\ \text{或}\quad\Theta(\theta)&=c(1-\cos\theta)^{\frac{1}{2}(J-M_J)}(1+\cos\theta)^{\frac{1}{2}(J+M_J)}.\end{aligned}\right\}\tag{3}$$

因为函数Θ应该是有限的，所以$|M_J|\leqslant J$。

为了确定函数Θ_{kJM_J}，我们来讨论算符$(\hat{J}_\xi+\mathrm{i}\hat{J}_\eta)$对它的作用。因为

$$\hat{J}_\zeta(\hat{J}_\xi+\mathrm{i}\hat{J}_\eta)\Theta_{kJM_J}=(k-1)(\hat{J}_\xi+\mathrm{i}\hat{J}_\eta)\Theta_{kJM_J}$$

所以

$$(\hat{J}_\xi+\mathrm{i}\hat{J}_\eta)\Theta_{kJM_J}=\mathrm{i}\alpha_k\Theta_{k-1,JM_J}.\tag{4}$$

将算符$(\hat{J}_\xi+\mathrm{i}\hat{J}_\eta)$的具体形式(1)代入方程(4)，就得到下列方程

$$\frac{\mathrm{d}\Theta_{kJM_J}}{\mathrm{d}\theta}+\frac{k\cos\theta-M_J}{\sin\theta}\Theta_{kJM_J}=\mathrm{i}\alpha_k\Theta_{k-1,JM_J},$$

若引进新变量$x=\cos\theta$，则上式变成

$$\sqrt{1-x^2}\frac{\mathrm{d}P_{kJM_J}(x)}{\mathrm{d}x}+\frac{M_J-kx}{\sqrt{1-x^2}}P_{kJM_J}(x)$$
$$=-\mathrm{i}\alpha_kP_{k-1,JM_J}(x),$$

式中

$$P_{kJM_J}(x)=\Theta_{kJM_J}(\arccos x).$$

若令

$$P_{kJM_J}=(1-x)^{-\frac{1}{2}(k-M_J)}(1+x)^{-\frac{1}{2}(k+M_J)}v_{kJM_J},\tag{5}$$

就求得确定v_{kJM_J}的简单关系式：

$$\frac{\mathrm{d}v_{kJM_J}}{\mathrm{d}x}=-\mathrm{i}\alpha_kv_{k-1,JM_J}.\tag{6}$$

前面已求得的函数P_{kJM_J}[见方程(3)]可改写成(5)式的形式：

$$P_{JJM_J}(x)=(1-x)^{-\frac{1}{2}(J-M_J)}(1+x)^{-\frac{1}{2}(J+M_J)}v_{JJM_J},$$

式中v_{JJM}表示下式：

$$v_{JJM}(x)=c(1-x)^{J-M_J}(1+x)^{J+M_J}.\tag{7}$$

由(7)式及递推关系式(6)，得

$$v_{kJM_J}=c\frac{\mathrm{d}^{J-k}}{\mathrm{d}x^{J-k}}[(1-x)^{J-M_J}(1+x)^{J+M_J}].$$

因此，

$$\Phi_{kJM_J}(\theta,\psi,\varphi)$$

$$=c\ \exp(\mathrm{i}k\varphi)\exp(\mathrm{i}M_J\psi)(1-\cos)^{-\frac{1}{2}(k-M_J)}$$

$$\times(1+\cos\theta)^{-\frac{1}{2}(k+M_J)}\times\left(\frac{\partial}{\partial\cos\theta}\right)^{J-k}[(1-\cos\theta)^{J-M_J}$$

$$\times(1+\cos\theta)^{J+M_J}];$$

当$M_J=0$时，如所预期，这些广义球函数就变成普通的球函数，并且就是转子的波函数：

$$\Phi_{kJ0}(\theta,\varphi)=c\exp(\mathrm{i}k\varphi)\ \frac{1}{\sin^k\theta}\cdot\frac{\mathrm{d}^{J-k}}{\mathrm{d}(\cos\theta)^{J-k}}(\sin^{2J}\theta).$$

21. $$H_{kk}=\frac{\hbar^2}{4}\left(\frac{1}{A}+\frac{1}{B}\right)[J(J+1)-k^2]+\frac{\hbar^2k^2}{2C},$$

$$H_{kk+2}=H_{k+2k}$$

$$=\frac{\hbar^2}{8}\left(\frac{1}{A}-\frac{1}{B}\right)\sqrt{[(J-k)(J-k-1)(J+k+1)(J+k+2)]}.$$

22. 对于不对称陀螺，对在固定参考系中的角动量方向的简并度仍然相同。对量子数k的简并度将完全消除，所以给定一个J值，将对应着$(2J+1)$个不同的能级。在$J=1$的情况下，解下列久期方程就可以确定能级：

$$\begin{vmatrix} H_{11}-E & H_{10} & H_{1,-1} \\ H_{10} & H_{00}-E & H_{0,-1} \\ H_{-1,1} & H_{-1,0} & H_{-1,-1}-E \end{vmatrix}$$

$$=\begin{vmatrix} H_{11}-E & 0 & H_{1,-1} \\ 0 & H_{00}-E & 0 \\ H_{-1,1} & 0 & H_{-1,-1}-E \end{vmatrix}=0.$$

因为$H_{-1,-1}=H_{11}$，所以我们有：

$$(H_{00}-E)(H_{11}^2+E^2-2H_{11}E-H_{1,-1}^2)=0$$

由此得

$$E_1=\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{A}+\frac{1}{B}\right),\ E_2=\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{C}+\frac{1}{A}\right),\ E_3=\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{B}+\frac{1}{C}\right).$$

23*.

E		m	
E_1	$\Phi_{k=0,m}$	1	$[\sqrt{3}/4\pi]\exp(i\psi)\sin\theta$
		0	$[1/\pi]\sqrt{\frac{3}{8}}\cos\theta$
		−1	$[\sqrt{3}/4\pi]\exp(-i\psi)\sin\theta$
E_2	$c(\Phi_{k-1,m}+\Phi_{k=-1,m})$	1	$[1/\pi]\sqrt{\frac{3}{16}}\exp(i\psi)(\cos\varphi+i\cos\theta\ \sin\varphi)$
		0	$[1/\pi]\sqrt{\frac{3}{8}}\cos\varphi\ \sin\theta$
		−1	$[1/\pi]\sqrt{\frac{3}{16}}\exp(-i\psi)(\cos\varphi-i\ \cos\theta\ \sin\varphi)$
E_3	$c(\Phi_{k-1,m}-\Phi_{k=-1,m})$	1	$[1/\pi]\sqrt{\frac{3}{16}}\exp(i\psi)(\cos\theta\ \cos\varphi+i\ \sin\varphi)$
		0	$[1/\pi]\sqrt{\left(\frac{3}{8}\right)}\sin\theta\ \sin\varphi$
		−1	$[1/\pi]\sqrt{\frac{3}{16}}\exp(-i\psi)(-\cos\theta\cos\varphi+i\ \sin\varphi)$

25. 谱项的分裂是由自旋-自旋相互作用决定的。为了确定这个分裂，必须将自旋-自旋相互作用算符 $\alpha(\hat{\mathbf{S}}\cdot\boldsymbol{n})^2$ 对转动态求平均。当给定的K值时，量子数J取下列值：

$$J=K+1,K,K-1.$$

$(\boldsymbol{n}\cdot\hat{\mathbf{S}})$的不为零的矩阵元有如下形式：

$$(\boldsymbol{n}\cdot\hat{\mathbf{S}})_K^{K-1}{}_{J=K}^{J=K}=(\boldsymbol{n}\cdot\hat{\mathbf{S}})_{K-1}^{K}{}_{J=K}^{J=K}=\sqrt{\left(\frac{K+1}{2K+1}\right)},$$

$$(\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{S}})^{K+1}_{K}{}^{J=K}_{J=K}=(\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{S}})^{K}_{K+1}{}^{J=K}_{J=K}=\sqrt{\left(\frac{K}{2K+1}\right)},$$

$$(\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{S}})^{K}_{K+1}{}^{J=K+1}_{J=K+1}=(\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{S}})^{K+1}_{K}{}^{J=K+1}_{J=K+1}=\sqrt{\left(\frac{K+2}{2K+3}\right)},$$

$$(\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{S}})^{K}_{K-1}{}^{J=K-1}_{J=K-1}=(\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{S}})^{K-1}_{K}{}^{J=K-1}_{J=K-1}=\sqrt{\left(\frac{K-1}{2K-1}\right)}.$$

利用上述关系式，我们求得三重态各分量的分裂为：

$$\Delta E_{J=K+1}=\frac{K+2}{2K+3}a,\quad \Delta E_{J=K}=a,\quad \Delta E_{J=K-1}=\frac{K-1}{2K-1}a.$$

26*. 我们首先求算符w的非对角矩阵元

$$(w)^{n\Lambda\Omega vJ}_{n\Lambda\Omega' vJ'}.$$

容易看出，只有与$\Omega'=\Omega\pm1$，$J=J'$对应的矩阵元才不为零。

由于

$$(\hat{M}_\zeta)^{n\Lambda\Omega}_{n\Lambda\Omega\pm1}=\mp i(\hat{M}_\eta)^{n\Lambda\Omega}_{n\Lambda\Omega\pm1},$$

我们有

$$(w)^{n\Lambda\Omega vJ}_{n\Lambda\Omega\pm1vJ}=\frac{\hbar_2}{M}\left[\pm\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin\theta}\quad\frac{\partial}{\partial\varphi}+(\Omega\pm1)\cot\theta\right]^{\Delta\Omega J}_{\Delta\Omega\pm1J}$$

$$\left(\frac{1}{\rho^2}\hat{M}_\eta\right)^{n\Lambda\Omega v}_{n\Lambda\Omega\pm1v}.$$

为了计算矩阵元

$$\left[\pm\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{i}{\sin\theta}\quad\frac{\partial}{\partial\varphi}+(\Omega\pm1)\cot\theta\right]^{\Delta\Omega J}_{\Delta\Omega\pm1J'},$$

我们指出，如果在算符$(\hat{J}_\zeta+i\hat{J}_\eta)$中（见§8.14题），令$\varphi=0$，并令$-i(\partial/\partial\varphi)\to\hat{M}_\zeta$，则

$$(J_\zeta\mp iJ_\eta)^{\varphi\to0}_{-i(\partial/\partial\varphi)\to\hat{M}_\zeta}=\mp i\left[\pm\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{i}{\sin\theta}\quad\frac{\partial}{\partial\varphi}\right.$$

$$\left.+(\Omega\pm1)\cot\theta\right].$$

算出上式，我们得：

$$\left[\mp\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{i}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}+(\Omega\pm1)\cot\theta\right]^{\Lambda\Omega J}_{\Lambda\Omega\pm1J}$$

$$=\pm i\sqrt{[(J\mp\Omega)(J\pm\Omega+1)]}\,.$$

对于在平衡位置附近的小振动的情形，可令矩阵元

$$\left(\frac{1}{\rho^2}\hat{M}_\eta\right)^{n\Lambda\Omega v}_{n\Lambda\Omega\pm1v}$$

近似地等于

$$\frac{1}{\rho_0^2}\,(\hat{M}_\eta)^{n\Lambda\Omega}_{n\Lambda\Omega\pm1}\,,$$

式中ρ_0是在平衡位置上的原子核之间的距离。因为

$$(\hat{L}_\eta+\hat{S}_\eta)^{n\Lambda\Omega}_{n\Lambda\Omega\pm1}=(\hat{S}_\eta)^{n\Lambda\Omega}_{n\Lambda\Omega\pm1}=\pm\frac{i}{2}\sqrt{[S(S+1)-\Sigma(\Sigma\pm1)]}\,,$$

最后，我们有：

$$(w)^{n\Lambda\Omega vJ}_{n\Lambda\Omega\pm1vJ}=B_0\sqrt{[S(S+1)-\Sigma(\Sigma\pm1)]}$$
$$\sqrt{[J(J+1)-(\Lambda+\Sigma)(\Lambda+\Sigma\pm1)]}\,.$$

这里$B_0=\hbar^2/2M\rho_0^2$是对与某一$\rho=\rho_0$对应的平衡态的转动常数。

在一般情形下，双重分裂可能与所算得的矩阵元有同一数量级，因此，为了计算双重谱项的能级移动，我们可以采用形式上稍有不同的微扰论。我们不用下列函数

$$\psi_{n\Lambda\Lambda+\frac{1}{2}vJ}\,,\ \psi_{n\Lambda-\frac{1}{2}vJ}\,,$$

而取它们的线性组合作为零级近似波函数：

$$\psi=c_1\psi_{n\Lambda\Lambda+\frac{1}{2}vJ}+c_2\psi_{n\Lambda\Lambda-\frac{1}{2}vJ}\,.$$

将这个表示式代入有微扰的方程中，并利用标准方法，我们得到久期方程：

$$\begin{vmatrix} E^{(0)}_{n\Lambda\backslash+\frac{1}{2}vJ}-E & w_{n\Lambda\Lambda-\frac{1}{2}vJ}^{n\Lambda\Lambda+\frac{1}{2}vJ} \\ w_{n\Lambda\Lambda+\frac{1}{2}vJ}^{n\Lambda\Lambda-\frac{1}{2}vJ} & E^{(0)}_{n\Lambda\Lambda-\frac{1}{2}vJ}-E \end{vmatrix}=0.$$

解此久期方程，得

$$E=\frac{1}{2}E^{(0)}\pm\frac{1}{2}\sqrt{\left\{\Delta E^{(0)}+4B_0^2\left[\left(J+\frac{1}{2}\right)^2-\Lambda^2\right]\right\}^2} \qquad (1)$$

式中

$$E^{(0)}=E^{(0)}_{n\Lambda\Lambda+\frac{1}{2}vJ}+E^{(0)}_{n\Lambda\Lambda-\frac{1}{2}vJ},$$

$$\Delta E^{(0)}=E^{(0)}_{n\Lambda\Lambda+\frac{1}{2}vJ}-E^{(0)}_{n\Lambda\Lambda-\frac{1}{2}vJ}.$$

在情形a，当多重分裂远大于转动能级的间隔时，由(1)式近似地得到：

$$E_1=E^{(0)}_{n\Lambda\Lambda+\frac{1}{2}vJ}+\frac{B_0^2\left[\left(J+\frac{1}{2}\right)^2-\Lambda^2\right]}{\Delta E^{(0)}}$$

$$E_2=E^{(0)}_{n\Lambda\backslash-\frac{1}{2}vJ}-\frac{B_0^2\left[\left(J+\frac{1}{2}\right)^2-\Lambda^2\right]}{\Delta E^{(0)}}$$

在情形b，由(1)式得

$$E_{1,2}=\frac{1}{2}E^{(0)}\pm B_0\left[\left(J+\frac{1}{2}\right)^2-\Lambda^2\right]\pm\frac{\Delta E^{(0)}}{8B_0\left[\left(J+\frac{1}{2}\right)^2-\Lambda^2\right]}.$$

27. 当总自旋$S=2$或$S=0$时，$K=0,2,4,\cdots$；

当总自旋$S=1$时，$K=1,3,5,\cdots$。

28. 分子的磁矩等于

$$\frac{e\hbar}{2\mu c}(\Lambda+2\Sigma)\boldsymbol{n},$$

其中$\boldsymbol{n}$是沿分子轴方向的单位矢量。

为了确定分裂的能量，必须将

$$-\frac{e\hbar}{2\mu c}(\Lambda+2\Sigma)(\boldsymbol{n}\cdot\mathscr{H})$$

对转动态求平均，即必须计算矩阵元

$$(\boldsymbol{n})^{JM_J}_{JM_J'}.$$

因为$\hat{\boldsymbol{J}}$是一个守恒的矢量，所以矢量$\boldsymbol{n}$的矩阵元显然正比于矢量$\hat{\boldsymbol{J}}$的矩阵元，即

$$(\boldsymbol{n})^{JM_J}_{JM_J'}\sim(\hat{\boldsymbol{J}})^{JM_J}_{JM_J'}.$$

如把$\boldsymbol{n}$当作算符，我们有

$$\hat{\boldsymbol{n}}=\text{常数}\times\hat{\boldsymbol{J}}.$$

为了确定这个常数，将上式两边乘以$\hat{\boldsymbol{J}}$，因为$\hat{\boldsymbol{J}}^2$的本征值为$J(J+1)$，而$\hat{\boldsymbol{J}}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}$等于$\Omega$，所以有

$$\hat{\boldsymbol{n}}=\frac{\Omega}{J(J+1)}\hat{\boldsymbol{J}}.$$

这样一来，微扰能量的算符等于

$$-\frac{e\hbar}{2\mu c}(\Lambda+2\Sigma)\cdot\frac{\Omega}{J(J+1)}(\mathscr{H}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}).$$

计算出对角矩阵元，我们就得到能量分裂的表示式为：

$$\Delta E_{M_J}=-\frac{e\hbar\mathscr{H}}{2\mu c}(\Lambda+2\Sigma)\frac{\Omega}{J(J+1)}M_J.$$

29. 容易验证，在本题的情形下，微扰算符有如下形式：

$$-\frac{e\hbar}{2\mu c}\left(\mathscr{H}\cdot\left[\frac{\Lambda^2}{K(K+1)}\hat{\boldsymbol{K}}+2\hat{\boldsymbol{S}}\right]\right).$$

由此得出塞曼分裂为

$$\Delta E_{M_J}=-M_J\frac{e\hbar}{2\mu c}\mathscr{H}\left[\Lambda^2\frac{J(J+1)-S(S+1)+K(K+1)}{2K(K+1)J(J+1)}\right.$$
$$\left.+\frac{J(J+1)+S(S+1)-K(K+1)}{J(J+1)}\right].$$

30. 塞曼分裂的能量等于

$$\Delta E_{M,M}=-\frac{e\hbar}{2\mu c}\mathscr{H}\left[\frac{\Lambda^2}{K(K+1)}M_K+2M_S\right].$$

31*. 由于磁矩和外磁场的相互作用能与自旋-偶极相互作用能同数量级，所以在微扰论中两者必须同时考虑。微扰算符为

$$\hat{V}=A(\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{S}})-\mu_0\Lambda(\boldsymbol{n}\cdot\mathscr{H})-2\mu_0(\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\mathscr{H}).$$

我们取角动量$\boldsymbol{K}$以及$\boldsymbol{K}$和$\boldsymbol{S}$沿磁场方向的分量均有确定值的态的波函数，作为零级近似波函数。取 z 轴沿磁场方向。由于总角动量沿磁场方向的分量是守恒的，所以在双重项的情况中，我们应该采用存在二重简并时的微扰论，计算出微扰算符的矩阵元，我们就得到

$$V^{M_K,-\frac{1}{2}}_{M_K,-\frac{1}{2}}=-M_K\frac{\Lambda}{2K(K+1)}A-M_K\frac{\Lambda^2}{K(K+1)}\mu_0\mathscr{H}$$
$$+\mu_0\mathscr{H},$$

$$V^{M_K-1,\frac{1}{2}}_{M_K-1,\frac{1}{2}}=(M_K-1)\frac{\Lambda}{2K(K+1)}A$$
$$-(M_K-1)\frac{\Lambda^2}{K(K+1)}\mu_0\mathscr{H}-\mu_0\mathscr{H},$$

$$V^{M_K,-\frac{1}{2}}_{M_K-1,\frac{1}{2}}=\frac{1}{2}A\frac{\Lambda}{K(K+1)}\sqrt{[K-M+1)(K+M)]}$$

$$= \frac{1}{2} A (n_x + i n_y)^{M_K}_{M_K - 1},$$

$$V^{M_K - 1, \frac{1}{2}}_{M_K, -\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} A (n_x - i n_y)^{M_K - 1}_{M_K}$$

$$= \frac{1}{2} A \frac{\Lambda}{K(K+1)} \sqrt{[(K - M + 1)(K + M)]}.$$

将上述关系式代入久期方程，并解之，即得：

$$E^{(0)}_{1,2} = \frac{\Lambda^2}{K(K+1)} \left(M_K - \frac{1}{2}\right) \mu_0 \mathscr{H} - \frac{A\Lambda}{4K(K+1)}$$

$$\pm \frac{1}{2K(K+1)} \sqrt{\left\{\left[A\Lambda\left(M - \frac{1}{2}\right) - \Lambda^2 \mu_0 \mathscr{H} + 2\mu_0 \mathscr{H} \times (K+1)K\right]^2 + A^2 \Lambda^2 (K + M_K)(K - M_K + 1)\right\}}.$$

我们来讨论两种极限情况。

当$\mu_0 \mathscr{H} \gg A$时，$E^{(0)}_{1,2}$的表示式为

$$E^{(0)}_{1,2} = -\frac{\Lambda^2}{K(K+1)} \left(M_K - \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}\right) \mu_0 \mathscr{H} \mp \mu_0 \mathscr{H},$$

它与上题所得到的公式一致。

当$A \gg \mu_0 \mathscr{H}$时，我们得

$$E^{(1)}_1 = \frac{A\Lambda}{2(K+1)} - \left(M_K - \frac{1}{2}\right)\left[\frac{\Lambda^2}{(K+1)\left(K + \frac{1}{2}\right)} + \frac{1}{K + \frac{1}{2}}\right] \mu_0 \mathscr{H},$$

$$E^{(1)}_2 = -\frac{A\Lambda}{2K} - \left(M_K - \frac{1}{2}\right)\left[\frac{\Lambda^2}{K\left(K + \frac{1}{2}\right)} - \frac{1}{K + \frac{1}{2}}\right] \mu_0 \mathscr{H}.$$

这些方程的第二项，即线性地依赖于$\mathscr{E}$的项，与在§8.28题中相应的公式一致，只要在该题中代入下列各值：

$$J=K\pm\frac{1}{2},\quad S=\frac{1}{2},\quad M_J=M_K-\frac{1}{2}.$$

32. 由于轴对称性，分子的偶极矩的方向沿核的联线，即

$$\boldsymbol{p}=p\boldsymbol{n}.$$

和解§8.27题时一样处理，我们求得：

$$\Delta E_{M_J}=-\mathscr{E}p\frac{\Omega}{\sqrt{J(J+1)}}M_J.$$

33. $$\Delta E_{M_J}=-\mathscr{E}pM_J\Lambda\frac{J(J+1)-S(S+1)+K(K+1)}{2K(K+1)\sqrt{J(J+1)}}.$$

34. 对于R^{-1}的最低次幂，这体系的势能$V(x_1,x_2)$是

$$V(x_1,x_2)=\frac{1}{2}kx_1^2+\frac{1}{2}kx_2^2+\frac{e^2x_1x_2}{R^3}.$$

式中x_1和x_2是两电子离开各自中心的位移。

这样两个电子的薛定谔方程可化作为两个线性谐振子的方程，这两个谐振子的动能和势能的形式都是二次的。而能量的本征值为

$$\frac{\hbar}{2\sqrt{\mu}}\left[(2n_1+1)\sqrt{k+\frac{e^2}{R^3}}+(2n_2+1)\sqrt{\left(k-\frac{e^2}{R^3}\right)}\right],$$

$$n_{1,2}=0,1,\cdots$$

在基态，我们有$n_1=n_2=0$，展开根式，取R^{-1}的最低次幂，我们得到吸引力的弥散能

$$\frac{e^4}{8k^2R^6}\hbar\sqrt{\frac{k}{\mu}}.$$

35*. 相互作用能包括两部分，第一部分来自氢原子的极化率α的贡献（见§7.47题）。离子H^+在氢原子处的场为$\mathscr{E}=e/R^2$，所以这部分相互作用能为

$$E_{\text{极化}}=-\frac{1}{2}\alpha\mathscr{E}^2=-\frac{9}{4}\frac{\hbar^2}{\mu a_B^2}\left(\frac{a_B}{R}\right)^4. \tag{1}$$

第二部分来自本题的对称性（参考§2.6题和§2.12题）。设$\psi_0(x,y,z)$是电子的波函数。这电子在质子1附近（见图43a）运动，质子1位于$x=-R/2$，$y=z=0$处。这里，我们选x轴沿两质子的联线，原点为两核子的中点。在这种情况下，ψ_0为

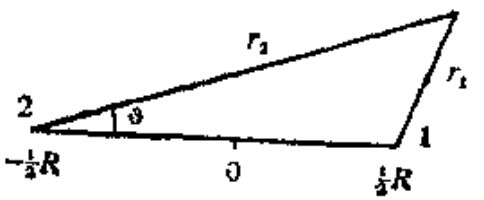


图 43a

$$\psi_0=\frac{A(x,y,z)}{\sqrt{\pi a_B^{3/2}}}\exp\left(-\frac{r_1}{a_B}\right). \tag{2}$$

其中$A(x,y,z)$是一缓慢变化的函数，它满足边界条件

$$A(x,y,z)\to 1，\ 当\ x,y,z\to\frac{1}{2}R,0,0时。 \tag{3}$$

函数ψ_0必满足方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi_0+(U-E_0)\psi_0=0 \tag{4}$$

式中

$$U=-\frac{e^2}{r_1}-\frac{e^2}{r_2}+\frac{e^2}{R}, \tag{5}$$

而E_0是氢原子的结合能。如果用ψ_{00}表示$A(x,y,z)=1$时的ψ_0，则ψ_{00}满足方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi_{00}+\left(-\frac{e^2}{r_1}-E_0\right)\psi_{00}=0, \tag{6}$$

这样，便得到$A(x,y,z)$的方程

$$\frac{\partial A}{\partial x}-\frac{A}{R}+\frac{A}{\frac{1}{2}R+x}=0, \tag{7}$$

这里我们忽略了所有的二阶导数和A对y和z的偏导数，并设$r_2=\frac{1}{2}R+x$。(7)式的满足边界条件(3)式的解是

$$A=\frac{R}{\frac{1}{2}R+x}\exp\left[-\frac{x-\frac{1}{2}R}{R}\right]. \tag{8}$$

当然，以质子2为中心时(4)式也有解。它就是 $\psi_0(-x,y,z)$。[按照本题的假设，可以假定它不与 $\psi_0(x,y,z)$ 重叠]，且相应的能量也是E_0。体系的真实状态将是由$\psi_0(x,y,z)$和$\psi_0(-x,y,z)$组合成的对称态和反对称态：

$$\psi_{s,a}=\frac{1}{\sqrt{2}}\{\psi_0(x,y,z)\mp\psi_0(-x,y,z)\}, \tag{9}$$

而且这些组合态也满足能量为$E_{s,a}$的方程(4)。如果用$\psi_{s,a}$乘关于$\psi_s(x,y,z)$的方程(4)，再用$\psi_0(x,y,z,)$乘关于$\psi_{s,a}$的方程(4)，最后对这两个结果的差在遍及$x\geqslant 0$的半空间积分；并利用$x=0$时，我们有$\psi_s=\sqrt{2}\,\psi_0$，$\psi_a=0$，$\partial\psi_s/\partial x=0$，$\partial\psi_a/\partial x=\sqrt{2}\,\partial\psi_0/\partial x$的条件，我们求得

$$E_{s,a}-E_0=\mp\frac{\hbar^2}{\mu}\iint\psi_0\frac{\partial\psi_0}{\partial x}\,\mathrm{d}y\mathrm{d}z, \tag{10}$$

这积分是对$x=0$平面的。

利用关于ψ_0的表示式(2)和(8)，我们求得

$$E_{s,a}-E_0=\frac{\hbar^2}{\mu a_B^2}\left[\mp\frac{2}{e}\frac{R}{a_B}\exp\left(-\frac{R}{a_B}\right)-\frac{9}{4}\left(\frac{a_B}{R}\right)^4\right]. \tag{11}$$

我们看到，只要$R/a_B\gg 1$，这结果便有效。对称态有最低能量。当$R\approx 2a_B$时，精确的E_s有极小值，它等于$-16.3\mathrm{eV}$（参看下题）；而当$R\approx 13a_B$时，由(11)式得E_a的极小值等于$-0.002\mathrm{eV}$。

36*. 我们从上题方程(4)出发，采用试探波函数

$$\psi=a\psi_1+b\psi_2, \tag{1}$$

其中

$$\psi_1=\frac{\alpha^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}}\exp(-\alpha r_1),\quad \psi_2=\frac{\alpha^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}}\exp(-\alpha r_2). \tag{2}$$

这样，本题中有α和R两个参数，与上题的讨论不同，现在必须

考虑对两波函数重叠区的积分

$$S=\int\psi_1\psi_2 d^3r. \tag{3}$$

根据对称性的考虑，可以看出，最低能量相当于 $a=b=\{2(1+S)\}^{-\frac{1}{2}}$ 的情形。这里利用了波函数必须是归一化的要求。体系的能量由下式求得

$$E=\frac{1}{1+S}\left\{\int\psi_1\hat{H}\psi_1 d^3r+\int\psi_2\hat{H}\psi_1 d^3r\right\}, \tag{4}$$

式中

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+\frac{e^2}{R}-\frac{e^2}{r_1}-\frac{e^2}{r_2}. \tag{5}$$

因此得

$$E=\frac{1}{1+S}\frac{\hbar^2}{\mu a_B^2}\left[-\frac{1}{2}a^2+\frac{a(a-1)-C+(a-2)I}{1+S}+\frac{1}{R}\right]. \tag{6}$$

其中C是无量纲的库仑相互作用积分值

$$C=a_B\frac{a^3}{\pi}\int\frac{\exp(-2ar_1)}{r_2}d^3r, \tag{7}$$

而I是无量纲的交换积分

$$I=a_B\frac{a^3}{\pi}\int\frac{\exp(-ar_1-ar_2)}{r_2}d^3r. \tag{8}$$

(7)式的积分，可采用将r_2^{-1}按r_1/R(当$r_1<R$)或R/r_1(当$r_1>R$)展开的方法来计算(见图43a)

$$\frac{1}{r_2}=\begin{cases}\dfrac{1}{R}\displaystyle\sum_{l=0}^{\infty}\left(\frac{r_1}{R}\right)^l P_l(\cos\theta), & \text{当}r_1<R;\\ \dfrac{1}{n}\displaystyle\sum_{l=0}^{\infty}\left(\frac{R}{r_1}\right)^l P_l(\cos\theta), & \text{当}r_1>R\end{cases} \tag{9}$$

式中P_l是勒让德多项式。将(9)式代入(7)式，得

$$C=\frac{a_B}{R}[1-(1+\alpha R)e^{-2\alpha R}]. \tag{10}$$

为了计算I，我们引进长椭球坐标：

$$\xi=\frac{r_1+r_2}{R},\quad \eta=\frac{r_1-r_2}{R}, \tag{11}$$

和绕分子轴的夹角φ。于是这个积分变成

$$I=a_B\frac{\alpha^3}{\pi}\int_1^{\infty}d\xi\int_{-1}^{+1}d\eta\int_0^{2\pi}d\varphi\left(\frac{R}{2}\right)^2(\xi^2-\eta^2)\ \frac{e^{-\alpha R\xi}}{\xi-\eta}$$

$$=\alpha a_B(1+\alpha R)e^{-\alpha R} \tag{12}$$

类似地可算出重叠积分，我们得到

$$S=\left[1+\alpha R+\frac{1}{3}(\alpha R)^2\right]e^{-\alpha R}. \tag{13}$$

将（10）式，（12）和（13）式代入（6）式，以α和$\beta=\alpha R$作为变分参量，我们可写出能量

$$E=F(\beta)\alpha^2+G(\beta)\alpha, \tag{14}$$

对α求上式的极小值，得出

$$E=-\frac{\{G(\beta)\}^2}{4F(\beta)}. \tag{15}$$

对β求极小值时，最好是用图解法。结果是极小值出现在：$\alpha a_B\sim 1.25$，$\beta\sim 2.5$；或$R\sim 2a_B$，且$E\sim 0.6(\hbar^2/\mu a_B^2)$。

为了求出离解能D，我们必须从这个E值中减去氢原子的结合能，$-\hbar^2/2\mu a_B^2$。于是得

$$D\sim 0.1\hbar^2/\mu a_B^2.$$

严格地讲，还应考虑分子的零点振动能的修正。但对刚才所作的粗略估算来说，这样做没有多大意义。如果作较高精度的计算，可考察$E(R)$曲线极小值点的邻域，而估算出零点能的大小。结果是，$\alpha a_B=1.24$，$R=2.08a_B$，$E=-0.587(\hbar/\mu a_B^3)$，和零点能$\frac{1}{2}\hbar\omega=0.0046(\hbar^2/\mu a_B^3)$。事实上，$D$的实验值非常接近于

$0.1\hbar^2/\mu a_B^2$。如果我们更细心的话，这种粗略估算会得出稍好一些的结果。

37*. 当R很大时，可以忽略交换效应，即假设第一个电子在核a附近，第二个电子在核b附近（见图44）。

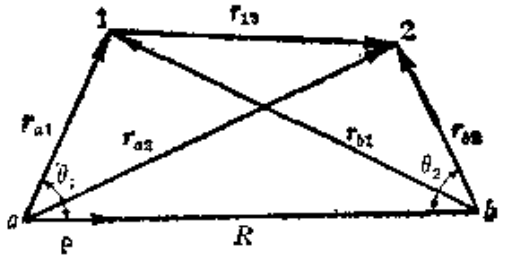


图 44

两原子的相互作用具有如下形式：

$$V=\frac{1}{R}-\frac{1}{r_{a2}}-\frac{1}{r_{b1}}+\frac{1}{r_{12}}, \tag{1}$$

我们将它当作小的微扰。

在一级近似下，两原子的相互作用能等于V的对角矩阵元，即

$$\int\psi_0(r_{1a})\psi_0(r_{2b})V\psi_0(r_{1a})\psi_0(r_{2b})\mathrm{d}\tau_1\mathrm{d}\tau_2,$$

式中：

$$\psi_0(r_{1a})=2\exp(-r_{1a});\ \psi_0(r_{2b})=2\exp(-r_{2b}).$$

在S态中，对角矩阵元，即偶极矩，四极矩…的平均值都等于零，所以为了计算相互作用能，必须考虑微扰论的二级近似。

在微扰算符（1）中，我们只限于讨论偶极-偶极相互作用，因为它随距离减小得最慢。为了得到偶极-偶极相互作用算符，我们将势V按R的负幂次展开。按球谐函数展开，可得到

$$\frac{1}{r_{b1}}=\frac{1}{|R\rho-r_{1a}|}=\sum_{\lambda=0}\frac{r_{a1}^{\lambda}}{R^{\lambda+1}}P_\lambda(\cos\theta)=\frac{1}{R}+\frac{(r_{a1}\cdot\rho)}{R^2}+$$

$$+\frac{3(r_{a1}\cdot\rho)^2-r_{a1}^2}{2R^3}+\cdots,$$

$$\frac{1}{r_{12}}=\frac{1}{|R\rho+r_{b_2}-r_{a_1}|}=\frac{1}{R}+\frac{r_{a_1}-r_{b_2}\cdot\rho)}{R^2}$$

$$+\frac{3(r_{a_1}-r_{b_2}\cdot\rho)^2-(r_{a_1}-r_{b_2})^2}{2R^3}+\cdots,$$

$$\frac{1}{r_{a_2}}=\frac{1}{R}+\frac{(r_{b_2}\cdot\rho)}{R^2}+\frac{3(r_{b_2}\cdot\rho)^2-r_{b_2}^2}{2R^3}+\cdots.$$

将这些展开式代入V中，求得偶极-偶极相互作用

$$V=-\frac{2z_1z_2-x_1x_2-y_1y_2}{R^3},\qquad(2)$$

其中z轴方向沿核的联线。我们已指出过，（2）式对未受微扰的本征函数$\psi=\psi_0(r_{a_1})\psi_0(r_{b_2})$的平均值等于零。（2）式的非对角矩阵元对应于由基态到激发态的跃迁，它可写成：

$$V_{00}^{mn}=-\frac{2z_{0m}z_{0n}-x_{0m}x_{0n}-y_{0m}y_{0n}}{R^3}.$$

根据选择定则可以看出，矩阵元z_{0n}，x_{0n}，y_{0n}只对从基态到态

$$\psi_n(r)\cos\theta,\ \psi_n(r)\sin\theta\cos\varphi,$$

的跃迁才不为零，而且这三个矩阵元彼此相等。在二级近似下，相互作用能等于

$$E^{(2)}=\sum_{m\neq n}\frac{(V_{00}^{mn})^2}{2E_0-E_m-E_n}$$

$$=\frac{1}{R^6}\sum_{m\neq n}\frac{4z_{0m}^2z_{0n}^2+x_{0m}^2x_{0n}^2+y_{0m}^2y_{0n}^2}{2E_0-E_m-E_n}$$

或

$$E^{(2)}=\frac{6}{R^6}\sum_{m\neq n}\frac{z_{0m}^2z_{0n}^2}{2E_0-E_m-E_n}.\qquad(3)$$

由于$E_0<E_m$，$E_0<E_n$，所以$E^{(2)}$是负的；由此可见，彼此相距很远，且处于非激发态的两个原子将相互吸引，吸引能与距离的6次方成反比。为了近似地计算（3）式中的和，我们注意到，不同的激发能级之间的能量差，比这些激发能级与基态能级

之间的能量差小得多。因此，可把（3）式近似地写成

$$E^{(2)}=\frac{3}{R^6}\sum_m z_{0m}^2\sum_n\frac{z_{0n}^2}{E_0-E_n}.$$

由二次斯塔克效应理论可知，

$$\sum_n\frac{z_{0n}^2}{E_0-E_n}=-\frac{1}{2}\alpha,$$

其中α是原子的极化率。对于氢原子基态，$\alpha=4.5$原子单位。为了计算$\sum_{n=0}z_{0m}^2$，我们利用矩阵乘法规则

$$(AB)_{nk}=\sum_m A_{nm}B_{mk},$$

或

$$\int\psi_n^*(AB)\psi_k d\tau=\sum_m\left(\int\psi_n^*A\psi_m d\tau\cdot\int\psi_m^*B\psi_k d\tau\right).$$

在上式中，令$A=B=z$，$n=k=0$，我们得：

$$(z^2)_{00}=\sum_m z_{0m}z_{m0}=\sum_m z_{0m}^2$$

或

$$\sum_{m\neq0}z_{0m}^2=\sum_m z_{0m}^2-z_{00}^2=(z^2)_{00}-z_{00}^2$$

由于对称性，在S态中，$z_{00}=0$。而$(z^2)_{00}=\frac{1}{3}(r^2)_{00}$，故得

$$\sum_{m\neq0}z_{0m}^2=\frac{1}{3}(r^2)_{00}=1.$$

这样，最后得$V(R)$的表示式

$$V(R)=-\frac{6.75}{R^6}.$$

为了探讨两个中性的球对称氢原子间的作用力究竟是怎样产生的，我们来考察系统的波函数。在一级近似下，系统的波函数

为

$$\psi=\psi_0(r_{a1})\psi_0(r_{b2})\left[1+\frac{1}{2E_0R^3}(x_1x_2+y_1y_2-2z_1z_2)\right].$$

如果忽略包含R^{-6}的项，则几率密度$w(1,2)$为

$$w(r_{a1},r_{b2})=w_0(r_{a1})w(r_{b2})\left[1+\frac{1}{E_0R^3}(x_1x_2+y_1y_2-2z_1z_2)\right].$$

如果原子间没有相互作用，则几率密度简单地等于$w(1)$和$w(2)$的乘积，亦即在这种情况下，电子的位置之间没有任何关联。在有相互作用的情形下，第一个电子的位置和第二个电子的位置不是独立无关的。从统计的观点看，电子有较多的时间处在相互势能具有最小可能值的位置上。

因而在一级近似下，相互作用力不能由电子云的形变来说明，而是由电子位置之间的关联来说明。

38. 在方法上和上题非常相似。不过现在我们要利用一级微扰论来求结果。微扰能仍是

$$V=\frac{e^2}{R^3}(x_1x_2+y_1y_2-2z_1z_2),$$

我们必须利用简并能级的微扰论。p态是三重简并的，由于我们讨论的是两个电子，因此共有六重简并。若r_0取下式的值

$$r_0=\int_0^\infty F_0(r)F_1(r)r^3\mathrm{d}r,$$

式中$F_0(r)$和$F_1(r)$是s态与p态波函数的径向部分：

$$F_0(r)\propto\exp(-r/a_B),\quad F_1(r)\propto\exp(-r/2a_B),$$

如果v由下式给出：

$$v=\frac{e^2r_0}{R^3},$$

则关于能量修正E_1的久期方程为

$$\begin{vmatrix} -E_1 & v & 0 & 0 & 0 & 0 \\ v & -E_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -E_1 & -2v & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2v & -E_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -E_1 & v \\ 0 & 0 & 0 & 0 & v & -E_1 \end{vmatrix} = 0,$$

其中头两行（列）对应于两氢原子中有一个处于$m=1$的p态，其次两行对应于$m=0$的态；最后两行对应于$m=-1$的态。由此，我们看到，相互作用能与R^{-3}成正比。

39*. 我们来证明，由三个原子组成的系统的可加性。根据计算将清楚地看出，它适用于任意数目的原子。把相互作用能写成下式

$$V=V(1,2)+V(2,3)+V(3,1),$$

这里用1，2，3表示第一个、第二个和第三个原子的所有坐标。讨论相距很远的原子的相互作用；在这种情形下交换力不起什么作用。若忽略交换力，则在零级近似下可令三个原子的波函数为

$$\psi=\psi_{ai}(1)\psi_{bk}(2)\psi_{cl}(3),$$

式中i，k，l表示原子a，b，c的量子态，属于不同i值的函数$\psi_{ai}(1)$是正交的。函数$\psi_{bk}(2)$和$\psi_{cl}(3)$也是这样。

在二级近似下，微扰能的形式是

$$\epsilon=V^{000}_{000}+\sum{}' \frac{|V^{000}_{ikj}|^2}{E_{a0}+E_{b0}+E_{c0}-E_{ai}-E_{bk}-E_{cl}}, \tag{1}$$

求和号上加一撇表示i、k、l不能同时为零。第一项是经典的多极相互作用。在我们的情形下，它等于零。在（1）式中，i、k、l均不为零的各项，由于函数的正交性都为零。

只有$i=k=0$，$l\neq 0$；$i=l=0$，$k\neq 0$；$k=l=0$，$i\neq 0$的三个部分和，分别表示在其余两个原子的场中，第l个，第k个和第i个原子的极化相互作用。在原子中的电荷分布具有球对称性的情况

下，这些和也等于零。必须注意，这些项不能用考虑每一对原子的相互作用，然后再相加的办法得到。最后，还要讨论有两个下标不为零的那些项。此时，如果对于原子中的电荷分布再作简单的假设，则相互作用能可写成三个部分和的形式

$$\epsilon=\sum_{i\neq 0,\,k\neq 0}{}'\frac{|V_{i\,k\,0}^{0\,0\,0}|^2}{E_{a0}+E_{bk}-E_{ai}-E_{bk}}+\sum_{k\neq 0,\,i\neq 0}{}'\frac{|V_{i\,k\,i}^{0\,0\,0}|^2}{E_{b0}+E_{c0}-E_{bk}-E_{ci}}+\sum_{i\neq 0\;\;i\neq 0}{}'\frac{|V_{i\,0\,i}^{0\,0\,0}|^2}{E_{a0}+E_{c0}-E_{ai}-E_{ci}}\,. \tag{2}$$

由于原子本征函数的正交归一性，我们得矩阵元

$$\begin{aligned}V_{i\,k\,0}^{0\,0\,0}&=\int\psi_{a0}^*(1)\psi_{b0}^*(2)\psi_{c0}^*(3)\{V(1,2)+V(2,3)\\&\quad+V(3,1)\}\times\psi_{ai}(1)\psi_{bk}(2)\psi_{ci}(3)\mathrm{d}\tau_1\mathrm{d}\tau_2\\&=\int\psi_{b0}^*(1)\psi_{c0}^*(2)V(1,2)\psi_{ai}(1)\psi_{bk}(2)\mathrm{d}\tau_1\mathrm{d}\tau_2\\&=[V(1,2)]_{i\,k}^{0\,0}.\end{aligned}$$

因而，（2）式中包含三项，每一项表示一对原子的弥散相互作用。容易看出，这些讨论可以推广到任意原子数目的情形。

当原子间的距离不太大时，应考虑到电子从一个原子到另一个原子的跃迁，亦即考虑交换力。

40. 我们讨论的是一个柱对称体系，它的哈密顿量可写成

$$\hat{H}=\hat{\Omega}(\rho,z)-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial\chi^2}, \tag{1}$$

其中ρ，z和χ是柱坐标，而

$$\hat{\Omega}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2}+\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\right)+V(\rho,z), \tag{2}$$

式中V是势能。

用两个量子数λ和n表征的分子的本征函数为

$$\phi_{\lambda,n}=\frac{1}{\sqrt{(2\pi)}}\psi_{\lambda,n}(\rho,z)\exp(i\lambda\chi), \qquad (3)$$

式中，$\psi_{\lambda,n}$满足关系式

$$\sum_n \psi^*_{\lambda,n}(\rho,z)\psi_{\lambda,n}(\rho',z')=\frac{1}{\sqrt{(\rho\rho')}}\delta(\rho-\rho')\delta(z-z'). \qquad (4)$$

我们将对$\lambda'=\lambda$的情况证明(*A*)。其他两种情况可用相似的方法证明。我们有

$$S_0=\sum_{n'} f_{\lambda n;\lambda n'}=-\frac{2\mu}{3\hbar^2}\sum_{n'}(E_{n'}-E_n)\cdot\left|\int\phi^*_{\lambda,n}z\phi_{\lambda,n'}d\tau\right|^2,$$

这里我们利用了如下关系：当$\lambda'=\lambda$时，$P_{\alpha\beta}=(ez)_{\alpha\beta}$；以及

$$d\tau=\rho d\rho dz d\chi=d\omega d\chi.$$

由于E_n是能量本征值，利用（3）作为本征函数，并利用（1）式和（4）式，进行分部积分，我们得到（函数上加一撇，表示其自变量是带一撇的）

$$\begin{aligned}S_0&=-\frac{2\mu}{3\hbar^2}\sum_{n'}\iiint d\tau d\tau'\phi^*_{\lambda,n}\phi'_{\lambda,n}zz'\phi'^*_{\lambda,n}(\hat{H}-E_n)\phi_{\lambda,n'}\\&=-\frac{2\mu}{3\hbar^2}\iint d\omega\, d\omega'\psi^*_{\lambda,n}\psi_{\lambda,n}zz'\Big[\sum_{n'}\psi'^*_{\lambda,n'}\\&\quad\left(\hat{\Omega}+\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\lambda^2}{\rho^2}-E_n\right)\psi_{\lambda,n'}\Big]\\&=-\frac{2\mu}{3\hbar^2}\iint d\omega\, d\omega'\psi^*_{\lambda,n}\psi'_{\lambda,n}zz'\left(\hat{\Omega}+\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\lambda^2}{\rho^2}-E_n\right)\\&\quad\cdot\frac{1}{\sqrt{(\rho\rho')}}\delta(\rho-\rho')\delta(z-z')\\&=-\frac{2\mu}{3\hbar^2}\int\rho\, d\rho\, dz\, z\psi_{\lambda,n}\left(\hat{\Omega}+\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\lambda^2}{\rho^2}-E_n\right)z\psi^*_{\lambda,n}.\end{aligned}$$

由于

$$\left(\hat{\Omega}+\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\lambda^2}{\rho^2}-E_n\right)\psi_{\lambda,n}=0,$$

我们得

$$S_0=-\frac{1}{3}\int\frac{\partial\psi^*_{\lambda,n}}{\partial z}z\psi_{\lambda,n}\rho\mathrm{d}\rho\mathrm{d}z,$$

分部积分后，得到

$$S_0=\frac{1}{3}.$$

§9. 散　　射

1*. 粒子的势能是

$$V(r)=-V_0 \qquad (r<a),$$
$$V(r)=0 \qquad (r>a).$$

我们需要求出散射相移，亦即求出满足下列方程的径向波函数的渐近形式：

$$\text{当}r>a\text{时}, \quad \chi_l''+\left[k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi_l=0,$$

$$k^2=\frac{2\mu E}{\hbar^2},$$

$$\text{当}r<a\text{时}, \quad \chi_l''+\left[k'^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi_l=0,$$

$$k'^2=\frac{2\mu(E+V_0)}{\hbar^2}.$$

边界条件为$\chi_l(0)=0$.

当德布罗意波长比势阱的线度大得多时，对散射的主要贡献来自S波。满足边界条件的解χ_0的形式是

$$\chi_0=A\sin k'r \qquad (r<a),$$
$$\chi_0=\sin(kr+\delta_0) \qquad (r>a).$$

相移δ_0和系数A由波函数及其导数在$r=a$处的连续性条件确定。由此得到

$$\delta_0=\arctan\left(\frac{k}{k'}\tan k'a\right)-ka.$$

因此，对于$l=0$的分波截面是

$$\sigma_0=\frac{4\pi}{k^2}\sin\delta_0=\frac{4\pi}{k^2}\sin^2\left[\arctan\left(\frac{k}{k'}\tan k'a\right)-ka\right]. \tag{1}$$

对于低速入射粒子($k\to 0$)，散射相移δ_0正比于k

$$\delta_0 \approx ka\left(\frac{\tan k_0 a}{k_0 a}-1\right),\quad k_0^2=\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}. \qquad (2)$$

由于因于$1/k^2$，截面σ_0成为

$$\sigma \approx 4\pi a^2\left(\frac{\tan k_0 a}{k_0 a}-1\right)^2 \qquad (k\text{很小}). \qquad (3)$$

我们把σ_0当作势阱深度的函数，k_0由此深度确定。如果势阱很浅($k_0 a\ll 1$)，我们有

$$\sigma_0=4\pi a^2\frac{k_0^4 a^4}{9}=\frac{16\pi}{9}\frac{a^6V_0^2\mu^2}{\hbar^4}.$$

注意，按照微扰论可得

$$f(\theta)=-\frac{1}{4\pi}\frac{2\mu}{\hbar^2}\int V(r)\,d\tau=\frac{2\mu}{\hbar^2}V_0\frac{a^3}{3}$$

因而

$$\sigma=4\pi|f(\theta)|^2=\frac{16\pi}{9}\frac{a^6V_0^2\mu^2}{\hbar^4}.$$

散射截面随着V_0的增加而增加，当$k_0 a=\pi/2$时，它将变成无限大。$k_0 a=\pi/2$这个条件就是势阱中出现第一个能级的条件。若继续加深势阱，截面又开始减少，当$\tan k_0 a=k_0 a$时，它趋于零。进一步增加V_0时，截面继续在0与∞之间振荡，每当势阱中出现一个新的能级时，截面又趋于∞。低速粒子散射截面的急剧振荡，说明了为什么低速电子被原子散射的截面与几何截面有显著的不同。

注意，如果$k_0 a$接近$\frac{1}{2}\pi$的整数倍，则必须改变公式（2）和（3）。的确，在这种情形下，$\tan k'a$是一个大数，因此不能由公式（1）展开而导出公式（2）。在这种情况下，仍可忽略公式（1）方括号中$ka\ll 1$的项。于是，我们有

$$\delta_0=\arctan\left(\frac{k}{k'}\tan k'a\right)$$

并得到截面σ_0

$$\sigma_0 = \frac{4\pi[1+O(\kappa a)]}{\kappa^2+k^2},$$

式中

$$\kappa = \frac{k'}{\tan k'a} \ll \frac{1}{a}.$$

如果势阱深度（或宽度）的小的变化，就会使分立能级出现或消失，则这个共振散射公式就给出k很小时截面对k的依赖关系。

2*. $\sigma = 4\pi a^2\left(\frac{\tanh ka}{ka}-1\right)^2$，式中$\kappa = \frac{\sqrt{(2\mu V_0)}}{\hbar}$。

当$V_0 \to \infty$时，$\sigma = 4\pi a^2$，这就是说，它等于经典力学中不可穿透的球的弹性散射截面的4倍。

3*. $$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin\delta_l$$

$$+\frac{6\cos\theta}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(l+1)\sin\delta_l\sin\delta_{l+1}\cos(\delta_{l+1}-\delta_l)$$

$$+\frac{5}{k^2}\frac{3\cos^2\theta-1}{2}\sum_{l=0}^{\infty}\left[\frac{l(l+1)(2l+1)}{(2l-1)(2l+3)}\sin^2\delta_l\right.$$

$$\left.+\frac{3(l+1)(l+2)}{2l+3}\sin\delta_l\sin\delta_{l+2}\cos(\delta_{l+2}-\delta_l)\right]+\cdots$$

或者

$$\int_0^{\pi} d\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l,$$

$$\int_0^{\pi}\cos\theta d\sigma = \frac{8\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(l+1)\sin\delta_l\sin\delta_{l+1}\cos(\delta_{l+1}-\delta_l),$$

$$\int_0^{\pi}\frac{3\cos^2\theta-1}{2}\,d\sigma=\frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{l(l+1)(2l+1)}{(2l-1)(2l+3)}\sin^2\delta_l$$

$$+\frac{12\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{(l+1)(l+2)}{2l+3}\sin\delta_l\sin\delta_{l+2}\cos(\delta_{l+2}-\delta_l).$$

4*. 径向函数满足方程

$$\chi_l''+\left[k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}-\frac{2\mu A}{\hbar^2r^2}\right]\chi=0$$

以及边界条件$\chi_l(0)=0$和当$r\to\infty$时，χ有限。满足这些条件的解是

$$\chi_l=\sqrt{r}\,J_\lambda(kr),$$

式中

$$\lambda=\sqrt{\left[\left(l+\frac{1}{2}\right)^2+\frac{2\mu A}{\hbar^2}\right]}.$$

根据$J_\lambda(kr)$的渐近式求得相移

$$\delta_l=-\frac{\pi}{2}\left(\lambda-l-\frac{1}{2}\right)=-\frac{\pi}{2}\left\{\sqrt{\left[\left(l+\frac{1}{2}\right)^2+\frac{2\mu A}{\hbar^2}\right]}-\left(l+\frac{1}{2}\right)\right\}.$$

δ_l与k无关意味着散射振幅可表成

$$f(\theta,k)=\frac{1}{k}f_0(\theta)$$

式中$f_0(\theta)$与散射粒子的能量无关。散射截面

$$d\sigma=\frac{1}{k^2}|f_0(\theta)|^2d\Omega$$

与能量成反比，并由一个普遍的角分布所表征。

由于确定散射振幅的和

$$f(\theta)=\frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)[\exp(2i\delta_l)-1],$$

在$\theta\to 0$时是发散的，很明显，当θ很小时，只有大的l 对计算$f(\theta)$才是重要的。而对于大的l我们有

$$-\delta_l \approx -\frac{\pi\mu A}{(2l+1)\hbar^2} \ll 1, \qquad (1)$$

所以

$$f(\theta) \approx \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)\delta_l$$

$$\approx -\frac{\pi\mu A}{\hbar^2 k}\sum_{l=0}^{\infty}P_l(\cos\theta) = -\frac{\pi\mu A}{k\hbar^2}\frac{1}{2\sin\frac{1}{2}\theta}.$$

若

$$\frac{8\mu A}{\hbar^2} \ll 1,$$

则δ_l的表示式（1）对所有的l都成立，因此，对于所有的θ值

$$f(\theta) \approx -\frac{\pi\mu A}{k\hbar^2}\frac{1}{2\sin\frac{1}{2}\theta},$$

$$\mathrm{d}\sigma = \frac{\pi^3\mu A^2}{2\hbar^2 E}\cot\frac{1}{2}\theta\mathrm{d}\theta.$$

5. 本题的薛定谔方程是

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi + V\psi = E\psi,$$

像通常一样，引进$k^2 = 2\mu E/\hbar^2$，这方程变为

$$\Delta^2\psi + k^2\psi = \frac{2\mu}{\hbar^2}V\psi. \qquad (1)$$

我们把右边当作非齐次项。因此，我们应该求非齐次方程的解，它满足下面的边界条件

$$\psi \underset{r\to\infty}{\approx} \exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{r})] + f\frac{\exp(\mathrm{i}kr)}{r}.$$

利用方程（1）的格林函数的表示式

$$G(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')=-\frac{1}{4\pi}\frac{\exp(ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|},$$

容易求出所要求的解

$$\psi=\exp[i(\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{r})]-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int V(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}')\cdot\frac{\exp(ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\,d^3\boldsymbol{r}'.$$

当r值大时，我们有

$$\frac{\exp(ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\approx\frac{\exp(ikr)}{r}\exp[-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}')]\qquad(r\to\infty),$$

式中

$$\boldsymbol{k}=k\frac{\boldsymbol{r}}{r}.$$

因此

$$\psi\approx\exp[i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})]-\frac{\mu}{2\pi\hbar}\frac{\exp(ikr)}{r}\int d^3\boldsymbol{r}'\exp[-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}')]V(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}'),$$

所以

$$f(\boldsymbol{k})=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int d^3\boldsymbol{r}\exp[-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})]V(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}).$$

这个公式对于各种近似计算是方便的。

例如，将$\psi(\boldsymbol{r})\approx\exp[i(\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{r})]$代入，我们就得到一级玻恩近似下的散射振幅。

6. 采用玻恩近似时，散射振幅由下面的公式给出，

$$f_{玻}(\theta)=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int\exp[i(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r})]V(r)\,d\tau=-\frac{2\mu A}{\hbar^2 q},$$

式中

$$\boldsymbol{q}=\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k},\quad q=2k\sin\frac{1}{2}\theta.$$

因此

$$d\sigma_{\text{散}}=|f(\theta)|^2d\Omega=\frac{\pi^3\mu A^2}{2\hbar^2E}\cot\frac{\theta}{2}d\theta$$

在经典力学中，散射角与碰撞参数ρ之间的联系如下

$$\int_{r_0}^{\infty}\frac{\mu v\rho dr}{r^2\sqrt{[2\mu(E-V)-(\mu v\rho/r)^2]}}=\frac{\pi-\theta}{2},$$

式中r_0是根号下的式子的根。积分得

$$\rho^2=\frac{A}{E}\frac{1}{\theta}\frac{(\pi-\theta)^2}{2\pi-\theta},$$

因而

$$d\sigma=-2\pi\rho\frac{d\rho}{d\theta}d\theta=\frac{2\pi^2A}{E}\frac{\pi-\theta}{\theta^2(2\pi-\theta)^2}d\theta.$$

若

$$\frac{8\mu A}{\hbar^2}\ll1$$

则对所有的角度都可以用玻恩近似（与§9.4题比较）

在相反的极限情形下，即$8\mu A/\hbar^2\gg1$时，对于不太小的角度

$$\theta\gtrsim\frac{\hbar^2}{8\mu A}$$

经典结果成立，而对于较小的角度

$$\theta\lesssim\frac{\hbar^2}{8\mu A}$$

玻恩近似的计算结果是正确的。

7*. 对于径向函数有下面的方程

$$\chi''+\frac{2\mu}{\hbar}[E+V_0\exp(-r/a)]\chi=0.$$

引进符号$k^2=2\mu E/\hbar^2$，$\kappa^2=2\mu V_0/\hbar^2$和独立变数$\xi=\exp(-r/2a)$，这样，我们需要解方程

$$\chi''+\frac{1}{\xi}\chi'+4a^2\left(\frac{k^2}{\xi^2}+\kappa^2\right)\chi=0;$$

它的解是虚数阶贝塞耳函数$\chi=J_{\pm2ak\mathrm{i}}(2a\kappa\xi)$。在$r=0$，亦即在

$\xi=1$处，函数χ应该为零，撇开归一化常数，我们得到

$$\chi=J_{-2ak\mathrm{i}}(2a\kappa)J_{2ak\mathrm{i}}(2a\kappa\xi)-J_{2ak\mathrm{i}}(2a\kappa)J_{-2ak\mathrm{i}}(2a\kappa\xi), \tag{1}$$

当$r\to\infty(\xi\to 0)$时，函数χ的渐近式是

$$\chi=J_{-2ak\mathrm{i}}(2a\kappa)\frac{\exp(2ak\mathrm{i}\ \ln a\kappa)}{\Gamma(2ak\mathrm{i}+1)}\cdot\exp(-\mathrm{i}kr)$$

$$-J_{2ak\mathrm{i}}(2a\kappa)\frac{\exp(-2ak\mathrm{i}\ \ln a\kappa)}{\Gamma(-2ak\mathrm{i}+1)}\exp(\mathrm{i}kr).$$

$\exp(-\mathrm{i}kr)$和$\exp(\mathrm{i}kr)$的系数可当作复数k的函数，如果用$a(k)$和$b(k)$来表示它们，则很容易看出，它们满足关系式

$$a(-k)=-b(k),$$

$$a^*(k)=-b(k)$$

（在取复共轭时不应把k变为k^*）。

把χ的渐近式写成

$$\chi=A[\exp(-\mathrm{i}kr-\mathrm{i}\delta_0)-\exp(\mathrm{i}kr+\mathrm{i}\delta_0)]$$

$$=-2\mathrm{i}A\sin(kr+\delta_0).$$

散射相移δ_0由下面的关系式确定

$$\exp(2\mathrm{i}\delta_0)=\frac{J_{2ak\mathrm{i}}(2a\kappa)}{J_{-2ak\mathrm{i}}(2a\kappa)}\cdot\frac{\Gamma(2ak\mathrm{i}+1)}{\Gamma(-2ak\mathrm{i}+1)}\exp(-4ak\mathrm{i}\ \ln a\kappa).$$

束缚态对应于一个虚数$k=\mathrm{i}k_n$，这时能量是负的。

当$k_n>0$时，χ的渐近式中第一项$\exp(-\mathrm{i}kr)=\exp(k_nr)$的系数必须为零。这表示，或者是$J_{2ak_n}(2a\kappa)=0$，或者$1/\Gamma(2ak_n+1)=0$。由第二个条件得

$$2ak_n+1=-n\quad(n=0,\ 1,\ 2,\ \cdots),$$

也就是说，

$$E=-\frac{\hbar^2k_n^2}{2\mu}=-\frac{\hbar^2(n+1)^2}{8\mu a^2}.$$

然而，贝塞耳函数的阶现在成为整数，因为$J_n(x)=(-1)^nJ_{-n}(x)$，所以两个解是线性相关的，波函数（1）恒等于零，所以这些能级是虚假的。第一个条件给出真实的分立能谱

$$J_{2ak_n}(2a\kappa)=0, \quad E_n=-\frac{\hbar^2k_n^2}{2\mu}. \qquad (2)$$

表示式 $\exp[2i\delta_0(k)]$ 的零点位于虚轴上，除了相应于分立谱（2）的ik_n值之外，还含有多余的零点。

9. (a) $d\sigma=\frac{\pi\mu^2V_0^2}{4\hbar^4\alpha^6}\exp\left(-\frac{4\mu E}{\hbar^2\alpha^2}\sin^2\frac{\theta}{2}\right)d\Omega$

$$\sigma=\frac{\pi^4V_0^2\mu}{4\hbar^2\alpha^4E}\left[1-\exp\left(-\frac{4\mu E}{\hbar^2\alpha^2}\right)\right],$$

(b) $d\sigma=\frac{16\mu^2V_0^2}{\hbar^4}\frac{\alpha^2}{(\alpha^2+q^2)^4}d\Omega$

$$\sigma=\frac{64\pi}{3}\frac{\mu^2V_0^2}{\hbar^4}\frac{16k^4+12k^2\alpha^2+3\alpha^4}{\alpha^4(\alpha^2+4k^2)^3}.$$

10 (a) 我们来计算氢原子的形状因子

$$F(q)=\int\exp[i(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r})]n(r)d\tau=\frac{1}{\pi a^3}\int\exp[i(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r})-2r/a]d\tau$$

$$=\frac{1}{(1+q^2a^2/4)^2},$$

式中$a=\hbar^2/\mu e^2$是玻尔半径。

由此我们求得微分截面

$$d\sigma=\frac{4a^2(8+q^2a^2)^2}{(4+q^2a^2)^4}d\Omega \quad \left(q=2k\sin\frac{1}{2}\theta\right) \qquad (1)$$

和总截面

$$\sigma=\frac{\pi a^2}{3}\frac{7k^4a^4+18k^2a^2+12}{(k^2a^2+1)^3}.$$

在这种情形下，若

$$ka\gg1,$$

则可以用玻恩近似，于是上式简化为

$$\sigma=\frac{7\pi}{3}\frac{1}{k^2a^2} \qquad (2)$$

（b） 对于氦原子，用变分法可求得电子密度分布的表达式如下：

$$n(r)=\frac{2}{\pi b^3}\exp(-2r/b),\quad b=\frac{16}{27}a.$$

在这种近似下，氦原子弹性散射的微分截面和总截面与氢原子的情况形式上相同，只须在公式（1）和（2）中用b代替a，并引进因子$Z^2=4$，特别是

$$\sigma=\frac{28\pi}{3k^2}.$$

11. 众所周知，用玻恩近似法求解势$V(r)$所引起的弹性散射问题时，将得到波函数的表示式如下：

$$\psi\approx\psi^{(0)}+\psi^{(1)},\tag{1}$$

式中

$$\left.\begin{aligned}\psi^{(0)}(r)&=\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})],\\ \psi^{(1)}(r)&=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int V(r')\psi^{(0)}(r')\frac{\exp(\mathrm{i}k|r-r'|)}{|r-r'|}\mathrm{d}^3r',\end{aligned}\right\}\tag{2}$$

其渐近式为

$$\psi^{(1)}_{r\to\infty}(r)\approx\left\{-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int V(r')\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}')]\mathrm{d}^3r'\right\}\frac{\exp(\mathrm{i}kr)}{r}$$

$$\equiv f(\theta)\frac{\exp(\mathrm{i}kr)}{r},\tag{2'}$$

这里$\boldsymbol{q}=\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'$是散射时粒子波矢量的改变，$\theta$是散射角。

散射到与粒子的入射方向$\boldsymbol{k}$成θ角的立体角元 $\mathrm{d}\Omega$ 内的微分截面是

$$\mathrm{d}\sigma=|f(\theta)|^2\mathrm{d}\Omega=\frac{\mu^2}{4\pi^2\hbar^4}\left|\int V(r')\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}')]\mathrm{d}^3r'\right|^2\mathrm{d}\Omega.\tag{3}$$

我们来计算(3)式的积分。取球坐标系的极轴沿矢量 $\boldsymbol{q}$ 的方向，并把$V(r')$代入，我们得：

$$\int \exp\left[-\kappa r' + i(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}')\right]\frac{d^3r'}{r'}$$

$$= 2\pi\int_0^\infty \exp(-\kappa r')r'\,dr'\int_{-1}^{1}\exp(iqr'x)\,dx$$

$$= \frac{4\pi}{\kappa^2+q^2},$$

因此，最后得：

$$d\sigma = \left(\frac{2A\mu}{\hbar^2}\right)^2 \frac{d\Omega}{(\kappa^2+q^2)^2}, \tag{4}$$

$$q = 2k\sin\frac{1}{2}\theta.$$

将(4)式对角度积分，即得总散射截面

$$\sigma = \frac{4\pi}{\kappa^2+4k^2}\left(\frac{2A\mu}{\kappa\hbar^2}\right)^2. \tag{5}$$

我们来讨论(4)式的若干极限情形。

(1) $k \ll \kappa$，也就是$q \ll \kappa$：

$$d\sigma \approx \left(\frac{2A\mu}{\hbar^2\kappa^2}\right)^2 d\Omega, \tag{4'}$$

与慢粒子散射的普遍理论完全一致，散射截面既不依赖于散射角也不依赖于粒子的能量。

(2) $k \gg \kappa$（快粒子）

这时，散射角有两个特征范围：

(a) $\theta \ll \kappa/k$ 即$q \ll \kappa$；对这些小的散射角，当$\theta \to 0$时，截面趋于常数极限(4')。

(b) $\theta \gg \kappa/k$，即$q \gg \kappa$（大偏转角）。在这种情形下，引进粒子的能量$E = \hbar^2k^2/2\mu$，则有

$$d\sigma \approx \left(\frac{A}{4E}\right)^2 \frac{d\Omega}{\sin^4\frac{1}{2}\theta}. \tag{4''}$$

这实际上就是卢瑟福散射公式，这是不足为奇的，因为在主要散

射区域$r\sim 1/q$中，这个场实际上是库仑场。

玻恩公式(3)和(4)的适用条件是，描述散射场影响的修正项$\psi^{(1)}$比主要项$\psi^{(0)}$小得多，即$|\psi^{(1)}|_{r=0}\ll|\psi^{(0)}|=1$。这个适用条件是充分的；然而，可以证明它是太苛刻了，特别是对于小散射角。

我们有

$$\psi^{(1)}\Big|_{r=0}=-\frac{\mu A}{2\pi\hbar^2}\int\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}')]\frac{\exp(-\kappa r'+\mathrm{i}kr')}{r'^2}\mathrm{d}^3r'$$

$$=-\frac{2\mu A}{\hbar^2}\int_0^\infty\exp(-\kappa r'+\mathrm{i}kr')\frac{\sin kr'}{kr'}\mathrm{d}r' \qquad (2'')$$

对于慢粒子($k\lesssim\kappa$)，积分中重要的区域是$r'\sim 1/\kappa$，在这区域里$\exp(\mathrm{i}kr')(\sin kr'/kr')\sim 1$，所以积分的数量级为$1/\kappa$，而所要求的(4)式的适用条件为

$$\frac{|A|\mu}{\kappa\hbar^2}\ll 1. \qquad (6')$$

对于快粒子($k\gg\kappa$)，由于存在着振荡很快的函数[$\exp(\mathrm{i}kr')\sin kr'$]，故对积分重要的区域是$r'\sim 1/k$，所以积分的数量级是$1/k$，而玻恩公式适用的条件为（引进粒子的速度$v=\hbar k/\mu$）：

$$\frac{|A|}{\hbar v}\ll 1. \qquad (6'')$$

如果把不等式(6′)和(6″)，与总截面的表达式(5)的极限情形联系起来考虑，则它们的意义就变得非常明显。略去数字系数，我们就可以看出，这两个不等式均和下面的条件等价：

$$\sigma\ll\frac{1}{\kappa^2}\left(\text{或}\sqrt{\sigma}\ll\frac{1}{\kappa}\right).$$

因此，玻恩近似适用的条件是：散射截面比散射场的有效力程的平方小得多，换言之，散射振幅$\sqrt{\sigma}$比场的有效力程$1/\kappa$要小得多。

基于本题的结果，作为一个特例，可以讨论电子被中性原子（即屏蔽的库仑场）散射的情况。此时应该在所有的公式中用$-Ze^2$代替A，用原子的托马斯-费密半径代替$1/\kappa$，这半径的数量

级为

$$\frac{\hbar^2}{Z^{\frac{1}{3}}\mu c^2}.$$

12 散射势，或者更确切地说，势能等于

$$V(r)=B\delta(r), \tag{1}$$

这里我们取力心作为原点。常数B显然等于对势能的体积分：

$$B=\int V(r)\mathrm{d}^3r=\text{常数} \tag{2}$$

弹性散射到单位立体角内（在质心系中）的微分有效截面等于

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}=\frac{\mu^2}{4\pi^2\hbar^2}\left|\int V(r)\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}]\,\mathrm{d}^3r\right|^2, \tag{3}$$

式中μ是碰撞粒子的约化质量，$\hbar\boldsymbol{q}\equiv\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}'$是它们的相对运动的动量改变。

根据(1)式和(3)式以及$\delta(r)$的性质，得出

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}=\frac{\mu^2B^2}{4\pi^2\hbar^4}. \tag{4}$$

因此，δ函数势的散射是各向同性的，而且与速度无关。大家知道，速度很低的粒子被一个有限宽的势阱所散射时，表现出同样的特性。我们将在下面说明这些事实之间的联系。

总散射截面等于

$$\sigma=4\pi\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}=\frac{\mu^2B^2}{\pi\hbar^4} \tag{5}$$

如果记住常数$B\left(B=\int V\mathrm{d}^3r\right)$的意义，我们可以看出，当$\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_{\text{有效}})]\approx1$，即$|\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_{\text{有效}}|\ll1$时，(4)式和(5)式总可以从普遍的玻恩公式(3)得到。为了使这一点对于所有的散射角都成立，不等式$kr_{\text{有效}}\ll1$或$r_{\text{有效}}\ll\lambda$（因为$q_{\max}\sim k$）必须成立，其中$r_{\text{有效}}$是$V(r)$显著不为零的区域的线度（“相互作用力程”）

因此，我们所讨论的δ函数势是一个理想的，作用力程极小的相互作用势，或者说，作用力程比碰撞粒子的相对运动的德布罗意波长小得多。因此，作为例子，δ函数势可用来形式地描述

足够慢的中子与质子或很重核的相互作用.

在这种情形下,尽管对所讨论的δ函数势并不能利用微扰论,但形式地应用玻恩近似法也能导致正确的结果.确实,对于慢粒子($ka\ll1$),微扰论适用的条件是

$$|V|\ll\frac{\hbar^2}{\mu a^2}.$$

若把这个条件写成$|V|a^3\ll(\hbar^2a/\mu)$,并注意到对于δ函数势$|V|a^3$具有固定的有限值,我们就会看到,当a值足够小时(常设$a=0$),微扰论,因而玻恩公式,是不适用的.

从公式(4)和(5)也可以清楚地看出,在真实的截面与速度无关的情形下,形式地应用玻恩近似法导致正确的结果.粗略地说,在这种情形下,我们感兴趣的不是对于给定的势去计算散射截面,而是对于已知的截面值来"调节"势的常数.

13. $$\delta_l=\int^{\infty}\left[k^2-\frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]^{\frac{1}{2}}\mathrm{d}r$$
$$-\int^{\infty}\left[k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]^{\frac{1}{2}}\mathrm{d}r.$$

14. 如果α是被散射粒子和散射粒子的质量比,则有

$$|f_{\text{lab}}(\theta',\varphi')|^2=\frac{\{1+2\alpha\cos\theta+\alpha^2\}^{3/2}}{|1+\alpha\cos\theta|}|f_{\text{com}}(\theta,\varphi)|^2.$$

15. (ii)

$$f(k)=\frac{4\pi\lambda|v(k)|^2}{1+\frac{2\lambda}{\pi}\int\mathrm{d}^3k'\frac{|v(k')|^2}{k^2-k'^2}},$$

式中

$$v(k)=\int_0^{\infty}\frac{\sin kr}{kr}v(r)r^2\mathrm{d}r.$$

(iii) $$k\cot\delta=\frac{(k^2b^2+1)^2+\xi(k^2b^2-1)}{2\xi b},$$

式中 $$\xi=2\pi\lambda b^3.$$

16*. 取转动中心为坐标原点，把入射粒子和转子的相互作用势能写成如下形式：

$$V=\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{n}a|}, \tag{1}$$

式中e是两粒子的电荷，a是转动粒子r到原点的距离，$\boldsymbol{n}$是沿转子“轴”的单位矢量，$\boldsymbol{r}$是被散射粒子的径矢。

在一级微扰论中，在单位时间内，所讨论的跃迁几率等于

$$\mathrm{d}w_{0l}=\frac{2\pi}{\hbar}|V_{0l}|^2\rho_E\mathrm{d}\Omega, \tag{2}$$

式中V_{0l}是引起所讨论的跃迁的微扰(1)在归一化波函数之间的矩阵元；$\rho_E\mathrm{d}\Omega$是单位能量间隔内末态的数目，$\mathrm{d}\Omega$是绕散射方向的立体角元。

系统的初态和末态的波函数是

$$\psi_{初}=\frac{1}{\sqrt{\Omega}}\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{r})]Y_{00}(\boldsymbol{n}),$$

$$\psi_{末}=\frac{1}{\sqrt{\Omega}}\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}_l\cdot\boldsymbol{r})]Y_{lm}(\boldsymbol{n}), \tag{3}$$

式中Y_{lm}是归一化的球谐函数，它描述转子的定态，$\boldsymbol{k}_0$和$\boldsymbol{k}_l$是散射前后被散射粒子的波矢量，Ω是归一化体积。从(1)式和(3)式我们得

$$V_{l0}=V^*_{0l}=\iint\psi^*_{末}V\psi_{初}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\mathrm{d}\Omega$$

$$=\frac{e^2}{\Omega}\iint Y^*_{lm}(\boldsymbol{n})Y_{00}(\boldsymbol{n})\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}_0-\boldsymbol{k}_l)\cdot\boldsymbol{r}]\frac{\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\mathrm{d}\Omega}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{n}a|} \tag{4}$$

式中$\mathrm{d}\Omega$是绕$\boldsymbol{n}$方向的立体角元。

由计算看出，对于任何给定的l值，可能被激发的只有一个转子态($m=0$)。所以末态的密度$\rho_E\mathrm{d}\Omega$完全由被散射粒子态的数目决定。因此，它等于

$$\rho_E \mathrm{d}\Omega = \frac{\Omega \rho_f^2 \frac{\mathrm{d}p_f}{\mathrm{d}E}\mathrm{d}\Omega}{(2\pi\hbar)^3}, \tag{5}$$

式中 $p_f=\hbar k_f$ 是被散射粒子的动量，由能量守恒定律，它与初始动量p_0的关系为：

$$E=\frac{p_0^2}{2\mu}=\frac{p_f^2}{2\mu}+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I}, \tag{6}$$

这里μ是被散射粒子的质量，I是转子的转动惯量。

令 $\boldsymbol{k}_0-\boldsymbol{k}_f=\boldsymbol{q}$，利用$Y_{00}=1/\sqrt{4\pi}$，并作变量替换$\boldsymbol{r}-n\boldsymbol{a}=\boldsymbol{r}'$，则(4)式变成

$$V_{f0}=\frac{e^2}{\sqrt{(4\pi)}\Omega}\int \mathrm{d}\Omega Y_{lm}^*(\boldsymbol{n})\exp[\mathrm{i}a(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{n})]$$

$$\cdot\int \exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}')]\frac{\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'}{r'} \tag{7}$$

这里出现的库仑势的傅里叶分量$\int\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}')](\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'/r')$等于$4\pi/q^2$（例如，参阅§3.42题）。选取$\boldsymbol{q}$作为使转子量子化的轴，并将$\exp[\mathrm{i}a(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{n})]$按勒让德多项式展成级数，我们得：

$$V_{f0}=\frac{\sqrt{4\pi}e^2}{\Omega q^2}\sum_{l'=0}^{\infty}(2l'+1)i^{l'}\sqrt{\frac{\pi}{2qa}}J_{l'+\frac{1}{2}}(qa)$$

$$\times\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}Y_{lm}^*(\theta,\varphi)P_{l'}(\cos\theta)\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi.$$

将

$$Y_{lm}^*=\sqrt{\left[\frac{2l+1}{4\pi}\cdot\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\right]}P_l^m(\cos\theta)\exp(-\mathrm{i}m\varphi)$$

代入，我们看出，只有跃迁到$m=0$态的那些矩阵元才不等于零。利用关系式

$$\int_0^{\pi}P_l P_{l'}\sin\theta\mathrm{d}\theta=\frac{2}{2l+1}\delta_{ll'},$$

并对 l' 求和，我们得到这些矩阵元的表示式

$$V^*_{l}=V_{l0}=4\pi\, i^l\frac{e^2}{\Omega q^2}\sqrt{\left[(2l+1)\frac{\pi}{2qa}\right]}J_{l+\frac{1}{2}}(qa).$$

(8)

微分有效散射截面 $d\sigma_l(\theta)$，等于几率(2)除以入射粒子流的密度。按照(3)式，该密度等于 v_0/Ω。其次，按照(6)式，(5)式中的量

$$p_l^2\frac{dp_l}{dE}=\frac{1}{2}\,p_l\frac{d(p_l^2)}{dE}$$

等于 $\mu p_l=\mu' v_l$，其中 v_0 和 v_l 是被散射粒子在散射前后的速度。把这结果与方程(2)，(5)和(8)结合起来，最后，我们得：

$$d\sigma_l(\theta)=\frac{\Omega}{v_0}\,dw_{0l}=2\pi\,(2l+1)\frac{v_l}{v_0}\,\frac{\mu^2e^4}{\hbar^4q^4}\,\frac{J^2_{l+\frac{1}{2}}(qa)}{qa}\,d\Omega.$$

(9)

有效截面中不包含归一化体积 Ω，因为它没有物理意义。

因此，(9)式就确定了所要求的粒子被散射到立体角元 $d\Omega$ 内，同时转子激发到第 l 个能级的微分有效截面。(9)式中的量 q 与散射角 θ 及 l 有关，因为 $\boldsymbol{p}_0=\boldsymbol{p}_l+\hbar\boldsymbol{q}$，其中矢量 $\hbar\boldsymbol{q}$ 是在碰撞过程中粒子传递给转子的动量。根据 $\boldsymbol{q}$ 的定义和(6)式我们有：

$$q^2=k_0^2+k_l^2-2k_0k_l\cos\theta$$

$$=2k_0^2-\frac{\mu}{I}\,l(l+1)-2k_0\sqrt{\left[k_0^2-\frac{\mu}{I}\,l(l+1)\right]}\cos\theta.$$

(10)

如果不管粒子的能量如何，要想求散射粒子的角分布，就必须对于给定的 θ 值，将(9)式对所有的 l 值求和。如果对于给定的能量转移要求出总散射截面，就必须对于一给定的 l 值，将(9)式对角度积分。由于截面(9)与 l 和 θ 的关系相当复杂，一般地说，上述两个计算只能用数值计算来进行。然而，对于某些最重要的情形，也可以近似地进行解析计算。下面我们来讨论这些情形。

现在我们来讨论(9)式。首先注意到，当 $l=0$，即弹性散射

时，(9)式是成立的。在这种情形下，$q=2k_0\sin\frac{1}{2}\theta$，所以弹性散射截面等于

$$d\sigma_{弹}(\theta)=d\sigma_0(\theta)=2\pi\frac{\mu^2e^4}{\hbar^4q^4}\frac{J^2_{\frac{1}{2}}(qa)}{qa}d\Omega$$

$$=\frac{4\mu^2e^4a^4}{\hbar^4}\frac{\sin^2\left(2k_0a\sin\frac{1}{2}\theta\right)}{\left(2k_0a\sin\frac{1}{2}\theta\right)}d\Omega, \tag{11}$$

这里用了关系式$J_{\frac{1}{2}}(qa)=\sqrt{(2/\pi qa)}\sin qa$。显然，对于小角度$\theta$，总的弹性散射截面是发散的。

在$2k_0a\ll1$的极限情形下，(11)式变成

$$d\sigma_{弹}(\theta)\approx\frac{\mu^2e^4}{4\hbar^4k_0^4\sin^4\frac{1}{2}\theta}d\Omega=\left(\frac{e^2}{2\mu v_0^2}\right)^2\frac{d\Omega}{\sin^4\frac{1}{2}\theta}, \tag{12}$$

此即卢瑟福公式。这是理所当然的，因为条件$2k_0a\ll1$意味着库仑散射中心（转子）的运动区域的线度$2a$，比被散射粒子的德布罗意波长$\lambda=1/k_0$要小很多，它实际上相当于有一个固定的散射中心，这正是卢瑟福公式(12)成立的条件。

为了以后便于讨论，将(9)式稍加改变，即将$d\Omega$变为dq。根据(10)式，对于给定的l值，我们有

$$qdq=k_0k_l\sin\theta d\theta=\frac{k_0k_l}{2\pi}d\Omega \tag{13}$$

所以(9)式变为

$$d\sigma_l=\left(\frac{2\pi e^2}{\hbar v_0}\right)^2(2l+1)\frac{J^2_{l+\frac{1}{2}}(qa)}{qa}\cdot\frac{dq}{q^3}. \tag{14}$$

我们只讨论转子被快速粒子激发的情形。快速粒子的初始能量$E=\mu v_0^2/2$，比“转动量子”$\hbar^2/2I$大得多，所以由(6)式可知$0\leqslant l\leqslant l_{max}$，且$l_{max}\gg1$（容易验证，对于电子——更不必说介子或质子——与分子碰撞时的μ和I的数值，条件$E\gg\hbar^2/2I$保证了用微扰论处理库仑散射问题的必要条件$e^2/\hbar v\ll1$成立）。更进一

步，我们假设（这已为最后结果所证实），起主要作用的是散射角很小（$\theta \ll 1$），并且能量转移比入射粒子的能量小得多（$\Delta E \ll E$）的那些碰撞。在这种情形下，显然$k_0 - k_l \ll k_0$，所以

$$\Delta E = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I} = \frac{\hbar^2}{2\mu}(k_0^2 - k_l^2) \approx \frac{\hbar^2 k_0}{\mu}(k_0 - k_l), \tag{15}$$

$$q^2 = (k_0 - k_l)^2 + 2k_0 k_l(1 - \cos\theta) \approx (k_0 - k_l)^2 + 2k_0^2\theta^2. \tag{16}$$

将(15)式和(16)式合并起来，得

$$q \approx \sqrt{\left\{\left[\frac{\mu l(l+1)}{2Ik_0}\right]^2 + (k_0\theta)^2\right\}} = \sqrt{\left\{\left(\frac{\Delta E}{\hbar v_0}\right)^2 + (k_0\theta)^2\right\}}. \tag{17}$$

当$\theta = 0$时，我们有$q \approx \Delta E/\hbar v_0$；而当$\Delta E = 0$时，有$q \approx k_0\theta = p_0\theta/\hbar$，所以，粗略地说，$\Delta E/v_0$和$p_0\theta$分别是纵向和横向转移的动量。

从(17)式清楚地看出，对于不太小的散射角，$k_0\theta \gg \Delta E/\hbar v_0$，$q$只依赖于$\theta$而与$l$无关。在这种情形下，我们可以将一般形式的(14)式对l求和，从而得到被散射粒子的（弹性和非弹性的）角分布。为此利用恒等式

$$\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)J_{l+\frac{1}{2}}^2(x) = \frac{2x}{\pi}. \tag{18}$$

[将展开式

$$\exp(\mathrm{i}x\cos\theta) = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{i}^l\sqrt{\left(\frac{\pi}{2x}\right)}J_{l+\frac{1}{2}}(x)P_l(\cos\theta)$$

的模平方，再对$\sin\theta\mathrm{d}\theta$积分，并利用正交归一化关系

$$\int_0^{\pi} P_l P_{l'}\sin\theta\,\mathrm{d}\theta = \frac{2}{2l+1}\delta_{ll'}$$

即得此恒等式]。根据等式(14)和(18)，我们有

$$\mathrm{d}\sigma(q) = \sum_{l=0}^{\infty}\mathrm{d}\sigma_l(q) = \left(\frac{2\pi e^2}{\hbar v_0}\right)^2 \frac{\mathrm{d}q}{q^3}\ \frac{1}{qa}\ \frac{2qa}{\pi}$$

$$=8\pi\left(\frac{e^2}{\hbar v_0}\right)^2\frac{\mathrm{d}q}{q^3}\,. \tag{19}$$

由于在所讨论的角度范围内$q\approx k_0\theta$，故(19)式可写成

$$\mathrm{d}\sigma(\theta)=8\pi\left(\frac{e^2}{\mu v_0^2}\right)^2\frac{\mathrm{d}\theta}{\theta^3}\approx\left(\frac{2e^2}{\mu v_0^2}\right)^2\frac{\mathrm{d}\Omega}{\theta^4}, \tag{19'}$$

这个式子与卢瑟福公式(12)（我们提醒一下，$\theta\ll1$）是一致的。这个结论与如下实事相联系，即对于所讨论的角度$p_0\theta\gg\Delta E/v_0$，散射中主要转移的是“横向”动量，并且实际上是弹性的。

角分布(19)或(19′)近似成立的散射角范围是

$$\frac{\Delta E}{2E}\ll\theta\ll1 \tag{20}$$

（这里用了关系式$p_0v_0=2E$）。由于按假设$(\Delta E)_{有效}\ll E$，所以可能有一个较大的角度区间满足条件(20)。角分布(19′)的特点（当θ减小时很快地增加），证实了我们原先的假设$\theta_{有效}\ll1$。

必须注意，(19)式是由对所有l求和而得到的。但是不等式(20)和(17)式对l作了如下限制：$\mu l^2/Ik_0\ll k_0\theta$或$l\ll l_1=k_0\sqrt{(I\theta/\mu)}$，初看起来，它似乎使得(19)式不成立了。然而，实际上条件$l\ll l_1$一般并不限制这个公式的适用性。容易验证，对于给定的x值，等式(18)中起主要作用的项的确是$l\ll x$的那些项，因此，为了满足(19)式的适用条件$l_{有效}\ll l_1$，只要有不等式$q\alpha\ll l_1$，或者$\theta\ll I/\mu\alpha^2=\mu_{转}/\mu$（$\mu_{转}=I/\alpha^2$是转动粒子的质量）就足够了，在所有实际上重要的情形下，$\mu_{转}\gtrsim\mu$，所以当$\theta\ll1$时，所要求的不等式自动满足。

现在来计算转子同时激发到第l个能级的总散射截面σ_l。为此，将(14)式对q积分。其上下限分别为$\theta=0$和$\theta=\pi$。因为对截面的主要贡献来自小角度的散射，所以，为了求q的积分限，只要利用(17)式，并且令$\theta=0$和$\theta\sim1$即可。于是我们有

$$\sigma_l=\int_{q_{min}}^{q_{max}}\mathrm{d}\sigma_l(q)=\left(\frac{2\pi e^2}{\hbar v_0}\right)^2(2l+1)\alpha^2$$

$$\cdot \int_{aq_{\min}}^{aq_{\max}} J_{l+\frac{1}{2}}^2(x)\,\frac{dx}{x^4}, \tag{21}$$

式中

$$q_{\min}=\frac{\Delta E}{\hbar v_0},\quad q_{\max}\sim k_0; \tag{22}$$

（在估计 $q_{\max}$ 的值时，可忽略（17）式中根号下的第一项，因为 $\Delta E \ll E$）。

当 x 值很大时，对于任何 l 值，（21）式中的被积函数随 x 的增加而急剧地减小；而当 x 值很小时，被积函数显著地依赖于 l。因为当 $x\to 0$ 时，$J_{l+\frac{1}{2}}(x)\sim x^{l+\frac{1}{2}}$，所以被积函数正比于 x^{2l-3}；因而，当 $l\geqslant 2$ 时，它趋于零；当 $l=0$，1 时，它趋于无穷。我们分别讨论这两种情形。

（1） $l=2,3,4,\cdots$

在这种情形下，我们有

$$\int_{aq_{\min}}^{aq_{\max}} J^2_{l+\frac{1}{2}}(x)\,\frac{dx}{x^4}\approx\int_0^{\infty} J^2_{l+\frac{1}{2}}(x)\,\frac{dx}{x^4}=\frac{2}{3\pi}\,\frac{(l-2)!}{(l+2)!}. \tag{23}$$

首先，讨论一下用 0 和 ∞ 代替积分限的正确性。因为函数 $J_{l+\frac{1}{2}}(x)$（$l\gg 1$）的第一个（最大的）极大值（也就是第一个根）在 $x=l$ 附近，而当 $x\ll l$ 时，这函数基本上正比于 $x^{l+\frac{1}{2}}$，当 $x>l$ 时，这函数将严重地衰减和振荡，所以可以清楚地看到，只要

$$aq_{\min}\ll l,\quad aq_{\max}\gg l \tag{24}$$

成立，改变积分限是允许的。利用（22）式和（15）式（为了消去 l），以及关系式 $\mu_{转}=I/a^4$，可以把这些条件写成

$$\frac{\Delta E}{E}\ll\frac{\mu_{转}}{\mu},\quad \frac{\Delta E}{E}\ll\frac{\mu}{\mu_{转}}. \tag{24'}$$

正如前面已提到的那样，通常 $\mu_{转}\gtrsim\mu$，因此，当 $\Delta E\ll E$ 时，第一个条件自动地满足，但第二个条件稍苛刻些。这样一来，至少在 $\mu\sim\mu_{转}$ 的情形下，证明了改变（23）中的积分限是可以的。

从（21）式和（23）式，最后得到

$$\sigma_l=\frac{8}{3}\left(\frac{e^2}{\hbar v_0}\right)^2(2l+1)\frac{(l-2)!}{(l+2)!}\cdot\pi a^2(l=2,3,\cdots)\qquad(25)$$

当l增加时，这总截面很快地减小（当$l\gg2$时，总截面按$1/l^3$、亦即按$1/(\Delta E)^{\frac{3}{2}}$减小），这也就证实了我们原先的假设：$(\Delta E)_{有效}\ll E$。

(2) $l=0,1$。

$l=0$的情形相当于弹性散射，这在前面已讨论过。

对于$l=1$，当$x\to0$时，积分(21)是对数发散的，所以对积分的主要贡献来自$x\ll1$。若用

$$\left(\frac{x}{2}\right)^{-\frac{3}{2}}\left[\frac{1}{\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)}\right]=\frac{2x^{-\frac{3}{2}}}{3\sqrt{2\pi}}$$

代替$J_{\frac{3}{2}}(x)$，并且从$aq_{\min}=a\Delta E/\hbar v_0=a\hbar/Iv_0\ll1$到$aq\sim1$的某个值积分，我们得到

$$\sigma_1=\frac{8}{3}\left(\frac{e^2}{\hbar v_0}\right)^2\ln\left(c\frac{Iv_0}{\hbar a}\right)\pi a^2(l=1),\qquad(26)$$

其中c是个约等于1的无量纲的量（它的准确值并不重要，因为对数的宗量比1大得多）。

最后，利用(25)式和(26)式，对于所有的角度和转子的所有可能的激发态，总的非弹性散射的有效截面为

$$\sigma_{非弹}=\sigma_1+\sum_{l=2}^{\infty}\sigma_l$$

$$=\frac{8}{3}\left(\frac{e^2}{\hbar v_0}\right)^2\pi a^2\left[\ln\left(c\frac{Iv_0}{\hbar a}\right)+\sum_{l=2}^{\infty}(2l+1)\frac{(l-2)!}{(l+2)!}\right],$$

利用关系式

$$\sum_{k=1}^{\infty}\frac{k!}{(k+n+1)!}=\frac{1}{(n-2)(n-1)!},$$

经过一些简单的运算，得到

$$\sum_{l=2}^{\infty}(2l+1)\frac{(l-2)!}{(l+2)!}=\frac{1}{3},$$

所以最后得到

$$\sigma_{非弹}=\frac{8}{3}\left(\frac{e^2}{\hbar v_0}\right)^2\ln\left(c_1\frac{Iv_0}{\hbar a}\right)\pi a^2, \tag{27}$$

式中 $c_1=ce^{\frac{1}{2}}$ ($e=2.718\cdots$)。因为$e^2/\hbar v_0\ll 1$，所以$\sigma_{非弹}$比转于运动区域的几何截面πa^2小得多。激发到$l=1$的能级的截面比激发到所有较高能级的总截面大得多。

17*. 满足边界条件$\chi_l(a)=0$的径向函数可用贝塞耳函数表示如下

$$\chi_l=\sqrt{(r)}\,[J_{-l-\frac{1}{2}}(ka)J_{l+\frac{1}{2}}(kr)$$
$$-J_{l+\frac{1}{2}}(ka)J_{-l-\frac{1}{2}}(kr)].$$

根据贝塞耳函数的渐近式，可求出散射相移

$$\cot\delta_l=(-1)^{l+1}\frac{J_{-l-\frac{1}{2}}(ka)}{J_{l+\frac{1}{2}}(ka)}.$$

于是，弹性散射的总截面为

$$\sigma=\frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\frac{J^2_{l+\frac{1}{2}}(ka)}{J^2_{l+\frac{1}{2}}(ka)+J^2_{-l-\frac{1}{2}}(ka)}\approx 2\pi a^2.$$

20. 由于$R\gg\lambda$，我们可以应用半经典近似。所有$l\leqslant R/\lambda$的粒子都射入原子核，因此

$$\text{对于 } l<\frac{R}{\lambda},\ \eta_l=0,$$

$$\text{对于 } l>\frac{R}{\lambda},\ \eta_l=1.$$

将这些η_l的值代入总截面的表示式

$$\sigma_r=\pi\lambda^2\sum(2l+1)(1-|\eta_l|^2),$$
$$\sigma_s=\pi\lambda^2\sum(2l+1)|1-\eta_l|^2$$

中，我们得

$$\sigma_r=\sigma_s=\pi\lambda^2\sum_{l=0}^{R/\lambda}(2l+1)\approx\pi R^2.$$

可见总截面$\sigma=\sigma_r+\sigma_s$等于原子核的几何截面的两倍。

21*、径向薛定谔方程可写成

$$\chi_l''+\left\{k^2-\bar{V}(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right\}\chi_l=0, \tag{1}$$

或者，等效地写成

$$\chi_l(r)=j_l(kr)+\int_0^\infty dr'G(r,r')\bar{V}(r')\chi_l(r'). \tag{2}$$

若设

$$\omega(r)=\sqrt{\{\bar{V}(r)\}}\,\chi_l(r),$$

$$g(r)=\sqrt{\{\bar{V}(r)\}}\,j_l(kr).$$

$$K(r,r')=\sqrt{\{\bar{V}(r)\bar{V}(r')\}}\,G(r,r'),$$

方程(2)就可写成具有对称核的积分方程的形式：

$$\omega(r)=g(r)+\int_0^\infty dr'K(r,r')\omega(r'). \tag{3}$$

利用这些新函数时，F_l量具有如下形式：

$$F_l=I_1/I_2^2 \tag{4}$$

其中

$$I_1=\int_0^\infty dr\ \omega(r)\left\{\omega(r)-\int_0^\infty dr'\omega(r')\,K(r,r')\right\}, \tag{5}$$

$$I_2=\int_0^\infty dr\ \omega(r)g(r). \tag{6}$$

如果 $\omega(r)$ 满足方程(3)，则$I_1=I_2$。利用相移的定义，取格林函数为

$$\begin{aligned}&\text{当}r<r'\text{时},\ G(r,r')=\frac{1}{k}j_l(kr)n_l(kr'),\\&\text{当}r>r'\text{时},\ G(r,r')=\frac{1}{k}n_l(kr)j_l(kr'),\end{aligned} \tag{7}$$

其中n_l是球诺埃曼函数，并利用j_l和n_l的渐近式，我们求得

$$I_2=-k\tan\delta_l, \tag{8}$$

所以，当$\omega(r)$满足方程(3)时，我们有

$$F_l=-\frac{1}{k}\cot\delta_l. \tag{9}$$

现在考虑解$\omega(r)+\delta\omega(r)$，其中$\omega(r)$满足方程(3)，我们得

$$\delta I_1=2\delta I_2 \tag{10}$$

于是得

$$\delta F_l=0.$$

22．两个全同粒子系统的波函数是轨道波函数和自旋波函数的乘积．不论粒子的自旋是整数还是半整数，与总自旋为偶数对应的是对称的轨道波函数，而与总自旋为奇数对应的是反对称轨道波函数．

引进质心系，并分离质心的变量，则轨道波函数的形式为

$$\Psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=\varphi(\boldsymbol{R})\psi(\boldsymbol{\rho}),$$

式中

$$\boldsymbol{R}=\frac{\boldsymbol{r}_1+\boldsymbol{r}_2}{2},\quad \boldsymbol{\rho}=\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2.$$

交换$\boldsymbol{r}_1$和$\boldsymbol{r}_2$，描写质心运动的函数$\varphi(\boldsymbol{R})$显然不变．于是，当总自旋S是偶数时，两粒子的相对运动的波函数是偶函数

$$\psi(\boldsymbol{\rho})=\psi(-\boldsymbol{\rho}),$$

而当S是奇数时，它是奇函数

$$\psi(\boldsymbol{\rho})=-\psi(-\boldsymbol{\rho}).$$

当S为偶数时，未受微扰的波函数可写成

$$\psi(\boldsymbol{\rho})=\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{\rho})]+\exp[-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{\rho})], \tag{1}$$

而当S为奇数时它可写成

$$\psi(\boldsymbol{\rho})=\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{\rho})]-\exp[-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{\rho})]. \tag{2}$$

由于粒子间相互作用而产生一散射波$[F(\theta)/\rho]\exp(\mathrm{i}k\rho)$，式中$\theta$是$\boldsymbol{k}_0$与质心系中粒子的飞出方向之间的夹角．散射振幅可以用

这样一个粒子在场$V(r)$中的散射振幅来表示，这粒子的质量等于两粒子的约化质量。实际上，$\psi(\rho)$满足方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{\mu}(\nabla_\rho^2+k^2)-V(\rho)\right]\psi(\rho)=0.$$

如果与入射波$\exp[i(\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{\rho})]$对应的散射波是$[f(\theta)/r]\exp[ik\rho]$，则对于入射波(1)

$$F_0(\theta)=f(\theta)+f(\pi-\theta)\quad\text{（偶自旋），}$$

而对于入射波（2）

$$F_1(\theta)=f(\theta)-f(\pi-\theta)\quad\text{（奇自旋）.}$$

一个粒子散射到立体角$d\Omega$内的几率（这时另一个粒子沿相反的方向运动）与入射粒子束的密度有关：

$$d\sigma_0=|f(\theta)+f(\pi-\theta)|^2,$$

$$d\sigma_1=|f(\theta)-f(\pi-\theta)|^2.$$

振幅$f(\theta)$可按公式用散射相移δ_l表示如下：

$$f(\theta)=\frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)[\exp(2i\delta_l)-1].$$

考虑到

$$P_l[\cos(\pi-\theta)]=P_l(-\cos\theta)=(-1)^lP_l(\cos\theta),$$

我们得到

$$F_0(\theta)=\frac{1}{ik}\sum_{\text{偶}l}(2l+1)P_l(\cos\theta)[\exp(2i\delta_l)-1],$$

$$F_1(\theta)=\frac{1}{ik}\sum_{\text{奇}l}(2l+1)P_l(\cos\theta)[\exp(2i\delta_l)-1].$$

对慢粒子来说，小的l值对散射的贡献最大。若总自旋是偶数，则散射截面是球形对称的（和不同粒子散射的情形一样），而且当$k\to0$时不为零。

若总自旋是奇数，则散射截面由$l=1$的项决定。当波数k很小时，$\delta_l\sim k^{2l+1}$，所以截面和E^2一样趋于零（当$E\to0$时），并

且与角度有关：$\sim\cos^2\theta$.

23. 在库仑场的情形下，用库仑单位时，散射振幅是

$$f(\theta)=-\frac{1}{2k^2\sin^2\frac{1}{2}\theta}\exp\left(-\frac{2i}{k}\ln\sin\frac{1}{2}\theta\right)\frac{\Gamma(1+i/k)}{\Gamma(1-i/k)}.$$

利用上题结果，在自旋为偶数的情形下，求出微分散射截面为

$$d\sigma_0=|f(\theta)+f(\pi-\theta)|^2d\Omega$$

$$=\frac{1}{4k^4}\left\{\frac{1}{\sin^4\frac{1}{2}\theta}+\frac{1}{\cos^4\frac{1}{2}\theta}\right.$$

$$\left.+\frac{2\cos[(2/k)\ln\tan\frac{1}{2}\theta]}{\sin^2\frac{1}{2}\theta\cos^2\frac{1}{2}\theta}\right\}d\Omega$$

这个公式给出α粒子的散射截面，α粒子的自旋为零.

在有两个电子的情形下，我们有总自旋为 1 的态，这时微分截面为

$$d\sigma_1=|f(\theta)-f(\pi-\theta)|^2$$

$$=\frac{1}{4k^4}\left\{\frac{1}{\sin^4\frac{1}{2}\theta}+\frac{1}{\cos^4\frac{1}{2}\theta}\right.$$

$$\left.-\frac{2\cos\left[(2/k)\ln\tan\frac{\theta}{2}\right]}{\sin^2\frac{1}{2}\theta\cos^2\frac{1}{2}\theta}\right\}d\Omega.$$

若散射电子未被极化，则总自旋的z分量有三个可能值：$S_z=0$，$S_z=\pm1$；而总自旋有两个可能值$S=0$和$S=1$. z分量的每一个可能值的几率是$W_{-1}=\frac{1}{4}$，$W_0=\frac{1}{2}$，$W_{+1}=\frac{1}{4}$. $S_z=\pm1$确定地相应于总自旋$S=1$. 由于$S=1$时不同分量的值是等几率的，

所以当$S=1$时，$S_z=0$的几率与$S_z=\pm1$的几率相同，即等于$\frac{1}{4}$，于是总自旋$S=0$的几率为$w_0-\frac{1}{4}=\frac{1}{4}$，而总自旋$S=1$的几率等于$\frac{3}{4}$。因此，对于未极化的电子束

$$\begin{aligned}d\sigma&=\frac{1}{4}d\sigma_0+\frac{3}{4}d\sigma_1\\&=\frac{1}{4k^4}\left\{\frac{1}{\sin^4\frac{1}{2}\theta}+\frac{1}{\cos^4\frac{1}{2}\theta}\right.\\&\quad\left.-\frac{\cos[(2/k)\ln\tan\frac{1}{2}\theta]}{\sin^2\frac{1}{2}\theta\cos^2\frac{1}{2}\theta}\right\}d\Omega.\end{aligned}$$

大括号中最后一项，即干涉项，是全同粒子散射的特征。当$\hbar\to0$时，$d\sigma$的公式应该变为经典的卢瑟福公式，在质心系中，卢瑟福公式的形式为

$$d\sigma=\frac{1}{4k^4}\left(\frac{1}{\sin^4\frac{1}{2}\theta}+\frac{1}{\cos^4\frac{1}{2}\theta}\right)d\Omega.$$

要过渡到这个公式还有某些特别的地方。若$e^2/\hbar v\gg1$，因而我们可以运用经典的考虑时，则干涉项具有如下形式（采用通常的单位）：

$$\frac{\cos[(2e^2/\hbar v)\ln\tan\frac{1}{2}\theta]}{\sin^2\frac{1}{2}\theta\cos^2\frac{1}{2}\theta},$$

它很快地振荡。因此，如果θ是严格固定的，即使$e^2/\hbar v$的值很大，量子力学的微分截面也与经典的很不相同。但是，如果求对小

角度范围$\Delta\theta\sim\hbar v/e^2$的平均值，则干涉项变为零，因而量子力学的公式变为经典的公式。

24. $\hat{f}^2=\frac{3}{4}f_3^2+\frac{1}{4}f_1^2+\frac{1}{4}(f_3^2-f_1^2)(\hat{\sigma}_n\cdot\hat{\sigma}_p)$。

在自旋函数

$$\begin{bmatrix}\exp(-i\alpha)\cos\beta\\ \exp(i\alpha)\sin\beta\end{bmatrix}_n\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p$$

所描述的态中，算符$(\hat{\sigma}_n\cdot\hat{\sigma}_p)$的平均值等于

$$\overline{(\hat{\sigma}_n\cdot\hat{\sigma}_p)}=\cos^2\beta-\sin^2\beta.$$

由此求得散射截面的表达式为

$$\sigma=\pi[3f_3^2+f_1^2+(f_3^2-f_1^2)\cos2\beta]$$

或

$$\sigma=\left[\frac{3}{4}\sigma_3+\frac{1}{4}\sigma_1+\frac{\cos2\beta}{4}(\sigma_3-\sigma_1)\right].$$

在中子束未被极化的情形下$\overline{\cos2\beta}=0$，我们得到散射截面为

$$\sigma=\frac{3}{4}\sigma_3+\frac{1}{4}\sigma_1.$$

25. 在相互作用前，中子和质子的自旋态由函数

$$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p$$

来描述。这个函数可以用单态和三重态的自旋函数展开：

$$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p=\frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p+\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_n\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p\right]\right.$$
$$\left.+\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p-\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_n\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p\right]\right\}.$$

散射波的形式是

$$\frac{\exp(ikr)}{r}\frac{1}{\sqrt{2}}\left\{f_3\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p+\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_n\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p\right]\right.$$

$$+f_1\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p-\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_n\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p\right]\Big\}$$

或

$$\frac{\exp(ikr)}{r}\left[f_3+\frac{f_1}{2}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p+\frac{f_3-f_1}{2}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_n\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p\right].$$

由此得到重新取向的几率是

$$\frac{1}{2}\cdot\frac{(f_3-f_1)^2}{f_3^2+f_1^2}.$$

26. 引进两质子的总自旋算符

$$\frac{1}{2}(\hat{\sigma}_{p1}+\hat{\sigma}_{p2})=\hat{S}.$$

很容易证明，

$$(\hat{\sigma}_n\cdot\hat{S})^2=\hat{S}^2-(\hat{\sigma}_n\cdot\hat{S}).$$

利用这个关系，求得$\hat{f}^2$的表达式如下：

$$\hat{f}^2=\frac{1}{4}[(f_1+3f_3)^2+(5f_3^2-2f_3f_1-3f_1^2)(\hat{S}_n\cdot\hat{S})$$

$$+(f_3-f_1)^2\hat{S}^2].$$

在被仲氢散射的情形下，截面等于

$$\sigma_{仲}=\pi(f_1+3f_3)^2.$$

当然，这截面和入射中子的极化无关，因为并没有特定的空间方向。

对于被正氢散射的情况下，截面等于

$$\sigma_{正}=\pi[(f_1+3f_3)^2+(5f_3^2-2f_3f_1-3f_1^2)\cos2\beta$$

$$+2(f_3-f_1)^2],$$

式中2β是两质子的总自旋的方向与中子的自旋方向之间的夹角。

若中子束未被极化，则$\cos2\beta$对混合系综的平均值等于零，因而$\sigma_{正}$具有如下形式：

$$\sigma_{正}=\pi[(f_1+3f_3)^2+2(f_3-f_1)^2],$$

这两个截面的比值为

$$\frac{\sigma_{正}}{\sigma_{仲}}=1+2\left(\frac{f_3-f_1}{f_1+3f_3}\right)^2.$$

27. $(2I+1)\ \dfrac{d\sigma}{d\Omega}=(I+1)|a_+|^2+I|a_-|^2$.

28. $\left.\dfrac{d\sigma}{d\Omega}\right|_{\sigma\parallel\pi}=\dfrac{\mu^2}{4\pi^2\hbar^4}\left[A-\dfrac{4}{3}\pi a^3B\right]^2$,

$$\left.\frac{d\sigma}{d\Omega}\right|_{\sigma\parallel-\pi}=\frac{\mu^2}{4\pi\hbar^4}\left[A+\frac{4}{3}\pi a^3B\right]^2;$$

$$P=\frac{\dfrac{8\mu^2}{3\hbar^4}a^3ABNL}{1-\dfrac{\mu^2}{\pi\hbar^4}NL\left(A^2+\dfrac{16\pi^3}{9}a^6B^2\right)}.$$

29*. 在离靶（靶由标量粒子组成）很远的地方，入射粒子的波函数为

$$\exp(ikZ)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\approx\frac{1}{2k_r}\sum_{l=0}^{\infty}i^{l+1}(2l+1)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}P_l(\cos\theta)$$

$$\times\{\exp[-i(kr-\frac{l}{2}\pi l)]-\exp[i(kr-\frac{1}{2}\pi l)]\}. \quad (1)$$

将函数$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}P_l(\cos\theta)$按算符$\hat{J}^2$的本征函数展开，其结果是

$$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}P_l(\cos\theta)=\frac{2\sqrt{\pi}}{\sqrt{2l+1}}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}Y_{l_0}(\theta)=\frac{2\sqrt{\pi}}{2l+1}[\sqrt{l+1}\,\Psi_l^+ +\sqrt{l}\,\Psi_l^-]. \quad (2)$$

上式中Ψ_l^+和Ψ_l^-是泡利函数（见§4.36题），

$$\Psi_l^+=\frac{1}{\sqrt{2l+1}}\begin{bmatrix}\sqrt{l+1}\,Y_{l0}\\ \sqrt{l}\,Y_{l1}\end{bmatrix}\left(j=l+\frac{1}{2},\ l,\ j_z=\frac{1}{2}\right),$$

$$\Psi_j^l=\frac{1}{\sqrt{2l+1}}\begin{bmatrix}\sqrt{l}\,Y_{l0}\\ -\sqrt{l+1}\,Y_{l1}\end{bmatrix}\left(j=l-\frac{1}{2},\ l,\ j_z=\frac{1}{2}\right).$$

将(2)式代入(1)式，则有

$$\exp(ikz)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\approx\frac{\sqrt{\pi}}{kr}\sum_{l=0}^{\infty}i^{l+1}\{\sqrt{(l+1)}\,\Psi_l^+ + \sqrt{(l)}\,\Psi_l^-\}$$

$$\times\{\exp[-i(kr-\frac{1}{2}\pi l)]$$

$$-\exp[i\,(kr-\frac{1}{2}\pi l)]\}. \qquad (3)$$

相互作用只改变出射波$\exp(ikr)/r$。因为对于任何相互作用规律，$\hat{j}^2$，$\hat{l}^2$和$\hat{j}_z$都是运动积分（见§4.40题）。所以，对于有不同量子数j，l的态，这种改变一般将是不同的。我们得到散射波的表达式如下：

$$\Psi_s\approx\frac{\exp(ikr)}{r}\ \frac{\sqrt{\pi}}{ik}\sum_{l=0}^{\infty}[\sqrt{l+1}\,(\eta_l^+-1)\Psi_l^+$$

$$-\sqrt{l}\,(\eta_l^--1)\Psi_l^-],$$

$$\eta_l^+=\eta\,(j=l+\frac{1}{2},\ l),\ \eta_l^-=\eta\,(j=l-\frac{1}{2},\ l)$$

或者

$$\Psi_s\approx\frac{\exp(ikr)}{r}\ \frac{\sqrt{\pi}}{ik}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{2l+1}}$$

$$\times\left\{\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}Y_{l0}[(l+1)(\eta_l^+-1)+l(\eta_l^--1)]\right.$$

$$\left.+\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}Y_{l1}(\eta_l^+-\eta_l^-)\right\}.$$

由此看出，当 $\eta_l^+ \neq \eta_l^-$ 时，粒子的自旋可能重新取向。我们可以用 η_l^+ 和 η_l^- 来表示散射截面。

极化同时改变的散射的微分截面 $d\sigma_1$ 等于

$$d\sigma_1 = \frac{\pi}{k^2}\left|\sum_{l=0}^{\infty}\sqrt{\left[\frac{l(l+1)}{2l+1}\right]}(\eta_l^+ - \eta_l^-)\,Y_{l1}\right|^2 d\Omega,$$

而极化不改变的散射的微分截面 $d\sigma_2$ 等于

$$d\sigma_2 = \frac{\pi}{k^2}\left|\sum_{l=0}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{(2l+1)}}Y_{l0}[(l+1)(\eta_l^+ - 1) + l(\eta_l^- - 1)]\right|^2 d\Omega.$$

当粒子的相对速度不太大时，我们只需考虑 S 波和 P 波的散射（当 $l>1$ 时，$|\eta_l^+ - 1| \ll 1$，$|\eta_l^- - 1| \ll 1$）。在这种情形下，

$$d\sigma_1 \approx \frac{1}{4k^2}(\eta_1^+ - \eta_1^-)\sin^2\theta\, d\Omega,$$

$$d\sigma_2 \approx \frac{1}{4k^2}|\cos\theta(2\eta_1^+ + \eta_1^- - 1) + \eta_0^+ - 1|^2 d\Omega.$$

从 $d\sigma_1$ 的表示式看出，自旋取向改变的粒子在垂直于 z 轴的方向上散射很弱

30. 在所有三种情形下，分布都是各向同性的。

31*. π 介子-核子系的算符 I_z 的本征函数，可以写成函数 φ 和 ψ 的所有可能的乘积的形式。函数 φ 相应于 π 介子的不同电荷态（φ_+，φ_0，φ_-），而函数 ψ 则相应于核子的电荷态（ψ_p，ψ_n）。我们将所有可能的组合列在下表中。

在这个表中，(p^+) 代表由 π^+ 介子和质子组成的系统的函数；(n^0) 代表由 π^0 介子和中子组成的系统的函数；等等。一般地说，这些函数不是这系统的总同位旋的平方 $\mathbf{I}^2$ 的算符的本征函数。

I^2 的本征函数同时又是 I_z 的本征函数，它们是上表中函数的

$(p^+)=\varphi_+\psi_+$ $I_z=\frac{3}{2}$	$(p^0)=\varphi_0\psi_+$ $I_z=\frac{1}{2}$	$(p^-)=\varphi_-\psi_+$ $I_z=-\frac{1}{2}$
$(n^+)=\varphi_+\psi_0$ $I_z=\frac{1}{2}$	$(n^0)=\varphi_0\psi_0$ $I_z=-\frac{1}{2}$	$(n^-)=\varphi_-\psi_0$ $I_z=-\frac{3}{2}$

线性组合，组合系数是克累布施-戈丹系数。$m'=\pm\frac{1}{2}$时的克累布施-戈丹系数有如下形式（见§4.36题）：

	$m'=\frac{1}{2}$	$m'=-\frac{1}{2}$
$l=j+\frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{j+M+\frac{1}{2}}{2j+1}}$	$\sqrt{\frac{j-M+\frac{1}{2}}{2j+1}}$
$l=j-\frac{1}{2}$	$-\sqrt{\frac{j-M+\frac{1}{2}}{2j+1}}$	$\sqrt{\frac{j+M+\frac{1}{2}}{2j+1}}$

在我们的情形下，$M=I_z$，$j=1$，$m'=\tau_z$。

利用这个表，可获得算符$\hat{I}^2$和$\hat{I}_z$的本征函数$\Phi^I_{I_z}$：

$$\Phi^{3/2}_{3/2}=(p^+),$$

$$\Phi^{3/2}_{1/2}=\sqrt{\frac{2}{3}}(p^0)+\sqrt{\frac{1}{3}}(n^+),$$

$$\Phi^{3/2}_{-1/2}=\sqrt{\frac{1}{3}}(p^-)+\sqrt{\frac{2}{3}}(n^0),$$

$$\Phi^{3/2}_{-3/2} = (n^-),$$

$$\Phi^{1/2}_{1/2} = -\sqrt{\frac{1}{3}}(p^0) + \sqrt{\frac{2}{3}}(n^+),$$

$$\Phi^{1/2}_{-1/2} = -\sqrt{\frac{2}{3}}(p^-) + \sqrt{\frac{1}{3}}(n^0).$$

很容易用I^2与I_z的本征函数来表示n介子-核子系统的本征函数，

$$(p^+) = \Phi^{3/2}_{3/2},$$

$$(n^+) = \sqrt{\frac{1}{3}}\Phi^{3/2}_{1/2} + \sqrt{\frac{2}{3}}\Phi^{1/2}_{1/2},$$

$$(p^0) = \sqrt{\frac{2}{3}}\Phi^{3/2}_{1/2} - \sqrt{\frac{1}{3}}\Phi^{1/2}_{1/2},$$

$$(n^0) = \sqrt{\frac{2}{3}}\Phi^{3/2}_{-1/2} + \sqrt{\frac{1}{3}}\Phi^{1/2}_{-1/2},$$

$$(p^-) = \sqrt{\frac{1}{3}}\Phi^{3/2}_{-1/2} - \sqrt{\frac{2}{3}}\Phi^{1/2}_{-1/2},$$

$$(n^-) = \Phi^{3/2}_{-3/2}.$$

32* 将入射波展开如下，

$$\psi = \exp(ikz)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\delta(\pi-\pi_1)\delta(n-\tau_z)$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} i^l(2l+1)P_l(\cos\theta)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\delta(\pi-\pi_1)\delta(n-\tau_z)$$

$$\cdot\frac{\sin(kr-\frac{1}{2}\pi l)}{kr}$$

$$= 2\sqrt{\pi}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{I} C^{I\tau_z}_{l_z}\,\Phi^I_{l_z}\,i^l\sqrt{(2l+1)}\,Y_{l0}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$

$$\cdot\frac{\sin(kr-\frac{1}{2}\pi l)}{kr}, \qquad (1)$$

式中 $C^{I\tau_z}_{l_z}$ 是克累布施-戈丹系数，它们由下表给出：

	$\tau_z=\frac{1}{2}$	$\tau_z=-\frac{1}{2}$
$C_{l_z}^{3/2}$	$\sqrt{(\frac{1}{2}+\frac{I_z}{3})}$	$\sqrt{(\frac{1}{2}-\frac{I_z}{3})}$
$C_{l_z}^{1/2}$	$-\sqrt{(\frac{1}{2}-\frac{I_z}{3})}$	$\sqrt{(\frac{1}{2}+\frac{I_z}{3})}$

(2)

这里我们用到了（见上题）

$$\delta(\pi-\pi_1)\delta(n-\tau_z) = \sum_I C^{I\tau_z}_{I_z}\,\Phi^I_{I_z}.$$

引进 $m_j=\frac{1}{2}$ 的泡利函数（见§9.29题）：

$$Y_l^+=\begin{pmatrix}\sqrt{\left(\frac{l+1}{2l+1}\right)}\,Y_{l0}\\ \sqrt{\left(\frac{l}{2l+1}\right)}\,Y_{l1}\end{pmatrix},\quad Y_l^-=\begin{pmatrix}\sqrt{\left(\frac{l}{2l+1}\right)}\,Y_{l0}\\ -\sqrt{\left(\frac{l+1}{2l+1}\right)}\,Y_{l1}\end{pmatrix}$$

并将 $Y_{l0}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ 按它们展开：

$$Y_{l0}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2l+1}}\left[\sqrt{l+1}\,Y_l^+ + \sqrt{l}\,Y_l^-\right]. \tag{3}$$

把(3)式代入(1)式，得：

$$\psi=-\frac{2\sqrt{\pi}}{kr}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_j i^l\left[\sqrt{l+1}\,Y_l^+ + \sqrt{l}\,Y_l^-\right]$$

$$\cdot\sin\left(kr-\frac{1}{2}\pi l\right)C_{l,\cdot}^{l_z}\,\Phi_{l,}^{l}$$

$$=\frac{\sqrt{\pi}}{ikr}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_j\left[\sqrt{l+1}\,Y_l^+ + \sqrt{l}\,Y_l^-\right]C_{l,\cdot}^{l_z}\,\Phi_{l,}^{l}$$

$$\cdot\left[\exp(ikr)-(-1)^l\exp(-ikr)\right]$$

$$=\frac{\sqrt{\pi}}{ik}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_j C_{l,\cdot}^{l_z}\,\Phi_{l,}^{l}\left[\sqrt{l+1}\,Y_l^+\right.$$

$$\left.+\sqrt{l}\,Y_l^-\right]\exp(ikr)/r$$

$$-\frac{\sqrt{\pi}}{ik}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_j C_{l,\cdot}^{l_z}\,\Phi_{l,}^{l}\left[\sqrt{l+1}\,Y_l^+\right.$$

$$\left.+\sqrt{l}\,Y_l^-\right](-1)^l\exp(-ikr)/r. \tag{4}$$

34*. 我们将入射波按守恒算符的本征函数展开［见§9.32

题的(4)式]。

展开式中每一个与完全确定的l，J和I值对应的项，都将相互独立地散射。

因而在弹性散射的过程中，具有确定的l，J和I值的粒子的数目不变，所以散射中心的影响是乘以某个相因子$\exp(2i\delta^l_{l_+})$。这里$\delta_{l_+}=\delta^l_{l,J=l+\frac{1}{2}}$，依赖于$l$，$J$和$I$，但是，由于假设同位旋不变性，所以它与$I_z$无关

应注意，散射中心不影响入射波，只影响出射波。因此，考虑了散射之后，系统的波函数可写成

$$\psi=\frac{\sqrt{\pi}}{ik}\sum_l\sum_{t=0}^{\infty}C^{lt}_{l,\frac{1}{2}}\Phi^l_{l,t}\left[\sqrt{l+1}Y^1_l\exp(2i\delta^l_{l_+})\right.$$

$$\left.+\sqrt{l}Y^{-1}_l\exp(2i\delta^l_{l_-})\right]$$

$$\times\exp(ikr)/r-\frac{\sqrt{\pi}}{ik}\sum_l\sum_{t=0}^{\infty}C^{lt}_{l,\frac{1}{2}}\Phi^l_{l,t}\left[\sqrt{l}Y^1_l\right.$$

$$\left.+\sqrt{l+1}Y^{-1}_l\right]\exp(-ikr)/r \qquad (1)$$

在离散射中心很远的地方，可将它写成

$$\psi=\psi_\lambda+f\frac{\exp(ikr)}{r},$$

这里f是散射振幅。若从(1)中减去ψ_λ的表示式[见§9.32题(4)式]，我们得到

$$f=\frac{\sqrt{\pi}}{ik}\sum_l\sum_{t=0}^{\infty}C^{lt}_{l,\frac{1}{2}}\Phi^l_{l,t}\left\{\sqrt{l+1}Y^1_l\left[\exp(2i\delta^l_{l_+})-1\right]\right.$$

$$\left.+\sqrt{l}Y^{-1}_l\left[\exp(2i\delta^l_{l_-})-1\right]\right\}。 \qquad (2)$$

函数$\Phi^l_{l,t}$可按算符$\hat{I}_z$的本征函数展开

$$\Phi^{l}_{I_z}=C^{I\tau_z}_{I_z}\,\delta(\pi-\pi_1)\delta\,(n-\tau_z)+C^{l,-\tau_z}_{I_z}\delta(\pi-\pi_k)\delta\cdot(n+\tau_z),\qquad(3)$$

其中克累布施-戈丹系数 $C^{I\tau_z}_{I_z}$ 由上题的表(2)给出，而$\pi_k=\pi_1+2\tau_z$。将(3)式代入(2)式，我们得到

$$f=\frac{\sqrt{\pi}}{ik}\sum_{l}\sum_{t=0}^{\infty}\left[\,G^{l\tau_z}_{I\tau_z}\,\delta(\pi-\pi_1)\delta\,(n-\tau_z)\right.$$

$$\left.+\,G^{l\tau_z}_{I_z,-\tau_z}\,\delta(\pi-\pi_k)\delta(n+\tau_z)\right]$$

$$\times\left\{\sqrt{l+1}\,Y^{\dagger}[\exp\,(2i\delta^{l}_{l+})-1\,]\right.$$

$$\left.+\sqrt{l}\,Y^{\dagger}_{-}\,[\exp\,(2i\delta^{l}_{l-})-1]\right\},$$

式中

$$G^{I\tau_z}_{I_z\tau_z'}=C^{l\tau_1}_{I_z}\;C^{l\tau_2'}_{I_z}$$

τ_z'表示核子的末态。

若现在令

$$f=f^{\tau_z}_{\tau_z'}\,\delta(\pi-\pi i)\;\delta\,(n-\tau_z)+f^{\tau_z}_{\tau_z'}\delta(\pi-\pi_k)\delta(n+\tau_z),$$

我们得：

$$f^{\tau_z}_{\tau_z'}=\frac{\sqrt{\pi}}{ik}\sum_{l}\sum_{t=0}^{\infty}G^{l\tau_z}_{I_z\tau_z'}\;\{\sqrt{l+1}\,Y^{\dagger}_{+}\,[\exp\,(2i\delta^{l}_{l+})-1]$$

$$+\sqrt{l}\,Y^{\dagger}_{-}\,[\exp\,(2i\delta^{l}_{l-})-1]\}\qquad(4)$$

本问题中所涉及的所有反应的$G^{l\tau_z}_{I_z\tau_z'}$值，都列在下表中 将$G^{l\tau_z}_{I_z\tau_z'}$的这些值代入(4)式中，最后得到：

反　　应	$p^+\to p^+$	$p^-\to p^-$	$p^-\to n^-$
$G^{3/2\,\tau_z}_{I_z\tau_z'}$	1	$\frac{1}{3}$	$\sqrt{2}/3$
$G^{1/2\,\tau_z}_{I_z\tau_z'}$	0	$\frac{2}{3}$	$-\sqrt{2}/3$

$$
\begin{aligned}
f(p^+,p^+)=&\frac{\sqrt{\pi}}{ik}\sum_{l=0}^{\infty}\{\sqrt{l+1}Y_l^+[\exp(2i\delta_{l+}^{\frac{3}{2}})-1]\\
&+\sqrt{l}\,Y_l^-[\exp(2i\delta_{l-}^{\frac{3}{2}})-1]\}\\
f(p^-,p^-)=&\frac{\sqrt{\pi}}{3ik}\sum_{l=0}^{\infty}\{\sqrt{l+1}Y_l^+[\exp(2i\delta_{l+}^{\frac{3}{2}})\\
&+2\exp(2i\delta_{l+}^{\frac{1}{2}})-3]\\
&+\sqrt{l}\,Y_l^-[\exp(2i\delta_{l-}^{\frac{3}{2}})+2\exp(2i\delta_{l-}^{\frac{1}{2}})\\
&-3]\}\\
f(p^-,n_0)=&\frac{\sqrt{2\pi}}{3ik}\sum_{l=0}^{\infty}\{\sqrt{l+1}Y_l^+[\exp(2i\delta_{l+}^{\frac{3}{2}})\\
&-\exp(2i\delta_{l+}^{\frac{1}{2}})-3]\\
&+\sqrt{l}\,Y_l^-[\exp(2i\delta_{l-}^{\frac{3}{2}})-\exp(2i\delta_{l-}^{\frac{1}{2}})]\}
\end{aligned}
\tag{5}
$$

35* 介子与核子所有可能的反应的系数$G^{I\tau_z}_{I_z\tau_z}$如下表：

由于同位旋不变性的假设，相移与I_z无关，所以从表(1)和上题中(4)式直接得出

(1) $f(p^+,p^+)=f(n^-,n^-)$,

(2) $f(p^-,p^-)=f(n^+,n^+)$,

(3) $f(p^0,n^+)=f(n^+,p^0)=f(p^-,n^0)=f(n^0,p^-)$,

(4) $f(p^0,p^0)=f(n^0,n^0)$

前三个振幅的表示式已在上题中给出。从表(1)容易看出

$$f(p^0,p^0)=\frac{1}{2}[f(p^+,p^+)+f(p^-,p^-)].$$

编号	反 应	I_z	$G^{3/2\tau_z}_{I,\tau_z}$	$G^{1/2\tau_z}_{I,\tau_z}$
1	$p^+\to p^+$	$\frac{3}{2}$	1	0
2	$p^0\to p^0$	$\frac{1}{2}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{3}$
3	$p^0\to n^+$	$\frac{1}{2}$	$\sqrt{2}/3$	$-\sqrt{2}/3$
4	$p^-\to n^0$	$-\frac{1}{2}$	$\sqrt{2}/3$	$-\sqrt{2}/3$
5	$p^-\to p^-$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{2}{3}$
6	$n^+\to n^+$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{2}{3}$
7	$n^0\to p^-$	$-\frac{1}{2}$	$\sqrt{2}/3$	$-\sqrt{2}/3$
8	$n^+\to p^0$	$\frac{1}{2}$	$\sqrt{2}/3$	$-\sqrt{2}/3$
9	$n^0\to n^0$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{3}$
10	$n^-\to n^-$	$-\frac{3}{2}$	1	0

利用上表我们得到

(1) $f(p^+,p^+)=f(n^-,n^-)=f^{\frac{3}{2}}$,

(2) $f(p^-,p^-)=f(n^+,n^+)=\frac{1}{3}(f^{\frac{3}{2}}+2f^{\frac{1}{2}})$,

(3) $f(p^0,n^+)=f(n^+,p^0)=f(p^-,n^0)=f(n^0,p^-)$

$$=\frac{\sqrt{2}}{3}(f^{\frac{3}{2}}-f^{\frac{1}{2}}),$$

(4) $f(p^0,p^0)=f(n^0,n^0)=\frac{1}{3}(2f^{\frac{3}{2}}+f^{\frac{1}{2}})$.

36*. 微分散射截面等于

$\frac{d\sigma}{d\Omega}=|f|^2$，式中$d\Omega=\sin\theta\, d\theta\, d\varphi$。

总散射截面等于

$$\sigma=\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}|f|^2\sin\theta\, d\theta\, d\varphi.$$

将所考虑的反应的散射振幅代入此式，这些散射振幅已在§9.34题中给出，再利用泡利函数的正交归一性

$$\iint(Y_l^{\frac{1}{2}})^*(Y_{l'}^{\frac{1}{2}})d\Omega=\iint(Y_l^{\frac{3}{2}})^*(Y_{l'}^{\frac{3}{2}})d\Omega=\delta_{ll'},$$

$$\iint(Y_l^{\frac{1}{2}})^*(Y_{l'}^{\frac{3}{2}})d\Omega=\iint(Y_l^{\frac{3}{2}})^*(Y_{l'}^{\frac{1}{2}})d\Omega=0,$$

我们得

$$\sigma(p^+,p^+)=\frac{4\pi}{R^2}\sum_{l=0}^{\infty}[(l+1)\sin^2\delta_{l+}^{\frac{3}{2}}+l\sin^2\delta_{l-}^{\frac{3}{2}}]$$

$$\sigma(p^-,p^-)=\frac{4\pi}{3k^2}\sum_{l=0}^{\infty}\{(l+1)[\sin^2\delta_{l+}^{\frac{3}{2}}+2\sin^2\delta_{l+}^{\frac{1}{2}}$$

$$-\frac{2}{3}\sin^2(\delta_{l+}^{\frac{3}{2}}-\delta_{l+}^{\frac{1}{2}})]$$

$$+l[\sin^2\delta_{l-}^{\frac{3}{2}}+2\sin^2\delta_{l-}^{\frac{1}{2}}-\frac{2}{3}\sin^2(\delta_{l-}^{\frac{3}{2}}$$

$$-\delta_{l-}^{\frac{1}{2}})]\}$$

$$\sigma(p^-,n^0)=\frac{8\pi}{9k^2}\sum_{l=0}^{\infty}[(l+1)\sin^2(\delta_{l+}^{\frac{3}{2}}-\delta_{l-}^{\frac{1}{2}})$$

$$+l\sin^2(\delta_{l-}^{\frac{3}{2}}-\delta_{l-}^{\frac{1}{2}})]$$

37* 我们将给出反应$(p^+,\ p^+)$的详细解。根据§9.34题，

我们得到S波和P波的散射振幅：

$$f(p^+,p^+)=\frac{\sqrt{\pi}}{ik}[a_0\,Y_0^+ +\sqrt{2}\,a_1Y_1^+ +\beta_1Y_1^-],$$

式中

$$a_0=\exp\,(2i\,\delta_0^+)-1;\quad a_1=\exp\,(2i\,\delta_{1+}^+)-1;$$

$$\beta_1=\exp\,(2i\,\delta_{1-}^+)-1.$$

利用§9.32题中泡利函数的表示式，我们求得S波和P波的微分散射截面

$$\frac{k^2}{\pi}\frac{d\sigma}{d\Omega}=|Y_{00}|^2|a_0|^2+\frac{1}{\sqrt{3}}|Y_{00}||Y_{10}|[2(a_0a_1^*+a_0^*a_1)+(a_0\beta_1^*+a_0^*\beta_1)]$$

$$+\frac{1}{3}|Y_{10}|^2[4|a_1|^2+|\beta_1|^2+2(a_1\beta_1^*+a_1^*\beta_1)]$$

$$+\frac{2}{3}|Y_{11}|^2[|a_1|^2+|\beta_1|^2-(a_1\beta_1^*+a_1^*\beta_1)].$$

因为球谐函数Y_{lm}等于

$$Y_{00}=\frac{1}{\sqrt{4\pi}};\quad Y_{10}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta;$$

$$Y_{11}=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\,\exp(i\varphi).$$

所以微分截面可写成下式

$$k^2\frac{d\sigma}{d\Omega}=A+B\cos\theta+C\cos^2\theta, \qquad (1)$$

式中系数A，B，C分别等于

$$A=\frac{1}{4}[|a_0|^2+|a_1|^2+|\beta_1|^2-(a_1\beta_1^*+a_1^*\beta_1)];$$

$$B=\frac{1}{4}[2(a_0a_1^*+a_0^*a_1)+(a_0\beta_1^*-a_0^*\beta_1)];$$

$$C=\frac{3}{4}[|\alpha_1|^2+(\alpha_1\beta_1^*+\alpha_1^*\beta_1)]。$$

为了用相移表示系数A，B和C，我们利用恒等式

$$|\exp(2ix)-1|^2=4\sin^2x,$$

$$[\exp(2ix)-1][\exp(-2iy)-1]+[\exp(-2ix)-1][\exp(2iy)-1]$$
$$=4[\sin^2x+\sin^2y-\sin^2(x-y)]。$$

于是得

$$\left.\begin{aligned}
A(p^+,p^+)&=\sin^2\delta_0^{\frac{3}{2}}+\sin^2(\delta_{1+}^{\frac{3}{2}}-\delta_{1-}^{\frac{3}{2}}),\\
B(p^+,p^+)&=3\sin\delta_0^{\frac{3}{2}}+2\sin^2\delta_{1+}^{\frac{3}{2}}+\sin^2\delta_{1-}^{\frac{3}{2}}\\
&\quad-2\sin^2(\delta_0^{\frac{3}{2}}-\delta_{1+}^{\frac{3}{2}})-\sin^2(\delta_0^{\frac{3}{2}}-\delta_{1-}^{\frac{3}{2}}),\\
C(p^+,p^+)&=3[2\sin^2\delta_{1+}^{\frac{3}{2}}+\sin^2\delta_{1-}^{\frac{3}{2}}-\sin^2(\delta_{1+}^{\frac{3}{2}}\\
&\quad-\delta_{1-}^{\frac{3}{2}})]。
\end{aligned}\right\}\quad(2)$$

上述求系数A，B和C的方法，很容易推广到反应(p^-,p^-)和(p^-,n^0)。我们将只给出最后的结果：

$$\begin{aligned}
A(p^-,p^-)=&\frac{1}{3}\sin^2\delta_0^{\frac{3}{2}}+\frac{2}{3}\sin^2\delta_0^{\frac{1}{2}}-\frac{2}{9}\sin^2(\delta_0^{\frac{3}{2}}-\delta_0^{\frac{1}{2}})\\
&+\frac{1}{9}\sin^2(\delta_{1+}^{\frac{3}{2}}-\delta_{1-}^{\frac{3}{2}})-\frac{2}{9}\sin^2(\delta_{1-}^{\frac{3}{2}}-\delta_{1-}^{\frac{1}{2}})\\
&+\frac{2}{9}\sin^2(\delta_{1-}^{\frac{3}{2}}-\delta_{1+}^{\frac{3}{2}})+\frac{2}{9}\sin^2(\delta_{1+}^{\frac{3}{2}}-\delta_{1-}^{\frac{1}{2}})\\
&+\frac{1}{9}\sin^2(\delta_{1-}^{\frac{1}{2}}-\delta_{1+}^{\frac{1}{2}})-\frac{2}{9}\sin^2(\delta_{1+}^{\frac{1}{2}}-\delta_{1+}^{\frac{1}{2}}),
\end{aligned}$$

$$B(p^-,p^-)=\sin^2\delta_0^{\frac{3}{2}}+2\sin^2\delta_0^{\frac{1}{2}}+\frac{2}{3}\sin^2\delta_{1+}^{\frac{3}{2}}+\frac{4}{3}\sin^2\delta_{1+}^{\frac{3}{2}}$$

$$+\frac{1}{3}\sin^2\delta_{1-}^{\frac{3}{2}}+\frac{2}{3}\sin^2\delta_{1-}^{\frac{1}{2}}-\frac{2}{9}\sin^2(\delta_0^{\frac{3}{2}}-\delta_{1+}^{\frac{3}{2}})$$

$$-\frac{4}{9}\sin^2(\delta_0^{\frac{3}{2}}-\delta_{1+}^{\frac{1}{2}})-\frac{1}{9}\sin^2(\delta_0^{\frac{3}{2}}-\delta_{1-}^{\frac{3}{2}})$$

$$-\frac{2}{9}\sin^2(\delta_0^{\frac{3}{2}}-\delta_{1-}^{\frac{1}{2}})-\frac{4}{9}\sin^2(\delta_0^{\frac{1}{2}}-\delta_{1+}^{\frac{3}{2}})$$

$$-\frac{8}{9}\sin^2(\delta_0^{\frac{1}{2}}-\delta_{1+}^{\frac{1}{2}})-\frac{2}{9}\sin^2(\delta_0^{\frac{1}{2}}-\delta_{1-}^{\frac{3}{2}})$$

$$-\frac{4}{9}\sin^2(\delta_0^{\frac{1}{2}}-\delta_{1-}^{\frac{1}{2}});$$

$$C(p^-,p^-)=2\sin^2\delta_{1+}^{\frac{3}{2}}+4\sin^2\delta_{1+}^{\frac{1}{2}}+\sin^2\delta_{1-}^{\frac{3}{2}}+2\sin^2\delta_{1-}^{\frac{1}{2}}$$

$$-\frac{2}{3}\sin^2(\delta_{1+}^{\frac{3}{2}}-\delta_{1+}^{\frac{1}{2}})-\frac{1}{3}\sin^2(\delta_{1+}^{\frac{3}{2}}-\delta_{1-}^{\frac{3}{2}})$$

$$-\frac{2}{3}\sin^2(\delta_{1+}^{\frac{3}{2}}-\delta_{1-}^{\frac{1}{2}})-\frac{2}{3}\sin^2(\delta_{1+}^{\frac{1}{2}}-\delta_{1-}^{\frac{3}{2}})$$

$$-\frac{2}{3}\sin^2(\delta_{1+}^{\frac{1}{2}}-\delta_{1-}^{\frac{1}{2}});$$

(3)

$$A(p^-,n^\circ)=\frac{2}{9}[\sin^2(\delta_0^{\frac{3}{2}}-\delta_0^{\frac{1}{2}})+\sin^2(\delta_{1+}^{\frac{3}{2}}-\delta_{1+}^{\frac{1}{2}})$$

$$+\sin^2(\delta_{1+}^{\frac{3}{2}}-\delta_{1-}^{\frac{3}{2}})-\sin^2(\delta_{1+}^{\frac{3}{2}}-\delta_{1-}^{\frac{1}{2}})$$

$$-\sin^2(\delta_{1+}^{\frac{1}{2}}-\delta_{1-}^{\frac{3}{2}})+\sin^2(\delta_{1+}^{\frac{1}{2}}-\delta_{1-}^{\frac{1}{2}})$$

$$+\sin^2(\delta_{1-}^{\frac{3}{2}}-\delta_{1-}^{\frac{1}{2}})];$$

$$B(p^-,n^0)=\frac{2}{9}[-2\sin^2(\delta_0^{\frac{3}{2}}-\delta_{1+}^{\frac{3}{2}})+2\sin\delta^2(\delta_0^{\frac{3}{2}}-\delta_{1+}^{\frac{1}{2}})$$

$$-\sin^2(\delta_0^{\frac{3}{2}}-\delta_{1-}^{\frac{3}{2}})+\sin^2(\delta_0^{\frac{3}{2}}-\delta_{1-}^{\frac{1}{2}})$$

$$+2\sin^2(\delta_0^{\frac{1}{2}}-\delta_{1+}^{\frac{3}{2}})-2\sin^2(\delta_0^{\frac{1}{2}}-\delta_{1+}^{\frac{1}{2}})$$

$$+\sin^2(\delta_0^{\frac{1}{2}}-\delta_{1-}^{\frac{3}{2}})-\sin^2(\delta_0^{\frac{1}{2}}-\delta_{1-}^{\frac{1}{2}})],$$

$$C(p^-,n^0)=\frac{2}{3}[\sin^2(\delta_{1+}^{\frac{3}{2}}-\delta_{1+}^{\frac{1}{2}})+\sin^2(\delta_{1+}^{\frac{3}{2}}-\delta_{1-}^{\frac{1}{2}})$$

$$-\sin^2(\delta_{1+}^{\frac{3}{2}}-\delta_{1-}^{\frac{3}{2}})+\sin^2(\delta_{1+}^{\frac{1}{2}}-\delta_{1-}^{\frac{3}{2}})$$

$$-\sin^2(\delta_{1+}^{\frac{1}{2}}-\delta_{1-}^{\frac{1}{2}})]. \quad (1)$$

当研究π介子被质子散射的角分布时，上面所得结果是很重要的。我们可以从实验上证实(1)式，并确定关于反应(p^+,p^+)，(p^-,p^-)和(p^-,n^0)的系数A，B和C。这样就可以由方程(2)，(3)和(4)定出六个未知的相移$\delta_0^{\frac{3}{2}}$，$\delta_0^{\frac{1}{2}}$，$\delta_{1+}^{\frac{3}{2}}$，$\delta_{1+}^{\frac{1}{2}}$，$\delta_{1-}^{\frac{3}{2}}$和$\delta_{1-}^{\frac{1}{2}}$。

然而，相移的计算有两点不确定性。首先，方程(2)、(3)和(4)中含有相移和相移差的正弦的平方，所以，不能确定它们的符号；其次，有几组不同的相移，都能符合实验数据。这些不同解中，费密解与实验符合得最好，在费密解中，相移$\delta_{1+}^{\frac{3}{2}}$对散射的贡献最大。这个相移，相当于在实验室坐标系中介子能量$E\approx 195$MeV时的90°度角的散射。其他相移$\delta_{1-}^{\frac{3}{2}}$，$\delta_{1+}^{\frac{1}{2}}$，$\delta_{1-}^{\frac{1}{2}}$对散射的贡献都很小。

有很多附加的判据，可用来消除上面的不确定性。相移的符

号，可根据因果性原理的考虑来确定，也可根据专门考虑库仑相互作用的实验来确定。我们可以借助关于反冲核子极化的实验来选择正确的解，但这个实验至今尚未完成。在反应 (p^+, p^+)，(p^-, p^-) 和 (p^-, n^0) 中，所期待的极化值将在下题中确定。

38*. 我们详细地讨论 (p^+, p^+) 反应。设质子的自旋波函数为：

$\alpha=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$，如果 $s_z=\frac{1}{2}$；$\beta=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$，如果 $s_z=-\frac{1}{2}$ 若质子原来具有 $s_z=\frac{1}{2}$，则散射振幅可写成

$$f_{\frac{1}{2}}=f_{\alpha\alpha}\alpha+f_{\alpha\beta}\beta. \tag{1}$$

若开始时 $s_z=-\frac{1}{2}$，则散射振幅

$$f_{-\frac{1}{2}}=f_{\beta\alpha}\alpha+f_{\beta\beta}\beta. \tag{2}$$

在这些方程中，$f_{\alpha\alpha}$ 和 $f_{\beta\beta}$ 是没有自旋重新取向的散射振幅，$f_{\alpha\beta}$ 和 $f_{\beta\alpha}$ 是有自旋重新取向的散射振幅。振幅 $f_{\alpha\alpha}$ 和 $f_{\alpha\beta}$ 可由 §9.34题公式（5）中 $\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ 和 $\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ 的系数决定。如只考虑 S 波和 P 波，则有

$$f_{\alpha\alpha}=\frac{\sqrt{\pi}}{ik}[\alpha_0 Y_{00}+\sqrt{\frac{1}{3}}(2\alpha_1+\beta_1)Y_{10}], \tag{3}$$

$$f_{\alpha\beta}=\frac{\sqrt{\pi}}{ik}\sqrt{\begin{pmatrix}2\\3\end{pmatrix}}(\beta_1-\alpha_1)Y_{11}, \tag{4}$$

式中 α_0，α_1，β_1 已在上题中给出。若利用 $m_j=\frac{1}{2}$ 时的泡利函数的表示式，容易求得

$$f_{\beta\alpha}=\frac{\sqrt{\pi}}{ik}\sqrt{\frac{2}{3}}(\alpha_1-\beta_1)Y_{1,-1};\ f_{\beta\beta}=f_{\alpha\alpha}.$$

若被散射质子是在 xz 平面内被散射，则极角 $\varphi=0$，于是得：

$$f_{\alpha\beta}=-f_{\beta\alpha}.$$

这样，我们就得到$s_z=-\frac{1}{2}$的质子的散射振幅[见(2)式]

$$f_{-\frac{1}{2}}=-f_{\beta\alpha}\alpha+f_{\alpha\alpha}\beta. \qquad (5)$$

因为质子原来未被极化，由(1)式和(5)式看出，散射后它们沿z轴仍然未被极化.

可以证明，散射后在xz平面内没有极化。的确，若假设z'轴在xz平面内与z轴成θ角。沿z'轴，相应于自旋分量为$\frac{1}{2}$和$-\frac{1}{2}$的质于的自旋函数γ_θ和δ_θ的形式为（见§4.19题）：

$$\begin{pmatrix}\gamma_\theta\\ \delta_\theta\end{pmatrix}=\exp(-i\hat{S}_y\theta)\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2} & -\sin\frac{\theta}{2}\\ \sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix}.$$

于是，我们得

$$f_{\frac{1}{2}}=f_{\alpha\alpha}\alpha+f_{\alpha\beta}\beta$$

$$=\left(f_{\alpha\alpha}\cos\frac{\theta}{2}-f_{\alpha\beta}\sin\frac{\theta}{2}\right)\gamma_\theta+\left(f_{\alpha\alpha}\sin\frac{\theta}{2}+f_{\alpha\beta}\cos\frac{\theta}{2}\right)\delta_\theta,$$

$$f_{-\frac{1}{2}}=-f_{\alpha\beta}\alpha+f_{\beta\beta}\beta$$

$$=-\left(f_{\alpha\alpha}\sin\frac{\theta}{2}+f_{\alpha\beta}\cos\frac{\theta}{2}\right)\gamma_\theta+\left(f_{\alpha\alpha}\cos\frac{\theta}{2}-f_{\alpha\beta}\sin\frac{\theta}{2}\right)\delta_\theta,$$

这表示在xz平面内任何方向上都没有极化。

然而，质于将沿垂直于散射平面的y轴而被极化。为了求此

极化的大小，我们用自旋本征函数

$$\gamma=\frac{\alpha+\mathrm{i}\beta}{\sqrt{2}}\,;\quad \delta=\frac{\alpha-\mathrm{i}\beta}{\sqrt{2}}\,,$$

来表示$f_{\frac{1}{2}}$和$f_{-\frac{1}{2}}$，γ和δ是自旋方向与y轴平行或反平行的自旋函数。于是有

$$f_{\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{2}}(f_{\alpha\alpha}-\mathrm{i}f_{\alpha\beta})\,\gamma+\frac{1}{\sqrt{2}}(f_{\alpha\alpha}+\mathrm{i}f_{\alpha\beta})\delta,$$

$$f_{-\frac{1}{2}}=\frac{-1}{\sqrt{2}}(f_{\alpha\alpha}-\mathrm{i}f_{\alpha\beta})\,\gamma+\frac{1}{\sqrt{2}}(f_{\alpha\alpha}+\mathrm{i}f_{\alpha\beta})\delta.$$

由此可得

$$W_+\sim|f_{\alpha\alpha}-\mathrm{i}f_{\alpha\beta}|^2;\qquad W_-\sim|f_{\alpha\alpha}+\mathrm{i}f_{\alpha\beta}|^2,\tag{6}$$

式中W_+和W_-是散射后自旋与y轴平行或反平行的几率。应注意，不管质子原来的s_z值如何，(6)式都成立。把$f_{\alpha\alpha}$和$f_{\alpha\beta}$的表示式(3)和(4)代入(6)式，我们得到

$$W_\pm\sim|\alpha_0+(2\alpha_1+\beta_1)\cos\theta\mp\mathrm{i}(\beta_1-\alpha_1)\sin\theta|^2,$$

或者

$$W_\pm\sim|[\exp(2\mathrm{i}\delta_0^{\frac{3}{2}})-1]+[2\exp(2\mathrm{i}\delta_{1+}^{\frac{3}{2}})$$

$$-3+\exp(2\mathrm{i}\delta_{1-}^{\frac{3}{2}})]\cos\theta$$

$$\pm\mathrm{i}[\exp(2\mathrm{i}\delta_{1+}^{\frac{3}{2}})-\exp(2\mathrm{i}\delta_{1-}^{\frac{3}{2}})]\sin\theta|^2.$$

与此相似，对于反应$(p^-,\ p^-)$和$(p^-,\ n^0)$我们得到

$$W_\pm(p^-,p^-)\sim|[\exp(2\mathrm{i}\delta_0^{\frac{3}{2}})-3+2\exp(2\mathrm{i}\delta_0^{\frac{1}{2}})]$$

$$+[2\exp(2\mathrm{i}\delta_{1+}^{\frac{3}{2}})-9+4\exp(2\mathrm{i}\delta_{1+}^{\frac{1}{2}})$$

$$+\exp(2\mathrm{i}\delta_{1-}^{\frac{3}{2}})+2\exp(2\mathrm{i}\delta_{1-}^{\frac{1}{2}})]\cos\theta$$

$$\pm i[\exp(2i\delta_{1+}^{\frac{3}{2}})+2\exp(2i\delta_{1+}^{\frac{1}{2}})-\exp(2i\delta_{1-}^{\frac{3}{2}})$$

$$-2\exp(2i\delta_{1-}^{\frac{1}{2}})]\cos\theta|^2;$$

$$W_{\pm}(p^-, n^0)\sim|[\exp(2i\delta_0^{\frac{3}{2}})-\exp(2i\delta_0^{\frac{1}{2}})]$$

$$+[2\exp(2i\delta_{1+}^{\frac{3}{2}})$$

$$-2\exp(2i\delta_{1+}^{\frac{1}{2}})+\exp(2i\delta_{1-}^{\frac{3}{2}})-\exp(2i\delta_{1-}^{\frac{1}{2}})]\cos\theta$$

$$\pm i[\exp(2i\delta_{1+}^{\frac{3}{2}})-\exp(2i\delta_{1+}^{\frac{1}{2}})-\exp(2i\delta_{1-}^{\frac{3}{2}})$$

$$+\exp(2i\delta_{1-}^{\frac{1}{2}})]\sin\theta|^2.$$

39. 这两个核反应是彼此互逆的，或

$$n+p\rightleftharpoons d+\gamma. \qquad (1)$$

$$(A) \qquad (B)$$

关于反应(1)的细致平衡原理可写作

$$\frac{\bar{\sigma}_{A\to B}}{\bar{\sigma}_{B\to A}}=\frac{g_B p_B^2}{g_A p_A^2}. \qquad (2)$$

在方程(2)中，$\bar{\sigma}_{A\to B}$，$\bar{\sigma}_{B\to A}$是相应跃迁的截面，它已对速度的所有方向积分，对末态的所有自旋方向求和，并已对初态的速度方向和自旋方向求平均；p_A和p_B是在态A和态B中粒子相对运动的动量；g_A和g_B是这些态的自旋（和极化）的统计权重。

在我们的情形下，我们有

$$\bar{\sigma}_{A\to B}=\sigma_{俘获}\ (俘获截面),$$

$$\bar{\sigma}_{B\to A}=\sigma_{光离}\ (光致离解截面).$$

因为中子和质子的自旋是$\frac{1}{2}$，氘核的自旋为1，而光子有两个

极化态，所以我们有

$$g_A=\left(2\times\frac{1}{2}+1\right)^2=4,\quad g_B=(2\times1+1)\times2=6.$$

我们选取固定在氘核上的坐标系，这时有$p_B=p_\gamma=\hbar\omega/c$，其中$\omega$是光子的频率。容易证明，这个参考系实际上与态$A$和态$B$的质心系相同。确实，在精确的质心系中，按定义我们有

$$p_d+p_\gamma=0\quad\text{或}\quad p_d=p_\gamma=\hbar\omega/c,$$

所以在此参考系中氘核的速度（反之，这个参考系相对于氘核的速度）等于$v_d=p_d/2M=\hbar\omega/2Mc$。另一方面，若光子的能量$\hbar\omega$比$Mc^2$小得多，而且与氘核的结合能$\epsilon$不太接近（我们假设这些条件是满足的），则两个核子飞开的速度约为

$$v_n\approx v_p\sim\sqrt{\frac{\hbar\omega-\epsilon}{M}}\sim\sqrt{\frac{\hbar\omega}{M}},$$

所以

$$\frac{v_d}{v_n}\sim\sqrt{\frac{\hbar\omega}{Mc^2}}\ll1.$$

因此，两个参考系的相对速度的确比反应产物的速度小得多，因而我们可以假设这两个参考系是近似相同的。

这样一来，我们就有$p_A^2\approx2\mu E_A$，其中$\mu=M/2$是n-p系的约化质量，M是核子的质量，E_A是它们相对运动的能量（或者说，在质心系中的能量）。根据能量守恒定律，我们有$E_A=E_B$，而且显然有

$$E_B=\hbar\omega+(-\epsilon)=\hbar\omega-\epsilon.$$

因而有$p_A^2=M(\hbar\omega-\epsilon)$。

把所有这些结果总合起来，最后得到

$$\frac{\sigma_{\text{俘获}}}{\sigma_{\text{光离}}}=\frac{3}{2}\cdot\frac{\hbar\omega}{Mc^2}\cdot\frac{\hbar\omega}{\hbar\omega-\epsilon}.\tag{3}$$

应该强调，这一结果与关于反应机制的任何具体假设无关，它只是根据量子力学的可逆性（即，根据方程对时间反演的对称性）得到的。

40. 首先我们注意到，由于带电的π介子的静止能量比中性π介子的静止能量约大5MeV，而$(\pi^+ + \pi^-)$系统的结合能的最大可能值只有大约2keV

$$\left(E = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} = -\frac{\mu}{\mu_{电}} \cdot \frac{\mu_{电} e^4}{2\hbar^2} \approx -\frac{1}{2} \times 270(13.5\text{eV})\right.$$

$$\approx -1800\text{eV}.$$

这里未考虑由π介子的非库仑相互作用产生束缚态的可能。）不管l的值如何，本题所考虑的过程在能量上是可能的。

要找的选择定则起因于末态的两个π^0介子是全同粒子。的确因为π介子的自旋是整数（自旋=0），$\pi^0+\pi^0$系必须由对于两个介子对称的波函数来描述。又因为没有自旋函数（更确切地说，因为自旋波函数=1），所以波函数对两个π^0介子的坐标是对称的。容易证明，两粒子1和2的波函数的宇称与坐标函数的对称性相同（原点取在1，2两粒子联线的中点）；因此，$\pi^0+\pi^0$系的波函数ψ只能是偶的$(I=+1)$，利用轨道角动量波函数的宇称的关系式：$I=(-1)^l$，我们求得两个π^0介子相对运动的轨道角动量也只能是偶的。

现在，我们来讨论总角动量（在我们的情形下，它就是轨道角动量）的守恒，并由此得出结论：当初态的l为偶数时这个反应是可能的，但当初态的l是奇数时，则是不可能的。

还要注意，从我们的讨论不能得出π介子具有负的内禀宇称的结论，因为在初态和末态都有两个介子，所以总的内禀宇称就是+1。

41. 把角动量和宇称守恒定律以及泡利原理应用到所讨论的过程。氘核的总角动量J等于1.若考虑到关于π^-介子的角动量和自旋的假设值，则原来的$\pi^+ + d$系统的总角动量也等于1，最后的$n+n$系统的总角动量亦等于1。设两中子组成的系统的轨道角动量和自旋分别用L和S表示，我们看到，总角动量$J=1$($\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}$)的态可由下列四种方式实现：

（1） $L=0$, $S=1$； （2） $L=1$, $S=0$；

（3） $L=1$, $S=1$； （4） $L=2$, $S=1$。

对应于 $S=1$和 $S=0$ 的自旋函数，对于两个中子的自旋分别是对称和反对称的。而具有给定L 值的坐标函数的对称性与这些函数的宇称$(-1)^L$相同，因为坐标反演$\boldsymbol{r}_1\longrightarrow-\boldsymbol{r}_1$, $\boldsymbol{r}_2\longrightarrow-\boldsymbol{r}_2$相当于两个粒子的坐标的交换，在原点位于$(\boldsymbol{r}_1+\boldsymbol{r}_2)/2$的参考系中，偶$L$ 对应于中子坐标的对称函数，奇 L 对应于中子坐标的反对称函数。

由此直接推出：根据泡利原理，组合方式1，2和 4 为泡利原理所禁戒，因为坐标和自旋函数具有同样的对称性，因而总波函数对于两个中子的交换是对称的。

因此，考虑到泡利原理，只有第三种态是可能的，它对应于反对称的总波函数；由于$J=1$，事实上有三个这样的态。然而，跃迁到这样的态违反宇称守恒定律，因为末态是奇的［$(-1)^L=(-1)^1=-1$］，而按照我们的假设和宇称的加法规则，初态π^-+d是偶的。

然而，所考虑的过程发生的几率实际上是很大的，这是π^-介子是赝标量粒子（即具有负的内禀宇称）的一个证明。

42. 为使所考虑的过程在能量上是可能的，π^-和 π^0 介子的最小静止能量差，显然应等于氘核的结合能（$\approx$2.2MeV）与中子和质子的静质量能之差($\approx$1.25MeV)的和，即约等于 3.5MeV（考虑到π^-介子是在束缚态中被俘获的，因此，它不仅带有动能，而且从反应中“攫取”一些能量，虽然此能量很小，仅为几keV）。实际的静质量能之差近似地等于4.5MeV，所以此反应在能量上是可能的，但在此反应中产生的粒子将具有小的动量，这一点在以下的讨论中是重要的。

我们把角动量和宇称守恒定律及泡利原理（对子中子）应用于所讨论的过程。反应后粒子系（$n+n+\pi^0$）的总角动量J 必须等于初始粒子系（π^-+d）的总角动量，即等于1(见上题)。令

L和S表示二个中子组成的子系的轨道角动量与自旋，l表示π^0介子相对于这个子系的轨道角动量(更确切地说，相对于这个子系的质心的轨道角动量)，而这个质心与所有三个粒子组成的体系的质心近似地重合)。

首先，我们注意到，除了守恒定律和泡利原理所要求的严格的选择定则之外，还有另外一个事实，即中子和π^0介子的动量很小，这将大大地减少符合选择定则的跃迁几率（根据角动量守恒定律，所有三个动量p有相同的数量级)。的确，任何可能的跃迁矩阵元，在积分号下包含着一个介子-核子相互作用算符，它仅在核力力程大小的范围内，即在π介子的康普顿波长$\hbar/\mu c$范围内，才明显地不为零。此算符作用在介子和一个核子的波函数上。然而，这些波函数在原点附近所考虑的范围$a\sim\hbar/\mu c$内象$(pr_\pi/\hbar)^l$和$(pr_n/\hbar)^L$一样变化，所以允许跃迁的几率显然含有因子$(pa/\hbar)^{2(L+l)}$。

用下面的方法估计$(pa/\hbar)^2$的值是方便的。在最重要的情形中[这里，如米格达(Migdal)所指出的，由于终态的两个慢中子的相互作用，两个中子在一个小的夹角内以小的相对动能飞出，所以π^0介子飞出时所带的动量约为每个中子动量的两倍]，π^0介子实际上带走了全部“剩余”的动能$\Delta E\sim 4.5\mathrm{MeV}-3.5\mathrm{MeV}=1\mathrm{MeV}\sim\epsilon/2$，其中$\epsilon$是氘核的结合能；因$\mu\ll M$，所以$p^2\sim\mu\epsilon$，因此

$$\left(\frac{pa}{\hbar}\right)^2\sim\frac{\mu\epsilon}{\hbar^2}\left(\frac{\hbar}{\mu c}\right)^2=\frac{\epsilon}{\mu c^2}\sim\frac{1}{60}\ll 1.$$

末态中存在三个粒子，这使总角动量$J=1$、满足泡利原理和宇称守恒定律的态可能实现的方式的数目显著地增大（与上题相比)。然而，由于$(pa/\hbar)^2\ll 1$，我们以后只须考虑$(L+l)$为最小（因之几率为最大）的那些允许的跃迁。

我们讨论两种可能情况：

1) 带电的和中性的π介子有相同的内禀宇称。

在此情形下，宇称守恒定律只允许$L+l$取偶数值，因为$n+n$

$+\pi^0$系统的总轨道宇称$(-1)^{L+l}$，必须等于$+1$。如果我们取使$L+l=0$或2，$J=|\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}+\boldsymbol{l}|=1$的$L$，$S$和$l$的所有组合，便得到下列的态：

（1） $L=0$，$S=1$，$l=0$；（2） $L=1$，$S=0$，$l=1$；

（3） $L=1$，$S=1$，$l=1$；（4） $L=2$，$S=1$，$l=0$；

（5） $L=0$，$S=1$，$l=2$。

这五个组合之中，只有一个，即（3），满足泡利原理（见上题）。在此情形下，$L+l=2$，所以，若π^-和π^0介子有同样的宇称，则所讨论的反应的几率正比于$(pa/\hbar)^4$。

2） 带电的和中性的介子有相反的宇称。

在这种情形中，因为$(-1)^{L+l}=-1$，$L+l$必定是奇数。

如果我们只考虑最可几的跃迁，即取$L+l=1$，则对于$J=1$得下列态：

（1） $L=1$，$S=0$，$l=0$；（2） $L=1$，$S=1$，$l=0$；

（3） $L=0$，$S=0$，$l=1$；（4）$L=0$，$S=1$，$l=1$。

在这些态中，（2）和（3）为泡利原理所容许。

由于$L+l=1$，所以若π^0和π^-介子具有相反的宇称，则所讨论的反应的几率正比于$(pa/\hbar)^2$；换句话说，这反应的禁戒程度比第一种情形的要弱得多。

π^-介子被氘核俘获的实验表明，这个过程是通过反应

或
$$\pi^-+d\longrightarrow n+n$$
$$\pi^-+d\longrightarrow n+n+\gamma$$

进行的，而不涉及π^0介子。这意味着反应

$$\pi^-+d\longrightarrow n+n+\pi^0$$

被很强地禁戒。

由此我们得出结论，第一种情形是成立的，即带电的和中性的π介子有相同的宇称。附带地说，所有实验数据都表明π介子的内禀宇称是-1。

13． 把总角动量和宇称的守恒定律以及对质子的泡利原理

应用于下列反应：

$$p+p\longrightarrow p+p+\pi^0。 \qquad (1)$$

按定义，π^0 介子是赝标量介子这个事实意味着它的自旋等于零，内禀宇称是-1。在我们所考虑的情形下，反应(1)的末态是轨道角动量$L=1$，因而轨道宇称为$(-1)^L=-1$的态。所以，末态的总宇称是$(-1)(-1)=+1$.

由于轨道宇称与轨道角动量L之间的一一对应关系，宇称守恒定律从初态质子相对运动的波函数中，只挑选出L为偶数［因而宇称$(-1)^L=+1$］的球谐函数。

我们不止一次地说过，两个全同粒子系的轨道宇称与其波函数相对于坐标的对称性相同；换句话说，$p+p$系的初始波函数对于坐标必须是对称的，因而根据泡利原理，对于质子的自旋必须是反对称的。所以这个波函数应该对应于总自旋$S=0$，因而总角动量（$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}$）必为偶数。

另一方面，因为我们已假设$L=0$，所以泡利原理只允许末态有$S=0$的质子态，这个态对自旋是反对称的。根据角动量的加法规则，对于末态我们得到奇数值$J=1$，这违背总角动量守恒定律。

这就是所要证明的。

44. 核子的同位旋$\tau=\frac{1}{2}$。因此，与角动量的加法规则完全类似，两个核子组成的系统的同位旋T必等于1或等于0。第一个本征值是三重简并的，它的T_3有三个可能值$+1$，0和-1。三对(T,T_3)中的每一个都对应于一个同位旋函数，它对于两个核子是对称的。本征值$T=0$相应于一个反对称的同位旋函数。

我们注意到，整个问题与组合两自旋$S=\frac{1}{2}$的问题完全相似。因此，我们可以将归一化的同位旋函数和相应的T与T_3的数值列成下表；这个表是很清楚的，不必作更多的解释；表中指明每个态的物理意义，1和2表示两个核子的同位旋变量τ_3。

T	T_3	同位旋函数	对称性	解释
1	+1	$\Psi^1_1=\psi^{\frac{1}{2}}_{\frac{1}{2}}(1)\psi^{\frac{1}{2}}_{\frac{1}{2}}(2)$	对称	2个质子
	0	$\Psi^1_0=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi^{\frac{1}{2}}_{\frac{1}{2}}(1)\psi^{\frac{1}{2}}_{-\frac{1}{2}}(2)+\psi^{\frac{1}{2}}_{\frac{1}{2}}(2)\psi^{\frac{1}{2}}_{-\frac{1}{2}}(1)\right]$	对称	质子+中子
	−1	$\Psi^1_{-1}=\psi^{\frac{1}{2}}_{-\frac{1}{2}}(1)\psi^{\frac{1}{2}}_{-\frac{1}{2}}(2)$	对称	2个中子
0	0	$\Psi^0_0=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi^{\frac{1}{2}}_{\frac{1}{2}}(1)\psi^{\frac{1}{2}}_{-\frac{1}{2}}(2)-\psi^{\frac{1}{2}}_{\frac{1}{2}}(2)\psi^{\frac{1}{2}}_{-\frac{1}{2}}(1)\right]$	反对称	质子+中子

特别是，从这个表可以看出，对于氘核（它的坐标-自旋态是$^3S+^3D$）有$T=0$。的确，它的波函数对应于$L=0$和$L=2$，即它是偶的；它的自旋为1，因而它对两个核子的自旋也是对称的。由于总波函数是一乘积，所以推广的泡利原理要求它对核子的同位旋变量是反对称的，这个要求只有当$T=0$时才能满足。

因此，我们可以说氘核的同位旋函数是一“同位旋标量”，亦即就其变换性质而言，它简单地是一个数，而核子的同位旋函数却是一个二分量的矢量，即一阶旋量；又例如，π介子的同位旋函数则是具有三个分量的普通矢量。

45. 因为在这两个反应的初态和末态都有氘核存在，又因为对于氘核$T=T_3=0$，所以它将不参与同位旋的相加。因此，在反应的两边，可以完全不考虑它。换句话说，对于质子p“离解”为核子和π介子的过程：

$$p\longrightarrow \text{核子}\left(T=\frac{1}{2}\right)+\pi\text{介子}(T=1), \qquad (1)$$

氘核起着“催化剂”的作用。

反应（1）的左边有$T=T_3=\frac{1}{2}$。因为总同位旋和它的第三分量（即电荷）是守恒的，所以在右边T和T_3必须有同样的值。将同位旋函数$\Psi^{\frac{1}{2}}_{\frac{1}{2}}$按“子系”（即核子和$\pi$介子）的同位旋函数展开，我们有

$$\Psi_{\frac{3}{2}}^{\frac{3}{2}}=-\sqrt{\frac{1}{3}}\psi_{\frac{3}{2}}^{\frac{3}{2}}\psi_0^0+\sqrt{\frac{2}{3}}\psi_{\frac{3}{2}}^{\frac{1}{2}}\psi_0^1.$$

叠加系数的平方$\left(\frac{1}{3}\text{和}\frac{2}{3}\right)$显然给出所要求的“离解”过程

$$p\longrightarrow p+\pi^0 \text{ 和 } p\longrightarrow n+\pi^+$$

的相对几率，因而也就给出所要求的截面比。

46. 由于对于氘核 $T=T_3=0$，所以反应(1)的左边对应于 $T=1$，$T_3=1$，而反应(2)的左边对应于$T=1$，$T_3=0$。

显然，电荷守恒定律（$T_3=$常数）总是满足的。反应(1)和(2)的末态具有完全确定的总同位旋T的值，分别由同位旋函数Ψ_1^1和Ψ_0^1描述。初态的同位旋函数是“子系”（即核子）的同位旋函数之积，而且可以写成具有确定T值的两个核子系统的函数的叠加形式（利用角动量加法公式）：

反应(1)

$$\psi_{\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}\psi_{\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}=\Psi_1^1$$

反应(2)

$$\psi_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}\psi_{\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}=-\sqrt{\frac{1}{2}}\Psi_0^0+\sqrt{\frac{1}{2}}\Psi_0^1.$$

根据T和T_3的守恒定律，$(p+p)$态中的两个核子正好给出“同位旋三重态”$T=1$，这是反应(1)所要求的，而在$(n+p)$态中反应(2)所要求的三重态$T=1(T_3=0)$存在的几率为$\frac{1}{2}$。因为已假设截面表达式中的其他因子完全相同，所以两截面之比就等于初态中所需的同位旋三重态的几率之比，此比值等于2，这就是所要证明的。

47. 参考前面两题。分支比是2。

48. 要求截面相等，表示核子-核子和核子-π介子相互作用具有电荷对称性。亦即，在作同时替换：$n\to p$，$p\to n$，$\pi^+\to$

π^-、$\pi^-\to\pi^+$时，这些相互作用，相应的跃迁几率等具有不变性。考虑推广的泡利原理，当同位旋相加时，由同位旋函数的变换规则可直接推出截面是相等的。

确实，由于两个质子或两个中子的波函数对它们的自旋和坐标必须是反对称的，所以对它们的同位旋变量必须是对称的，也就是说，它必须对应于总同位旋$T=1$。[这个结论也可以很简单地从下述事实得到，即：$T\geqslant|T_3|$。对于$(p+p)$，$T_3=+1$；对于$(n+n)$，$T_3=-1$。] 在这种情形下，$(p+p)$系的同位旋函数与π^+的同位旋函数相同（两者都是Ψ_1^1），而$(n+n)$系的同位旋函数与π^-的相同（两者都是Ψ_{-1}^1）。因此，反应（1）和（2）的右边对应于同样的同位旋函数$\Psi_1^1\Psi_{-1}^1$，所以从初始的同位旋态$\psi_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}\psi_{\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}$到末态的跃迁的矩阵元，以及有效截面（它正比于这些矩阵元的绝对值的平方）都是相同的。

§10. 产生算符和湮没算符；密度矩阵

2. $|\Psi\rangle=\int\cdots\int \mathrm{d}1\cdots\mathrm{d}N|i_1,\cdots,i_N\rangle\langle i_1,\cdots,i_N|\Psi\rangle$,

$$\hat{\Omega}=\int\cdots\int \mathrm{d}1\cdots\mathrm{d}N\mathrm{d}1'\cdots\mathrm{d}N'$$
$$|i_1,\cdots,i_N\rangle\langle i_1,\cdots,i_N|\hat{\Omega}|i_1',\cdots,i_N'\rangle\langle i_1',\cdots,i_N'|$$

其中$\int \mathrm{d}j$表示积分遍及第 j 个粒子的空间坐标（且当必要时对它的自旋变量求和）。

3. $|i_1,\cdots,i_N\rangle=\frac{1}{\sqrt{N!}}\hat{a}^+(i_1)\hat{a}^+(i_2)\cdots\hat{a}^+(i_N)|0\rangle$

7. $\hat{\Omega}=\int \mathrm{d}i\mathrm{d}i'\langle i|\hat{\Omega}^{(1)}|i'\rangle\hat{a}^+(i)\hat{a}(i')$

$$+\frac{1}{2}\int \mathrm{d}i\mathrm{d}j\mathrm{d}i'\mathrm{d}j'\langle i,j|\hat{\Omega}^{(2)}|i',j'\rangle\hat{a}^+(i)\hat{a}^+(j)\hat{a}(j')\hat{a}(i')$$

8. $\hat{\Omega}=\sum_i \frac{\hbar^2k^2}{2\mu}\hat{a}_k^+\hat{a}_k+\frac{1}{v}\sum_{k,q}V(q)\hat{a}_k^+\hat{a}_{k-q}$

$$+\frac{1}{2v}\sum_{k,k',q}U(q)\hat{a}_k^+\hat{a}_{k'}^+\hat{a}_{k'+q}\hat{a}_{k-q} \qquad (3)$$

式中

$$V(q)=\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\ \exp[-\mathrm{i}(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r})]V(\boldsymbol{r})$$

$$U(q)=\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\ \exp[-\mathrm{i}(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r})]U(\boldsymbol{r}) \qquad (4)$$

9. $\hat{a}^+(i)\hat{a}(i)|i_1,\cdots,i_N\rangle=N(i)|i_1,\cdots,i_N\rangle$

其中$N(i)$是在数$i_1,\cdots,i_N$中出现 i 的次数。

算符$\hat{n}(i)$是占有数算符.

10. 利用如下事实: 如果$|\alpha\rangle$是$\hat{A}$的一个本征态，而且，$[\hat{A},\hat{B}]_-|\alpha\rangle=\epsilon\hat{B}|\alpha\rangle$，则$\hat{B}|\alpha\rangle$也是$\hat{A}$的一个本征态，这两个本征态对应的本征值相差$\epsilon$.

11. $\Psi^+(\Psi)$是一个在r点产生（湮没）一个粒子的算符.

12. $$\hat{H}=\int\left\{\frac{\hbar^2}{2\mu}[\nabla\Psi^+(\boldsymbol{r})\cdot\nabla\Psi(\boldsymbol{r})]+V(\boldsymbol{r})\Psi^+(\boldsymbol{r})\Psi(\boldsymbol{r})\right\}$$
$$\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}+\frac{1}{2}\iint\Psi^+(\boldsymbol{r})\Psi^+(\boldsymbol{r}')U(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\Psi(\boldsymbol{r}')\Psi(\boldsymbol{r})$$
$$\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'$$

13. 利用变换

$$a\to\hat{\alpha}-\lambda,\quad a^+\to\hat{\alpha}^+-\lambda$$

可求得精确的能级，这个变换引入一对新的玻色子算符$\hat{\alpha}$和$\hat{\alpha}^+$. 于是哈密顿量为

$$\hat{H}=\epsilon\hat{\alpha}^+\hat{\alpha}-\epsilon\lambda^2,$$

它具有本征值

$$E_n=n\epsilon-\epsilon\lambda^2. \qquad (1)$$

从微扰论可得出同样的答案. 未受微扰的本征值和本征函数是（参考§10.3题）

$$E_n^{(0)}=n\epsilon,\quad |\psi_n\rangle=\frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n|0\rangle,$$

而对于能量本征值的微扰是

$$E_n^{(1)}=\langle\psi_n|\hat{H}_1|\psi_n\rangle,\quad E_n^{(2)}=\sum_m{}'\frac{|\langle\psi_n|\hat{H}_1|\psi_m\rangle|^2}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}$$

而答案(1)立即可以得到.

14* 利用§1.8题的步骤，我们能通过方程

$$a_i=\frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\sqrt{\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)}x_i+\sqrt{\left(\frac{\hbar}{\mu\omega}\right)}\frac{\partial}{\partial x_i}\right\},$$

$$a_i^\dagger=\frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\sqrt{\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)}x_i-\sqrt{\left(\frac{\hbar}{\mu\omega}\right)}\frac{\partial}{\partial x_i}\right\}$$

$$i=1,2 \tag{1}$$

引入这两个振子的产生算符和湮没算符。将这两式代入哈密顿量，则得

$$\hat{H}=\hbar\omega\{\hat{a}_1^+\hat{a}_1+\hat{a}_2^+\hat{a}_2+1\}+\frac{1}{2}\lambda\hbar\omega\{\hat{a}_1\hat{a}_2+\hat{a}_1^+\hat{a}_2+\hat{a}_1\hat{a}_2^+-\hat{a}_1^+\hat{a}_2^+\}. \tag{2}$$

这个哈密顿量对数算符$\hat{n}_1(\equiv\hat{a}_1^+\hat{a}_1)$和$\hat{n}_2(\equiv\hat{a}_2^+\hat{a}_2)$不是对角的。可以采用两种不同的方法，或者将原来的哈密顿量对角化，或者将哈密顿量(2)对角化。

在第一种情况下，我们利用坐标轴转动引入新的变量y_1和y_2:

$$x_1=\alpha y_1+\beta y_2,\quad x_2=-\beta y_1+\alpha y_2,\quad \alpha^2+\beta^2=1. \tag{3}$$

如果我们取

$$\alpha=\beta=\frac{1}{\sqrt{2}}, \tag{4}$$

则哈密顿量变成

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial y_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_2^2}\right)+\frac{1}{2}\mu\omega_1^2y_1^2+\frac{1}{2}\mu\omega_2^2y_2^2 \tag{5}$$

其中

$$\omega_1^2=\omega^2(1-\lambda),\quad \omega_2^2=\omega^2(1+\lambda) \tag{6}$$

并且通过下面两式引入新的湮没算符和产生算符：

$$b_i=\frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\sqrt{\left(\frac{\mu\omega_i}{\hbar}\right)}y_i+\sqrt{\left(\frac{\hbar}{\mu\omega_i}\right)}\frac{\partial}{\partial y_i}\right\},$$

$$b_i^+=\frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\sqrt{\left(\frac{\mu\omega_i}{\hbar}\right)}y_i-\sqrt{\left(\frac{\hbar}{\mu\omega_i}\right)}\frac{\partial}{\partial y_i}\right\},$$

$$i=1,2, \tag{7}$$

哈密顿量就变成

$$\hat{H}=\hbar\omega_1\left(b_1^+b_1+\frac{1}{2}\right)+\hbar\omega_2\left(b_2^+b_2+\frac{1}{2}\right), \tag{8}$$

它具有能级

$$E_{n_1n_2}=\left(n_1+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_1+\left(n_2+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_2. \tag{9}$$

得到结果(9)的第二种方法是在方程(2)中引进新的湮没算符和产生算符：

$$\begin{aligned}\hat{a}_1&=\alpha\hat{c}_1+\beta\hat{c}_2+\gamma\hat{c}_1^{+}+\delta\hat{c}_2^{+},\\ \hat{a}_2&=\xi\hat{c}_1+\eta\hat{c}_2+\zeta\hat{c}_1^{+}+\theta\hat{c}_2^{+}.\end{aligned} \tag{10}$$

(10)式中的 α，β，γ，δ，ξ，η，ζ，θ 都是实数。首先，根据 $\hat{c}_i$ 和 $\hat{c}_i^{+}$ 必须满足玻色子的对易关系（见§10.4题到§10.6题），得到

$$\begin{aligned}&\alpha^2+\beta^2-\gamma^2-\delta^2=\xi^2+\eta^2-\zeta^2-\theta^2=1,\\ &\gamma\xi+\delta\eta-\alpha\zeta-\beta\theta=0.\end{aligned} \tag{11}$$

把表达式(10)代入哈密顿量(2)，有

$$\begin{aligned}\frac{2\hat{H}}{\lambda\hbar\omega}=&\hat{c}_1^{+}\hat{c}_1\{(2/\lambda)(\alpha^2+\gamma^2+\xi^2+\zeta^2)+2(\alpha+\gamma)(\xi+\zeta)\}\\ &+\hat{c}_2^{+}\hat{c}_2\{(2/\lambda)(\beta^2+\delta^2+\eta^2+\theta^2)+2(\beta+\delta)(\eta+\theta)\}\\ &+(\hat{c}_1^{+2}+\hat{c}_1^{2})\{(2/\lambda)(\alpha\gamma+\xi\zeta)+(\alpha+\gamma)(\xi+\zeta)\}\\ &+(\hat{c}_2^{+2}+\hat{c}_2^{2})\{(2/\lambda)(\beta\delta+\eta\theta)+(\beta+\delta)(\eta+\theta)\}\\ &+(\hat{c}_1^{+}\hat{c}_2+\hat{c}_1\hat{c}_2^{+})\{(2/\lambda)(\alpha\beta+\gamma\delta+\xi\eta+\zeta\theta)\\ &+(\alpha+\gamma)(\eta+\theta)+(\beta+\delta)(\xi+\zeta)\}\\ &+(\hat{c}_1^{+}\hat{c}_2^{+}+\hat{c}_1\hat{c}_2)\{(2/\lambda)(\alpha\delta+\beta\gamma+\xi\theta+\eta\zeta)\\ &+(\alpha+\gamma)(\eta+\theta)+(\beta+\delta)(\xi+\zeta)\}\\ &+(2/\lambda)(\alpha^2+\beta^2+\xi^2+\eta^2+1)+(\alpha+\gamma)(\xi+\zeta)\\ &+(\beta+\delta)(\eta+\theta).\end{aligned} \tag{12}$$

我们见到，当取

$$\alpha=-\xi=-\frac{1}{2\sqrt{2}}\{(1-\lambda)^{-1/4}-(1-\lambda)^{1/4}\},$$

$$\beta=\eta=-\frac{1}{2\sqrt{2}}\{(1+\lambda)^{-1/4}-(1+\lambda)^{1/4}\},$$

$$\gamma=-\zeta=\frac{1}{2\sqrt{2}}\{(1-\lambda)^{-1/4}-(1-\lambda)^{1/4}\},$$

$$\delta=\theta=\frac{1}{2\sqrt{2}}\{(1+\lambda)^{-1/4}-(1+\lambda)^{1/4}\} \tag{13}$$

时，不但（11）式得到满足，而且可以去掉 $\hat{H}$ 中对占有数算符 $\hat{c}_1^{+}\hat{c}_1$ 为非对角的项。首先注意到，令 $\alpha=-\xi$，$\beta=\eta$，$\gamma=-\zeta$，$\delta=\theta$，就可以满足（11）式中三个方程中的两个，由此可得上述结果。然后，处理其余几个方程，我们得

$$(4/\lambda)\beta\delta\sqrt{(1+\lambda)}+(4/\lambda)\alpha\gamma\sqrt{(1-\lambda)}=1. \tag{14}$$

若我们令（14）式左边两项中的每一项都等于 $\frac{1}{2}$，则得（13）式的结果。

将结果（13）代入哈密顿量（12）中，我们得

$$\hat{H}=\hbar\omega_1\hat{c}_1^{+}\hat{c}_1+\hbar\omega_2\hat{c}_2^{+}\hat{c}_2+\frac{1}{2}\hbar(\omega_1+\omega_2),$$

此式与（8）式相同。

15．这些条件是

$$u_k^2+v_k^2=1,\quad u_{-k}^2+v_{-k}^2=1,\quad u_kv_{-k}+u_{-k}v_k=0, \tag{2}$$

由此可知这些系数能够用一个参数 θ_k 表征如下：

$$u_k=\cos\theta_k,\quad v_k=\sin\theta_k,\quad u_{-k}=\cos\theta_k,\quad v_{-k}=-\sin\theta_k, \tag{3}$$

这里我们利用了恒等变换应是变换组（1）的一部分这一事实。

$$\langle 0|\hat{a}_k^{+}\hat{a}_k|0\rangle=\frac{v_k^2}{u_ku_{-k}-v_kv_{-k}}=\sin^2\theta_k \tag{4}$$

16．在这种情况下，取代上题中的(2)式，(3)式和(4)式，我们有

$$u_k^2-v_k^2=1,\quad u_{-k}^2-v_{-k}^2=1,\quad u_kv_{-k}-u_{-k}v_k=0, \tag{2'}$$

因而

$$u_k=\cosh\varphi_k,\quad v_k=\sinh\varphi_k,$$
$$u_{-k}=\cosh\varphi_k,\quad v_{-k}=\sinh\varphi_k. \tag{3'}$$

$$\langle 0|\hat{a}_k^+\hat{a}_k|0\rangle=\sinh^2\varphi_k. \tag{1'}$$

17* 假如没有相互作用，我们就可以利用§10.8题的算符a_k，$\hat{a}_k^+$(见§10.8题)；利用这些算符可将哈密顿量表示为

$$\hat{H}_0=\sum_k \frac{\hbar^2k^2}{2\mu}\hat{a}_k^+\hat{a}_k, \tag{3}$$

它具有本征值

$$E=\sum_k \frac{\hbar^2k^2}{2\mu}n_k^{(0)}, \tag{4}$$

其中$n_k^{(0)}$是整数，是占有数算符$\hat{a}_k^+\hat{a}_k$的本征值。

显然，基态是$n_0^{(0)}=N$，$n_k^{(0)}=0(k\neq 0)$的态。如果相互作用很弱，我们可以预期，对于低能态在$k=0$（零动量）的态中的粒子数仍很大，更确切地说，$\hat{a}_0^+\hat{a}_0$的期望值与粒子的总数N同数量级。因为$\hat{a}_0\hat{a}_0^+=\hat{a}_0^+\hat{a}_0+1$，而且如果我们取$N$远大于1（所有物理体系都是这样的），我们见到$\hat{a}_0^+\hat{a}_0$和$\hat{a}_0\hat{a}_0^+$实际上是相同的。所以，作为一个很好的近似，我们可以把$\hat{a}_0$和$\hat{a}_0^+$看作一个数，并令它们等于$\sqrt{n_0}$，这里n_0是$\hat{a}_0^+\hat{a}_0$的期望值。

现在，让我们用$\hat{a}_k$和$\hat{a}_k^+$来表示哈密顿量（见§10.8题的(3)式）。

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}_1, \tag{5}$$

$$\hat{H}_1=\frac{1}{2v}\sum_{k,k'q}U(q)\hat{a}_k^+\hat{a}_{k'}^+\hat{a}_{k'+q}\hat{a}_{k-q} \tag{6}$$

在算符$\hat{H}_1$中，当$k=k'=q=0$时，只有一项具有四个算符$\hat{a}_0$或$\hat{a}_0^+$；没有具有三个这种算符的项；有具有两个，一个或零个这种算符的项。具有两个这种算符的项是

$$-\frac{1}{2v}\sum_q{}'U(q)\hat{a}_0^+\hat{a}_0^+\hat{a}_q\hat{a}_{-q}+\frac{1}{v}\sum_q{}'U(0)\hat{a}_0^+\hat{a}_0\hat{a}_q^+\hat{a}_q$$

$$+\frac{1}{v}\sum_q{}'U(q)\hat{a}_0^+\hat{a}_0\hat{a}_q^+\hat{a}_q+\frac{1}{2v}\sum_q{}'\hat{a}_0\hat{a}_0\hat{a}_q^+\hat{a}_{-q}^+, \tag{7}$$

其中求和号上加“撇”表示带$q=0$的项除外，这里我们还利用了

$U(q)$是q的绝对值的函数这一事实。现在令$\hat{a}_0=\hat{a}_0^+=\sqrt{n_0}$，并忽略具有少于两个零动量算符的项，我们得到$\left(\sum \hat{a}_q^+\hat{a}_q=n_0+\sum{}'\right.$ $\left.\hat{a}_q^+\hat{a}_q=N\right.$是粒子的总数，对于形为（5）式的哈密顿量它是一个常数。$\left.\right)$

$$\hat{H}=\sum\frac{\hbar^2q^2}{2\mu}\hat{a}_q^+\hat{a}_q+\frac{n_0^2}{2v}U(0)\sum{}'\hat{a}^+\hat{a}_q$$

$$+\frac{n_0}{2v}\sum{}'U(q)\{\hat{a}_q^+\hat{a}_{-q}^++a_qa_{-q}+2\hat{a}_q^+\hat{a}_q\}. \qquad (8)$$

或

$$\hat{H}=\frac{N^2}{2v}U(0)+\sum_q\frac{\hbar^2q^2}{2\mu}\hat{a}_q^+\hat{a}_q+\frac{n_0}{2v}\sum{}'U(q)\{\hat{a}_q^+\hat{a}_{-q}^+$$

$$+\hat{a}_q\hat{a}_{-q}+2\hat{a}_q^+\hat{a}_q\}. \qquad (9)$$

现在让我们应用前面两题中讨论过的那种变换：

$$\hat{b}_q=u_q\hat{a}_q+v_q\hat{a}_{-q}^+. \qquad (10)$$

在前题中我们看到这个变换[它是博戈柳博夫首先引入的，因此常被称为博戈柳博夫变换]是一个正则变换，即当

$$u_q=u_{-q}=\cosh\varphi_q,\quad v_q=v_{-q}=\sinh\varphi_q \qquad (11)$$

时，它保证$\hat{b}_q$，$\hat{b}_q^+$仍是玻色子算符。将(11)式代入变换式(10)并完成这个变换，我们得到哈密顿量的表示式如下：

$$\hat{H}=\frac{N^2}{2v}U(0)+\sum_q{}'\hat{b}_q\hat{b}_q\left\{\frac{\hbar^2q^2}{2\mu}(\cosh^2\varphi_q+\sinh^2\varphi_q)\right.$$

$$\left.+\frac{n_0}{v}U(q)(\cosh^2\varphi_q+\sinh\varphi_q-2\cosh\varphi_q\sinh\varphi_q)\right\}$$

$$+\sum_q{}'(\hat{b}_q\hat{b}_{-q}+\hat{b}_q^+\hat{b}_{-q}^+)\left\{-\frac{\hbar^2q^2}{2\mu}\sinh\varphi_q\cosh\varphi_q\right.$$

$$\left.+\frac{n_0}{2v}U(q)(\cosh^2\varphi_q+\sinh^2\varphi_q-2\sinh\varphi_q\cosh\varphi_q)\right\}$$

$$+\sum_q{}' \frac{\hbar^2 q^2}{2\mu}\sinh^2\varphi_q+\frac{n_0}{v}\sum_q{}' U(q)(\sinh^2\varphi_q$$

$$-\cosh\varphi_q\sinh\varphi_q). \tag{12}$$

因此，若设

$$\cosh^2\varphi_q+\sinh^2\varphi_q-2\sinh\varphi_q\cosh\varphi_q=2\alpha\sinh\varphi_q\cosh\varphi_q \tag{13}$$

其中

$$\alpha=\alpha(q)=\frac{v\hbar^2q^2}{2\mu n_0U(q)}, \tag{14}$$

或

$$\tanh\varphi_q=\alpha+1-\sqrt{\alpha^2+2\alpha}, \tag{15}$$

则具有b_qb_{-q}和$b_q^+b_{-q}^+$的项将消失。将（15）式代入（12）式，则得

$$H=E_0+\sum_q{}' \varepsilon_q b_q^+b_q, \tag{16}$$

其中

$$E_0=-\frac{N^2}{2v}U(0)+\frac{1}{2}\sum_q{}' \frac{n_0U(q)}{v}\{-1-\alpha+\sqrt{(\alpha^2+2\alpha)}\}, \tag{17}$$

以及

$$\varepsilon_q=\frac{\hbar^2q^2}{2\mu}\left(\frac{\alpha+2}{\alpha}\right)^{1/2}. \tag{18}$$

我们注意到当$\alpha\gg1$时，$\varepsilon_q\approx\hbar^2q^2/2\mu$，而(16)式在本质上是自由的玻色子体系的哈密顿量[参考(3)式]。在$\alpha(q)\to0$的极限情况下，我们得到

$$\varepsilon_q\to\hbar sq, \tag{19}$$

其中

$$s=\left[\frac{n_0U(0)}{\mu v}\right]^{1/2}\approx\left[\frac{NU(0)}{\mu v}\right]^{1/2}. \tag{20}$$

（19）式给出声波的能量．当然，为使基态是稳定的，必须$U(0)>0$，或[如果我们利用§10.8题的(4)式]

$$\int U(r)\mathrm{d}^3r>0, \tag{21}$$

这意味着玻色子之间的相互作用必须基本上是排斥的相互作用．

准粒子的激发谱（18）与液氦中的元激发谱有些相似．

18*．引入一组矩阵a_{ij}使得

$$\sum_i a_{ij}a^*_{ik}=\delta_{jk}=\sum_i a^*_{ij}a_{ki}. \tag{3}$$

在这种情况下，变换

$$\hat{a}_i=\sum_k a_{ki}\hat{b}_k \tag{4}$$

是正则变换，这是很容易验证的．

将变换(4)代入哈密顿量(1)，我们得

$$\hat{H}=\sum_{i,j,k,l} L_{ij}a^*_{ki}a_{lj}\hat{b}^+_k\hat{b}_l \tag{5}$$

如果我们从必要条件

$$\sum_{i,j} L_{ij}a^*_{ki}a_{lj}=E_k\delta_{kl} \tag{6}$$

确定a_{ij}，便得表达式(2)．这样便把问题归结为把二次型化为对角形式．从（6）式可知E_k是下面的久期方程的本征值

$$|L_{ij}-E\delta_{ij}|=0. \tag{7}$$

19*．本题的解与上题类似．在这种情况下，我们考虑变换（参考§10.16题和§10.17题的解）

$$\hat{b}_i=\sum_j(\alpha_{ij}\hat{a}_j+\beta_{ij}\hat{a}^+_j). \tag{4}$$

为使变换式（4）是正则的，α_{ij}和β_{ij}必须满足下列关系式：

$$\sum_j(\alpha_{ij}\alpha^*_{kj}-\beta_{ij}\beta^*_{kj})=\delta_{ik},\quad \sum_j(\alpha_{ij}\beta_{kj}-\beta_{ij}\alpha_{kj})=0. \tag{5}$$

变换式（4）的逆为

$$a_i=\sum_j(\alpha^*_{ij}b_j-\beta^*_{ij}b^+_j)。\qquad(6)$$

将（6）式代入哈密顿量（1）式便得哈密顿量（3）式，只要α_{ij}，β_{ij}和E_i满足下列方程：

$$\sum_k\{(E_i\delta_{jk}-L^*_{jk})\alpha_{ik}+M^*_{kj}\beta_{ik}\}=0,$$

$$\sum_k\{M_{kj}\alpha_{ik}+(E_i\delta_{jk}+L_{jk})\beta_{ik}\}=0,\qquad(7)$$

即E_i是久期方程

$$\begin{vmatrix} E\delta_{ij}-L^*_{ij} & M^*_{ij} \\ M_{kj} & E\delta_{kl}+L_{kl} \end{vmatrix}=0\qquad(8)$$

的本征值。基态能量E_0由方程

$$E_0=-\sum_{k,l}E_k|\beta_{kl}|^2\qquad(9)$$

给出。注意，如果所有的$M_{ij}=0$，本题便化为上题，在这种情况下可令所有的$\beta_{ij}=0$，因而方程(8)化为上题的方程(7)。

20．(i) A的期望值由下式给出：

$$\langle\hat{A}\rangle=\iint\Psi^*(q,x)\hat{A}\Psi(q,x)\mathrm{d}q\mathrm{d}x,\qquad(2)$$

式中$\mathrm{d}x$和$\mathrm{d}q$分别表示积分遍及较小体系的全部坐标和较大体系的余部的坐标。如果利用$\hat{\rho}$的定义式(1)，我们得

$$\langle\hat{A}\rangle=\iint\langle x'|\hat{\rho}|x\rangle\mathrm{d}x\langle x|\hat{A}|x'\rangle\mathrm{d}x'=\mathrm{Tr}\hat{\rho}\hat{A}。\qquad(3)$$

(ii) 利用取$\hat{A}=1$的方程(3)，我们得

$$\mathrm{Tr}\,\hat{\rho}=\int\langle x|\hat{\rho}|x\rangle\mathrm{d}x=1,\qquad(4)$$

此式也可直接从定义式(1)和$\Psi(q,x)$的归一化得出。

(iii) 设 $\varphi_n(x,t)$ 是 $\hat{H}$ 的完全的正交归一的含时本征函数集，即

$$i\hbar\frac{\partial\varphi_n}{\partial t}=\hat{H}\varphi_n. \tag{5}$$

现将$\langle x|\hat{\rho}|x'\rangle$按$\varphi_n(x,t)$展开如下

$$\langle x|\hat{\rho}|x'\rangle=\sum_{m,n}a_{mn}\varphi_m(x,t)\varphi_n^*(x',t). \tag{6}$$

首先，我们指出，a_{mn} 给出 φ 表象中的密度矩阵，其次，我们可以取$\langle x|\hat{\rho}|x'\rangle$的时间导数，得

$$\begin{aligned}i\hbar\langle x|\dot{\hat{\rho}}|x'\rangle&=\sum_{m,n}a_{mn}i\hbar\{\varphi_n^*(x,t)\dot{\varphi}_m(x,t)\\&\quad+\dot{\varphi}_n^*(x',t)\varphi_m(x,t)\}\\&=\sum_{m,n}a_{mn}\int\{\varphi_n^*(x',t)\langle x|\hat{H}|x''\rangle dx''\varphi_m(x'',t)\\&\quad-\varphi_m(x,t)\varphi_n^*(x'',t)dx''\langle x''|\hat{H}|x'\rangle\}\\&=\int\{\langle x|\hat{H}|x''\rangle dx''\langle x''|\hat{\rho}|x'\rangle\\&\quad-\langle x|\hat{\rho}|x''\rangle dx''\langle x''|\hat{H}|x'\rangle\}\\&=\langle x|\hat{H}\hat{\rho}-\hat{\rho}\hat{H}|x'\rangle,\end{aligned} \tag{7}$$

或

$$i\hbar\dot{\hat{\rho}}=[\hat{H},\hat{\rho}]_-. \tag{8}$$

21. 密度矩阵为[参考上题的(1)式]

$$\langle x|\hat{\rho}|x'\rangle=\chi^*(x')\chi(x), \tag{3}$$

因此

$$\begin{aligned}\langle x|\hat{\rho}^2|x'\rangle&=\int\langle x|\hat{\rho}|x''\rangle dx''\langle x''|\hat{\rho}|x'\rangle\\&=\int\chi^*(x'')\chi(x)dx''\chi^*(x')\chi(x'')\\&=\chi^*(x')\chi(x)=\langle x|\hat{\rho}|x'\rangle.\end{aligned} \tag{4}$$

证明充分性的步骤如下。设 $\psi_n(x)$ 是一个完全正交归一集，让我们将 $\langle x|\hat{\rho}|x'\rangle$ 展成

$$\langle x|\hat{\rho}|x'\rangle=\sum_{m,n}c_{m,n}\psi_m(x)\psi^*(x')。\tag{5}$$

现在让我们假定所选的集合 $\psi_n(x)$ 能使 $\hat{\rho}$ 对角化，即

$$c_m=c_m\delta_{mn}。\tag{6}$$

如果 $\hat{\rho}$ 是对角的，则 $\hat{\rho}^2$ 也是对角的，所以，(2)式意味着

$$c_m^2=c_m,\tag{7}$$

由此可知，

$$要么\ c_m=1，要么\ c_m=0。\tag{8}$$

从 $\hat{\rho}$ 的归一化[上题(4)式]得出

$$\sum c_m=1。\tag{9}$$

于是，从(8)式和(9)式得知有一个 $c_m=1$，而其余的为零。

$$c_{m_0}=1，\ c_m=0，\ m\neq m_0。\tag{10}$$

从而

$$\langle x|\hat{\rho}|x'\rangle=\psi_{m_0}(0)\psi^*_{m_0}(x')，\tag{11}$$

这正是（3）式的形式。

22. (i)(1)式很容易由如下事实得到，（a）自旋为 $\frac{1}{2}$ 的粒子的自旋部分的密度矩阵必为一个2×2矩阵，（b）这矩阵必须满足§10.20题的(4)式

$$\mathrm{Tr}\,\hat{\rho}=1\tag{2}$$

而

$$\mathrm{Tr}\hat{1}=2，\ \mathrm{Tr}\hat{\sigma}_i=0，\ i=x,y,z。\tag{3}$$

(ii) 计算 $\langle\hat{\sigma}\rangle$，并利用关系式

$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y=i\hat{\sigma}_z，(循环置换指标)，\ \hat{\sigma}_i^2=\hat{1}，\tag{4}$$

和(3)式，不难得到

$$\boldsymbol{P}=\langle\hat{\sigma}\rangle。\tag{5}$$

因此，矢量$\boldsymbol{P}$可称为自旋为$\frac{1}{2}$的粒子的（平均）极化强度。

(iii) 我们有

$$\frac{\partial \boldsymbol{P}}{\partial t}=\frac{\partial\langle\hat{\boldsymbol{\sigma}}\rangle}{\partial t}=\left\langle\frac{\partial\hat{\boldsymbol{\sigma}}}{\partial t}\right\rangle=-\frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{\boldsymbol{\sigma}},\hat{H}]_-\rangle, \tag{6}$$

其中$\hat{H}$是（自旋）哈密顿量

$$\hat{H}=-\hat{\mu}(\cdot\mathscr{H})=-\frac{1}{2}\gamma\hbar(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\mathscr{H}), \tag{7}$$

式中$\hat{\mu}$和γ分别是磁矩和回磁比。

$$\hat{\mu}=\gamma\hbar\hat{\boldsymbol{\sigma}}. \tag{8}$$

将（7）式代入（6）式，并利用（4）式，很容易得到

$$\frac{\partial \boldsymbol{P}}{\partial t}=\frac{1}{2}i\gamma\langle[\hat{\boldsymbol{\sigma}},(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\mathscr{H})]_-\rangle=-\gamma\langle[\mathscr{H}\times\hat{\boldsymbol{\sigma}}]\rangle, \tag{9}$$

或

$$\frac{\partial \boldsymbol{P}}{\partial t}=-\gamma[\mathscr{H}\times\boldsymbol{P}]. \tag{10}$$

23. 如果光子处于纯态ψ_0中，

$$\psi_0=c_1^{(0)}\psi_1+c_2^{(0)}\psi_2, \tag{5}$$

我们会期望

$$W=\left|\int\psi_0^*\psi_{\text{探测}}d\tau\right|^2=|c_1^{(0)*}c_1^{\text{探测}}+c_2^{(0)*}c_2^{\text{探测}}|^2. \tag{6}$$

如果光子态用密度矩阵$\hat{\rho}$描述，我们有

$$W=\langle\hat{\rho}_{\text{探测}}\rangle=\mathrm{Tr}\,\hat{\rho}\hat{\rho}_{\text{探测}}. \tag{7}$$

容易验证：(i)如果$\hat{\rho}$对应于纯态(5)，则（7）式导致式(6)，在这种情况下

$$\rho_{ij}=c_i^{(0)}c_j^{(0)*}, \tag{8}$$

(ii) 如果光子处于纯态，即$\psi_0\equiv\psi_{\text{探测}}$，则$W=1$，当然，这是应有的情况。

24. 为求光子A的偏振，必须计算表达式

$$P_A=\mathrm{Tr}_A\hat{\rho}_A\hat{\omega}_A, \tag{2}$$

式中$\hat{\rho}_A$是关于光子A本身的态的密度矩阵。与§10.20题（1）式

类比，我们得到

$$\hat{\rho}_A = \mathrm{Tr}_B \hat{\rho}_{AB}, \qquad (3)$$

式中$\mathrm{Tr}_B(\mathrm{Tr}_A)$是遍及属于光子B(A)的自由度的迹。

从（1）式和（3）式出发，并根据与§10.22题(3)式相似的方程，可得出

$$\hat{\rho}_A = \frac{1}{2}\hat{1}_A, \qquad (4)$$

将此结果与§10.22题的结果相比，或利用方程(2)，我们得到

$$\boldsymbol{P}_A = 0, \qquad (5)$$

类似地得到

$$\boldsymbol{P}_B = 0, \qquad (6)$$

即两光子是无偏振的。

为求得两光子的偏振是否有某种相关，我们考虑两个探测器的情况（这两个探测器如此安置，以使响应度为100%），第一个探测器对光子A的偏振$\boldsymbol{P}_A^{探测}$响应，而第二个探测器对光子B的偏振$\boldsymbol{P}_B^{探测}$响应。这组探测器由密度矩阵表征[参考§10.22题的(1)式]：

$$\hat{\rho}_A^{探测} = \frac{1}{2}\{\hat{1}_A + (\boldsymbol{P}_A^{探测}\cdot\hat{\boldsymbol{\omega}}_A)\}\hat{1}_B,$$

$$\hat{\rho}_B^{探测} = \frac{1}{2}\{\hat{1}_B + (\boldsymbol{P}_B^{探测}\cdot\hat{\boldsymbol{\omega}}_B)\}\hat{1}_A. \qquad (7)$$

为求出是否在两个计数器处都有响应，我们必须计算表达式[参考上题(7)式]

$$W(\boldsymbol{P}_A^{探测}, \boldsymbol{P}_B^{探测}) = \mathrm{Tr}\,\hat{\rho}_{AB}\hat{\rho}_A^{探测}\hat{\rho}_B^{探测}, \qquad (8)$$

结果是

$$W(\boldsymbol{P}_A^{探测}, \boldsymbol{P}_B^{探测}) = \frac{1}{4}\{1-(\boldsymbol{P}_A^{探测}\cdot\boldsymbol{P}_B^{探测})\}. \qquad (9)$$

我们见到，当$\boldsymbol{P}_A^{探测}$与$\boldsymbol{P}_B^{探测}$平行时，$W(\boldsymbol{P}_A^{探测}, \boldsymbol{P}_B^{探测})=0$；而

当$\boldsymbol{P}_{\mathrm{A}}^{探测}$和$\boldsymbol{P}_{\mathrm{B}}^{探测}$反平行时，这两个光子有相反的偏振，$W(\boldsymbol{P}_{\mathrm{A}}^{探测}, \boldsymbol{P}_{\mathrm{B}}^{探测})$有极大值。

25. 散射后的密度矩阵$\hat{\rho}_f$(参考§10.20题的(1)式)为

$$\hat{\rho}_f = \hat{S}\hat{\rho}_i\hat{S}\dagger, \tag{3}$$

其中$\hat{S}\dagger$是$\hat{S}$的厄密共轭，而$\hat{\rho}_i$是散射前的密度矩阵。

散射后的偏振由下式给出[见§10.22题的(5)式]：

$$\boldsymbol{P}_f = \langle\hat{\sigma}\rangle = \mathrm{Tr}\hat{\sigma}_f\hat{\sigma} = \mathrm{Tr}\hat{\sigma}\hat{S}\hat{\rho}_i\hat{S}^{\dagger}. \tag{4}$$

因散射前偏振为零，我们有

$$\hat{\rho}_i = \frac{1}{2}\hat{1}, \tag{5}$$

然后利用§10.22题的(3)式和(4)式，很容易求得

$$\boldsymbol{P}_f = 2\mathrm{Re}(gh^*)\boldsymbol{n}. \tag{6}$$

§11. 相对论波动方程

1. 对于带电粒子在磁场中运动的情况，j_μ由下式给出

$$j_\mu=\frac{e\hbar}{2mi}(\varphi^*\partial_\mu\varphi-\varphi\partial_\mu\varphi^*)-\frac{e^2A_\mu}{mc}\psi^*\psi.$$

2. 我们写出

$$\psi(\boldsymbol{r},\ t)=\varphi(\boldsymbol{r},\ t)\exp\left(-\frac{imc^2t}{\hbar}\right), \tag{1}$$

如果E是粒子的能量，我们有

$$E=E'+mc^2. \tag{2}$$

在非相对论的极限情况下，

$$E'\ll mc^2, \tag{3}$$

从而

$$\left|i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t}\right|\sim E'\varphi\ll mc^2\varphi. \tag{4}$$

因此，我们得

$$\frac{\partial\psi}{\partial t}\approx-\frac{imc^2}{\hbar}\varphi\exp\left(-\frac{imc^2t}{\hbar}\right), \tag{5}$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}\approx-\left\{\frac{2imc^2}{\hbar}\frac{\partial\varphi}{\partial t}+\frac{m^2c^4}{\hbar^2}\varphi\right\}\exp\left(-\frac{imc^2t}{\hbar}\right), \tag{6}$$

进而，代入克莱因-戈登方程[上题的方程(4)]，则得

$$i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi. \tag{7}$$

利用方程(5)我们得到在非相对论极限情况下

$$\boldsymbol{j}=\frac{e\hbar}{2mi}(\varphi^*\nabla\varphi-\varphi\nabla\varphi^*),\quad \rho=e\varphi^*\varphi. \tag{8}$$

方程(7)是自由粒子的薛定谔方程，方程(8)则是$\boldsymbol{j}$和ρ的相应的表示式。

3. 令

$$\psi=A\exp\left[\frac{i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})}{\hbar}-\frac{i\epsilon t}{\hbar}\right], \tag{1}$$

将它代入自由粒子的克莱因-戈登方程，我们得到

$$\epsilon=\pm E_p,\quad E_p=c\sqrt{(p^2+m^2c^2)}, \tag{2}$$

因此有两个解

$$\psi_+=A_1\exp\frac{i\{(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})-E_pt\}}{\hbar}, \tag{3}$$

$$\psi_-=A_2\exp\frac{i\{(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})+E_pt\}}{\hbar}, \tag{4}$$

以及相应的电荷密度

$$\rho_+=\frac{eE_p}{mc^2}\psi_+^*\psi_+, \tag{5}$$

$$\rho_-=-\frac{eE_p}{mc^2}\psi_-^*\psi_-. \tag{6}$$

在此，我们见到附加自由度的出现：能量的符号可正可负。

4. (i)

$$i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2(\varphi+\chi)+mc^2\varphi, \tag{2}$$

$$i\hbar\frac{\partial\chi}{\partial t}=\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2(\varphi+\chi)-mc^2\chi.$$

(ii) $$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\hbar}{2m}(\hat{\tau}_3+i\hat{\tau}_2)\nabla^2\Psi+mc^2\hat{\tau}_3\Psi, \tag{3}$$

其中

$$\Psi=\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}. \tag{4}$$

(iii) $$\rho=e(\varphi^*\varphi-\chi^*\chi)=e\Psi^\dagger\hat{\tau}_3\Psi. \tag{5}$$

5. 自然地，如§11.3题中那样，我们求得旋量

$$\Psi=\Phi\exp\{i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-\epsilon t)/\hbar\},\quad \Phi=\begin{pmatrix}\varphi_0\\ \chi_0\end{pmatrix}, \tag{1}$$

是波动方程的一个解，只要

$$\epsilon=\pm E_p,\quad E_p=c\sqrt{(p^2+m^2c^2)}. \tag{2}$$

如果$\epsilon=\pm E_p$，我们有

$$\varphi_0^{(\pm)}=\frac{mc^2\pm E_p}{2\sqrt{(mc^2E_p)}},\quad \chi_0^{(\pm)}=\frac{mc^2\mp E_p}{2\sqrt{(mc^2E_p)}}, \tag{3}$$

这里的波函数已对单位体积归一化。

由上题的(5)式得到

$$\rho_\pm=\pm e \tag{4}$$

$\epsilon=+E_p(\epsilon=-E_p)$的解对应于正(负)"电荷态"。

在非相对论极限下，我们有 $E_p\approx mc^2+\frac{p^2}{2m}$，$p^2/2m\ll mc^2$，因而从(3)式我们得到

$$\varphi_0^{(+)}\sim 1,\quad |\chi_0^{(+)}|\sim\left(\frac{p}{2mc}\right)^2\sim\left(\frac{v}{2c}\right)^2\ll 1,$$

$$|\varphi_0^{(-)}|\sim\left(\frac{p}{2mc}\right)^2\sim\left(\frac{v}{2c}\right)^2\ll 1,\quad \chi_0^{(-)}\sim 1.$$

7. 在这种情况下，需要求解在电磁场

$$\boldsymbol{A}=0,\quad \phi=-\frac{ze}{r}, \tag{1}$$

中的带电粒子的克莱因-戈登方程。因为我们要求一定态解，所以我们设

$$\psi(\boldsymbol{r},\ t)=\varphi(\boldsymbol{r})\exp(-iEt/\hbar), \tag{2}$$

并寻求$E>0$的解。现在$\varphi(\boldsymbol{r})$的方程变为

$$\left\{\left(E+\frac{Ze^2}{r}\right)^2-m^2c^4+\hbar^2c^2\nabla^2\right\}\varphi(\boldsymbol{r})=0. \tag{3}$$

变到球极坐标系中，并写成

$$\varphi(\boldsymbol{r})=\frac{1}{r}R_l(r)Y_{lm}(\theta,\ \varphi), \tag{4}$$

则径向波函数$R_l(r)$满足下列方程：

$$\left\{\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}-\frac{l(l+1)-Z^2\alpha^2}{r^2}+\frac{2Z\alpha E}{\hbar cr}-\frac{m^2c^4-E^2}{\hbar^2c^2}\right\}R_l(r)=0, \tag{5}$$

其中α是精细结构常数，

$$\alpha=\frac{e^2}{\hbar c}\approx\frac{1}{137}. \tag{6}$$

如果我们寻求束缚态解，则$E<mc^2$. 如果我们写出

$$k(k+1)=l(l+1)-Z^2\alpha^2, \tag{7}$$

$$\gamma=\frac{2Z\alpha E}{\hbar c\beta}, \tag{8}$$

$$\beta=\frac{2}{\hbar c}\sqrt{(m^2c^4-E^2)}, \tag{9}$$

$$\rho=\beta r, \tag{10}$$

我们就可以把方程(5)写成

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}+\frac{\gamma}{\rho}-\frac{k(k+1)}{\rho^2}-\frac{1}{4}\right]R_l(\rho)=0. \tag{11}$$

这个方程与非相对论情况下氢原子的类似方程有相同的形式。它的解是合流超几何级数乘上一个指数函数和一个ρ的幂函数。为使波函数可以归一化，必须$\gamma-k-1$为非负整数，将它记为ν，即

$$\gamma=\nu+k+1,\quad \nu=0,\ 1,\ 2,\ \cdots, \tag{12}$$

或者，解方程(7)求出k，代入上式，则得

$$\gamma=\nu+\frac{1}{2}+\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2-Z^2\alpha^2},\quad \nu,\ l=0,\ 1,\ \cdots. \tag{13}$$

从(8)式(9)式和(13)式，我们得到能量本征值按$Z\alpha$的幂的展开式：

$$E=mc^2\left[1-\frac{Z^2\alpha^2}{2n^2}-\frac{Z^4\alpha^4}{2n^4}\left(\frac{n}{l+\frac{1}{2}}-\frac{3}{4}\right)+\cdots\right], \tag{14}$$

其中$n=\nu+l+1$是主量子数。(14)式左边第一项是静质量能，第

二项给出在库仑场中粒子的非相对论能级，第三项给出精细结构分裂。在此我们忽略了核的有限大小。因为 π 介子比电子重得多，所以基态轨道半径约为玻尔半径的 1/270，这意味着，核的有限大小是个很重要的修正。

8. 我们象通常一样来求连续方程。用 ψ_i^* 左乘方程(3)，再将方程(3)的厄密共轭方程右乘 ψ_j，将所得结果相加并对 j 求和，则得

$$\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\Psi^\dagger\Psi+\left[\Psi^\dagger(\hat{\alpha}\cdot\nabla)\Psi+(\nabla\Psi^\dagger)\hat{\alpha}^\dagger\Psi+\frac{imc}{\hbar}(\Psi^\dagger\hat{\beta}\Psi-\Psi^\dagger\hat{\beta}^\dagger\Psi)\right]=0. \tag{5}$$

因为

$$\rho=e\Psi^\dagger\Psi, \tag{6}$$

如果取

$$j=ec\Psi^\dagger\hat{\alpha}\Psi, \tag{8}$$

并假定

$$\alpha=\alpha^\dagger,\ \beta=\beta^\dagger, \tag{9}$$

则方程(5)变为连续性方程

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+(\nabla\cdot j)=0. \tag{7}$$

让我们将算符

$$\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}-(\hat{\alpha}\cdot\nabla)-\frac{imc}{\hbar}\hat{\beta} \tag{10}$$

从左边作用于方程(4)。结果是

$$\left\{\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}-\frac{1}{2}\sum_{k,l=1}^{3}(\hat{\alpha}_k\hat{\alpha}_l+\hat{\alpha}_l\hat{\alpha}_k)\partial_k\partial_l+\frac{m^2c^2}{\hbar^2}\beta^2-\frac{imc}{\hbar}\sum_{k=1}^{3}(\hat{\alpha}_k\hat{\beta}+\hat{\beta}\hat{\alpha}_k)\partial_k\right\}\Psi=0. \tag{11}$$

这个方程化为所要求的方程

$$\left\{\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}-\nabla^2+\frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right\}\Psi=0, \tag{12}$$

只要

$$\beta^2=\hat{1},\ [\hat{\alpha},\ \hat{\beta}]_+=0,\ [\hat{\alpha}_k,\ \hat{\alpha}_l]_+=2\hat{1}\delta_{kl}, \tag{13}$$

这里 $\hat{1}$ 是单位矩阵，$[\hat{A},\ \hat{B}]_+\equiv\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}$是个反对易子。

首先指出，为使(13)式和(9)式满足，$\hat{\alpha}$ 和 $\hat{\beta}$ 必须至少有四行和四列．其次，如果我们采用4×4矩阵表示，则有几种不同的选择．本节中我们选取如下的一种：

$$\hat{\alpha}=\begin{pmatrix}0 & \hat{\sigma}\\ \hat{\sigma} & 0\end{pmatrix},\quad \beta=\begin{pmatrix}\hat{1} & 0\\ 0 & -\hat{1}\end{pmatrix}, \tag{14}$$

其中$\hat{\sigma}$的分量是2×2泡利矩阵$\hat{\sigma}_x$，$\hat{\sigma}_y$和$\hat{\sigma}_z$，而这里 $\hat{1}$ 是2×2单位矩阵。作为一个练习，请读者证明矩阵(14)满足(9)式和(13)式。

9． 因为$\hat{\alpha}=i\beta\hat{\gamma}$，我们得

$$\boldsymbol{j}=iec\Psi^\dagger\hat{\beta}\hat{\boldsymbol{\gamma}}\Psi, \tag{4}$$

而

$$\rho=e\Psi^\dagger\hat{\beta}\hat{\beta}\Psi, \tag{5}$$

于是我们能写出

$$j_\mu=iec\Psi^\dagger\hat{\gamma}_4\hat{\gamma}_\mu\Psi, \tag{6}$$

或

$$j_\mu=iec\Psi\hat{\gamma}_\mu\Psi, \tag{7}$$

其中

$$\Psi=\Psi^\dagger\hat{\gamma}_4 \tag{8}$$

叫做Ψ的伴随或狄拉克共轭。

10． $\sum_\mu\hat{\gamma}_\mu\hat{\gamma}_\mu=4\cdot\hat{1}$，$\sum_\mu\hat{\gamma}_\mu\hat{\gamma}_\nu\hat{\gamma}_\mu=-2\hat{\gamma}_\nu$，

$\sum_\mu\hat{\gamma}_\mu\hat{\gamma}_\nu\hat{\gamma}_\rho\hat{\gamma}_\mu=4\delta_{\nu\rho}\hat{1}$，$\sum_\mu\hat{\gamma}_\mu\hat{\gamma}_\nu\hat{\gamma}_\rho\hat{\gamma}_\sigma\hat{\gamma}_\mu=-2\hat{\gamma}_\sigma\hat{\gamma}_\rho\hat{\gamma}_\nu$。

12 由于$p_4=iE/c$=常数，我们可写出

$$\Psi=\Phi(\boldsymbol{r})\exp(-iEt/\hbar), \tag{1}$$

代入自由粒子的狄拉克方程，则得

$$E\Phi=\hat{H}_{\mathrm{D}}\Phi, \tag{2}$$

其中

$$\hat{H}_{\mathrm{D}}=c(\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})+mc^2\hat{\beta}. \tag{3}$$

当我们考虑矩阵 $\hat{\alpha}$ 和 $\hat{\beta}$ 的形式时，很显然可把它们写成如下形式：

$$\hat{\alpha}=\rho_x\hat{\sigma},\quad \hat{\beta}=\hat{\rho}_z\hat{1}_\sigma. \tag{4}$$

为看出 $\hat{\rho}_k$ 矩阵的作用，我们重新编排了 $\hat{\alpha}$ 和 $\hat{\beta}$（以及旋量 Ψ 和 Φ 的分量）的行和列如下：

$$1\to 11,\quad 2\to 12,\quad 3\to 21,\quad 4\to 22. \tag{5}$$

在这种情况下，(4)中的矩阵 $\hat{\alpha}$ 和 $\hat{1}_\sigma$ 是作用在第二个指标上的 2×2 矩阵，而 $\hat{\rho}_k$ 矩阵（它与泡利矩阵形式相同）作用在第一个指标上．借助于 $\hat{\beta}$ 和 $\hat{\sigma}$ 矩阵，方程(2)变为

$$\hat{H}_{\mathrm{D}}\Phi\equiv\{(\hat{\rho}_x(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})+\hat{\rho}_z\hat{1}_\sigma\}\Phi=E\Phi \tag{6}$$

我们寻求 $\boldsymbol{p}$ 的值完全确定的状态

$$\Phi=\Phi_0\exp\{i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar\}. \tag{7}$$

如果我们现在引入旋量

$$\varphi\equiv\begin{pmatrix}\phi_1\\ \phi_2\end{pmatrix},\quad \chi\equiv\begin{pmatrix}\phi_3\\ \phi_4\end{pmatrix}, \tag{8}$$

并且利用下述事实：对波函数(7)所描写的态，我们有 $\hat{\boldsymbol{p}}\Phi=\boldsymbol{p}\Phi$，则可将方程(6)写成

$$\begin{aligned}&(mc^2-E)\varphi+c(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{p})\chi=0,\\ &c(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{p})\varphi-(mc^2+E)\chi=0.\end{aligned} \tag{9}$$

我们注意到，仅当

$$\begin{vmatrix}mc^2-E & c(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{p})\\ -c(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{p}) & mc^2+E\end{vmatrix}=0, \tag{10}$$

或利用§5.15题的结果

$$E=\pm E_p,\quad E_p=c\sqrt{(p^2+m^2c^2)} \tag{11}$$

时，方程(9)才有解。

如果我们利用下式引进符号算符$\hat{\Lambda}$，

$$\hat{\Lambda}=\frac{\hat{H}_D}{\sqrt{H_D^2}}=\frac{c(\hat{\alpha}\cdot\hat{p})+\hat{\beta}mc^2}{c\sqrt{(p^2+m^2c^2)}},\tag{12}$$

我们首先就会看到，$\hat{\Lambda}$与$\hat{H}_D$对易，而且$\hat{\Lambda}^2=\hat{1}$，所以它的本征值为±1；事实上，本征值是E/E_p。本征值为+1的本征函数称为正能量本征函数，而本征值为−1的本征函数则称为负能量本征函数。

现在我们已求出$\hat{H}_D$（本征值为E），$\hat{p}$（本征值为p），和$\hat{\Lambda}$（本征值为E/E_p）的共同本征函数。从(9)式可见，我们可以用这两个二分量函数中的一个表示另一个。如果我们写出

$$\varphi=A\exp\{i(p\cdot r)/\hbar\}u,\quad u\equiv\begin{pmatrix}u_1\\u_2\end{pmatrix},\tag{13}$$

则u将是§4中讨论过的那种旋量，它能被泡利自旋矩阵所作用。从(9)式可见，若φ由(13)式给出，则对于χ有

$$\chi=A\frac{c(\hat{\sigma}\cdot p)}{mc^2+E}\exp\{i(p\cdot r)/\hbar\}u.\tag{14}$$

因此，波函数Ψ由下式给出：

$$\Psi=A\begin{Bmatrix}u\\\dfrac{c(\hat{\sigma}\cdot p)}{mc^2+E}u\end{Bmatrix}\exp\{i(p\cdot r)/\hbar-iEt/\hbar\},\tag{15}$$

其中A是归一化常数。若粒子被限制在单位体积中，我们得

$$A^2=\frac{E_p+\lambda mc^2}{(2\pi\hbar)^3 2E_p},\quad \lambda=\frac{E}{E_p},\tag{16}$$

只要u的归一化关系式为

$$u^\dagger u=1.\tag{17}$$

现在让我们考虑螺旋算符$\hat{h}$，它被定义为

$$\hat{h}=(\hat{\Sigma}\cdot n),\tag{18}$$

其中$n=p/p$，且

$$\Sigma=\hat{1}_p\hat{\sigma},\tag{19}$$

其中单位算符 $\hat{1}_\rho$ 作用于与 $\hat{\sigma}_k$ 一样的指标上。如果选取 z 轴沿着 $\boldsymbol{n}$，则 $\hat{h}$ 有如下形式：

$$h=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{20}$$

螺旋算符与 $\hat{H}_D$ 对易，所以 $\hat{H}_D$，$\hat{p}$，$\hat{\Lambda}$，和 $\hat{h}$ 具有共同的本征函数。$\hat{h}$的本征值是± 1，本征函数对应于粒子的自旋与动量平行或反平行。$\hat{h}$的本征值$+1$对应于 $u=\alpha\equiv\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$，本征值$-1$对应于 $u=\beta\equiv\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$。

13. 在非相对论极限下，我们可以写出（参考§ 11.2题）

$$E_+=mc^2+E',\quad E'\approx p^2/2m\ll mc^2。 \tag{1}$$

因而在$E=+E_+$的情况下，我们求得

$$\chi=\frac{c(\hat{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})}{E'+2mc^2}\varphi\approx\frac{(\hat{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})}{2mc}\varphi\ll\varphi, \tag{2}$$

而在$E=-E_+$的情况下，我们有

$$-\varphi=\frac{c(\hat{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})}{E'+2mc^2}\chi\approx\frac{(\hat{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})}{2mc}\chi\ll\chi。 \tag{3}$$

我们看到，在非相对论极限下，有两个大的分量和两个小的分量；ψ_1和ψ_2是在正能态时的大分量；ψ_3，ψ_4是在负能态时的小分量。

借助于旋量φ和χ，电荷密度和电流密度具有如下形式

$$\rho=e(\varphi^\dagger\varphi+\chi^\dagger\chi),\quad \boldsymbol{j}=ec(\varphi^\dagger\hat{\sigma}\chi+\chi^\dagger\hat{\sigma}\varphi)。 \tag{4}$$

在非相对论极限下，对于正能态情况，我们有

$$\chi\approx\frac{(\hat{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})}{2mc}\varphi=-i\hbar\frac{(\hat{\sigma}\cdot\nabla)}{2mc}\varphi, \tag{5}$$

因此

$$\rho=e(\varphi^{\dagger}\varphi+\chi^{\dagger}\chi)\approx e\varphi^{\dagger}\varphi-e\frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\varphi^{\dagger}\nabla^2\varphi, \tag{6}$$

$$\boldsymbol{j}=ec(\varphi^{\dagger}\hat{\sigma}\chi+\chi^{\dagger}\hat{\sigma}\varphi)\approx\frac{e\hbar}{2mi}\{\varphi^*\nabla\varphi-$$

$$-(\nabla\varphi^*)\varphi\}+\frac{e\hbar}{m}[\nabla\times\varphi^{\dagger}\hat{\sigma}\varphi], \tag{7}$$

其中我们利用了关系式

$$\hat{\sigma}(\hat{\sigma}\cdot\nabla)\varphi=\nabla\varphi-\mathrm{i}[\nabla\times\hat{\sigma}]\varphi.$$

(7)式右边最后一项是粒子自旋所引起的电流密度。

14. 解决本题的方法类似于§2.1题中的情况。狄拉克方程为

$$\hat{H}_D\Phi=(E-e\phi)\Phi. \tag{3}$$

在$z<0$和$z>0$两区域分别有解[参考§11.12题的方程(15)]

$$\Phi_{z<0}=A\begin{pmatrix}u\\ \frac{cp_1}{mc^2+E_p}u\end{pmatrix}\exp(\mathrm{i}p_1z/\hbar)$$

$$+B\begin{pmatrix}u\\ \frac{-cp_1}{mc^2+E_p}u\end{pmatrix}\exp(-\mathrm{i}p_1z/\hbar), \tag{4}$$

$$\Phi_{z>0}=C\begin{pmatrix}u\\ \frac{cp_2}{mc^2+E_p-V_0}u\end{pmatrix}\exp(\mathrm{i}p_2z/\hbar), \tag{5}$$

其中

$$E_p=c\sqrt{(p_1^2+m^2c^2)}, \tag{6}$$

$$p_2^2c^2+m^2c^4=(E_p-V_0)^2. \tag{7}$$

反射系数R和透射系数T由下列式给出

$$R=\frac{|j_{反射}|}{|j_{入射}|},\quad T=\frac{|j_{透射}|}{|j_{入射}|}, \tag{8}$$

其中，电流密度是§11.8题的(8)式所给出的表达式的z分量，

我们得

$$j_{反射}=-\frac{2c^2p_1}{mc^2+E_p}|B|^2, \tag{9}$$

$$j_{入射}=\frac{2c^2p_1}{mc^2+E_p}|A|^2, \tag{10}$$

$$j_{透射}=\frac{2c^2p_2}{mc^2+E_p-V_0}|C|^2. \tag{11}$$

此外，利用Φ和$\partial\Phi/\partial z$在$z=0$处的连续性，B和C可用A表出，我们有

$$A+B=C \tag{12}$$

$$A-B=\frac{p_2}{p_1}\frac{mc^2+E_p}{mc^2+E_p-V_0}C. \tag{13}$$

联立(8)到(13)各式，得出

$$R=\frac{(1-r)^2}{(1+r)^2},\quad T=\frac{4r}{(1+r)^2}, \tag{14}$$

其中

$$r=\frac{p_2}{p_1}\frac{mc^2+E_p}{mc^2+E_p-V_0}. \tag{15}$$

15 根据§3.27题，速度算符由下式给出：

$$\frac{d\hat{r}}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[\hat{r},\ \hat{H}_D]_-=c\hat{\alpha}, \tag{1}$$

由于$\hat{\alpha}$的本征值是±1，我们看到粒子是以光速运动的；然而$\hat{\alpha}$和$\hat{H}_D$不对易，所以粒子的任何状态实际上是具有不同方向的速度的状态的叠加。为了积分(1)式，我们必须求出$d\hat{\alpha}/dt$，为此得到

$$\frac{d\hat{\alpha}}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[\hat{\alpha},\ \hat{H}_D]_-=\frac{2i}{\hbar}(c\hat{p}-\hat{\alpha}\hat{H}_D), \tag{2}$$

我们所关心的态是$\hat{p}$和$\hat{H}_D$的本征函数，积分(2)式，得

$$\hat{\sigma}(t)=\frac{c\hat{p}}{E}+\{\hat{\sigma}(0)-c\frac{\hat{p}}{E}\}\exp(-2iEt\hbar/), \tag{3}$$

从而

$$\hat{r}(t)=r(0)+\frac{c^2p}{E}t+\frac{ic\hbar}{2E}\left\{\hat{\alpha}(0)-\frac{cp}{E}\right\}\{\exp(-2iEt/\hbar)-1\}. \quad (4)$$

右边前两项代表正常的经典运动，右边最后一项描写所谓“颤振”，即速度非常快的小振幅运动。这振幅小于康普顿波长 $\hbar/mc$(对于电子，它等于4×10^{-11}cm)，其周期小于 $\hbar/mc^2$（对于电子它等于10^{-21}s）。

注意，如果仅考虑正能态，即让“投影”算符 Π_+ 作用于波函数，那么振荡部分就消失了。“投影”算符定义为

$$\hat{\Pi}_+=\frac{1}{2}(\hat{1}+\hat{\Lambda}), \quad (5)$$

这个问题的证明，作为练习留给读者。如果我们只考虑正能态，那么粒子的坐标算符的本征函数不再是 δ 函数，而是被“涂抹”了一个区域，这个区域的线度为康普顿波长的数量级。

16. 因为$\hat{p}_\mu$是数，它们在变换(1)之下是不变的，而

$$\hat{p}'_\mu=\sum_\nu a_{\mu\nu}\hat{p}_\nu. \quad (3)$$

从而狄拉克方程

$$\left\{\sum_\mu \hat{\gamma}_\mu\hat{p}_\mu-imc\right\}\Psi(x_\mu)=0, \quad (4)$$

变成

$$\left\{\sum_\mu \hat{\gamma}_\mu\hat{p}'_\mu-imc\right\}\Psi'(x'_\mu)=0, \quad (5)$$

其中 $\Psi'(x'_\mu)$是新独立变量 x'_μ的一个新函数。我们想要寻找这样一个幺正变换$\hat{S}$：如果有

$$\Psi'(x'_\mu)=\hat{S}\Psi, \quad (6)$$

则方程(5)化为方程(4)。可将方程(5)写成

$$\left\{\sum_{\mu,\nu}\gamma_\mu a_{\mu\nu}\hat{p}_\mu-imc\right\}\hat{S}\Psi=0. \quad (7)$$

或

$$\left\{\sum_{\mu,\nu} \hat{S}^{-1}\hat{p}_\mu \hat{S} a_{\mu\nu}\hat{p}_\nu - imc\right\}\Psi = 0, \tag{8}$$

可见$\hat{S}$满足下列方程。

$$\sum_{\mu} \hat{S}^{-1}\hat{p}_\mu \hat{S} a_{\mu\nu} = \hat{p}_\mu. \tag{9}$$

一旦我们从方程(9)求得$\hat{S}$，就可由方程(6)得出被变换的波函数。

现在我们考虑一些特殊情况。前两种情况对应于连续变换类，所以，我们可限于考虑无限小变换，在这种情况下

$$a_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu} + \epsilon_{\mu\nu}, \tag{10}$$

这里$\epsilon_{\mu\nu}$是一无限小二阶张量。如果$a_{\mu\nu}$满足条件(2)，则有

$$\delta_{\nu\nu'} = \sum_{\mu} a_{\mu\nu}a_{\mu\nu'} = \delta_{\nu\nu'} + (\epsilon_{\nu\nu'} + \epsilon_{\nu'\nu}), \tag{11}$$

这意味着$\epsilon_{\mu\nu}$必须是反对称张量。

(a) 在从一个惯性参考系变换到以速度v沿x方向运动的另一参考系的情形，我们有（假定v/c为无限小）

$$\epsilon_{14} = -\epsilon_{41} = iv/c; \quad \epsilon_{\mu\nu} = 0, \quad \mu, \nu \neq 1, 4\text{或}4, 1. \tag{12}$$

(b) 在这种情况下，我们有（δ_φ为无限小）

$$\epsilon_{12} = -\epsilon_{21} = \delta_\varphi; \quad \epsilon_{\mu\nu} = 0, \quad \mu, \nu \neq 1, 2\text{或}2, 1. \tag{13}$$

一般来说，我们必须由(9)式求出$\hat{S}$，其中$a_{\mu\nu}$由(10)式给出。对于无限小变换，我们预期

$$\hat{S} = \hat{1} + \frac{1}{2}\sum_{\mu,\nu} \hat{C}_{\mu\nu}\epsilon_{\mu\nu}, \tag{14}$$

把这个表示式代入方程(9)，则得

$$\frac{1}{2}\sum_{\lambda,\nu}[\hat{p}_\mu, \hat{C}_{\lambda\nu}]_- = \sum_{\nu} \epsilon_{\mu\nu}\hat{p}_\nu. \tag{15}$$

将此式右边写成

$$\sum_{\nu} \epsilon_{\mu\nu}\hat{p}_\nu = \frac{1}{2}\sum_{\lambda,\nu}\epsilon_{\mu\nu}\{\delta_{\lambda\mu}\hat{p}_\nu - \delta_{\nu\mu}\hat{p}_\lambda\}, \tag{16}$$

方程(15)就变成

$$\sum_{\lambda,\nu}\{\hat{p}_\mu C_{\lambda\nu} - C_{\lambda\nu}\hat{p}_\mu - \delta_{\lambda\mu}\hat{p}_\nu + \delta_{\nu\mu}\hat{p}_\lambda\}\epsilon_{\lambda\nu} = 0, \tag{17}$$

可以直接看出上式被下式所满足：

$$C_{\lambda\nu} = \frac{1}{2}\hat{p}_\lambda\hat{p}_\nu. \tag{18}$$

因此，对于无穷小变换，从(14)式可得到

$$\hat{S} = \hat{1} + \frac{1}{4}\sum_{\mu,\nu}\epsilon_{\mu\nu}\hat{p}_\mu\hat{p}_\nu. \tag{19}$$

例如，对于绕 z 轴的一个转动，利用(13)式和 $\hat{p}_1\hat{p}_2 = -\hat{p}_2\hat{p}_1 = i\hat{\sigma}_z$，我们得到

$$\hat{S} = \hat{1} + \frac{1}{2}i\delta\varphi\hat{1}\rho\hat{\sigma}_z, \tag{20}$$

对于有限变换得

$$\hat{S} = \exp\left(\frac{1}{2}i\varphi\hat{1}\rho\hat{\sigma}_z\right). \tag{21}$$

类似地，利用(12)式和 $\hat{p}_1\hat{p}_4 = -\hat{p}_4\hat{p}_1 = i\hat{\rho}_x\hat{\sigma}_x$，对于由一个惯性系到另一个惯性系的变换，我们求得

$$\hat{S} = \hat{1} - \frac{1}{2}\frac{v}{c}\hat{\rho}_x\hat{\sigma}_x. \tag{22}$$

对于 v 沿任意方向的有限变换，利用相似的方法求得

$$\hat{S} = \exp\left\{-\frac{1}{2}\varphi(\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\alpha}})\right\}, \tag{23}$$

其中 $\varphi = \mathrm{artanh}(v/c)$，$\boldsymbol{n} = \boldsymbol{v}/v$.

(c)在空间反演的情况下，没有无限小变换。在这种情况下

$$a_{\mu'} = \delta_{\mu\nu}a_\mu,$$

$$a_{11}=a_{22}=a_{33}=-1,\quad a_{44}=1. \tag{24}$$

(d) 在时间反演的情况下，也没有无限小变换。在这种情况下

$$a_{\mu\nu}=\delta_{\mu\nu}a_\mu,$$
$$a_{11}=a_{22}=a_{33}=1,\quad a_{44}=-1. \tag{25}$$

在情况(c)中方程(9)变成

$$\hat{\gamma}_k\hat{S}=-\hat{S}\hat{\gamma}_k,\quad k=1,\ 2,\ 3;\quad \hat{\gamma}_4\hat{S}=\hat{S}\hat{\gamma}_4, \tag{26}$$

或

$$S=\lambda\hat{\gamma}_4,\quad |\lambda|=1. \tag{27}$$

在情况(d)中，方程(9)变成

$$\hat{\gamma}_k\hat{S}=\hat{S}\hat{\gamma}_k,\quad k=1,\ 2,\ 3;\quad \hat{\gamma}_4\hat{S}=-\hat{S}\hat{\gamma}_4, \tag{28}$$

或利用§11.12题的方程(4)和§11.9题的方程(2)，由这两个方程得出

$$\hat{\boldsymbol{\gamma}}=\hat{\rho}_y\hat{\boldsymbol{\sigma}},\quad \hat{\gamma}_4=\hat{\rho}_z\hat{1}_\sigma, \tag{29}$$

我们有

$$\hat{S}=\mu\hat{\rho}_y\hat{1}_\sigma,\quad |\mu|=1. \tag{30}$$

17. 如果利用上题中的(23)式和下述事实：若粒子的动量为 $\boldsymbol{p}$，则静止系相对于实验室系的速度为

$$\boldsymbol{v}=-\boldsymbol{p}/E, \tag{1}$$

就可以证明。

18. 在考虑双线性形式之前，我们必须首先求出 Ψ 如何变换。我们已经看到

$$\Psi'^{\dagger}(x'_\mu)=\hat{S}\Psi(x_\mu). \tag{1}$$

取此式的厄密共轭，则得

$$\Psi'^{\dagger}(x'_\mu)=\Psi^{\dagger}(x_\mu)\hat{S}^{\dagger}, \tag{2}$$

利用伴随矩阵的定义，由此可得

$$\overline{\Psi'}(x'_\mu)=\Psi'^{\dagger}(x'_\mu)\hat{\gamma}_4=^{\dagger}(x_\mu)\hat{\gamma}_4\hat{S}^{\dagger}\hat{\gamma}_4. \tag{3}$$

算符 $\hat{\gamma}_4\hat{S}^{\dagger}\hat{\gamma}_4$ 可以改写。考虑§11.16题的(9)式并利用同一题中的(2)式，我们得

$$\hat{S}^{-1}\hat{\gamma}_\mu\hat{S}=\sum_\nu a_{\mu\nu}\hat{\gamma}_\nu. \tag{4}$$

取 $\mu=4$ 时(4)式的厄密共轭，并利用如下事实：当 $k=1,2,3$ 时 a_{4k} 是纯虚数，而 a_{44} 是实数，我们求得

$$(\hat{S}^{-1}\hat{\gamma}_4\hat{S})^\dagger=a_{44}\hat{\gamma}_4-\sum_{k=1}^{3}a_{4k}\hat{\gamma}_k. \tag{5}$$

用 $\hat{\gamma}_4$ 右乘(5)式并利用 $[\hat{\gamma}_k,\hat{\gamma}_4]_+=2\delta_{k4}\hat{1}$，我们求得

$$(\hat{S}^{-1}\hat{\gamma}_4\hat{S})^\dagger\hat{\gamma}_4=\sum_\mu{}'\hat{\gamma}_4 a_{4\mu}\hat{\gamma}_\mu, \tag{6}$$

或利用(4)式，有

$$(\hat{S}^{-1}\hat{\gamma}_4\hat{S})^\dagger\hat{\gamma}_4=\hat{\gamma}_4\hat{S}^{-1}\hat{\gamma}_4\hat{S}, \tag{7}$$

或利用 $\hat{\gamma}_4=\hat{\gamma}_4^{-1}$，有

$$(\hat{\gamma}_4\hat{S}^\dagger\hat{\gamma}_4)\hat{\gamma}_4(\hat{\gamma}_4\hat{S}^\dagger\hat{\gamma}_4)^{-1}=\hat{S}^{-1}\hat{\gamma}_4\hat{S}, \tag{8}$$

于是我们得

$$\hat{\gamma}_4\hat{S}^\dagger\hat{\gamma}_4=\lambda\hat{S}^{-1},\quad \lambda=+1\text{ 或 }-1. \tag{9}$$

现在考虑恒等式

$$\hat{S}^\dagger\hat{S}=\hat{S}^\dagger\hat{\gamma}_4\hat{\gamma}_4\hat{S}=\lambda\hat{\gamma}_4\hat{S}^{-1}\hat{\gamma}\hat{\gamma}_4\hat{S}, \tag{10}$$

或

$$\hat{S}^\dagger\hat{S}=\lambda\Big\{a_{44}\hat{1}+\sum_{k=1}^{3}a_{4k}\hat{\gamma}_k\Big\}. \tag{11}$$

反迹，并利用 $\mathrm{Tr}\hat{S}^\dagger\hat{S}>0$，我们有

$$\mathrm{Tr}\hat{S}^\dagger\hat{S}=\lambda a_{44}>0, \tag{12}$$

因此

$$\begin{aligned}&\text{当 } a_{44}>0,\ \hat{\gamma}_4\hat{S}^\dagger\hat{\gamma}_4=\hat{S}^{-1};\\&\text{当 } a_{44}<0,\ \hat{\gamma}_4\hat{S}^\dagger\hat{\gamma}_4=-\hat{S}^{-1}.\end{aligned} \tag{13}$$

现在我们就能够研究双线性形式 $\bar{\Psi}\hat{\Gamma}_i\Psi$ 的变换特性。我们将对于无限小变换（见§11.16题）考虑它们，此时

$$\hat{S}=\hat{1}+\frac{1}{4}\sum_{\mu,\nu}\epsilon_{\mu\nu}\hat{\gamma}_\mu\hat{\gamma}_\nu \tag{14}$$

以及

$$\hat{S}^{-1}=\hat{1}-\frac{1}{4}\sum_{\mu,\nu}\epsilon_{\mu\nu}\hat{\gamma}_\mu\hat{\gamma}_\nu, \tag{15}$$

或者对于反演考虑它们，此时

$$\hat{S}=\lambda\hat{\gamma}_4,\quad |\lambda|=1, \tag{16}$$

因而

$$\hat{S}^{-1}=\lambda^{-1}\hat{\gamma}_4. \tag{17}$$

(a) G_1：我们有

$$G_1'=\bar{\Psi}'\Psi=\bar{\Psi}\hat{S}^{-1}\hat{S}\Psi=G_1. \tag{18}$$

G_1 是一个标量。

(b) G_2 到 G_5：利用(4)式我们有

$$G_\nu'=\bar{\Psi}'\hat{\gamma}_\nu\Psi'=\bar{\Psi}\hat{S}^{-1}\hat{\gamma}_\nu\hat{S}\Psi=\sum_\mu a_{\nu\mu}\bar{\Psi}\hat{\gamma}_\mu\Psi=\sum_\mu a_{\nu\mu}C_\mu; \tag{19}$$

G_ν 象四元矢量一样变换。

(c) G_6 到 G_{11}：我们考虑对称的和反对称的组合 $G_{\mu\nu}\pm G_{\nu\mu}$ ($G_{\mu\nu}\equiv\bar{\Psi}\hat{\gamma}_\mu\hat{\gamma}_\nu\Psi$)。因为 $\hat{\gamma}_\mu\hat{\gamma}_\nu+\hat{\gamma}_\nu\hat{\gamma}_\mu=2\delta_{\nu\mu}\hat{1}$，所以对称组合化为$G_1$。对于反对称组合我们有

$$\begin{aligned}(G_{\mu\nu}-G_{\nu\mu})'&=\bar{\Psi}'[\hat{\gamma}_\mu,\hat{\gamma}_\nu]_-\Psi'\\&=\bar{\Psi}\hat{S}^{-1}[\hat{\gamma}_\mu,\hat{\gamma}_\nu]_-\hat{S}\Psi\\&=\bar{\Psi}[\hat{S}^{-1}\hat{\gamma}_\mu\hat{S},\hat{S}^{-1}\hat{\gamma}_\nu\hat{S}]_-\Psi\\&=\sum_{\rho,\sigma}a_{\mu\rho}a_{\nu\sigma}\bar{\Psi}[\hat{\gamma}_\rho,\hat{\gamma}_\sigma]_-\Psi\\&=\sum_{\rho,\sigma}a_{\mu\rho}a_{\nu\sigma}(G_{\rho\sigma}-G_{\sigma\rho}),\end{aligned} \tag{20}$$

即反对称组合象二阶张量一样变换。

(d) G_{12} 到 G_{16}：如果我们引入矩阵 $\hat{\gamma}_5$ 并利用 $\hat{\gamma}_5^{-1}=\hat{\gamma}_5$，就

能写出

$$G_{\mu\nu\rho}=\pm\bar{\Psi}\hat{\gamma}_5\hat{\gamma}_\sigma\Psi, \tag{21}$$

式中 $\hat{\gamma}_\sigma$ 是唯一的一个不包括在乘积 $\hat{\gamma}_\mu\hat{\gamma}_\nu\hat{\gamma}_\rho$ 中的 $\hat{\gamma}$ 矩阵. 正负号与 $\hat{\gamma}$ 矩阵的次序有关. 事实上, 如果我们引入一个四分量的量 $\tilde{G}_\mu$, 其分量如下

$$\begin{aligned}\tilde{G}_1&=\bar{\Psi}\hat{\gamma}_2\hat{\gamma}_3\hat{\gamma}_4\Psi,\\ \tilde{G}_2&=\bar{\Psi}\hat{\gamma}_4\hat{\gamma}_3\hat{\gamma}_1\Psi,\\ \tilde{G}_3&=\bar{\Psi}\hat{\gamma}_1\hat{\gamma}_2\hat{\gamma}_4\Psi,\\ \tilde{G}_4&=\bar{\Psi}\hat{\gamma}_3\hat{\gamma}_2\hat{\gamma}_1\Psi,\end{aligned} \tag{22}$$

我们见到

$$\tilde{G}_\mu=\bar{\Psi}\hat{\gamma}_\mu\hat{\gamma}_5\Psi. \tag{23}$$

于是我们有

$$\tilde{G}'_\mu=\bar{\Psi}'\hat{\gamma}_\mu\hat{\gamma}_5\Psi'=\bar{\Psi}\hat{S}^{-1}\hat{\gamma}_\mu\hat{\gamma}_5\hat{S}\Psi. \tag{24}$$

由 $\hat{\gamma}_5$ 的定义可知, 如果 $\hat{S}$ 由(14)式给出, 则有

$$\hat{\gamma}_5\hat{S}=\hat{S}\hat{\gamma}_5, \tag{25}$$

因而

$$\begin{aligned}\tilde{G}'_\mu&=\bar{\Psi}\hat{S}^{-1}\hat{\gamma}_\mu\hat{S}\hat{\gamma}_5\Psi\\ &=\sum_\nu a_{\mu\nu}\bar{\Psi}\hat{\gamma}_\nu\hat{\gamma}_5\Psi=\sum_\nu a_{\mu\nu}\tilde{G}_\nu.\end{aligned} \tag{26}$$

亦即在变换(14)之下, G_μ 的行为象一个四元矢量. 然而, 如果我们考虑变换(16), 则有

$$\begin{aligned}\tilde{G}'_\mu&=\bar{\Psi}'\hat{\gamma}_\mu\hat{\gamma}_5\Psi'=\bar{\Psi}\hat{S}^{-1}\hat{\gamma}_\mu\hat{\gamma}_5\hat{S}\Psi\\ &=\bar{\Psi}\lambda^{-1}\hat{\gamma}_4\hat{\gamma}_5\hat{\gamma}_\mu\lambda\hat{\gamma}_4\Psi.\end{aligned} \tag{27}$$

根据 $\hat{\gamma}_5$ 的定义, §11.6题的(29)式以及§4.15题的结果, 可得

$$\hat{\gamma}_5=\hat{\gamma}_1\hat{\gamma}_2\hat{\gamma}_3\hat{\gamma}_4=\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_x\hat{\rho}_2\hat{\sigma}_y\hat{\rho}_3\hat{\sigma}_x\hat{\rho}_2\hat{1}_\sigma=-\hat{\rho}_x\hat{1}_\sigma, \tag{28}$$

因此, 从(27)式我们得

$$\tilde{G}'_k=\tilde{G}_k,\ k=1,2,3;\ \tilde{G}'_4=-\tilde{G}_4; \tag{29}$$

即 $\tilde{G}_\mu$ 的行为象一个赝矢量.

(e) G_{16}: 现在我们有

$$G'_{16}=\overline{\Psi}'\hat{\gamma}_5\Psi'=\overline{\Psi}\hat{S}^{-1}\hat{\gamma}_5\hat{S}\Psi。 \tag{30}$$

在变换(14)之下，利用(25)式，我们得

$$G'_{16}=\overline{\Psi}\hat{\gamma}_5\Psi=G_{16}, \tag{31}$$

而在变换(16)之下，我们得

$$G'_{16}=\overline{\Psi}_4\hat{\gamma}_5\hat{\gamma}_4\Psi=-G_{16}; \tag{32}$$

即 G_{16} 的行为象一个赝标量.

最后我们注意到，在时间反演之下，当 $\hat{S}$ 是由§11.16题的(30)式给出时，$\tilde{G}_\mu$ 和 G_{16} 的变换如下：

$$\tilde{G}'_k=-\tilde{G}_k,\ k=1,2,3;\ \tilde{G}'_4=\tilde{G}_4, \tag{33}$$

$$G'_{16}=-G_{16}。 \tag{34}$$

19 设 $\hat{S}_c$ 是把 Ψ^* 变换为 Ψ_c 的算符：

$$\Psi_c=\hat{S}_c\Psi^* \tag{3}$$

如果我们取(1)式的复共轭，并记住 p_4 和 $\boldsymbol{A}$ 是实的，而 $\hat{p}$ 和 A_4 是纯虚的，则得

$$\left[\left(\hat{\gamma}^*\cdot\left\{\hat{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right\}\right)-\hat{\gamma}_4^*\left(p_4+\frac{e}{c}A_4\right)-imc\right]\Psi^*=0。 \tag{4}$$

把它与方程(2)比较，我们看出 $\hat{S}_c$ 必须满足方程

$$\hat{\gamma}=\hat{S}_c^{-1}\hat{\gamma}^*\hat{S}_c,\ \hat{\gamma}_4=-\hat{S}_c^{-1}\hat{\gamma}_4^*\hat{S}_c \tag{5}$$

或者，记住 $\hat{\gamma}_2$ 和 $\hat{\gamma}_4$ 是实的，而 $\hat{\gamma}_1$ 和 $\hat{\gamma}_3$ 是纯虚的，

$$[\hat{S}_c,\ \hat{\gamma}_1]_+=[\hat{S}_c,\ \hat{\gamma}_3]_+=[\hat{S}_c,\ \hat{\gamma}_4]_+=0$$
$$[\hat{S}_c,\ \hat{\gamma}_2]_-=0, \tag{6}$$

这样我们得

$$\hat{S}_c=\hat{\gamma}_2。 \tag{7}$$

20. 可以证明，总角动量 $\hat{J}$

$$\hat{J}=\hat{L}+\hat{S} \tag{1}$$

与 H_D 对易。其中 $\hat{L}$ 是轨道角动量：

$$\hat{L}=[\hat{\gamma}\times\hat{p}], \tag{2}$$

$\hat{S}$ 是自旋角动量：

$$\hat{S}=\frac{1}{2}\hbar\hat{\sigma}. \tag{3}$$

这意味着一个满足狄拉克方程的粒子，除轨道角动量之外，还具有内禀角动量或自旋（它是自旋为 $\frac{1}{2}$ 的粒子）.

21. 我们考虑在形式上与§11.12题的方程(9)相似的狄拉克方程：

$$(E-e\varphi-mc^2)\varphi-c\left(\hat{\sigma}\cdot\left\{\hat{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right\}\right)\chi=0, \tag{1a}$$

$$c\left(\hat{\sigma}\cdot\left\{\hat{p}-\frac{e}{c}\hat{\boldsymbol{A}}\right\}\right)\varphi-(E-e\phi+mc^2)\chi=0. \tag{1b}$$

在此问题给出的假定之下，并写出

$$E=E'+mc^2, \tag{2}$$

我们有

$$|E'-e\phi|\ll mc^2. \tag{3}$$

于是从方程(1b)我们得

$$\chi=\frac{c\left(\hat{\sigma}\cdot\left\{\hat{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right\}\right)}{E'+2mc^2-e\phi}\varphi\approx\frac{1}{2mc}\left(\hat{\sigma}\cdot\left\{\hat{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right\}\right). \tag{4}$$

或者，把它代入方程(1a)，则得

$$E'\varphi=\left[\frac{\left(\hat{\sigma}\cdot\left\{\hat{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right\}\right)^2}{2m}+e\phi\right]\varphi. \tag{5}$$

利用§4.15题的结果，我们求得

$$\left(\hat{\sigma}\cdot\left\{\hat{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right\}\right)^2=\left(\hat{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2-\frac{e\hbar}{c}(\hat{\sigma}\cdot[\nabla\times\boldsymbol{A}]), \tag{6}$$

再利用 $\mathscr{H}=[\nabla\times\boldsymbol{A}]$，从(5)式求得

$$E'\varphi=\left[\frac{\left(\hat{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2}{2m}+e\varphi-\frac{e\hbar}{2mc}(\hat{\sigma}\cdot\mathscr{H})\right]\varphi. \tag{7}$$

我们得到一个附加项，

$$-(\hat{\mu}\cdot\mathscr{H})=\mu_B(\hat{\sigma}\cdot\mathscr{H}), \tag{8}$$

其中

$$\mu_B=\frac{e\hbar}{2mc}=\text{玻尔磁子}. \tag{9}$$

显然，回磁比为 e/mc。方程(7)是泡利首先提出来的，称为泡利方程。

22. 在上题的方程(1)中令 $A=0$，$e\phi=V(r)$，并利用上题(2)式，则有

$$\{E'-V(r)\}\varphi-c(\hat{\sigma}\cdot\hat{p})\chi=0, \tag{1a}$$

$$c(\hat{\sigma}\cdot\hat{p})\varphi-\{E'+2mc^2-e\phi\}\chi=0, \tag{1b}$$

消去 χ 我们得

$$(E'-V)\varphi=\frac{(\hat{\sigma}\cdot\hat{p})}{2m}\left(1-\frac{E'-V}{2mc^2}\right)(\hat{\sigma}\cdot\hat{p})\varphi. \tag{2}$$

这个方程可以写成

$$E'\varphi=\hat{H}'\varphi. \tag{3}$$

在确定 $\hat{H}'$ 之前，我们注意下述事实：如果原来的四分量波函数 Φ 是归一化的，二分量波函数 φ 就不会是归一化的。为了马上能从 $\hat{H}'$ 的形式看出与非相对论情况相比有些什么修正，引入一个把 φ 变为归一化的 $\tilde{\varphi}$ 的变换是方便的，这可以如下进行。对于一级修正，我们有 $\chi=(\hat{\sigma}\cdot\hat{p})\varphi/2mc$，于是从归一化条件

$$\int\rho\mathrm{d}^3r=e\int(\varphi^\dagger\varphi+\chi^\dagger\chi)\mathrm{d}^3r=e, \tag{4}$$

准确到 $(v/c)^2$，我们得到关系式

$$\int\varphi^\dagger\left(1+\frac{\hat{p}}{4m^2c^2}\right)\varphi\mathrm{d}^3r=1. \tag{5}$$

为了使 $\tilde{\varphi}$ 满足关系式

$$\int\tilde{\varphi}^\dagger\tilde{\varphi}\mathrm{d}^3r=1, \tag{6}$$

准确到 $(v/c)^2$ 级，我们求得

$$\tilde{\varphi}=\left(1+\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{8m^2c^2}\right)\varphi. \tag{7}$$

变换(3)式，我们求得

$$E'\tilde{\varphi}=\hat{H}\tilde{\varphi}, \tag{8}$$

其中

$$\hat{H}=\left(1+\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{8m^2c^2}\right)\hat{H}'\left(1-\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{8m^2c^2}\right) \tag{9}$$

或

$$\hat{H}=\left(1+\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{8m^2c^2}\right)\left\{\frac{(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})}{2m}\left(1-\frac{E'-V}{2mc^2}\right)(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})+V\right\}$$

$$\left(1-\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{8m^2c^2}\right). \tag{10}$$

因为

$$(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})f(\boldsymbol{r})(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})=f(\boldsymbol{r})\hat{\boldsymbol{p}}^2-\mathrm{i}\hbar\{(\nabla f\cdot\hat{\boldsymbol{p}})+\mathrm{i}(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot[\nabla f\times\hat{\boldsymbol{p}}])\}, \tag{11}$$

我们求得

$$\hat{H}=\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m}+V(\boldsymbol{r})-\frac{(E'-V(\boldsymbol{r}))^2}{2mc^2}-\frac{e\hbar(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot[\mathscr{E}\times\hat{\boldsymbol{p}}])}{4m^2c^2}$$

$$-\frac{e\hbar^2}{8m^2c^2}(\nabla\cdot\mathscr{E}), \tag{12}$$

其中

$$\mathscr{E}=-e\nabla V \tag{13}$$

是静电场.

方程(12)右边头两项是非相对论项，至一级近似，第三项可以写成 $p^4/8m^3c^2$，它来自相对论的质量修正。对于有心力，$\nabla V=(\boldsymbol{r}/r)(\mathrm{d}V/\mathrm{d}r)$，第四项可以写成

$$\Delta\hat{H}_2=\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\frac{(\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}})}{2m^2c^2r}, \tag{14}$$

其中 $\hat{\boldsymbol{S}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{L}}$ 是自旋和轨道角动量算符。这一项叫自旋轨道相互作用。最后一项仅在有电荷的位置上才起作用。例如，在库仑场

情况下，$V\propto\frac{1}{r}$，$\Delta\hat{H}_2\propto\delta(r)$。

23 我们不采用从 l_z 和 s_z 有完全确定值的无微扰本征函数出发，然后解久期方程的方法；为方便起见，我们选取 $\hat{l}^2$ 和 $\hat{j}^2$ 有完全确定值的本征函数为初始本征函数。这里的 $\hat{j}=\hat{l}+\hat{S}$ 是总角动量，很容易证明它与上题中的 $\Delta\hat{H}_2$ 对易。如果考虑到对于这些函数如下关系式成立

$$\hat{j}^2=j(j+1)=l(l+1)+s(s+1)+2(\hat{l}\cdot\hat{S}), \tag{1}$$

我们得到

$$\Delta E_2=\overline{\Delta\hat{H}_2}=\frac{j(j+1)-l(l+1)-s(s+1)}{4m^2c^2}\hbar^2\overline{\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}}. \tag{2}$$

对于氢原子 $V=-e^2/r$，并且由于（见§5.17题）

$$\overline{\frac{1}{r^3}}=\frac{1}{n^3(l+1)\left(l+\frac{1}{2}\right)l}\left(\frac{me^2}{\hbar^2}\right)^3, \tag{3}$$

最后我们得到

$$\Delta E_2=\frac{me^4}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2\frac{j(j+1)-l(l+1)-s(s+1)}{4n^3l\left(l+\frac{1}{2}\right)(l+1)}. \tag{4}$$

这个公式可以写得更简洁些，因为在我们的情况下，$s=\frac{1}{2}$ 且我们有 $j=l-\frac{1}{2}$ 或 $j=l+\frac{1}{2}$。容易证明

$$2(\hat{l}\cdot\hat{S})=j(j+1)-l(l+1)-s(s+1)$$

$$=\begin{cases} l, & \text{当 } j=l+\frac{1}{2}, \\ -l-1, & \text{当 } j=l-\frac{1}{2}, \end{cases} \tag{5}$$

所以对于所有的 j 值和 l 值

$$\Delta E_2=\frac{me^4}{\hbar^2}\left(-\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2\frac{1}{2n^3}\left[-\frac{1}{j+\frac{1}{2}}+\frac{1}{l+\frac{1}{2}}\right]. \tag{6}$$

将ΔE_2与对于质量的相对论修正[这修正来源于粒子的速度(见§7.5题)]以及对于$l=0$态上题方程(12)右边最后一项所引起的修正合并，我们求得

$$\Delta E=\frac{me^4}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2\frac{1}{n^3}\left[\frac{3}{8n}-\frac{1}{2j+1}\right]. \tag{7}$$

这个表示式与l无关，这意味着j相同而l不同的两个态对应于相同的（简并的）能量.

24. 我们再次从§11.21题的方程(1)出发，而现在我们可令

$$\phi=A_x=A_z=0,\quad A_y=\mathscr{H}x, \tag{1}$$

在此我们取z轴沿$\mathscr{H}$的方向.

消去χ我们得

$$\{c^2\hat{p}^2+e^2\mathscr{H}^2x-ec\mathscr{H}(\hbar\hat{\sigma}_z+2x\hat{p}_y)\}\varphi$$
$$=(E^2-m^2c^4)\varphi. \tag{2}$$

我们寻求的解，是$\hat{p}_y$、$\hat{p}_z$和$\hat{\sigma}_z$的本征函数、其本征值为p_y，p_z和σ_z. 因此我们写出

$$\varphi=\exp\{i(p_yy+p_zz)/\hbar\}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\Psi$$

或
$$\exp\{i(p_yy+p_zz)/\hbar\}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\Psi. \tag{3}$$

函数Ψ必须满足方程

$$\{c^2p_z^2-e^2\mathscr{H}^2x^2-ec\mathscr{H}(\hbar\sigma+2xp_y)\}\Psi$$
$$=(E^2-m^2c^4-p_y^2c^2-p_z^2c^2)\Psi, \tag{4}$$

或

$$\{c^2p_z^2+(e\mathscr{H}x-cp_y)^2\}\Psi$$
$$=(E^2-m^2c^4-p_z^2c^2+ec\mathscr{H}\hbar\sigma)\Psi. \tag{5}$$

上式左边的算符是一维谐振子的哈密顿量（参考在非相对论情况下类似的情况；见§6.4题）。因此，能级由下式确定

$$E^2-m^2c^2-p_z^2c^2+ec\hbar\mathscr{H}\sigma=|e|\mathscr{H}(2n+1)\hbar,$$

$$n=0,1,2,\cdots. \qquad (6)$$

很容易验证，在非相对论极限下，这个结果与§6.3题中的结果相同。

25. （i）在这种情况下，代替§11.8题(13)式的四个方程，应该满足下列方程：

$$[\hat{\alpha}_k,\ \hat{\alpha}_l]_+=2\hat{1}\delta_{kl}, \qquad (2)$$

用三个 2×2 矩阵可以做到这一点，取

$$\alpha=c\hat{\sigma}. \qquad (3)$$

（ii） 讨论过程与§11.20题相同。

（iii） 在一能量本征态中，我们有

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=E\Psi, \qquad (4)$$

并且由于

$$c(\hat{\sigma}\cdot\hat{p})\Psi=i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}, \qquad (5)$$

我们求得

$$cp\cos\gamma=E, \qquad (6)$$

其中 γ 是自旋和动量之间的夹角。因 $E^2=p^2c^2$ 或 $E=\pm pc$，所以结论得证。

索　引

每一条目后面的数字表示题序，例如5.14表示§5第14题（或§5.14题）

二　画

几率流密度　1.40

三　画

与时间有关的算符　3.24，3.27，3.28，3.31，3.37，3.40，3.53，3.57，11.15
与时间有关的哈密顿量　3.25

四　画

方势阱　1.1—1.6，3.13，3.44，3.57，3.58
反射系数　2.2，2.4，2.16，2.17，6.16，11.14
中子散射　9.24—9.26，9.28
介子　7.77，7.78，11.7
介子散射　9.32，9.34—9.38，9.40—9.43
内转换　7.74
厄密算符　3.45
厄任费斯脱定理　3.32
引力场　1.20，1.28
双中子　4.53
双原子分子　8.1—8.13，8.24，8.25，8.27，8.28，8.33，8.35—8.37
分支比　9.45—9.47
不对称陀螺　8.21—8.23

五　画

半经典近似　1.21—1.31，1.39，2.7，2.9，2.10，2.12，

2.14, 2.15, 5.19—5.21, 6.10, 6.11, 7.34, 7.66, 9.13
对易关系　§3
对易子　3.1—3.3, 3.6
对称陀螺　8.17—8.20
电离势　7.67
平面转子　1.32—1.34, 7.50
四极矩　4.57—4.60, 7.6

六　画

托马斯-费密原子　7.24—7.31, 7.34, 7.35
自旋　§4, 6.18—6.24
自旋转向　4.27, 9.29
自旋-轨道耦合　7.43, 11.22, 11.23
光子　4.40
场算符　10.11, 10.12
动量表象　1.12, 1.30, 1.35, 3.43, 3.44
动量分布函数　1.3, 1.12, 3.13, 3.35, 3.36, 3.42, 3.43, 7.4
伦敦-范德瓦耳斯力　8.34, 8.35
同位旋　9.31—9.33, 9.44
汤川势　9.11
同位素移动　7.80, 7.81
运动积分　3.50, 3.51
交换效应　7.81
氘核　4.47, 4.48, 5.8, 5.9, 9.39, 9.41, 9.42, 9.45, 9.46
产生算符　§10
宇称　7.82, 9.24—9.26, 9.48

七 画

求和规则 7.83—7.86, 8.40
角动量 §4
狄喇克方程 11.8—11.25
克莱因-戈登方程 11.1—11.7
克龙尼希-彭尼 (Kronig-Penney) 势 1.37, 1.38
极化率 7.35, 7.47, 7.63
极化 10.22—10.25
均匀场 1.19

八 画

转子 4.2, 4.4, 4.5
波包 3.17, 3.18
定态 1.41, 1.42
周期势 1.35—1.39
非局域势 9.15
细致平衡 9.39
非谐振子 7.68
泡利方程 11.21
泡利矩阵 4.14, 4.15

九 画

玻恩近似 9.6, 9.9—9.12
复势 1.40
类氦原子 7.58, 7.62, 7.81
矩阵 3.33, 3.34
洪德定则 7.16
氢原子 1.18, 3.49, 5.17, 5.20, 7.3—7.6, 7.8—7.10,

7.40, 7.45—7.49, 7.53—7.55, 7.63, 7.73, 7.76, 7.78, 9.10, 11.23
类氢原子 7.1, 7.2, 7.38, 7.39
氢分子 8.38, 9.26
洛伦兹变换 11.15—11.17

十　画

氦原子 7.12, 7.33, 7.59, 7.60, 9.10
振动方程 5.9, 7.28, 7.55—7.58, 7.61—7.63, 9.21
核的壳层模型 5.6, 5.7
格林函数 3.18, 3.20—3.22, 3.24
朗德因子 7.36
海森伯表象 3.24, 3.29, 3.30, 3.53
海森伯关系 §3
核的有限质量 7.80, 7.81
核的有限体积 7.64, 7.65, 11.7
莫尔斯势 1.16, 8.12
浸渐微扰 3.54—3.56, 3.58

十 一 画

谐振子 1.8—1.10, 1.12, 1.23, 1.26, 3.9, 3.18—3.24, 3.30, 3.37, 3.39—3.41, 3.56, 5.4—5.6, 6.6, 7.56, 7.57, 7.69—7.72
密度矩阵 §10
偶极矩 7.50, 7.82, 7.83
跃迁几率 3.23, 3.41
跃迁算符 3.47
跃迁系数 2.3, 2.5, 2.7—2.11, 2.15, 2.16, 11.14
维里定理 1.27, 3.34, 7.29, 7.30, 7.79

球形势阱 5.10—5.13

十 二 画

斯特恩-革拉赫实验 4.13, 4.22, 4.35
散射系数 9.18
散射 §9, 10.25
量子化规则 1.21
锂原子 7.61
超精细结构 7.10, 7.11, 7.41
湮没算符 §10
斯塔克效应 7.46, 7.48—7.50, 7.52, 7.53, 7.70, 7.71, 8.32, 8.33
博戈柳博夫 10.15—10.19

十 三 画

塞曼效应 7.41, 7.53, 8.28—8.31
微扰论 5.16, 7.23, 7.40, 7.41, 7.43, 7.44, 7.50, 7.52, 7.62, 7.67, 7.70, 7.71, 7.73, 9.16

十 四 画

隧道效应 §2, 5.14
谱项图 4.49, 7.14—7.23, 7.36, 7.37, 7.43, 7.44
磁矩 4.45—4.47
磁场中运动 §6
α衰变 5.14
β衰变 7.7
δ函数势 1.17, 2.5
WKB方法 见半经典近似