量子力学思考题集

王家庆　雷世曾　编　喀兴林　校

高等教育出版社

量子力学思考题集

王家庆　雷世曾　编
喀兴林　校

高等教育出版社
1992年

(京)112号

内 容 提 要

本书编集了500多道量子力学的思考题，涉及高等学校量子力学课程的各个方面，旨在帮助初学者深入理解量子力学的基本概念，切实掌握量子力学的实质内容. 书中每一道题都给出了详尽的答案，有些还提供了有关的参考文献以开拓思路.

本书可以作为综合大学、师范院校和师范专科学校学生学习量子力学课程的辅助读物，也可供有关教师在教学中参考使用.

本书初稿由王家庆编写，二稿由雷世曾执笔，经二人讨论后定稿，全书由喀兴林审校.

量子力学思考题集

王家庆　雷世曾　编

喀兴林　校

*

高等教育出版社出版

新华书店总店科技发行所发行

河北省香河县印刷厂印装

*

开本 850×1168　1/32　印张 11.75 字数 280 000

1993 年10月第1版　1993 年10月第1次印刷

印数 0 001—1 650

ISBN7-04-004345-9/O·1239

定价55.45 元

O411.1/31/17

序

量子力学是近代物理学两大支柱之一，是描述微观世界运动规律的一门学科．在高等学校，通常是在理论力学、热力学、统计物理和电动力学等经典理论物理课程之后学习量子力学的．由于微观世界的运动规律与宏观世界显现的规律有很大的不同，学习量子力学时要建立许多新的概念，这些新概念与经典概念完全不同，又无生活经验可以借鉴，特别是对刚刚学过经典理论物理课程的学生，经典概念已在头脑中根深蒂固，要在短时间内建立起新的微观世界的各种概念，是一件很不容易的事．

于是，如何正确地理解和掌握这些描述微观世界的新概念，便成了学习量子力学过程中的一个突出的问题．现行量子力学教材中的习题多数是计算题．计算题固然也能对搞清概念和巩固概念起一定的作用，但这些题目的重点往往偏重数学计算．我们在多年讲授量子力学课程中，深感只有计算题还是不够的，还应该多出一些思考题，帮助同学开动脑筋，更好地掌握量子力学中的有关概念．这就是我们编写这本《量子力学思考题集》的原由．

本书的目的就是为初学量子力学的同学提供一批思考题，帮助他们更准确、更深刻地掌握有关概念，学好量子力学．从而使本书成为基本教材之外的一本辅助读物．

要深刻地理解概念，就要反复推敲、反复思考．思考题，顾名思义就是引起思考的题目：或是正面提出问题请你回答；或是提出一个似是而非的问题请你判断；或是提出几种不同答案请你选择．总之，为初学者多开辟一些思路，促使他们多问几个为什么，以提高他们的理解能力、鉴别能力和判断能力，达到更好地学习量子力学的目的．

我们对每一道思考题都给出了参考答案，有些题的答案中还给出了一些说明或指出了思路．为了使你拿到题目之后要自己多想一想，答案并不是直接附在题后，而是要多翻几页才能找到．

本书中的大部分题目都在教材范围之内．但也有一部分题目超出了教材的范围，介绍了一些新的概念．这样做的目的仍是帮助初学者更深入、更全面地掌握教材范围之内的概念．

本书一般不包括单纯的计算题．但是，理论物理是离不开数学公式的，许多概念问题就隐藏在公式中，本书题目中出现的数学计算都是很简单的，其目的仍是为了深入地搞清某一概念．

尽管量子力学中的各种具体规律以及各种概念之间的关系早已为人们所公认并为无数实验现象所证实，然而对于某些规律的理解，对于某些概念的解释，却一直未取得一致的看法，特别是对于量子力学的若干基本问题仍有着相当不同的观点存在．由于这些根本问题不是初等量子力学的重点，也不宜于在初学时展开讨论，本书尽量不去涉及这类问题．尽管如此，我们在某些问题的分析中，仍难免会流露出倾向性，偏向于某一种观点而怠慢了另一种观点．这种情况并不很多，既然目前还没有公认的一致看法，这些问题应该怎样理解是完全可以讨论的．

本书是王家庆、雷世曾二人共同编写的．第一稿由王家庆编写，第二稿经充分讨论后由雷世曾执笔，经二人共同定稿的，全书由喀兴林担任审校工作．由于水平所限，题目的编选可能不尽恰当，题目的解答也可能有不深刻、不全面、不妥当甚至错误之处，我们诚恳地希望各界读者给予指正．

编　者

1992 年 12 月 1 日

目　录

思考题 ……1

第一章　黑体辐射，光的波粒二象性……1
第二章　微观粒子的波粒二象性……8
第三章　波函数　态叠加原理　波动方程……11
第四章　力学量与算符……19
第五章　定态解……27
第六章　不确定关系……34
第七章　绘景和表象……37
第八章　角动量　自旋……43
第九章　全同粒子……53
第十章　定态微扰与量子跃迁……58
第十一章　散射理论……61
第十二章　原子与分子……65
第十三章　对称性与守恒定律……71

解答……77

第一章……77
第二章……93
第三章……102
第四章……134
第五章……167
第六章……187
第七章……194

第八章……220
第九章……270
第十章……294
第十一章……307
第十二章……336
第十三章……361

思 考 题

第一章 黑体辐射，光的波粒二象性

1. 什么叫黑体？

(1) 黑颜色的物体.

(2) 完全吸收任何波长的外来辐射而无反射的物体.

(3) 完全吸收任何波长的外来辐射而无任何辐射的物体.

(4) 吸收比为 1 的物体.

(5) 在任何温度下，对入射的任何波长的辐射全部吸收的物体.

以上哪个说法是正确的？

2. (1) 与热辐射有关的物理量：辐射出射度、辐射体亮度、吸收比、比辐射率(发射率，emissivity)是如何定义的？试给出它们间及与辐射能密度间的基本关系.

(2) 下面列出常见的几种书中①，使用的有关热辐射的主要名

① [1] 王竹溪，《热力学》，1955 年，高等教育出版社；《热力学简程》，1964 年，人民教育出版社.

[2] C.Э. 福里斯等，吉林大学译，《普通物理学》第三卷第一分册，1955 年，高等教育出版社.

[3] Г.С. 兰斯别尔格，杨葭荪等译，《光学》下册，1957 年，高等教育出版社.

[4] 母国光等，《光学》，1979 年，人民教育出版社.

[5] 程守洙等，《普通物理学》(第三版)，1979 年，人民教育出版社.

[6] Э.В. 史包尔斯基，周同庆等译，《原子物理学》第一卷，1954 年，高等教育出版社.

[7] E. 赫克特，A. 赞斯，詹达三等译，《光学》下册，1981 年，人民教育出版社.

词. 请按(1)中出现的物理量，把物理上的同义词归类.

① (总)发射(辐射)本领 E　② 光谱面发光度

③ 面辐射强度　④ 辐射率 $r_{\lambda\cdot T}$

⑤ 单色发射本领　⑥ 总辐射率 R

⑦ (能量)面发光度　⑧ 辐射本领 r_λ

⑨ 表面亮度 B　⑩ 能量亮度

⑪ 出射度(exitance)　⑫ 总辐射通量密度

⑬ 光谱出射度　⑭ (单色)吸收本领 $d_{\lambda\cdot T}$

⑮ 光谱通量密度　⑯ 光谱能量密度 u_ν

⑰ 总辐射度　⑱ 单色辐射亮度 b_ν

⑲ 吸收率　⑳ 单色辐射度

㉑ 总能量密度 ρ　㉒ 光谱辐射亮度 $b_{\nu\cdot T}$

㉓ 吸收因数 α_λ　㉔ 辐射能密度 u

㉕ 能量密度 ρ_ν　㉖ 吸收比

3. 分别写出以单色辐射能密度 u_ω, u_ν, u_λ; 单色辐出度 $r_{\lambda\cdot T}$, $r_{\nu T}$ 及辐射体单色亮度 b_ν, b_λ 表出的普朗克黑体辐射公式. 讨论这些分布曲线间，哪些形状相同？哪些不同？

4. 黑体辐射公式

$$b_\nu=\frac{2h\nu^3}{c^2}\frac{1}{e^{h\nu/kT}-1}\text{及}\ u_\nu=\frac{4\pi}{c}b_\nu=\frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\frac{1}{e^{h\nu/kT}-1}$$

是偏振辐射？还是非偏振辐射的公式？

有些书中，如本章第 2 题注中[1]及[6]，首先由偏振幅射 $u_\nu=\frac{4\pi}{c}b_\nu$ 得出相应的 $u=\frac{4\pi}{c}B$. 进一步对非偏振辐射，考虑到两个独立的偏振方向，则 $u_\nu=\frac{8\pi}{c}b_\nu$. 此时，是否相应有 $u=\frac{8\pi}{c}B$？

5. 维恩位移定律 $\lambda_m T=b$ 是从普朗克公式 u_λ 出发，由 $\frac{du_\lambda}{d\lambda}=0$ 求出的.

如果从 u_ν 出发，由 $\frac{\mathrm{d}u_\nu}{\mathrm{d}\nu}=0$ 求出使 u_ν 为极大的 ν_m，再由 $\lambda=\frac{c}{\nu}$ 换算出 λ 与 T 的关系，与前者是否一致？为什么？

6. 黑体的最大单色辐出度 $r_{\lambda\mathrm{m}}$ 与温度 T 多少次方成正比？

7. 应用维恩位移定律可估算太阳表面温度，为什么可以把太阳视为黑体呢？

8. 试估算太阳质量由于热辐射而耗损 1% 所经历的时间(太阳半径 $R=7.0\times10^8$ m，质量 $M=2\times10^{30}$ kg，$\lambda_\mathrm{m}=0.48$ μm).

9. 对吸收比与波长无关的非黑体——灰体，辐出度 R 与温度的关系如何？

10. (1) 带有小孔的几乎封闭的空腔作为黑体时腔壁是否一定由黑体构成？

(2) 腔的线度为 D，腔壁由反射系数 $k=0.4$ 的粗糙面构成，与 D 相比小孔应小到什么程度才能把此空腔视为黑体（准确度到 0.1%）

11. 有完全反射的两空腔，具有相同直径为 a 的小孔，两腔的位置使两孔正相对，相距为 l. 空腔 1 中维持着恒温 T_1. 问：空腔 2 中，稳态温度 $T_2=$？

12. 有关热辐射的论述中，由于对“吸收”与“发射”有惯用的两种不同定义，因而“发射本领”、“吸收比”等往往因在不同意义下使用而引起混淆.

(1) 在不同定义中，“吸收”，“发射”的含义是什么？每种定义的特点是什么？

(2) 同一问题，从不同定义出发，由理论预期的实验结果是否一致？

(3) 由于两种定义的存在，什么情况下最易引起混淆？

13. 在 L 系（实验室参考系）讨论光子被静止自由电子的弹

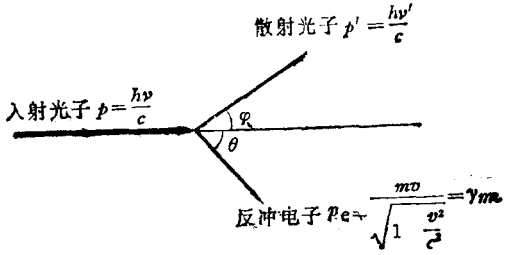


图 1

性散射，如图 1.

(1) 应用相对论能量动量守恒，可得到几个联立方程？方程中含多少变量？

(2) 写出两组参量(一组含动量 p, p_e, p'；一组含频率 ν, ν')下的联立方程.

(3) 在联立方程中消去只与电子有关的参量 v 与 θ，将得到什么结果？

(4) 方程中消去速度 v 与频率 ν'，得到什么结果？

(5) 方程中消去散射角 φ，得到什么结果？

(6) 在方程中消去频率 ν 与 ν'，求出：散射光子的 p' 与反冲电子的速度 v 间夹角 $\phi=\theta+\varphi$ 与 θ 的关系.

14. 康普顿效应中，反冲电子的动能 E_k 与入射光子能量 $E=h\nu$ 间的关系如何？在什么情况下，电子只吸收很小的能量？反冲电子运动方向有什么特点？

15. 在M系(质心系)讨论康普顿散射，求出入射与散射量间的关系，并画出动量矢量图.

16. 证明：对 R系(反冲电子为静止)康普顿散射相当于反射.

(1) 利用上题在M系讨论康普顿散射的结果作定性论证.

(2) 利用本章第 3 题对 L 系的结果，作定量计算.

17. 如以粒子的散射代替康普顿效应中的光子散射，上题的结论是否仍成立？

18. 康普顿效应中入射光子的能量只有部分被电子吸收，这是否意味着光子在相互作用过程中是可分的？

19. 可以观察到可见光的康普顿效应吗？光电效应对入射光有截止频率的限制，康普顿效应对入射光有没有类似限制？

20. 试还几种在原子物理范围内从实验上测定普朗克常数 h 数值的方法，比较哪种方法最准确？

21. 光电效应中，对入射光有截止频率(红限)的限制是否必需？因为当一个电子同时吸收两个或几个频率低于截止频率的光子或电子可积累多次吸收光子的能量，则在任何频率光入射时都能形成光电流.

22. 光电效应中，是否每个入射光子都能释放出一个电子？功率为 P，频率为 ν 的入射光，每秒入射光子数 $N=\frac{P}{h\nu}$，如释放出电子数(即有效光子数)为 n，定义：量子效率 $\eta=\frac{n}{N}$.

如何从实验中求出量子效率 η？$\eta=1$？$\eta<1$？

23. 以波长 $\lambda=0.3\times10^{-6}$ m 的光照射一光电管，使工作于产生饱和光电流状态.已知，此光电管的光谱灵敏度 $J=4.8$ mA/W.

求，一个入射光子所产生光电子的数目，即量子效率 $\eta=$？

24. 什么实验事实说明：单色入射光产生的光电子初速度是不一致的？电子按速度分布曲线是否可由实验求出？这个速度分布是连续的还是离散的，产生速度分布的原因是什么？

25. 既然光电子初速度呈某种分布，爱因斯坦方程 $h\nu=\frac{mv^2}{2}+\phi$ 式中出现的电子速度 v 指的是哪个速度？为什么方程习惯上用最大速度 v_m 表出？它与用任意速度 v 表出有什么不同？

26. 光电管的发射极(阴极)与接收极(阳极)为什么用两种不

同金属构成？阴极材料给定后，是否用其他任何金属作阳极都可以？

27. 实验中实测到的光电伏安特性曲线与教科书中给出的典型的特性曲线不同，如图 2，产生差别的主要原因是什么？

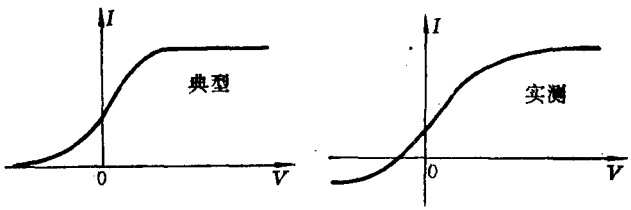


图 2

28. 光电效应实验装置中，当光电流为零时，电压表读数为 V_0，通常称此 V_0 为遏止电势，它与光电子最大动能的关系是否为 $eV_0=\frac{1}{2}mv_m^2$？称为遏止电势的 v_0 是否是真正遏止电势？

29. 图 3 中给出典型的光电伏安特性曲线. 从曲线上如何确定惯用的遏止电势 V_0、阴阳极间接触电势差 V_c 以及真正的遏止电势 V_0. 并画出 $V_c=0$ 时的伏安特性曲线.

30. 通常认为：光电管发射极的功函数 ϕ_e 可由 eV_0 与 ν 的直线关系 $eV_0=h\nu-\phi_e$ 求出，如图 4，这种说法对否？

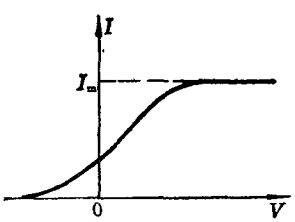


图 3

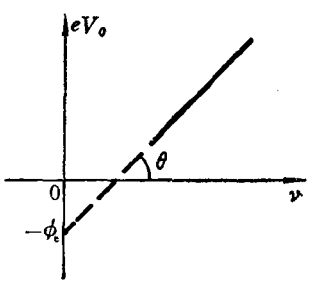


图 4

31. 考虑光电管两极间的接触电势差 V_{ce}，将对 eV_0-ν 曲线有什么影响？是否影响了密立根实验的结果？

32. 密立根验证爱因斯坦方程的实验，实质上是由 eV_0-ν 直线的斜率求 h. 对给定光电管只要改变入射光频率 ν，由电压表测出相应的遏止电势 V_0 就可以了. 但这个实验使密立根用了 10 年的时间才完成. 问题关键在哪里？实测中如何正确确定遏止电势 V_0？

33. 截止频率(红限)$\nu_0=\frac{\phi_e}{h}$及其测定是否与存在接触电势差有关？

34. 密立根当年研究以金属 e 作阴极、金属 c 作阳极的光电效应时，为了作出 eV-ν 直线(这里 $V=V_0(e)+V_{ce}$，其中 $V_0(e)$为光电流为零时电压表测值，V_{ce} 为 c、e 两极间接触电势差)，他选金属 e、c、b，使截止频率 $\nu_0(b)<\nu_0(e)<\nu_0(c)$，由研究金属 b 的光电效应(分别以 c 及 e 作阳极)即可得出 V_{ce}.

问：V_{ce} 是如何得出的？

35. 康普顿效应中作为散射体的电子是否一定是自由电子？光子被束缚电子散射时结果如何？

36. 光电效应的爱因斯坦方程，在什么温度下才准确成立？

第二章　微观粒子的波粒二象性

1. 在德布罗意基本假设中$\lambda=\frac{h}{p}$，如何从光学与力学基本概念间存在的深刻的类似性而得到启示？

2. 历史上，德布罗意如何受狭义相对论的启示得出德布罗意的两个基本关系：$E=\hbar\omega$ 与 $\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k}$？

3. 德布罗意波在电子的椭圆轨道上是否能容纳整数个波而形成驻波？其含意是什么？

4. 为什么粒子的波动性在我们日常观察中不甚明显？举例说明.

5. 德布罗意关系式是仅用于基本粒子如电子、中子之类还是同样适用于具有内部结构的复合体系？

6. 粒子的德布罗意波长是否可以比其本身线度长或短？二者之间是否有必然联系？

7. 什么是德布罗意波包？给出它的一般表达式？

8. 什么是相速？什么是群速？什么情况下它们才相等？

9. 德布罗意波的运动如何与粒子运动联系？

(1) 粒子的力学运动速度 v 与平面波相速间有什么关系？

(2) 证明：德布罗意波包的群速度 v_g 等于粒子的力学速度 v.

10. 已知粒子(静能 $m_0\neq0$)能量 E，求德布罗意波长 $\lambda=$？

(1) 由 $\nu=\frac{E}{h}$ 代入公式 $\lambda=\frac{c}{\nu}$ 求出 λ.

(2) 由 $E=\frac{p^2}{2m_0}$ (相对论情形时 $E=\sqrt{p^2c^2+m_0^2c^4}$)计算出与已知 E 对应的动量 p，再由 $\lambda=\frac{h}{p}$ 求出 λ.

问：哪个正确？

11. 德布罗意波是否有确定的频率？频率$\nu=\frac{E}{h}$是否可由直接测量而验证？波长$\lambda=\frac{h}{p}$呢？

12. 讨论以下类似性：波动力学（量子力学）与经典力学的关系有似于物理光学（波动光学）与几何光学的关系.

13. 关于粒子的波动性，某种看法认为：粒子运行轨迹是波动曲线，或其速度呈波动式变化，这种看法对不对？

14. 在电子衍射实验中，单个电子的落点是无规则的. 而大量电子的散落则形成了衍射图样，这是否意味着单个粒子呈现粒子性，大量粒子集合才呈现波动性？

15. 有人认为德布罗意波是粒子的疏密波，如同声波一样？这种看法对不对？

16. 粒子按轨道运动这个概念的实质是什么？

试直接从德布罗意假设$\lambda=\frac{h}{p}$出发，论证：对微观粒子不存在轨道概念.

17. 为什么德布罗意波包在真空中亦会扩散？

18. 按经典观点解释：波动性、粒子性.

19. 波动性与粒子性是如何统一于同一客体之中的？物质在运动过程中是如何表现波粒二象性的？

20. “电子是粒子，又是波”，

“电子不是粒子，又不是波”，

“电子是粒子，不是波”①，

“电子是波，不是粒子”，

以上哪一种说法是正确的？

① 康帕涅耶茨，《理论物理》（中译本），1960年，高等教育出版社，p.264.

21. 量子力学创建时，德布罗意本人对微观粒子波粒二象性中波和粒子的关系是如何认识的？薛定谔等人呢？

22. 以下说法是否正确？

(1) 量子力学适用于微观体系，而经典力学适用于宏观体系.

(2) 量子力学适用于 h 不能忽视的体系，而经典力学适用于 h 可以忽略的体系.

23. h 既为常数，通常说 $h\to 0$ 是指什么意思？

24. 量子化是不是量子力学特有效应？经典物理中是否有量子化现象？

第三章　波函数　态叠加原理　波动方程

1. 经典波有波函数吗？量子波函数与经典波函数有什么异同？

2. 经典物理中有态叠加原理吗？态叠加与经典波叠加有什么异同？举例说明.

3. 判断下列说法是否确切、完整.

(1) 波函数是德布罗意波的数学表示.

(2) 波函数是体系波方程的解.

(3) 波函数是单粒子态的数学表示.

(4) 波函数是量子态的数学表示.

4. 以下说法是否确切？

(1) 粒子波函数振幅的平方等于在一定时刻一定位置找到粒子的概率.

(2) 如粒子波函数为 $\psi(\boldsymbol{r},t)$，则在时刻 t，位置 $\boldsymbol{r}$ 找到粒子的概率为 $|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2$.

5. 波函数的物理意义——微观粒子的状态完全由其波函数描述，这里"完全"的含义是什么？

6. 已知自由粒子能量 $E=\sqrt{m_0^2c^4+p^2c^2}\approx m_0c^2+\frac{p^2}{2m_0}+\cdots$. 式中 m_0 是粒子的静止质量. 如果我们选择能量零点，使自由粒子的总能(即动能)取为 $E=\frac{p^2}{2m_0}$. 问：当能量零点改变时概率密度 $w(x)=\psi^*(x)\psi(x)$ 是否随之改变？

7. 波函数归一化的含义是什么？什么样的波函数可以归一化？归一化随时间变化吗？

8. 将下列波函数归一化：

(1) $\psi(x)=\begin{cases}\sin\dfrac{\pi x}{a} & 0<x<a\\ 0 & x<0, x>a.\end{cases}$

(2) $\psi(x)=\begin{cases}x(a-x) & x>0, x<a\\ 0 & x<0, x>a.\end{cases}$

式中$a>0$.

(3) $\psi(x)=e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$($\alpha$ 常数).

(4) $\psi(x)=\begin{cases}Nxe^{-\lambda x} & x>0, \lambda \text{ 常数}\\ 0 & x<0.\end{cases}$

9. N 个粒子体系的波函数，如何归一化？

10. “双狭缝干涉实验中，电子必定通过两缝之一而打到屏上，因此落到屏上的总电子数必定等于分别通过两缝的电子数之和”，这种说法对吗？

11. 已知单粒子的归一化波函数 $\psi(x)$，用 $\psi(x)$表出粒子动量 p_x 介于 p_1 与 p_2 之间的概率. 如果三维粒子波函数 $\psi(x, y, z)=\psi(r)$. 粒子动量分量 p_x 介于 p_1 与 p_2 之间的概率怎样以 $\psi(x, y, z)$表达？

12. 设单粒子的归一化波函数 $\psi(x、y、z)=\psi(r)$、用 $\psi(x、y、z)$表出下列概率.

(1) 粒子坐标 x 介于 x_1 与 x_2 之间，$x_1\leqslant x\leqslant x_2$.

(2) $x_1\leqslant x\leqslant x_2$，同时粒子动量分量 $p_z\geqslant 0$.

(3) 粒子动量分量 p_x, p_y, p_z 同时分别为：$p_1\leqslant p_x\leqslant p_2, p_3\leqslant p_y\leqslant p_4, p_5\leqslant p_z\leqslant p_6$.

13. 一维空间两粒子体系的波函数为$\psi(x_1,x_2)$，写出下列概率.

(1) $x\leqslant x_1\leqslant x+\mathrm{d}x, \alpha\leqslant x_2\leqslant\beta$.

(2) 发现粒子 1 的位置介于 x 和 $x+\mathrm{d}x$ 之间（不对粒子 2 进行观测）.

(3) 至少发现一个粒子的位置介于 α 和 β 之间.

(4) 有且仅有一个粒子的位置介于 α 和 β 之间.

(5) $p' \leqslant p_1 \leqslant p''$, 且 $\alpha \leqslant x_2 \leqslant \beta$.

(6) $p' \leqslant p_1 \leqslant p''$, 且 $p''' \leqslant p_2 \leqslant p''''$.

14. 为什么说平面波函数是不能归一化的，如何理解这个结果？这是否给量子力学带来困难？

15. 波包 $\varphi(x)=A\int_{p_1=p_0-\Delta p}^{p_2=p_0+\Delta p} e^{ipx/\hbar}dp$, A 为一常数.

(1) 组成此波包的各平面波具有的动量的分布是什么？

(2) 证明：此波包是平方可积的，并求出归一化的波函数.

16. 量子波函数是可以测量的量吗？是否可由测量概率分布而计算出波函数？

17. 量子力学中态的叠加原理，常被表述为：

"如果 ψ_1 与 ψ_2 是体系的可能态，则它们的线性叠加 $\phi=c_1\psi_1+c_2\varphi_2$ 也是这个体系的一个可能态."

(1) 是否可能出现 $\psi(x,t)=c_1(t)\varphi_1(x)+c_2(t)\varphi_2(x)$

(2) 对其中的 c_1 与 c_2 如认为：①"系数 c_1 与 c_2 是任意与 r 无关的复数，但可能是时间 t 的函数"这种理解正确吗？

18. 态的叠加原理，通常以对叠加态取和的形式表出如 $\psi=\sum_n c_n\varphi_n$，是否有积分形式的态的叠加原理？举例说明.

19. 怎样从测量的角度理解态叠加原理的物理意义？如体系处于叠加态 $\varphi=c_1\varphi_1+c_2\varphi_2$，通常所说：体系处于 φ_1 态的概率是 $|c_1|^2$，处于 φ_2 态的概率是 $|c_2|^2$，这种说法的准确含义是什么？

20. 以微观粒子的双狭缝干涉实验为例，说明态叠加原理. 什么情况下可出现概率叠加？

21. 狄拉克认为②："每个光子只与它自己发生干涉，从来不会

---

① J. M. Cassels, *Basic Quntum Mechanics*, 1990, p. 6.

② 狄拉克，《量子力学原理》(中译本)，1965 年，科学出版社，p. 9.

出现两个不同光子之间的干涉.”，如何理解这句话的含义？

22. (1) 波函数 ψ 与 $K\psi$、$\psi e^{i\alpha}$(K、α 均为常数)是否描述同一状态？

(2) 下列波函数在什么情况才是描述同一状态？

$$\psi_1+\psi_2;\ c_1\psi_1+c_2\psi_2;\ c_1\psi_1 e^{i\alpha_1}+c_2\psi_2 e^{i\alpha_2}.$$

(这里，c_1、c_2 为复常数，α_1、α_2 为实常数.)

23. 什么是量子系综？它与经典系综有什么区别？为什么说量子波函数一般是描述量子系综的，而不仅仅是描述个别粒子状态的？

24. 以下是态的一种定义①：“态是构成对态的制备的、对系统的一系列操作的结果. 如果在态的制备中有关的条件都相同的话，两个态就是相同的.”，这个定义的含义是什么？举例说明. 这个定义的含义是什么？举例说明.

25. 量子力学的基本假设中为什么没有态的定义？

26. 如图 5 设偏振光沿 Oz 轴正向（垂直纸面由里向外）传播. 光子的偏振态，以各偏振方向单位矢量表出如 $e_x, e_y, \cdots$.

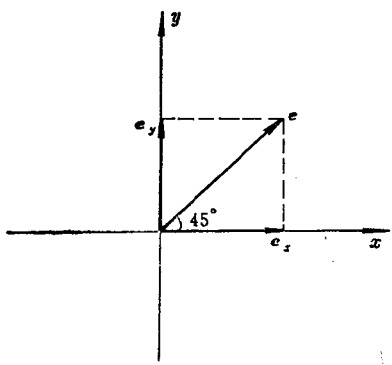


图 5

① J. M. Jauch, *Foundations of Quantum Mechanics*, 1968, P. 92.

(1) 如果全体入射光子的偏振态都是 $e=\frac{1}{\sqrt{2}}(e_x+e_y)$，问：这个态是 e_x 态与 e_y 态的相干叠加，还是非相干叠加？是纯态，还是统计混合态？

是否在 e 态的 N 个光子中，有 $N\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2=\frac{N}{2}$ 个光子处于 e_x 态，有 $\frac{N}{2}$ 个光子处于 e_y 态？

如何检验这个结论？

(2) 如果入射光为自然光时，将如何？

(3) 由此例说明：态的线性叠加与统计混合的差异，相干叠加与非相干叠加的差异？

27. 互相正交的两个偏振态 e_x 与 e_y 线性叠加产生四个偏振态：$e_1=\frac{1}{\sqrt{2}}(e_x+e_y)$，$e_2=\frac{1}{\sqrt{2}}(e_x-e_y)$，$e_3=\frac{1}{\sqrt{2}}(e_x+ie_y)$，$e_4=\frac{1}{\sqrt{2}}(e_x-ie_y)$，分析它们的展开系数的相对相位间有什么差别？说明它们各代表什么偏振态？

28. “归一化波函数可以含有一任意相因子”．“相位的出现是量子力学最基本的特征，没有相位就不成其为量子力学．”这两个论断是否矛盾？

29. 薛定谔方程是如何建立的？是推导出来的吗？

30. 薛定谔方程能否适用于相对论性粒子？

31. 有的书中说，为了满足叠加原理，波动方程必须是线性的．也有的书上说：因为波动方程是线性的，所以存在叠加原理．到底哪个说法对？

32. 为什么粒子波动方程中的系数不应包含有关粒子运动的一些参量如动量，能量，……？

33. 如将计算势能的起点改变一个常量 c，使 $V(r)\to V(r)$

$+c=V'(r)$，波动方程的解将发生什么变化？

34. 如何应用波动方程得出概率守恒——波函数的归一化不随时间改变？

35. 什么是定域的概率守恒？概率流密度的物理意义是什么？它可以直接加以测量吗？

36. (1) 对什么波函数描述的态，概率流密度与电流密度……均为零？

(2) 对什么波函数描述的态，概率密度与概率流密度……是稳定的(与 t 无关).

(3) 平面波的 $w=?$ $j=?$ 具有什么特征？

37. 如果势函数是复函数，概率守恒是否仍成立？复势函数的物理意义是什么？

38. 量子体系是否遵从因果律？波方程如何反映这种因果律？

39. 什么是量子力学的初值问题？如何求解？举例说明.

40. 量子力学中的初值问题可由 $\psi(r,t)=\hat{U}(t,0)\psi(r,0)$ 求出，式中 $\hat{U}(t,0)$ 为体系的演化算符，体系哈密顿量不显含时间时

$$\hat{U}=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{-i}{\hbar}\hat{H}t\right)^n$$

用演化算符$\hat{U}$求出的$\psi(r,t)$与波动方程解是否一致？对平面波 $\psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}p_0x}$ 应用 $\hat{U}$ 求出 $\psi(x,t)$并与上题结果比较.

41. 经典物理中有对时间导数的一阶方程吗？如有请举例并与薛定谔方程作比较.

42. 设波动方程为$a\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi$，$\hat{H}$ 为体系哈密顿量，$\frac{\partial\psi}{\partial t}$ 前系数为 a，证明：如果要求方程有周期解，a 必须为复数.

43. (1)设两个无关的部分组成一体系，如两个独立的粒子，体系的哈密顿量 $\hat{H}(x_1,x_2)=\hat{H}_1(x)+\hat{H}_2(x_2)$，如第一个粒子的态

为 $\psi_1(x_1,t)$，第二个粒子的态为 $\psi_2(x_2,t)$，根据波函数的统计解释，体系 $\psi(x_1,x_2,t)=$？

(2) 设波动方程为时间导数的一阶方程，$a\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi$；或为时间导数的二阶方程 $a^2\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}=\hat{H}\psi$，其中 a 为待定常数. 问：这两个方程中，哪个能得出前问中的正确解，从而是可接受的波动方程.

44. 经典波动方程 $\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}=v\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$，$v$ 为波速的平方，是否可作为量子力学中的波动方程？

45. 量子力学中波函数一般应为复函数，通常我们取复指数函数形式表示波函数. 如果我们把复函数 ψ 分为实部与虚部 $\psi=\psi_1+i\psi_2$（ψ_1 和 ψ_2 均为实函数）重新建立量子力学的公式.

问：此时，概率密度 $w=$？波动方程是什么形式？为什么我们不采用这种表述形式？

46. 经典波中，平面波（沿 x 轴方向传播）的表达式为

$$\psi_1=A\cos(kx-\omega t)\text{或 }\psi_2=A\sin(kx-\omega t).$$

量子力学中是否也可取相应的实函数 $\psi_1=A\cos\frac{1}{\hbar}(px-Et)$ 或 $\psi_2=A\sin\frac{1}{\hbar}(px-Et)$ 作为平面波的波函数？

实函数 ψ_1 与 ψ_2 对时间的二阶微分方程是什么？

47. 由上题中平面波波函数的例子，是否可用对时间的二阶微分方程 $\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}=-\frac{\hbar^2}{4m^2}\frac{\partial^4\psi}{\partial x^4}$ 及一个实波函数 ψ 来代替薛定谔波方程与复波函数而建立一个可接受的理论？

(1) 论证：如果概率密度 w 只与实波函数 ψ 有关，概率守恒不可能对任意 ψ 都成立.

(2) 验证：如果定义概率密度 $w=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)^2+\frac{\hbar^2}{8m^2}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right)^2$，概

率流密度 $\boldsymbol{j}=\frac{\hbar^2}{4m^2}\left[\frac{\partial\psi}{\partial t}\frac{\partial^3\psi}{\partial x^3}-\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\frac{\partial^4\psi}{\partial x\partial t}\right]\boldsymbol{i}$，则 $w\geqslant 0$ 且满足概率守恒 $\frac{\partial w}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0$

(3) 以平面波 $\psi=\cos(kx-wt)$ 为例，求出 $w=$？并由此说明上问中定义的概率密度是不能用的.

48. 如果把概率密度定义为 $w(x,t)=\psi^*(x,\ t)\psi(x,\ t)+\frac{\partial}{\partial x}(\psi^*\psi)$ 仍然可导致概率守恒，为什么没采用这个定义？

49. 证明：薛定谔方程在伽利略变换下保持形式不变.

50. 量子力学规律的统计性与经典统计力学的统计规律有什么不同？为什么概率会进入量子力学？量子力学统计的客观基础是什么？

第四章　力学量与算符

1. 量子力学中与力学量有关的基本假设有哪些？

2. 量子力学为什么要用算符表示力学量？

3. 量子力学中力学量的定义是什么？为什么它没有出现在基本假设之中？这是否是理论上的缺陷？

4. 什么是可观察量？它与力学量有何区别？什么是可观察算符？它与厄米算符有何区别？

5. 什么是算符的本征值和本征函数？它们有什么物理意义？

6. 什么是算符的期望值(平均值)？它们有什么物理意义？

7. 给出下列算符的定义.

(1) 线性算符，反线性算符.

(2) 单位算符.

(3) 零算符.

(4) 逆算符.

(5) 转置算符.

(6) 复共轭算符.

(7) 厄米共轭算符.

(8) 厄米算符.

(9) 幺正算符.

8. 算符运算与一般代数运算有什么异同？

9. 以下等式是否成立？

(1) $(\hat{g}+\hat{f})^2=\hat{g}^2+2\hat{g}\hat{f}+\hat{f}^2$.

(2) $e^{\hat{g}}e^{\hat{f}}=e^{\hat{g}+\hat{f}}$.

10. 矢量算符的运算有什么特点？

11. 下面推导是否正确？

$$\hat{L}\hat{F}=(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})\hat{F}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}\hat{F}=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}\times\frac{\partial\hat{F}}{\partial\boldsymbol{r}},$$

其中 $\hat{\boldsymbol{r}}$ 为坐标矢量算符，$\hat{\boldsymbol{p}}$ 为动量矢量算符，$\hat{\boldsymbol{L}}$ 为角动量矢量算符.

12. 线性算符之和是否仍为线性算符？线性算符乘积或乘幂是否仍为线性算符？

13. 同上题所问厄米算符又将如何？

14. 厄米算符有哪些特性？

15. 为什么作为力学量必须要求算符是线性的、厄米的？

16. 定义厄米算符时通常总说：对任意的 φ 与 ψ 满足 $(\varphi,\hat{F}\psi)=(\hat{F}\varphi,\psi)$，则 $\hat{F}$ 是厄米的. 这里 φ,ψ 任意性有多大？是否指在态空间中的任意性？一个算符是否在整个态空间都有意义？什么是厄米算符的定义域？举例说明.

17. 一个厄米算符的定义域如何确定？

18. (1) 动量算符 $\hat{p}_x=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ 对满足什么样无穷远条件的波函数才是厄米算符？

(2) $\hat{p}_x$ 的自乘幂 $\hat{p}_x^n$ 作为厄米算符，波函数是否也满足同样的无穷远条件？以 $\hat{p}^3$ 为例.

19. 下列算符中哪些是线性算符？

(1) $\hat{A}u=\lambda u$，λ 为常数.

(2) $\hat{B}u=u^*$.

(3) $\hat{C}u=u^2$.

(4) $\hat{D}u=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}u$.

(5) $\hat{E}u=\frac{1}{u}$.

(6) $\hat{F}=[\hat{H},\hat{p}]$ $\hat{H},\hat{p}$ 均为线性算符.

20. 连续谱本征函数"归一化"为δ函数是如何得出的？这与"连续本征函数是不能归一化的"是否矛盾？

21. 动量本征函数归一化为δ函数

$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{p'}(x)\psi_p(x)\mathrm{d}x=\delta(p'-p)$（一维情况，为简便略去$p_x$的下标$x$），由此讨论波包$\psi_{p_1p_2}=\int_{p_1}^{p_2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}pt/\hbar}\mathrm{d}p$的正交归一性.

22. 讨论处理连续本征函数归一化的其他方式：

（1）什么是平面波的箱归一化？为什么要引入周期性边界条件？

（2）x的本征函数如何作为离散谱问题的极限来处理？

23. 证明：如$\hat{F}$是厄米算符，则

$\hat{U}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha\hat{F}}=\left[1+\mathrm{i}\alpha\hat{F}+\frac{(\mathrm{i}\alpha\hat{F})^2}{2!}+\cdots\right)$（$\alpha$是实数）是幺正算符.

24. 证明任何线性算符$\hat{F}$可以唯一地写成$\hat{F}=\hat{A}+\hat{B}$，式中$\hat{A}$为厄米算符，$\hat{B}$为反厄米（$\hat{B}=-\hat{B}^{+}$）算符.

25. 对于含有算符对易式的代数运算，分配律是否成立？算符和的对易式是否等于对易式之和？即

$$\left[\sum_i\hat{A}_i,\ \sum_k\hat{B}_k\right]=\sum_{ik}[\hat{A}_i,\hat{B}_k]\text{是否成立？}$$

26. 厄米算符本征函数的正交性——属于厄米算符$\hat{F}$的不同本征值的本征函数是相互正交的. 从这个定理是否可以说$\hat{F}$的同一本征值的本征函数一定不正交？举例说明.

27. x表象中，通常取$\hat{x}=x$，$\hat{p}=-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$（一维）. 如$\hat{p}$改取为$\hat{p}=-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}+f(x)$，$f(x)$为$x$的任意实函数，问：

（1）$\hat{x}$与$\hat{p}$的对易关系是否改变？

（2）$\hat{p}$的本征值谱是否变化？本征函数$\psi_p(x)$是否仍为平面

波？概率密度$|\psi_p(x)|^2$是否改变？

(3) 任一波函数 $\psi(x)$ 如何表示成这些动量本征函数的叠加？

(4) 力学量 $F\left(\hat{x}, -\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)$作相应改变为 $\hat{F}\left[\hat{x}, -\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}+f(x)\right]$是否在物理上引起实质改变？

28. 径向动量

(1) 经典力学中径向动量为 $p_r=\frac{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}}{r}$，量子力学中把力学量用相应的算符表示出. 算符$\hat{F}_r=\frac{\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}}{\hat{r}}$是否厄米的？

(2) 量子力学中径向动量 $\hat{p}_r=?[\hat{r}, \hat{p}_r]=?$

(3) 厄米算符 $\hat{p}_r$ 是力学量吗？厄米算符 $\hat{p}_r$ 的定义域是什么？

29. 在什么条件下，不对易的厄米算符 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 满足

$$(\psi, \hat{A}\hat{B}\psi)=(\psi, \hat{B}\hat{A}\psi).$$

30. 算符$\hat{F}=\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$作用在平方可积函数 $\psi(x)$上，$\psi(x)$定义在半轴$(0, +\infty)$上，且满足 $\psi(0)=0$. 问：

(1) 算符$\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$是否为厄米算符？

(2) 算符的本征函数是什么？

31. 已知 $\hat{f}$ 与 $\hat{g}$ 都是线性厄米算符，判断下面算符是否仍为厄米算符.

(1) $\hat{f}+\mathrm{i}\hat{g}$.

(2) $\hat{f}-\mathrm{i}\hat{g}$.

(3) $\hat{f}\hat{g}+\hat{g}\hat{f}$.

(4) $\hat{f}\hat{g}-\hat{g}\hat{f}$.

(5) $\mathrm{i}(\hat{f}\hat{g}+\hat{g}\hat{f})$.

(6) $\mathrm{i}(\hat{f}\hat{g}-\hat{g}\hat{f})$.

32. 如何一般定义算符的函数 $F(\hat{A})$ 或 $F(\hat{A}, \hat{B})$？此处 $F(x)$

或 $F(x,y)$为一任意的函数形式.

33. 力学量之间的对易关系有什么物理意义?

34. 力学量之间的对易关系是否具有传递性?即如 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 对易且 $\hat{B}$ 与 $\hat{C}$ 对易,是否必有 $\hat{A}$ 与 $\hat{C}$ 对易?

35. 给出常见的力学量对易关系:

$[x_\alpha, x_\beta]=?$ $[\hat{p}_\alpha, \hat{p}_\beta]=?$ $[\hat{l}_\alpha, \hat{l}_\beta]=?$ $[\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\beta]=?$

$[\hat{x}_\alpha, \hat{l}_\beta]=?$ $[\hat{p}_\alpha, \hat{l}_\beta]=?$ $[\hat{r}^2, \hat{p}_\alpha]=?$ $[\hat{r}^2, \hat{l}_\alpha]=?$

$[\hat{p}^2, \hat{x}_\alpha]=?$ $[\hat{p}^2, \hat{l}_\alpha]=?$ $[\hat{l}^2, \hat{x}_\alpha]=?$ $[\hat{l}^2, \hat{l}_z]=?$

$[\hat{l}^2, \hat{p}_\alpha]=?$ $[\hat{l}_+, \hat{l}_-]=?$ $[\hat{l}_\alpha, \hat{l}_\pm]=?$ $[\hat{l}^2, \hat{l}_\pm]=?$

式中 $\hat{l}_\pm=\hat{l}_x\pm i\hat{l}_y$.

36. 证明下列恒等式:

(1) $[\hat{A},\hat{B}]=-[\hat{B},\hat{A}]$.

(2) $[\hat{A},\hat{A}]=0$.

(3) $[\hat{A},S]=0$(S 非算符).

(4) $[\hat{A},\hat{B}+\hat{C}]=[\hat{A},\hat{B}]+[\hat{A},\hat{C}]$.

(5) $[\hat{A},\hat{B}\hat{C}]=\hat{B}[\hat{A},\hat{C}]+[\hat{A},\hat{B}]\hat{C}$.

(6) $[\hat{A}\hat{B},\hat{C}]=\hat{A}[\hat{B},\hat{C}]+[\hat{A},\hat{C}]\hat{B}$.

(7) $[\hat{A},[\hat{B},\hat{C}]]+[\hat{B},[\hat{C},\hat{A}]]+[\hat{C},[\hat{A},\hat{B}]]=0$.

(8) $[\hat{A}^m,\hat{B}^n]=\sum_{s=0}^{m-1}\hat{A}^{m-s-1}\hat{B}^{n-1}[\hat{A},\hat{B}]\hat{A}^s$.

37. 如力学量 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 对易,它们是否必有共同本征态?反之,如 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 有共同本征态,它们是否必对易?

38. 在力学量 $\hat{A}$ 的任一给定的本征态 ψ_A 中力学量 $\hat{A}$ 有完全确定值.

问:当$[\hat{A},\hat{B}]\neq 0$ 或$[\hat{A},\hat{B}]=0$ 时,力学量 $\hat{B}$ 在ψ_A 态中是否也有完全确定值?

39. 一维自由粒子 $\hat{H}=\dfrac{\hat{p}^2}{2m}$.

(1) 属于能量本征值 E 的能量本征函数 ψ_E=?

(2) 动量 $\hat{p}$ 与 $\hat{H}$ 对易$[\hat{p},\ \hat{H}]=0$，$\hat{p}$ 与 $\hat{H}$ 的共同本征函数 $\psi_{E\cdot p}$=?

(3) 对任一给定的 ψ_E，是否 $\hat{p}$ 必具有确定值?

(4) 以通常表示集合的 Venn 图表出本题中动量 $\hat{p}$ 与 $\hat{H}$ 对易$[\hat{p},\hat{H}]=0$ 时，本征函数 ψ_p 集与 ψ_E 集间的关系.

40. $[\hat{A},\hat{B}]=[\hat{B},\hat{C}]=[\hat{A},\hat{C}]=0$ 表明力学量 $\hat{A}$、$\hat{B}$、$\hat{C}$ 中任意两个都是相互对易的，如只是 $\hat{A}$ 具有非简并的本征函数，试以 Venn 图表出它们本征函数集.

41. 关于角动量 $\hat{L}^2$ 及 L_x、L_y、L_z 的本征态

已知$[\hat{L}^2,\hat{L}_x]=[\hat{L}^2,\hat{L}_y]=[\hat{L}^2,\hat{L}_z]=0$，但 L_x、L_y、L_z 三者间任两个都不可对易，并且 $\hat{L}^2$ 具有$(2l+1)$度简并，试以 Venn 图表出角动量 $\hat{L}^2$ 及 $\hat{L}_x$、$\hat{L}_y$、$\hat{L}_z$ 的本征态?

42. 什么是厄米算符本征函数的正交性、完全性、封闭性? 完全性是否就是封闭性?

43. 什么叫奇算符、偶算符?这两类算符的矩阵元有何特点?

44. 所有量子态都可分为本征态与非本征态，这句话是否确切?

45. 如果波函数 ψ 不是力学量 $\hat{F}$ 的本征态，那么在态 ψ 中测量 $\hat{F}$ 会发生什么情况?

46. 是否可把力学量分为两类:一类本征值为连续谱，而另一类本征值为离散谱.

47. 态 $\psi(x)=\frac{1}{2i}(e^{ikx}+e^{-ikx})$ 中，动量本征值是否是分立的$(\pm\hbar k)$?

48. 下列算符是否可视为力学量? 若是，指出它们的本征值与本征态.

(1) 时间演化算符.

(2) 复共轭算符.

(3) 空间有限平移算符.

(4) 空间无限小平移算符.

(5) 空间有限转动算符.

(6) 空间无限小转动算符.

49. 如果力学量 $\hat{F}$ 在态系 $\{\psi_i\}$ 中平均值 $\overline{F}_i=0(i=0,\ 1,\ 2,\ 3,\cdots)$，在态 $\psi=\sum_i c_i\psi_i$ 中是否必有 $\overline{F}=\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle=0$?

50. 证明：在具有确定宇称的定态中，动量平均值 $\langle\hat{p}\rangle=0$.

51. 力的概念在量子力学与经典物理中的地位有什么不同?

52. 量子力学中平均值公式

(1) ψ 态中，力学量 $\hat{F}$ 的平均值 $\overline{F}=\langle\psi,\hat{F}\psi\rangle$.

(2) $\overline{F}=\sum_n|c_n|^2\lambda_n$(离散谱)或 $\overline{F}=\int|c_\lambda|^2\lambda\mathrm{d}\lambda$ 其中 $c_\lambda=(\varphi_\lambda,\psi)$(连续谱). 其中 $c_n=(\varphi_n,\psi)$，φ_n 为 $\hat{F}$ 的本征值、为 λ_n 的本征函数.

这两公式有什么不同?

53. 力学量 $\hat{F}^2$ 的平均值公式，可由以下三个公式计算

① $(\psi,F^2\psi)$　② $(\hat{F}\psi,F\psi)$　③ $\sum_n|c_n|^2\lambda_n^2$

这三个公式是否等效，它们各自成立的条件是什么?

54. 一维无限深势阱中，粒子在 $\psi(x)=\sqrt{\frac{30}{a^5}}x(a-x)$ 态运动 $(0\leqslant x\leqslant a)$，求其能量 $\hat{E}=\frac{\hat{p}^2}{2m}$ 的方均值.

(1) $\overline{E}^2=(\psi,E^2\psi)=0$.

(2) $\overline{E}^2=(E_\psi,E_\psi)=\sum_n|c_n|^2E_n^2=30\left(\frac{\hbar^2}{ma^2}\right)^2$.

哪个是正确的?为什么?

55. 定理“厄米算符平方的平均值永为正”成立的条件是什么?

56. 计算氢原子基态ψ_0能级的相对论修正，已知$\psi_0=Ae^{-r/a_0}$.

以相对论动能修正项$\hat{H}'=\frac{-\hat{p}^4}{8m^3c^2}$作微扰，求能量一级修正$E'=\left(\frac{-1}{8m^3c^2}\right)(\psi_0,\hat{p}^4\psi_0)$.

以$\hat{p}^4=(\hbar^2\nabla^2)$代入，求得$(\psi_0,\hat{p}^4\psi_0)=-3\left(\frac{\hbar}{a_0}\right)^4$，$\hat{p}^4$的平均值为负值！问题出在哪里?

57. 什么是力学量的完全集合?它有什么特征?

58. 对于确定的体系状态，力学量的完全集合是否是唯一的?

59. 对于下列体系，列举力学量的完全集合:

(1) 自由粒子.

(2) 一维谐振子.

(3) 三维谐振子.

(4) 氢原子(不考虑自旋轨道耦合).

(5) 氢原子(考虑自旋轨道耦合).

(6) 氦原子.

60. 试述对应原理及厄恩费斯特定理.

61. 量子牛顿方程是否可作为解决微观粒子运动规律的基本方程(如同力学中牛顿方程一样)?

第五章 定 态 解

1. 什么是定态？它有何特征？

2. 对于定态，是否概率流密度必为零？

3. (1) 任意定态的叠加，一定仍为定态。理由如下：

定态的叠加态

$$\psi(x,t)=\sum_n c_n\psi_n(x)e^{-iE_nt/\hbar}$$

$\psi(x,t)$态中平均值$\bar{E}=\int\psi^*\hat{H}\psi dx=\sum_n|c_n|^2E_n$与$t$无关，所以叠加态$\psi(xt)$是定态.

(2) 体系的哈密顿量不显含时间时，波动方程的解都是定态解.

以上说法正确吗？

4. 什么是束缚态？它有何特征？束缚态是否必为定态？定态是否必为束缚态？举例说明

5. 解定态问题时，波函数ψ为什么一般要求应是单值的、有限的、连续的？为什么ψ的一阶微商是有限的，并且是连续的？

6. 三维空间中，如$r=0$是势能$V(r)$的奇点，试证明，为了满足概率守恒，波函数趋于无穷大的趋势不能超过$\frac{1}{r^\alpha}(\alpha<1)$.

7. 球坐标中，波函数在$r=0$处的有限性条件在不同著述中往往是不同的，例如：

(1) 要求$\psi\xrightarrow{r\to0}$有限或对ψ的径向部分$R(r)=\frac{u(r)}{r}$中$u\to0$不慢于$r\to0$.

(2) 要求$r\psi\xrightarrow{r\to0}0$或在$r=0$处$\psi\to\infty$应慢于$r^{-1}\to\infty$.

(3) 要求在$r\to0$时$\psi\to\infty$应慢于$r^{-3/2}$.

如何看待这些不同的条件？

8. 什么是品优函数 (Well-behaved function)？判断以下函数是否品优函数，对于不是品优函数的那些函数请说明理由.

(1) $u(x)=\begin{cases}x & x\geqslant 0\\ 0 & x\leqslant 0.\end{cases}$

(2) $u(x)=x^2$.

(3) $u(x)=\mathrm{e}^{-|x|}$.

(4) $u(x)=\cos x$.

(5) $u(x)=\sin|x|$.

(6) $u(x)=\mathrm{e}^{-x^2}$.

(7) $u(x)=\begin{cases}1-x^2 & |x|\leqslant 1\\ 0 & |x|>1.\end{cases}$

9. 解算符 $\hat{F}=-\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$的本征值方程 $\hat{F}u(x)=\lambda u(x)$ (λ 为实数)，写出可能的本征函数，讨论什么条件下是品优的.

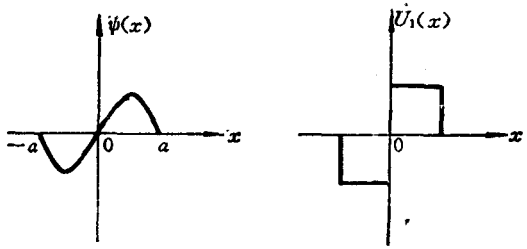
10. 定态不含时波函数可能是实函数，也可能是复函数，比较二者物理意义.

a. 是否实函数表示 $E<V$ 的解，而复函数表示 $E>V$ 的解？

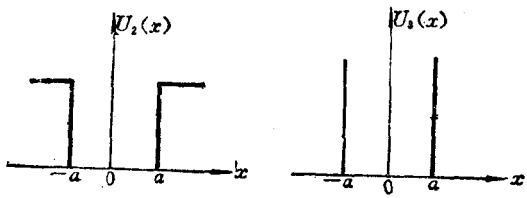
b. 是否实函数表示束缚态解，而复函数表示非束缚态解？

c. 上述实波函数与复波函数的物理意义究竟有何差异？

11. 指出图 6(a)的定态波函数对应于图中哪个势函数？



(a) (b)



(c) (d)

图 6

12. (1) 什么是简并?

(2) 设一个质量为 m 的粒子,限制在边长为 a 的"方盒"中运动,如图 7.

$$V(x,y)=\begin{cases}0 & 0<x<a,0<y<a\\ \infty & \text{其他地方}\end{cases}$$

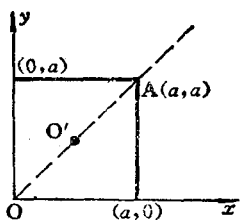


图 7

以此二维无限深势阱为例说明:什么是本质简并?什么是偶然简并?

(3) 上问中,体系对势阱中心 O' 点的对称性导致出什么简并?

13. 证明:非简并态能级波函数可以表为实函数.

14. 证明:

(1) 一维束缚定态不存在简并.

(2) 一维束缚定态波函数可表为实函数.

15. 如果势函数是关于原点对称的,那么波函数是否也具有同样的对称性?是否具有确定的宇称?概率密度呢?

16. 一维定态解包括几个量子数?量子数数目取决于什么?

17. 量子力学定态解在什么条件下过渡到经典解?

18. 用简单方法求出一维无限深势阱中的粒子作用于阱壁的

力为多大?

19. 若一维方势阱定态解已知,不作计算,试直接给出一维半方势阱的定态解,

半方势阱为 $U(x)=\begin{cases}\infty & x<0\\ U_0 & 0<x<a\\ 0 & x>a.\end{cases}$

20. 一维谐振子中,粒子分布于经典界限以外的概率是多少?

21. 随着能量量子数增大,一维谐振子位置分布概率如何变化?试与经典谐振子比较.

22. 试由一维谐振子的定态解直接给出半谐振子的定态解,

半谐振子 $U(x)=\begin{cases}\infty & x<0\\ \frac{1}{2}m\omega^2x^2 & x>0.\end{cases}$

23. 给出三维无限深方势阱的能级分布及能级简并度.

24. 给出三维无限深球势阱的能级分布及能级简并度.

25. 给出三维谐振子的能级分布及能级简并度.

26. 设单粒子定态波函数为

$$\psi_k(r)=\frac{1}{r}(e^{-ikr}+be^{ikr})$$

试描述其势场.

27. 在一维方势阱中,假定 $n=3$,于是波函数在阱中有两处为零,因而在这两点发现粒子的概率也为零,那么粒子怎么通过这两点而运动呢?

28. 上题中,如果在两节点处设置刚性壁,将势阱分为三部分,那么概率分布有何变化?

29. 为什么概率流在势不连续点会发生分裂,而对应的粒子却不会发生分裂?

30. 是否仅当入射粒子由低势能区射向高势能区时才会在交

界面发生反射，而由高势能区射向低势能区时不会发生反射？

31. 是否当入射粒子能量小于势能时才会发生反射？当入射粒子能量大于势能时是否也会发生反射？

32. 入射波是否仅在势不连续点发生反射？在势场连续变化区域是否会发生反射？

33. 粒子通过阶跃势垒，反射系数是多少？

如果① $E<U_0$，② $E>U_0$.

34. 粒子通过如图 8 所示势垒 $E<U_0(U(\infty)=U_0)$，反射系数是多少？

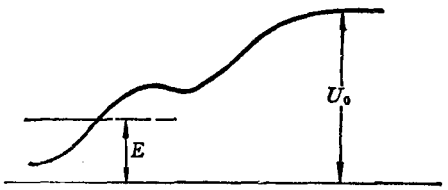


图 8

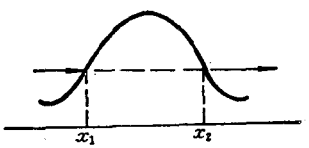


图 9

35. 有人仿一维势垒解法，直接写出任意势垒（如图 9）定态波函数如下：

$$\psi(x)=\begin{cases}e^{ikx}+Re^{-ikx} & x<x_1\\ e^{k'x}+e^{-k'x} & x_1<x<x_2\\ De^{ikx} & x>x_2,\end{cases}$$

式中 $k=\sqrt{2m[E-U(x)]}/\hbar$，$k'=\sqrt{2m[U(x)-E]}/\hbar$

这样做对不对？

36. 说明：当量子力学过渡到经典力学时隧道效应将消失.

37. 隧道效应能否直接观测到？就是说，测量到粒子位于势垒之内，同时可确定其能量小于势垒高度？

38. 有人认为入射粒子的寿命是有限的，因此能量并不完全确定，能量 E 只是平均值，而某一瞬时的能量完全可能大于势垒高

度，从而越过势垒。这种看法对不对？

39. 指出势垒穿透问题的光学类比，进而说明隧道效应的物理本质.

40. 势阶(高度为 V_0)

如图 10 $E<V_0$ 时，在区域 II 中 $\psi_2=\beta_2 e^{-k_2 x}$，但透射概率 $j_x=0$. 为什么此区中概率流为零，但粒子出现的概率不为零？

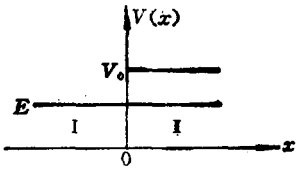


图 10

41. 图 11 为三个概率密度 $|\psi|^2$ 分布图，找出这些概率分布与谐振子、有限方势阱、无限方势阱的对应关系.

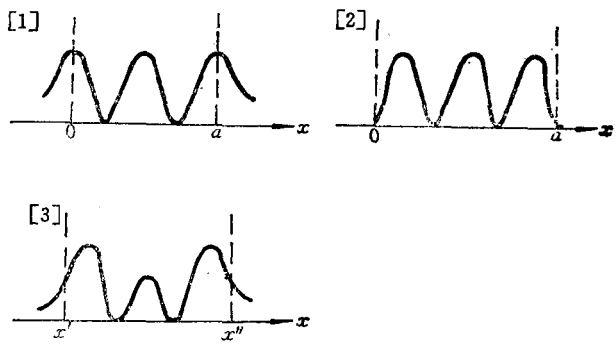


图 11

42. 概率密度 $|\psi(x)|^2$ 分布图如图 12 所示，说明它们描述的

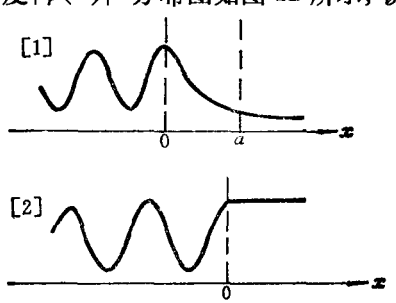


图 12

是势垒？势阱？势阶？$E>V(x)$？$E<V(x)$？并给出图中E与$V(x)$相反关系时概率分布示意图.

43. 说明δ势垒的穿透性质$V(x)=V_0\delta(x)$.

第六章　不确定关系

1. 过去一直沿用的“测不准关系”，为什么现在改译为“不确定(度)关系”？

2. 经典物理中是否存在不确定现象？它与量子力学中不确定关系有什么差异？

3. 不确定关系如何体现物质的普遍本质——波粒二象性？

4. 给出不确定关系的一般表述，并列举常见的不确定关系.

5. 坐标动量不确定关系中的 $\Delta x, \Delta p$ 应如何理解？例如将它们理解为：

(1) 坐标表象与动量表象中的波包线度；

(2) 粒子坐标表象与动量表象中的分布范围；

(3) 粒子线度.

6. 坐标-波长的“不确定关系” $\Delta x \cdot \Delta\lambda \geqslant \frac{\lambda^2}{2\pi}$ 是如何得出的？

7. 在威尔逊云室中，当有粒子通过时，其径迹便可显现出来，这是否表明微观粒子的运动有轨迹？

8. 量子力学中，是否可将波包中心的运动轨迹看作是粒子的运动轨迹？

9. 双缝衍射实验中，能否不破坏粒子本身状态(它决定了衍射模式)而确定粒子从哪个缝通过？

10. 由不确定关系可说明存在零点能，据此粗略估算下列体系的基态能量.

(1) 一维谐振子.

(2) 氢原子中电子.

11. 什么情况坐标-动量不确定度最小？$\overline{(\Delta x)^2} \cdot \overline{(\Delta p)^2} = \frac{\hbar^2}{4}$.

12. 同样是一对不对易力学量，为什么 $\hat{x},\hat{p}$ 不能同时确定，而 L_x 与 L_y 可同时为零，同时为零不就同时确定了吗？

13. 叙述时间能量不确定关系的含义，它与坐标动量不确定关系的含义有什么不同？

14. 不确定关系式 $\overline{(\Delta x)^2}\cdot\overline{(\Delta p)^2}\geqslant\frac{\hbar^2}{4}$ 与 $\overline{\Delta x}\cdot\overline{\Delta p}\geqslant\frac{\hbar}{2}$ 是否等效？若无平均值符号，此两关系是否成立？

15. 若力学量 A，B 之间有关系式 $\overline{(\Delta A)^2}\cdot\overline{(\Delta B)^2}\geqslant\frac{\hbar^2}{4}$，那么，在力学量 A 与 $F(B)$ 之间，有如下不确定关系成立，

$$\overline{(\Delta A)^2}\cdot\overline{(\Delta F)^2}\geqslant\frac{\hbar^2}{4}\cdot\left(\frac{\partial F}{\partial B}\right)^2,$$

试证明之.

16. 在三维运动中，绕 z 轴的转角 ϕ 与对应的角动量 $\hat{L}_z=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$. 是否有 $\Delta\phi\cdot\Delta L_z\geqslant\frac{\hbar}{2}$？

17. 一维势阱问题中，设势阱宽度为 a，高度为 U_0. 这时至少存在一束缚态能级. $\Delta x\sim a$，$\Delta p=\sqrt{2m\Delta T}\sim\sqrt{2mU_0}$，于是有 $\Delta x\cdot\Delta p\sim a\sqrt{2mU_0}$. 若使得 $a\ll\hbar/\sqrt{2mU_0}$（这在原则上可以办到），则得到 $\Delta x\cdot\Delta p\ll\hbar$，因而违反了不确定关系. 试指出以上论述错在何处？

18. 一维势阱问题中，什么条件下，位置不确定度可与势阱宽度相比拟，即 $\Delta x\sim a$？

19. 如图 13 动量为 p 的电子射线从左边垂直入射到屏 S_1，屏上有一小孔 O_1，孔径为 a. 与 S_1 相距为 d 处的屏 S_2 上也有一小孔 O_2，孔径亦为 a. 当电子束通过 O_1 后会发生偏转，其中有些偏转很小的电子将通过 O_2 继续前进.

考虑这些通过 O_2 的电子，它们的横向位置不确定度为

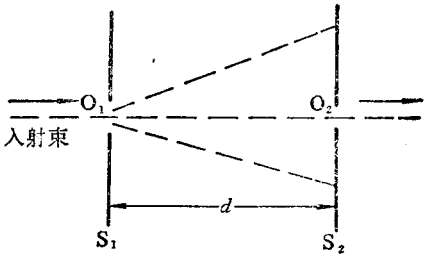


图 13

$\Delta x \sim a$. 动量大小仍为 p(实验中无损耗) 而动量方向不确定度为 $\Delta\theta \leqslant \frac{a}{d}$(因为偏转大的电子不能通过 O_2). 于是,得到

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = \Delta x \cdot p \cdot \Delta\theta = \frac{pa^2}{d}.$$

如果我们减小 a 而增大 d(原则上没有限制). 那么,便可使此乘积任意减小,从而破坏了不确定关系.

试指出以上论述的错误.

第七章　绘景和表象

1. 量子力学中表象与绘景的含义有何不同?

2. 什么是薛定谔绘景? 什么是海森伯绘景? 二者间的关系如何?

3. 时间演化算符 $\hat{U}(t,t_0)$ 是如何定义的? 物理意义是什么? 它是力学量吗? 如何确定 $\hat{U}(t,t_0)$ 的具体形式?

4. 薛定谔绘景与海森伯绘景中的哈密顿量有什么关系?

5. 什么是薛定谔绘景与海森伯绘景中的运动方程?

6. 什么是相互作用绘景? 为什么常称它为中间绘景? 写出相互作用绘景的运动方程.

7. 力学量 $\hat{F}$ 在 ψ 态的平均值 $\bar{F}=(\psi,\hat{F}\psi)$ 在上述三种绘景中是否相等?

8. 相互作用绘景中如定义演化算符 $\hat{U}_I(t,t_0)$ 为

$$\psi^I(t)=\hat{U}_I(t,t_0)\psi^I(t_0).$$

问: $\hat{U}_I(t,t_0)$ 的具体形式是什么?

9. 力学量 $\hat{A},\hat{B},\hat{C}$ 在薛定谔绘景中,满足 $[\hat{A},\hat{B}]=\mathrm{i}\hat{C}$.

这个关系在其他绘景中是否仍成立?

10. 海森伯绘景中,自由粒子的坐标算符 $\hat{x}^{\mathrm{H}}(t)=$?

11. 给出海森伯绘景中,一维谐振子的坐标与动量算符 $\hat{x}^{\mathrm{H}}(t)=$? $\hat{p}^{\mathrm{H}}(t)=$?

12. 在上两题中,

(1) 自由粒子 $\hat{x}^{\mathrm{H}}(0)$ 与 $\hat{x}^{\mathrm{H}}(t)$ 是否仍对易?

(2) 一维谐振子 $\hat{x}^{\mathrm{H}}(t_1)$ 与 $\hat{x}^{\mathrm{H}}(t_2)$ 是否对易? $\hat{p}^{\mathrm{H}}(t_1)$ 与 $\hat{p}^{\mathrm{H}}(t_2)$ 是否对易? $[\hat{x}^{\mathrm{H}}(t_1),\hat{p}^{\mathrm{H}}(t_2)]=$?

13. 通常所说"薛定谔绘景是态矢空间中,坐标系固定而令态

矢量旋转”的含意是什么？

对其他两个绘景，相应的叙述是什么？

14. 各绘景间的变换与表象间变换均由幺正变换完成，而幺正变换相当于态矢空间中的一个转动. 绘景变换与表象变换这两者对应的转动有什么根本不同？

理论上可有多少种绘景？每一绘景中可有多少种表象？

15. 海森伯绘景中，任意态作 A 表象展开时，所用基矢是力学量 $\hat{A}^{H}(t)$ 的本征矢吗？

16. 坐标与动量作为算符，在能量表象中有确定的表示式吗？

17. 如何用矩阵表示量子态与力学量，并说明理由？

18. 用矩阵表示出波函数的归一化条件.

19. 量子力学中，不同表象间

① 基矢；② 波函数；③ 力学量

是如何变换的？

20. 幺正变换有什么特征？

21. 力学量在其自身表象中如何表示？其本征矢是什么？

22. 力学量的矩阵对角化含义是什么？

23. 试将坐标表象与动量表象加以比较？

24. 设 $\hat{H}=\frac{\hat{p}_x^2}{2m}+V(x)$. 分别在 $\hat{x}$ 表象与 $\hat{p}_x$ 表象中，写出 $\hat{x}$；$\hat{p}_x$，$\hat{H}$ 的矩阵元

25. (1) 用本章第 23 题给出的 $\hat{x}$ 表象与 $\hat{p}$ 表象的对比，从位置表象的波方程直接写出动量表象的波方程.

(2) 写出动量表象中的一维谐振子的定态波方程.

26. 位置表象的定态波方程中，由于 $\frac{\hat{p}^2}{2m}=-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ 而含位置坐标的二阶导数，是二阶微分方程. 当变换到动量表象时，是否也含对动量的二阶导数而仍为二阶微分方程？举例说明之.

一般情形下，动量表象中定态波方程最多可能是多少阶的微分方程？

27. 动量表象中，定态波方程可取如下积分方程形式表出

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m}-E\right)\phi(\boldsymbol{p})=-\int\tilde{V}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\phi(\boldsymbol{p}')\mathrm{d}^3p'.$$

式中 $\tilde{V}(\boldsymbol{p})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int V(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}^3r$，为势 $V(\boldsymbol{r})$ 的傅立叶变换.

问：这个方程是如何从位置表象的波方程得出的？

28. 上题中，如势 V 的傅立叶变换不存在，就不能利用所建立的 $\phi(\boldsymbol{p})$ 满足的积分方程. 请举出这种势的一个实例.

29. 给出以下情形中，动量表象的定态波方程.

(1) 屏蔽库仑势 $V(r)\frac{-Ze^2}{r}\mathrm{e}^{-\alpha r}$ $\alpha>0$;

(2) 纯库仑势 $V(r)=\frac{-Ze^2}{r}$.

30. 已知，一维谐振子在坐标表象中能量本征函数为 $\psi_n(\alpha x)$，不用计算，直接写出动量表象中能量本征函数 $\phi_n(p)$.

31. 写出能量表象中薛定谔方程.

32. 体系量子态以波函数描述时，由体系可能的波函数构成的波函数空间 $\mathscr{H}$ 即是体系的态空间.

为什么利用狄拉克符号时，又引入以右矢作为态矢量的态空间 ε？空间 $\mathscr{H}$ 与 ε 究竟有什么不同？

33. (1) 狄拉克符号中，引入了右矢$|\rangle$，为什么又引入左矢$\langle|$. 左矢与右矢可以相加吗？

(2) 为什么把左矢$\langle\phi|$称为右矢$|\phi\rangle$的共轭矢量？

(3) 狄拉克符号中的字母，代表什么意义？

34. 狄拉克符号的厄米共轭

(1) 一个右(左)矢的厄米共轭是什么？

(2) 线性算符 $\hat{F}$ 的厄米共轭 $\hat{F}^{\dagger}$ 的定义?

(3) 厄米算符 $\hat{F}$ 的厄米共轭 $\hat{F}^{\dagger}=$?

(4) 常数(复数) λ 的厄米共轭是什么?

(5) 给出:对含有右矢、左矢、线性算符及常数的式子求厄米共轭式时的规则.

35. (1) 线性算符 $\hat{F}$ 作用于左矢$\langle\psi|$时,$\langle\psi|\hat{F}=$?

(2) 厄米算符 $\hat{F}$ 作用于左矢$\langle\psi|$,结果如何?

(3) 如$|\psi\rangle$是 $\hat{F}$ 的本征矢,$\langle\psi|\hat{F}=$?

36. (1) $(\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle)^{\dagger}=$?

(2) $|\lambda\psi\rangle=$? $\langle\lambda\psi|=$?

(3) $(|\varphi\rangle\langle\phi|)^{\dagger}=$?

(4) $|\hat{F}\psi\rangle=$? $(\hat{F}|\psi\rangle)^{\dagger}=$?

(5) $\hat{F}\langle\psi|=$?

37. 在狄拉克符号的体系中,具体表象中的波函数是如何表出的?

38. 史瓦兹不等式

如$|\varphi_1\rangle$与$|\varphi_2\rangle$是态空间中任意右矢,则

$$|\langle\varphi_1|\varphi_1\rangle^2\leqslant\langle\varphi_1|\varphi_1\rangle\langle\varphi_2|\varphi_2\rangle.$$

(1) 导出此式.

(2) 给出不等式中等号成立的条件.

(3) 举出数学上与之类似的不等式.

39. 以下等式是否成立?

(1) $\langle m|\dfrac{\mathrm{d}\hat{F}}{\mathrm{d}t}|n\rangle=\langle m|\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{F}|n\rangle=\dfrac{E_m}{\mathrm{i}\hbar}\langle m|\hat{F}n\rangle$, 其中$|m\rangle$与$|n\rangle$皆为能量本征态.

(2) $\langle p'_x|\hat{p}_x x-x\hat{p}_x|p''_x\rangle=\langle p'_x|\hat{p}_x\hat{x}|p''_x\rangle-\langle p'_x|\hat{x}p_x|p''_x\rangle$

$=(p'_x-p''_x)\langle p'_x|\hat{x}|p''_x\rangle=(p'_x-p''_x)x\delta(p'_x-p''_x)$.

40. 说明算符 $\hat{P}_i=|i\rangle\langle i|$ 的物理意义，公式 $\sum_i |i\rangle\langle i| =1$ 成立的条件是什么($|i\rangle$为 $\hat{F}$ 表象的一基矢)?

写出在连续基下的公式.

以 x 表象表出本题的公式.

41. 有人认为:粒子数确定，能量也就确定. 因此,能量表象与粒子数表象是一回事? 对不对?

42. 已知，x 表象中动量 $\hat{p}_x$ 的矩阵元为 $(p_x)_{x_1x_2}=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x_1}\cdot\delta(x_1-x_2)$. 有人认为: $\hat{p}_x$ 的矩阵元中出现 $\delta(x_1-x_2)$，所以除了 $x_1=x_2$ 外,其他矩阵元均为零,即 $\hat{p}_x$ 是对角矩阵，必与 x 对角矩阵对易，这岂不和 x 矩阵与 p_x 矩阵不可对易相矛盾? 这个佯谬的根源是什么?

43. 证明:在算符章第 26 题,$\hat{x}=x$, $\hat{p}=-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}+f(x)$ 中,$f(x)$ 的出现,实质上是由以$|x\rangle$为基矢的 x 表象,以幺正变换 $\hat{S}=\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}g(\hat{x})}$ 变换到以$|\tilde{x}\rangle=\hat{S}|x\rangle$ 为基矢的新 x 表象的结果. 你怎样理解 x 表象的这种不唯一性?

44. 指出下列使用的狄拉克符号哪些是不正确的.

(1) $|\psi(t)\rangle$; $|\psi\rangle$; $|\psi(x)\rangle$; $\psi(r)=\langle r|\rangle$; $\langle r|n\rangle=\psi_n(r)$.

(2) $|r'\rangle=\delta(r-r')$.

$$|\rangle=\sum_{r'}\psi(r')|r'\rangle=\int\psi(r')\delta(r-r')\mathrm{d}^3r'=\psi(r)$$

上两式见Roman, *Advanced Quantum Theory*, (1965)p. 15.

45. $|-r_0\rangle$和$-|r_0\rangle$是否相等?

46. x 表象中,动量 $\hat{p}_x$ 的矩阵元有时给出为

$$(p_x)_{x_1x_2}=\frac{-\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x_1}\delta(x_1-x_2).$$

有时给出为

$$(p_x)_{x_1 x_2} = \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial}{\partial x_1} \delta(x_1 - x_2).$$

问：哪个正确？

47. 什么叫广义右矢或非正规矢？

右矢与左矢间是否有着一一对应的关系？

48. 判断下列各符号中，哪些是算符？哪些是数？哪些是矢量？

$|\psi\rangle\langle\psi|$；$\langle\psi|\psi\rangle$；$\langle u|\hat{F}|w\rangle$；$\lambda|u\rangle\langle v|w\rangle$；$\lambda\langle u|\hat{\mathrm{i}}|w\rangle|v\rangle\langle\psi|$.

第八章　角动量　自旋

1. 量子力学中，角动量是如何定义的？

2. 能量本征态有可能是角动量 $\hat{L}^2$ 的本征态吗？有可能是 $\hat{L}_z$ 的本征态吗？

3. 在 s 态中，$l=0$，因而轨道角动量为零．这意味着什么？难道说电子静止不动吗？

4. 为什么球形对称势场中，角动量的本征函数可以是非球形对称的？概率密度呢？

5. 在角动量 $\hat{J}_z$ 任一本征态中，$\bar{J}_x=0$，$\bar{J}_y=0$.

(1) 证明这个结论.

(2) 利用矢量模型，直观地解释之.

(3) 这个结论是否只对轨道角动量才成立？

6. 在角动量分量 $\hat{L}_z$ 的本征态，角动量沿与 z 轴成 θ 角的 z' 方向上的分量 $\hat{L}_{z'}$ 的平均值 $\bar{L}_{z'}=$？

7. 上题中，如 ψ_m 是 $\hat{L}_z$ 的属于本征值 $m\hbar$ 的本征态，则对方位角为(θ,φ)的 z' 轴．$\hat{L}_{z'}$ 的本征态为

$$\psi'_m=\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{L}_z\varphi}\cdot\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{L}_y\theta}\ \psi_m.$$

(1) ψ'_m 式中，算符 $\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{L}_z\varphi}$ 与 $\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{L}_y\theta}$ 的物理意义是什么？

(2) 不用计算，只利用(1)直接说明：ψ'_m 是 $\hat{L}_{z'}$ 的本征态.

8. 经典力学中，角动量 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}=-\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{r}$.

量子力学中，轨道角动量算符 $\hat{\boldsymbol{L}}=\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}}$ 是否仍有 $\hat{\boldsymbol{L}}=-\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{r}}$ 呢？

9. 试述电子具有自旋的实验证据与理论依据.

10. 斯特恩-盖拉赫实验中，只能使用处于 s 态的中性原子，

而不能使用电子，为什么？

11. (1) 经典物理中，是否有类似自旋的概念？地球自转是否与量子力学中自旋概念相对应？

(2) 能否把电子看作均匀带电小球，而其自旋便是这种小球的转动？

12. (1) 自旋可以在坐标表象中表示吗？它是否与外部空间毫无关系呢？

(2) 自旋角动量与轨道角动量，性质上有哪些差异？

13. 自旋态是如何表示的？什么叫旋量 (spinor)？计及自旋时，波函数归一化条件是什么？

14. 电子 $\hat{S}_z$ 的本征态常被写为 $\alpha_z=\alpha=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$，$\beta_z=\beta=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$. 它们的含义是什么？什么是 $\hat{S}_z$ 表象？

15. 什么是泡利矩阵？什么是泡利表象？

16. 自旋为 $\frac{1}{2}$ 的粒子(如电子)的自旋态矢量 $\chi=\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$ 是存在于二维复空间的旋量，任两个线性无关的旋量都可作这个空间的基矢.

验证(1) $\hat{S}_x$ 的本征矢 $\alpha_x=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$ 与 $\beta_x=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$ 是线性无关的.

(2) $\hat{S}_y$ 的本征矢 $\alpha_y=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\\mathrm{i}\end{pmatrix}$ 与 $\beta_y=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-\mathrm{i}\end{pmatrix}$ 是线性无关的.

并分别以 α_x,β_x 及 α_y,β_y 为基矢，展开任意旋量 $\chi=\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$.

17. 处于 α_z 态的极化电子束，经过斯特恩-盖拉赫实验装置测 S_x.

问：测值为$\pm\frac{\hbar}{2}$的概率各为多少？

18. 质子在自旋态α_y，问：测值为以下各问的概率各是多少？

(1) $S_y=-\frac{\hbar}{2}$；(2) $S_x=+\frac{\hbar}{2}$；(3) $S_x=-\frac{\hbar}{2}$；(4) $S_z=+\frac{\hbar}{2}$；

(5) $S_z=-\frac{\hbar}{2}$.

19. 泡利算符$\hat{\boldsymbol{\sigma}}$的基本性质可方便地表述为

$\sigma_i\sigma_j=\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_k+\delta_{ij}$(其中$i$、$j$、$k$均可任取$x$、$y$、$z$).

式中ε_{ijk}为列维-齐维他(Levi-Civita)符号. ε_{ijk}当有两个或两个以上的下标相同时为零，如$\varepsilon_{ikk}=0$，而(i, j, k)次序按123轮换排列的如$\varepsilon_{231}=1$，有逆序的，如$\varepsilon_{132}=-1$.

试由给出的公式，得出泡利算符的基本性质.

20. (1) 求$|\hat{\sigma}_z|=$？ $|\hat{\boldsymbol{\sigma}}|=$？

(2) $\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\times\hat{\boldsymbol{\sigma}}=$？ $\hat{\sigma}_z^n=$？ (n奇或偶)

21. "$\hat{\boldsymbol{\sigma}}$三个分量之积为1"是否正确？

22. 泡利矩阵中，σ_x与σ_z为实矩阵，σ_y为纯虚矩阵.

问：是否可经表象变换，使

(1) 三个泡利矩阵都是实的；或(2) 两个是纯虚的，另一个是实矩阵.

23. 恒等式$(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\boldsymbol{A}})(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\boldsymbol{B}})=\hat{\boldsymbol{A}}\cdot\hat{\boldsymbol{B}}+\mathrm{i}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot(\hat{\boldsymbol{A}}\times\hat{\boldsymbol{B}})$.

(1) 对矢量算符$\hat{\boldsymbol{A}}$、$\hat{\boldsymbol{B}}$及$\hat{\boldsymbol{\sigma}}$的要求是

① $\hat{\boldsymbol{A}}$、$\hat{\boldsymbol{B}}$为任意矢量算符；

② $\hat{\boldsymbol{A}}$、$\hat{\boldsymbol{B}}$、$\hat{\boldsymbol{\sigma}}$中，任两者均对易；

③ $\hat{\boldsymbol{A}}$、$\hat{\boldsymbol{B}}$是与$\hat{\boldsymbol{\sigma}}$对易的任何矢量算符；

④ $\hat{\boldsymbol{A}}$或$\hat{\boldsymbol{B}}$与$\hat{\boldsymbol{\sigma}}$对易；

⑤ $\hat{\boldsymbol{A}}$与$\hat{\boldsymbol{B}}$必对易；

问：哪个是正确的？

(2) 泡利算符在任方向(单位矢量 $\boldsymbol{n}$)投影为 $\hat{\sigma}_n$. 用此恒等式求 $\sigma_n^2=(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})^2=?$

24. 问：$\hat{\sigma}_x\alpha=?$ $\hat{\sigma}_x\beta=?$ $\hat{\sigma}_y\alpha=?$ $\hat{\sigma}_y\beta=?$

25. 对自旋为 $\frac{1}{2}$ 的粒子，是否存在态 $\eta=\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$，在其中

$$\overline{S}_x=\overline{S}_y=\overline{S}_z=0.$$

26. 在自旋态 $\alpha=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$中，$\overline{(\Delta S_x)^2}$与$\overline{(\Delta S_y)^2}$各是多少？

27. 泡利自旋算符 $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ 的各种矩阵表示

(1) 验证：$\sigma'_x=\begin{pmatrix}0&-1\\-1&0\end{pmatrix}$，$\sigma'_y=\begin{pmatrix}0&\mathrm{i}\\-\mathrm{i}&0\end{pmatrix}$，$\sigma'_z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$与作为标准形式的泡利矩阵

$\sigma_x=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$，$\sigma_y=\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{pmatrix}$，$\sigma_z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$一样，也是 $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ 在 $\hat{S}_z$ 表象($\hat{\sigma}_z$ 表象)的一个矩阵表示.

(2) 导出：S_z 表象中，取 $\sigma_z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$时，矩阵 σ_x 与 σ_y 的一般表达式. 并由此说明：$\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ 的矩阵表示存在非唯一性的实质.

(3) 由上问得出的矩阵表达式，写出两种具体的矩阵形式.

28. 在 S_z 表象的泡利自旋算符的矩阵表达式中，有一组满足角动量对易关系 $[\sigma_i,\ \sigma_j]=2\mathrm{i}\sigma_k$(即$[S_i,\ S_j]=\mathrm{i}\hbar S_k$) 的泡利矩阵 σ_i，

$$\sigma'_z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix},\quad \sigma'_y=\begin{pmatrix}0&\mathrm{i}\\-\mathrm{i}&0\end{pmatrix},\quad \sigma'_x=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},$$

很易验证它们满足

$$\sigma'_x\sigma'_y=-\mathrm{i}\sigma'_z;\ \sigma'_y\sigma'_z=-\mathrm{i}\sigma'_x;\ \sigma'_z\sigma'_x=-\mathrm{i}\sigma'_y,$$

这与作为标准形式的泡利矩阵 σ 满足的

$\sigma_x\sigma_y=i\sigma_z, \sigma_z\sigma_x=i\sigma_y, \sigma_y\sigma_z=i\sigma_x$ 不同.

(1) 这里得出的 σ' 是否泡利自旋算符的一个矩阵表示?

(2) 举出与本题的 σ' 有相同性质的另一个矩阵表示.

29. (1) 求 S_z 表象中泡利自旋算符 $\hat{\sigma}$ 的矩阵表示时，选用的 $\sigma_z=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$ 也可改取为 $\sigma_z'=\begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$，为什么?

(2) 证明：改取 $\sigma_z'=\begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$ 时，矩阵 σ_x' 及 σ_y' 的一般表达式不变.

(3) 选用 $\sigma_z=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$ 与改取 $\sigma_z'=\begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$ 会有何不同?

30. 不经计算，直接写出 S_y 表象及 S_x 表象的泡利矩阵.

31. 指出：列矢量 $\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$、$\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$、$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ \pm i\end{pmatrix}$、$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ \pm 1\end{pmatrix}$ 各是 σ 哪个分量的本征矢?

32. (1) 利用上题直接写出由 S_z 表象到 S_y 表象的幺正变换矩阵 S，并说明 S 不是唯一的.

(2) 按表象理论计算出 S，并与(1)比较.

(3) 计算出 S_y 表象中 $\sigma'=S^{\dagger}\sigma S=$? 并与第 30 题比较.

33. (1) 绕 z 轴旋转一个有限角度 θ 的转动算符（本章第 8 题）

$\hat{R}_z(\theta)=e^{\frac{-i}{\hbar}\hat{L}_z\theta}$，其中 $\hat{L}_z$ 是角动量(z 分量)算符.

证明：$\hat{R}_z(\theta)$ 是幺正算符.

(2) 证明 $\theta=2\pi$ 时，$\hat{R}_z(2\pi)=1$ 是恒等变换.

(3) 绕任一方向(单位矢量 $\boldsymbol{n}=n_1\boldsymbol{i}+n_2\boldsymbol{j}+n_3\boldsymbol{k}$)旋转有限角度 θ 的转动算符 $\hat{R}_n(\theta)$，是否有

$$\hat{R}_n(\theta)=e^{\frac{-i}{\hbar}\theta(\hat{L}n)}=e^{\frac{-i}{\hbar}\theta\hat{L}_xn_1}e^{\frac{-i}{\hbar}\theta\hat{L}_yn_2}e^{\frac{-i}{\hbar}\theta\hat{L}_zn_3}?$$

34. 作用在自旋态空间上的转动算符.

绕 z 轴旋转 θ 角，$\hat{R}_z(\theta)=e^{\frac{-i}{\hbar}\theta\hat{S}_z}=e^{-i\frac{\theta}{2}\hat{\sigma}_z}$，其中如 $\hat{\sigma}_z$ 以 σ_x 代替，即为绕 x 轴的转动算符，以 $\hat{\sigma}_y$ 代之即为绕 y 轴转动算符.

(1) 这些转动算符的矩阵表示，可以用仅包含单位矩阵和相应的 σ 矩阵表出，即每个泡利矩阵总是跟绕某一特定轴的转动相关联.

以 $\hat{R}_z(\theta)$ 为例，证明：$\hat{R}_z(\theta)=\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)-i\hat{\sigma}_z\sin\frac{\theta}{2}$，并给出 $\hat{R}_z(\theta)$ 的矩阵表示.

(2) 由(1)知，$R_z(0)=R_z(4\pi)=1$，但 $R_z(2\pi)=-1$，与上题不同，不再是恒等算符.

这是否在物理上导致实质性的变化?

(3) $\hat{R}_z(2\pi)=-1$，只对电子$\left(S=\frac{1}{2}\right)$成立，还是对其他值的粒子均成立?

35. 以单位矢量 $\boldsymbol{n}=n_1\boldsymbol{i}+n_2\boldsymbol{j}+n_3\boldsymbol{k}$ 的方向为轴，旋转有限角度 θ 时，自旋态空间的转动算符

$$\hat{R}_n(\theta)=e^{\frac{-i}{\hbar}\theta(S\cdot n)}=e^{-i\frac{\theta}{2}(\sigma\cdot n)},$$

与上题中 $\hat{R}_z(\theta)$ 的差别只是以 $\sigma_n=\sigma\cdot\boldsymbol{n}$ 代替了 σ_z.

(1) 说明：如按上题作类似计算，结果也必为

$$\hat{R}_n(\theta)=\cos\frac{\theta}{2}-i(\hat{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})\sin\frac{\theta}{2}.$$

(2) 给出 $\hat{R}_n(\theta)$ 的矩阵表示.

36. 应用本章第 34 题中自旋态空间上的转动算符 $\hat{R}_z(\theta)$，验证：本章第 27 题(2)中的结论——由泡利矩阵 σ 到

$$\sigma'_x=\begin{pmatrix}0&-1\\-1&0\end{pmatrix}=-\sigma_x,\ \sigma'_y=\begin{pmatrix}0&i\\-i&0\end{pmatrix}=-\sigma_y,\sigma'_z=\sigma_z$$ 的变化相当于直角坐标系的 z 轴取向不变而坐标系绕 z 轴转 π 角

使 x 轴与 y 轴均改取相反方向.

37. (1) 上题中，如绕 z 轴转$\left(-\frac{\pi}{2}\right)$，结果如何？

(2) 转角为$\frac{\pi}{2}$时，结果又如何？

(3) $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ 的各种矩阵表示是否均可由泡利矩阵经转动算符作用而得出？

38. 如采用变换矩阵 $U=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1+\mathrm{i} & 1+\mathrm{i}\\ \mathrm{i}-1 & 1-\mathrm{i}\end{pmatrix}$，则从 S_z 表象的泡利矩阵 σ，由 $\sigma'=U\sigma U^{\dagger}$ 即可得出 S_z 表象中泡利矩阵 σ' 为

$$\sigma'_x=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix},\ \sigma'_y=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\ \sigma'_z=\begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{pmatrix}.$$

(1) 验证这个结论.

(2) 应用转动矩阵 $R_n(\theta)$，导出给出的变换矩阵 U.

39. 泡利矩阵从 S_z 表象进行表象变换，如取变换算符为 $\hat{R}=\frac{1}{2}(1+\mathrm{i}\hat{\sigma}_y)(1+\mathrm{i}\hat{\sigma}_z)$，将导致什么结果？并与上题比较.

40. 设 $\boldsymbol{n}$ 为(θ,φ)方向单位矢量 $\boldsymbol{n}(n_1,n_2,n_3)$.

$$n_1=\sin\theta\cos\varphi,\ n_2=\sin\theta\sin\varphi,\ n_3=\cos\theta.$$

(1) 电子自旋算符 $\hat{\boldsymbol{S}}$ 在 $\boldsymbol{n}$ 方向投影 $\hat{S}_n=\frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_n=$？并写出 S_z 表象中，$\hat{S}_n$ 的矩阵表示.

(2) 对自旋态 $\chi=\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}$，$\hat{S}_n$ 的平均值 $\overline{S}_n=$？

(3) 证明：对 $\hat{S}_z$ 的本征态$\left(\text{本征值 } S_z=\pm\frac{\hbar}{2}\right)$，

$$\overline{S}_n=\left(\pm\frac{\hbar}{2}\right)\cos\theta=S_z\cos\theta.$$

并与轨道角动量的情况(本章第 6 题)比较.

(4) 应用上问的结论，求在 $\hat{S}_z$ 的本征态中，S_n 取值$\pm\frac{\hbar}{2}$的概

率 $w_{\pm}=?$

41. (1) 将第 7 题中求角动量分量 $\hat{L}_{z'}$ 的本征态 ψ'_m 的公式应用于自旋角动量 $\hat{\boldsymbol{S}}$，藉助于自旋态空间的转动算符 $\hat{R}_n(\theta)$（第 35 题），求：S_z 表象中，$\hat{S}_n$ 的本征函数 $\psi_{S_n=\pm\frac{\hbar}{2}}=?$

(2) 应用上问的结论，求 $\hat{S}_z$ 表象中，$\hat{S}_x$ 与 $\hat{S}_y$ 的本征函数，并与第 16 题中的 α_x、β_x 及 α_y、β_y 作一比较.

42. (1) 证明：泡利矩阵 σ_x、σ_y、σ_z 与二维单位矩阵 I，构成二阶方阵的完全集.

(2) 任意二阶方阵 M 均可用 σ 及 I 的线性组合表出为

$$M=a_0I+\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{\sigma}=a_0I+a_x\sigma_x+a_y\sigma_y+a_z\sigma_z,$$

其中系数 $a_0=\frac{1}{2}\mathrm{Tr}M$，$a_i=\frac{1}{2}\mathrm{Tr}(M\sigma_i)$，$i=x、y、z$.

取 M 为第 35 题中自旋态空间的转动矩阵 $R_n(\theta)$，验证上述的求 a_0 及 a_i 的公式.

43. 证明 (1) 与三个泡利矩阵都对易的非零二维矩阵必为常数矩阵.

(2) 与三个泡利矩阵都反对易的二维矩阵必为零矩阵.

44. 设 $\hat{P}_{\pm}=\frac{1}{2}[1\pm\hat{\sigma}_z]$ 为 z 方向投影算符. 证明：

(1) $\hat{P}_+ + \hat{P}_- = 1$;

(2) $[\hat{P}_+, P_-]=0$;

(3) $P_+\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a\\0\end{pmatrix}$，$\hat{P}_-\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\b\end{pmatrix}$;

(4) 写出 S_z 表象中，$\hat{P}_{\pm}$ 的矩阵表示.

45. 定义 $\hat{\sigma}_{\pm}=\frac{1}{2}(\hat{\sigma}_x\pm\mathrm{i}\hat{\sigma}_y)$.

(1) 写出：σ_z 表象中，$\sigma_{\pm}$ 的矩阵表示.

(2) 证明：$\sigma_+^2=\sigma_-^2=0$，$\sigma_+\sigma_-=P_+$，$\sigma_-\sigma_+=P_-$，$[\sigma_+, \sigma_-]$

$=\sigma_z$.

(3) 问: $\sigma_-\alpha=?$ $\sigma_-\beta=?$ $\sigma_+\alpha=?$ $\sigma_+\beta=?$

46. 定义 $\hat{P}_{n\pm}=\hat{P}_{S_n=\pm\frac{\hbar}{2}}=\frac{1}{2}(1\pm\hat{\sigma}\cdot n)$.

(1) 证明: $\hat{P}_{n\pm}^2=\hat{P}_{n\pm}$.

(2) 说明: $\hat{P}_{n\pm}$的物理意义.

47. 以 $\hat{P}_{n\pm}=\hat{P}_{S_n=\pm\frac{\hbar}{2}}=\frac{1}{2}(1\pm\hat{\sigma}\cdot n)$作用于自旋态 $\chi=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$.

(1) 求 $\hat{\sigma}_n=\hat{\sigma}\cdot n$ 的本征函数 $\psi_{n\pm}=\psi_{S_n=\pm\frac{\hbar}{2}}$, 并与第 41 题的结果比较.

(2) 以求出的 $\psi_{n\pm}$验证: $\hat{P}_{n\pm}\psi_{n\pm}=\psi_{n\pm}$, $\hat{P}_{\pm}\psi_{n\mp}=0$,

48. 应用上题求出的 $\hat{S}_n$ 的本征态 $\psi_{n\pm}$求: $\hat{S}_n$ 对$\chi=\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$态的平均值 $\overline{S}_n=?$ 并与第 40 题由 $\overline{S}_n=\chi^\dagger S_n\chi$ 求得的结果比较.

49. 由角动量算符 $\hat{J}_x$ 和 $\hat{J}_y$ 构成的 $\hat{J}_\pm=\hat{J}_x\pm i\hat{J}_y$ 是力学量吗? 为什么把 $\hat{J}_+$称为上升算符, 把 $\hat{J}_-$ 称为下降算符?

50. 试比较经典角动量的相加与量子角动量的耦合, 二者有什么区别?

51. 两个角动量耦合, 什么是耦合表象? 什么是非耦合表象? 指出两表象中力学量完全集. 什么叫 C-G 系数?

52. 应用矢量模型, 叙述两个角动量耦合的三角形关系, 并指出这种耦合关系的适用条件.

53. 两个角动量耦合. 当 j_1 和 j_2 给定时, 相互独立的 $|jm\rangle$ 状态数为$(2j_1+1)(2j_2+1)$个.

(1) 以上结论是怎样得出的?

(2) 以 $j_1=2$、$j_2=1$ 为例, 列出合成角动量量子数 j 及 m 的可能取值及相应状态数, 验证之.

54. $\hat{J}_1$与$\hat{J}_2$ 都是角动量.

(1) 如$\hat{J}_1$与$\hat{J}_2$是两个独立的角动量，教材中只证明了$\hat{J}_1+\hat{J}_2=\hat{J}$是角动量. 但是$\hat{K}=\hat{J}_1-\hat{J}_2$不是角动量. 为什么?

(2) 问: $\hat{J}_1$与$\hat{J}_2$要满足什么条件，$\hat{K}=\hat{J}_1-\hat{J}_2$才是角动量?

55. 三个独立的角动量$\hat{j}_1$、$\hat{j}_2$、$\hat{j}_3$，

令 $\hat{j}_{12}=\hat{j}_1+\hat{j}_2$, $j_{23}=j_2+j_3$.

问(1) $\hat{j}_{12}^2$与$\hat{j}_{23}^2$是否对易?

(2) 这对三个角动量耦合有何影响?

56. (1) 轨道角动量与自旋角动量是否对易?

(2) 自旋轨道耦合对自旋角动量与轨道角动量的各自对易关系是否有影响?

57. 自旋轨道耦合对体系的波函数、哈密顿量及总角动量各有什么影响?

58. 在耦合表象中，给出自旋轨道耦合项$\hat{S}\cdot\hat{L}$的本征值.

59. 列表给出以下力学量的对易关系.

$$\hat{L}^2、\hat{L}_z、\hat{L}_x、\hat{S}^2、\hat{S}_z、\hat{S}_x、\hat{J}^2、\hat{J}_z、\hat{J}_x、\hat{L}\cdot\hat{S}、\hat{H}.$$

(1) 不考虑自旋轨道耦合;

(2) 考虑自旋轨道耦合效应.

60. 什么是好量子数? 当计及自旋轨道耦合时，指出哪些量子数是好量子数.

61. 按照半经典模型，自旋取向可看作是自旋矢量绕z轴进动.

试求: 电子自旋进动频率与进动角.

62. 如两个电子的自旋相耦合，求: 合自旋矢量的进动角.

63. 用矢量模型解释处于自旋态$\alpha_z=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$的电子$\overline{S}_x=\overline{S}_y=0$的物理意义.

第九章　全同粒子

1. 全同粒子是:

(1) 所有性质均相同的粒子.

(2) 质量、速度、动量、能量、角动量均相同的粒子.

(3) 自旋相同的粒子(有时被称为同类粒子).

(4) 所有固有物理性质如静质量、电荷、自旋、磁矩、……均相同的粒子.

(5) 所有固有物理性质相同，且彼此间无相互作用的粒子.

你认为哪个定义最确切?

2. 以两个全同小球间的弹性碰撞为例,说明经典的全同粒子总是可区分的.

3. 以两个全同粒子(自旋为零)间的弹性碰撞为例,说明微观的全同粒子具有不可区分性.

4. 在什么情形下，微观的全同粒子具有可区分性?举例说明.

5. 微观的全同粒子可区分时,粒子可以被标记编号，这是否意味着这些微观粒子服从经典力学规律、粒子按轨道运动?

6. 微观粒子的全同性原理如表述为:

"全同粒子体系中,体系的物理状态不因交换任意两个粒子而改变."

问: (1) "物理状态"是指宏观态?还是微观态?

(2) "交换任意两个粒子"的准确含义是什么?

(3) 它与全同粒子的不可区分性有什么联系?

7. 经典的全同粒子系是否存在全同性原理?

8. 什么是全同粒子系哈密顿量的交换对称性?它有经典对

应吗？它对全同粒子系波函数的性质能作出什么判断？只由它是否可直接导出体系波函数必须是对称或反对称的结论？

9. 什么是全同粒子体系波函数的交换对称性？它对体系波函数带来什么限制？

10. 如体系哈密顿量为 $\hat{H}$ 的全同粒子系，在某时刻 t，由反对称波函数 ψ_A 描述.

问：(1) 此时，$\hat{H}\psi$ 具有什么对称性？

(2) 此时，$\frac{\partial\psi}{\partial t}$具有什么对称性？

(3) 此后，任何时刻的 ψ，具有什么对称性？

11. 全同粒子系的波函数是否可能对其中一部分粒子是对称的，而对另一部分粒子则是反对称的？

12. 是否可能由于外场的作用，使全同粒子系从一种对称态跃迁到具有不同对称性的态？

13. 交换对称性与其他对称性相比，有什么特点？

14. 态叠加原理对全同粒子系是否仍适用？全同粒子系的波动方程解的任意线性叠加，是否仍描述该体系的可能态？

15. 什么是玻色子？什么是费米子？哪些基本粒子是费米子？哪些基本粒子是玻色子？

16. 对原子核、原子、……等由基本粒子构成的复杂粒子，如何确定是费米子或玻色子？

17. 为什么质量数为奇数的核为费米子，而质量数为偶数的核为玻色子？如何判断中性原子是费米子或玻色子？

18. 根据前两题，判断：把下列复杂粒子看作一种简单粒子时，哪些是费米子？哪些是玻色子？

氢原子，重氢(氘)原子，α 粒子，氘核，氚核，氦原子，氮(N^{14})原子.

19. 氦原子是玻色子，而计算氦原子的量子能级时，氦原子的定态波函数由反对称波函数描述，是否矛盾？

20. 量子力学中以什么为依据，把全同粒子系划分为定域系与非定域系？

21. 为什么把玻色-爱因斯坦统计与费米-狄拉克统计统称为量子统计，而把玻尔兹曼统计称为经典统计？量子统计与经典统计是统计原理上的不同，还是其他方面的不同？

22. 设 $\hat{P}_{ij}$ 为全同粒子系中，第 i 个粒子与第 j 个粒子的交换算符.

(1) 任两对不同粒子的交换算符 $\hat{P}_{ij}$ 与 $\hat{P}_{kl}$ 是否对易？

(2) i 粒子与其他粒子 j、l 的 $\hat{P}_{ij}$ 与 $\hat{P}_{il}$ 是否对易？

以实例说明.

23. (1) 偶数 $N=2k$ 个全同粒子组成的体系中 $(k=1,2,\cdots)$，有多少个独立的交换算符？其中有多少个是彼此对易的？以实例说明.

(2) 奇数 $N=2k+1$ $(k=1,2,\cdots)$ 个全同粒子组成的体系，结果又如何？

24. 交换算符只涉及全同粒子系中一对粒子，实际上全同粒子系中每个粒子都可能参与交换，这相当于在体系波函数 ψ 中，把 N 个粒子编号重新排列——置换.

(1) 从 N 粒子系波方程任一解出发，经任何方式的置换可以得到多少个解？以 $N=2$ 及 $N=3$ 为例说明.

(2) 如引入置换算符 $\hat{P}$，N 粒子系有多少个置换算符？

(3) 以 $N=3$ 为例说明：任一置换算符可分解为若干交换算符的乘积.

(4) 什么是奇置换？什么是偶置换？

25. 什么是交换简并？粒子数为 N 的全同粒子系，能量本征

值的最大简并度是多少？交换简并的消除与其他简并相比，有什么特点？

26. N 个全同粒子在 k 个单粒子态中分布. 对定域系，可能态数 n_D=？费米系 n_F=？玻色系 n_B=？

(1) 给出计算的一般公式.

(2) 以 $N=3$、$k=2$ 为例，具体列出各系的可能状态.

27. N 个全同粒子在 k 个单粒子态中分布，定域系可能态数 n_D、费米系可能态数 n_F、与玻色系可能态数 n_B 之间，是否总有 $n_D=n_B+n_F$？

试以 $N=2$、k 分别为 2、3、4 及 $N=3$、k 分别为2、3 为例，算出相应的 n_D、n_B、n_F 作比较.

28. 怎样由全同粒子系未对称化的波函数构成对称的及反对称的波函数？以 $N=3$ 为例说明.

29. 粒子数为 N、全同且近独立的粒子系波函数，其归一化常数在什么条件下，对玻色系与费米系均有

$$C=\frac{1}{\sqrt{N!}}?$$

30. 全同粒子间相互作用不可忽略时，是否还有单粒子态存在？体系波函数是否仍可用单粒子态乘积描述？体系波函数是否仍有对称与反对称之分？

31. 对于近独立的全同费米子系，如何从体系波函数的交换对称性，导出泡利不相容原理？全同粒子间有不可忽略的相互作用时，泡利原理是否仍存在？它与前者有何不同？

32. 一般情况下的全同费米子系，体系波函数可以斯莱特行列式展开. 例如，$N=2$ 时

$$\psi_A(1,2)=\sum_{i>j}\sum_{j}C(i,j)\begin{vmatrix}\varphi_i(1) & \varphi_i(2)\\ \varphi_j(1) & \varphi_j(2)\end{vmatrix}.$$

式中对 i, j 取和时，$i>j$ 的限制是如何得出的？它的物理含义是什么？

33. 对两粒子的全同粒子系，为什么把

$\hat{S}_2=\frac{1}{2}(1+\hat{P}_{12})$ 称为两粒子系的对称化算符？

$\hat{A}_2=\frac{1}{2}(1-\hat{P}_{12})$ 称为两粒子系的反对称化算符？

其中，$\hat{P}_{12}$ 为交换算符.

34. $N=3$ 的全同粒子系对称化算符 $\hat{S}_3=$？反对称化算符 $\hat{A}_3=$？

N 个全同粒子的体系 $\hat{S}_N=$？$\hat{A}_N=$？

35. 全同性原理使全同粒子系的态矢空间有什么特点？

36. 为什么把对称化算符与反对称化算符称为投影算符？

37. 全同粒子系中，粒子数 $N=$？时，反对称化态矢空间 e_A 与对称化态矢空间 e_S 才是互补的子空间？

38. 交换算符 $\hat{P}_{ij}$ 是否为幺正算符？是否为厄米算符？置换算符 $\hat{P}_\alpha$ 呢？对称化算符与反对称化算符呢？

第十章　定态微扰与量子跃迁

1. 简述定态微扰法的基本思想.

2. 将定态微扰法的适用条件表述为微扰 $\hat{H}'\ll\hat{H}_0$，即总哈密顿量 $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}'$ 与 $\hat{H}_0$ 相差很小，是否确切?

3. 上题中得出的非简并定态微扰的成立条件，为什么只说是必要条件，而不是充分条件？以粒子在势场 $V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2+\beta x^3$ 运动为例，说明.

4. 证明：定态微扰论中，能量的一级近似是总哈密顿算符 $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}'$ 对零级波函数的平均值.

5. 证明：定态微扰论中，能量的二级近似是总哈密顿算符 $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}'$ 对归一化的一级近似波函数的平均值.

这是否是一般规律？即：能量的 $n+1$ 级近似可由 $\hat{H}$ 对归一化的第 n 级近似波函数取平均而得出？

6. 证明：非简并定态微扰中，基态的能量二级修正永为负.

7. 证明：微扰 $\hat{H}'$ 在未受扰态中的矩阵元满足

$$\sum_m|H'_{nm}|^2=(H'^2)_{nn}.$$

8. 对以无穷项取和表出的能量二级修正 $E'_2=\sum_{m\neq n}\frac{|H'_{mn}|^2}{E_n^0-E_m^0}$，一个简单而有用的估计是确定 E'_2 大小的上界.

试证明：对给定能级 E_n^0，其二级修正 $|E'_2|$ 的上界为

$$|E'_2|\leqslant\frac{|\Delta H'|^2}{\Delta E},$$

式中 $\Delta H'=\sqrt{(H'^2)_{nn}-(H'_{nn})^2}$ 是微扰 $\hat{H}'$ 在 $|n\rangle$ 态的方均根偏差(标准差). ΔE 是 E_n^0 与最靠近它的能级间的能量差的绝对值.

9. 氢原子受沿 z 轴方向的均匀电场 e 作用，微扰 $\hat{H}'=eez=eer\cos\theta$. 利用上题结果，求出基态能量的二级修正的上界，并与由微扰论算出的结果比较(不计电子自旋).

10. 非简并态微扰法为什么不适用于所谓近简并情况?

11. 体系某简并能级，在微扰 $\hat{H}'$ 作用下，如果一级修正没有解除简并，是否二级、……一直作下去，简并就一定能解除?

12. 简并态微扰

(1) 什么是对微扰 $\hat{H}'$ 的"正确的"零级波函数?

(2) 能量一级修正等于什么?

(3) 简并态微扰成立的必要条件是什么?

13. 什么条件下，简并能级情形仍可用非简并态微扰处理?

14. 能级简并没有解除的解是否必定是近似解? 反之，近似解是否必定是能级简并的?

15. 若总哈密顿量 $\hat{H}$ 在 $\hat{H}_0$ 的表象中为非对角矩阵，物理上意味着什么? 若 $\hat{H}$ 在 $\hat{H}_0$ 的表象中为对角矩阵，又意味着什么?

16. 如果微扰 $\hat{H}'$ 的形式已知，那么，我们便可将 $\hat{H}$ 在 $\hat{H}_0$ 的表象中对角化，从而求得 $\hat{H}$ 的本征解. 这样，近似计算还有什么意义呢?

17. 定态微扰问题与量子跃迁问题在研究目标与处理方法上有何不同?

18. 含时微扰在含时情况不同时，对体系产生的效果有何不同?

19. 常微扰既然不随时间变化，那么它是否可作为定态微扰问题来处理?

(1) 体系在 $0—t$ 时间受到常微扰作用.

(2) 体系在 $0—\infty$ 时间受到常微扰作用.

20. 什么是等能跃迁?

21. 试用经典类比说明：周期微扰下的量子跃迁与共振.

22. 什么叫“黄金规则”？它的适用范围是什么？

23. 非相对论量子力学中是如何处理光的吸收和辐射问题的？

24. 辐射的谱线位置与谱线强度各取决于什么因素？

25. 简单说明什么是偶极跃迁？它适用于什么条件？

26. 什么是禁戒跃迁？它是完全禁戒的吗？

27. 自发辐射中既然没有外来扰动($\hat{H}'=0$)，那么体系应当处于定态，为什么还会发生跃迁呢？

第十一章 散射理论

1. 以正电子 e^+ 入射于基态氢原子为例说明：量子碰撞的三种可能类型：弹性散射，非弹性散射，反应.

2. 研究微观粒子间的碰撞现象有什么意义？

3. 给定碰撞过程中，发生某事件的总截面及微分截面是如何定义的？为什么说截面是描述碰撞的特征量？

4. 上题中，截面的定义在什么实验条件下才成立？

5. 非弹性散射的截面是如何定义的？

6. 什么叫逆散射问题(the inverse scattering problem)？

7. 什么是实验室系(L 系)、质心系(c、M 系)？它们是惯性系吗？为什么散射问题中采用这两个坐标系？同一散射过程，散射截面对 L 系与 c、M 系是否相同？

8. 什么是势散射？

9. "势散射是把两体散射在质心系中约化为具有折合质量的单粒子在中心势场中的散射问题，"这个提法是否正确？

10. 什么条件下，散射问题可用定态方法求解？试把求解这个定态问题与氢原子、线性谐振子等定态问题作一比较？

11. 为什么说：严格的散射理论中，入射粒子束应该用一束波包来描述？什么条件下，波包的形状对截面才没有显著影响？什么条件下，波包与平面波描述的结论是一致的？

12. 库仑势是中心势，为什么散射理论中对它需作专题讨论？

13. 为什么研究散射问题时，通常只限于势场作用范围外的散射波？

14. 微分散射截面的定义在入射粒子正前方向($\theta=0$)是否还

有效？在 $\theta=0$ 方向测得的粒子属于散射波还是属于入射波？如何确定 $\theta=0$ 方向的微分散射截面？

15. 一维势垒贯穿问题中，是否存在散射截面的概念？

16. 用分波法计算中心力场中弹性散射截面时，

(1) 问题中应存在什么对称性？

(2) 什么叫分波？

(3) 初态——沿 z 轴入射的平面波 e^{ikz}，是哪些力学量的本征函数.

(4) 中心力场中，角动量是守恒量，为什么又把入射平面波用对应不同角量子数 $l=0,1,2,\cdots$ 的分波展开？角动量是守恒量怎样具体体现在散射问题中？

(5) 库仑场是中心力场，为什么不能应用这种分波法？

17. 分波法中，相移 $\delta_l>0$ 与 $\delta_l<0$ 各代表什么物理意义？

18. 分波法中，径向波函数满足的方程中，当 $r\to\infty$，$V(r)$ 比 $\frac{1}{r}$ 更快地趋于零时，可求出

$$R_l(r)\xrightarrow[r\to\infty]{}\frac{A_l}{kr}\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right)$$

既然此式是在 $V(r)\to 0$ 得到的，那么，相移 δ_l 不是与 $V(r)$ 无关吗？

19. s 分波散射有什么特点？

20. 分波法中如只考虑 s 分波与 p 分波，角分布呈什么形状？

21. 应用分波法解具体问题时，如何简单估算应当计算多少次分波的相移就可以得到足够准确的结果？

22. 玻恩近似法的基本思想是什么？

23. 分波法是近似方法吗？它适用的条件是什么？

24. 对玻恩近似，通常给出的应用条件是：

低能时 $(ka\ll 1)$ $|V|\ll\frac{\hbar^2}{ma^2}$

高能时 $(ka\gg 1)$ $|V|\ll\frac{\hbar^2}{ma^2}\cdot ka=\frac{\hbar v}{a}$

其中 a 是势场 $V(r)$ 的作用半径，$v=\frac{\hbar k}{m}$是入射粒子的速度，$|V|$代表该势场主要区域内场值的数量级．这相当于在半径为 a 的球内，把势能视为常数 $|V|$，或以 $|V|$ 代表平均势能．

问：(1) 这两个条件通常是基于什么物理要求而得出的？

(2) 既然有低能与高能两个条件，为什么通常说玻恩近似是高能近似？

(3) 这两个条件对库仑散射是否可应用？

25. (1) 利用不确定关系估计玻恩近似成立条件．

(2) 上题中两个成立条件是否可从其他考虑导出？

26. 在什么条件下，用玻恩近似求出的中心势场中弹性散射截面才是分波法中相应截面的精确近似？

27. 分波法中，散射总截面 Q 是各分波截面 Q_l 之和，$Q=\sum_l Q_l$．微分截面 $\sigma(\theta)$是否也有类似结果？角分布中各分波是否也是独立的？

28. 三维球形方势阱及方势垒散射的物理过程有什么不同？

29. 刚球(半径为 a) 散射 $V=\begin{cases}0 & r>a\\ \infty & r\leqslant a.\end{cases}$

为什么量子总截面到经典总截面有个 $4\pi a^2\to 2\pi a^2\to\pi a^2$ 的变化，给出物理解释．

30. 什么是共振散射？球方势阱中的低能散射在满足什么条件下可发生共振散射？

31. 球方势阱 $V(r)$中可能存在 l 分波 $(l\geqslant 0)$ 低能共振散射，

这是否可以说：正能粒子可存在束缚态？

32. 什么是冉邵尔（Ramsauer）效应？量子理论如何解释？

33. 粒子被复势散射表示什么物理意义？

34. 光学定理——正前方向弹性散射振幅的虚部 $\mathrm{Im}f(0)$ 与总截面 Q 满足 $$\mathrm{Im}f(0)=\frac{k}{4\pi}Q.$$

(1) 定理的物理意义是什么？

(2) 定理是否只对中心力场中弹性散射才成立？

35. 光学定理表明：散射振幅一般是复数，而且靠近正前方向有一个正的虚部.

(1) 证明：玻恩一级近似中，正前方向的弹性散射振幅总是实的，并举出实例.

(2) 如何看待上问中出现的玻恩一级近似永远不满足光学定理这个事实？

36. 由光学定理 $\mathrm{Im}f(0)=\frac{k}{4\pi}Q$，通过实测总截面 Q，可确定正前方向弹性散射振幅的虚部 $\mathrm{Im}f(0)$.

问：$f(0)$ 的实部 $\mathrm{Re}f(0)$ 如何求出？是否可直接由测量确定？

37. 有两个全同粒子相碰撞，在质心系中，设单粒子散射振幅为 $f(\theta)$.

问：在 θ 方向上测得粒子(无论是哪个粒子)的微分截面是多少？如果它们是

(1) 经典粒子.　　(2) α 粒子.　　(3) 电子.

38. 设有两电子束相碰撞，比较下述情况的散射截面.

(1) 非极化电子束.

(2) 极化电子束.

第十二章　原子与分子

1. 玻尔氢原子线度与量子力学中氢原子线度有什么关系？

2. 为什么原子幅射时，幅射的光子能量总是稍稍小于电子跃迁的能级差？

3. 描述氢原子状态需要几个量子数？量子数数目取决于什么？

4. 氢原子中能量量子化与角动量量子化是如何发生的？其物理实质是什么？量子力学中电子轨道还是量子化的吗？

5. 如果有心力场不是库仑场（$V(r)$不与$\frac{1}{r}$成比例），角分布函数将取什么形式？

6. 库仑场与一般有心力场在简并性上有何不同？库仑场中是否有偶然简并？

7. 氢原子的径向分布函数有什么特征？

8. 下列三种径向归一化表示式中，哪一种是正确的？

(1) $\int_0^\infty |R(r)|^2 \mathrm{d}r = 1.$　　(2) $\int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 \mathrm{d}r = 1.$

(3) $\int_0^\infty |R(r)|^2 4\pi r^2 \mathrm{d}r = 1.$

9. 氢原子ψ_{nlm}态中$r=$？

10. 氢原子基态$|\psi_{100}|^2 = \frac{1}{\pi a_0^3} \mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}$（$a_0$为玻尔半径），在$r=0$有极大值．表明电子最概然位置是在非常靠近原子核的地方，这与电子最概然距离$r=a_0$是否矛盾？

11. 类氢原子中$\frac{1}{\bar{r}}$与$\overline{\left(\frac{1}{r}\right)}$是否相等？为什么计算时往往互相取代？对其他正整数$\alpha$的$\overline{r^\alpha}$与$\overline{\left(\frac{1}{r^\alpha}\right)}$是否也有类似关系？

12. 为什么氢原子径向波函数可以是实函数而角向波函数必为复函数?

13. 设氢原子处于 $n=3$、$l=2$ 的状态,如只考虑偶极跃迁,它向哪些低能状态的跃迁才是可能的?

14. 氢原子中径向波函数 $R_{nl}(r)$ 的归一化常数 $N_{nl}=-\left\{\left[\frac{2Z}{na_0}\right]^3\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}\right\}^{1/2}$,为什么归一化常数取负值?

15. 一个靠万有引力结合的中子电子系统,构成一个假想的"原子". 试问:此"原子"第一轨道半径有多大?

16. 一个 μ 子,其质量为电子的 210 倍,被一个质子俘获形成一个类氢原子.

(1) 当 μ 子从第一激发态落到基态时,所发射光子的能量是多少?

(2) 此类氢原子第一玻尔半径多大?

(3) μ 子在第 n 个玻尔圆形轨道上的速度是多大?

17. 对一般的多电子原子,其哈密顿量应计入哪些种相互作用?

18. 交换能必定是库仑能吗?交换效应的物理本质是什么?什么情况下交换效应可忽略?

19. 通常所说"态的交换时间与交换能成反比"是如何得出来的?它有何实际意义?

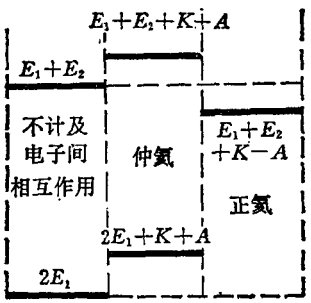
20. 正氦与仲氦的波函数对于电子都是反对称的,它们之间从理论上是可能发生跃迁的. 为什么又说. 正氦与仲氦之间不能有跃迁呢?

21. 为什么用光照射处于基态的氦很难使它由仲氦转换为正氦. 用电子来轰击就可以实现?

22. 为什么通常在氦能级图上只标出单激发态,即氦原子的

两个电子中，一个总是处于基态(1 s)，另一个处于任意单电子态(nl)？是否存在电子组态如($nl, n'l'$)(其中 $n, n'>1$)的双激发态？如考虑这些能态，能级图将有什么变化？

23. 图 14 中给出氦原子第一激发态能级示意图. 它是否正确？



图中 K:库仑能
A:交换能

图 14

24. 氢原子谱线在电场中的分裂——斯塔克效应

(1) 实验中外电场可高达 $\varepsilon\sim10^5$ V/cm，为什么能作微扰处理？

(2) 氢原子能级是 n^2 度简并的，加外电场后是否可把简并全部解除？

(3) 为什么只对氢原子，且只在激发态才发生一级(线性) 斯塔克效应(谱线分裂与场成正比)，而碱金属原子只有裂矩与场平方成正比的二级(平方)效应？

25. 什么是精细结构常数？

26. 正常塞曼效应中，每条谱线分裂为三条，能级是否也是一分为三？

27. 原子结构理论中，有心力场模型的基本假定是什么？

28. 哈特里自洽场方法中“自洽”的含义是什么？

29. 费米-托马斯模型是统计近似还是准经典近似？它与哈特里自洽场方法相比，有什么特点？

30. 说明泡利不相容原理在原子结构中的重要意义.

31. 周期表前三个周期原子电离能变化如图 15，试予以详细解释.

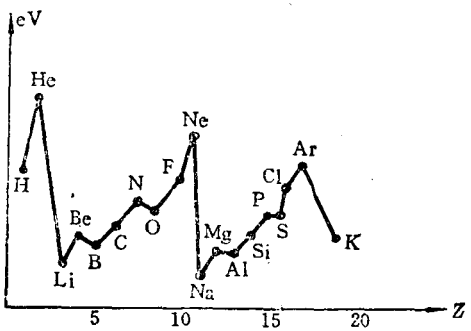


图 15 z 由 1 到 19 间元素的电离能

32. 为什么 p 轨道上($l=1$)有四个电子时，电离能反而比三个电子时还小一些？

33. 什么是里德堡修正？它与哪些参量有关？

34. 为什么多电子原子中电子的角函数与单电子原子一样，而径向函数除 $r=0$ 处外两者不同？

35. 什么是有效原子序数 z？为什么可用单电子原子方程加上一个有效原子序数 z 来讨论多电子原子？

36. 多电子原子中，有些主量子数 n 较小的态，其能量有时反而比 n 较大的态大，为什么？

37. 叙述洪德定则，并指出其适用条件？

38. 试从物理上对洪德定则作出定性解释.

39. 按照洪德定则，对于一未满副壳层(nl)，当电子不足半满时，有 $J=|L-S|$；当电子超过半满时，有 $J=L+S$. 那么，当电子恰好半满时，应满足什么关系？

40. 叙述原子谱项表示方法，为什么确定原子谱项只须考虑未满壳层？

41. 写出下列物质的电子组态与基态原子谱项：

${}_1H$, ${}_2He$, ${}_3Li$, ${}_6C$, ${}_9F$, ${}_{13}Al$, ${}_{19}K$, ${}_{26}Fe$, ${}_2He^+$, ${}_{11}Na^+$, ${}_{11}Na^{**}$, ${}_{26}Fe^{**}$, ${}_{26}Fe^{***}$, H_2.

42. 比较下列元素的原子谱项，并对结果作出解释.

${}_5B$ 与 ${}_9F$, ${}_{14}Si$ 与 ${}_{16}S$, ${}_{22}Ti$ 与 ${}_{28}Ni$.

43. Na 的原子序数为 11，

(1) 写出它的电子组态与基态谱项；

(2) 写出它的最低激发态的一对分裂能级的谱项；

(3) 此一对能级分裂的机制是什么？

(4) 这两个分裂能级中，哪一个能量较高？

(5) 这两个能级分裂距正比于 $\overline{r^n}$，r 是价电子到核心矩离，试通过简单讨论求出幂指数 n.

44. 说明朗德 g 因子的物理意义，给出其表达式.

45. 为什么朗德 g 因子对所有独态都等于 1，而对所有 s 态都等于 2？

46. 为什么自旋轨道耦合作用随原子序数增大而增强，自旋与自旋相互作用是否如此？

47. 什么是 LS 耦合？什么是 jj 耦合？各适用于什么情况？是否存在其他耦合方式？

48. 既然自旋轨道相互作用随 Z 增大而增强，为什么 LS 耦合又不适用于重元素原子？

49. 解释下列名词：

共价键，离子键，极性键，非极性键，轨道杂化。

50. 共价键的数目与方向取决于什么？

51. 为什么氢分子是由两个氢原子组成，而不是三个或更多氢原子组成？为什么氢分子中两原子自旋不能平行？

52. 碳原子只有两个未配对电子，为什么是 4 价？

第十三章　对称性与守恒定律

1. 通常所说：一个几何图形具有某种对称性的确切含义是什么？

2. 物理体系具有某种对称性的准确含义是什么？

3. 举例给出：物理学中的常见变换.

(1) 属于空间坐标变换，

(2) 属于时间坐标变换，

(3) 属于时间及空间坐标变换，

(4) 与时空坐标无关的对称变换.

4. 为什么对称性在量子物理中的应用比在经典物理中有着更重要的作用？

5. 具有几何对称的体系，可能的对称变换实际上都可由以下三种本质不同的基本类型中的一种或几种组合而成：

(1) 旋转(绕某轴转过一定角度)，

(2) 反射(对某一平面)，

(3) 平移(沿某方向移动一距离).

问：将 $r\to -r$ 的空间反射是由其中哪几种组合而成的？

6. 量子体系的几何对称性为什么往往只由空间对称变换下势能的不变性来确定？试举例说明.

7. 量子力学中守恒量是如何表述的？有何特点？

8. 经典力学中，守恒量（运动积分）是指体系在运动过程中恒取确定值的力学量. 量子力学中体系的守恒量是否总是取确定值？

9. 在什么条件下，厄米算符 $\hat{F}$(不显含时间)的平均值不随时

间改变?

10. 证明(1)坐标变换 $\hat{G}$ 是幺正变换,

(2) 在坐标变换 $\hat{G}$ 的作用下,如量子体系的哈密顿量 $\hat{H}$ 不变,则变换算符 $\hat{G}$ 与 $\hat{H}$ 对易.

11. 幺正变换算符 $\hat{F}$ 描述了体系的不变性. $\hat{F}$ 不显含时间且与体系的哈密顿量对易.

问: $\hat{F}$ 是否为体系的一个守恒量?

12. 物理学中,体系的对称性(不变性) 与某些基本量的不可观测性(不可区分性)及守恒定律这三者间关系如何?

13. 物理上,空间的均匀性和各向同性、时间的均匀性,它们各代表什么对称性(不变性)? 对应的不可观测量是什么? 导致什么守恒定律?

14. 表象变换是幺正变换,它与体系什么对称性联系?

15. 是否所有的物理上的对称性都有对应的守恒定律? 是否所有的物理上的守恒定律都伴随着某种对称性? 有些对称性被称为"破缺"的,含义是什么?检验的标准是什么?

16. 具有某种对称性的体系是否总处于其守恒量的本征态?例如,具有时间平移对称性的体系是否总处于能量本征态?具有空间反射对称性的体系是否总处于宇称的本征态?

17. 指出下列体系中,能量 E、动量(p_x, p_y, p_z)、角动量(L^2, L_x, L_y, L_z)、宇称 P,哪些是守恒量?

(1) 自由粒子.

(2) 中心力场中的粒子.

(3) 一维谐振子.

(4) 在立方容器中的粒子.

(5) 在球形容器中的粒子.

(6) 在圆柱形容器(轴沿 z 轴)内的粒子.

(7) 在无规则形状的容器内的粒子.

(8) 在沿 z 方向的均匀电场中的带电粒子.

(9) 在随时间变化但沿 z 方向空间均匀的电场中的带电粒子.

18. 自旋 $S=\frac{1}{2}$ 的粒子，哈密顿量 $\hat{H}$ 为

(1) $\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+U_0(r)+f(r)(\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L})$.

(2) $\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+U_0(r)+U(r)\left(\sigma\cdot\frac{r}{r}\right)$.

找出体系的守恒量.

19. 应用以下定理“如体系有彼此不对易的两个守恒量 F 和 G，则一般说来(个别特殊的态除外) 体系的能级是简并的”判断下列体系能级是否简并.

(1) 三维中心力场中运动的粒子.

(2) 一维运动的自由粒子.

20. 体系的对称性是否一定导致体系能级的简并？以一维谐振子及对称方势阱中运动的粒子为例，并以上题所述的定理说明之.

21. 在什么条件下，具有空间反射对称性的体系，其能量本征态才具有一定的宇称？举例说明.

22. 在 $x=\pm\frac{L}{2}$ 间的一维无限深势阱中的粒子，设初态($t=0$)；$\psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{41}}(4\varphi_1+5\varphi_2)$，其中 φ_1 为体系的能量本征态(基态)，φ_2 为第一激发态.

问：(1) 对给出的 $\psi(x,0)$ 以及任时刻的 $\psi(x,t)$ 是否有一定的宇称？

(2) 对给出的 $\psi(x,0)$ 以及任时刻的 $\psi(x,t)$，宇称作为力学

量，其平均值 $\bar{P}=$？

23. 对没有一定宇称的态 ψ，总可以由宇称投影算符 $\hat{P}_{\pm}=\frac{1}{2}[1\pm\hat{P}]$ 作用到 ψ 上而得出分别具有奇宇称的 ψ_- 与具有偶宇称的 ψ_+ 两部分.

(1) 以一维运动的自由粒子 $\psi(x)=e^{ikx}$ 验证之.

(2) 以上题给出的 $\psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{41}}(4\varphi_1+5\varphi_2)$ 验证之.

24. 判断下列论断的正误

(1) 一体系的哈密顿量是守恒量，则体系必处于定态.

(2) 一维运动的粒子若处于定态则能级是非简并的.

(3) 若 $\hat{F}$ 与 $\hat{G}$ 都是体系的守恒量，则它们都具有确定的测值.

25. 已知 $\hat{F}_1$ 与 $\hat{F}_2$ 都是体系的守恒量，但不可对易. 即 $\frac{d\hat{F}_1}{dt}=\frac{d\hat{F}_2}{dt}=0$，$\hat{F}_1\hat{F}_2\neq\hat{F}_2\hat{F}_1$. 因而 $\frac{d}{dt}(\hat{F}_1\hat{F}_2)=\left(\frac{d\hat{F}_1}{dt}\right)\hat{F}_2+\hat{F}_1\left(\frac{d\hat{F}_2}{dt}\right)=0$，类似有 $\frac{d}{dt}(\hat{F}_2\hat{F}_1)=0$. 所以，$\hat{F}_2\hat{F}_1$ 与 $\hat{F}_1\hat{F}_2$ 亦为体系的守恒量，对否？

26. 证明：如动量 p_x 及角动量 L_z 是体系的守恒量，则动量 p_y 必为该体系的守恒量. 举出一实例，并从对称性角度给予解释.

27. 如角动量 L_x 与 L_y 是某体系的守恒量，证明：角动量 L_z 及 L^2 同样为体系的守恒量. 并从对称性解释此结论.

28. 由平移算符 $D(a)$——三维空间平移一段有限距离 a，转动算符 $R_n(\beta)$——绕任意轴(方向 n)转过 β 角，宇称算符 $\hat{P}$ 及交换算符 $\hat{p}_{ij}$ 所构成的下列各对算符中，哪些对是对易的？

(1) $D(a),D(b)$. (2) $R_n(\beta),R_n(\gamma)$. (3) $R_n(\beta),R_m(\beta)$.

(4) $P, D(\alpha)$. (5) P, p_{ij}. (6) $D(\alpha), R_n(\beta)$.

29. 体系的哈密顿算符在空间反射下不变，常被写成

(1) $\hat{H}(\boldsymbol{r})=\hat{H}(-\boldsymbol{r})$.

(2) $\hat{H}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p})=\hat{H}(-\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p})$.

(3) $\hat{H}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p})=\hat{H}(-\boldsymbol{r}, -\boldsymbol{p})$.

哪个是正确的？

30. 什么叫连续变换？为什么把时间平移、空间平移、空间转动这三种时空变换称为连续时空变换？

31. 宇称变换对应的守恒量——宇称算符具有离散的本征值 ± 1，由此，把宇称变换称为离散时空变换. 类此，连续变换是否可定义为：与变换对应的守恒量有连续谱的变换？

32. 给出与空间转动、空间平移、时间平移这三种连续时空变换对应的

(1) 无穷小变换，(2) 守恒量，(3) 以无穷小变换累积表出的有限变换.

33. 时空变换中，连续时空变换的变换算符和宇称变换算符均与系统的哈密顿量对易. 为什么只有宇称算符才是与变换对应的守恒量？

34. 证明：单粒子在中心力场中运动时，单粒子态的宇称为 $(-1)^l$，即波函数 ψ_{nlm} 有 l 宇称.

35. (1) 以宇称变换为例，说明“离散变换下的对称性导致相乘性量子数守恒定律”.

(2) 对连续变换下的对称性导致什么性质量子数守恒定律？举例说明.

36. 物理上，时间各向同性代表什么对称性？对应的不可观测量是什么？导致什么守恒定律？

37. 给出下列物理量在空间反射与时间反转变换下的变换

关系.

r, t, p(动量), 角动量 $L=r\times p, \sigma$(自旋),

E(电场强度), B(磁感应强度).

解　答

第　一　章

1. (4),(5)正确. 吸收比 $\alpha(\lambda,T)=1$,蕴含了任何温度下,对入射的任何波长的辐射 $\alpha(\lambda,T)$ 均为 1.

(2) 是常见的黑体定义，显然，应加上“在任何温度下”才完整.

2. (1) 与热辐射有关的几个物理量的定义如下.

辐射出射度(简称辐出度)R: 处于绝对温度 T 的热辐射体，每单位时间从单位表面面积向 2π 立体角(即半空) 发出的一切可能波长的总辐射能，R 的单位为瓦/米^2.

单色辐出度 r_λ: 辐出度 R 中，波长在 λ 附近单位波长间隔的辐射能，常用 $r_{\lambda,T}$ 或 $r(\lambda,T)$ 表示，单位为瓦/米^3. 单色辐出度也可以频率 ν 及 $\omega=2\pi\nu$ 表出为 r_ν 及 r_ω.

辐射体亮度 B: 辐射体在某方向的亮度是指在垂直此方向上，辐射体表面投影的单位面积，在单位立体角内发出的辐射功率，其单位为瓦/(米^2·球面度).

辐射体单色亮度 b_λ: 辐射体亮度 B 中在某波长 λ 附近单位波长间隔的亮度，其单位为瓦/(米^3·球面度). 单色亮度也可以频率表出为 b_ν 等.

吸收比通常是指单色吸收比 $\alpha(\lambda,T)$: 波长在 λ 到 $\lambda+\mathrm{d}\lambda$ 范围内的入射功率被温度为 T 的热辐射体所吸收的部分与该入射功

率之比，它是取值范围由 0 到 1 的纯数.

比辐射（率）emissivity：一非黑体的单色辐出度 $r_{\lambda,T}$ 与同温度下如物体为黑体时的单色辐出度 $f_{\lambda,T}$ 之比. 比辐射（率）$\varepsilon_{\lambda,T}=r_{\lambda,T}/f_{\lambda,T}$ 有时被称为发射率或发射本领.

以上这些物理量及辐射能密度 $u=\int_0^\infty u_\nu \mathrm{d}\nu$ 间的基本关系如下：

任一热辐射体的单色辐出度 $r_{\lambda,T}$ 与单色吸收比 $\alpha_{\lambda,T}$ 满足基尔霍夫定律 $\frac{r_{\lambda,T}}{\alpha_{\lambda,T}}=f(\lambda,T)$，普适函数 $f(\lambda,T)$ 为同温度下黑体的单色辐出度. 如利用比辐射 $\varepsilon_{\lambda,T}$ 则定律表述为 $\varepsilon_{\lambda,T}=\frac{r_{\lambda,T}}{f_{\lambda,T}}=\alpha_{\lambda,T}$. 物体的发射本领等于它的吸收本领.

辐出度 $R=\int_0^\infty r_{\nu,T}\mathrm{d}\nu=\int_0^\infty r_{\lambda,T}\mathrm{d}\lambda.$

辐射体亮度 $B=\int_0^\infty b_\nu \mathrm{d}\nu.$

对非黑体 $R=\int_0^\infty r_{\lambda,T}\mathrm{d}\lambda=\int_0^\infty \varepsilon_{\lambda,T}f_{\lambda,T}\mathrm{d}\lambda.$

对黑体 $R=\sigma T^4$，σ 为斯特藩常数.

黑体是余弦辐射体，亮度与方向无关，$R=\pi B$，$r_\nu=\pi b_\nu$.

辐射能密度 $u=\frac{4}{c}R=\frac{4\pi}{c}B$，单色能量密度 $u_\nu=\frac{4\pi}{c}b_\nu$.

(2) 同义词分行排列，只给出题中名词的号码.

辐射出射度(辐出度)：(1)，(6)，(7)，(11)，(12)，(17).

单色辐出度：(2)，(4)，(5)，(8)，(13)，(15)，(20).

辐射体亮度：(3)，(9)，(10).

辐射体单色亮度：(18)，(22).

吸收比：(14)，(19)，(23)，(26).

辐射能密度：(24)，(21).

单色辐射能密度：(16)，(25).

3. 普朗克黑体辐射公式

(1) 以单色辐射能密度表出:

$$u_\omega=\frac{\hbar\omega^3}{\pi^2c^3}\frac{1}{e^{\hbar\omega/kT}-1},\quad u_\nu=\frac{8\pi h}{c^3}\frac{\nu^3}{e^{h\nu/kT}-1},$$

$$u_\lambda=\frac{8\pi hc}{\lambda^5}\frac{1}{e^{hc/\lambda kT}-1}.$$

(2) 以单色辐出度表出:

$$r_{\nu,T}=\frac{2\pi h\nu^3}{c^2}\frac{1}{e^{h\nu/kT}-1},\quad r_{\lambda,T}=\frac{2\pi hc^2}{\lambda^5}\frac{1}{e^{hc/\lambda kT}-1}.$$

(3) 以辐射体单色亮度表出:

$$b_\nu=\frac{r_{\nu,T}}{\pi}=\frac{2h\nu^3}{c^2}\frac{1}{e^{h\nu/kT}-1},$$

$$b_\lambda=\frac{r_{\lambda,T}}{\pi}=\frac{2hc^2}{\lambda^5}\frac{1}{e^{hc/\lambda kT}-1}.$$

这些分布曲线间:

u_ω 按 ω 分布, 与 u_ν, r_ν, b_ν 按 ν 分布曲线形状相同. u_λ 与 r_λ, b_λ 按 λ 分布曲线形状相同.

特别注意: 由于 $\lambda=\frac{c}{\nu}$, $\left|\frac{d\lambda}{d\nu}\right|=\frac{\lambda^2}{c}=\frac{c}{\nu^2}$, $r_{\nu,T}=\frac{\lambda^2}{c}r_{\lambda,T}$

因而, 辐出度按 ν 分布($r_{\nu,T}$)及按 ω 分布与按 λ 分布曲线形状不同.

4. 所给公式是非偏振辐射公式.

史包尔斯基等书中的 b, 是对偏振辐射而言, 为区别改记为 $b'_\nu=\frac{h\nu^3}{c^2}\frac{1}{e^{h\nu/kT}-1}$, 因而对非偏振辐射应有 $b_\nu=2b'_\nu$, $u_\nu=2u'_\nu=2\times\frac{4\pi}{c}b'_\nu=\frac{4\pi}{c}b_\nu$.

此时, $B=\int_0^\infty 2b'_\nu d\nu=\int_0^\infty b_\nu d\nu$, 故 $u=\frac{4\pi}{c}B$ 仍成立.

5. 从 $\frac{du_\nu}{d\nu}=0$ 出发, 求出使 u_ν 为极大的 $\nu_m=\left(\frac{2.821k}{h}\right)\cdot T$, 再由

$\lambda=\frac{c}{\nu_m}$算出 $\lambda T=\frac{hc}{2.821k}=b'$，结果与维恩位移定律 $\lambda_m T=b=\frac{hc}{4.965k}$不一致.

由第三题知，u_ν 对 ν 分布与 u_λ 对 λ 分布曲线形状不同，因而两个曲线中最大值的位置所对应的频率 ν(波长 λ) 不同，所以，$\frac{c}{\nu_m}\neq\lambda_m$. 由实际得出的数据 $\nu_m\cdot\lambda_m=\frac{2.821k}{h}\cdot\frac{hc}{4.965k}\approx 0.56c$ 也说明 $\nu_m\cdot\lambda_m\neq c$.

6. 由维恩位移定律 $\lambda_m=\frac{b}{T}$，代入普朗克公式，得黑体最大单色辐出度 $r_{\lambda m}=\frac{c_1\lambda_m^{-5}}{e^{c_2/\lambda_m T}-1}$，

其中，$c_1=2\pi hc^2$，$c_2=\frac{hc}{k}$，

$$r_{\lambda m}=\frac{c_1T^5}{b^5(e^{4.965}-1)}=\alpha T^5,\quad \alpha=1.29\times10^{-5}\mathrm{W/(m^3\cdot K^5)}.$$

7. 一般光源的亮度是随方向变化的，只有黑体作为辐射源时它的亮度不随方向变化，因而是理想的余弦辐射体. 当观察太阳这个发光的半球时，觉得它是个均匀亮度的平面圆盘，这只有当发光的半球与平面圆盘均为余弦辐射体并且具有相同的亮度时才如此，据实验测定，太阳的亮度如果以圆盘中心为 1，距中心为$\frac{3}{4}$半径处，亮度为 0.8，所以可认为亮度是均匀的，因而太阳是相当好的近似黑体.

8. 把太阳视为黑体，已知 $\lambda_m=0.48\ \mu m$，由维恩位移定律 $T=\frac{b}{\lambda_m}\approx 6000\ \mathrm{K}$

太阳热辐射功率 P：应用斯特藩定律 $R=\sigma T^4$，其中 $\sigma=5.67\times10^{-12}\ \mathrm{W/(cm^2\cdot K^4)}$，则 $P=4\pi R^2\cdot\sigma T^4=4.6\times10^{26}\mathrm{W}$，$\frac{P}{c^2}=5\times10^{9}\ \mathrm{kg/s}$.

太阳质量由于热辐射而耗损 1%所经历的时间

$$t=\frac{M\times 0.01}{5\times 10^{9}}\text{s}=4\times 10^{18}\,\text{s}\approx 10^{11}\text{年}.$$

9. 由基尔霍夫定律 $\varepsilon_{\lambda,T}=\alpha_{\lambda,T}$，对灰体，吸收比 α 与波长无关，因而 $\varepsilon_{\lambda,T}=\alpha$.

辐出度 $R=\int_0^\infty r_{\lambda,T}\mathrm{d}\lambda=\int_0^\infty \varepsilon_{\lambda\cdot T}f_{\lambda\cdot T}\mathrm{d}\lambda=\alpha\int_0^\infty f_{\lambda\cdot T}\mathrm{d}\lambda=\alpha\sigma T^4$

其中 σ 为斯特藩常数.

10. (1) 不必，只要腔壁对各种频率的吸收比都不为零.

(2) 设小孔的直径为 d，如由小孔入射的通量为 1，则经粗糙壁面漫反射后，反射通量为 k，近似地均匀分布在直径为 D 的球面上，其中由小孔穿出的部分为 $\frac{k\cdot\pi d^2}{\pi D^2}$，则

与黑体准确到 0.1%时，$1-\frac{k\pi d^2}{\pi D^2}=0.999$

当 $k=0.4$ 时　$d\approx\frac{D}{20}$

11. 黑体是余弦辐射体. 1 孔作为面辐射源，辐射亮度 $B_1=\frac{R_1}{\pi}$，其中 R_1 为 1 孔的辐出度，$R_1=\sigma T_1^4$.

2 孔对1孔所张立体角度为 $\mathrm{d}\Omega=\frac{\pi\left(\frac{d}{2}\right)^2}{l^2}=\pi\left(\frac{d}{2l}\right)^2$，稳态时，对 2 孔 $R_2=B_1\mathrm{d}\Omega=R_1\left(\frac{d}{2l}\right)^2$. 由 $R_2=\sigma T_2^4$，$T_2^4=T_1^4\left(\frac{d}{2l}\right)^2$，则 $T_2=T_1\sqrt{\frac{d}{2l}}$.

12. (1) 根据爱因斯坦的理论，发射与吸收的三种可能过程为：自发发射；(感生)吸收；感生(受激)发射.

热辐射中，对吸收与发射的两种定义为：

(a) 总发射为感生发射与自发发射之和. 总吸收即感生

吸收.

(b) 总发射只为自发发射，而总吸收是感生吸收减去感生发射，即把感生发射视为负吸收.

定义(a) 是量子力学中常用的. 对于实电磁场的依时关系 $\cos\omega t$，数学上可方便地表为:

$\cos\omega t=\frac{1}{2}(e^{i\omega t}+e^{-i\omega t})$. 作微扰时，以 $e^{-i\omega t}$ 描述感生吸收，$e^{i\omega t}$ 描述感生发射.

定义(b) 是固有的热力学定义. 因为正常情形下，物理上无法在实验上区分吸收与感生发射，实测的吸收是真正的吸收减去感生发射. 这正是定义(b) 中对吸收的定义. 可见此定义与实测紧密连系.

(2) 无论用何种定义，对同一问题所预期的实验结果都是一致的(具体例子见题末文献).

(3) 由于存在两种定义，引起混淆的情况来自两个方面.

首先，不管使用哪种定义，前后必须一致，否则将出现谬误. 例如，理论上对吸收采用定义(a)，此时发射包括自发与感生两项，而预期实验结果时又采用定义(b)，即发射专指自发发射，就可导致以下错误结论，受热物体自发发射的发射本领与环境的特性有关.

其次，有些定律是在对吸收与发射特定的定义下成立的，如热辐射的基尔霍夫定律就是指观测到的吸收与发射，即在定义(b)中的发射与吸收才成立. 应用基尔霍夫定律时往往因没有正确使用定律要求的吸收与发射的定义而出现误解.

本题详尽的讨论请参阅: Burkhard, *Am. J. phys*, 40, 1794 (1972).

13. (1) 五个变量如 $\lambda,\lambda',v,\varphi,\theta$ 或 p,p',p_e,θ,φ. 三个方程.

(2) 含动量的一组变量为 $p, p', p_e, \theta, \varphi$，联立方程为

$$p = p' + (\gamma - 1)mc \tag{1}$$

$$p = p' \cos\varphi + p_e \cos\theta \tag{2}$$

$$p' \sin\varphi = p_e \sin\theta \tag{3}$$

其中，电子静质量为 m. $p = \frac{h\nu}{c}$, $p' = \frac{h\nu'}{c}$, $p_e = m\gamma v$, $\gamma = (1-\beta^2)^{-\frac{1}{2}}$, $\beta = \frac{v}{c}$.

含频率的一组变量为 $\nu, \nu', \theta, \varphi, v$，联立方程为

$$h\nu + mc^2 = h\nu' + \gamma mc^2,$$

$$\frac{h\nu}{c} = \left(\frac{h\nu'}{c}\right)\cos\varphi + \gamma mv\cos\theta,$$

$$\left(\frac{h\nu'}{c}\right)\sin\varphi = \gamma mv\sin\theta.$$

(3) 康普顿散射公式 $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{mc}(1-\cos\varphi)$.

(4) 对能量给定的入射光子，散射光子与反冲电子运动方向间的关系 $\operatorname{ctg}\left(\frac{\varphi}{2}\right) = \left(1 + \frac{h\nu}{mc^2}\right)\operatorname{tg}\theta$.

(5) 含动量的一组变量的联立方程中，消去 φ，可得出相对论多普勒效应公式，推导如下：

由(2) 中(1) 式平方得

$$p^2 = p'^2 + (\gamma-1)^2 m^2 c^2 + 2p'(\gamma-1)mc \tag{4}$$

(2) 式平方与(3)式平方相加得 $p'^2 = p^2 + p_e^2 - 2pp_e\cos\theta$ (5)

以(5)式代入(4)式并注意到 $p_e = m\gamma v$ 得

$$p' = \frac{2p\gamma v\cos\theta - mc^2[(\gamma-1)^2 + \beta^2\gamma^2]}{2c(\gamma-1)} \tag{6}$$

由(1) 式 $p - p' = (\gamma-1)mc$, 得 $m = (p-p')/c(\gamma-1)$, 而 $\gamma^2 - 1 = \beta^2/(1-\beta^2) = \gamma^2\beta^2$，把以上诸式代入(6) 式得

$$p' = p\gamma(1-\beta\cos\theta) \tag{7}$$

即 $$\nu' = \nu(1-\beta\cos\theta)/\sqrt{1-\beta^2} \tag{8}$$

此即相对论多普勒效应公式.

(6) 设 $\varphi+\theta=\phi$,由动量守恒有

$$p^2=p'^2+p_e^2-2p'p_e\cos(\pi-\phi)=p'^2+p_e^2+2p'p_e\cos\phi,$$

由(5)式 $p'^2-p^2=p_e^2-2pp_e\cos\theta$,代入上式得

$$\cos\phi=p\cos\theta-p_e/p' \tag{9}$$

由 $p_e=m\gamma v$ 及 $m=\dfrac{p-p'}{c(\gamma-1)}$ 得

$$p_e=\frac{\gamma\beta(p-p')}{\gamma-1} \tag{10}$$

以(7)式,$p'=p\gamma(1-\beta\cos\theta)$及(10)式,代入(9)式,经化简得

$$\cos\phi=\frac{\beta-\cos\theta}{1-\beta\cos\theta} \tag{11}$$

14. (1) 设散射光子能量为 $h\nu'$,则反冲电子动能 $E_k=h\nu-h\nu'$,$\dfrac{E_k}{h\nu}=\dfrac{\nu-\nu'}{\nu}=\dfrac{\lambda'-\lambda}{\lambda'}=\dfrac{\Delta\lambda}{\lambda+\Delta\lambda}=\dfrac{2h\nu}{mc^2}\sin^2\left(\dfrac{\varphi}{2}\right)\Big/\left[1+\dfrac{2h\nu}{mc^2}\sin^2\left(\dfrac{\varphi}{2}\right)\right]$.

(2) $h\nu\ll mc^2$ 时,电子只吸收很小能量.

(3) 由上题中 $\operatorname{ctg}\left(\dfrac{\varphi}{2}\right)=\left(1+\dfrac{h\nu}{mc^2}\right)\operatorname{tg}\theta$ 知

散射角φ:由$0\to\pi$时,$\dfrac{\varphi}{2}$由$0\to\dfrac{\pi}{2}$,θ 由$\dfrac{\pi}{2}\to0$,由于$0<\theta\leqslant\dfrac{\pi}{2}$,反冲电子总是向前方运动.

15. 在M系(质心系)中讨论康普顿散射:设入射光子动量 $p=\dfrac{h\nu}{c}$,散射光子动量$p'=\dfrac{h\nu'}{c}$,入射电子动量$p_e=\dfrac{mv}{\sqrt{1-\dfrac{v^2}{c^2}}}$,反冲电子动量 $p_e'=mv'\Big/\sqrt{1-\dfrac{v'^2}{c^2}}$.

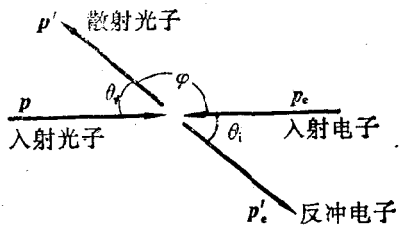


图16 康普顿效应(质心系)

由能量、动量守恒知：在M系碰撞前后电子(以及光子)的动量等值反向，入射光与散射光的频率相同 $\nu=\nu'$，入射电子与反冲电子有相同的速率 $v=v'$，动量值 $p=p'=p_e=p'_e$，入射角与散射角之和 $\theta_i+\varphi=\pi$.

在图 16 中给出的动量矢量图上可明显看出.

16. (1) 要论证对R系(反冲电子为静止)康普顿散射相当于反射，首先要证明对R系入射光与散射光有相同的频率. 由上题知，对M系(质心系)入射光与散射光的频率是相同的，问题是：由M系变换到R系后，入射与散射光频率为什么仍相同？

由于碰前R系即L系(碰前电子静止)，所以对R系的入射频率也是对L系的入射频率. 而入射频率由M系变换到L系与散射频率由M系变换到R系(碰后，电子静止)将经受相同的洛仑兹变换. 所以，R系中，散射光与入射光频率必相同，均等于L系中入射光频率 ν.

通过类似讨论可知，对R系的入射角(即对L系的入射角 θ)等于R系的反射角. 因而，对R系，康普顿散射相当于反射，如图17.

(2) 设L系中，入射光频率为 ν，散射光频率为 ν'. R系中，散射光频率为 ν''.

已知，散射光子与反冲电子的夹角对L系为 $\phi=\varphi+\theta$，设对

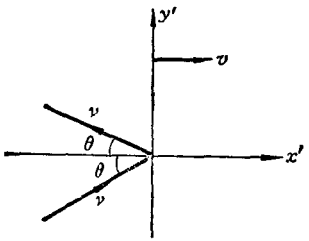


图 17

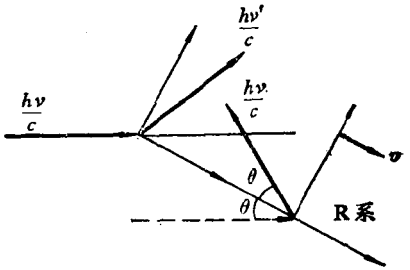


图 18

R 系为 θ''，由相对论中频率及方向的变换关系，由 L 系到 R 系有

$$\nu''=\gamma\nu'(1-\beta\cos\phi),\ \cos\theta''=\frac{\cos\phi-\beta}{1-\beta\cos\phi}\text{其中,}$$

$$\gamma=(1-\beta^2)^{-\frac{1}{2}},\ \beta=\frac{v}{c}.$$

以本章 13 题中(8)式及(11)式，对 L 系

$$\nu'=\nu\gamma(1-\beta\cos\theta)\quad\text{及}\quad\cos\phi=\frac{\beta-\cos\theta}{1-\beta\cos\theta}.$$

代入上面经化简得 $\nu''=\nu$，$\cos\theta''=-\cos\theta$. 可见，R 系中与入射量 ν 及 $\cos\theta$ 对应的为 ν 及 $-\cos\theta$，所以，康普顿散射相当于反射，如图 18.

17. 成立. 在散射体为静止的 R 系中，散射过程仍相当于反射，但此时，将以速度的计算代替有关频率的计算.

18. 按照量子电动力学的观点，康普顿散射包括两个过程：一个电子首先把入射光子整个吸收然后再发射一个能量较低的光子(散射光子)，所以，光子在相互作用过程中是不可分的.

19. 已知，康普顿偏移 $\Delta\lambda$ 与入射波长无关. 所以从原理上讲康普顿效应对入射光频率没限制. 但只有以硬 X 射线入射时，才使 $\frac{\Delta\lambda}{\lambda}$ 足够大，而产生明显的观测效应. 因而，对可见光观察不到康普顿效应.

20. 在原子物理范围内，从以下几种方法可测定 h 的数值：

(1) 由光电效应求遏止电势和频率之间的直线的斜率可得出 h.

(2) 利用实测的康普顿波长 $\Lambda=\frac{h}{mc}$，根据准确的 m 和 c 值求 h.

(3) 利用实测的连续 X 光谱的短波限计算 h 是最准确的方法. 原理如下：当经加速电压 V 使初始动能为 E_{k_0} 的电子轰击重核靶时，电子将减速而导致光子发射. 如重核靶反冲可忽略，设碰后电子动能为 E_{k_0}'，则 $h\nu=E_{k_0}-E_{k_0}'$，即 $\frac{hc}{\lambda}=eV-E_{k_0}'$，与短波极限 γ_m 对应的是 $E_{k_0}=0,\lambda_m=\frac{hc}{eV}$.

λ_m 可由固定 V，测 λ 按强度分布求出或用“等色线法”，如图 19 (史包尔斯基，《原子物理学》第一卷，p. 348，高等教育出版社，1954 年).

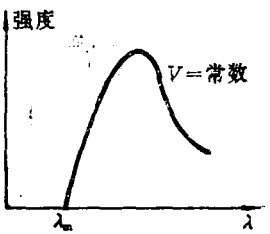


图 19

21. 光电效应中，一个电子同时吸收两个光子的概率非常小，一个电子只吸收一个光子.

另外，实测中光电发射没有可分辨出的时间延迟，这说明，电子没有能量积累过程，即电子吸收一个光子后再吸收一个光子的概率也是非常小的.

因而，截止频率的限制是必需的.

22. 量子效率可由测量光电管的光谱灵敏度 $J=\frac{I_m}{P}$ 求出，式中 P 为频率为 ν 的入射光的功率，I_m 为饱和光电流.

对给定波长的入射光，I_m 正比于 P. I_m-P 图形为直线，这条

直线的斜率$\frac{I_m}{P}$就是光谱灵敏度 J. 由 $J=\frac{I_m}{P}=\frac{ne}{Nh\nu}=\left(\frac{e\lambda}{hc}\right)\eta$ 可求出量子效率 η. 实测出量子效率的典型值为$\frac{1}{500}$—$\frac{1}{5}$(见下题). 可见,入射光子中只有极少数能释放出金属中的电子,绝大部分光子能量消耗在使整个阴极发热或被阴极散射到光电管外.

23. 由 $J=\frac{n}{N}\frac{e\lambda}{hc}$, $N=1$ 时 $\eta=\frac{hcJ}{e\lambda}=\frac{2}{100}$.

24. 如光电子具有同一初速度,则在伏安特性曲线上,在外加反向电压未达到遏止电压前,电流与势差无关;等于遏止电压时应突降为零. 实际上,光电流逐渐降为零. 这就表明:光电子的速度有一组连续的分布,电子按速度分布可由作图法求伏安特性曲线的导数而得出. 参阅:史包尔斯基,《原子物理学》第一卷 p. 273, p. 343,高等教育出版社,1954 年.

产生速度分布的原因是:阴极内一个电子吸收光子而逸出的过程中由于内碰撞使动能减少,逸出时又要克服金属表面原子的引力场作功而失去更多的能量,入射光子能量 $h\nu$ 与失去总能量之差才以动能形式出现,由于损失的总能量不同,使光电子初速度为连续分布.

以极薄金属片作阴极的实验表明,光电子速度均匀得多.

25. 爱因斯坦方程$h\nu=\frac{mv^2}{2}+\phi$ 中,v 为光电子速度,ϕ 代表电子离开金属所需的总能量. 它由克服金属表面原子对电子的束缚所作功及逸出过程中的内碰撞损失这两部分组成.

但我们关心的不是光电子的速度分布,而是它的最大速度 v_m,因为实测的遏止电势 V_0 正是与阻止具有 v_m 的电子有关,以 v_m 表出公式时. ϕ 取极小值 ϕ_e,有

$$h\nu=\frac{1}{2}mV_m^2+\phi_e.$$

光电子以最大动能 $\frac{1}{2}mv_m^2$ 逸出时，对应于电子被束缚得最松而且又没有内碰撞损失的情形.

此时 ϕ_0 是通过金属表面所需的最小能量，ϕ_0 才是金属的特征能量，称为逸出功(或功函数).

26. 光电管的阳极如用相同金属，尽管在光电管结构上，仪器装置上尽量避免入射光直射阳极，但总有光(如从阴极来的散射光等等)射到阳极，这样在产生阴极光电流的同时，将产生反向的阳极光电流，如图 20.

所以，作为阳极的金属不能任意选取，必须选择截止频率比阴极高很多的金属作阳极，并且用介于这两个截止频率之间的频率作为入射光的工作频率以避免反向的阳极电流.

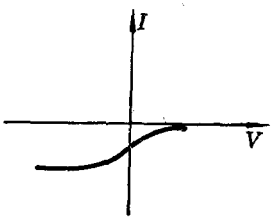


图 20 阳极光电流

27. 主要差别在于：典型图中给出的只有阴极光电流.

实际上，尽管光电管两极采用不同金属并适当选择了工作频率，但制造过程中阳极上往往溅有阴极材料并在使用过程中愈来愈严重. 只要有光照射即使杂散光漫射到阳极也有光电子发射. 另外，阳极表面也可能把阴极光电子反射回等等. 所以，反向的阳极光电流是不可避免的.

另外，没有入射光时，光电管也会产生热电流称为暗电流. 还有室内漫反射光产生的本底电流等都是实验的干扰因素. 实验装置设计上已将暗电流，本底电流的影响显著减小时，实测的曲线可认为是阴极光电流与反向的阳极光电流的叠加.

28. 由于光电管两极需用不同的金属构成，并且阳极与阴极间是断开的，两极间存在接触电势差 V_c，当光电流为零、电压表读

数为V_0时，真空中加在电子上的真实电压即真正的遏止电势$V=V_0+V_c$，则$eV=e(V_0+V_c)=\frac{1}{2}mv_m^2$.

尽管$eV_0\approx\frac{1}{2}mv_m^2$，但因光电流为零时可由电压表测出$V_0$，为方便起见，往往仍习惯上称$V_0$为遏止电势.

29. 光电流自饱和值I_m开始下降到$I=0$时对应的电压值即为$V=V_0+V_c$，如图21，如$V_c=0$，伏安曲线如图22.

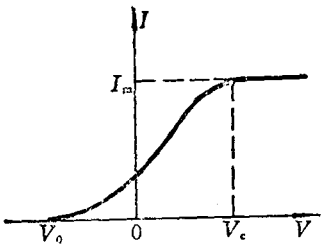


图 21

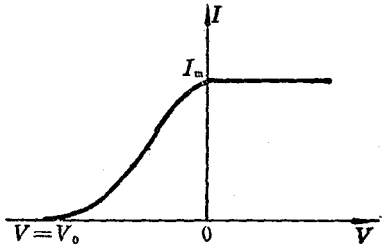


图 22

30. 不对，这是光电效应叙述中一个带有普遍性的错误，主要是忽略了不同金属的两极间的接触电势差所致. 正确公式应为$eV_0=h\nu-\phi_c$，这里ϕ_c是接收极(阳极)的功函数，或$eV=h\nu-\phi_e$，而$\phi_c-\phi_e=eV_c$，V_c是两极间的接触电势差.

已知 $eV=e(V_0+V_c)=\frac{1}{2}mv_m^2$及$h\nu-\phi_e=\frac{1}{2}mv_m^2$，可得出：

$eV_0=\frac{1}{2}mv_m^2-eV_c=h\nu-\phi_c$及$eV=h\nu-\phi_e$.

这个结论可在简化情形下，考虑电子在光电管中各点的能量很简单地导出.

参阅：J. Rudnick, *Am. J. Phys*, 44, 796, (1975).

译文见《大学物理》，1983年6月，p. 17.

31. 考虑了接触电势差V_c后，eV_0与ν间的直线关系将为

$eV_0=h\nu-\phi_c=h\nu-\phi_e-eV_c$.

与 $eV_0=h\nu-\phi_c$ 相比，两条直线平行，只在竖直轴上移动 $-eV_c$.

故对密立根实验利用直线斜率求 h 没影响.

32. 关键在于如何正确确定遏止电势 V_0.

实测特性曲线实质上是光电阴电流与反向的光电阳电流的叠加，如图 23.

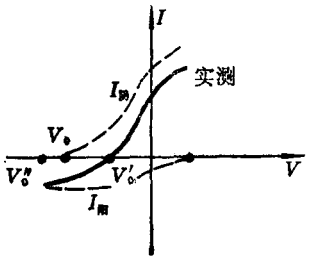


图 23

实测曲线与 V 轴交点 $V_0'\fallingdotseq V_0$，因此时光电阴电流不为零. 如阴极电流上升越快，反向电流越小，则 V_0' 与 V_0 之差越小，此时，V_0' 可近似当作 V_0.

另外，由于电极结构等原因，如阳极电流饱和缓慢，当 $V=V_0$ 时仍未饱和，则反向电流刚开始饱和时，拐点的电压 V_0'' 也不等于 V_0，而当反向电流饱和较快时，可用 $V_0''\approx V_0$.

对不同光电管应根据特性曲线的不同，用上述不同方法确定 V_0，前面题中已提到实验中必须将暗电流及本底电流的影响显著减小. 可见，整个实验除了对光电管结构本身的要求外，对光路系统如聚光、滤光、光源等均有一定要求.

33. 关系式 $\nu_0=\frac{\phi_e}{h}$ 不变，未考虑接触电势差 V_c 时，$h\nu-\phi_e=eV_0$，ν_0 即为 eV_0-ν 直线与 ν 轴的交点，考虑 V_c 后此交点不再为 ν_0.

但由于 $eV=h\nu-\phi_e$，其中 $V=V_0+V_c$ 是真正的遏止电势，因而 eV-ν 直线与 ν 轴交点仍为 ν_0.

34. 对以金属 b 作阴极的光电效应，设 $V_0(b)$ 为电流为零时，

电压表测值.

以金属 e 作阳极　$V(b)=V_{0c}(b)+V_{eb}$,

以金属 c 作阳极　$V(b)=V_{0c}(b)+V_{cb}$.

其中 V_{eb} 与 V_{cb} 分别代表金属 e、b 及金属 c、b 间的接触电势差.

由 $eV=\frac{1}{2}mv_m^2=h\nu-\phi_e$ 知，对同一阴极，同一入射光，ν 相同，ϕ_e 相同，虽阳极不同但 $V(b)$ 相同.

因而，$V_{0c}(b)-V_{0e}(b)=V_{cb}-V_{eb}=V_{ce}$,

上式中利用了 $V_{ce}+V_{eb}+V_{bc}=0$.

这样，由电压表两次读数差即可测出 V_{ce}.

研究金属 e 作阴极，金属 c 作阳极的光电效应，有

$$V(e)=V_{0c}(e)+V_{ce}.$$

由于 V_{ce} 可测出，$V_{0c}(e)$ 为光电流为零时，电压表的测值，所以 $V(e)$ 可得出.

35. 当电子的束缚能与入射光子的能量相比完全可忽略时，可视电子为自由电子，光子被自由电子散射可产生康普顿效应.

光子被束缚电子散射时，光子与整个原子碰撞，$\Delta\lambda$ 公式中应以原子质量 M 代替电子质量 m .

已知 $M\gg m$，所以产生偏移 $\Delta\lambda$ 非常小，即散射光波长不变，这正是康普顿效应中不变线的来源.

36. 严格讲，爱因斯坦方程只在绝对零度时准确成立. 由于热运动. 光电子的动能大于方程中的 $\frac{1}{2}mv_m^2$，使测出的 V_0 偏大.

第 二 章

1. 历史上，早在19世纪人们就注意到几何光学与分析力学间有着深刻的类似性，但一般认为只是数学形式上的类比而已，以后逐渐被人们遗忘．本世纪20年代，德布罗意又重新考察了这种类似性．

根据费马原理，光线在非均匀介质中传播是按通过时间 $t=\int_{s_0}^{s}\frac{\mathrm{d}s}{v}$ 取极小值的路径进行的，由于 $\lambda=\frac{v}{\nu}$，所以 $\int\frac{\mathrm{d}s}{\lambda}=\min$ 表明：光线经过的路程上，波长数是最小值．

与光学中光线类比的力学概念是轨迹．

力学中，质量为 m、速度为 v 的粒子在空间中运动轨迹满足莫培督原理

$$\int_{s_0}^{s}mv\mathrm{d}s=\min.$$

由对比可发现动量为 p 的粒子与对应的波的波长 λ 间的关系为 $\lambda\propto\frac{1}{p}$，引入比例常数 h，即有

$$\lambda=\frac{h}{p}.$$

2. 按照狭义相对论，考虑一平面波．在惯性系 S 中此平面波的频率为 ω，波矢为 $\boldsymbol{k}(k_x,k_y,k_z)$，$|\boldsymbol{k}|=\frac{2\pi}{\lambda}$.

一般说来，在运动参照系 S' 中，这个波将有不同的频率 ω' 和波矢 $\boldsymbol{k}'$．但是，波的相位是个不变量，

$$\phi=\omega t-\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}=\omega' t'-\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}'.$$

因而，平面波的频率和波数构成一个四维矢量

$$\left(\boldsymbol{k},\ \mathrm{i}\frac{\omega}{c}\right)=\left(k_x, k_y, k_z,\ \mathrm{i}\frac{\omega}{c}\right).$$

在相对论性力学中，动量与能量也构成一四维矢量

$\left(\boldsymbol{p},\ \mathrm{i}\frac{E}{c}\right)$，不变量为 $p^2-\frac{E^2}{c^2}=m_0^2c^2$，其中 m_0 为质点静质量.

把四维矢量 $\left(\boldsymbol{k},\ \mathrm{i}\frac{\omega}{c}\right)$ 与 $\left(\boldsymbol{p},\ \mathrm{i}\frac{E}{c}\right)$ 对比，可看出：能量为 E，动量为 $\boldsymbol{p}$ 的自由粒子与一平面波 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega t-\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})}$ 对应时，可假设以下比例关系

$$k\propto p,\quad \omega\propto E.$$

即
$$\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k},\quad E=\hbar\omega.$$

3. 按旧量子论的量子化条件，椭圆轨道是由 $\oint p_r\mathrm{d}r=n_rh$ 和 $\oint p_\varphi\mathrm{d}\varphi=n_\varphi h$ 两个条件选择的，其中 $p_r=\frac{\partial L}{\partial\dot{r}}$，而 $p_\varphi=\frac{\partial L}{\partial\dot{\varphi}}$.

考虑到 $T=\frac{1}{2}\sum_i\dot{q}_ip_i$，得

$$2\int_0^\tau T\mathrm{d}t=\sum_i\int_0^\tau p_i\dot{q}_i\mathrm{d}t=\sum_i\oint p_i\mathrm{d}q_i=(n_r+n_\varphi)h=nh,$$

式中 τ 为电子绕行周期. 由于 $2T\mathrm{d}t=m_0v\mathrm{d}s=\frac{h}{\lambda}\mathrm{d}s$，

结果是 $\oint\frac{\mathrm{d}s}{\lambda}=n$，可能形成驻波.

其真正含意是：描述电子运动的波函数必须是单值的.

4. 由于 h 是个很小的量，所以德布罗意波的波长 $\lambda=\frac{h}{p}$ 极短. 如能量为 E 电子伏的低能电子，$\lambda=\frac{h}{p}=\frac{h}{\sqrt{2mE}}$，$E=100\mathrm{eV}$ 时，$\lambda=1.2\text{Å}$；又如直径 $a\approx1\ \mu\mathrm{m}=10^{-6}\ \mathrm{m}$ 的微尘（$\mathrm{m}=10^{-12}\ \mathrm{g}$，$v=1\ \mathrm{cm/s}$），$\lambda=6.6\times10^{-7}\text{Å}$；而以 $v=1\ \mathrm{cm/s}$ 运动着的 $m=1\ \mathrm{g}$ 的物体，$\lambda\approx10^{-27}\ \mathrm{cm}$，如其动量再大，则波长更短.

已知，波长为 λ 的光经过孔径或障碍物的线度为 a 时，只有当 $\frac{\lambda}{a}\gtrsim 1$ 才进入波动光学范畴.

上述的微尘线度虽小但 $\frac{\lambda}{a}\to 0$，所以波性可忽略. 而对 100eV 的电子，$\lambda=1.2$Å，也只有使用特征尺寸 $a\approx 1$ Å 的仪器装置，波动性才明显. 原子大小约 1 Å，所以只有在原子范围内，量子效应才明显表现出来. 由于宏观质点的德布罗意波长太短，就宏观范围来说，所有的尺寸 a 都有 $\frac{\lambda}{a}\to 0$，波的特性根本探测不到.

5. 德布罗意关系式是适用于一切物质的普遍关系，是波粒二象性的反映而与物质具体结构无关. 因此，不仅适用于基本粒子也适用于具有内部结构的复合体系.

6. 由基本假设 $\lambda=\frac{h}{p}$，波长仅取决于粒子的动量而与粒子本身线度无必然连系.

7. 一般而言，德布罗意波包是指局限于有限空间中的德布罗意波. 在数学上可表示为不同波矢的单色平面波的叠加.

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\int_{-\infty}^{+\infty}\phi(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}\mathrm{d}^3k.$$

实际问题中经常用到的波包是在波矢域中只占中心波矢 $\boldsymbol{k}_0$ 周围的一个小区域的单色平面波的叠加

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k}\phi(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}\mathrm{d}^3k.$$

8. 相速是等相面的运动速度. 例如，x 方向传播的平面波 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)}$ 中，取相位 $kx-\omega t=$常数，则相速 $v_p=\frac{\omega}{k}$. 如相速与波数 $k=\frac{2\pi}{\lambda}$ 有关，则波存在色散. 相速是一种视在速度，可能大于光速.

群速是波包中心的运动速度，$v_g=\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0}$，$k_0$ 为波包的中心波矢. 群速是真实信息的传递速度，不可能大于光速.

只有不存在色散，v_p 与 k 无关，波包中各成分的相速均相同时，才有 $v_g=v_p$.

下题中将看到，德布罗意波是有色散的.

9. (1) 德布罗意波相速 $v_p=\frac{\omega}{k}$. 以 $E=\hbar\omega$ 及 $p=\hbar k$ 代入得 $v_p=\frac{E}{p}$. 由于粒子动量 $p=mv$，相对论能量 $E=mc^2$，故 $v_p=\frac{c^2}{v}$. 已知 $v<c$，因而德布罗意波相速 $v_p>c$.

以德布罗意关系代入 $E=\frac{p^2}{2m}$，则 $\omega=\frac{\hbar k^2}{2m}$，$v_p=\frac{\hbar k}{2m}=\frac{v}{2}$.

由于 v_p 与 k 有关，因而与电磁波不同，即使在真空中德布罗意波也会发生色散.

(2) 由于 $\omega=\frac{\hbar k^2}{2m}$，群速 $v_g=\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0}=\frac{\hbar k_0}{m}=\frac{p_0}{m}=v_0$.

因为波包是由在 k_0 附近小范围 Δk 内的许多分波叠加而成的，严格说，粒子没有确定的动量和速度. 因此，这里 $p_0=\hbar k_0$ 可视为粒子的"平均"动量，$v_0=\frac{p_0}{m}$ 为粒子的"平均"速度. 或者认为，由于 Δk 很小，$v_0=v$.

10. (2) 正确. (1) 中 $m_0\neq 0$ 时，$\lambda=\frac{v_p}{\nu}\neq\frac{c}{\nu}$.

11. 由德布罗意假设 $E=h\nu$ 知，德布罗意波是否有确定的频率就在于粒子能量 E 是否有确定值.

在非相对论性理论中，粒子在运动时静能不变而有实际意义的只是能量的相对变化值 ΔE. 因此，能量总是可确定到只相差一个与之相加的恒量. 表现在确定自由粒子动能时，通常只取为 $\frac{p^2}{2m_0}$，而把粒子静能 m_0c^2 略去. 显然，与之相应的德布罗意波不

具有唯一确定的频率.

在相对论性理论中，能量 $E=mc^2$ 具有确定值. 此时，德布罗意波的频率才有确定值.

从测量角度，由微观粒子的波动性产生的各类干涉衍射条纹分布是与其波长直接相关的. 德布罗意波波长是可测量的. 实验证实德布罗意波的存在只是对 $\lambda=\frac{h}{p}$ 式的直接验证.

静质量不为零的粒子，其德布罗意波的频率 $\nu=\frac{v_p}{\lambda}$ 是与波的相速连系在一起. 由第九题知 $v_p>c$，这显然是无法实测的. 基本假设 $E=h\nu$ 揭示了粒子能量 E 与波的频率以 h 相连系，但是，这里的 ν 不具有测量意义. 有测量意义的频率只是由 $\Delta E=h\nu$ 所确定的 $\nu=\frac{\Delta E}{h}$，如原子两个定态能级间的跃迁.

可见，量子力学中的概率波不仅绝对振幅没有意义，而且绝对频率也没意义，而只有能量差，即频率差在物理上才有意义.

12. 哈密顿早在 1825 年就确定了几何光学与经典力学的类似，但直到量子力学建立前这种类似的深刻内涵并没被注意，直到经典物理遇到了困难寻找出路的时候，薛定谔等才意识到它的价值.

已知光学中几何光学是波动光学的近似，波动光学是几何光学的深化. 几何光学与经典力学间存在着深刻的类似性启发人们联想到：经典力学也是有待深化的一种近似. 对比光学，看来应该有个类似波动光学一样的波动力学，粒子运动应该也有波动性才行.

正是在这种对比的导引下，建立了与波动光学相似的力学.

13. 一个典型的看法如下“谈论物质的二重性质，完全和谈论汽车的二重性质一样，汽车一方面是个体，而另一方面，当它在丘陵地带行驶时，又采取波浪形的路线①.

① 兰德“量子非决定论，因果连续的结果”引自萨契柯夫，《论量子力学的唯物主义解释》(中译本)，上海人民出版社，1961 年，p. 61.

这种观点的实质在于，微观粒子就是经典粒子，存在的只是粒子，波粒二象性是不存在的，显然是不正确的.

14. 为了验证是否大量粒子集合才呈现波动性，1949 年比贝曼(苏)等曾作了极微弱电子束射向金属箔发生衍射的实验. 实验中两个电子相继穿过衍射系统的时间大约为一个电子穿过整个仪器所需时间的三万倍！尽管这样，所产生的衍射图样和用强度大 10^7 倍的电子束所得到的图样完全符合.

可见，每个粒子都是不受其他粒子的影响而发生衍射的. 单个粒子在被探测时与仪器发生作用，当打到荧光屏时是整个粒子起作用. 单个粒子的落点虽是无规的，但却受概率波的支配而形成图样.

15. 声波是空气分子一个带动一个此起彼伏而形成波动的. 只有大量相互作用着的粒子集合才能产生疏密波，而上题中的实验已否定了这种看法.

16. 轨道概念的实质在于粒子在任意瞬时，其位置与动量都同时有确定值. 如以径矢 r 标明粒子某瞬时的位置，又同时知其动量 p，就可说明在无限短时间 $\mathrm{d}t$ 内，这粒子的位置将变为 $r+\mathrm{d}r=r+\frac{p}{m}\mathrm{d}t$，式中 m 为粒子质量，在此基础上就可得出粒子运动的轨道.

对于微观粒子，其德布罗意波长 $\lambda=\frac{h}{p}$，显然，波长 λ 不是任何点的坐标的函数而是"波形"的"函数". 因而，"在点 x 的波长等于 λ"是毫无意义的. 这类似于问："在一给定时刻，单摆的振动频率有多大？"而频率的概念，定义的前提就是必须对单摆的许多次振动进行观察.

既然波长不可能是坐标 x 的函数. 由 $p=\frac{h}{\lambda}$，动量 p 也不可能是坐标 x 的函数. 在微观领域中说"粒子在 x 点的动量等于 p" 同

样是没有意义的.

所以，对微观粒子的运动不存在轨道概念.

17. 在本章第 9 题中已得出：德布罗意波相速 $v_p=\frac{hk}{2m}$（真空中）. 于是，构成波包的不同分波（k 不同即 λ 不同），在真空中仍以不同的相速传播. 如在某时刻形成了波包，但随着运动进程，波包宽度就会因不同成分间相速不同而加宽，这就是波包的扩散.

18. 经典物理中的波动总是与某个物理量随时空的周期变化相联系（如电磁波中的 $\boldsymbol{E}(x,y,z,t)$），其最本质的特性是能够产生相干叠加效应如干涉衍射等. 另外，伴随着波的前进，有能量传播，有能量密度，能流密度.

粒子性或称颗粒性是指客体有确定的内禀属性，有集中的质量，电荷，能量等. 另外，经典粒子总是占有确定的时空位置，并且有确定的运行轨道.

在经典概念中，波动性与粒子性是格格不入的.

19. 经典粒子与经典波是无法统一于同一客体之中的. 微观粒子的波是概率波，只说明概率波有作为波动本质特性的相干叠加性，由此可产生干涉衍射. 波函数的模方 $[\Psi]^2$ 才代表概率，Ψ 根本不是经典波中出现的那一类的力学量.

微观粒子的粒子性表现为有集中的质量、能量、电荷，但与经典粒子不同，它没有轨道概念. 我们认为粒子性的本质不在于有无轨道而是在于是否有集中的质量、能量. 我们所说波与粒子性的统一不是经典粒子与经典波的统一，而是概率波与有集中质量……而无轨道运动的微观粒子的统一.

具体说来，当我们以任何实验手段观察微观粒子时，它总是以有集中的质量、电荷、能量……的粒子出现，也就是说在与物质相互作用过程中呈现粒子性，而在其传播过程中，以概率形式表现波

动性，这就是通常所说波粒二象性的统一.

20. 我们必需区分经典粒子与微观粒子；经典波与概率波. 这样，给出的几种说法应为：

(1) 电子是微观粒子，又有概率波.

(2) 电子不是经典粒子也不是经典波.

(3) 电子是微观粒子，不是经典波.

(4) 电子波动性是概率波，电子不是经典粒子.

这样就不致引起误解.

21. 德布罗意当时认为物质波是导引粒子运动的所谓"导波"，粒子位于波场的奇点. 这个观点可直观地比喻为"波-驾驶员概念". 他认为波和粒子的关系好像飞机和驾驶员的关系：波载着粒子，粒子驾驶着波。粒子和波相互作用着按决定论的规律运动. 但由于粒子与波作用的复杂性，对运动初始条件又所知不多，所以才表现出实验中的统计现象.

薛定谔虽然建立起以他名字命名的波方程，但当时对波函数 ψ 的解释还不正确. 他一直把 ψ 认为应该和经典波动一样，代表在三维空间中真实的波动，粒子则是由波组成的波包. 实际上，薛定谔谈的不是波粒二象性，而只有一象性——波. 他认为波方程中 $|\psi|^2$ 代表粒子的密度. 他长期不认同玻恩的统计解释，由怀疑到反对，甚至说先前若有先见之明，他宁可不发表有关波动力学的论文.

22. (1)量子力学是比经典力学更为普遍的理论体系，它可以包容整个经典力学体系.

(2) 对于宏观体系或 h 可忽略的体系，并非量子力学不能适用，而是量子力学实际上已经过渡到经典力学，二者相吻合了.

23. 通常说 $h\to 0$，是指其数值与体系有关参数相比可忽略不计. 确切地说，应指 $h \ll pl_c$，这里 p 为体系动量，l_c 为体系特征线

度，实际上就是指

$$\lambda=\frac{2\pi\hbar}{p}\ll l。$$

如本章第 4 题中微尘的例子，$\lambda\approx 6.6\times 10^{-7}$Å，$a\approx 10^{-6}$ m，显然 $\lambda\ll a$，波性可忽略.

24. 所谓量子化，无非就是指某个力学量可取数值具有离散谱. 一般说来，这不是量子力学的特有效应. 经典物理中，例如声音中的泛音、无线电中的谐波都是频率具有离散谱(虽然一般不称为量子化). 经典波在束缚状态形成驻波时，频率也是量子化的，但经典波的频率量子化并不对应能量量子化.

有时，量子化用来专指能量量子化，在这种意义下，它就是量子力学特有的效应了.

第 三 章

1. 波函数就其本义而言不是量子力学特有的概念. 任何波都有相应的波函数，只是习惯上这一术语通常专用于描述量子态而不常用于经典波.

经典波例如沿 x 轴方向传播的平面单色波，波动量 y 对 x 和 t 的函数——波函数可写为 $y(x,t)=A\cos(kx-\omega t)$，其复指数形式为 $y(x,t)=Ae^{i(kx-\omega t)}$，波函数 $y(x,t)$ 给出了传播方向上时刻 t 在点 x 处的振动状态. 经典波的波函数通常称之为：波的表达式或波运动方程.

量子力学中，把德布罗意关系 $p=\hbar k$ 及 $E=\hbar\omega$ 代入上式就得到自由粒子的波函数(自由粒子的波的表达式)

$$\psi(x,t)=Ae^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}=\psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}.$$

经典波与概率波的唯一共性是叠加相干性，但概率波函数是态函数，而态的叠加与经典波的叠加有着本质的差别.

经典波函数描述的是经典波动量对时空变量的函数关系. 量子力学中的概率波函数其意义不同于经典物理中的任何物理量. 概率波函数虽是态函数，但本身不是力学量. 态函数给出的也不是物理量间的关系. 概率波函数的意义是：由波函数描述微观体系各种力学量的概率分布.

作为一种约定的处理方法，经典波可表为复指数函数形式，但只有它的实部才有物理意义. 而概率波函数，一般应为复函数.

非相对论量子力学中，粒子不产生也不湮没. 粒子一定在全空间中出现，导致了概率波函数归一化问题，而经典波则不存在这个问题.

概率波函数乘上一常数后，粒子在空间各点出现的相对概率不变．因而，仍描述原来的状态．而经典波中不同的波幅的波表示不同的波动状态，振幅为零的态表示静止态．而量子力学中，振幅处处为零的态($\psi=0$)表示不存在粒子．

另外，经典波函数与量子波函数满足各自的、特征不同的波方程．

2．量子力学中，态叠加原理是波的叠加性与波函数完全描述一个微观体系状态这两个概念的综合，是微观粒子具有波粒二象性所决定的．

一般说来，经典物理中，单一物理量不能完全决定体系的物理状态，而经典波正是描述物理量的波动，经典波的叠加则是物理量的叠加，而非态的叠加，因此在经典物理中，不存在普遍的态叠加原理．

此外，量子物理中概率波的叠加与经典波的叠加也有着本质的不同．

例如，经典物理中可由不同波长的单色波叠加得出限于空间局部区域的波包——定域波包(例如，形状为高斯分布型函数的高斯波包)，但这只说明合成的波包中含有不同的波长成份．严格说，对定域波包，一般不存在"波包的波长"的概念．

在量子力学中，对应的波包是由不同动量$\left(p=\frac{h}{\lambda}\right)$值的平面波叠加而成的概率波的波包，亦即叠加态$\psi$是由不同动量值的动量本征态的叠加．在此波包描述的态ψ中，测量动量时，凡是波包中含有的那些本征态对应的动量值，都可能出现．虽然测量的结果有不确定性，但各个可能出现的动量值间出现的相对概率是确定的．量子力学中态叠加原理是与测量密切联系的基本原理．

另外，量子力学中自由波包即使在真空中前进也会扩散．波

包的形状将随时间而变化，概率分布也因之而改变．这是由于德布罗意波在真空中也存在色散，组成波包的各个波是以不同速度传播而引起的必然结果．这也是量子力学中波的叠加独有的特点．

3．(1) 按照德布罗意假设，平面波是描述自由粒子的波．这只是波函数一个具体例子．一般情况下，微观粒子必须用更复杂的波函数来描述．

有时也把描述微观粒子一切可能的波(一般不是平面波)笼统称为德布罗意波．在这样理解下，才可以说，波函数是德布罗意波的数学表示．

(2) 体系波动方程的通解有无穷多个．但并非所有这些解都可以描述体系的量子态．物理上真实态的波函数是指那些满足特定的初始条件与边界条件的体系波动方程的解．

对全同粒子系，能实现的体系其波函数是既满足波方程又同时满足交换对称性要求的解．

(3)、(4)波函数是体系量子态的数学表示，而单粒子波函数才是单粒子态的数学表示．

4．波函数的统计解释中，波函数 ψ 不是概率，而是概率幅，ψ 的模的平方(不是波函数振幅平方)——$|\psi|^2$ 才代表概率．正确的提法是：如果体系波函数为 $\psi(\boldsymbol{r},t)$，则在时刻 t，在 $\boldsymbol{r}$ 点附近体积元 $\mathrm{d}\tau$ 内，找到粒子的概率为 $\mathrm{d}w(\boldsymbol{r},t)=c|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2\mathrm{d}\tau$，$c$ 为比例常数．

$|\psi|^2=\psi^*\psi$ 称为概率密度，其中 ψ^* 表示 ψ 的共轭复数．

5．按照波函数的统计解释，波函数统计地描述了体系的量子态．如已知单粒子(不考虑自旋)波函数为 $\psi(\boldsymbol{r})$，则不仅可确定粒子的位置概率分布，而且如动量等粒子其他力学量的概率分布也均可通过 ψ 而完全确定．

由于量子理论与经典理论不同，它一般只能预言测量的统计

结果. 而只要已知体系波函数，便可由它获得该体系的一切可能物理信息. 从这个意义上看，有关体系的全部信息显然都已包含在波函数中，所以我们说，微观粒子的状态完全由其波函数描述，并把波函数称为态函数.

6. 通常取 $E=\frac{p^2}{2m_0}$ 情况下，自由粒子波函数为 $\psi(x,\ t)=\psi(x)e^{\frac{-i}{\hbar}Et}$. 当能量零点改变使 $E'=\frac{p^2}{2m_0}+E_0$ 后，波函数 $\psi'(x,t)=\psi(x)e^{\frac{-i}{\hbar}(E+E_0)t}=\psi(x,t)e^{\frac{-i}{\hbar}E_0t}$，

$$\psi'^*(x,t)=\psi^*(x,\ t)e^{\frac{+i}{\hbar}E_0t},$$

$$w'(x)=\psi'^*(x)\psi'(x)=\psi^*(x)\psi(x)=w(x).$$

可见，能量零点的不同只使波函数相差到一个模为 1 的相因子 $e^{\frac{-i}{\hbar}E_0t}$，因而 $w(x)$ 与能量零点选择无关.

7. 非相对论量子力学中粒子不产生、不湮灭. 根据波函数的统计解释，在任何时刻，粒子一定在空间出现，所以，在整个空间中发现粒子是必然事件. 概率论中认为必然事件的概率等于 1. 因而，粒子在整个空间中出现的概率即概率密度 $|\psi|^2$ 对整个空间积分应等于 1.

$$\int_\infty|\psi(x,y,z,t)|^2d\tau=1.$$

式中积分号下的无限大符号表示对整个空间积分. 这个条件称为归一化条件. 满足归一化条件的波函数称为归一化波函数.

显然，平方可积波函数才可以归一化.

如果波函数 ϕ 是平方可积的，但 $\int_\infty|\phi|^2d\tau=A$(常数)，则 $\int_\infty\left|\frac{\phi}{\sqrt{A}}\right|^2d\tau=1$. 可见，虽然 ϕ 不满足归一化条件，但 $\frac{\phi}{\sqrt{N}}$ 是归一化的，$N=\frac{1}{\sqrt{A}}$ 称为归一化常数(归一化因子). 由于波函数的

概率特性，ϕ 与 $\frac{\phi}{\sqrt{A}}$ 描述同一状态．所以，归一化与否不涉及实质问题．ψ 一旦归一化将永远如此，归一化常数不随时间改变．

8. (1) $\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x)|^2\mathrm{d}x=\int_0^a\sin^2\frac{\pi x}{a}\mathrm{d}x=\frac{a}{2}$，

归一化常数 $N=\sqrt{\frac{2}{a}}$．

(2) $\int_0^a x^2(a-x)^2\mathrm{d}x=\frac{a^5}{30}$，　归一化常数 $N=\sqrt{\frac{30}{a^5}}$．

(3) $\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2}\mathrm{d}x=\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}$，　归一化常数 $N=\alpha^{\frac{1}{2}}\pi^{-\frac{1}{4}}$．

(4) $\int_0^\infty N^2x^2\mathrm{e}^{-2\lambda x}\mathrm{d}x=N^2\frac{2!}{(2\lambda)^3}$，　归一化常数 $N=2\lambda^{3/2}$．

9. 三维空间中，N 个可区分的粒子，坐标分别为

$$\boldsymbol{r}_1(x_1,y_1,z_1),\boldsymbol{r}_2(x_2,y_2,z_2),\cdots,\boldsymbol{r}_N(x_N,y_N,z_N).$$

粒子系波函数 $\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N)$．粒子 1 出现在 $(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_1+\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1)$，而且粒子 2 出现在 $(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_2+\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2)$、…、粒子 N 出现在 $(\boldsymbol{r}_N,\boldsymbol{r}_N+\mathrm{d}\boldsymbol{r}_N)$ 中的概率为　$|\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N)|^2\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2\cdots\mathrm{d}\boldsymbol{r}_N$．

归一化条件为 $\int_\infty|\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N)|^2\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2\cdots\mathrm{d}\boldsymbol{r}_N=1$

N 个全同粒子系波函数归一化问题，见“全同粒子”章．

10. 由于波性，根据传统解释每个电子都是同时通过双缝而落到屏上，而不是电子束中一部分电子由 A 缝通过，另一部分电子由 B 缝通过，不然屏上显示的只是两个单缝衍射条纹的叠加．因此“电子必定通过两缝之一”的说法是不正确的．

11. 设 $\psi(x)$ 态中，动量概率密度为 $|\varphi(p_x)|^2$，则粒子动量 p_x 介于 p_1 与 p_2 之间的概率为 $\int_{p_1}^{p_2}|\varphi(p_x)|^2\mathrm{d}p_x$，而 $\varphi(p_x)$ 是 $\psi(x)$ 的傅氏变换，可由 $\psi(x)$ 完全确定

$$\varphi(p_x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}p_x\cdot x}\,dx.$$

由于 $|\psi(p_x)|^2=\psi^*(p_x)\psi(p_x)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x')e^{\frac{i}{\hbar}p_x\cdot x'}\,dx'\cdot\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}p_x\cdot x}\,dx$，所以 $\psi(x)$ 中粒子动量 p_x 介于 p_1 与 p_2 间的概率为

$$\int_{p_1}^{p_2}\left[\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)\psi^*(x')e^{\frac{-i}{\hbar}p_x(x-x')}dxdx'\right]dp_x.$$

如波函数为 $\psi(x,y,z)$，则粒子动量分量 p_x 介于 p_1 与 p_2 之间的概率为

$$\int_{p_1}^{p_2}dp_x\int_{-\infty}^{\infty}\phi^*(\boldsymbol{p})\phi(\boldsymbol{p})dp_ydp_z$$

$$=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int_{p_1}^{p_2}dp_x\int_{-\infty}^{\infty}dp_ydp_z\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x',y',z')$$

$$\cdot\psi(x,y,z)e^{-\frac{i}{\hbar}[p_x(x-x')+p_y(y-y')+p_z(z-z')]}\cdot dxdydzdx'dy'dz'$$

$$=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int_{p_1}^{p_2}dp_xe^{-\frac{i}{\hbar}p_x(x-x')}\cdot(2\pi\hbar)^2\int_{-\infty}^{\infty}\delta(y-y')\cdot\delta(z-z')$$

$$\cdot\psi^*(x',y',z')\psi(x,y,z)\cdot dxdydzdx'dy'dz'$$

$$=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{p_1}^{p_2}dp_x\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x',y,z)\psi(x,y,z)e^{-\frac{i}{\hbar}p_x(x-x')}$$

$$\cdot dxdx'dydz.$$

12. 概率 $p_1=\int_{x_1}^{x_2}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x,y,z)|^2dxdydz$

$$=\int_{x_1}^{x_2}dx\int_{-\infty}^{+\infty}dy\int_{-\infty}^{+\infty}dz|\psi(x,y,z)|^2.$$

概率 $p_2=\int_{-\infty}^{+\infty}dz'\int_{-\infty}^{+\infty}dz''\int_0^{\infty}dp_z\left\{\frac{1}{2\pi\hbar}e^{-\frac{i}{\hbar}p_z(z'-z'')}\cdot\left[\int_{x_1}^{x_2}dx\int_{-\infty}^{+\infty}dy\psi(x,y,z')\psi^*(x,y,z'')\right]\right\}$.

概率 $p_3=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int_{p_1}^{p_2}dp_x\int_{p_3}^{p_4}dp_y\int_{p_5}^{p_6}dp_z\left\{\int_{-\infty}^{+\infty}d^3r'\right.$

$$\cdot\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}^3r''\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p\cdot(r'-r'')}\psi(r')\psi^*(r'')\Big\}.$$

13. (1) 概率 $p_1=\Big[\int_{\alpha}^{\beta}\mathrm{d}x_2|\psi(x,x_2)|^2\Big]\mathrm{d}x.$

(2) 概率 $p_2=\Big[\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x_2|\psi(x,x_2)|^2\Big]\mathrm{d}x.$

(3) 概率 $p_3=\int_{\alpha}^{\beta}\mathrm{d}x_1\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x_2|\psi(x_1,x_2)|^2+$

$$+\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x_1\int_{\alpha}^{\beta}\mathrm{d}x_2|\psi(x_1,x_2)|^2-\int_{\alpha}^{\beta}\mathrm{d}x_2\int_{\alpha}^{\beta}\mathrm{d}x_1|\psi(x_1x_2)|^2.$$

p_3 式中，第一项为粒子 1 在区间[α, β]、粒子 2 在整个空间(包括区间[α,β])的概率；第二项为粒子 2 在区间[α,β]，粒子 1 在整个空间(包括区间[α, β])的概率. 第三项代表两粒子均处于[α,β]的概率.

(4) 概率 $p_4=p_3-\int_{\alpha}^{\beta}\mathrm{d}x_1\int_{\alpha}^{\beta}\mathrm{d}x_2|\psi(x_1,x_2)|^2.$

其中，第二项积分表示两粒子同时位于[α,β]中的概率.

(5) 概率 $p_5=\dfrac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x_1'\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x_1''\int_{\alpha}^{\beta}\mathrm{d}x_2\int_{p'}^{p''}\mathrm{d}p_1\mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{i}}{\hbar}p_1(x_1'-x_1'')}$

$$\cdot\psi(x_1'x_2)\cdot\psi^*(x_1'',x_2).$$

(6) 概率 $p_6=\dfrac{1}{(2\pi\hbar)^2}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x_1'\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x_1''\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x_2'\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x_2''\int_{p'}^{p''}\mathrm{d}p_1$

$$\cdot\int_{p'''}^{p''''}\mathrm{d}p_2\Big\{\mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{i}}{\hbar}[p_1(x_1'-x_1'')+p_2(x_2'-x_2'')]}$$

$$\cdot\psi(x_1',x_2')\psi^*(x_1'',x_2'')\Big\}.$$

14. 以沿 x 轴传播的平面波为例.

波函数 $\psi_p(x,t)=A\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(px-Et)}=\psi(x)\mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{i}}{\hbar}Et}$,

而 $\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi_p(x,t)|^2\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x)|^2\mathrm{d}x=|A|^2\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x=\infty.$

因而 $\psi_p(x,t)$不是平方可积函数，不能归一化.

但这只是数学上的困难，从物理上是不难理解的. 这种情形相当于归一化常数为零. 因为，如果粒子在空间各处出现的概率是均匀的，并且在整个空间出现的概率为 1，那么在任何有限区域内出现的概率必然为零. 因而，平面波函数归一化常数只能为零，也就是说不能按常规方式归一化.

正如光学中严格的单色波并不存在一样. 严格说 $\psi_p(x, t)$ 并不表示真实的物理状态. 某一物理状态对应的波函数总是平方可积的.

量子力学中，平面波函数平方不可积，而由波长不同的一系列平面波的叠加而形成的波包

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

都是平方可积的. 因而，自由粒子的波函数应以平面波叠加构成的波包表示. 尽管平面波波函数不表示真实状态，但却是个方便且实用的近似. 另外，不仅平面波波函数，凡是连续谱本征函数都不能简单归一化.

15. (1) 此波包是由以动量 p_0 为中心，宽度在 $p_2-p_1=2\Delta p$ 的一段内动量均匀分布的平面波所构成.

(2) $\psi(x)=A\int_{p_0-\Delta p}^{p_0+\Delta p}e^{ipx/\hbar}dp=\frac{A\hbar}{ix}[e^{i(p_0+\Delta p)x/\hbar}$
$-e^{i(p_0-\Delta p)x/\hbar}]$,

提出 $e^{ip_0x/\hbar}$，并化简，得

$$\psi(x)=2\hbar A\frac{\sin(\Delta p\cdot x/\hbar)}{x}e^{ip_0x/\hbar}.$$

归一化要求 $1=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\psi(x)dx$

$$=4\hbar^2A^2\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin^2(\Delta px/\hbar)}{x^2}dx.$$

令 $y=\frac{\Delta p x}{\hbar}$，利用 $\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin^2 y}{y^2}\mathrm{d}y=\pi$，$2\Delta p=p_2-p_1$ 有

$$1=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\psi(x)\mathrm{d}x=4\pi\hbar A^2\Delta p=2\pi\hbar(p_2-p_1)A^2,$$

故 $$A=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar(p_2-p_1)}}.$$

归一化波包 $$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar(p_2-p_1)}}\int_{p_1=p_0-\Delta p}^{p_2=p_0+\Delta p}\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}p,$$

即 $$\psi(x)=\sqrt{\frac{\hbar}{\pi\Delta p}}\frac{\sin(\Delta px/\hbar)}{x}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_0x/\hbar}.$$

16. 量子波函数与经典波函数有本质上的不同. 如态函数乘以任一常数后仍描述原状态等等. 概率波函数就其本性而言是无法直接测量的. 可以测量的是粒子的力学量的值，以及出现这些值的概率.

一般情况下，按测得概率计算波函数时，因为概率所决定的只是 $|\psi(x)|^2$，或更一般地，只是 $\psi(x)$ 按其力学量的本征函数展开时 $\left(\psi(x)=\sum_n c_n\phi_n(x)\right)$ 其中的 $|c_n|^2$，$\psi(x)\cdots$ 的相位仍然是不确定的.

17. (1) 可能，这时 $c_1(t)$ 与 $c_2(t)$ 按薛定谔方程的要求随时间变化.

(2) 如按这种理解 $\phi(x,t)=c_1(t)\psi_1(x,t)+c_2(t)\psi_2(x,t)$.

已知 ψ_1 与 ψ_2 是体系可能态，它们应满足波方程(设体系哈密顿量为 $\hat{H}$)

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi_1}{\partial t}=\hat{H}\psi_1,\qquad \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi_2}{\partial t}=\hat{H}\psi_2.$$

ψ_1 与 ψ_2 线性叠加后得到的 $\phi(x\cdot t)$ 如果也是体系的一个可能态，就必须满足波方程 $$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\phi}{\partial t}=\hat{H}\phi.$$

然而 $$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\phi}{\partial t}=\left[c_1\frac{\partial\phi_1}{\partial t}+\psi_1\frac{\mathrm{d}c_1}{\mathrm{d}t}+c_2\frac{\partial\psi_2}{\partial t}+\psi_2\frac{\mathrm{d}c_1}{\mathrm{d}t}\right]\mathrm{i}\hbar$$

$$= c_1\hat{H}\psi + c_2\hat{H}\psi_2 + i\hbar\left[\psi_1\frac{dc_1}{dt} + \psi_2\frac{dc_2}{dt}\right].$$

只有当$\frac{dc_1}{dt} = \frac{dc_2}{dt} = 0$时，$i\hbar\frac{\partial\phi}{\partial t} = \hat{H}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = \hat{H}\phi$. 因此$\phi(x,t) = c_1\psi_1(x,t) + c_2\psi_2(x,t)$中，$c_1$与$c_2$应是任意复常数，而不是$t$的任意复函数. 如上式中$\psi$态不含$t$，则为

$$\phi(x) = c_1\psi_1(x) + c_2\psi_2(x).$$

18. 有，而且很普遍. 事实上，任何力学量本征值连续变化的本征态的叠加，其结果必然由求和形式过渡到积分形式. 例如，平面波叠加形成的波包，电子在晶体表面的散射等都属于这类情形.

19. 许多著述如朗道著《量子力学》及曾谨言著《量子力学》中都强调态叠加原理是与测量紧密联系的基本原理，按照这种观点，态叠加原理被表述为：

"设体系处于ψ_1态时，测其力学量A可得准确值a_1，体系处于ψ_2态时测该力学量A可得另一个准确值a_2，则在$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$态中($c_1$与$c_2$为常数)测量力学量$A$，结果只可能为$a_1$，或为$a_2$，而且其相对概率是完全确定的，我们就称$\psi$态是$\psi_1$态与$\psi_2$态的线性叠加态."

如ψ_1和ψ_2是相互正交的态. 则在ψ态中测力学量A得值a_1的概率为$|c_1|^2$，得值a_2的概率为$|c_2|^2$，这就是通常说的"ψ态中处于ψ_1态的概率是$|c_1|^2$，处于ψ_2态的概率是$|c_2|^2$"的精确含义.

可见，ψ_1态与ψ_2态的线性叠加态$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$中对诸如力学量$A$的测量结果具有不确定性. 在$\psi$态中测力学量$A$时，测量值可能为$a_1$或为$a_2$，二者必居其一. 并且测量值为$a_1$与测量值为$a_2$的相对概率是完全确定的. 这个物理结果通常被表述为：在ψ_1态与ψ_2态的线性叠加态ψ中，粒子既处在ψ_1态，又处在ψ_2态. 或者说，部分地处于ψ_1态，部分地处于ψ_2态.

20. 缝后粒子波函数ψ是由缝A发出的ψ_A与缝B发出的

ψ_B 的线性叠加 $\psi=c_1\psi_A+c_2\psi_B$，$|c_1|^2+|c_2|^2=1$. 可见，态的叠加是波函数的叠加，而屏上粒子位置概率由 $|\psi|^2=|c_1\psi_A+c_2\psi_B|^2$ (和的平方)确定. $|\psi|^2$ 中出现有 ψ_A 与 ψ_B 的干涉项 $2\mathrm{Re}[c_1c_2^*\cdot\psi_1\psi_2^*]$. c_1 和 c_2 的模及相对相位对概率分布都有重要作用.

什么情况下会出现概率叠加呢？如果把实验装置中的双缝总是遮住一个，并且任何时刻我们不知道哪个缝被遮住，入射波只能从 A(或 B)一个缝通过. 从 A 缝通过与从 B 缝通过是互相排斥事件. 因而出现概率相加(平方的和)，电子在屏上的概率密度为 $|c_1|^2|\psi_A|^2+|c_2|^2|\psi_B|^2$. 但这时描述的已不是双缝干涉了.

21. 这是狄拉克在他的经典名著中颇引人注目从而引出了不少议论的一句名言. 按照对波函数的传统解释，概率波函数可以描述一个粒子的态. 双狭缝实验中，一个粒子的波同时通过 A 缝与 B 缝，缝后粒子态为 $\psi=\psi_A+\psi_B$，ψ 态中一个粒子部分处于 ψ_A 态，部分处于 ψ_B 态. ψ 态是一个粒子的波经两缝而分裂成两分波 ψ_A 与 ψ_B 的叠加. 因而，对两束光的干涉可认为“每一光子都是部分地走入两个组分中的每一个. 这样，每一个光子只与它自己发生干涉.”

按照狄拉克的解释：如果认为屏上的条纹是通过双缝中 A 缝的光子与通过 B 缝的另一个光子间的干涉，这就要求有时候两个光子干涉而湮没，有时又要求产生四个光子. 这样就违背了能量守恒，因而“从来不会出现两个不同光子之间的干涉.”

从狄拉克以上的论述中可看出，他是把入射光在传播时也当作光子流看待的.

60 年代以来，两支独立的激光光源间的干涉实验相继成功，这就打破了相干光束必须来自同一光源的制约，从而动摇了“光子的干涉”的观念. 看来，更合理的观点应是：双缝实验中空间传播的只是概率波幅，同时通过双缝的也是概率波，缝后线性叠加态中

产生干涉是概率波 ψ_A 与 ψ_B 而不是粒子间的干涉.

22. (1) ψ 与 $k\psi$ 或 $\psi e^{i\alpha}$ 描述的相对概率分布完全相同. 例如,对空间 x_1 点与 x_2 点的相对概率

$$\frac{|\psi(x_1)|^2}{|\psi(x_2)|^2}=\frac{|k\psi(x_1)|^2}{|k\psi(x_2)|^2}=\frac{|\psi(x_1)e^{i\alpha}|^2}{|\psi(x_2)e^{i\alpha}|^2}.$$

故 ψ 与 $k\psi$ 或 $\psi e^{i\alpha}$ 均描述同一状态.

(2) 由于任意复数 $c=|c|e^{i\theta}$,以及

$$|c_1\psi_1\pm c_2\psi_2|^2=|c_1\psi_1|^2+|c_2\psi_2|^2\pm c_1c_2^*\psi_1\psi_2^*\pm c_2c_1^*\psi_2\psi_1^*,$$

显然,只有当复数 $c_1=c_2=c$. 即 $|c_1|=|c_2|=|c|$, 且 $e^{i\alpha_1}=e^{i\alpha_2}=e^{i\alpha}$ 时,$\psi_1+\psi_2$、$c_1\psi_1+c_2\psi_2=c(\psi_1+\psi_2)$ 以及

$$\psi_1e^{i\alpha_1}+\psi_2e^{i\alpha_2}=(\psi_1+\psi_2)e^{i\alpha}$$

代表相同状态.

23. 波函数的统计解释只说: ψ 是概率幅. 但波函数描述的对象是什么是个有争议的问题.

传统解释认为波函数是描述个别粒子状态的,这在对不确定关系的论证中得到充分体现.

而量子系综(简称系综)观点的统计解释认为: 用波函数对微观粒子运动的统计性描述的结果,只有在重复用大量实验进行完全同样的测量,多次重复实验所出现的测量结果的分布才具有完全客观的性质.

在量子领域中,我们难以对同一个粒子重复进行实验. 因为,一般地说测量能使微观粒子的状态发生改变. 因此,要重复进行大量完全相同的实验,就必须通过对处于相同的宏观条件下的互相独立的大量粒子的实验来实现.

这样一组处于相同宏观条件下的互相独立地运动的微观粒子的集合称为量子系综(简称为系综). 所以,严格说来态和波函数的概念是属于系综的,而不是个别粒子的. 通常为了简便也常说

粒子的态或粒子的波函数，但应记住是该粒子所从属系综的态和波函数．从系综观点，量子力学描述的是量子系综(而不是个别粒子)的运动规律，确定对系统测量结果的概率分布．量子力学本质上是一种统计理论．

量子力学中系综概念虽来自经典统计力学，但经典系综只是为了计算而引入的模型，而量子系综是要通过多次重复实验来实现的．

关于量子系综的实现，请参阅态的定义一题．

24．按照这个定义，物理系统的态是对系统制备的结果．态的制备则由对系统进行一系列操作来完成的．这一系列操作是藉助各种宏观装置(仪器)，对系统加上制备某态所需的宏观条件而实现．

例如，由固定温度的灯丝不断发出的电子，经过加速装置，再经速度选择装置，又加上定向装置如光阑、狭缝之类．在灯丝温度、加速电势、狭缝位置、宽度、……这些宏观条件的限制下，最后选出沿一定方向，具有确定动量的电子束，经过以上一系列操作的制备过程，就可以说，此时电子束是处于符合一定宏观条件的确定态．

虽然这个定义只能说是态的"制备定义"，但定义指出宏观条件在态的制备中的作用，实质上正是确定量子统计系综的重要特征．如上例中，不断地从灯丝中发射出电子，当电子间相互作用可以忽略时，就可不断重复地制备出处在相同宏观条件下并且独立地运动的大量电子．这正是量子系综的实现，是入射电子系综的制备．

从态的"制备定义"更可看出，态的概念是属于系综的，应该说系综的态．而当我们说粒子的态时，应该理解为是以该粒子为成员的系综的态．

正如布洛欣采夫所说"当在量子力学中谈到某一微观现象的再现(譬如说到某同一实验的重复)时,那么,这时所指的是:对于这个微观物理学现象,它的宏观条件再现了,也就是说实现了一个统计系综."

因此,量子力学是在微观粒子与宏观测量仪器的关系上来研究粒子的性质(统计系综)的,因为只有借助于这些宏观仪器,才能够测定一般所说的"粒子的态",也就是说,才能够把统计系综确定下来.

25. 对量子力学基本假设应包括哪些内容,尽管是仁者见仁,智者见智(比如,对态的叠加原理,有人认为是,有人认为不是,甚至有的书中根本没出现态的叠加原理这几个字),但共同的是在基本假设中根本没有态的定义.

上题中引用的 Jauch 的定义实际上是狄拉克书中给出定义的简化. 量子力学经典著作中给出的定义为什么竟然都不被引用呢?如果说狄拉克在他对态的定义那段叙述中有些语句费解,那么经简化说清楚了的 Jauch 定义为什么也没列入量子力学基本假设中呢?

基础理论中愈是基本的概念愈难给予严格定义. 物理中的时间,数学中的集合,……都是如此.

态是量子力学中的基本概念,但由于波函数的统计解释,态函数是概率幅. 这就使量子力学的概念,规律与经典力学中有本质的不同. 量子态(以及力学量……)是很难预先给下个全面严格的定义的.

狄拉克以及 Jauch 的态的"制备定义是以宏观仪器给出的客观条件来确定制备态. 这并不需要量子论的理论来解决.

因而,在基本假设中只出现态矢作为概率幅……这个反映量子特征本质的内容而没有态的定义是可以接受的.

26. (1) $e=\frac{1}{\sqrt{2}}(e_x+e_y)$代表与 e_x 及 e_y 都成 45° 角方向上的线偏振光，是互相正交的两个偏振态 e_x 与 e_y 的线性叠加态，是相干叠加，e 态是纯态.

如果在光的传播路途中，放置一个检偏振器，其偏振化方向 e' 与 e 垂直(如图 24)，显然，对处于 e 态的 N 个光子没有一个能通过检偏振器. 如果认为有$\frac{N}{2}$个光子处 e_x 态、$\frac{N}{2}$个光子处 e_y 态，就应有$\frac{N}{2}$个光子通过检偏振器. 实验否定了这个预言.

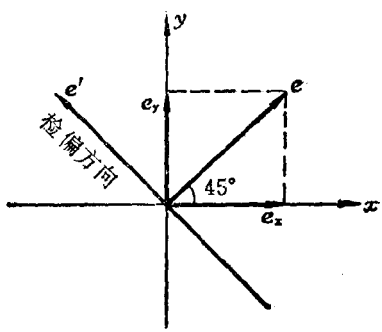


图 24

(2) 如果入射光是自然光，它是 e_x 态与 e_y 态的非相干叠加. 是两种偏振态 e_x 以相同比例组成的统计混合态，当$\frac{N}{2}$个光子处于 e_x 态、$\frac{N}{2}$个光子处于 e_y 态的自然光，经过测量时因每个光子有概率为 $\cos^2 45=\frac{1}{2}$的可能性通过检偏振器. 所以，共有$\frac{N}{2}$个光子通过. 这里是整个光子(不是光子的一部分)通过检偏振器. 由于测量，光子的偏振态由 e_x 或 e_y 变为 e'.

(3) 从这个例子看出：自然光是 e_x 态和 e_y 态以相同比例构成的统计混合态. 线偏振光 $e=\frac{1}{\sqrt{2}}(e_x+e_y)$是 e_x 态与 e_y 的线

性叠加态，是纯态.

纯态与统计混合态的差异正好跟相干光的叠加与不相干光的叠加之间的差异相似.

在计算纯态中的概率时，是把概率幅叠加以后再取平方——和的平方，因而，纯态中存在各个个别态间的干涉. 统计混合态中则不存在这种干涉. 在计算统计混合态的概率时，则是把强度相加——平方的和，即概率是相加的.

27. 由于任一复数 $c=|c|e^{i\theta}$，θ 为相位角，给出的四个叠加态均可写为

$$e=\frac{1}{\sqrt{2}}e_x+\left(\frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\alpha}\right)e_y=c_1e_x+c_2e_y.$$

其中 α 是展开系数 c_2 与 c_1 的相对相位，$\frac{c_2}{c_1}=e^{i\alpha}$，四个叠加态的差别只在于系数的相对相位

$$\alpha_1=0,\quad \alpha_2=\pi,\quad \alpha_3=+\frac{\pi}{2},\quad \alpha_4=-\frac{\pi}{2}.$$

由于 α 的不同，四个叠加态在物理上是不同的偏振态. 前两个表示沿角$(e_x、e_y)$等分线的线偏振光，后两者则表示圆偏振光，一个右旋，另一个为左旋.

这个例子充分说明相干叠加态 e 取决于 e_x 与 e_y 的相对权重与相对相位，仅由于相对相位 α 的不同，相干叠加态已经是不同的物理态.

28. 量子力学中用概率波描述微观体系，它既不同于经典波，也不同于经典粒子. 本题中，第一个论断反映了概率波与经典波的不同，第二个论断则反映了概率波所描述的微观体系与经典粒子模型的本质差异.

我们说"归一化波函数可以含有一个任意相因子"是指 ψ_1 与 $\psi_1e^{i\alpha}$(α 实常数)有相同的概率分布，描述的是相同的态.

量子力学与经典力学的根本差异在于"态有叠加性"而 ψ_1 态与 ψ_2 态的线性叠加态 $\psi=\psi_1+\psi_2$ 与态

$$\phi=\psi_1 e^{i\alpha_1}+\psi_2 e^{i\alpha_2},$$

由于 $|\phi|^2\neq|\psi|^2$，概率分布不同，ψ 与 ϕ 是不同的态.

从波的干涉看来，这是显然的. 两相干波叠加时，因干涉形成的强度分布是由两波的相对相位——相位差决定的. 例如，上述叠加态 ϕ 中，两叠加项的相对相位为 $e^{i(\alpha_2-\alpha_1)}$，而 ψ 态的两叠加项是同相的($\alpha_2=\alpha_1$，使 $e^{i(\alpha_2-\alpha_1)}=1$)，相对相位不同的叠加必然产生不同的干涉效果，呈现不同的概率分布.

如把 ϕ 写成 $\phi=\psi_1 e^{i\alpha_1}+\psi_2 e^{i\alpha_2}=e^{i\alpha_1}[\psi_1+\psi_2 e^{i(\alpha_2-\alpha_1)}]=e^{i\alpha_1}\phi'$，由于 $|\phi|^2=|\phi'|^2$，所以，ϕ' 与 ϕ 描述相同的态，这里公共相因子 $e^{i\alpha_1}$ 具有任意性. $e^{i\alpha_1}$ 变动时，ϕ' 中两项的相对相位仍为 $e^{i(\alpha_2-\alpha_1)}$.

为了与相对相位区分，可以把这个模为 1 的公共相因子 $e^{i\alpha_1}$ 称为绝对相位. 绝对相位是无关紧要的，具有任意性. 而相对相位是决定概率波干涉，从而是确定概率分布的决定性因素.

正是从相对相位的这个意义上说，相位的出现是量子力学的最基本特征. 没有相位就不成其为量子力学.

29. 薛定谔方程不是推导出来的，而是作为非相对论量子力学的一个基本假设而引入的.

波动方程在量子力学中的地位与牛顿方程在经典力学中的地位完全相当. 它们的正确性只能通过大量实验事实来验证.

教科书中通常是从德布罗意假设得到的平面波波函数出发，求出 $\frac{\partial\psi}{\partial t}$ 与 $\nabla^2\psi$，再由能量 $E=\frac{p^2}{2m}$ 得出对自由粒子的波动方程

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi.$$

进一步考虑势场 V 中运动的粒子，由于

$$E=\frac{p^2}{2m}+V,$$

波动方程可推广为

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}+V\right)\psi$$

数学上平面波波函数满足的波方程不是唯一的，为什么薛定谔方程中只有$\frac{\partial\psi}{\partial t}$而没出现$\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}$，为什么方程中用了$\nabla^2\psi$而没有$\nabla\psi$……完全没有严格地论证．所以，薛定谔方程不是推导出来的，教科书中只是出自教学上的考虑才这样做的．

30．因为薛定谔方程中对空间坐标是二次微商，而对时间则是一次微商，显然不满足相对论要求的协变性．其次，方程中动能是以$E=\frac{p^2}{2m}$表出的，这只对非相对论情形适用．所以薛定谔方程是非相对论量子力学的波方程．

31．一般认为，量子力学理论体系中，态叠加原理或波方程都可以单独作为独立的基本假设．不同教材中它们出现先后可能不同，但不存在主从之分．这时，题中给出的两种说法只是说明这两个基本假设之间是相容的．

也有人不把态叠加原理作为基本假设而作为由波方程得出的一个推论．这正是题中第二个提法，而狄拉克在他的书中开宗明义第一章就是态叠加原理，也有的名著如席夫所著《量子力学》中只提为了使方程解能被叠加以产生干涉……方程必须是线性的．没有明确作为"态叠加原理"而提出．

不同的处理方式反映了不同作者对态叠加原理在量子力学中地位和重要性的见解很不相同．

32．波方程作为微观粒子的运动方程，不能只局限于描述给定的动量、能量……的粒子运动，还应当能把这些力学量的不同值的解叠加而获得普遍解．所以波动方程的系数不应包括动量、能

量……这些参量.

至于质量与电荷，质量是任何非光速粒子都有的属性而电荷只是带电粒子的属性.

经典力学中，牛顿运动方程 $\boldsymbol{F}=m\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t^2}$ 中只出现质量 m. 对带电粒子是通过相互作用中所受的电磁力出现于合外力 $\boldsymbol{F}$ 内，而对粒子运动产生影响.

与之类似，量子力学的波动方程中也只有质量出现，而带电粒子的电荷对运动的影响，则包含于势能项中.

33. 设波函数 ψ 是波动方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+[E-V(\boldsymbol{r})]\psi=0$$

的解. 将方程左边加减相等的 $c\psi$ 项，得

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+\{[E+c]-[V(\boldsymbol{r})+c]\}\psi=0,$$

亦即

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+[E'-V'(\boldsymbol{r})]\psi=0.$$

可见，当 $V(\boldsymbol{r})\to V'(\boldsymbol{r})=V(\boldsymbol{r})+c$ 前后有相同的解. 只是

$$E\to E'=E+c.$$

34. 对波动方程的任一解 $\psi(x,t)$，如在某时刻归一化为

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

则
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\psi\,\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}+\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right]\mathrm{d}x.$$

由波方程

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

取复共轭得

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

对于实的 V，有 $V^*=V$，把得出的 $\frac{\partial\psi}{\partial t}$ 与 $\frac{\partial\psi^*}{\partial t}$ 代入前式，得

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

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

因为 ψ 可归一化，ψ 在 $\pm\infty$ 处必为零，故

$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi|^2dx=0$$

35. 对概率密度 $w(\boldsymbol{r},t)=\psi^*(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t)$，

求
$$\frac{\partial w}{\partial t}=\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}+\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi.$$

一维情况下，由上题知

$$\frac{\partial w}{\partial t}=\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left[\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}-\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right],$$

如定义

$$j_x=\frac{i\hbar}{2m}\left[\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}-\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right],$$

则有

$$\frac{\partial w}{\partial t}+\frac{\partial j_x}{\partial x}=0.$$

三维情况下

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

令
$$\boldsymbol{j}\equiv\frac{i\hbar}{2m}[\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi],\text{（概率流密度）}$$

则有
$$\frac{\partial w}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0.$$

形式上与流体力学中连续性方程一样，是概率守恒的微分表

达式，它描述了概率守恒具有定域的性质．当粒子在空间某处的概率发生变化，可以看成是概率流流动的结果．如某处概率减小，通过概率流的流动必使其他某处概率增大，从而使全空间内总概率不变．

对空间一个有限区域 V（包围 V 的闭合曲面为 S），则 V 内

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_V w\mathrm{d}V=-\int_V \nabla\cdot\boldsymbol{j}\mathrm{d}r=-\oint_S \boldsymbol{j}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S}=-\oint_S j_n\mathrm{d}S.$$

上式左方代表体积 V 中单位时间找到粒子总概率的增加．右方代表单位时间内经 S 面流入的概率（负号代表流入）．$\boldsymbol{j}$ 在 $\mathrm{d}S$ 面上的法向分量，$\boldsymbol{j}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S}$ 表示单位时间流过 $\mathrm{d}S$ 面上单位面积的概率．

所以，把 $\boldsymbol{j}$ 称为概率流密度．

概率流密度 $\boldsymbol{j}$ 与概率密度 $w=|\psi|^2$ 不同，它不能直接加以测量．

36．（1）由 $\boldsymbol{j}=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}[\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi]$，$j_e=e\boldsymbol{j}$，…

可看出：

如波函数是实的，$\psi^*=\psi$，则 $\boldsymbol{j}=0$，$j_e=0$，…

对定态波函数

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\phi(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et},$$

如果 $\phi(\boldsymbol{r})$ 为实函数，仍有 $\boldsymbol{j}=0$，$j_e=0$，…．例如，一维束缚定态波函数．如果 $\phi(\boldsymbol{r})$ 是复函数，一般来说 $\boldsymbol{j}\neq 0$．

（2）对定态　$w=|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2=|\phi(\boldsymbol{r})|^2$，

即 w 与时间 t 无关，$\boldsymbol{j}$ 也如此，即 w 与 $\boldsymbol{j}$ 是稳定的，这是定态的一个非常重要的性质．

（3）平面波　$\psi(\boldsymbol{r},t)=A\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et)}=\psi(\boldsymbol{r})\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}$，

所以概率密度　$w(\boldsymbol{r},t)=|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2=|\psi(\boldsymbol{r})|^2=|A|^2$，

即 w 在空间各处都一样且与时间 t 无关.

概率流密度 $j=\frac{i\hbar}{2m}(\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi)$,

以平面波波函数 $\psi(r,t)$ 代入得

$$j(r,t)=|A|^2\cdot\frac{p}{m}.$$

可见,平面波的概率流密度 j 不依赖于时间.

37. 从概率守恒的证明过程可看出,只有势函数 V 是实的,即 $V^*=V$,概率守恒才成立.

如果势函数是复的

$$V(r)=V_1(r)+iV_2(r),\quad (V_1\text{ 与 }V_2\text{ 都是实的}).$$

类似的推导可得出

$$i\hbar\frac{\partial w}{\partial t}=\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla\cdot[\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*]+i2V_2\psi^*\psi,$$

即

$$\frac{\partial w}{\partial t}+\nabla\cdot j=\frac{\partial V_2}{\hbar}w\neq 0.$$

概率守恒不成立时粒子数不守恒. 这时体系中必存在粒子的产生或湮没. 利用复势描述这些现象的例子见"散射"一章.

38. 量子体系遵从因果律,但由于微观粒子的波粒二象性使描述态的方式与经典力学有本质上的不同,因果律的含义及表现也有所不同.

由于波方程只含时间的一次导数,因此只要给出体系在初始时刻($t=0$)的状态 $\psi(r,0)$,原则上由波方程就可唯一确定以后任何时刻的状态 $\psi(r,t)$.

这就是因果律在量子力学中的体现.

把这个结果与经典力学作一比较是非常必要的,经典力学中牛顿运动方程是粒子的力学量坐标动量满足的方程. 给定初始条件就是给出初始时刻粒子的坐标,动量,藉助于牛顿运动方程,可以

给出这些力学量在各种情况下随时间变化的规律，这就是经典力学中的因果性.

可见，尽管经典力学与量子力学对粒子状态的描述，运动方程……都有着质的差异，但因果律都起作用，只是实际含义有所不同.

39. 给定体系初始态函数 $\psi(r,0)$，由波方程确定 $t>0$ 的任意时刻 $\psi(r,t)$，这称为量子力学的初值问题，这是量子力学中非常重要的问题. 一般情况下，求解是很复杂的. 我们只限于体系哈密顿量 $\hat{H}$ 与时间无关的情形. 例如，一维粒子

$$\psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}p_0x}，\ 求\ \psi(x,t).$$

显然，$\psi(x,0)$描述的是动量为 p_0、能量为 $E_0=\frac{p_0^2}{2m}$ 的自由粒子.

利用傅氏变换

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

以 $\psi(x,0)$代入，得

$$\phi(p)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}e^{\frac{i}{\hbar}(p_0-p)x}\,dx=\delta(p_0-p),$$

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

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\delta(p_0-p)\,e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}dp,$$

注意到 $E=\frac{p^2}{2m}$，$E_0=\frac{p_0^2}{2m}$，得

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}(p_0x-E_0t)}.$$

这是一个沿 x 轴正向传播的平面波解.

一般情况下，量子力学中往往用演化算符解初值问题，参阅下题.

40. 体系哈密顿量 $\hat{H}$ 不显含 t 时，初值问题

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\hat{U}\psi(\boldsymbol{r},0)=\mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{i}t}{\hbar}\hat{H}}\ \psi(\boldsymbol{r},0)$$

可从波动方程导出如下:

由波方程 $\quad \mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi$ 得

$$\frac{\partial\psi}{\partial t}+\frac{i\hat{H}}{\hbar}\psi=0.$$

以 $\hat{U}$ 的逆算符 $\hat{U}^{-1}=\mathrm{e}^{\frac{it}{\hbar}\hat{H}}$ 乘上式后得

$$\frac{\partial}{\partial t}[\mathrm{e}^{\frac{it}{\hbar}\hat{H}}\psi(\boldsymbol{r},t)]=0..$$

对时间间隔$(0,t)$积分，由于 $\hat{U}(0)=1$ 得

$$\mathrm{e}^{\frac{it}{\hbar}\hat{H}}\psi(\boldsymbol{r},t)-\psi(\boldsymbol{r},0)=0$$

再以 $\hat{U}=\mathrm{e}^{\frac{-it}{\hbar}\hat{H}}$ 乘上式得

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\mathrm{e}^{\frac{-it}{\hbar}\hat{H}}\ \psi(\boldsymbol{r},0)=\hat{U}\psi(\boldsymbol{r},0).$$

可见，应用演化算符解初值问题与解波动方程是一致的.

对平面波 $\quad \psi(x,0)=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_0x}$,

$$\psi(x,t)=\hat{U}\psi(x,0)=\mathrm{e}^{\frac{-it}{\hbar}\hat{H}}\psi(x,0)$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{-\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}t\right)^n\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_0x}.$$

已知体系

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}=\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{2x^2},\quad \hat{H}e^{\frac{i}{\hbar}p_0x}=E_0e^{\frac{i}{\hbar}p_0x},$$

其中 $E_0=\frac{p_0^2}{2m}$ 故

$$\psi(x,\ t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{-i}{\hbar}E_0t\right)^n e^{\frac{i}{\hbar}p_0x}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{-it}{\hbar}E_0}e^{\frac{i}{\hbar}p_0x}.$$

即 $$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}(p_0x-E_0t)}.$$

与上题结果相同.

41. 经典物理中输运方程是时间的一阶微分方程，如分子扩散——沿 x 方向由于分子浓度差引起的扩散，满足方程

$\frac{\partial n}{\partial t}=D\frac{\partial^2 n}{\partial x^2}$，$n$ 为分子浓度，D 为扩散系数.

但分子扩散，热传导……全是不可逆过程，所以，输运方程没有周期解.

薛定谔方程最重要的特点是在导数前面有虚数 i 存在，正是由于$\frac{\partial\psi}{\partial t}$的系数是虚数 i，波方程虽然是时间的一阶微分方程，却可以有周期解，并且波函数 ψ 一般是复函数(见下题).

42. 由 40 题，如体系哈密顿量 $\hat{H}$ 与 t 无关，体系波函数

$$\psi(r,t)=\hat{U}\psi(r,\ 0)=e^{\frac{-it}{\hbar}\hat{H}}\psi(r,0).$$

这个结果可由波方程导出.

如对方程 $a\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi$ 作类似推导，可得出

$$\psi(r,t)=e^{\frac{t}{a}\hat{H}}\psi(r,0).$$

如 a 为实数含 t 的指数因子中没有 i 出现，$\psi(r,t)$ 中不可能

出现 $e^{i\omega t}$ 项，$\psi(r,t)$ 就没有周期解. 只有 a 为复数时，ψ 才为复函数，解才可能具有周期性，才描述波的传播.

43. (1) 根据波函数的统计解释，复合体系的概率密度

$$w=|\psi|^2 \quad \text{应为} \quad w_1=|\psi_1|^2 \quad \text{与} \quad w_2=|\psi_2|^2$$

的乘积，因而要求，体系波函数 $\psi=\psi_1\psi_2$

(2) 已知 ψ_1 满足 $a\frac{\partial\psi_1}{\partial t}=H_1\psi_1$，$\psi_2$ 满足 $a\frac{\partial\psi_2}{\partial t}=H_2\psi_2$，

由于
$$\hat{H}\psi=(H_1+H_2)\psi=H_1\psi_1\psi_2+H_2\psi_1\psi_2$$
$$=\psi_2\left(a\frac{\partial\psi_1}{\partial t}\right)+\psi_1\left(a\frac{\partial\psi_2}{\partial t}\right)=a\frac{\partial\psi}{\partial t}.$$

可见，$\psi=\psi_1\psi_2$ 满足 $a\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi$.

含时间一阶导数的方程是可接受的波动方程.

而
$$a^2\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}=a^2\frac{\partial}{\partial t}\cdot\left[\frac{\partial(\psi_1\psi_2)}{\partial t}\right]$$
$$=(\hat{H}_1+\hat{H}_2)\psi_1\psi_2+2a^2\frac{\partial\psi_1}{\partial t}\cdot\frac{\partial\psi_2}{\partial t}$$
$$=\hat{H}\psi+2a^2\left(\frac{\partial\psi_1}{\partial t}\right)\left(\frac{\partial\psi_2}{\partial t}\right),$$

即 $\psi=\psi_1\psi_2$ 不满足 $a^2\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}=\hat{H}\psi$.

44. 如果我们取 $\quad v=\left(\frac{\omega}{k}\right)^2=\left(\frac{E}{p}\right)^2$，

方程 $\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}=\left(\frac{E}{p}\right)^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$ 可有复指数函数的平面波解

$$\psi(x,t)=e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}=e^{i(kx-\omega t)}.$$

但方程的系数中出现运动参量，能量 E 与动量 p. 这再次表明经典波动方程不能作为量子力学的波方程.

45. 如取 $\psi=\psi_1+i\psi_2$，ψ_1 和 ψ_2 都是实函数，则

概率密度　　$w=\psi^*\psi=\psi_1^2+\psi_2^2$,

归一化条件为　　$\int_\infty(\psi_1^2+\psi_2^2)\mathrm{d}z=1$.

由于　ψ 满足波动方程　$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi$,

即　　$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi_1+\mathrm{i}\psi_2)=\hat{H}(\psi_1+\mathrm{i}\psi_2),$$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi_1}{\partial t}-\hbar\frac{\partial\psi_2}{\partial t}=\hat{H}\psi_1+\mathrm{i}\hat{H}\psi_2.$$

由此等式可得出 ψ_1 与 ψ_2 满足的一对方程

$$-\hbar\frac{\partial\psi_2}{\partial t}=\hat{H}\psi_1 \text{ 与 } \hbar\frac{\partial\psi_1}{\partial t}=\hat{H}\psi_2.$$

这是 ψ_1 与 ψ_2 的联立方程，ψ 的 ψ_1 与 ψ_2 两部分，通过这一对方程联系在一起.

量子力学的所有关系式如平均值公式……都要随之改写. 显然这比用复指数函数表示波函数要复杂得多.

在数学处理上，对使用 $\psi=\psi_1+\mathrm{i}\psi_2$ 引起的量子力学关系式的更换，也可通过引入二列矩阵 $\psi\equiv\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}$ 与二行矩阵 $\psi^*\equiv(\psi_1,\psi_2)$表出. 这时，以 2×2 矩阵 $\gamma\equiv\begin{pmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$代替 i（同样有 $\gamma^2=-1$），于是，波动方程写为　$\hbar\gamma\frac{\partial}{\partial t}\psi=H\psi$,

算符也进行相应更换，如 $p=-\gamma\hbar\nabla$, …

由此建立的二分量形式与对自旋的处理是类似的.

在经典物理中波方程的解写为复指数形式是为了简便.

量子力学中波动方程的解一般应为复函数，写成复指数函数也是为了简便.

46. 经典波中为了计算简便，平面波常以复指数函数 $\psi=$

$Ae^{i(kx-\omega t)}$ 表示. 题中给出的 ψ_1 与 ψ_2 正分别是 $\psi=\psi_1+i\psi_2$ 的实部与虚部.

相应地,量子力学中, $\psi_1=A\cos\frac{1}{\hbar}(px-Et)$ 与 $\psi_2=A\sin\frac{1}{\hbar}(px-Et)$ 分别是 $\psi=Ae^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}$ 的实部与虚部.

对 ψ_1(及 ψ_2)求出 $\frac{\partial\psi_1}{\partial t}$ 及 $\frac{\partial^2\psi_1}{\partial x^2}$可直接看出, ψ_1(及 ψ_2) 不满足波方程,

即
$$i\hbar\frac{\partial\psi_1}{\partial t}\neq\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_1}{\partial x^2}.$$

ψ_1 与 ψ_2 对时间的一次导数满足一对联立方程

$$-\hbar\frac{\partial\psi_2}{\partial t}=\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi_1}{\partial x^2}=\hat{H}\psi_1,$$

$$\hbar\frac{\partial\psi_1}{\partial t}=\hat{H}\psi_2.$$

这正是把上题的讨论,应用到平面波的结果.

可见,对时间为一阶导数的波动方程,实函数 ψ_1 及 ψ_2 不是它的解. 而由 ψ_1 与 ψ_2 构成的复函数 $\psi=\psi_1+i\psi_2$ 才满足波动方程. 含时波方程的解一般为复函数.

对 ψ_1 求出 $\frac{\partial^2\psi_1}{\partial t^2}$ 及 $\frac{\partial^4\psi_1}{\partial x^4}$, 并利用自由粒子 $E=\frac{p^2}{2m}$,很容易得出 ψ_1 满足的方程为

$$\frac{\partial^2\psi_1}{\partial t^2}=\frac{-\hbar^2}{4m^2}\frac{\partial^4\psi_1}{\partial x^4}.$$

类似的有
$$\frac{\partial^2\psi_2}{\partial t^2}=\frac{-\hbar^2}{4m^2}\frac{\partial^4\psi_2}{\partial x^4}.$$

此时, ψ_1 与 ψ_2 仍然通过对时间的一阶导数的联立方程相联系.

47. (1) 假设概率密度 $w(\psi)$ 仅与 ψ 有关,则

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_{-\infty}^{+\infty}w(\psi)\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial w}{\partial t}\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial w}{\partial\psi}\frac{\partial\psi}{\partial t}\mathrm{d}x\neq 0\ (\text{对任意 }\psi).$$

这是因为，在时间的二阶微分方程中，$\frac{\partial\psi}{\partial t}$ 可以有任意的初始值. 正是由于$\frac{\partial\psi}{\partial t}$ 的这个性质，积分式不可能对所有的 ψ 都等于零. 所以概率守恒不可能对所有 ψ 都成立.

(2) 一维问题中

$$\frac{\partial w}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0,$$

化为

$$\frac{\partial w}{\partial t}+\frac{\partial j}{\partial x}=0.$$

如定义

$$w=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)^2+\frac{\hbar^2}{8m^2}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right)^2,$$

w 是两平方项之和，故 $w\geqslant 0$.

如再定义

$$j=\frac{\hbar^2}{4m^2}\left[\frac{\partial\psi}{\partial t}\frac{\partial^3\psi}{\partial x^3}-\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial t}\right]i,$$

分别求出 $\frac{\partial w}{\partial t}$ 及 $\frac{\partial j}{\partial x}$，并利用方程$\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}=\frac{-\hbar^2}{4m^2}\frac{\partial^4\psi}{\partial x^4}$，

可得出 概率守恒 $\frac{\partial w}{\partial t}+\frac{\partial j}{\partial x}=0$ 成立.

(3) 以平面波 $\psi=\cos(kx-\omega t)=\cos\frac{1}{\hbar}(px-Et)$为例，

$$w=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)^2+\frac{\hbar^2}{8m^2}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right)^2$$

$$=\frac{E^2}{2\hbar^2}\sin^2\frac{1}{\hbar}(px-Et)+\frac{p^4}{8m^2\hbar^2}\cos^2\frac{1}{\hbar}(px-Et)$$

由于 $E=\frac{p^2}{2m}$，故 $w=\frac{E^2}{2\hbar^2}$.

可见，如此定义的 w 与能量零点选择有关，因而是不能接受的. 量子力学中定义的 $w=\psi^*\psi$ 是与能量零点选择无关的.

这个例子具有普遍意义，它说明：如果以时间的二阶方程作波方程，以一个实函数作波函数，就没有可接受的概率定义.

从本章中一系列问题中可看出：在非相对论量子力学中，含时波动方程是对时间为一阶的微分方程. 波动方程解一般为复函数. 概率密度 $w=\psi^*\psi\geqslant 0$，它与能量零点选择无关，并对任意波函数都存在概率守恒. 波动方程，复波函数，概率密度 $w=\psi^*\psi$ 这三者是紧密联系在一起并相互制约的.

48. 如定义 $w=\psi^*\psi+\frac{\partial}{\partial x}(\psi^*\psi)$ 虽然仍可满足概率守恒. 但对某些波函数可能有 $w<0$.

例如，对 $\psi=\cos kx$，

$$w(x)=\psi^*\psi+\frac{\partial}{\partial x}(\psi^*\psi)=\cos^2 kx(1-2k\operatorname{tg}kx),$$

对任意 x $\cos^2 kx\geqslant 0$，但可能 $(1-2k\operatorname{tg}kx)<0$.

由于可能出现负概率密度. w 的这个定义不满足对任意 ψ 均应有 $w\geqslant 0$ 的条件.

49. 设两惯性系为 S' 与 S 系，S' 系在 x 轴方向以速度 u 相对 S 系运动.

S 系中，质量为 m 的粒子，波方程为 $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi$.

我们要证明：S' 系中，波方程为 $i\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t'}=\hat{H}'\psi'$.

为简单只讨论一维运动，则

$$\hat{H}=\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x,t),$$

$$\hat{H}'=\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x'^2}+V'(x',t'),$$

其中，x' 与 x…由伽利略变换 $x'=x-ut$，$t'=t$ 相联系.

将 ψ 与 ψ' 的变换关系代入波方程，并注意到

$$V'(x',t')\equiv V(x,t),$$

得 $$i\hbar\frac{\partial\psi'}{2t}=\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla'^2\psi'+V'\psi'=\hat{H}'\psi'.$$

薛定谔方程在伽利略变换下是不变的.

我们以平面波为例，求出 $\psi(x,t)$ 与 $\psi'(x',t')$ 的变换规律.

S' 系中，此波函数为 $\psi'(x',t')=Ae^{\frac{i}{\hbar}(p'x'-E't')}$，

而 $x'=x-ut$，动量 $p'=p-mu$（粒子运动速度 $v'=v-u$），

能量 $$E=\frac{p^2}{2m},\quad E'=\frac{p'^2}{2m}=\frac{(p-mu)^2}{2m}=E-pu+\frac{mu^2}{2}.$$

由于 $$p'x'-E't'=px-Et-mux+\frac{mu^2}{2}t,$$

所以 $$e^{\frac{i}{\hbar}(p'x'-E't')}=e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}\cdot e^{\frac{-i}{\hbar}(mux-\frac{mu^2}{2}t)},$$

亦即 $$\psi'(x',t')=\psi(x,t)e^{\frac{-i}{\hbar}(mux-\frac{mu^2}{2}t)},$$

或 $$\psi(x,t)=\psi'(x',t')e^{\frac{+i}{\hbar}(mux-\frac{mu^2}{2}t)}.$$

ψ 与 ψ' 只差一个绝对值为 1 的相因子 $e^{\frac{i}{\hbar}(mux-\frac{mu^2}{2}t)}$，它描述粒子随 S' 系一起相对于 S 系的自由运动. 上式不只对平面波，对任何波函数均成立. 因此对任何波函数均有 $|\psi(x,t)|^2=|\psi'(x',t')|^2$.

它正确地反映了在给定时刻和给定地点发现粒子的概率密度应与参考系选择无关这个事实.

50. 经典统计力学的基础是牛顿力学，例如一定量气体中每个气体分子在每个瞬时都有确定的位置和动量，每个分子都按牛顿运动定律而运动，而大量分子组成的体系存在着统计规律. 例如，对个别分子不存在温度这个概念. 处于平衡态的理想气体的温度是分子平均平动动能的量度.

与经典统计力学不同，量子力学不是象经典统计那样建立起

来的宏观理论. 波函数的统计解释是量子力学理论结构中的基本假设.

在传统的解释中，量子力学规律的统计性被认为是由波粒二象性所决定的微观粒子的本质特性，是观测仪器对微观粒子的不可控制的作用的结果.

如类似对经典粒子那样，进一步问：统计性的微观实质是什么？理论依据是什么？则被认为是超出了基本假设限度，因而是没有意义的也是没必要的.

爱因斯坦与哥本哈根学派间关于量子力学理论解释的分歧，请参阅：吴大猷，《量子力学》（甲部），科学出版社(1984)，第五章，§ 5，p. 198.

关于统计解释与由此产生的问题，请参阅：张启仁，《量子力学》，高等教育出版社，1989，第二十章，量子力学与客观世界，p. 370.

第 四 章

1. 关于力学量及其表示，量子力学有三条基本假定：

(1) 有关量子体系运动的每一个力学量都可以用一个线性厄密算符 $\hat{F}$ 来表示.

(2) 对于该力学量的测量值，必定是相应的线性厄米算符 $\hat{F}$ 的本征值$\{F_i\}$之一.

(3) 如果体系处于 ψ 态，该态可按算符 $\hat{F}$ 的本征态$\{\psi_i\}$ 展开

$$\psi=\Sigma c_i\psi_i,$$

那么在态 ψ 中，测量力学量 F 取值 F_i 的概率正比于展开系数 c_i 的模的平方$|c_i|^2$.

以上三条假定，共同给出了关于力学量的完整概念.

可见，在量子力学中，力学量与态是相对独立的概念. 而力学量算符与其数值也有不同含义. 在经典物理中，力学量可由运动状态完全确定，不必引入算符表示. 并且，力学量与其数值也是一体的概念.

2. 用算符表示力学量，是由于量子体系所固有的波粒二象性所要求的. 这正是量子力学处理方法上的基本特点之一. 我们知道，表示量子态的波函数是一种概率波. 因此，即使在一确定的量子态中，也并非各种力学量都有完全确定值，而是一般地表现为不同数值的统计分布. 这就注定了经典力学量的表示方法（可由运动状态完全决定）不再适用，因此需要寻求新的表示方法.

我们从力学量平均值的表示式出发，来说明引入算符的必要性.

如果体系处于态 $\psi(x)$中，则它的位置平均值为

$$\bar{x}=\int|\psi(x)|^2x\mathrm{d}^3x.$$

类似地，它的动量平均值也可表示为

$$\overline{\boldsymbol{p}}=\int|\psi(x)|^2\boldsymbol{p}\mathrm{d}^3x.$$

但是要求出第二个积分，必须将 $\boldsymbol{p}$ 表示为 x 的函数．然而这是办不到的．因为按不确定关系 $\boldsymbol{p}(x)$的表示是无意义的，因此不能直接在坐标表象中按上式求动量平均值．我们可先在动量表象中求出动量平均值，再转换到坐标表象中去．

$$\overline{\boldsymbol{p}}=\int|\psi(\boldsymbol{p})|^2\boldsymbol{p}\mathrm{d}^3\boldsymbol{p},$$

利用 $\psi(\boldsymbol{p})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot x/\hbar}\mathrm{d}^3x$ 有

$$\begin{aligned}\overline{\boldsymbol{p}}&=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\iiint\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}\mathrm{d}^3x'\mathrm{d}^3x\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot x'/\hbar}\psi^*(x')\boldsymbol{p}\psi(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot x/\hbar}\\&=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\iint\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}\mathrm{d}^3x'\psi^*(x')\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot x'/\hbar}\int\mathrm{d}^3x\psi(x)\mathrm{i}\hbar\nabla\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot x/\hbar}\\&=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}^3x\psi^*(x)(-\mathrm{i}\hbar\nabla)\psi(x).\end{aligned}$$

可见，若在坐标表象中计算动量平均值，那么动量矢量恰与算符$(-\mathrm{i}\hbar\nabla)$相当，实际上，任何一个力学量在非自身表象(连续谱)中计算其平均值，都与一个特定的算符相当，这就自然地引入了算符表示的概念．

用算符表示力学量的问题还可以从另一角度来说明．我们知道，量子力学中，力学与力学量之间的关系，从其数值是否能同时确定来考虑，有相互对易与不对易两种，而经典力学量之间都是对易的，因此经典力学量的表示方法不能适用于量子力学．然而在数学中，算符与算符之间一般并不满足交换律．也就是存在不对易的情形．因此用算符表示力学量是适当的．

3．什么是力学量？它怎样出现在量子力学理论中？请看狄拉克书中以下一段论述("量子力学原理")"力学变量意指那些，例如

粒子的坐标，粒子的速度，动量与角动量的各个分量以及这些量的函数——事实上，就是经典力学借以建立起来的那些变量."至于为什么经典力学量可以描述微观粒子呢？这是因为"量子力学中的力学变量仍然有许多性质是与它们在经典力学中的对应量所共有的."为了体现量子力学中力学量的本质特性，进一步假定：力学量以线性算符表示，"这个新假定要求这些量也出现在量子力学中，但是带有显著的不同，即它们现在服从一种代数，其中乘法交换律不能成立. 对于力学变量的这种不同的代数，是量子力学不同于经典力学的最重要的方式之一."实际上，量子力学与经典力学的力学量没有一一对应关系，量子力学中存在没有经典对应的力学量如自旋宇称等.然而，时间也不再和经典力学中一样作为力学量了. 量子力学中坐标动量都有相应的算符表示，我们可以计算它们的平均值……但量子力学中时间的平均值、本征值等都是无法讨论的，用经典力学定义的力学量描述微观粒子只能是近似地，这种近似性表现为力学量之间的排斥性，不确定关系正是这种排斥性的体现.

量子力学中力学量当然应该有个完整、严格的定义，它不应仅仅是经典力学量的类比和推广. 但正如在讨论态的定义时说过的力学量和态……这些基本概念在开始是很难给出完整、严格的定义的.

现有的量子力学基本假设中，没有态和力学量这两个基本概念的严格定义，如果说是个缺陷，也未尝不可；但从另外角度看，也可以说正是个独到之处. 很难设想，如果理论体系中一定先把基本概念诸如态、力学量等的定义搞清楚再起步，将是什么结局. 事实上量子力学建立以来已半个多世纪，量子力学中这些重大基本问题的争论探索一直在延续. 从这个意义上看，现有量子力学理论的框架最大的成功就在于把握住波函数的统计解释，以算符表

示力学量，这些微观世界中本质性的内容形成了一套自洽的理论框架并给以统一的数学表述：态以希尔伯特空间的矢量描述，力学量以作用于该空间上的算符表示……由之可计算出与实验相比较的结果．量子力学在各个微观领域中的成功应用，也使理论本身得到了发展，如引入自旋以及全同粒子等，并进一步发展建立了相对论量子力学、量子场论等更高层次理论．

4．"……本征态组成完全系的力学量叫可观察量"(observable)这是狄拉克引入的概念．由于力学量以厄米算符表出，"并非所有厄米算符都具有一个完备、正交归一本征函数系．然而，能表示物理量的厄米算符就有这样的系．为此，我们给这种算符一个名子：观察算符 (observable)．要证明一个特殊的厄米算符是观察算符往往是个困难的数学问题．实际上只对简单的情况（例如位置坐标或动量坐标、一维量子体系的哈密顿量、角动量等等）作过证明．下面我们总是认为所有与物理量相联系的算符都具有一完备正交归一本征函数系"——A·梅西亚，《量子力学》第一卷，科学出版社，1986 p. 193.

所以一般教科书中对这些名词往往不加区分地混用，也有的书上只用"物理量"一词．

5．含有算符 $\hat{F}$ 的方程

$$\hat{F}\varphi_n = F_n\varphi_n$$

称为 $\hat{F}$ 的本征值方程，F_n 为 $\hat{F}$ 的一个本征值，而 φ_n 则称为 $\hat{F}$ 的属于本征值 F_n 的本征函数．

如果算符 $\hat{F}$ 代表一个力学量，上述概念物理意义如下：

当体系处于 $\hat{F}$ 的本征态 φ_n 时，测量 F 的数值是确定的，恒等于 F_n，并且根据本章开头列出的假设，当体系处于任意态时，单次测量 F 的值必等于它的诸本征值之一．

6．力学量 F 的平均值(或称期望值)的一般定义为

$$\langle F\rangle=\int\psi\hat{F}\psi\mathrm{d}\tau.$$

它的意义包括以下几点:

(1) 当体系处于 ψ 态时,$\langle F\rangle$ 就等于对于 $\hat{F}$ 的所有测量值的平均;

(2) 如 ψ 为 $\hat{F}$ 的一个本征态,则 $\overline{F}$ 就等于对应的本征值;

(3) 如果可在经典力学与量子力学间建立对应关系,那么与经典力学量对应的便是量子力学中的力学量的平均值.

7. (1) 如算符 $\hat{F}$ 满足

$$\hat{F}(c_1\psi_1+c_2\psi_2)=c_1\hat{F}\psi_1+c_2\hat{F}\psi_2,$$

其中 c_1、c_2 为任意常数,ψ_1 与 ψ_2 为任意函数,则 $\hat{F}$ 称为线性算符.

如 $\hat{F}(c_1\psi_1+c_2\psi_2)=c_1^*\hat{F}\psi_1+c_2^*\hat{F}\psi_2$, 则算符 $\hat{F}$ 称为反线性的.

(2) 如算符 $\hat{I}$ 作用于任何函数均可使之保持不变 $\hat{I}\psi=\psi$,则 $\hat{I}$ 称为单位算符. 显然它是线性算符的特例.

(3) 零算符作用于任何函数均为零 $\hat{0}\psi\equiv0$.

(4) 如果两算符 $\hat{F}$、$\hat{G}$ 满足 $\hat{G}\hat{F}=\hat{F}\hat{G}=\hat{I}$,则 $\hat{F}$ 与 $\hat{G}$ 互为逆算符. 记为 $\hat{G}=\hat{F}^{-1}$ 或 $\hat{F}=\hat{G}^{-1}$.

(5) 算符 $\hat{F}$ 与 $\hat{G}$ 如果满足

$$(\psi_1,\hat{F}\psi_2)=\int\psi_1\hat{F}\psi_2\mathrm{d}\tau=\langle\psi_2,\hat{G}\psi_1\rangle,$$

则称 $\hat{F}$ 与 $\hat{G}$ 互为转置算符. 记为 $\hat{G}=\widetilde{\hat{F}}$ 或 $\hat{F}=\widetilde{\hat{G}}$.

(6) 将算符 $\hat{F}$ 的表示式中的复量换成其共轭复量即得到 $\hat{F}$ 的复共轭算符 $\hat{F}^*$,例如 $\hat{p}_x=-\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$, $\hat{p}_x^*=\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}=-\hat{p}_x$.

(7) 算符 $\hat{F}$ 的厄米共轭算符 $\hat{F}^\dagger=\widetilde{\hat{F}^*}$ 或

$$(\psi_1,\hat{F}^\dagger\psi_2)=(\hat{F}\psi_1,\psi_2).$$

(8) 厄米算符 $\hat{F}$ 是满足下列关系的线性算符

$$\hat{F}=\hat{F}^{\dagger} \text{ 或 } (\psi_1,\hat{F}\psi_2)=(\hat{F}\psi_1,\psi_2).$$

(9) 如 $\hat{F}^{\dagger}=\hat{F}^{-1}$ 或 $\hat{F}\hat{F}^{\dagger}=\hat{F}^{\dagger}\hat{F}=1$，则称 $\hat{F}$ 为幺正算符.

8. 算符运算与一般代数运算不同之点在于

① 算符乘积一般不满足代数乘法运算的交换律

$$\hat{A}\hat{B}\neq\hat{B}\hat{A}$$

② 算符乘积定义为 $(\hat{A}\hat{B}\hat{C})\psi=\hat{A}[\hat{B}(\hat{C}\psi)]$，运算次序由后至前，不能随意变更. 例如

$$\hat{p}_x\hat{y}\hat{x}\psi=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}[y(x\psi)]$$

$$=-i\hbar y\left(x\frac{\partial\psi}{\partial x}+\psi\right)\neq-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}y\right)x\psi=0.$$

9. 此二等式对于算符一般都不成立.

(1) $(\hat{g}+\hat{f})^2=\hat{g}^2+\hat{f}^2+\hat{g}\hat{f}+\hat{f}\hat{g}\neq\hat{g}^2+\hat{f}^2+2\hat{g}\hat{f}$ (因一般 $\hat{g}\hat{f}\neq\hat{f}\hat{g}$).

(2) $e^{\hat{g}}$ 与 $e^{\hat{f}}$ 只是形式上借用指数函数符号，并不是完全具有指数的所有性质. 实际上它是通过与指数展开级数相类比而定义的.

$$e^{\hat{g}}\cdot e^{\hat{f}}=\left(1+\hat{g}+\frac{\hat{g}^2}{2!}+\cdots\right)\left(1+\hat{f}+\frac{\hat{f}^2}{2!}+\cdots\right)$$

$$\neq\left[1+(\hat{g}+\hat{f})+\frac{(\hat{g}+\hat{f})^2}{2!}+\cdots\right),$$

故

$$e^{\hat{g}}\cdot e^{\hat{f}}\neq e^{\hat{g}+\hat{f}}.$$

10. 矢量算符运算兼有矢量运算与算符运算的特点.

例如，$\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{r}=\hat{p}_x\hat{x}+\hat{p}_y\hat{y}+\hat{p}_z\hat{z}$，(矢量标积运算)

$\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{r}\neq\hat{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}$. (算符不对易)

又如，$\hat{\boldsymbol{L}}=\hat{r}\times\hat{\boldsymbol{p}}=(\hat{y}\hat{p}_z-\hat{z}\hat{p}_y)\boldsymbol{e}_x+(\hat{z}\hat{p}_x-\hat{x}\hat{p}_z)\boldsymbol{e}_y+(\hat{x}\hat{p}_y-$

$$\hat{y}\hat{p}_x)\boldsymbol{e}_z=\mathrm{i}\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial z}\right)\boldsymbol{e}_x+\left(x\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial x}\right)\boldsymbol{e}_y+\left(y\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial y}\right)\boldsymbol{e}_z.$$

可见，矢量算符运算是矢量运算与算符运算的综合.

11. 这样的推导不对，应当按定义进行运算

$$\hat{L}\hat{F}\psi=\hat{L}(\hat{F}\psi)=-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}\times\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}(\hat{F}\psi)$$

$$=-\mathrm{i}\hbar\left(\boldsymbol{r}\times\frac{\partial F}{\partial\boldsymbol{r}}\right)\psi-\mathrm{i}\hbar\left(\boldsymbol{r}\times\hat{F}\frac{\partial\psi}{\partial\boldsymbol{r}}\right),$$

故

$$\hat{L}\hat{F}=-\mathrm{i}\hbar\left[\left(\boldsymbol{r}\times\frac{\partial\hat{F}}{\partial\boldsymbol{r}}\right)+\boldsymbol{r}\times\hat{F}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}\right].$$

12. 设 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 均为线性算符，ψ_1 与 ψ_2 为任意函数.

$$(\hat{A}+\hat{B})(c_1\psi_1+c_2\psi_2)=c_1\hat{A}\psi_1+c_1\hat{B}\psi_1+c_2\hat{A}\psi_2+c_2\hat{B}\psi_2$$

$$=c_1(\hat{A}+\hat{B})\psi_1+c_2(\hat{A}+\hat{B})\psi_2,$$

故线性算符之和仍为线性算符.

$$\hat{A}\hat{B}(c_1\psi_1+c_2\psi_2)$$

$$=\hat{A}[\hat{B}(c_1\psi_1+c_2\psi_2)]$$

$$=\hat{A}[c_1\hat{B}\psi_1+c_2\hat{B}\psi_2]$$

$$=c_1\hat{A}\hat{B}\psi_1+c_2\hat{A}\hat{B}\psi_2.$$

故线性算符之积仍为线性算符. 自然，其乘幂仍为线性算符.

13. $(\hat{A}+\hat{B}+\cdots)^\dagger=\hat{A}^\dagger+\hat{B}^\dagger+\cdots=\hat{A}+\hat{B}+\cdots,$

所以厄米算符之和仍为厄米算符.

$$(\hat{A}\hat{B}\cdots\hat{F})^\dagger=\hat{F}^\dagger\cdots\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger=\hat{F}\cdots\hat{B}\hat{A}\neq\hat{A}\hat{B}\cdots\hat{F},$$

所以厄米算符之积未必仍为厄米算符.

$$(\hat{A}^n)^\dagger=(\underbrace{\hat{A}\cdots\hat{A}}_{n\text{个}})^\dagger=\hat{A}^\dagger\cdots\hat{A}^\dagger=\hat{A}^n,$$

所以厄米算符之自乘幂仍为厄米算符.

14. 厄米算符具有如下特性.

① 厄米算符的本征值为实数；

② 厄米算符在任何态中的平均值亦为实数;

③ 厄米算符属于不同本征值的本征函数彼此正交;

④ 描写力学量的厄米算符的本征函数系是完全系.

15. 力学量必须为线性算符. 这是由量子态叠加原理所要求的.

真实力学量的任何测量值当然必须是实数，因此它的本征值必为实数，这就决定了力学量必须由厄米算符来表达.

16. 事实上一个算符不一定在整个空间都有定义，量子力学中最重要的力学量如动量 $\hat{p}=-\mathrm{i}\hbar\nabla$、动能 $\hat{T}=\frac{\hat{p}^2}{2m}$ 都是微分算符，它们对希尔伯特空间中有可微性的 ψ 才有作用.

算符作为希尔伯特空间$\mathscr{H}$上的映射，与函数类似，必须指明它的定义域.

厄米算符的定义域 $D(\hat{F})$ 是指$\mathscr{H}$空间中，使 $\hat{F}$ 能作为厄米算符作用的那些元素的集合.

因此，厄米算符完整的定义应为:

如 $\hat{F}$ 定义域为 $D(F)$，对所有 $\varphi\in D(F)$ 及 $\psi\in D(F)$，关系式 $(\varphi,\ \hat{F}\psi)=(\hat{F}\varphi,\psi)$ 成立，则 $\hat{F}$ 是厄米算符.

例如，$\mathscr{H}$空间上的位置算符 $\hat{x}$ 定义为

$$\hat{x}\psi(x)=x\psi(x),$$

$\hat{x}$ 的定义域 $D(x)=\left\{\psi(x):\ \int_{-\infty}^{\infty}x|\psi(x)|^2\mathrm{d}x<\infty\right\}$.

可见 $\hat{x}$ 是对平方可积函数空间中，满足附加条件 $x|\psi(x)|^2$ 也可积的那些 $\psi(x)$才有定义. 从数学上严格说，厄米算符定义域应加上 $D(F)$ 在$\mathscr{H}$内稠密这个条件，即 $D(F)$是稠域. 其数学含义是空间$\mathscr{H}$内任一 ψ 的邻域都含有属于$D(F)$的 ψ，从物理上就意味着虽然 $D(F)$不是整个$\mathscr{H}$空间，但$\mathscr{H}$空间处处都存在属于$D(F)$的 ψ.

17. 这是个数学问题，实质就是找满足什么条件的 ψ 才属于

$\hat{F}$ 的定义域. 量子力学中往往通过令$(\varphi,\hat{F}\psi)-(\hat{F}\varphi,\psi)=0$ 而找出波函数应满足的条件,其中边界条件(包括无穷远条件) 起着重要作用(见下题).

18. 动量算符 $\hat{p}_x$ 如满足$\int_{-\infty}^{\infty}\varphi^*\hat{p}_x\psi\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{\infty}(\hat{p}_x\varphi)^*\psi\mathrm{d}x$才具有厄米性,以 $\hat{p}_x=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ 代入上式左边,并利用分部积分法

$$\int_{-\infty}^{\infty}\varphi^*\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi\mathrm{d}x=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\varphi^*\psi\Big|_{-\infty}^{\infty}+\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x}\right)^*\psi\mathrm{d}x,$$

可见,只要波函数满足的无穷远条件使 $\varphi^*(+\infty)\psi(+\infty)=\varphi^*(-\infty)\psi(-\infty)$,$\hat{p}_x$ 即为厄米的. 通常取无穷远处波函数为零. 这与束缚态条件是一致的.

至于算符 $\hat{p}_x^n$ 的厄米性,以 $n=3$ 为例,$\hat{p}_x^3=\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^3$. 对 $\int_{-\infty}^{\infty}\varphi^*\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^3\psi\mathrm{d}x$ 用分部积分(连用三次)则

$$\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{\infty}\varphi^*\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^3\psi\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\right)^3\varphi^*\mathrm{d}\left(\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}\right)\\
&=\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\right)^3\varphi^*\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x}\Big|_{-\infty}^{\infty}-\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\right)^3\frac{\mathrm{d}\varphi^*}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}\left(\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right)\\
&=\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\right)^3\left[\varphi^*\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}-\frac{\mathrm{d}\varphi^*}{\mathrm{d}x}\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right]_{-\infty}^{\infty}+\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\right)^3\frac{\mathrm{d}^3\varphi^*}{\mathrm{d}x^3}\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x\\
&=\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\right)^3\left[\varphi^*\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}-\frac{\mathrm{d}\varphi^*}{\mathrm{d}x}\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}+\frac{\mathrm{d}^2\varphi^*}{\mathrm{d}x^2}\psi\right]_{-\infty}^{\infty}\\
&\quad+\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}^3\varphi}{\mathrm{d}x^3}\right)^*\psi\mathrm{d}x.
\end{aligned}$$

只有上式中第一项括号内 3 项总和为零,$\hat{p}^3$ 才是厄米算符,由于该项中包括了波函数及其导数,所以只有波函数本身的无穷远条件是不够的,$\hat{p}_x^n$ 的厄米性要求波函数的导数也满足一定的无穷远条件(如均取为零……).

$\hat{p}^n$的厄米性和$\hat{p}$的厄米性相比对波函数有了更多的要求，实质上这正说明 $\hat{p}$ 和 $\hat{p}^n$ 作为厄米算符的定义域不同，$\hat{F}^n$ 的厄米定义域比 $\hat{p}$ 的更"小"些.

19. (1) $Au=\lambda u$,

$$\hat{A}(c_1u_1+c_2u_2)=c_1\lambda u_1+c_2\lambda u_2=c_1\hat{A}u_1+c_2\hat{A}u_2,$$

故 $\hat{A}$ 是线性算符.

(2) $\hat{B}u=u^*$.

$$\hat{B}cu=(cu)^*=c^*u^*=c^*\hat{B}u,$$

当 c 为非实数时

$$\hat{B}cu=c^*\hat{B}u\neq c\hat{B}u,$$

故 $\hat{B}$ 非线性算符而是反线性算符.

(3) $\hat{C}u=u^2$,

$$\hat{C}(\lambda u)=\lambda^2u^2=\lambda^2\hat{C}u,$$

故 $\hat{C}$ 非线性算符.

(4) $\hat{D}u=\dfrac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}$,

$$\hat{D}(c_1u_1+c_2u_2)=c_1\frac{\mathrm{d}u_1}{\mathrm{d}x}+c_2\frac{\mathrm{d}u_2}{\mathrm{d}x}=c_1\hat{D}u_1+c_2\hat{D}u_2,$$

故 $\hat{D}$ 为线性算符.

(5) $\hat{E}u=\dfrac{1}{u}$,

$$\hat{E}(cu)=\frac{1}{cu}=\frac{1}{c}\hat{E}u,$$

故 $\hat{E}$ 不是线性算符.

(6) $\hat{F}=[\hat{H},\hat{p}]$, $\hat{H}$、$\hat{p}$ 均为线性算符,

$$\begin{aligned}\hat{F}(c_1u_1+c_2u_2)&=[\hat{H},\hat{p}](c_1u_1+c_2u_2)\\&=c_1[\hat{H},\hat{p}]u_1+c_2[\hat{H},\hat{p}]u_2\\&=c_1\hat{F}u_1+c_2\hat{F}u_2,\end{aligned}$$

故 $\hat{F}$ 为线性算符.

20. 动量本征函数 $\psi_p(x)=Ne^{ip_x x/\hbar}$,

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*_{p'_x}(x)\psi_{p'_x}(x)\mathrm{d}x=|N|^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{i(p'_x-p_x)x/\hbar}\mathrm{d}x$$

$$=|N|^2\lim_{m\to\infty}\int_{-m}^{+m}e^{i(p'_x-p_x)x/\hbar}\mathrm{d}x$$

$$=|N|^2\hbar\lim_{m\to\infty}\frac{2\sin[(p'_x-p_x)m/\hbar]}{p'_x-p_x}$$

$$=|N|^2 2\pi\hbar\delta(p'_x-p_x),\quad\left[\text{已知}\lim_{m\to\infty}\frac{\sin my}{\pi y}=\delta(y)\right]$$

取 $N=1/\sqrt{2\pi\hbar}$ 则

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*_{p'_x}(x)\,\psi_{p_x}(x)\mathrm{d}x=\delta(p'_x-p_x),$$

即 $$\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-i(p'_x-p)x/\hbar}\mathrm{d}x=\delta(p'_x-p_x).$$

上式中当 $p'_x=p_x$ 时 $\delta(p'_x-p_x)=\infty$ 正说明 $\psi_{p_x}(x)$ 不能归一化，归一化波函数的本来含义是指波函数的归一化积分值等于 1，现在，连续谱本征函数 $\psi_{p_x}(x)$ 的归一化积分等于 δ 函数. 对比之下，人们常称：连续谱本征函数“归一化”为 δ 函数.

为了区别是否真正归一化，较好的提法是：连续谱本征函数不能归一化为1，只能“归一化”为 δ 函数.

21. 设波包1：

$$\psi_{p_1p_2}=\int_{p_1}^{p_2}e^{ipx/\hbar}\,\mathrm{d}p,\quad\text{波包2：}\psi_{p'_1p'_2}=\int_{p'_1}^{p'_2}e^{ip'x/\hbar}\mathrm{d}p.$$

为了讨论波包的正交归一化. 求

$$(\psi_{p_1p_2},\,\psi_{p'_1p'_2})=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*_{p_1p_2}(x)\,\psi_{p'_1p'_2}(x)\,\mathrm{d}x$$

$$=\int_{p_1}^{p_2}\mathrm{d}p\int_{p'_1}^{p'_2}\mathrm{d}p'\int_{-\infty}^{\infty}e^{-i(p-p')x/\hbar}\mathrm{d}x.$$

已知动量本征函数"归一化"为 δ 函数，即

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

则
$$(\psi_{p_1p_2},\ \psi_{p_1'p_2'})=2\pi\hbar\int_{p_1}^{p_2}dp\int_{p_1'}^{p_2'}\delta(p'-p)dp'$$

由于$\int_{p_1'}^{p_2'}\delta(p'-p)dp'=\begin{cases}1 & \text{在间隔}(p_1', p_2')\text{内}\\ 0 & \text{在间隔}(p_1', p_2')\text{外},\end{cases}$

故
$$(\psi_{p_1p_2},\ \psi_{p_1'p_2'})=2\pi\hbar\int_{(p_1,p_1')_{\max}}^{(p_2,p_2')_{\min}}dp=2\pi\hbar[(p_2,p_2')_{\min}-(p_1,p_1')_{\max}].$$

假设组成两波包的动量间隔(p_1, p_2)及(p_1', p_2')如图 25 所示，

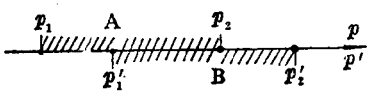


图 25

图中A点即为$(p_1, p_1')_{\max}$，B点即为$(p_2p_2')_{\min}$.

可见，积分时由于 δ 函数的出现，对动量积分只对间隔(p_1, p_1')与(p_2, p_2')的重叠区进行.

为了讨论波包的正交归一化，只考察以下两种情形：

(1) $\psi_{p_1p_2}$与$\psi_{p_1'p_2'}$为同一波包，即间隔(p_1, p_2)与(p_1', p_2')完全重合，如图 26(a). 此时$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*_{p_1p_2}(x)\psi_{p_1p_2}(x)dx=2\pi\hbar(p_2-p_1)$.

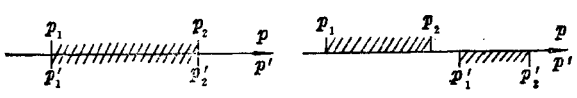


图 26

因此，归一化波包为

$$\psi_{p_1p_2}(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar(p_2-p_1)}}\int_{p_1}^{p_2}e^{ipx/\hbar}dp.$$

(2) 如图 26(b) 间隔(p_1, p_2)与(p_1', p_2')完全不重叠，波包 1 与波包 2 满足.

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*_{p_1p_2}(x)\psi_{p_1'p_2'}(x)dx=0.\ \text{(即波包的正交性)}$$

其他连续谱本征函数，如由能量邻近的连续谱本征函数叠加而成的"波包"也是平方可积的. 请参阅: A·梅西亚，《量子力学》第一卷，科学出版社，1986 年，p. 114，p. 190.

总之，虽然连续谱本征函数本身不能归一化，但由这些函数构成的波包具有有限模方却是平方可积的，因而可以正交归一化. 实用中往往以平面波$\psi_p(x)$代替波包$\psi_{p_1p_2}(x)$，波包的正交归一化也就以$\psi_p(x)$归一化为δ函数取代了.

数学上波包$\psi_{p_1p_2}(x)$称为$\psi_p(x)$(或$\hat{p}$)的本征微分(eigendifferenfial). 一般地说连续谱本征函数本身不能正交归一化，但其本征微分是可以正交归一化的. 可参阅上面引用的梅西亚的书及布洛欣采夫的《量子力学原理》下册，吴伯泽译，1981年，人教版，p. 697，附录III.

22. 连续谱本征函数的另一种直观、实用的处理方式是把连续谱本征值问题，以另一个有完全离散谱的本征值问题来取代，最后取极限情况离散谱又变为连续谱.

(1) 对平面波(动量本征函数)的箱归一化是首先把粒子限制在有限空间(边长为L的立方箱)中，最后再令$L\to\infty$. 对一维情况粒子限制在$\left[-\frac{L}{2},\ \frac{L}{2}\right]$中运动，求$\hat{p}_x$的本征解时当然要问$\psi$应满足的边界条件是什么？为了使$\hat{p}_x$的本征值为实数，$\hat{p}_x=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$应为厄米的，但$\hat{p}_x$的厄米性是在无限空间中利用了无穷远处$\psi=0$

这个边界条件证明的. 为了使 $\hat{p}_x$ 在有限空间中仍为厄米就要求对于任何波函数 ψ 与 φ，按厄米算符定义应有

$$\int_{-L/2}^{L/2}\varphi^*\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}\psi\right)\mathrm{d}x-\int_{-L/2}^{L/2}\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)^*\varphi\,\mathrm{d}x=0$$

即
$$\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\int_{-L/2}^{L/2}\frac{\partial}{\partial x}(\varphi^*\psi)\,\mathrm{d}x=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\varphi^*\psi\Big|_{-L/2}^{L/2}=0.$$

故
$$\varphi^*(L/2)\psi(L/2)-\varphi^*(-L/2)\psi(-L/2)=0,$$

或
$$\frac{\psi(L/2)}{\psi(-L/2)}=\frac{\varphi^*(-L/2)}{\varphi^*(L/2)}=\text{常数，与}\psi\text{和}\varphi\text{无关.}$$

这就要求，对任意波函数 $\psi(x)$ 必需满足

$$\psi(-L/2)/\psi(L/2)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha},\ \alpha\text{为实数.}$$

相因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}$ 一次选定后，对所有波函数均相同，习惯上取 $\alpha=0$，于是得出周期性边界条件

$$\psi(L/2)=\psi(-L/2).$$

在这个周期性边界条件下 $\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}$ 的本征值问题的本征值谱是离散的 $p_n=\frac{2\pi\hbar}{L}n$，$n=0,\pm1,\pm2,\cdots$.

与 p_n 对应的归一化本征函数为 $\psi_{p_n}(x)=\frac{1}{\sqrt{L}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_nx}$.

在 $L\to\infty$ 极限下 $p_{n+1}-p_n=\frac{\hbar}{L}\to0$，本征值谱变为连续谱. 这个结论很容易推广到三维，这就是对平面波(动量本征函数)的箱归一化.

(2)①对于位置 $\hat{x}$ 的本征函数，我们先把位置 x 所在区间分为相等的、长度为 e 的小段(图 27)，让连续变量 x 只取分立值 $x^\times=ne$ ($n=0,\pm1,\pm2,\cdots,\pm\infty$)，波函数 $\psi(x)$ 则以在每小段中为常数的

① 参阅：曾谨言，《量子力学》上册，科学出版社，1981，p. 141；
A·梅西亚，《量子力学》第一卷，科学出版社，1986p. 196.

$\psi^{\times}(x)$取代，即 $\psi(x)\sim\psi^{\times}(x)=\psi(x^{\times})=\psi(n\varepsilon)$.

$$x-\varepsilon<n\varepsilon\leqslant x \text{ 或 } n\varepsilon\leqslant x<(n+1)\varepsilon.$$

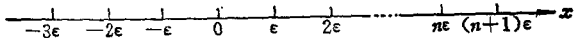


图 27

当 $\varepsilon\to 0$ 时 $x^{\times}\to x$, $\psi^{\times}(x)\to\psi(x)$.

对于算符 $\hat{x}^{\times}$，属于本征值 $n\varepsilon$ 的本征函数为

$$u_n(x)=\begin{cases}\varepsilon^{-1/2} & \text{当 } n\varepsilon\leqslant x<(n+1)\varepsilon\\ 0 & \text{其余情况.}\end{cases}$$

显然，u_n满足正交归一关系$(u_n,u_{n'})=\delta_{nn'}$.

23. 由 $\hat{U}^{\dagger}=e^{-i\alpha\hat{F}^{\dagger}}$，已知$\hat{F}$是厄米的，即 $\hat{F}=\hat{F}^{\dagger}$，因而 $\hat{U}^{\dagger}=e^{-i\alpha\hat{F}}$, $\hat{U}\hat{U}^{\dagger}=\hat{U}^{\dagger}\hat{U}=1$，所以 $\hat{U}$ 是幺正算符. 讨论对称性时，我们将看到. 连续对称变换如空间平移、空间转动等的变换算符是幺正算符$\hat{U}$. 但一般不是厄米的，不能作为力学量. 通过$\hat{U}=e^{i\alpha\hat{F}}$ 可找到一个厄米算符 $\hat{F}$、由于 $\hat{U}$ 与体系哈密顿量$\hat{H}$对易，所以 $\hat{F}$ 也与$\hat{H}$对易，$\hat{F}$ 称为变换 $\hat{U}$ 的生成元. 并且 $\hat{F}$是个守恒的厄米算符，所代表的力学量是个守恒量.

24. 如取 $\hat{A}=\dfrac{\hat{F}+\hat{F}^{\dagger}}{2}$, $\hat{B}=\dfrac{\hat{F}-\hat{F}^{\dagger}}{2}$，则 $\hat{A}=\hat{A}^{\dagger}$, $-\hat{B}^{\dagger}=\hat{B}$，满足 $\hat{F}=\hat{A}+\hat{B}$，但 $\hat{F}\neq\hat{F}^{\dagger}=\hat{A}-\hat{B}$.

这样，由一个非厄米算符 $\hat{F}$ 总可“厄米化”，即由 $\hat{F}$ 及 $\hat{F}^{\dagger}$ 总可以构成厄米算符 $\hat{A}=\dfrac{\hat{F}+\hat{F}^{\dagger}}{2}$ 或 $-i\hat{B}=\dfrac{\hat{F}-\hat{F}^{\dagger}}{2i}$.

25. 只对于线性算符成立.

$$\left[\sum_i\hat{A}_i\sum_k\hat{B}_k\right]\equiv\frac{1}{i\hbar}\left\{\left(\sum_i\hat{A}_i\right)\left(\sum_k\hat{B}_k\right)-\left(\sum_k\hat{B}_k\right)\left(\sum_i\hat{A}_i\right)\right\}$$

$$=\frac{1}{i\hbar}\left(\sum_{i\,k}\hat{A}_i\hat{B}_k-\sum_{i\,k}\hat{B}_k\hat{A}_i\right)=\sum_{i\,k}[\hat{A}_i,\hat{B}_k]$$

26. 不一定. 对一维自由粒子，$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}$，属于$\hat{H}$的同一本征值的两个可能的本征函数. $\psi_1=e^{\frac{i}{\hbar}px}$与$\psi_2=\sin\frac{p}{\hbar}x$不是正交的.

但$e^{\frac{i}{\hbar}px}$和$e^{-\frac{i}{\hbar}px}$属于$\frac{p^2}{2m}$的同一本征值，它们却是正交的.

可见，对于 $\hat{F}$ 的同一本征值的两个本征函数是否正交，从正交性定理作不出确定的回答.

27. (1) 对易关系不变，仍满足$[\hat{x},\hat{p}]=i\hbar$.

(2) 本征值方程$\left[-i\hbar\frac{d}{dx}+f(x)\right]\psi_p(x)=p\psi_p(x)$的解为

$$\psi_p(x)=Ae^{\frac{i}{\hbar}\left[px-\int^x f(x)dx\right]},$$

不再是平面波，具体形式与 $f(x)$ 选取有关，如取 $f(x)=x$ 则

$$\psi_p(x)=Ae^{\frac{i}{\hbar}\left(px-\frac{x^2}{2}\right)}.$$

本征值 p 仍为连续谱$-\infty<p<+\infty$，非简并.

$|\psi_p(x)|^2=A^2$，相对概率分布不变.

事实上，如设$g(x)=\int^x f(x)dx$，则 $\psi_p(x)=Ae^{\frac{i}{\hbar}[px-g(x)]}$

$$=e^{-\frac{i}{\hbar}g(x)}\cdot\psi'_p(x),$$

式中 $\psi'_p(x)=Ae^{\frac{i}{\hbar}px}$为惯用的动量本征态.

因而，$f(x)$的出现只使动量本征态差一相因子$e^{-\frac{i}{\hbar}g(x)}$.

(3) $\psi(x)=\int c(p)\psi_p(x)\,dp=e^{-\frac{i}{\hbar}g(x)}\int c(p)\psi'_p(x)dp$

$$=e^{-\frac{i}{\hbar}g(x)}\cdot\psi'(x).$$

可见 $\psi(x)$与惯用的$\psi'(x)$只差一相因子，它们描写相同的态.

(4) 首先$\langle\psi|x|\psi\rangle=\langle\psi'|x|\psi'\rangle$，其次由于

$$\left[\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}+f(x)\right]\psi=\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}g(x)}\cdot\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}\psi'}{\mathrm{d}x},$$

因而$\left\langle\psi\left|\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}+f(x)\right|\psi\right\rangle=\left\langle\psi'\left|\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right|\psi'\right\rangle$.

一般力学量，算符相应改变为$\hat{F}\left[\hat{x},-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}+f(x)\right]$仍具有相同的本征值，有一一对应的本征函数.

总之，$f(x)$的出现，不引起体系物理性质上实质改变. 为简便，通常取$f(x)=0$是完全可以的(从表象理论对此题的讨论见表象章32题).

28. (1) 算符$\hat{F}_r=\hat{r}^{-1}(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})=\hat{r}^{-1}(\hat{x}\hat{p}_x+\hat{y}\hat{p}_y+\hat{z}\hat{p}_z)$.

取$\hat{F}_r$的厄米共轭

$$\begin{aligned}(\hat{F}_r)^\dagger&=[\hat{r}^{-1}(\hat{x}\hat{p}_x+\hat{y}\hat{p}_y+\hat{z}\hat{p}_z)]^\dagger=(\hat{x}\hat{p}_x)^\dagger(\hat{r}^{-1})^\dagger\\&\quad+(\hat{y}\hat{p}_y)^\dagger(\hat{r}^{-1})^\dagger+(\hat{z}\hat{p}_z)^\dagger(\hat{r}^{-1})^\dagger\\&=\hat{p}_x\hat{x}\hat{r}^{-1}+\cdots\neq\hat{r}^{-1}\hat{x}\hat{p}_x+\cdots,\end{aligned}$$

即$(\hat{F}_r)^\dagger=\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\frac{1}{\hat{r}}$.

由于$\hat{p}_x$与$\hat{x}$及$\hat{p}_x$与$\hat{r}\cdots$都是不可对易的，$\hat{F}_r{}^\dagger\neq\hat{F}_r$，$\hat{r}^{-1}(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})$不是厄米算符.

(2) $\hat{F}_r$不是厄米算符但可由它构成厄米算符

$$\hat{p}_r=\frac{1}{2}[\hat{F}_r+\hat{F}_r{}^\dagger]=\frac{1}{2}\left[\frac{1}{\hat{r}}\,\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}\frac{1}{\hat{r}}\right].$$

而以$\hat{p}_r$作为径向动量，其中

$$\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}=-\mathrm{i}\hbar\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\cdot\nabla=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial r},$$

$$\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}\frac{1}{r}=-\mathrm{i}\hbar\nabla\cdot\boldsymbol{e}_r.$$

这里$\boldsymbol{e}_r=\frac{\boldsymbol{r}}{r}$，为$\boldsymbol{r}$方向单位径矢.

设 $f(r)$ 为 r 的可微函数，则

$$\hat{p}_r f(r)=\frac{-\mathrm{i}\hbar}{2}\left(\frac{\partial}{\partial r}+\nabla\cdot\boldsymbol{e}_r\right)f=\frac{-\mathrm{i}\hbar}{2}\left(\frac{\partial f}{\partial r}+\boldsymbol{e}_r\cdot\nabla f+f\nabla\cdot\boldsymbol{e}_r\right)$$

$$=\frac{-\mathrm{i}\hbar}{2}\left(\frac{\partial f}{\partial r}+\frac{\partial f}{\partial r}+\frac{2f}{r}\right)=-\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial f}{\partial r}+\frac{f}{r}\right)$$

$$=\left[-\mathrm{i}\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\right]f(x).$$

厄米算符 $\hat{p}_r=-\mathrm{i}\hbar\dfrac{1}{r}\dfrac{\partial}{\partial r}r=\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(\dfrac{\partial}{\partial r}+\dfrac{1}{r}\right)$ 通常称之为径向动量.

很容易证明 $[r,p_r]=\mathrm{i}\hbar$.

(3) 确定厄米算符 $\hat{p}_r$ 的定义域，就是确定对在什么条件下的平方可积函数 $\psi(r)$，$\hat{p}_r$ 才是厄米的. 按我们曾讨论过的确定厄米算符定义域的方法，必须有

$$0=(\psi,\hat{p}_r\psi)-(\psi,\hat{p}_r\psi)^*\equiv\int[\psi^*(p_r\psi)-(p_r\psi)^*\psi]\mathrm{d}\tau$$

$$=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\int_0^{2\pi}\sin\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\int_0^{\infty}\left[\frac{\partial}{\partial r}|r\psi|^2\right]\mathrm{d}r.$$

由于 $r\to\infty$ 时 $r\psi$ 为零，上式只在 $\lim\limits_{r\to0}r\psi(r)=0$ 时成立，对满足这个条件的平方可积函数，算符 $\hat{p}_r$ 才是厄米的.

但对 $\hat{p}_r$ 的本征值方程 $\hat{p}_r f(r)=bf(r)$（设 $\hat{p}_r$ 的本征函数为 $f(r)$，本征值以 b 表示），

即 $$\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}[rf(r)]=bf(r),$$

解的形式为 $f(r)\sim\dfrac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}br/\hbar}}{r}$，无论 b 取什么值都不满足条件 $\lim\limits_{r\to0}rf(r)=0$.

因而 $\hat{p}_r$ 的本征值问题无解.

尽管 $\hat{p}_r$ 是有经典对应的厄米算符，又满足 $[r,p_r]=\mathrm{i}\hbar$，但 $\hat{p}_r$ 不是个可观察量或者说 $\hat{p}_r$ 不是观察算符. 并且，在中心力场中，哈密

顿量的能量部分 $\hat{T}=\frac{\hat{p}_r^2}{2m}+\frac{\hat{L}^2}{2mr^2}$ 总与势能 $V(r)$ 相伴出现，没有单独依赖于径向动量 $\hat{p}_r$ 的可观察的物理效应，所以，径向动量算符 $\hat{p}_r$ 只是个极有用的计算工具，对径向动量全面的分析请参阅 R. L. Liboff 等，*Am. J. Phys*, 41, 926 (1973).

数学上，径向动量算符也是个典型例子，数学上可以采取扩张定义域的手段，改变一些条件，使有的算符在新的定义域中是观察算符. 广义函数理论中可严格地证明①

径向动量 $\hat{p}_r$ 是不可能通过扩大定义域使之成为观察算符的

29. 由于 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 均为厄米算符，由定义

$(\psi,\hat{A}\hat{B}\psi)=(\hat{A}\psi,\hat{B}\psi)=(\hat{B}\hat{A}\psi,\psi)=(\psi,\hat{B}\hat{A}\psi)^*$.

如 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 为实算符，即 $\hat{A}^*=\hat{A}$, $\hat{B}^*=\hat{B}$, 则

$(\psi,\hat{B}\hat{A}\psi)^*=(\psi^*,\hat{B}\hat{A}\psi^*)$.

又如 ψ 为实函数即 $\psi^*=\psi$, 则

$(\psi,\hat{A}\hat{B}\psi)=(\psi^*,\hat{B}\hat{A}\psi^*)=(\psi,\hat{B}\hat{A}\psi)$.

因而等式 $(\psi,\hat{A}\hat{B}\psi)=(\psi,\hat{B}\hat{A}$ 中) 对于不对易的厄米算符 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 成立的条件是：$\hat{A}$、$\hat{B}$ 及 ψ 均为实.

30. (1) 因为 $\int_0^\infty \psi_1^*\left(\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_2\right)\mathrm{d}x-\int_0^\infty\left(\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_1\right)^*\psi_2\mathrm{d}x=\mathrm{i}\psi_1^*\psi_2\Big|_0^\infty=0$, 可见，在给定条件，特别是 $\psi(0)=0$ 条件下，$\hat{F}=\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ 是厄米算符.

(2) 本征值方程 $\quad \mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f(x)=kf(x)$

形式上虽有解 $f(x)=\begin{cases}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} & (x>0)\\ 0 & (x=0),\end{cases}$ 但此解不宜描述实际本征态，在 $x=0$ 处不连续.

① Robert D. Richtmyer, *Principles of Advanced Mathematical Physics*, Vol. *I* (1978), p. 139.

31. 假定 $\hat{f}$ 与 $\hat{g}$ 都是力学量.

(1) $(\hat{f}+\mathrm{i}\hat{g})^{\dagger}=\hat{f}-\mathrm{i}\hat{g}$，非厄米算符，不是力学量.

(2) $(\hat{f}-\mathrm{i}\hat{g})^{\dagger}=\hat{f}+\mathrm{i}\hat{g}$，非厄米算符，不是力学量.

(3) $(\hat{f}\hat{g}+\hat{g}\hat{f})^{\dagger}=\hat{g}\hat{f}+\hat{f}\hat{g}$，厄米算符，可作为力学量.

(4) $(\hat{f}\hat{g}-\hat{g}\hat{f})^{\dagger}=\hat{g}\hat{f}-\hat{f}\hat{g}=-(\hat{f}\hat{g}-\hat{g}\hat{f})$，非厄米算符，不是力学量.

(5) $\mathrm{i}(\hat{f}\hat{g}+\hat{g}\hat{f})^{\dagger}=-\mathrm{i}(\hat{g}\hat{f}+\hat{f}\hat{g})$，非厄米算符，不是力学量.

(6) $\mathrm{i}(\hat{f}\hat{g}-\hat{g}\hat{f})^{\dagger}=-\mathrm{i}(\hat{g}\hat{f}-\hat{f}\hat{g})=\mathrm{i}(\hat{f}\hat{g}-\hat{g}\hat{f})$，厄米算符，可作力学量.

32. 如果函数 $F(x)$ 任意阶可导，那么算符函数 $F(\hat{A})$ 可按其泰勒展开式定义，

$$F(\hat{A})=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{F^{(n)}(0)}{n!}\hat{A}^n.$$

例如 $\mathrm{e}^{\alpha\hat{A}}=1+\alpha\hat{A}+\frac{\alpha^2}{2!}\hat{A}^2+\cdots+\frac{\alpha^n}{n!}\hat{A}^n+\cdots$.

两个或多个算符的函数也可类似定义，

$$F(\hat{A},\hat{B})=\sum_{n,m=0}^{\infty}\frac{F^{(n,m)}(0,0)}{n!\,m!}\hat{A}^n\hat{B}^m,$$

式中 $F^{(n,m)}(x,y)=\dfrac{\partial^{n+m}F(x,y)}{\partial x^n\partial y^m}$.

注意：如 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 不对易，应明确算符乘积顺序，如约定 $\hat{A}^n\hat{B}^m=\underbrace{\hat{A}\cdots\hat{A}}_{n个}\cdot\underbrace{\hat{B}\cdots\hat{B}}_{m个}$，否则定义将不是单值的.

33. 力学量之间的对易关系，是量子力学中极为重要的关系，它相当于旧量子论中的量子化条件，具有深刻的物理含义. 对易关系表明，经典因果性不是普遍成立的，并指出各类力学量能够同时确定的条件(相互对易)、体现了量子力学的基本特点. 与不确

定原理一样，力学量之间的对易关系也是来源于物质的波粒二象性．从纯理论角度说，它也可以作为量子力学的基本出发点．此外，对于有的力学量，对易关系反映了它的基本特征如 $[\hat{l}_\alpha, \hat{l}_\beta]=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\mathrm{i}\hbar\hat{l}_\gamma$ 就可作为角动量的定义．

34. 力学量之间的对易关系不具有传递性．即如果 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 对易，$\hat{B}$ 与 $\hat{C}$ 对易，但 $\hat{A}$ 与 $\hat{C}$ 未必对易．例如 $[\hat{L}^2, L_x]=0$．$[\hat{L}^2, L_y]=0$，然而 $[\hat{L}_x, \hat{L}_y]\neq 0$．又如 $[\hat{p}_x, \hat{p}_y]=0$ $[\hat{p}_y, \hat{x}]=0$ 但 $[\hat{p}_x, \hat{x}]=\mathrm{i}\hbar\neq 0$.

35.

$$[\hat{x}_\alpha, \hat{x}_\beta]=0, \qquad [\hat{p}_\alpha, \hat{p}_\beta]=0,$$

$$[\hat{l}_\alpha, \hat{l}_\beta]=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\mathrm{i}\hbar\hat{l}_\gamma, \qquad [\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\beta]=\mathrm{i}\hbar\delta_{\alpha\beta},$$

$$[\hat{x}_\alpha, \hat{l}_\beta]=-\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\mathrm{i}\hbar\hat{x}_\gamma, \qquad [\hat{p}_\alpha, \hat{l}_\beta]=-\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\mathrm{i}\hbar\hat{p}_\gamma,$$

$$[\hat{r}^2, \hat{p}_\alpha]=\mathrm{i}\hbar\hat{x}_\alpha, \qquad [\hat{r}^2, \hat{l}_\alpha]=0,$$

$$[\hat{p}^2, \hat{x}_\alpha]=\mathrm{i}\hbar\hat{p}_\alpha, \qquad [\hat{p}^2, \hat{l}_\alpha]=0,$$

$$[\hat{l}^2, \hat{x}_\alpha]=\hbar^2\hat{x}_\alpha+\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}(\hat{x}_\beta\hat{l}_\gamma-\hat{x}_\gamma\hat{l}_\beta),$$

$$[\hat{l}^2, \hat{p}_\alpha]=\hbar^2\hat{p}_\alpha+\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}(\hat{p}_\beta\hat{l}_\gamma-\hat{p}_\gamma\hat{l}_\beta),$$

$$[\hat{l}^2, \hat{l}_\alpha]=0, \qquad [\hat{l}^2, \hat{l}_\pm]=0,$$

$$[\hat{l}_+, \hat{l}_-]=\hbar\hat{l}_z, \qquad [\hat{l}_z, \hat{l}_\pm]=\pm\hbar\hat{l}_z,$$

$$[\hat{l}_y, \hat{l}_\pm]=\pm\mathrm{i}\hbar\hat{l}_z, \qquad [\hat{l}_z, \hat{l}_\pm]=\pm\hbar\hat{l}_\pm,$$

$$[\hat{l}_\alpha, \hat{r}\cdot\hat{p}]=0.$$

式中符号定义为

$$\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}=\begin{cases}1 & \alpha\beta\gamma=123,231,312\\ -1 & \alpha\beta\gamma=132,213,321\\ 0 & \text{任两个指标相同.}\end{cases}$$

36.

(1) $[\hat{A},\hat{B}]=\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}=-(\hat{B}\hat{A}-\hat{A}\hat{B})=-[\hat{B},\hat{A}]$.

(2) $[\hat{A},\hat{A}]=\hat{A}\hat{A}-\hat{A}\hat{A}=0$.

(3) $[\hat{A},S]=\hat{A}S-S\hat{A}=S(\hat{A}-\hat{A})=0.$

(4) $[\hat{A},\hat{B}+\hat{C}]=\hat{A}(\hat{B}+\hat{C})-(\hat{B}+\hat{C})\hat{A}=\hat{A}\hat{B}+A\hat{C}-\hat{B}\hat{A}-\hat{C}\hat{A}$
$=[\hat{A},\hat{B}]+[\hat{A},\hat{C}].$

(5) $[\hat{A},\hat{B}\hat{C}]=\hat{A}\hat{B}\hat{C}-\hat{B}\hat{C}\hat{A}=\hat{A}\hat{B}\hat{C}-\hat{B}\hat{A}\hat{C}+\hat{B}\hat{A}\hat{C}-\hat{B}\hat{C}\hat{A}$
$=[\hat{A}\hat{B}]\hat{C}+\hat{B}[\hat{A}\hat{C}].$

(6) $[\hat{A}\hat{B},\hat{C}]=\hat{A}\hat{B}\hat{C}-\hat{C}\hat{A}\hat{B}=\hat{A}\hat{B}\hat{C}-\hat{A}\hat{C}\hat{B}+\hat{A}\hat{C}\hat{B}-\hat{C}\hat{A}\hat{B}$
$=\hat{A}[\hat{B}\hat{C}]+[\hat{A}\hat{C}]\hat{B}.$

(7) $[\hat{A},[\hat{B},\hat{C}]]+[\hat{B},[\hat{C},\hat{A}]]+[\hat{C},[\hat{A},\hat{B}]]$
$=\hat{A}(\hat{B}\hat{C}-\hat{C}\hat{B})-(\hat{B}\hat{C}-\hat{C}\hat{B})\hat{A}+\hat{B}(\hat{C}\hat{A}-\hat{A}\hat{C})$
$-(\hat{C}\hat{A}-\hat{A}\hat{C})\hat{B}+\hat{C}(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A})-(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A})\hat{C}=0.$

(8) $[\hat{A}^m,\hat{B}^n]=\hat{A}^m\hat{B}^n-\hat{A}^{m-1}\hat{B}^n\hat{A}+\hat{A}^{m-1}\hat{B}^n\hat{A}-\hat{A}^{m-2}\hat{B}^n\hat{A}^2+\cdots$
$+\hat{A}\hat{B}^n\hat{A}^{m-1}-\hat{B}^n\hat{A}^m=\hat{A}^{m-1}\hat{B}^{n-1}[\hat{A},\hat{B}]$
$+\hat{A}^{m-2}\hat{B}^{n-1}[\hat{A},\hat{B}]\hat{A}+\cdots+\hat{B}^{n-1}[\hat{A},\hat{B}]\hat{A}^{m-1}$

$=\sum_{s=0}^{m-1}\hat{A}^{m-s-1}\hat{B}^{n-1}[\hat{A},\hat{B}]\hat{A}^s.$

37. 如果两力学量 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 对易，它们必有完全的共同本征函数系. 反之，如 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 有共同本征态 ψ_{nl}，即 $\hat{A}\psi_{nl}=a_n\psi_{nl}$，$\hat{B}\psi_{nl}=b_l\psi_{nl}$，且 $(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A})\psi_{nl}=(a_nb_l-b_la_n)\psi_{nl}=0$

但只由此式并不能作出 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 是对易的结论. 因为只有对任意波函数 ψ 都有 $(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A})\psi=0$ 时 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 才是对易的. 如果 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 存在一系列的共同本征函数构成完全系，则任何波函数 ψ 都可以展开为

$$\psi=\sum_{n\,l}c_{nl}\psi_{nl}.$$

此时 $\quad(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A})\psi=\sum_{n\,l}c_{nl}(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A})\psi_{nl}=0.$

因而 $\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}=0$，即 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 是对易的. 总之，两算符具有完全

的共同本征函数系的充要条件是这两算符可对易.

38. 一般说来,仅根据 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 是否对易是不能判断这个问题的.

例如,中心力场中,角动量三个分量 L_x、L_y、L_z 中任意两个都是彼此不对易的. 但却存在本征值 $L_x=L_y=L_z=0$ 的共同本征态,可见 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 不可对易时,并不排斥它们某些本征值可同时确定.

另一方面,单从 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 可对易,一般地说也不能断定在给定 ψ_A 态中 $\hat{B}$ 具有完全确定值.

例如,氢原子中尽管 $[\hat{H},\hat{L}]=0$,但除基态外,能级 E_n 是简并的,每个能级 E_n 相应于角动量 $\hat{L}^2$ 的 $(l=0,1,2,\cdots,n-1)$ n 个值,所以,对给定 E_n 的态一般是由不同 $\hat{L}^2$ 值的态的叠加,并不能凭 E_n 已确定及 $\hat{H}$ 与 $\hat{L}^2$ 可对易而判断出 $\hat{L}^2$ 是否具有完全确定值.

这个例子说明,在简并情形下 $\hat{A}$ 的一个值对应着 $\hat{B}$ 的若干个值,$[\hat{A},\hat{B}]=0$ 只保证必有构成完全系的共同本征函数 ψ_{AB} 存在,ψ_{AB} 中 A 与 B 同时具有完全确定值,但对 $\hat{A}$ 的给定的任一本征态 ψ_A,一般地说是 ψ_{AB} 的线性叠加,因而,一般说来 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 的对易性并不能回答本题的问,只有把 $\hat{B}$ 作用在 ψ_A 上,如有 $\hat{B}\psi_A=b\psi_A$,b 是个数,那么 ψ_A 也是 $\hat{B}$ 的本征函数,在 ψ_A 态中,$\hat{B}$ 有完全确定值 b.

只有在不存在简并的特殊情形下,由 $[\hat{A},\hat{B}]=0$ 自动得出 $\hat{A}$ 的任一本征函数同时也是 $\hat{B}$ 的本征函数,$\hat{A}$ 有确定值时 $\hat{B}$ 也必有确定值.

已知一维束缚定态均不简并,例如,一维谐振子中,宇称算符 $\hat{P}$ 与 $\hat{H}$ 对易,与 E_n 对应的能量本征态也是 $\hat{P}$ 的本征态,每个能级都有确定的宇称.

39. (1) 一维自由粒子 $\hat{H}=\dfrac{\hat{p}^2}{2m}=-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial x}$,本征方程 $\hat{H}\psi=E\psi$.

本征值$E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$为双重简并，独立的本征函数只有两个，如$\varphi_1=\cos kx, \varphi_2=\sin kx$，即$\hat{H}\psi_1=E\psi_1, \hat{H}\psi_2=E\psi_2$.

$\hat{H}$的属于本征值$E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$的一般解是上述两个独立本征函数的任意线性叠加，即$\psi_E=\alpha\psi_1+\beta\psi_2$，$\alpha$、$\beta$为任意复数. 例如$\psi_3=e^{ikx}$，验证如下：

$$\hat{H}\psi_E=\hat{H}(\alpha\varphi_1+\beta\varphi_2)=\alpha\hat{H}\varphi_1+\beta\hat{H}\varphi_2=E(\alpha\varphi_1+\beta\varphi_2)=E\psi_E.$$

在希尔伯空间中，函数ψ_1与ψ_2生成一“平面”(二维子空间)，平面上任一矢量都是$\hat{H}$的属于本征值E的本征矢(如图28).

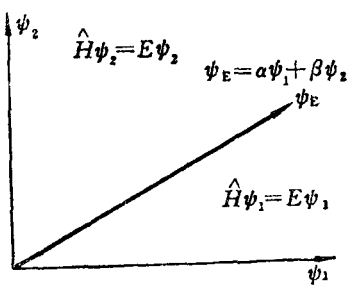


图 28

(2) 动量$\hat{p}$与$\hat{H}$对易，即$[\hat{p},\hat{H}]=0$，$\hat{p}$与$\hat{H}$的共同本征函数ψ_{Ep}可由$\hat{H}$的双重简并的本征函数线性叠加得出. 两个独立的$\hat{p}$与$\hat{H}$的共同本征态为：

$\psi_{Ep+}=\varphi_1+i\varphi_2=e^{ikx}$，本征值$E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$，$p=+\sqrt{2mE}$；

$\psi_{Ep-}=\varphi_1-i\varphi_2=e^{-ikx}$，本征值$E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$，$p=-\sqrt{2mE}$.

对$\hat{H}$仍为简并本征态，对p则是非简并的.

(3) 对任一给定的ψ_E，例如$\psi_E=\psi_1=\cos kx$，则ψ_1不是动量$\hat{p}$的本征态，ψ_1态中$\hat{p}$不具有确定值，尽管$[\hat{p},\hat{H}]=0$，必存在共同本

征函数 $\psi_{E,p}$，但由于 E 是简并的，一个 E 对应两个不同的 $p=\pm\sqrt{2mE}$，所以 ψ_E 一般应为 ψ_{Ep} 的线性叠加，即 $\psi_E=c_+e^{ikx}+c_-e^{-ikx}$.

（4）从以上讨论可看出，如$[\hat{p},\hat{H}]=0,\hat{H}$ 是具有简并的本征值 E 时，$\hat{H}$ 的本征函数 ψ_E 不一定是 $\hat{p}$ 的本征函数 ψ_p. 可粗略地说：简并的算符比非简并的算符是有“更多”的本征态，这个概念可由表示集合的 Venn 图形象地表示出. 数学上通常以矩形（或圆）区域表示全集. 这里，区域中一点代表一个本征函数.. 当$[\hat{A},\hat{B}]=0$，如无简并，$\hat{A}$的任一本征函数必是 $\hat{B}$ 的本征函数，所以ψ_A集合就是 ψ_B集合，Venn 图示如图 29(a).

本题中$[\hat{p},\hat{H}]=0,\hat{H}$ 是简并的，$\hat{p}$ 是非简并的，Venn 图如 29(b)所示.

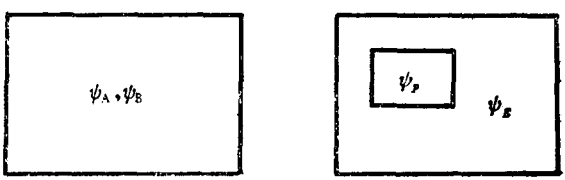


图 29

40. Venn 图如图 30.

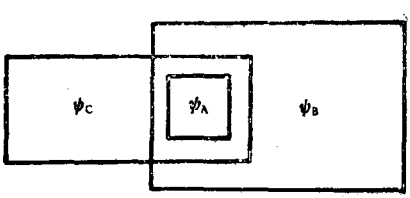


图 30

41.

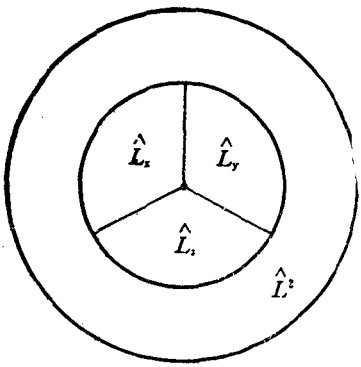


图 31

如图 31，整个圆形区每一点代表 $\hat{L}^2$的一个本征函数，在各个扇形区的点代表 $\hat{L}^2$ 及 $\hat{L}_x$ ($\hat{L}_y$或 $\hat{L}_z$) 的共同本征函数，圆心代表 $\hat{L}$及$\hat{L}^2$的零本征矢[对应本征值 $L_x=L_y=L_z=0$)，边缘环形区代表 $\hat{L}^2$ 的但不属于 $\hat{L}_x$、$\hat{L}_y$、$\hat{L}_z$ 的本征态，例如 $\boldsymbol{L}$ 在空间任意方向分量 $\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{n}$($\boldsymbol{n}$ 为任意方向单位矢量)有确定值的本征态.

图中充分反映了$\hat{L}^2$本征态空间大于包含 $\hat{L}_x$、$\hat{L}_y$、$\hat{L}_z$ 所有本征态的空间.

42.

I. 首先看这些概念的基本定义.

(一) 正交性　定义：函数 ψ_1与ψ_2满足$(\psi_1,\psi_2)=0$ 称 ψ_1与 ψ_2 正交. 函数系 $\psi_n(n=1, 2, \cdots)$中，任意 ψ_k 与 $\psi_l(k\neq l)$ 均满足 $(\psi_k,\psi_l)=0$，称 ψ_n 为正交函数系$(n\neq l)$.

如ψ_n满足$(\psi_k,\psi_l)=\delta_{kl}$，称$\psi_n$为正交归一函数系，简称正归系.

(二) 完全性　希尔伯空间中，一正交归一化函数系的完全性是指希尔伯空间中任一函数 $\psi(x)$可以表示成正交归一化系 $\psi_n(x)$ 的线性组合，

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

这个展开的含义：

(1) 如要求该级数在任一点 x 上收敛于 ψ——逐点收敛，因条件太严，希尔伯空间中很难满足.

(2) 为了能存在完全的正交归一化函数系，减弱收敛性准则，引入"平均收敛"，即 $\psi(x)\doteq\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n(x)$(以等号上加一点表示)

无穷级数 $\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n(x)$ 平均收敛于任一函数 $\psi(x)$，是指当 $m\to\infty$ 时 $\sum_{n=1}^{m}c_n\psi_n(x)$ 与 $\psi(x)$ 的平均距离趋于零，即

$$\lim_{m\to\infty}\int_a^b|\psi(x)-\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n(x)|^2\mathrm{d}x=0.$$

(3) 利用平均收敛概念定义正交归一化函数系的完全性

设 $\psi(x)$ 为希尔伯空间中任一函数 (即任一平方可积函数)，并设 $\psi_n(x)$ 为此空间中一正交归一化函数系. 若存在常数系数 c_n，使得部分和序列 $\sum_{n=1}^{m}c_n\psi_n(x)$ 平均收敛于 $\psi(x)$ 即

$$\lim_{m\to\infty}\int_a^b|\psi-\sum_{n=1}^{m}c_n\psi_n|^2\mathrm{d}x=0.$$

则 ψ_n 是个完全的正交归一化函数系.

要注意区分正交归一化函数系的完全性与希尔伯空间的完全性.

(三) 封闭性　定义：若不存在与函数系 ψ_n 中每个函数正交的非零函数，则正交归一化函数系 ψ_n 称为封闭的.

II. 正交性、完全性、封闭性三者的关系

(一) 完全性、封闭性均指正交归一化函数系而言.

(二) 任一正交归一化函数系不一定是完全系.

例如,函数系 $\psi_n(n=1,2,3,4,5)$是正交归一化系且有完全性则不存在非零的 ψ_6 使$(\psi_n,\psi_6)=0$, 也就是说,互相正交的函数已全包括在此函数系内.

但如只取 ψ_n为 $\psi_1,\psi_2,\psi_3,\psi_4$,仍为正交系. 但不是完全系,因为可有 $\psi_5\neq 0$,使$(\psi_n,\psi_5)=0$.

任一平方可积函数 $\psi(x)$只能以完全系ψ_n展开,不完全系不能作基矢函数.

(三) 定理. 对于希尔伯空间中一个正交归一化函数系,当且仅当它是封闭的,则它是完全的.

证明参阅:F. W. 拜仑,R. W. 富勒,《物理学中的数学方法》第一卷,科学出版社,1982, §5.1,5.2.

(四) 封闭性关系(完全性条件)

封闭性与完全性虽是两个概念,但在希尔伯空间中,它们是等价的. 因而,检验一正交归一化函数系是否完全,可由是否满足封闭性关系式(设只有分立谱)

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1 \quad [x\text{表象中为}\ \sum_n \psi_n^*(x')\psi_n(x)=\delta(x-x')]$$

而定,所以上式亦称完全性条件.

满足完全性条件的正交归一化函数系才能作基矢.

43. 算符 $\hat{F}$ 经宇称变换后,如$\hat{P}\hat{F}\hat{P}=\hat{F}$($\hat{P}$为宇称算符),称$\hat{F}$为偶宇称算符, 简称为偶算符, 如角动量$\hat{\mathbf{L}}=r\times p$,动能算符 $\hat{T}=\frac{\hat{p}^2}{2m}$; 如$\hat{P}\hat{F}\hat{P},=-\hat{F}$,则称 $\hat{F}$为奇算符,如动量 $\hat{p}$,位置 $\hat{x}$.

很易证明:一个偶算符在宇称相反的态间的矩阵元为零.

一个奇算符在宇称相同的态间的矩阵元为零.

它们是计算矩阵元时非常有用的判据.

44. 此话不确切，所谓本征态是针对一定的力学量而言的. 某一特定的量子态可能是某个力学量的本征态，但对于其他力学量而言，就未必是本征态了.

45. 这时测量 $\hat{F}$ 便不能得到确定值，而可能是它的任一本征值. 如将 ψ 展开为 $\hat{F}$ 的本征态的叠加，$\psi=\sum c_n\varphi_n$，则测得 φ_n 的本征值 λ_n 的概率为 $|c_n|^2$. 这正是量子力学基本假设之一(参看本章第 1 题).

46. 力学量根据其本征值谱的特性，可以分为三类：

第一类，其本征值谱总是连续的，如坐标；

第二类，其本征值谱总是离散的，如角动量，宇称等；

第三类，本征值谱可以是连续的，也可以是离散的，或是部分连续，部分离散的，要由体系与外场特性而定，如自由粒子哈密顿量是连续的，谐振子哈密顿量是离散的，氢原子哈密顿量则是部分连续，部分离散的.

47. 本例中动量本征值不是离散的，因为 k 可为任何值，$\pm k$ 只是表示，对任何取定的 k 值，都具有二个方向的波矢.

48.

(1) 时间演化算符 $\hat{U}(t)=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$. 幺正算符，非线性厄米算符，不是力学量.

(2) 复共轭算符 $\hat{C}$，

$$\hat{C}\psi=\psi^*.$$

非厄米算符.

(3) 空间有限平移算符 $\hat{D}(r)=e^{\frac{i}{\hbar}(r\cdot p)}$，其中 r 为有限位移，p 为动量算符. 幺正算符，非线性厄米符算.

(4) 空间无限小平移算符 $\hat{D}(\delta r)=e^{\frac{i}{\hbar}(\delta r\cdot p)}\approx 1+\frac{i}{\hbar}\delta r\cdot p$，$\delta r$ 为无限小

位移．线性算符，非厄米算符．

(5) 空间有限转动算符

$\hat{R}(\varphi)=e^{\frac{i}{\hbar}(\varphi\cdot\hat{L})}$，$\varphi$ 为有限转角，$\hat{L}$ 为角动量算符．幺正算符，非线性厄米算符．

(6) 空间无限小转动算符 $\hat{R}(\delta\varphi)=e^{\frac{i}{\hbar}(\delta\varphi\cdot\hat{L})}$

$\approx 1+\frac{i}{\hbar}\delta\varphi\cdot\hat{L}$，$\delta\varphi$ 为无限小转角．线性幺正算符，非厄米算符．

49. 不一定．因 $F_i=(\psi_i|\hat{F}|\psi_i)$，

而 $\bar{F}=\left(\sum_i c_i\psi_i|\hat{F}|\sum_i c_i\psi_i\right)=\sum_{i\,j}c_ic_j(\psi_i|\hat{F}|\psi_j)\neq\sum c_iF_i$．

例如 $\hat{L}_x$ 在 $\hat{L}_z$ 的所有本征态中平均值皆为零，但在其叠加态中，例如在 $\psi=c_1Y_{11}+c_2Y_{10}$ 中 $\langle\psi|\hat{L}_x|\psi\rangle\neq 0$．

50. 证：设 $\hat{I}$ 为宇称算符，

$$\langle\hat{P}\rangle=\langle\psi,\hat{P}\psi\rangle=\langle\hat{I}\psi,\ \hat{P}\hat{I}\psi\rangle$$
$$=\langle\psi,\ \hat{I}\hat{P}\hat{I}\psi\rangle=\langle\psi,\ (-\hat{P}\psi)\rangle=-\langle\psi,\ \hat{P}\psi\rangle=-\langle\hat{P}\rangle$$

故 $\langle\hat{P}\rangle=0$．

51. 力在经典力学中占有重要地位，是用来描述体系与外界相互作用的一个基本概念．而且质量的概念，无论是惯性质量或引力质量，都是借助于力的概念来定义的．而在量子力学中，一般是用势场，而不是力来描述体系与外界的相互作用，另外质量也无须借助于力来定义．虽然从对应原理可形式地把力定义为动量的平均变化率，但并没有什么实际用处．体现波粒二象性的 $E=\hbar\omega$ 与 $p=\frac{\hbar}{\lambda}$，使量子力学中能量、动量成为基本概念，由于 $\frac{d}{dt}(\bar{x})=\frac{\bar{p}}{m}$，动量可看成是物质运动的直接原因．力的概念失去了它在经

典物理中的地位.

52. 一般往往把(1)作为基本假设，由(1)推出(2)，由本章17题对厄米算符定义域的讨论可看出，$\overline{F}=(\psi,\hat{F}\psi)$ 成立的条件是 $\psi\in D(F)$，D在$\mathscr{H}$中稠密，而$\overline{F}=\sum_n|c_n|^2\lambda_n$ 公式中没直接出现算符 $\hat{F}$，所以与$D(\hat{F})$无直接联系.

53. 用类似证明上题中①与②式等效的方法，即由①$\Longleftrightarrow$②，很易证明$\overline{F}^2=(\hat{F}\psi,\hat{F}\psi)$. 但它们成立的条件是不同的. $\overline{F}^2=(\psi,F^2\psi)$，定义域应该是 $D(F^2)$，即要求其中 $F\psi=\varphi\in D(F^2)$. 要特别注意的是，要使 $\hat{F}^2\psi=\hat{F}(\hat{F}\psi)=\hat{F}\varphi$ 有意义，必须 $\psi\in D(\hat{F})$并且 $\hat{F}\psi=\varphi\in D(\hat{F}^2)$才可以.

可见，定义域 $D(F^2)$在$\hat{F}$的定义域 $D(\hat{F})$中，因而 $D(F^2)$一般只只是 $D(F)$的一部分，即 $D(\hat{F}^2)$一般比 $\hat{F}$ 的定义域 $D(\hat{F})$小.

而对 $\overline{F}^2=(\hat{F}\psi,\hat{F}\psi)$，显然只要求$\psi\in D(F)$即可.

至于公式$\overline{F}^2=\sum_n(c_n)^2\lambda^2{}_n$、与 $D(F^2)$无直接关系.

可见，②式比①式能在较大的定义域中成立. 总之，$\overline{F}^2=(\hat{F}\psi,\hat{F}\psi)=(\psi,\hat{F}^2\psi)$，当$\psi\in D(F^2)$时成立.

$\overline{F}^2=(\hat{F}\psi,\hat{F}\psi)=(\psi,\hat{F}^2\psi)$，当$\psi\in D(F)$成立，但不必有$\psi\in D(\hat{F}^2)$.

54. (2) 正确. 这正是上题的典型例子. 此时，$\overline{E}^2=(\hat{E}\psi,\hat{E}\psi)=(\psi,\hat{E}^2\psi)$.

本题中，$\psi(x)\in D(\hat{E})$，但 $\varphi=\hat{E}\psi$ 为非零常数，$\varphi\notin D(\hat{E})$，即 $\psi\notin D(E^2)$. 计算中出现的“矛盾”实质上是忽略了公式成立的条件而导致的佯谬.

55. 从定理证明的过程，$\overline{F}^2=(\psi,\hat{F}^2\psi)=(\hat{F}\psi,\hat{F}\psi)=(\varphi,\varphi)\geqslant 0$，可明显看出此定理只对$\psi\in D(F^2)$才成立.

56. 由$(\hat{p}^2\psi_0,\hat{p}^2\psi_0)=5\left(\frac{\xi}{a_0}\right)^4$可得出正确的修正值

$$E'=-\frac{5}{8}\alpha^4 mc^2,$$

其中 $\alpha=\frac{e^2}{\xi c}$.

这里$(\hat{p}^2\psi_0,\hat{p}^2\psi_0)\neq(\psi_0,p^4\psi_0)$，正是由于$\psi_0\in D(\hat{p}^2)$.

但$\hat{p}^2\psi_0=\varphi\notin D(\hat{p}^2)$，即$\psi_0\notin D(\hat{p}^4)$.

另外，可由$[(\hat{F}\psi,\psi)-(\psi,\hat{F}\psi)]=0$的方法，找出$\psi$应满足的条件. 结果表明：氢原子波函数$\psi_{nlm}$均在$\hat{p}^2$的厄米定义域中，氢原子的$l=0$的波函数(包括基态)不在$\hat{p}^4$的定义域中.

57. 设有一组彼此独立而相互对易的力学量$(\hat{F}_1,\hat{F}_2,\cdots)$它们的共同本征函数组为$\{\varphi_{\alpha_1,\alpha_2},\cdots\}$，$\{\alpha_1,\alpha_2,\cdots\}$为一组量子数. 如果给定一组量子数$(\alpha_1,\alpha_2,\cdots)$就可以确定体系的一个可能状态. 那么，就称$(\hat{F}_1,\hat{F}_2,\cdots)$为体系的一个力学量完全集.

特点：[1]力学量完全集的共同本征函数组构成一个希尔伯空间(即体系状态的完备系).

[2] 力学量完全集所包含力学量数目，即等于量子数组$(\alpha_1,\alpha_2,\cdots)$所包含的量子数数目，也称为体系的自由度数.

[3] 力学量完全集中所有力学量是可以同时测量的.

58. 对于给定的量子体系，力学量完全集的选取不是唯一的.

例如，对于三维自由粒子，可以将其力学量完全集取作(p_x,p_y,p_z)，这时共同本征函数系为

$$\psi_{p_xp_yp_z}(x,y,z)=A\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p_x\cdot x+p_y\cdot y+p_z\cdot z)}.$$

也可取为坐标(x',y',z')，这时本征函数系为

$$\psi_{x'y'z'}(x,y,z)=B\delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z').$$

59.

(1) $(\hat{p}_x,\hat{p}_y,\hat{p}_z)$;

(2) $(\hat{H})$;

(3) $(\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$或$(H, L^2, L_z)$;

(4) $(\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z, \hat{S}_z)$;

(5) $(\hat{H}, \hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{L}^2)$;

(6) $(\hat{H}_1^{(0)}, \hat{H}_2^{(0)}, \hat{L}_1^2, \hat{L}_2^2, \hat{L}_{1z}, \hat{L}_{2z}, \hat{S}_{1z}, \hat{S}_{2z})$,

式中 $\hat{H}_1^{(0)}=-\frac{\xi^2}{2m}\nabla_1^2-\frac{2e^2}{V_1}, \hat{H}_2^{(0)}=-\frac{\xi^2}{2m}\nabla_2^2-\frac{2e^2}{V_2}$.

60. 对应原理是玻尔提出的,它的基本思想是:量子力学在适当的极限条件下将过渡到经典力学. 关于适当的极限条件,玻尔曾提出大量子数 $n\to\infty$,而狄拉克则提出 $\hbar\to 0$. 看来,狄拉克的极限条件更具普遍性.

厄恩费斯特定理是对应原理的一个特例,它是指以下两个公式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\bar{x})=\frac{1}{m}\cdot\bar{p}_x, \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\bar{p}_x)=-\overline{\frac{\partial V}{\partial x}}=\bar{F}_x.$$

由此可得出

量子牛顿方程

$$m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t}(\bar{x})=-\overline{\frac{\partial V}{\partial x}}=\bar{F}_x.$$

61. 方程中出现的$\bar{x}$,$\overline{\frac{\partial V}{\partial x}}$还须由量子力学规律,求平均值公式得出. 所以,量子牛顿方程不是基本方程.

厄恩费斯特定理的实质是说明:当 ψ 满足薛定谔方程时,则 $\hat{x}$ 与 $\hat{p}_x$ 在 ψ 态的平均值是满足牛顿运动方程的.

第 五 章

1. 定态是概率密度和概率流密度不随时间变化的状态. 若势场恒定$\frac{\partial V}{\partial t}=0$,则体系可以处于定态.

定态具有以下特征:

(1) 定态波函数时空变量可以分离 $\psi(\boldsymbol{r},t)=\psi(\boldsymbol{r})e^{-iEt/\hbar}$,其中 $\psi(\boldsymbol{r})$是哈密顿 H 的本征函数,而 E 为相应的本征值.

(2) 不显含 t 的任何力学量,对于定态的期待值,不随时间变化,各种可能观察值出现的概率分布亦不随时间变化.

注意通常用 $\psi(\boldsymbol{r})$表示定态只是一种简写, 定态是含时态,任何描写粒子状态的波函数都是含时的.

2. 对于定态$\frac{\partial \rho}{\partial t}=0$ 可得 $\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0$ 但 $\boldsymbol{j}$ 不一定为零.

3. (1) 能量不同的定态的叠加态$\psi(x,t)=\sum_n c_n\psi_n(x)e^{-iE_nt/\hbar}$中,不具有确定的能量值,尽管 $\bar{E}$ 与 t 无关,但位置概率密度

$$\omega(x,t)\equiv\psi^*(x,t)\psi(x,t)=\sum_{nm}c_n^*c_m\psi_n^*\psi_m e^{i(E_n-E_m)t/\hbar}$$

依赖于 t.

例如,一维体系中,E 值不同的两定态的叠加

$$\psi(x,t)=\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar}+\psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar},$$

概率密度

$$\omega(x,t)=|\psi(x,t)|^2=|\psi_1(x)|^2+|\psi_2(x)|^2$$
$$+[\psi_1^*\psi_2e^{i\omega t}+c\cdot c],$$

式中
$$\omega=\frac{E_1-E_2}{\hbar}.$$

概率密度将在

$|\psi_1(x)|^2+|\psi_2(x)|^2$ 与 $|\psi_1(x)|^2-|\psi_2(x)|^2$ 间以频率 $\omega=\frac{E_1-E_2}{\hbar}$ 振荡，这表明，任意定态的叠加态不再具有定态的特征，是非定态.

(2) 由于波动方程是线性的，体系中不同定态叠加而成的非定态

$$\psi(x,t)=\sum_n c_n\psi_n(x)e^{-iE_nt/\hbar}$$

仍是波方程的解.

因此，只能说定态解($\hat{H}$不显含t的)是体系含时波动方程 $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi$ 的解，但不能说该体系的含时波动方程的解都是定态解.

从这里也可看出，如果认为定态就是能量本征态，由于本征值方程 $\hat{H}\psi=E\psi$ 中明显出现 E，体系中不同 E 值的本征态的线性叠加不可能再是原本征值方程的解. 而这种叠加态正是实际存在最一般的可能态.

4. 当粒子被外力(势场)约束于特定的空间区域内，即在无穷远处波函数等于零的态叫束缚态.

束缚态的能级是离散的. 例如，一维谐振子就属于束缚定态，具有量子化的能级. 但束缚态不一定是定态，例如，限制在一维箱中的粒子，最一般的可能态是以一系列分立的定态叠加而成的波包，上题中已讨论过，这种叠加态是没有确定能量值的非定态.

虽然一般情况下定态多属束缚态，但定态也可能有非束缚态. 例如，弹性散射中，入射粒子受散射势作用而向各方向散射，粒子不局限在有限区域，但粒子处于能量的本征态. 这时粒子处于一个非束缚态，或者说处于散射定态(常简称为散射态).

5. 由于定态波函数是能量本征函数与由能量 E 确定的时间

定态方程

相因子的乘积，解定态问题实际上归结为求解定态波方程，即哈密顿算符的本征值方程 $\hat{H}\psi=E\psi$

例如，一维问题中，$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx}+V(x)$，可见定态波方程是一个二阶常微分方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+[V(x)-E]\psi=0.$$

解方程时要求：

(1) 波函数 ψ 有限、单值. 这正是由于波函数的统计解释，$w=\psi^*\psi$ 代表粒子出现的概率密度. 为了使粒子在任何时刻在空间各点有唯一确定的概率，波函数必须在空间各点是有限的且是单值的.

(2) 由波方程

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

可看出，对势能 $V(x)$ 有跃变的间断点，$\frac{d^2\psi}{dx^2}$ 是不连续的. 但只要 V、E、ψ 都是有限的，$\frac{d^2\psi}{dx^2}$ 必是有限的，这就要求 $\frac{d\psi}{dx}$ 必定是连续和有限的，否则如果在某点 $\frac{d\psi}{dx}$ 不连续，该点的 $\frac{d^2\psi}{dx^2}$ 必无限.

例如，一维空间中，势阶 ($V=0, x<x_0; V=V_0, x>x_0$)，在 $x=x_0$ 处，势能由零突变为 V_0.

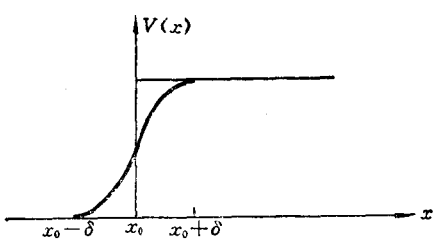


图 32

由波方程

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

在 x_0 附近给出的区间上积分得

$$\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\bigg|_{x_0+\delta}-\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\bigg|_{x_0-\delta}=\frac{2m}{\hbar^2}\int_{x_0-\delta}^{x_0+\delta}(V-E)\psi\,\mathrm{d}x.$$

可见，只要$(V-E)\psi$ 在区间内有限，在 $\delta\to 0$ 极限，等式右边积分趋向于零，因此，在 x_0 处$\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}$是连续的$\left(\text{而}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}\text{是不连续的}\right)$，从而 $\psi(x)$也是连续的，总之，只要势能 $V(x)$是有限的，不管是否连续，在 $V(x)$发生有限跃变处，波函数及其一阶导数也是连续的，不连续的只是二阶导数.

势能 $V(x)$有跃变处，ψ 与$\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}$的连续性，在 $\psi(x)$的图形上表现为：在跃变点两侧的曲线，在跃变点平滑衔接. 从图 33 给出的势阶 $E<V_0$ 时 $\psi(x)$的图形可明显看出.

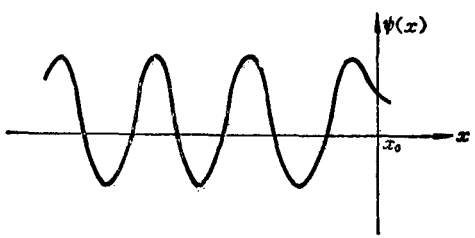


图 33

定态问题，正是由于对波函数的一些基本要求，才很自然地得出能量量子化……具有量子特征的解. 关于波函数单值性问题请参阅：E. Merzbacher, *Am. J. Phys*, 30, 237—247 (1962)，该文对波函数单值性问题作了全面而深入的研究.

6. 从 ψ^*和 ψ 的薛定谔方程出发，应用高斯定理即可得出

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_V \psi^*\psi \mathrm{d}V = -\int_V \nabla\cdot \boldsymbol{j}\mathrm{d}V = -\oint_S j_n \mathrm{d}r,$$

式中 $\boldsymbol{j}$ 为概率流密度.

概率守恒要求：对整个空间 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_\alpha \psi^*\psi \mathrm{d}V = 0$.

若三维空间球坐标中 $r=0$ 处是势能 $V(r)$（从而哈密顿量 $\hat{H}$）的奇点，为了应用上式，以奇点为球心，作半径为 R 的小球，把这个点包起来并把它从积分体积中除去. 对整个空间积分时，求面积分包含两部分，一部分是对包含整个体积的在无穷远处的表面 S_∞ 的积分. 另一部分则是对半径 $R\to 0$ 的小球表面的积分.

$$\oint_{S_\infty} j_n \mathrm{d}S + \lim_{R\to 0}\oint j_n \mathrm{d}S = 0.$$

由于在无穷远处束缚态波函数等于零. 所以第一项面积分为零. 第二项面积分中，球表面元 $\mathrm{d}S = R^2\mathrm{d}\Omega$，$\mathrm{d}\Omega$ 是立体角元.

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

令 $\psi(r) = \frac{u(r)}{r^\alpha}$（$u$ 在 $r\to 0$ 时是正则的），于是

$$\lim_{R\to 0}\oint_S j_R \mathrm{d}S = \lim_{R\to 0} R^2\oint_\Omega j_R \mathrm{d}\Omega = \lim_{R\to 0}\frac{R^2}{R^{2\alpha}}\oint_\Omega \left[u\frac{\partial u^*}{\partial r} - u^*\frac{\partial u}{\partial r}\right]_{r=R}\mathrm{d}\Omega$$
$$= 0.$$

这只有在 $\alpha<1$ 时才成立.

由此可见，为了满足概率守恒，在奇点（$r=0$）附近，波函数不能比 $\frac{1}{r^\alpha}$（$\alpha<1$）更快地趋于无穷大，即在 $r=0$ 处 $\psi\to\infty$ 应慢于 $r^{-1}\to\infty$，或者说 $r\psi\xrightarrow{r\to 0}0$.

这正是球坐标中波函数在奇点（$r=0$）处的有限性条件，或者说，是波方程在 $r=0$ 处的自然边界条件.

狄拉克是着眼于数学上的考察得出以上条件的①，他注意到，当波方程以球坐标表出时，对出现的奇点($r=0$)必须加上 $r\psi\xrightarrow{r\to 0}0$ 这个限制性条件后，才与以直角坐标表示同一个波方程具有同样的解集合．这样，同一量子体系以不同坐标系表出的两个微分方程才是等价的．

7．由上题讨论可看出 $r\psi\xrightarrow{r\to 0}0$ 作为有限性条件 无论从数学还是物理上都有充分的论据，这也是大部分教科书中采用的有限性条件．

(3)中给出的条件——在奇点附近 ψ 的增长比 $r^{-3/2}$ 慢，是根据 ψ 应满足 $\int|\psi|^2\mathrm{d}V=1$ 得出的(费米，《量子力学》中译本，西安交通大学出版社，1984，p.7)，显然，这比前面给出的那个条件宽松些．

至于给出的第一个条件：$\psi_{r=0}$ 有限，这个要求无论从物理上还是数学上都缺乏论据．在奇点上波函数还应该有限，这是个严格到了苛刻的要求，并且，物理上也无法实测某几何点的 $|\psi|^2$．实测只能在奇点附近，有限但很小的区域中进行．从这个观点看，条件(3)可以看作是从测量角度出发的物理要求．

8．如果函数 $u(x)$ 是单值的、有限的、连续的，并且 $u(x)$ 的一阶导数也是连续的，$u(x)$ 就是品优函数．

(1) 不是．因为当 $x\to\infty$，u 不保持有限，并且在 $x=0$ 处一阶导数不连续．

(2) 不是品优的．因为当 $|x|\to\infty$ 时 $u=x^2$ 不能保持有限．

(3) 不是品优的，因为在 $x=0$ 时，一阶导数不连续．

(4) $\cos x$ 是品优函数．

(5) $u=\sin|x|$ 不是品优的，因为 $x=0$ 时，一阶导数不连续．

(6) 是品优的．

① 请参阅：狄拉克，《量子力学原理》中译本，科学出版社，1965，§38.
参阅：张永德，《大学物理》，1989年，第9期，p.1.

(7) 不是品优的，因为在 $x=\pm1$ 时，一阶导数不连续.

9. 常微分方程 $-\frac{d^2}{dx^2}u=\lambda u$ 的通解为

$$u=Ae^{i\sqrt{\lambda}x}+Be^{-i\sqrt{\lambda}x} \qquad \text{当 } \lambda\neq0,$$

$$u=cx+D \qquad \text{当 } \lambda=0.$$

讨论三种情形:

$\lambda=0$，只有 $c=0$ 时 u 是品优的，其他情形 u 不保持有限.

$\lambda<0$ 时，设纯虚数 $\sqrt{\lambda}=ia$，a 为大于零的实数，则解可写成

$$u=Ae^{-ax}+Be^{ax},$$

当 $|x|\to\infty$ 时 u 不能保持有限，所以 u 不是品优函数.

$\lambda>0$ 时 u 是品优函数.

10. 首先要说明，任何一个波函数乘以一个复相因子，仍旧表示同一量子态. 因此这里的实函数应指可以化为实函数的波函数.

a. 不一定，$E>V(x)$ 的解有时也可表为实函数. 本章第12题中将证明，一维束缚定态波函数可以表为实函数，如一维有限深对称势阱中，$\psi\sim\sin kx$.

b. 也不一定，束缚定态波函数可以是复函数. 如球方势阱；非束缚定态波函数也可是实函数，如一维平面波受刚性壁反射.

c. 可以说定态波函数为实函数时，表示的是"驻波"态，$j=0$；定态波函数为复函数时，表示的是"行波"态，$j\neq0$.

11. 图(a)中的波函数对应于图(d)的势场，因为

[1] 波函数有确定宇称，则势场必关于原点对称.

[2] $\psi(a)=\psi(-a)=0$，故应为无限深势阱而非有限深势阱.

12. (1) 力学量 $\hat{F}$ 的本征值方程 $\hat{F}\psi=F\psi$ 中，如果对 $\hat{F}$ 的一个本征值 F，有 f 个相互独立(线性无关)的本征函数，我们就称本征值 F 是简并的，简并度为 f.

通常说到简并，常常是指能量简并. 能量简并意味着仅由能

量不能构成体系状态的力学量完全集合.

(2) 二维无限深势阱

$$V(x,y)=\begin{cases}0 & 0<x<a \quad 0<y<a\\ \infty & \text{其他地方}\end{cases}$$

体系哈密顿量 $\hat{H}=\frac{\hat{p}_x^2}{2m}+\frac{\hat{p}_y^2}{2m}$.

由此很易得出能量本征值

$$E_{n_1n_2}=E_{n_1}+E_{n_2}=\frac{1}{2ma^2}(n_1^2+n_2^2)\pi^2\hbar^2,$$

式中 $n_1, n_2=1,3,5,\cdots$, 与 $E_{n_1n_2}$ 对应的本征函数(归一化的)为

$$\phi_{n_1n_2}(x,y)=\psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)=\frac{2}{a}\sin\frac{n_1\pi x}{a}\sin\frac{n_2\pi y}{a}.$$

其中凡 $n_1\neq n_2$ 的能级都是简并的.

例如, $E_{21}=E_{12}=\frac{5}{2}\frac{\pi^2\hbar^2}{ma^2}$, 而 $\phi_{12}(x,y)$ 与 $\phi_{21}(x,y)$ 是独立的, 所以这个能级是二度简并的.

这种简并性是由于此势阱关于坐标 x、y 是对称的, 即当 x 与 y 互换, p_x 与 p_y 互换时体系 $\hat{H}$ 不变. 但当 $n_1\neq n_2$ 时, $\phi_{n_1n_2}(x,y)$ 对于 x 和 y 是不对称的, 因而产生简并.

这种起源于体系的对称性的简并叫本质简并 (或系统的简并). 其一般规律是: 对称性愈高, 简并度愈大.

如果在本题中的"方盒"改为"矩形盒" (长宽分别为 a 和 b), 粒子限制在此矩形盒中运动时, 能量本征值将为

$$E_{n_1n_2}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{a^2}+\frac{n_2^2}{b^2}\right),$$

由此可知 $E_{n_1n_2}\neq E_{n_2n_1}$.

正是由于对矩形盒来说, 关于坐标 x、y 的对称性破坏了, 因而简并解除了.

这是个有普遍意义的结论: 体系的某种对称性破坏, 则由此对

称性导致的简并消除.

另外，对方盒中的运动，$E_{55}=E_{71}$ $E_{74}=E_{81}$ 这种简并与体系具有的对称性无直接关系，称之为偶然简并.

(3) 至于势阱中心 O′ 点的对称性，相当对任意的 n_1 和 n_2，将 x 换成 $(a-x)$，y 换成 $(a-y)$ 代入 $\phi_{n_1n_2}$ 中可看出，这相当于 $\phi_{n_1n_2}(x,y)$ 式子乘上一个相位因子，并不导致简并.

这也是一个有普遍意义的结论：体系能级的本质简并总与体系的某种对称性有关. 但是，对称性不一定导致简并. 另一个例子是一维运动的束缚定态(尽管有对称性)总是不简并的.

13. 设 ψ 为能量本征函数，对 $\hat{H}\psi=E\psi$ 取复共轭，通常，势能 $V(x)$ 为实的，故 $\hat{H}\psi^*=E\psi^*$. 已知能级 E 是非简并的，故有 $\psi^*=c\psi$ (c 为常数)，又取复共轭

$\psi=c^*\psi^*=c^*c\psi$，所以 $c^*c=1$，$c=e^{i\delta}$. 可令 $\delta=0$，则 $c=1$，得到 $\psi^*=\psi$，即 ψ 可表为实函数.

14. (1) 设定态波函数 ψ_1、ψ_2 对应于同一能量 E，

$$\frac{d^2\psi_1}{dt^2}=\frac{-2m}{\hbar^2}(E-V)\psi_1=\psi_1'',\qquad \frac{d^2\psi_2}{dx^2}=\frac{-2m}{\hbar^2}(E-V)\psi_2=\psi_2''.$$

由此得 $\psi_1''/\psi_1=\psi_2''/\psi_2$，即 $\psi_1''\psi_2-\psi_2''\psi_1=0$. 积分得 $\psi_1'\psi_2-\psi_2'\psi_1=c$(不依赖于 x 的常数)，ψ_1 与 ψ_2 均为束缚态. 当 $|x|\to\infty$ 时，ψ_1 与 ψ_2 均趋于零，因此得出，不依赖于 x 的常数 $c=0$.

所以 $\frac{\psi_1'}{\psi_1}=\frac{\psi_2'}{\psi_2}$，即 $\ln\psi_1-\ln\psi_2=c_1''$.

因而 $\psi_1=c''\psi_2$，即 ψ_1 与 ψ_2 表示同一量子态，故不存在简并.

(2)由(1)及上题，由于一维束缚定态无简并，故其波函数可表为实函数.

15. 定态波方程

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

改变x取向，方程不变

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

因为$V(-x)=V(x)$，$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi(-x)}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\psi(-x)\equiv E\psi(-x)$.

可见$\psi(x)$与$\psi(-x)$满足同一波方程，且属于同一本征值E. 又因为一维束缚定态无简并，故$\psi(x)$与$\psi(-x)$描述同一量子态，即$\psi(x)=c\psi(-x)$.

改变x取向$\psi(-x)=c\psi(x)$，所以$\psi(x)=c^2\psi(x)$.

$$c=\pm 1,\qquad \psi(x)=\pm\psi(-x).$$

即$\psi(x)$具有确定宇称.

一般说来，波函数与势场不具有相同的对称性，概率密度亦是如此. 只在一维情形下，如果势场关于原点对称，则概率密度也关于原点对称(因为波函数具有确定宇称).

16. 一维定态解只具有一个能量量子数

一般说来，量子态的量子数数目等于体系的自由度数目，也即等于描述体系状态的力学量完全集中所包含的力学量数目.

17. 量子力学的定态解在量子数$n\to\infty$时，即过渡到经典解，此即玻尔对应原理.

18. 对于一维无限深势阱中粒子有

$$E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}.$$

设想压缩势阱壁，使a减小(如图 34)，则必然要克服粒子对阱壁压力而作功，此功将转化为粒子能量

$$\mathrm{d}E_n=-\bar{F}\mathrm{d}a.$$

所以 $$\bar{F}=-\frac{\mathrm{d}E_n}{\mathrm{d}a}=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{ma^3}=\frac{2E_n}{a}$$

此即粒子对阱壁的平均压力.

此法只对无限深势阱适用.

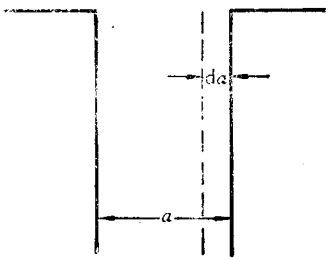


图 34

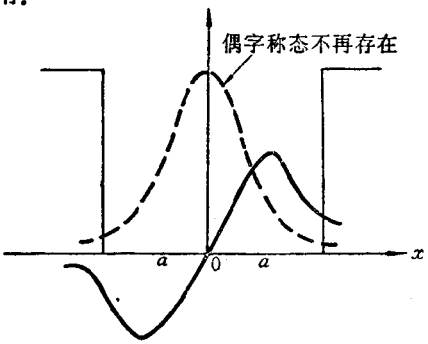


图 35

19. 设想在对称方势阱中，置一不可穿透壁，这样在 $x>0$ 的区域，便形成了如题所述的半势阱（如图 35）．显然半势阱与对称势阱在 $x>0$ 区域满足同样的波方程．但壁的存在破坏了偶宇称的态，而奇宇称的态则不受影响，因此半势阱的定态解即两倍宽度的对称势阱的奇宇称解（$x>0$ 部分），只是归一化常数不同.

$$\psi(x)=\begin{cases}0 & x<0\\ A\sin kx & a<x<a\\ Be^{-k'x} & x>a.\end{cases}$$

20. 本题中，经典界限为 $E=V(x)$ 处，如图 36，它因能级而异．由 $V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ 及

$$E=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega=\frac{1}{2}m\omega^2a_n^2$$

求出

$$a_n=\sqrt{\frac{2\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega}{m}}.$$

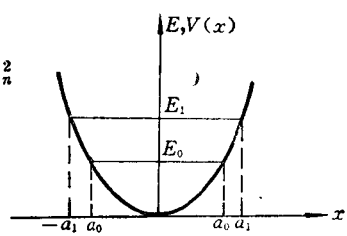


图 36

经典区域即为$[-a_n, a_n]$.

在经典界限之外发现粒子的概率为

$$P_n=1-\int_{-a_n}^{a_n}\psi_n^*\psi_n\,\mathrm{d}x=1-\int_{-a_n}^{a_n}N_n^2\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2}H_n(\alpha x)\mathrm{d}x.$$

式中 $\alpha=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$，$N_n$ 为归一化常数，$H_n(\alpha x)$为厄米多项式.

例如，当 $n=0$(基态)

$$P_0=1-\int_{-a}^{a}\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2}\mathrm{d}x\approx16\%.$$

P_n 显示出一种量子效应. 当 $n\to\infty$，$P_n\to0$.

21. 当 $n=0$ 时，分布概率极大位于势场中心(如图 37)，经典界限之外发现粒子有较大概率. 随着 n 增大，最大概率位置向两侧推移，在经典区域外，发现粒子概率逐渐减小. 当 $n\to\infty$ 时，最大概率位置就是经典界限位置，在经典区域之外不再能找到粒子了.

与经典谐振子相比，经典谐振子当然不会位于经典区域之外，其次，在势场中心，它的动能最大速度最快，逗留时间最短，因而发现概率最小；在经典极限处，其动能为零，速度为零，因而逗留时间最长，发现概率最大(如图 37). 可见，当 $n\to\infty$ 时，一维谐振子便过渡到经典谐振子了.

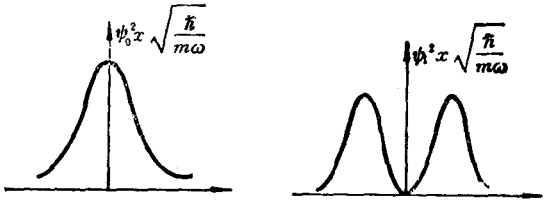


图 37

22. 与半势阱情形类似，半谐振子定态解，即谐振子的奇宇称部分解($x>0$). (只是归一化常数不同)

$$\psi(x)=\begin{cases}0 & x<0\\ A_n\mathrm{e}^{-1/2\alpha^2x^2}H_n(\alpha x) & x\geqslant0\end{cases}\quad n=1,3,5,\cdots$$

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad n=1,3,5,\cdots.$$

23. 设三维无限深势阱为矩形，边长为 a、b、c，

$$V(x,y,z)=\begin{cases}0 & 0<x<a \quad 0<y<b \quad 0<z<c\\ \infty & \text{其余处.}\end{cases}$$

令 $\psi(x,y,z)=\psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$，容易求得

$$\psi_1(x)=A_1\sin\frac{n_1\pi x}{a},\quad \psi_2(y)=A_2\sin\frac{n_2\pi y}{b},\ \psi_3(z)=A_3\sin\frac{n_3\pi z}{c},$$

n	n_1	n_2	n_3	$n_1^2+n_2^2+n_3^2$	简并度
1	1	1	1	3	1
2	2	1	1	6	3
	1	2	1		
	1	1	2		
3	1	2	2	9	3
	2	1	2		
	2	2	1		
4	1	1	3	11	3
	1	3	1		
	3	1	1		
5	2	2	2	12	1
6	1	2	3	14	6
	2	1	3		
	1	3	2		
	3	1	2		
	2	3	1		
	3	2	1		
7	2	2	3	17	3
	2	3	2		
	3	2	2		

表 5-1

$$\psi_{n_1n_2n_3}(x,y,z)=\sqrt{\frac{8}{abc}}\sin\frac{n_1\pi x}{a}\sin\frac{n_2\pi x}{b}\sin\frac{n_3\pi x}{c}\quad(n_1,n_2,n_3=1,2,\cdots).$$

对应能级为 $E_{n_1n_2n_3}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{a^2}+\frac{n_2^2}{b^2}+\frac{n_3^2}{c^2}\right)$.

当 $a\neq b\neq c$ 时能级一般无简并（由长度的巧合而造成的偶然简并除外）.

当 $a=b=c$ 时，能级是简并的. 但一般地计算其简并度比较复杂，因为能量取决于 $(n_1^2+n_2^2+n_3^2)$. 下面我们列出前面几个能级的简并度.

24. 三维无限深球势阱

$$V(r)=\begin{cases}0 & V<R\\ \infty & V>R.\end{cases}$$

其能级分布为 $E_{n_r l}=\frac{\hbar^2}{2ma^2}x_{n_r l}^2$, $n_r=1,2,3\cdots$, $l=0,1,2\cdots$.

式中 $x_{n_r l}$ 为球塞尔函数 $j_l(x)$的根，由于能级取决于 n_r 与 l 两个量子数，简并度为 $2l+1$.

25. 三维各向同性谐振子 $V(r)=\frac{1}{2}m\omega^2r^2=\frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2+z^2)$.

令 $\hat{H}=\hat{H}_x+\hat{H}_y+\hat{H}_z$, $\psi_{n_xn_yn_z}=\psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)\psi_{n_z}(z)$.

可解得 $E_{n_xn_yn_z}=\left(N+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega$, $N=n_x+n_y+n_z$.

给定N时 $n_xn_yn_z$ 可能取值的数目为$\frac{1}{2}(N+1)(N+2)$,

所以能级N的简并度$g_N=\frac{1}{2}(N+1)(N+2)$.

26. 将已知波函数代入球坐标系的波方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}\psi_k}{\mathrm{d}r}\right)+V(r)\psi_k=E\psi_k.$$

可得 $$\frac{k^2\hbar^2}{2m}\psi_k+V(r)\psi_k=E\psi_k.$$

由此可见 $$V(r)=E-\frac{\hbar^2k^2}{2m}=\text{const.}$$

故不妨令其为零，$V=0$，则所给波函数乃是自由粒子波函数.

27. 我们不能将粒子在势箱中的运动看成是经典粒子在箱中来回移动. 微观粒子在箱中的运动呈现一种波动，正是波动在箱壁上的往复反射，干涉形成了驻波，产生了波腹与波节，波节处波函数为零，发现粒子的概率为零. 因此波节是粒子运动的产物，而不是阻碍粒子在箱中的运动. 一旦我们真的试图在波节处探测粒子时，波动状态也就破坏了，因此并不会发生实验观测上的矛盾(实验上不可能恰好只探测波节一点，而只能是一个小区域，在此区域中发现粒子概率不为零，因此不可避免要发生粒子与仪器的相互作用).

28. 由于物质波是概率波，与经典波不同，若在波节处插入壁垒，波动状态将发生变化，如箱中是单粒子插入壁垒后，粒子可能处于被两势壁分割开的三个小空间之一，这时粒子将在此小空间中重新形成适当的分布，而其余两部分空间中波函数即为零了.

29. 所谓概率流在势不连续点发生分裂（分解为透射流与反射流）意指粒子在该点以一定概率作透射或反射运动. 这与粒子本身的分裂显然不相干(不涉及粒子内部结构的改变).

30. 无论粒子由低势能区射向高势能区，或由高势能区射向低势能区，都会发生反射.

31. 无论入射粒子能量大于势能或小于势能，都会发生反射.

32. 入射波不仅在势不连续点会发生反射，在势连续变化区域(只要势场是不均匀的)也会发生反射. 可直接由概率流密度的定义来证实这一点.

33. (1) 若入射粒子能量小于阶跃势垒，则反射系数等于 1. 由于阶跃势无限宽，虽然粒子仍可能有一指数衰减概率透入经典禁区，但最终仍将被反射回去.

(2) 若粒子能量大于阶跃势，则反射系数为

$$R=\left(\frac{1-\sqrt{1-V_0/E}}{1+\sqrt{1-V_0/E}}\right)<1.$$

这时粒子既有反射概率，也有透射概率.

34. 粒子通过任意势垒，如果粒子能量小于无穷远处的势垒高度，则粒子仍然不能通过，只能反射回去，因此反射系数为 1.

35. 这样做不对. 题中所写函数形式只对局部势场为常数的情形才适用，对于任意势场是不适用的(否则求解任意势场的波方程问题就变得很简单了).

36. 粒子穿过任意势垒的透射系数为

$$D=D_0e^{-\frac{2}{\hbar}\int\sqrt{2m[u(x)-E]}\,dx}$$

因而随着粒子质量增大，透射系数急剧减小，当过渡到经典力学时，质量增大到宏观数值，这时隧道效应实际上已经消失.

37. 在题述的意义上，隧道效应不能被直接观测到. 要使隧道效应能够被显著地观察到，透射系数应当足够大，指数衰减因子要小.

以方势垒为例，应有 $\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0-E)}\lesssim 1$,

即 $$a\lesssim\hbar/2\sqrt{2m(V_0-E)}\,.$$

另外，为要确定粒子确实位于势垒之中，即将观察范围限于 $\Delta x\sim a$ 的区域内，由不确定关系，将引起动量不确定量

$$\overline{\Delta P^2}\gtrsim\frac{\hbar^2}{4a^2}=2m(V_0-E),$$

$$\overline{\Delta E^2}=\frac{\overline{\Delta P^2}}{2m}\gtrsim V_0-E.$$

亦即由此引起的能量不确定量，足以使粒子能量超过势垒高度，因而当我们能够断定粒子位于势垒之中时，我们便无从判断粒子能量是否确实小于势能．但是我们可以"间接地"然而是可靠地观察到隧道效应：让能量小于势垒高度的粒子从一侧射向势垒，我们可以从另一侧以非零概率观察到具有相同能量的粒子的存在．这就说明了粒子确实穿过势垒．

38．这种看法不对．粒子寿命虽然有限，但相对说来还是很长，不确定性很大，因而引起的能量不确定量很小，这不足以使粒子越过势垒．要使粒子产生足够的附加能量，其寿命 τ 应当与粒子穿过势垒的时间 t 相比拟，$t=\frac{am}{P}$（a 为势垒宽度），但实际上很显然 $\tau \gg t$．

39．在势垒穿透问题中，粒子由低势能区穿过高势区再进入低势区，这种现象类似于光线从光疏质穿过光密质再进入光疏质．（如图 38）势场的势能就相当于光质的折射率，它们分别影响物质波与光波的传播速度．由这种类比可以看出，隧道效应的物理本质在于粒子的波动性．

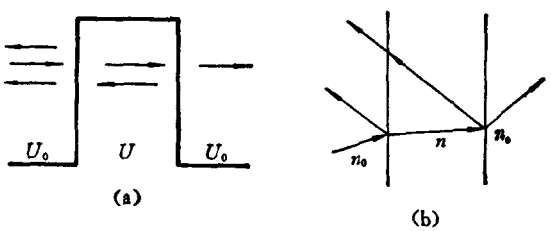


图 38

实际上，所谓隧道效应的佯谬，只是从经典观点看才是一个问题．按照经典观点 $E=T+V$，而隧道效应的存在破坏了这个关系式．但在量子力学中动能与势能不能同时确定，不存在这样的关系式，也即无所谓佯谬．量子力学中有 $\bar{E}=\bar{T}+\bar{V}$，这一关系式并

不因为隧道效应的存在而受到破坏.

40. 势阶中当 $E<V_0$ 时在势不连续处发生的是全反射，但仍有一个指数衰减的概率进入经典禁区II. 这相当于光学中的全内反射，光虽然能进入第二媒质，但坡印亭矢量的路线是弯曲的，它们进入第二媒质后又回到第一媒质，而没有单向的能量移动.

这里对应的是：在稳定情况下，区域II中有两种概率流，一种是正概率流，它对应于入射波包的一部分向这个区的穿透. 另一种是负概率流，对应于波包的这部分向区域I返回. 这两种反向概率流正好抵消，所以没有衰减波的概率流了.

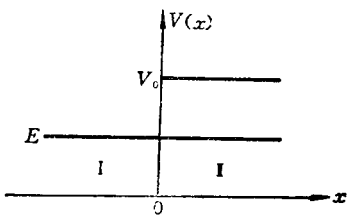


图 39

41. (1) 有限方势阱.

(2) 无限方势阱.

(3) 谐振子势.

42. (1)

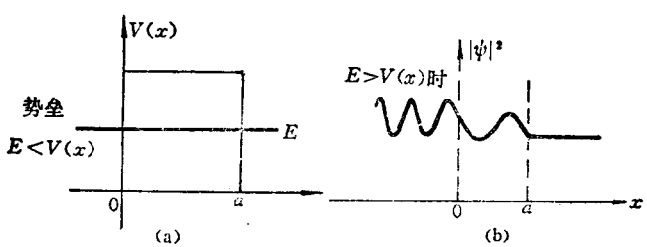


图 40

(2)

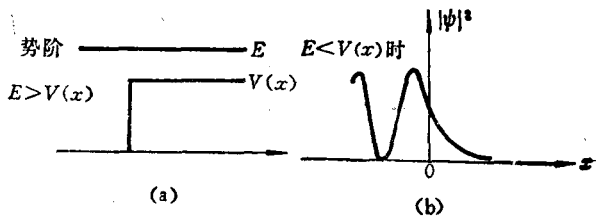


图 41

43. 对于 δ 势，定态波方程为

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

定态波函数可表为

$$\psi(x)=\begin{cases}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+R\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} & x<0 \quad k=\dfrac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}\\ S\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} & x>0.\end{cases}$$

对波方程在区域$(0^-,0^+)$积分得

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

以 $\psi(0)$代入得

$$\frac{\mathrm{i}k\hbar^2}{2m}(S-1+R)=V_0S.$$

而由 $\psi(0)$的连续条件得

$$1+R=S.$$

解得

$$S=1\Big/\left(1+\frac{\mathrm{i}mV_0}{\hbar^2k}\right).$$

穿透系数

$$T=|S|^2=1\Big/1+\frac{mV_0^2}{2E\hbar^2}.$$

可见当 $V_0\sim0$ 势垒是透明的；

$V_0 \sim \infty$ 势垒是不可透的(V_0 称为不透明度);

V_0 为有限值，势垒是半透明的.

通常物理所称 δ 势垒，泛指无限高而又无限薄的势垒，若表为 $V_0\delta(x)$ 则三种可能性都有. V_0 称为不透明度.

第 六 章

1. 英文"uncertainty relation"并无测量的含义，这个关系是(德)海森伯 1927 年首先提出的. 文章是用德文发表的，该名词使用的德文及后来译成的法、俄文……都没有测量的含义.

改译为"不确定(度)关系"既符合外文的原意，也避免产生误解. 我们承认了"不确定度"的存在，并且导出了满足不等式的关系，至于为什么会如此，它与测量的关连……可以有着各种见解. 事实上，这正是量子力学建立以来一直争论探讨的重大问题之一.

对初学者来说，不可能也没必要过多地介入到这种原始基本概念的雾海之中.

本章只对初学者可能遇到的一些不确定度关系予以讨论，并且仍沿用一般教材书中习用的看法.

2. 不确定现象并非量子力学所特有的，经典物理中也存在这种现象. 例如所有随机事件都表现出这种特点. 但这种经典不确定现象是由随机因素所造成，而量子力学中的不确定关系则起源于物质的波粒二象性，是普遍存在的. 这种不确定关系通过不对易力学量的相互制约性表现出来.

3. 我们前面说过，我们使用"波粒二象性"的术语，这本身就反映了经典物理概念的局限性，也反映了我们语言的局限性. 我们可以认为，物质兼具粒子性与波动性，但确切地说，它们既不同于纯粹的经典波也不同于纯粹的经典粒子. 经典物理中无论是粒子概念或波动概念，只有经过修正，才能被量子理论借用，不确定关系就反映了这种修正. 它给出了这两个概念能够被有效借用的限度. 粒子性力学量的不确定关系，如 $\Delta x \cdot \Delta p \gtrsim \hbar$，给出了用粒子图象描述物质的局限性.

4. 任何一对不对易力学量之间，都存在相应的不确定关系. 不对易关系的类型不同，相应的不确定关系形式也不同，一般地由 $[\hat{A},\hat{B}]\neq 0$，便有 $\Delta A\cdot\Delta B\neq 0$，或 $\Delta A\cdot\Delta B\geq\varepsilon(\eta)$，但 $\varepsilon(\eta)$ 的表达式多种多样. 它可能是某一常数也可能是变量 η 的函数. 而变量 η 可能是 $\hat{A}$ 或 $\hat{B}$，也可能是 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 之外其他有关的力学量.

最典型的类型是关于正则坐标与正则动量之间的不确定关系.

这时对易关系为 $[q,p]=i\hbar$，

不确定关系为 $\overline{(\Delta p)^2}\cdot\overline{(\Delta q)^2}\geq\frac{\hbar^2}{4}$.

以下列举常见不确定关系

位置-动量　　$\overline{(\Delta x)^2}\cdot\overline{(\Delta p^2)}\geq\frac{\hbar^2}{4}$，

角动量分量之间　$\overline{(\Delta L_x)^2}\cdot\overline{(\Delta L_y)^2}\geq\frac{\hbar^2}{4}\hat{L}_z^2$　(循环置换).

5. (1) 将 Δx、Δp 理解为波包在坐标表象中与动量表象中的线度，可形象地反映了不确定关系起源于粒子的波动性，比较直观但不严格.

(2) 确切地说，$\overline{\Delta x}$ 与 $\overline{\Delta p}$ 表示粒子在坐标空间与动量空间中分布的平均离差. $\overline{(\Delta x)^2}$ 与 $\overline{(\Delta p)^2}$ 表示粒子的坐标与动量的均方差.

(3) Δx 与粒子线度是完全不同的概念. Δx 是一种状态参量(波包线度也是如此)，它可因粒子所处状态不同而有很大不同. 而粒子线度是粒子内禀特征参量，例如电子的半径据估计应小于 10^{-15} cm，而电子波包线度(Δx)可大到原子线度量级(10^{-8}cm)，二者显然相差甚远，可见，将波包与粒子本身完全等同起来是荒谬的.

6. 由德布罗意关系 $p=\frac{h}{\lambda}=\frac{2\pi\hbar}{\lambda}$，得$\Delta p=2\pi\hbar\frac{\Delta\lambda}{\lambda^2}$，

已知 $\Delta x\cdot\Delta p\geqslant\hbar$，故 $\Delta x\cdot\Delta p=2\pi\hbar\frac{\Delta\lambda}{\lambda^2}\Delta x\geqslant\hbar$，

于是 $$\Delta x\cdot\Delta\lambda\geqslant\frac{\lambda^2}{2\pi}.$$

此关系式中不含作为量子特征的普朗克常数 $\hbar$，它不是量子力学特有的关系式.

7. 云室中观察到的粒子"径迹"，并非是粒子本身的运动轨迹，它只是由于粒子通过云室时，引起其中过饱和水蒸汽的凝结而产生的痕迹. 这种迹的宽度已是宏观线度，与微观粒子线度相比大得不可比拟. 因此，与粒子运动轨迹是二回事.

8. 所谓波包，即指在一定的时刻波函数明显不为零的区域. 在此区域内任何点都是粒子可能出现的点，差别只在于出现的概率不同. 从这个意义上说，波包中心没有什么特殊之处，它不过是粒子可能出现的点之一，而不能取代整个粒子.

9. 不可能.

如要求判断粒子从哪一个狭缝通过，则应当在狭缝前置一探测器，而探测器的存在改变了双缝衍射的客观环境，已不再是双缝衍射实验了.

10. (1) 一维谐振子

$$\overline{E}=\frac{\overline{p^2}}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\cdot\overline{x^2},\text{而}\overline{(\Delta p)^2}=\overline{p^2}-\overline{p}^2,\text{且}\overline{p}=0.$$

故 $\overline{p^2}=\overline{p}^2+\overline{(\Delta p)^2}=\overline{(\Delta p)^2}$. 类似有$\overline{x^2}=\overline{x}^2+\overline{(\Delta x)^2}=\overline{(\Delta x)^2}$.

所以 $$\overline{E}=\frac{\overline{(\Delta p)^2}}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\cdot\overline{(\Delta x)^2}.$$

由不确定关系式 $\overline{(\Delta x)^2}\cdot\overline{(\Delta p)^2}\geqslant\frac{\hbar^2}{4}$，

$$\bar{E}\geqslant\frac{\hbar^2}{8m\,\overline{(\Delta x)^2}}+\frac{1}{2}m\omega^2\cdot\overline{(\Delta x)^2},$$

当 $\frac{\hbar^2}{8m\,\overline{(\Delta x)^2}}=\frac{1}{2}m\omega^2\,\overline{(\Delta x)^2}$ 时，即 $\overline{(\Delta x)^2}=\frac{\hbar}{2m\omega}$ 时，$\bar{E}$ 式右端取极小值，

$$E_{\min}=\frac{1}{2}\hbar\omega.$$

此即一维谐振子基态能量.

(2) 氢原子

$$E=\frac{p^2}{2m}-\frac{e^2}{r}.$$

粗略地作下列近似代换

$p\backsim\Delta p$, $r\backsim\Delta r$, 并由不确定关系 $\Delta p\cdot\Delta r\backsim\hbar$.

于是 $p\backsim\frac{\hbar}{r}$, $E\backsim\frac{\hbar^2}{2mr^2}-\frac{e^2}{r}$

当 $r=\frac{\hbar^2}{e^2m}=a$ 时 ($a=0.529\times10^{-8}$ cm 为第一玻尔半径),

$E_0=E_{\min}\backsim-\frac{me^4}{2\hbar^2}=-13.6\,(\mathrm{eV})$.

11. 我们可用积分 $I(\xi)=\int_{-\infty}^{+\infty}D(x)\mathrm{d}x\geqslant0$

(其中 $D(x)=\left|\xi x\psi(x)+\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}\right|^2\geqslant0$)

来导出不确定关系式. 而最小不确定度对应于等式 $I(\xi)=0$, 由此可得 $D(x)\equiv0$,

即 $$\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}=-|\xi x\psi(x)|.$$

例如 $\psi(x)=Ae^{-ax^2}$ (高斯波包) 就具有最小不确定度.

12. 严格地说，不确定关系式 $\overline{(\Delta p)^2(\Delta q)^2}\geqslant\frac{\hbar^2}{4}$ 并不是适用于任何一对不对易力学量，而只是适用于正则坐标与正则动量，这种

正则力学量之间有如下对易关系：$[\hat{q},\hat{p}]=i\hbar$. 这样的正则力学量之间绝对地不对易，它们永远不可能同时确定. 另有一类不对易力学量，它们之间的对易关系取决于其他力学量. 例如$[\hat{L}_x,\hat{L}_y]=i\hbar\hat{L}_z$，这样的力学量对于特定的状态，可以同时确定. 例如当$L_z=0$时，$L_x=0$，$L_y=0$，便出现了三者可以同时确定但确定值只能是零的共同本征态.

13. 时间-能量不确定关系，较之其他不确定关系，曾引起更多的争议. 关于它的意义，有着不同的解释. 玻尔的解释是：通过相继两次测量(时间间隔为Δt)来检验量子力学中的能量守恒定律，只能准确到$\Delta E\backsim\hbar/\Delta t$的数量级.

另一种解释是：如果处于"准稳态"的体系寿命为Δt，则确定该体系能量只能准确到$\Delta E\backsim\hbar/\Delta t$的数量级.

关于时间能量不确定关系与位置动量不确定关系的比较，有人认为，位置与动量均为体系力学量，而时间t不应看作体系力学量. Δx、Δp都是指同一时刻而言，而Δt、ΔE则未必是对应于同一空间位置.

也有人认为时间与位置一样都是基本力学量，特别是从相对论角度，它们都是四维时空中的一个坐标分量，具有同等地位，因此两种不确定关系并没有实质性差别.

14. 这两个关系式并不等效，因为一般地$\overline{(\Delta x)^2}\neq\overline{\Delta x}^2$，$\overline{(\Delta p)^2}\neq\overline{\Delta p}^2$. 实际上，只有关系式$\overline{(\Delta x)^2}\cdot\overline{(\Delta p)^2}\geqslant\frac{\hbar^2}{4}$才是严格正确的. $\overline{\Delta x}\cdot\overline{\Delta p}\geqslant\frac{\hbar}{2}$一般并不成立. 该式还有两个明显的毛病，如将$\Delta x$、$\Delta p$理解为坐标与动量相对于平均值的偏离，那么，它们是可正可负的，因此它们的平均值均为零.

在关系式$\Delta x\cdot\Delta p\geqslant\frac{\hbar}{2}$中，正确的理解是：$\Delta x=[\overline{(\Delta x)^2}]^{1/2}$，

$\Delta p=[(\Delta p)^2]^{1/2}$.

15. 证: 令 $\Delta A=A-\bar{A}=\hat{\alpha}$, $\Delta F(B)=F(B)-\overline{F(B)}=\hat{\beta}$.

考虑积分 $I(\xi)=\int|\xi\hat{\alpha}\psi+\mathrm{i}\hat{\beta}\psi|^2\mathrm{d}A\geqslant 0$,

$$I(\xi)=\int(\xi\psi^*\hat{\alpha}^{\dagger}-\mathrm{i}\psi^*\hat{\beta}^{\dagger})(\xi\hat{\alpha}\psi+\mathrm{i}\hat{\beta}\psi)\mathrm{d}A$$

$$=\xi^2\int\psi^*\hat{\alpha}^2\psi\mathrm{d}A+\int\psi^*\hat{\beta}^2\psi\mathrm{d}A+\xi\int[\mathrm{i}\psi^*(\hat{\alpha}\hat{\beta})\psi-\mathrm{i}(\hat{\beta}\hat{\alpha})\psi]\mathrm{d}A$$

$$=\xi^2\overline{\hat{\alpha}^2}+\overline{\hat{\beta}^2}+\xi\mathrm{i}\overline{[\alpha,\ \beta]},$$

但 $\overline{[\alpha,\ \beta]}=\overline{\hat{\alpha}\hat{\beta}-\hat{\beta}\hat{\alpha}}=\overline{[A,\ F]}=\mathrm{i}\hbar\overline{\dfrac{\partial F}{\partial\beta}}$,

故
$$I(\xi)=\xi^2\overline{\hat{\alpha}^2}+\overline{\hat{\beta}^2}-\hbar\xi\overline{\frac{\partial F}{\partial\beta}}\geqslant 0,$$

由此可知
$$\hbar^2\left(\overline{\frac{\partial F}{\partial\beta}}\right)^2-4\overline{\hat{\alpha}^2\hat{\beta}^2}\leqslant 0,$$

故
$$\overline{\hat{\alpha}^2}\cdot\overline{\hat{\beta}^2}=\overline{(\Delta A)^2}\cdot\overline{(\Delta F)^2}\geqslant\frac{\hbar^2}{4}\left(\overline{\frac{\partial F}{\partial\beta}}\right)^2.$$

16. 有的书如席夫《量子力学》中列入此式. 但有书评论此式有错, 理由如下:

不确定关系中两个力学量应是在同一希尔伯空间定义的厄米算符.

绕 z 轴转动角 ϕ 与角动量 $\hat{L}_z=-\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial\phi}$ 就不满足这个基本要求.

这是因为由在区间 $(0,2\pi)$ 内平方可积函数 $\psi(\phi)$ 构成的函数空间中只有具有周期性, 即满足 $\psi(0)=\psi(2\pi)$ 的 ψ 才使 $\hat{L}_z$ 满足厄米条件 $(\psi_1,\hat{L}_z\psi_2)=(\hat{L}_z\psi_1,\psi_2)$.

但 $\hat{\phi}\psi(\phi)=\phi\psi(\phi)$ 不再是周期函数, 不属于 $\hat{L}_z$ 的定义域.

这样, $\Delta\phi\cdot\Delta L_z\geqslant\dfrac{\hbar}{4}$ 的成立就成了问题, 有人建议不用 ϕ 而用

$\sin\phi$, $\cos\phi$ 作为有关算符讨论.

可证$[\sin\phi, L_z]=i\hbar\cos\phi$, $[\cos\phi, L_z]=-i\hbar\sin\phi$.

由此得出

$$\overline{(\Delta L_z)^2}\cdot\overline{(\Delta\sin\phi)^2}\geqslant\frac{\hbar^2}{4}\overline{\cos^2\phi},\ \overline{(\Delta L_z)^2}\cdot\overline{(\Delta\cos\phi)^2}\geqslant\frac{\hbar^2}{4}\overline{\sin^2\phi}.$$

详细讨论，参阅(1) R. L. Liboff, *Introductory Quantum Mechanics*, p. 340; (2) F. 康斯坦丁内斯库等,《量子力学习题与解答》,高教版, 1983, p. 91.

17. 此处的错误在于将 Δx 与势阱宽度混为一谈. Δx 相当于 $|\psi|^2$ 的分布范围，当 a 很小时 Δx 可以远大于 a. 如图 42.

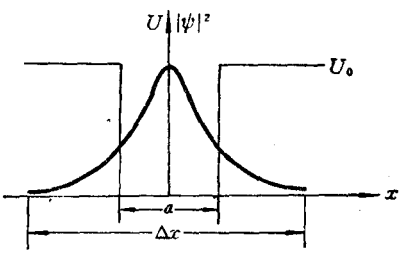


图 42

18. 在无限深势阱的情况下($U_0=\infty$)才有 $\Delta x\backsim a$，此外在势阱很宽时($a\gg\sqrt{\hbar^2/mU_0}$), Δx 也可与 a 相比拟.

19. 本题论证的错误在于，没有把电子具有波动性的考虑贯彻始终. 也就是说电子束不仅通过 O_1 后发生衍射，通过 O_2 后同样发生衍射. 衍射后电子的横向动量不确定度取决于孔径大小，而不管入射的电子束动量是多么准确地确定. 即使让电子束通过几个小孔，也不会减小横向动量的涨散. 出射电子束的扩散程度主要地取决于最后一个小孔的孔径.

第 七 章

1. 绘景(picture)是指描述量子体系随时间变化的方式. 量子力学中，波函数 ψ 与力学量 $\hat{F}$ 都是不能直接测量的. 能与实测比较的量如力学量在 ψ 态的平均值 $\overline{F}$，$\overline{F}=(\psi,\hat{F}\psi)$，既与算符 $\hat{F}$ 有关又与波函数 ψ 有关. 量子体系在运动中，$\overline{F}(t)$ 的随时变化是完全由于 $\psi(t)$ 或 $\hat{F}(t)$ 还是两者都依时而变？在理论上可有不同但等效的描述方式. 即有不同的绘景：如常用的薛定谔绘景，海森伯绘景…….

量子力学中体系的量子态由希尔伯空间中一个矢量来描述，力学量由作用于此空间上的厄米算符来表示. 同一个态或力学量可以有不同的表象(representation).

表象是态和力学量的具体表示方式，是指在希尔伯空间中对坐标的选择. 也就是对作为基矢的完备正交归一本征矢系的选择. 选用不同坐标系对应用于采用不同的表象.

显然，每一绘景中，可取各种表象如位置表象，动量表象等.

对一具体问题，用什么绘景，又选用什么表象，由如何才便于求解而定.

在量子力学基础教材中，通常使用的是薛定谔绘景中的位置表象，有时被简称为薛定谔表象.

绘景与表象是两个不同的概念. 在早期的国外量子力学教材中经常混用，近期的教材都已加以明确区分.

2. 量子体系随时间变化方式可用不同观点等效描述. 若采用波函数随时间变化，而力学量以不随时间变化的算符表示，这种描述方式称为薛定谔绘景. 若采用波函数不随时间变化，而力学量以随时间变化的算符表示，这种描述方式称为海森伯绘景. 必

须注意，这里所谓力学量随时间变化，是指算符形式的变化，而不是力学量数值的变化．两种绘景关系如下．

波函数：　$\psi^{\mathrm{H}}(t)=\hat{U}^{-1}(t,t_0)\psi^{\mathrm{S}}(t)=\psi^{\mathrm{S}}(t_0)$

力学量：　$\hat{F}^{\mathrm{H}}(t)=\hat{U}^{-1}(t,t_0)\hat{F}^{\mathrm{S}}\hat{U}(t,t_0)$．

式中，上标 H，S 分别表示海森伯绘景与薛定谔绘景；$\hat{U}(t,t_0)$为演化算符，当 $t=t_0$ 时，两种绘景中的波函数与算符重合，通常取 $t_0=0$，并把 $\hat{U}(t,0)$表为 $\hat{U}(t)$．

在非相对论量子力学中，主要使用薛定谔绘景．在不致引起混淆的情况下，通常将其上标 S 略去．因而，无论是波函数还是算符，凡不加上标的均代表是薛定谔绘景的量．

薛定谔绘景中的力学量 $\hat{F}$，除有含时微扰等例外，一般均不显含时间，但不论 $\hat{F}$ 是否显含时间，对应的 $\hat{F}^{\mathrm{H}}$ 总与时间有关．

3．在薛定谔绘景中，已知量子体系初态 $\psi(t_0)$，由波方程 $\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}\psi(t)}{\mathrm{d}t}=\hat{H}\psi(t)$（$\hat{H}$ 为体系哈密顿量）就可知道以后任意时刻的 $\psi(t)$．据此，可换个提法，认为 $\psi(t)$与 $\psi(t_0)$是由演化算符 $\hat{U}(t,t_0)$所连系，$\psi(t)$是 $\hat{U}(t,t_0)$作用在 $\psi(t_0)$的结果，即 $\psi(t)=\hat{U}(t,t_0)\psi(t_0)$．显然，应有 $\hat{U}(t_0,t_0)=1$．

由于归一化不应随时间改变

$$(\psi(t),\psi(t))=(U\psi(t),\hat{U}\psi(t_0))=(\psi(t_0),U^{\dagger}U\psi(t_0))$$
$$=(\psi(t_0),\psi(t_0))=1,$$

$U^{\dagger}U=1$，即 $U^{-1}=U^{\dagger}$．$\hat{U}$ 为幺正算符，但不是厄米的．所以，演化算符不是力学量．

如何确定 $\hat{U}(t,\ t_0)$呢？把 $\psi(t)=\hat{U}(t,\ t_0)\psi(t_0)$代入波方程，得$\left[\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t}\right]\psi(t_0)=\hat{H}\hat{U}\psi(t_0)$，由于对该体系的任一$\psi(t_0)$均成立．故得出微分方程 $\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}\hat{U}(t,t_0)}{\mathrm{d}t}=\hat{H}\hat{U}(t,t_0)$，$\hat{U}(t,\ t_0)$是此方程对于初始条件 $\hat{U}(t_0,t_0)=1$ 的解，可见，演化算符 $\hat{U}$ 是由量子体系

的哈密顿量所确定的.

这个微分方程及初始条件,表达了量子体系的基本演变定律,等效于薛定谔波动方程.

当体系 $\hat{H}$ 不显含时间(保守系),$\hat{U}(t,t_0)$具有具体形式为:

$$\hat{U}(t,t_0)=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}=1+\frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t-t_0)+\frac{1}{2!}\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2\hat{H}^2(t-t_0)^2+\cdots$$

$$=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left[\frac{\hat{H}(t-t_0)}{i\hbar}\right]^n.$$

如 $\hat{H}$ 显含 t,则 $\hat{H}(t_1)$与 $\hat{H}(t_2)$可能不对易,例如,

$\hat{H}(t)=\hat{x}^2\cos\omega t+\hat{p}^2\sin\omega t$. 当 $t_1=0$, $t_2=\frac{\pi}{2\omega}$时,

$$(\hat{H}(t_1),\hat{H}(t_2))=(\hat{x}^2,\hat{p}^2)\neq 0.$$

上式不再成立,需专门讨论.

4. 已知力学量 $\hat{F}$ 在薛定谔绘景与海森伯绘景间的变换关系为

$$\hat{F}^{H}=\hat{U}^{-1}(t,t_0)\hat{F}^{S}U(t,t_0).$$

如取 $\hat{F}^{S}=\hat{H}^{S}$(不显含时间),由于 $\hat{H}^{S}$ 与演化算符 $\hat{U}(t,t_0)=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{S}(t-t_0)}$对易,

$$\hat{H}^{H}=\hat{U}^{-1}(t,t_0)U(t,t_0)\hat{H}^{S}=\hat{H}^{S}=\hat{H}.$$

可见,如哈密顿量不显含时间,在这两个绘景中,哈密顿算符完全相同. 因此可略去上标,都用 $\hat{H}$ 表示.

5. 薛定谔绘景中,量子态随时间变化的关系完全体现在波函数上,这种变化反映了量子体系的运动规律.

薛定谔绘景中波函数与力学量满足如下方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^{S}=\hat{H}\psi^{S}\text{ 及 }\frac{\partial}{\partial t}\hat{F}^{S}=0\quad(\text{设 }\hat{F}^{S}\text{ 不显含时间}).$$

在海森伯绘景中,量子体系的运动规律完全由力学量随时间

的变化体现，即 $\psi^{\mathrm{H}}_{(t)}\equiv\psi^{\mathrm{S}}_{(t_0)}$，因而，$|\psi^{\mathrm{H}}|^2$ 不能反映粒子在 $t=t_0$ 以后时刻在空间出在的概率.

海森伯绘景中，波函数与力学量满足以下方程

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi^{\mathrm{H}}=0,\ \text{及}\quad \frac{\partial\hat{F}^{\mathrm{H}}}{\partial t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{F}^{\mathrm{H}},\hat{H}].$$

6. 设体系哈密顿量为 $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}'$，其中 $\hat{H}_0$ 不显含时间为零级哈密顿量或无微扰哈密顿量. 附加项 $\hat{H}'$ 很小而常常是显含时间的，如外电磁场的作用.

可通过幺正变换定义相互作用绘景如下

$$\psi^{\mathrm{I}}(t)=\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}^{\mathrm{S}}_0 t}\psi^{\mathrm{S}}(t),$$

$$\hat{F}^{\mathrm{I}}(t)=\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}^{\mathrm{S}}_0 t}\hat{F}^{\mathrm{S}}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}^{\mathrm{S}}_0 t}.$$

可见，$\psi^{\mathrm{I}}(t)$ 与 $\hat{F}^{\mathrm{I}}(t)$ 均是随时间变化的. 当 $t=0$ 时，相互作用绘景与薛定谔绘景及海森伯绘景中的波函数和算符都重合. 在相互作用绘景中，$\hat{H}^{\mathrm{I}}(t)$ 是含时的，但 $\hat{H}^{\mathrm{I}}_0$ 仍不含时且 $\hat{H}^{\mathrm{I}}_0=\hat{H}^{\mathrm{S}}_0$. 由于 $\hat{H}'$ 与 $\hat{H}_0$ 一般是不可对易的，故 $\hat{H}'^{\mathrm{I}}\neq\hat{H}'^{\mathrm{S}}$，从而 $\hat{H}^{\mathrm{I}}\neq\hat{H}^{\mathrm{S}}$.

相互作用绘景中，运动方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^{\mathrm{I}}(t)=\hat{H}'^{\mathrm{I}}(t)\psi^{\mathrm{I}}(t),$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{F}^{\mathrm{I}}(t)=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{F}^{\mathrm{I}}(t),\hat{H}_0].$$

可见，相互作用绘景将哈密顿量 $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}'$ 中两部分的影响分开考虑了，波函数随时间的变化仅依赖于 $\hat{H}'$，而力学量随时间的变化只取决于 $\hat{H}_0$. 因此，在处理相互作用等问题时，采用此绘景比较方便.

7. 已知，薛定谔绘景中，力学量 $\hat{F}$ 在 ψ 态的平均值 $\overline{F}=(\psi,\hat{F}\psi)$.

由于 $\psi^{\mathrm{H}}=\hat{U}^{-1}\psi^{\mathrm{S}}=\hat{U}^{\dagger}\psi^{\mathrm{S}}$，$\hat{F}^{\mathrm{H}}=\hat{U}^{-1}\hat{F}^{\mathrm{S}}\hat{U}$（式中，演化算符 $\hat{U}^{-1}$

$=\hat{U}^{\dagger}$，以下省去上标 S），

$$\bar{F}^{H}=(\psi^{H},\hat{F}^{H}\psi^{H})=(\hat{U}^{\dagger}\psi,\hat{U}^{-1}\hat{F}\hat{U}\hat{U}^{-1}\psi)=(\psi,\hat{U}\hat{U}^{-1}\hat{F}\psi)$$
$$=(\psi,\hat{F}\psi)=\bar{F}.$$

又由 $\psi^{I}=e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\cdot\psi^{S}$. $\hat{F}^{I}=e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\hat{F}^{S}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}$（以下省去上标 S），

$$\bar{F}^{I}=(\psi^{I},\hat{F}^{I}\psi^{I})=(e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\cdot\psi,\ e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\ \hat{F}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\cdot e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\psi)$$
$$=(\psi,\ e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\ e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\ \hat{F}\psi)$$
$$=(\psi,\hat{F}\psi)=\bar{F}.$$

可见，三种绘景中 $\bar{F}$ 均为 $\bar{F}=(\psi,\hat{F}\psi)$.

8. 相互作用绘景中，如定义演化算符 $U_I(t,t_0)$ 为 $\psi^{I}(t)=\hat{U}_I(t,t_0)\psi^{I}(t_0)$，$\hat{U}_I(t,t_0)$ 的具体形式可确定如下：

已知 $\psi^{I}(t)=e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\psi(t)$，以 $\psi(t)=\hat{U}(t,t_0)\psi(t_0)$ 代入，得

$$\psi^{I}(t)=e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\hat{U}(t,t_0)\psi(t_0).$$

又由 $\psi(t_0)=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t_0}\cdot\psi^{I}(t_0)$ 有

$$\psi^{I}(t)=e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\hat{U}(t,t_0)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t_0}\psi^{I}(t_0).$$

与定义 $\psi^{I}(t)=\hat{U}_I(t,t_0)\psi^{I}(t_0)$ 相比，得

$$\hat{U}_I(t,t_0)=e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\hat{U}(t,t_0)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t_0}.$$

已知，对保守系，$\hat{H}$ 不显含时间，$\hat{U}(t,t_0)=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}$，

此时，$\hat{U}_I(t,t_0)=e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t_0}$.

如在 $t\geqslant t_0$ 时，$\hat{H}'$ 不随 t 而变，上式亦适用.

如选 $t_0=0$，则 $\hat{U}_I(t,0)=e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$

9. 仍成立. 以海森伯绘景为例,证明如下:

已知,薛定谔绘景中,力学量 $\hat{A}$、$\hat{B}$、$\hat{C}$ 满足$[\hat{A},\hat{B}]=\mathrm{i}\hat{C}$.

在海森伯绘景中

$$\hat{A}^{\mathrm{H}}(t)=U^{-1}(t,0)\hat{A}\hat{U}(t,0)=\hat{U}^{-1}\hat{A}\hat{U},$$

$$\hat{B}^{\mathrm{H}}(t)=U^{-1}(t,0)\hat{B}U(t,0)=\hat{U}^{-1}\hat{B}\hat{U}.$$

$$[A^{\mathrm{H}}(t),\hat{B}^{\mathrm{H}}(t)]=\hat{A}^{\mathrm{H}}\hat{B}^{\mathrm{H}}-\hat{B}^{\mathrm{H}}\hat{A}^{\mathrm{H}}$$

$$=\hat{U}^{-1}\hat{A}\hat{U}\hat{U}^{-1}\hat{B}\hat{U}-\hat{U}^{-1}\hat{B}\hat{U}\hat{U}^{-1}\hat{A}\hat{U}.$$

由于演化算符 $\hat{U}^{-1}\hat{U}=\hat{U}\hat{U}^{-1}=1$, 且$[\hat{A},\hat{B}]=\mathrm{i}\hat{C}$,

$$[\hat{A}^{\mathrm{H}}(t),\hat{B}^{\mathrm{H}}(t)]=\hat{U}^{-1}\hat{A}\hat{B}\hat{U}-\hat{U}^{-1}\hat{B}\hat{A}\hat{U}=\hat{U}^{-1}(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A})\hat{U}$$

$$=\mathrm{i}\hat{U}^{-1}\hat{C}\hat{U}=\mathrm{i}\hat{C}^{\mathrm{H}}(t).$$

类似可证明:对相互作用绘景仍有$[\hat{A}^{\mathrm{I}}(t),\hat{B}^{\mathrm{I}}(t)]=\mathrm{i}\hat{C}^{\mathrm{I}}(t)$.

具体例子见本章第 12 题.

10. 自由粒子 $\hat{H}=\dfrac{\hat{p}^2}{2m}$不显含时间. 薛定谔绘景中坐标算符 $\hat{x}$,在海森伯绘景中

$$\hat{x}^{\mathrm{H}}(t)=U^{-1}(t,0)\hat{x}U(t,0)=\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}t}\cdot\hat{x}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}t}=\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{\hat{p}^2}{2m}t}\cdot\hat{x}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{\hat{p}^2}{2m}t}.$$

已知,对算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{L}$,有

$$\mathrm{e}^{\hat{L}}\hat{A}\mathrm{e}^{-\hat{L}}=\hat{A}+[\hat{L},\ \hat{A}]+\frac{1}{2!}[\hat{L},[\hat{L},\hat{A}]]+\frac{1}{3!}[\hat{L},[\hat{L},[\hat{L},\ \hat{A}]]]+\cdots.$$

这里,$\hat{A}=\hat{x}$; $\hat{L}=\dfrac{\mathrm{i}t}{\hbar}\hat{H}=\dfrac{\mathrm{i}t}{2m\hbar}\hat{p}^2$, $[\hat{L},\hat{A}]=\dfrac{\mathrm{i}t}{\hbar}[\hat{H},\hat{x}]$

$$=\frac{\mathrm{i}t}{2m\hbar}[\hat{p}^2,\hat{x}].$$

而$[\hat{p}^2,\hat{x}]=[\hat{p}\hat{p},\hat{x}]=\hat{p}\hat{p}\hat{x}-\hat{x}\hat{p}\hat{p}=\hat{p}\hat{p}\hat{x}-\hat{p}\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x}\hat{p}-\hat{x}\hat{p}\hat{p}$

$$=\hat{p}(\hat{p}\hat{x}-\hat{x}\hat{p})+(\hat{p}\hat{x}-\hat{x}\hat{p})\hat{p}=-2\,\mathrm{i}\hbar\hat{p}.$$

$[\hat{L},\ \hat{A}]=\dfrac{t}{m}\hat{p}$, $[\hat{L},[\hat{L},\hat{A}]]=0$, $[\hat{L},[\hat{L},[\hat{L},\ \hat{A}]]]=0$, …. 代入$\hat{x}^{\mathrm{H}}(t)$式中,得

$$\hat{x}^{H}(t)=\hat{x}+\frac{t}{m}\hat{p}.$$

11. 海森伯绘景中 $\dfrac{d\hat{x}^{H}}{dt}=\dfrac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{x}^{H}]$

$$=\frac{i}{\hbar}e^{\frac{-i}{\hbar}\hat{H}t}[\hat{H},\hat{x}]e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}.$$

类似有 $\dfrac{d\hat{p}^{H}}{dt}=\dfrac{i}{\hbar}e^{\frac{-i}{\hbar}\hat{H}t}[\hat{H},\hat{p}]e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}.$

对于一维谐振子 $\hat{H}=\dfrac{\hat{p}^2}{2m}+\dfrac{1}{2}m\omega^2x^2,$

所以 $[\hat{H},\hat{x}]=\left[\dfrac{\hat{p}^2}{2m},\hat{x}\right]=\dfrac{-i\hbar}{m}\hat{p},[\hat{H},\hat{p}]=\left[\dfrac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2,\ \hat{p}\right]$

$=i\hbar m\omega^2\hat{x}.$

由此得 $\dfrac{d\hat{x}^{H}(t)}{dt}=\dfrac{1}{m}\hat{p}^{H}(t),\quad \dfrac{d\hat{p}^{H}(t)}{dt}=-m\omega^2\hat{x}^{H}(t).$

结合上两式可得 $\dfrac{d^2\hat{x}^{H}(t)}{dt^2}+\omega^2\hat{x}^{H}(t)=0.$

此 $\hat{x}^{H}(t)$的微分方程的解为

$$\hat{x}^{H}(t)=c_1\cos\omega t+c_2\sin\omega t,$$

$$\hat{p}^{H}(t)=-m\omega c_1\sin\omega t+m\omega c_2\cos\omega t.$$

其中，系数 c_1,c_2 可由初始条件确定，由于 $t=0$ 时

$$\hat{x}^{H}(0)=\hat{x}=c_1,\ \hat{p}^{H}(0)=\hat{p}=c_2m\omega.$$

故 $$c_1=\hat{x},\quad c_2=\frac{\hat{p}}{m\omega}.$$

代入 $\hat{x}^{H}(t)$及 $\hat{p}^{H}(t)$式中有

$$\hat{x}^{H}(t)=\hat{x}\cos\omega t+\frac{\hat{p}}{m\omega}\sin\omega t,$$

$$\hat{p}^{H}(t)=\hat{p}\cos\omega t-m\omega\hat{x}\sin\omega t.$$

12. (1) 由本章第 10 题，自由粒子 $\hat{x}^{H}(t)=\hat{x}+\dfrac{\hat{p}}{m}t$，则

$$[\hat{x}^{H}(0),\ \hat{x}^{H}(t)]=\left[\hat{x},\ \hat{x}+\frac{\hat{p}}{m}t\right]=\hat{x}^{2}+\frac{t}{m}\hat{x}\hat{p}-\hat{x}^{2}+\frac{t}{m}\hat{p}\hat{x}$$

$$=(\hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{x})\frac{t}{m}=\frac{i\hbar}{m}t.$$

除非 $t=0$，否则 $\hat{x}^{H}(0)$与 $\hat{x}^{H}(t)$不可对易.

(2) 由本章第 11 题知，一维谐振子

$\hat{x}^{H}(t)=\hat{x}\cos\omega t+\frac{\hat{p}}{m\omega}\sin\omega t$，$\hat{p}^{H}(t)=\hat{p}\cos\omega t-m\omega\hat{x}\sin\omega t$，则

$$[\hat{x}^{H}(t_1),\hat{x}^{H}(t_2)]=\frac{1}{m\omega}[x,\ p]\cos\omega t_1\cos\omega t_2+\frac{1}{m\omega}[\hat{p},\ \hat{x}]\sin\omega t_1\cos\omega t_2$$

$$=\frac{-i\hbar}{m\omega}\sin(\omega t_1-\omega t_2).$$

当 t_1 与 t_2 满足 $\sin\omega(t_1-t_2)=0$，如 $t_1=t_2=t$ 时，

$$[\hat{x}^{H}(t),\hat{x}^{H}(t)]=0.$$

类此，$[\hat{p}^{H}(t_1),\ \hat{p}^{H}(t_2)]=-m\omega[\hat{p},\ \hat{x}]\cos\omega t_1\sin\omega t_2-m\omega[\hat{x},\ \hat{p}]\sin\omega t_1\cos\omega t_2=-im\omega\hbar\sin(\omega t_1-\omega t_2)$，

$$[\hat{x}^{H}(t_1),\hat{p}^{H}(t_2)]=i\hbar\cos(\omega t_1-\omega t_2).$$

如 t_1 与 t_2 不同，只有满足 $\cos(\omega t_1-\omega t_2)=1$ 时，才与薛定谔绘景有相同的关系.

13. 量子力学中，体系在给定时刻的状态由希尔伯空间一个矢量描述. 这个态矢空间的坐标系是由体系的一组力学量完全集的共同本征矢作为基矢. 而作用在态矢空间上的算符，只是将空间中一矢量变换成另一矢量.

薛定谔绘景中，体系随时运动的时间依赖关系完全由 $\psi(t)$ 来体现. 如已知体系初态为$\psi(t_0)$，此后任何时刻 t 的$\psi(t)$，可视为由演化算符$\hat{U}(t,t_0)$对$\psi(t_0)$作用而实现，即$\psi(t)=\hat{U}(t,t_0)\psi(t_0)$. 由于 $\hat{U}(t,t_0)$是幺正算符，它的作用不改变态矢的大小. 因而，体系运动的效果相当在固定坐标体系中，态矢的随时间的转动.

从薛定谔绘景变换到海森伯绘景，由定义

$$\psi^{H}(t)=\hat{U}^{-1}(t,t_0)\psi(t_0)=\psi(t_0).$$

这相当从一个固定坐标系转换到随 $\psi(t)$一同转动的坐标系. 这样，在此运动坐标系中看来，ψ 是不随时而变的，而在固定坐标系中不变的算符，在这个转动坐标系中就成为时间的函数了.

类此可知，在相互作用绘景中，态矢量及坐标系均可随时间进程而各自旋转.

总之，体系随时间变化，反映在态矢空间. 如保持坐标系固定而让态矢旋转即为薛定谔绘景. 如让坐标系旋转而保持态矢固定即为海森伯绘景. 而相互作用绘景是态矢与坐标系均旋转的一种绘景.

14. 绘景变换的幺正算符是演化算符如 $\hat{U}(t,t_0)$……，是含时的. 由定义 $\psi(t)=\hat{U}(t,t_0)\psi(t_0)$，$\hat{U}(t,t_0)$的作用相当于在 t_0 到 t 的时间进程中，态矢空间上态矢由 $\psi(t_0)$到 $\psi(t)$的转动. 从 $\hat{U}(t,t_0)$满足波方程 $i\hbar\frac{d\hat{U}}{dt}=\hat{H}\hat{U}$ 也可看出，$\hat{U}(t,t_0)$体现了体系的动力学态在时间进程中具有严格因果性的演变.

理论上，可有无限多个幺正算符作为绘景变换算符. 因而，在理论上允许有无限多个绘景存在.

表象变换的幺正变换算符是不含时的，它只是对体系同一时刻的态，选用不同的坐标系(不同的基矢). 这时，幺正算符相当在态矢空间中在同一时刻转动一下基矢(即坐标轴的一个转动)，而这种转动不反映体系的任何动力学进程.

15. 不是. 在海森伯绘景中，任态态ψ^{H}作 A 表象展开时，所用基矢不是力学量 $\hat{A}^{H}(t)$的本征矢，而是 $\hat{A}^{H}(0)$的本征矢.

例如，把ψ^{H}按力学量完全集$\hat{A}^{H}(0)$的共同本征矢 ψ_1、ψ_2、…展开. 就得出海森伯绘景的 A 表象中与 ψ^{H} 对应的不含时的一列矩

阵．对任一力学量 $\hat{F}^{H}(t)$，仍用这组基矢可得出与 $\hat{F}^{H}(t)$ 对应的 A 表象中的含时厄米方阵．

16．坐标与动量算符在能量表象中没有确定的表示式．因为能量表象不是一种确定的表象．不同体系因其哈密顿量 $\hat{H}$ 不同，各有自己的能量表象．它们的矩阵元取决于能量的本征函数，而能量本征函数又由外势场决定．

17．矩阵表示一般用于本征值为离散谱的表象(相应的希尔伯空间维数是可数的)．

具体说，如果力学量 A 的本征矢为 φ_1^A、φ_2^A、…，相应本征值分别为 $A_1, A_2, \cdots$．假定一个任意态矢为 ψ，将它展开

$$\psi=\sum_i a_i\varphi_i^A, \quad a_i=(\psi_i^A,\psi).$$

则态矢 ψ 在 $\hat{A}$ 表象中波函数便可用展开系数的一列矩阵表示

$$\psi=\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\\vdots\end{pmatrix}.$$

其意义是：在 ψ 态中，$\hat{A}$ 取 A_m 的概率为 $|a_m|^2$，这与 x 表象中波函数意义是类似的．

力学量用厄米方阵表示

$$\hat{F}=\begin{pmatrix}F_{11} & F_{12} & \cdots\\F_{21} & \ddots & \\\vdots & & \ddots\end{pmatrix}, F_{ij}=(\varphi_i^A,\hat{F}\varphi_j^A).$$

显然，一列矩阵和方阵维数与希尔伯空间维数是相等的．

用矩阵表示力学量，有如下理由：

第一、可以反映力学量作用于一个量子态得到另一个量子态的事实．

设 $\phi(x)=\hat{F}\psi(x)$，式中 $\phi(x)=\sum_j b_j\varphi_j^A(x)$，$\phi=\begin{pmatrix}b_1\\b_2\\\vdots\end{pmatrix}$.

取 $\sum_j b_j\varphi_j^A(x)=\sum_i a_i\hat{F}\varphi_i^A(x)$，

两端左乘 φ^{*A}_j，取标积得 $b_j=\sum_i(\varphi_j^A,\hat{F}\varphi_i^A)\cdot a_i=\sum_i F_{ji}a_i$，

即

$$\begin{pmatrix}b_1\\b_2\\\vdots\end{pmatrix}=F\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\\vdots\end{pmatrix}.$$

第二，矩阵乘法一般不满足交换律，这恰好能满足两个力学量一般不对易的要求.

第三，厄米矩阵的性质能体现力学量算符的厄米性.

对于本征值为连续谱的表象（希尔伯空间维数不可数），也可形式地运用矩阵表示，这时可将矩阵元素看成是连续分布的.

18. 在矩阵表示中，波函数的归一化条件可表为

$$\psi^{\dagger}\psi=(a_1^*,a_2^*,\cdots)\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\\vdots\end{pmatrix}=|a_1|^2+|a_2|^2+\cdots=1.$$

19. 量子力学中由一个表象到另一个表象的变换为幺正变换，它类似于欧氏空间中坐标转动. 设 $\hat{A}$ 表象中基矢为 φ_1^A、φ_2^A、…，$\hat{B}$ 表象中基矢为 φ_1^B、φ_2^B、….

（1）基矢变换关系为

$$\varphi_i^B=\sum_j\varphi_j^A S_{ji}.$$

式中 $S_{ji}=(\varphi_j^A,\varphi_i^B)$，$S^{\dagger}S=1$（$S$ 为幺正矩阵）.

设有任意态 $\psi=\sum_i C_i^A\varphi_i^A=\sum_j C_j^B\varphi_j^B$，则态 ψ 在 $\hat{A}$ 及 $\hat{B}$ 表象

中波函数分别为矩阵

$$\psi^A=C^A=\begin{pmatrix}C_1^A\\C_2^A\\\vdots\end{pmatrix},\quad \psi^B=C^B=\begin{pmatrix}C_1^B\\C_2^B\\\vdots\end{pmatrix}.$$

(2) 波函数变换规则为: 矩阵 $C^B=S^{-1}C^A$.

(3) 力学量变换规则为: $F^B=S^{-1}F^AS$.

(式中 F^A 与 F^B 为力学量 $\hat{F}$ 在 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 表象中矩阵)

20. 幺正变换特点:

(1) 幺正变换不改变态矢的模, 这一特征相当于坐标旋转变换;

(2) 幺正变换不改变力学量本征值;

(3) 力学量矩阵之迹 $\mathrm{Tr}F$ 与矩阵行列式 $\det F$ 亦不因幺正变换而改变.

21. 如果力学量本征值为离散谱, 那么, 它在其自身表象中表示式为对角矩阵

$$F=\begin{pmatrix}\lambda_1 & 0 & \cdots\\0 & \lambda_2 & \\\vdots & & \ddots\end{pmatrix},\ \lambda_1,\lambda_2\cdots\text{为 }\hat{F}\text{ 诸本征值.}$$

本征矢为单元素一列矩阵

$$\varphi_1=\begin{pmatrix}1\\0\\0\\\vdots\end{pmatrix},\quad \varphi_2=\begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\\\vdots\end{pmatrix},\cdots.$$

如果力学量 $\hat{F}$ 本征值为连续谱, 则它在其自身表象中为纯变量

$$\hat{F}=F.$$

其本征矢为 δ 函数. $\varphi'_F=\delta(F-F')$, 对应本征值为 F'.

22. 如果力学量 $\hat{F}$ 的矩阵 F 是非对角矩阵，则说明 F 不是 $\hat{F}$ 在其自身表象中的表示，而是在某个其他表象 G 中的表示（表象 G 以力学量 $\hat{G}$ 的本征矢作为基矢）. 所谓将矩阵 F 对角化，也就是将 $\hat{F}$ 转换到其自身的表象中来，这样做的目的是求矩阵 F 的本征值.

23. 坐标表象与动量表象是一对共轭表象，表示形式十分类似.

	$\hat{x}$ 表象	$\hat{p}_x$ 表象
$\hat{x}$:	x	$\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial p_x}$
$\hat{p}_x$:	$-\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$	p_x
$\hat{x}$ 本征态:	$\delta(x-x')$	$\dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_x x'}$
$\hat{p}$ 本征态:	$\dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_x' x}$	$\delta(p_x-p_x')$

一般波函数 ψ 的 $\hat{x}$ 表象 $\psi(x,t)$ 与 $\hat{p}_x$ 表象 $C(p_x,t)$ 之间的关系

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}C(p_x,t)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_x x}\,\mathrm{d}p_x,$$

$$C(p_x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x,t)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_x x}\,\mathrm{d}x.$$

可见，只要令有关表示式中 $\mathrm{i}\to-\mathrm{i}$、$x\leftrightarrow p_x$ 便可由 $\hat{x}$ 表象表示式得到 $\hat{p}_x$ 表象中对应表示式，反之亦然. 还可以看出，两表象波函数在傅立叶变换中互为镜象. 当然，$\hat{y}$ 与 $\hat{p}_y$ 表象；$\hat{z}$ 表象与 $\hat{p}_z$ 表象之间有同样关系.

24. (1) 在 $\hat{x}$ 表象中，作为基矢的本征矢为 $\delta(x-x')$.

$$(x)_{x'x''}=\int\delta(x-x')x\delta(x-x'')\,\mathrm{d}x=x'\delta(x''-x'),$$

$$(\hat{p}_x)_{x'x''}=\int\delta(x-x')\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\delta(x-x'')\mathrm{d}x$$

$$=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\delta(x'-x''),$$

$$(\hat{H})x'x''=\int\delta(x-x')\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right]\delta(x-x'')\mathrm{d}x$$

$$=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x'^2}+V(x')\right]\delta(x'-x'').$$

(2) 在 $\hat{p}_x$ 表象中，作为基矢的本征矢为 $\delta(p_x-p_x)$. 仿上可得

$$(\hat{x})p'_xp''_x=+\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p''_x}\delta(p'_x-p''_x),$$

$$(\hat{p}_x)p'_xp''_x=p'_x\delta(p'_x-p''_x),$$

$$(\hat{H})p'_xp''_x=\left[\frac{p'^2_x}{2m}+V\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p'_x}\right)\right]\delta(p'_x-p''_x).$$

25. (1)位置表象中波方程 $\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}\psi(\boldsymbol{r},t)}{\mathrm{d}t}=\left[-\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\boldsymbol{r})\right]\cdot\psi(\mathbf{r},t)$，如将其中 $\psi(\mathbf{r},t)\to\phi(\boldsymbol{p},t)$，$\mathrm{i}\to-\mathrm{i}\hat{\boldsymbol{r}}\to\mathrm{i}\hbar\nabla_p$，$-\mathrm{i}\hbar\nabla\to\boldsymbol{p}$即可得出动量表象中的波方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\phi(\boldsymbol{p},t)}{\mathrm{d}t}=\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(\mathrm{i}\hbar\nabla_p)\right]\phi(\boldsymbol{p},t).$$

注意，左边 $\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}$ 中的 i 不变号.

定态波方程为 $\left[\dfrac{\hat{p}^2}{2m}+V(\mathrm{i}\hbar\nabla_p)\right]\phi(\boldsymbol{p})=E\phi(\boldsymbol{p})$.

(2) 已知一维谐振子的 $V(x)=\dfrac{1}{2}m\omega^2x^2$，动量表象中，定态波方程为 $\left[\dfrac{p^2}{2m}-\dfrac{\hbar^2}{2}m\omega^2\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}p^2}\right]\phi(p)=E\phi(p)$.

26. 上题中，一维谐振子无论在位置表象或动量表象其定态波方程均为二阶微分方程，这完全是由于 $\hat{H}=\dfrac{\hat{p}^2}{2m}+V(x)$ 中 $V(x)$

$=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ 所致，其他问题中如 $V(x)$ 有更简单的形式，如均匀静电场 E 中的带电粒子(电荷为 q)$V(x)=-qEx$，动量表象中定态波方程

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}-\mathrm{i}\hbar qE\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}\right]\phi(p)=E\phi(p)$$

只为一阶微分方程.

一般情况下 $V(x)$ 可能具有复杂的形式，如 $V(x)$ 是 x 的解析函数，可以展开为 x 的幂级数:

$$V(x)=V(0)+\left.\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right|_{x=0}\cdot x+\left.\frac{1}{2!}\frac{\mathrm{d}^2V}{\mathrm{d}x^2}\right|_{x=0}\cdot x^2+\cdots=\sum_n a_nx^n$$

设上式右方含 x 的最高次项为 x^m，则变换到动量表象中. 相应的波方程将是 m 阶的微分方程，从这点可看出，除非势 $V(x)$ 具有特别简单的形式，动量表象中的波方程将比位置表象中的波方程复杂. 甚至因无法求解而毫无用处，较好的处理方法是采用与此波方程等效的动量表象中的积分方程，见下题.

27. 已知，位置表象中定态波方程为 $\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r})=E\psi(\boldsymbol{r})$.

我们只讨论 $E<0$(束缚态)的情形.

已知 $\psi(\boldsymbol{r})$ 与 $\phi(\boldsymbol{p})$ 互为傅立叶变换，即

$$\phi(\boldsymbol{p})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r},$$

$$\psi(\boldsymbol{r})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int\phi(\boldsymbol{p})\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}.$$

我们取位置表象中定态波方程两端的傅立叶变换，这相当于以 $\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}$ 乘方程两端，并对整个空间积分，得

$$\frac{\hat{p}^2}{2m}\phi(\boldsymbol{p})+\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int\mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}V(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=E\phi(\boldsymbol{p}).$$

上式积分号中的 $\psi(\boldsymbol{r})$以 $\phi(\boldsymbol{p})$的傅立叶积分代入.

如势 $V(\boldsymbol{r})$ 存在傅立叶变换

$$\tilde{V}(\boldsymbol{p})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int V(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}\,\mathrm{d}^3r,$$

则式中引入 $\tilde{V}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int\mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}^3r$, 最后可得

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m}-E\right)\phi(\boldsymbol{p})=-\int\tilde{V}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\phi(\boldsymbol{p}')\mathrm{d}^3p'.$$

这就是当势 $V(\boldsymbol{r})$存在傅立叶变换时，动量表象中波函数 $\phi(\boldsymbol{p})$满足的积分方程. $\tilde{V}(\hat{p}-\hat{p}')$即为积分方程的核.

此积分方程与 $\phi(\boldsymbol{p})$ 满足的以微分方程表出的定态波方程等效.

28. 数学上，如(1)$f(x)$是分段光滑即 $f(x)$是连续函数，$f'(x)$是分段连续函数且. (2)$\int_{-\infty}^{\infty}|f(x)|\mathrm{d}x$ 存在，即 $f(x)$ 绝对可积，则 $f(x)$存在傅立叶积分①.

例如，一维谐振子，势 $V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ 满足 (1)，但 $\int_{-\infty}^{\infty}|V(x)|\mathrm{d}x\to\infty$, 即$V(x)$不是绝对可积的,因而一维谐振子 $V(x)$不存在傅立叶变换，不能利用 $\phi(\boldsymbol{p})$满足的积分方程.

29. 由 27 题，动量表象中，波函数 $\phi(\boldsymbol{p})$满足积分方程

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m}-E\right)\phi(\boldsymbol{p})=-\int\tilde{V}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\phi(\boldsymbol{p})\mathrm{d}^3p',$$

其中 $\tilde{V}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int\mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\cdot\boldsymbol{r}}V(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3r.$

对有心势$V(r)$如图 43，取$\boldsymbol{q}=\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}$方向为极轴. 在球坐标中计算 $\tilde{V}(\boldsymbol{q})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}^3r$. 按所取球坐标 $\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}=qr\cos\theta$,

① 参阅：郭敦仁，《数学物理方法》人民教育出版社，1965 年，p.152.

$$d^3\tau = r^2 dr\sin\theta d\theta d\varphi,$$

$$\tilde{V}(q) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta \int_0^{\infty} dr \cdot V(r) r^2 e^{\frac{i}{\hbar} q r\cos\theta}$$

$$= \frac{1}{4\pi^2\hbar^3}\int_0^{\infty} dr \cdot V(r) r^2 \int_{-1}^{1} d\eta e^{\frac{i}{\hbar} qr\eta}. \quad (\text{其中 } \eta \equiv \cos\theta)$$

$$\tilde{V}(q) = \frac{1}{2\pi^2 q\hbar^2}\int_0^{\infty} r\sin\left(\frac{qr}{\hbar}\right) V(r) dr.$$

上式表明对有心势 $V(r)$，$\tilde{V}(q)$ 是实的，且仅依赖于 $q = |\boldsymbol{p}' - \boldsymbol{p}|$.

(1) 屏蔽库仑势 $V(r) = \dfrac{-Ze^2}{r} e^{-\alpha r}$. $(\alpha > 0)$

$$\tilde{V}(q) = \frac{-Ze^2}{2\pi^2 q\hbar^2}\int_0^{\infty} e^{-\alpha r}\sin\left(\frac{qr}{\hbar}\right) dr = \frac{-Ze^2}{2\pi^2\hbar}\frac{1}{(\hbar^2\alpha^2 + q^2)}.$$

$\phi(\boldsymbol{p})$ 满足积分方程为

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m} - E\right]\phi(\boldsymbol{p}) = \frac{Ze^2}{2\pi^2\hbar}\int \frac{\phi(\boldsymbol{p}')d^3p}{(\hbar^2\alpha^2 + q^2)}.$$

(2) 纯库仑势 $V(r) = -\dfrac{Ze^2}{r}$.

在屏蔽库仑势中令 $\alpha = 0$，即为纯库仑势.

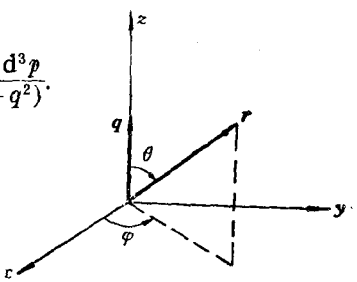


图 43

$$\tilde{V}(q) = \frac{-Ze^2}{2\pi^2\hbar q^2} = \frac{-Ze^2}{2\pi^2\hbar|\boldsymbol{p}' - \boldsymbol{p}|^2}.$$

由此得，动量表象中，类氢原子的定态波方程为

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m} - E\right]\phi(\boldsymbol{p}) = \frac{Ze^2}{2\pi^2\hbar}\int \frac{\phi(\boldsymbol{p}')d^3p'}{|\boldsymbol{p}' - \boldsymbol{p}|^2}.$$

具体求解 $\phi(\boldsymbol{p})$ 过程可参阅：B. H. Bransden *and* C. J. Joachain, *Physics of Atoms and Molecules*, 1983, p. 621, App. 5.

30. 一维谐振子哈密顿量为

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 = \frac{1}{2m}[\hat{p}^2 + (\alpha\hbar x)^2] = \frac{1}{2}m\omega^2[(\alpha'\hbar\hat{p})^2 + \hat{x}^2],$$

式中 $\alpha = \sqrt{m\omega/\hbar}$, $\alpha' = \sqrt{1/m\omega\hbar}$.

可见，$\hat{H}$ 关于 $\hat{p}$ 与 $\hat{x}$ 是对称的，差别只在于 α 与 α' 不同. 因而，本征函数 $\phi_n(\alpha', p)$ 与 $\psi_n(\alpha, x)$ 形式应当完全一样.

已知 $\psi_n(\alpha, x) = N_n e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} H_n(\alpha x)$，其中 $N_n = [\alpha/\sqrt{\pi}\, 2^n n!]^{\frac{1}{2}}$. 故应有 $\phi_n(\alpha', p) = N'_n e^{-\frac{1}{2}\alpha'^2 p^2} H_n(\alpha' p)$，其中 $N'_n = [\alpha'/\sqrt{\pi}\, 2^n n!]^{\frac{1}{2}}$.

31. 一般说来，波方程在 $\hat{Q}$ 表象中的矩阵形式为

$$i\hbar \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \vdots \end{pmatrix} = (H) \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \vdots \end{pmatrix},$$

或

$$i\hbar \frac{da_n(t)}{dt} = \sum_i H_{ni} a_i(t),$$

式中，$H_{ij} = (\varphi_i^Q, \hat{H}\varphi_j^Q)$，$\varphi^Q$ 为 Q 表象中本征矢.

如果 $\hat{Q}$ 表象为能量表象，则

矩阵

$$(H) = \begin{pmatrix} E_1 & 0, \cdots \\ 0 & E_2 \cdots \\ \vdots & \ddots \end{pmatrix},$$

波方程为

$$i\hbar \frac{da_m(t)}{dt} = E_m a_m(t).$$

32. 波函数空间 $\mathscr{H}$ 与体系右矢集合构成的态空间 ε 都是数学上的矢量空间. 并且，这两个矢量空间是同构的，$\mathscr{H}$ 空间中每一个波函数都在 ε 空间中有一个右矢与之对应.

在一般初等量子力学教材中，不引入狄拉克符号时，就是只以波函数空间作为态空间，把波函数作为态矢量来讨论的.

为什么又要引入右矢？体系量子态以波函数描述与以右矢描述有什么区别呢？

波函数空间中，无论是基矢［例如，力学量 $\hat{F}$ 的本征函数系 $\{u_i(r)\}$］或波函数本身［例如 $\psi(r)$］，都是在具体表象（这里是坐

标表象)中给出的.

体系量子态以右矢描述时，右矢是与具体表象无关的抽象矢量.

从物理规律上，正如经典力学中 $F=ma$ 这个矢量公式与坐标系无关一样，量子力学规律也应与具体表象（坐标系的选取）无关.

因而,尽管作为矢量空间的组元，右矢与波函数都可视为"矢量",但必须把这种"矢量"与通常的几何矢量相区别. 通常的几何矢量公式与矢量运算可不涉及具体坐标系. 这正是使用矢量的优越性.

量子力学中，以右矢作为态矢量才与通常的几何矢量意义一致,这样的态矢量才与具体表象无关. 引入这种符号. 在理论上,运算上都带来极大的方便.

正是由于空间$\mathscr{H}$与空间 ε 之间有着这样的差别,为了避免混淆,通常把态矢量、态空间留给狄拉克符号专用而与波函数空间相区分.

33. (1)量子力学中,态空间是具有内积的矢量空间. 波函数空间中，波函数 ϕ 与 ψ 的内积定义为 $(\phi,\ \psi)=\int\phi^*\psi\mathrm{d}\tau$. 与之类似,任两个右矢 $|\phi\rangle$ 与 $|\psi\rangle$ 的内积

$$(|\phi\rangle,|\psi\rangle)$$

是一复数.

狄拉克符号中,把这个内积记为

$$(|\phi\rangle,|\psi\rangle)=\langle\phi|\psi\rangle.$$

其中,$\langle\phi|$ 是对应于 $|\phi\rangle$ 的左矢. 数学上，左矢 $\langle\phi|$ 是态空间 ε 的对偶空间 ε^* 中的一个矢量.

数学上对偶空间的定义可参阅: C. Cohen-Tannoudji 等,《量子力学》(中译本)第一卷上册,高教出版社,1987，p. 85.

由于右矢与左矢是不同空间中的矢量，不能相加.

(2) 如在 $\hat{F}$ 表象中，$|\psi\rangle$以一列复数矩阵

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_i \\ \vdots \end{pmatrix}$$

表示，则其对偶矢量 $\langle\psi|$ 在相同表象中是此列矩阵的转置共轭 $(a_1^*, a_2^*, \cdots, a_i^*, \cdots)$. 因而，对偶矢量又称厄米共轭矢量，常简称为共轭矢量.

(3) 狄拉克符号右(左)矢中的字母，只是作为与其他右（左）矢相区别的标记，没有确定的含意. 它可以是量子态的量子数如 $|n\rangle$、$|l\ m\rangle$；也可以是标明本征矢是哪个力学量的如 $|p\rangle$、$|x\rangle$；也可以是本征值，如 $|p'\rangle$、$|x'\rangle$等；也可以是作为量子态标志的任何符号，如 $|A\rangle$、$|\psi\rangle$等. 有时也常以 $|\rangle$代表任一右矢.

34. (1) $(\langle\psi|)^\dagger = |\psi\rangle$, $(|\psi\rangle)^\dagger = \langle\psi|$.

(2) 线性算符 $\hat{F}$ 的厄米共轭 $\hat{F}^\dagger$ 定义为 $\langle\hat{F}^\dagger\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|\hat{F}\psi\rangle$.

(3) 厄米算符 $\hat{F}^\dagger = \hat{F}$.

(4) 常数 λ 的厄米共轭为 λ^*(共轭复数).

(5) 对含有右矢、左矢、线性算符及常数的式子，求厄米共轭式时的规则为

① 代换：右矢↔左矢，线性算符 $\hat{F} \leftrightarrow \hat{F}^\dagger$，

常数 $\lambda \leftrightarrow \lambda^*$.

② 反序：把式子除常数外所有因子，颠倒反序.

35. (1) 线性算符 $\hat{F}$ 作用于左矢$\langle\psi|$时，$\langle\psi|\hat{F} = (\hat{F}^\dagger|\psi\rangle)^\dagger$.

(2) 厄米算符作用于左矢$\langle\psi|$时，$\langle\psi|\hat{F} = (\hat{F}|\psi\rangle)^\dagger$.

(3) 如 $|\psi\rangle$为$\hat{F}$的本征值为F'的本征矢，即$\hat{F}|\psi\rangle = F'|\psi\rangle$，则

$\langle\psi|\hat{F}=F'\langle\psi|$.

36. (1) $(\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle)^{\dagger}=\langle\psi|\hat{B}^{\dagger}\hat{A}^{\dagger}$.

(2) $|\lambda\psi\rangle=\lambda|\psi\rangle,\langle\lambda\psi|=\lambda^{*}\langle\psi|$.

(3) $(|\varphi\rangle\langle\phi|)^{\dagger}=|\phi\rangle\langle\varphi|$.

(4) $|\hat{F}\psi\rangle=\hat{F}|\psi\rangle,(\hat{F}|\psi\rangle)^{\dagger}=\langle\psi|\hat{F}^{\dagger}$.

(5) $\hat{F}\langle\psi|$没意义.

37. 前面题中已说明，体系的波函数总是呈现于具体表象中，而狄拉克符号中的态矢量是不涉及具体表象的抽象矢量，它与通常的几何矢量的含意是一致的.

数学上，矢量A可用给定坐标系中的分量表出. 如选用基矢为(i,j,k)的直角坐标系，则 $A=A_xi+A_yj+A_zk$. 矢量A可用其分量即A的坐标$A(A_x,A_y,A_z)$表出. 而A的各个分量是A在各基矢上的投影如 $A_x=(A,i)$，…. 如选用其他坐标系，如球极坐标，则A可以相应的分量表出为 $A(A_r,A_\theta,A_\varphi)$.

与之类似，描述体系量子态的态矢$|\psi\rangle$，可用态空间中任一组基矢$\{|u_i\rangle\}$的线性叠加表示为 $|\psi\rangle=\sum_i C_i|\psi\rangle$. 在基矢$\{|u_i\rangle\}$中，态矢$|\psi\rangle$的分量是数 $C_i=\langle u_i|\psi\rangle(i=1,2,\cdots)$的集合. 如果这组基矢是由力学量完全集 $\hat{F}$ 的本征矢所确定，就称为 $\hat{F}$ 表象.

态矢$|\psi\rangle$在 $\hat{F}$ 表象中所有基矢上分量的集合，即

$C_1=\langle u_1|\psi\rangle;C_2=\langle u_2|\psi\rangle$；…称为$|\psi\rangle$态在 $\hat{F}$ 表象的波函数. 数 $C_i=\langle u_i|\psi\rangle$ 的集合可用一列矩阵（行数通常是可数无穷多）表为

$$\begin{pmatrix}\langle u_1|\psi\rangle\\ \langle u_2|\psi\rangle\\ \vdots\\ \langle u_i|\psi\rangle\\ \vdots\end{pmatrix}.$$

如果基矢是连续基，以 x 表象为例．本征矢 $|x'\rangle$ 满足 $\langle x'|x''\rangle=\delta(x'-x'')$．其中，$x'$ 是连续变量．

态矢 $|\psi\rangle$ 在给定 x' 的基矢 $|x'\rangle$ 上的分量是一个数 $\langle x'|\psi\rangle$．态矢 $|\psi\rangle$ 在连续基矢 $\{|x'\rangle\}$ 上所有分量，将是连续的无穷多个数 $\langle x'|\psi\rangle$ 的集合．因而可用 x 的一个函数表出．这就是态 $|\psi\rangle$ 在 x 表象中的波函数

$$\psi(x)=\langle x|\psi\rangle$$

其中，x 为连续变量．

波函数 $\psi(x)$ 在 x' 点的值即右矢 $|\psi\rangle$ 在 x 表象基矢 $|x'\rangle$ 上的分量．当然，波函数 $\psi(x)$ 也可用一列矩阵表出为

$$\begin{pmatrix}\vdots\\ \langle x|\psi\rangle\\ \vdots\end{pmatrix}.$$

只是由于 x 是连续变量，这相当于连续的无穷多个数在垂直方向上排成一列．

38．(1) 定义 $|\varphi\rangle=|\varphi_1\rangle+\lambda|\varphi_2\rangle$．式中 λ 是任意参量．已知必有 $\langle\varphi|\varphi\rangle\geqslant 0$．即

$$\langle\varphi|\varphi\rangle=\langle\varphi_1|\varphi_1\rangle+\lambda\langle\varphi_1|\varphi_2\rangle+\lambda^*\langle\varphi_2|\varphi_1\rangle+\lambda\lambda^*\langle\varphi_2|\varphi_2\rangle\geqslant 0.$$

由于上式对任意 λ 都成立．选取 $\lambda=\dfrac{-\langle\varphi_2|\varphi_1\rangle}{\langle\varphi_2|\varphi_2\rangle}$，则

$$\frac{-\langle\varphi_1|\varphi_2\rangle}{\langle\varphi_2|\varphi_2\rangle},$$

代入 $\langle\varphi|\varphi\rangle$ 式中，得

$$\langle\varphi_1|\varphi_1\rangle-\frac{\langle\varphi_1|\varphi_2\rangle\langle\varphi_2|\varphi_1\rangle}{\langle\varphi_2|\varphi_2\rangle}\geqslant 0.$$

以正数 $\langle\varphi_2|\varphi\rangle$ 乘以上不等式，即得

$$\langle\varphi_1|\varphi_1\rangle\langle\varphi_2|\varphi_2\rangle\geqslant|\langle\varphi_1|\varphi_2\rangle|^2.$$

(2) 史瓦兹不等式中，仅在 $\langle\varphi|\varphi\rangle=0$，即 $|\varphi_1\rangle=-\lambda|\varphi_2\rangle$、两

右矢$|\varphi_1\rangle$与$|\varphi_1\rangle$成正比时，等号才成立.

(3) 与之类似的不等式，如两矢量A与B，则

$$(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})^2\leqslant|\boldsymbol{A}|^2\cdot|\boldsymbol{B}|^2.$$

39. 这两个等式都不能成立.

(1) 问题在于对时间t的微分不可以向左作用. 根据定义:

$$\frac{\mathrm{d}\hat{F}}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial\hat{F}}{\partial t}+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{F},\hat{H}]=\frac{\partial\hat{F}}{\partial t}+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(\hat{F}\hat{H}-\hat{H}\hat{F}),$$

因而，$\langle m|\frac{\mathrm{d}\hat{F}}{\mathrm{d}t}|n\rangle=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle m|[\hat{F},\hat{H}]|n\rangle+\left\langle m|\frac{\partial\hat{F}}{\partial t}|n\right\rangle$

$$=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(E_n-E_m)\langle m|\hat{F}|n\rangle+\left\langle m|\frac{\partial\hat{F}}{\partial t}|n\right\rangle.$$

(2) 错误出在：$\langle p'|\hat{x}|p''\rangle\neq x\delta(p'-p'')$. 因为$|p''\rangle$不是$\hat{x}$本征态，$\hat{x}$不能提出，应当是$\langle p'|\hat{x}|p''\rangle=\left\langle p'|\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}|p''\right\rangle$.

40. 算符$\hat{P}_i=|i\rangle\langle i|$的意义在于，它作用于任何态矢上，便得到该态矢在基矢$|i\rangle$方向的投影矢量.

$$\hat{P}_i|A\rangle=|i\rangle\langle i|A\rangle=A_i|_i\rangle,$$

且 $$\hat{P}_i^2=\hat{P}_i|i\rangle\langle i|=|i\rangle\langle i|i\rangle\langle i|=|i\rangle\langle i|=\hat{P}_i.$$

故$\hat{P}_i$称为投影算符，$A_i=\langle i|A\rangle$便是投影数值.

公式$\sum_i|i\rangle\langle i|=1$成立的条件为：基矢集$\{|i\rangle\}$构成正交、归一的完全集. 这时，任意态矢均可按$\{|i\rangle\}$唯一地展开

$$|A\rangle=\sum_i A_i|i\rangle=\sum_i|i\rangle\langle i|A\rangle.$$

由于$|A\rangle$是任意态矢，故得到$\sum_i\hat{P}_i=\sum_i|i\rangle\langle i|=\mathbb{1}$. $\mathbb{1}$为恒等算符. 此公式可作为完全集的定义，称为封闭性关系.

对连续基矢，封闭性关系为

$$\int\mathrm{d}\alpha|\alpha\rangle\langle\alpha|=1.$$

x 表象中，封闭性关系为

$$\sum_i u_i^*(x')u_i(x)=\delta(x'-x) \quad 及 \int u_\alpha^*(x')u_\alpha(x)\mathrm{d}\alpha=\delta(x'-x)$$

式中$\{u_i(x)\}$是一组可数的完全函数系，$\{u_\alpha(x)\}$是一组不可数(连续)的完全函数系.

41. 有的书将一维谐振子的能量表象称为粒子粒表象或占有数表象. 那不是因为"粒子数确定、能量也确定"，一维谐振子只有一个粒子，谈不上粒子数，所以有此称呼是因为今后可以用此表象研究多光子系统. 所谓粒子数是指那时的光子数.

42. 连续矩阵 p_x 的矩阵元中出现的是δ函数的导数 $\frac{\partial}{\partial x_1}\delta(x_1-x_2)$. 和$\delta$函数一样，它也是一些有界的并具有尖锐峰值的函数的极限. $\delta(x_1-x_2)$ 的峰值在 $x_1=x_2$ 处. $\frac{\partial}{\partial x_1}\delta(x_1-x_2)$ 虽在 $x_1=x_2$ 时为零，但在 $x_1=x_2$ 的两侧有两个邻近而符号相反的很尖锐的峰，所以 p_x 矩阵不是对角矩阵.

43. 新基矢 $|\tilde{x}\rangle=\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}g(\hat{x})}|x\rangle=\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}g(x)}|x\rangle$，其中 $g(x)=\int^x f(x')\mathrm{d}x'$

对新基矢，显然有$\langle\tilde{x}|x|\tilde{x}'\rangle=\langle y|x|x'\rangle=x\delta(x-x')$.

而$\langle\tilde{x}|\hat{p}|\tilde{x}'\rangle=\langle x|\mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{i}}{\hbar}g(\hat{x})}\hat{p}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}g(\hat{x})}|x'\rangle$. 应用 $\hat{p}F(\hat{x})-F(\hat{x})\hat{p}=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial F}{\partial x}$，则 $\hat{p}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}g(\hat{x})}=\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}g(\hat{x})}\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)+\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\cdot\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}g(\hat{x})}=\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}g(\hat{x})}\left[\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}+f(x)\right]$.

因而，$\langle\tilde{x}|\hat{p}|\tilde{x}'\rangle=\left\langle x\left|\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}+f(x)\right|x'\right\rangle$

$$=\left[\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}+f(x)\right]\delta(x-x').$$

可见，x表象中基矢变换$|\hat{x}\rangle=e^{\frac{i}{\hbar}g(\hat{x})}|x\rangle$时，算符$\hat{x}$，$\hat{p}$的相应变换为

$$\hat{x}=x,\qquad \hat{p}=-i\hbar\frac{d}{dx}+f(x).$$

由此看出，x表象不是唯一的．由给定基矢$|x\rangle$即可得另一新基矢$|\hat{x}\rangle=e^{\frac{i}{\hbar}g(\hat{x})}|x\rangle$．但这只相当乘上一个相因子$e^{\frac{i}{\hbar}g(x)}$．所以，模方和正交性均保持不变．

虽然，$\hat{p}$的矩阵元因$f(x)$而异，但体系物理性质没有实质上变化．选择$f(x)=0$后，动量算符在x表象中才直接以微分算符表出．

44. (1) 中$|\psi(x)\rangle$不正确．(2) 都不正确．

45. $|-r_0\rangle$是位置算符的本征矢，属于本征值$-r_0$．对应于波函数$\psi_{-r_0}(r)=\delta(r+r_0)$．

$-|r_0\rangle$也是位置算符的本征矢，但属于本征值r_0，对应的波函数为$-\psi_{r_0}(r)=-\delta(r-r_0)$．

故$|-r_0\rangle$与$-|r_0\rangle$二者不等．

46. 直接计算可得出

$$(p_x)_{x_1x_2}=\langle x_1|p_x|x_2\rangle=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_1}\delta(x_1-x_2)=\frac{-\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_2}\delta(x_1-x_2),$$

所以两者都正确．

47. 右矢是态空间e中一个矢量，是可归一化的矢量或有限长度的矢量．

非正规矢是指不能归一化或有无限长度的矢量，例如动量本征矢．非正规矢不属于态空间，它们不代表实际存在的量子态，只是理想化的模型．但非正规矢都与态空间e中任右矢存在着有限的标积．

左右矢间是否有着一一对应关系呢？

态空间 e 每个右矢 $|\varphi\rangle$ 都有 e 的对偶空间 e^* 中一个矢量——左矢 $\langle\varphi|$ 与之对应.

但是，却存在没有对应右矢的左矢[实例参阅: C. Cohen Tannoudji 等，《量子力学》(中译本)第一卷上册，高教出版社，p，87].

如果我们除了 e 空间的右矢外，把非正规矢作为广义右矢，虽然它们是无限长度的矢量. 但它们与 e 空间中任何右矢的标积却都是有限的.

引入广义右矢后，使对偶空间 e^* 中每个左矢都对应着一个右矢.

左右矢的这种不对应，用数学语言说: 态空间 e 和它的对偶空间 e^* 不是同构的；或直观地说: e^* 空间比 e 空间更大.

48. $|\psi\rangle\langle\psi|$ 是投影算符;

$\langle\psi|\psi\rangle$ 和 $\langle u|\hat{F}|w\rangle$ 是数;

$\lambda|u\rangle\langle v|w\rangle$ 是右矢[因为 λ 和 $\langle v|w\rangle$ 都是数];

$\lambda\langle u|\hat{A}|w\rangle|v\rangle\langle\varphi|$ 是算符[因为 λ 和 $\langle u|\hat{A}|w\rangle$ 都是数].

第 八 章

1. 量子力学中，角动量是按下式定义

$$\hat{\boldsymbol{J}} \times \hat{\boldsymbol{J}} = \mathrm{i}\hbar \hat{\boldsymbol{J}}.$$

任何满足此式的算符所代表的力学量，都可以认为是角动量. 此定义较之角动量的仿经典定义$\hat{\boldsymbol{L}} = \hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{p}}$更具普遍性. 后者只能适用于轨道角动量而不能适用于自旋.

2. 要看$\hat{L}_z$与$\hat{L}^2$是否与$\hat{H}$对易，对易就可能. 实例有：

(1) 有心力场中运动的粒子，例如，氢原子中的定态也是$\hat{L}^2$的本征态；

(2) 沿z方向传播的平面波$\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}$就是粒子能量、动量及$\hat{L}_z$的共同本征态.

3. $l=0$时，粒子波函数与概率分布都是球对称的. 角动量指向任何方向是等概率的. 因而，角动量在任何方向的投影皆为零，需特别注意的是：$\overline{L^2}=0$，切不可理解为粒子停止运动.

4. 在球对称势场中，角动量的本征函数可以是非球对称的，概率分布也可以是非球对称的.

首先，从数学上，有心力场中定态波动方程存在着$l \neq 0$的解；其次，从物理意义上，球对称势场只是表明外界对体系的作用是各向同性的，没有理由要求体系本身也必须是球对称的.

经典力学中也是如此. 例如，太阳对行星的万有引力势具有球对称性，但行星运动并非球对称的.

5. (1) 设ψ_m为角动量分量$\hat{J}_z$属于本征值$m\hbar$的本征态，即

$\hat{J}_z|\psi_m\rangle = m\hbar|\psi_m\rangle$，$\langle\psi_m|\hat{J}_z = m\hbar\langle\psi_m|$.

由基本对易关系 $\hat{J}_y\hat{J}_z - \hat{J}_z\hat{J}_y = \mathrm{i}\hbar\hat{J}_x$.

在$|\psi_m\rangle$态中求J_x,

$$i\hbar J_x=\langle\psi_m|\hat{J}_y\hat{J}_z|\psi_m\rangle-\langle\psi_m|\hat{J}_z\hat{J}_y|\psi_m\rangle=m\hbar\langle\psi_m|\hat{J}_y|\psi_m\rangle$$
$$-m\hbar\langle\psi_m|\hat{J}_y|\psi_m\rangle=0.$$

类似地,利用$\hat{J}_z\hat{J}_x-\hat{J}_x\hat{J}_z=i\hbar\hat{J}_y$可得出在$\langle\psi_m|$中$J_y=0$.

(2) 由矢量模型,角动量矢量J绕z轴进动,形成锥体的斜高为$\sqrt{j(j+1)}\hbar$,对z轴有固定的投影$m\hbar$,如图 44.

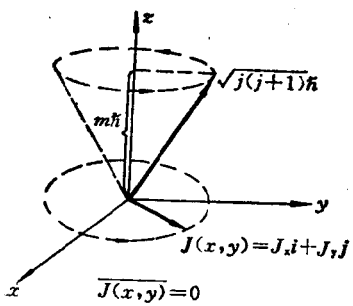


图 44

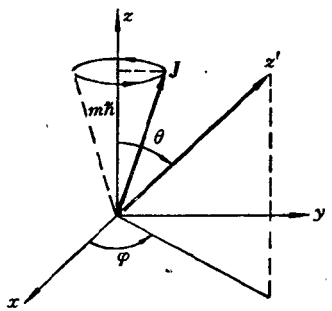


图 45

角动量在xy平面上的投影为$J(x,y)$,由于J进动时,$J(x,y)$方向不固定,因而$J_x=J_y=0$.

(3) 导出以上结果时,只利用了角动量的基本对易关系.因而,对一切角动量均适用.对自旋角动量的应用见本章第 64 题

6. 如图 45 设z轴的方位角为(θ,φ),则

$$\hat{L}_{z'}=\hat{L}_x\cos(x,z')+\hat{L}_y\cos(y,z')+\hat{L}_z\cos(z,z').$$

在$\hat{L}_z$的本征态ψ_m中求$\bar{L}_{z'}$.已知,对$|\psi_m\rangle$态,$\bar{L}_x=\bar{L}_y=0$,$\cos(z,z')=\cos\theta$,故

$$\bar{L}_{z'}=\langle\psi_m|\hat{L}_{z'}|\psi_m\rangle=\cos\theta\langle\psi_m|\hat{L}_z|\psi_m\rangle=m\hbar\cos\theta.$$

7. (1) $\hat{R}_y(\theta)=e^{-i\hat{L}_y\theta/\hbar}$是体系绕$y$轴转$\theta$角的转动算符.$\hat{R}_z(\varphi)=e^{-i\hat{L}_z\varphi/\hbar}$是体系绕$z$轴转$\varphi$角的转动算符.

一般地，体系绕 n 方向转动 α 角的转动算符为

$$\hat{R}_n(\alpha)=e^{-i\alpha n\cdot L/\hbar}.$$

体系经转动 $\hat{R}_n(\alpha)$ 后，体系波函数将由 ψ_m 成为 $\hat{R}_n(\alpha)\psi_m$.

(2) 如体系经两次转动，首先绕 y 轴转 θ 角，再绕原 z 轴转 φ 角. 这样，原来的 z 轴就转到方位角为$(\theta,\ \varphi)$的 z'轴方向. $\hat{L}_{z'}$的本征态可由 ψ_m 得出为$\psi'_m=e^{-i\hat{L}_z\varphi/\hbar}\,e^{-i\hat{L}_y\theta/\hbar}\,\psi_m$.

8. 算符$\hat{\boldsymbol{r}}$与$\hat{\boldsymbol{p}}$的矢量积中，不出现有不对易因子 xp_x、yp_y、zp_z 的项. 例如，$\hat{L}_z=(\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}})_z=\hat{x}\hat{p}_y-\hat{y}\hat{p}_x$，而

$$(-\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{r}})_z=-\hat{p}_x\hat{y}+\hat{p}_y\hat{x},$$

由于 $\hat{x}\hat{p}_y=\hat{p}_y\hat{x}$，$\hat{p}_x\hat{y}=\hat{y}\hat{p}_x$，故

$$(-\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{r}})_z=\hat{x}\hat{p}_y-\hat{y}\hat{p}_x=\hat{L}_z.$$

其他两个分量 $\hat{L}_y$ 及 $\hat{L}_x$ 也有类似的结果.

因而，在量子力学中仍有$\hat{\boldsymbol{L}}=\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}}=-\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{r}}$.

9. 电子具有自旋的实验证据：

(1) 斯特恩-盖拉赫实验；

(2) 光谱精细结构；

(3) 反常塞曼效应.

以上实验事实，只有引入自旋概念才能得到解释.

理论依据：从相对论量子力学的狄拉克方程出发，可以证明轨道角动量不是运动积分，必须引入补充项构成总角动量，才能满足角动量守恒定律. 引入的补充项就是自旋.

10. 斯特恩-盖拉赫实验中，不能使用自由电子的原因是：

(1) 电子带有电荷，在磁场中运动时要受到洛伦兹力作用；

(2) 电子质量轻，德布罗意波长较长，不易清晰成象.

使用中性 s 态原子，原因有三：(1)质量较重；(2)不带电荷；

(3) 处于 s 态，$l=0$，可排除轨道角动量的影响.

11. (1) 自旋是量子力学的特有概念. 经典物理中没有类似的概念与之对应. 所谓地球自转实际上仍然是地球各质点的轨道运动，应与轨道角动量相对应，而不是与自旋相对应.

(2) 若将电子设想为一个均匀带电的经典小球，而自旋即此小球的转动，这种看法是错误的. 可以应用不确定关系来说明这一点. 因为 $p\sim\Delta p\sim\frac{\hbar}{r_c}$, $r_c=\frac{e^2}{mc^2}$为电子经典半径，即 $p\sim\frac{\hbar mc^2}{e^2}=\frac{mc}{\alpha}$. 已知 $\alpha=\frac{e^2}{\hbar c}\approx\frac{1}{137}$为电磁耦合常数. 所以 $p\sim137\,mc$, $v\sim137c$.

可见，小球表面电荷速度远超过光速. 因此，这个模型是错误的.

12. (1) 自旋是内禀角动量，故不能在坐标空间表示出来.

(2) 轨道角动量是外部空间角动量，可在坐标表象中表示. 量子数为整数，本征态为球谐函数. 自旋是内禀角动量，量子数为整数或半奇整数，自旋函数须用多分量波函数表示. 此外，二者的旋磁比不同.

13. 考虑自旋后，波函数 $\psi=\psi(\boldsymbol{r},\ S_z)$. 自旋为 S 的粒子在某特定方向投影（通常取 z 轴方向）状态数为 $2S+1$. 对电子，$S=\frac{1}{2}$, $2S+1=2$, 自旋投影 S_z 只能取 $\pm\frac{\hbar}{2}$ 两个离散值. 波函数中包括自旋变量 S_z 后，$\psi(\boldsymbol{r},S_z)$ 相当两个波函数

$$\psi_+=\psi\left(\boldsymbol{r},\frac{\hbar}{2}\right)\ 与\ \psi_-=\psi\left(\boldsymbol{r},\frac{-\hbar}{2}\right).$$

常以二分量波函数表示为

$$\psi=\begin{pmatrix}\psi_+\\ \psi_-\end{pmatrix}.$$

计及自旋时，波函数归一化条件中，除对坐标积分还应对自旋取和. 如对电子，因 $S_z=\pm\frac{\hbar}{2}$，归一化条件为

$$\sum_{S_z=\pm\frac{\hbar}{2}}\int|\psi(\boldsymbol{r},S_z)|^2\mathrm{d}^3x=\int\left|\psi\left(\boldsymbol{r},\frac{\hbar}{2}\right)\right|^2\mathrm{d}^3x$$
$$+\int\left|\psi\left(\boldsymbol{r},-\frac{\hbar}{2}\right)\right|^2\mathrm{d}^3x=1.$$

当单电子哈密顿量不含自旋变量或可以表成连续变量 $\boldsymbol{r}$ 部分，与含 S_z 分立部分之和，波函数可分离变量为

$$\psi(\boldsymbol{r},S_z)=\phi(\boldsymbol{r})\chi(S_z).$$

式中，$\chi(S_z)$ 是自旋波函数，一般形式为 $\chi=\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$，称为二分量旋量. 其中 $|a|^2=\left|\chi\left(\frac{\hbar}{2}\right)\right|^2$ 代表 $S_z=\frac{\hbar}{2}$ 的概率，$|b|^2=\left|\chi\left(-\frac{\hbar}{2}\right)\right|^2$ 代表 $S_z=-\frac{\hbar}{2}$ 的概率. 归一化条件为

$$\sum_{S_z=\pm\frac{\hbar}{2}}|\chi(S_z)|^2=|a|^2+|b|^2=1.$$

14. $\hat{S}_z$ 的本征态是自旋波函数 $\chi=\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$ 的特例. 由于在 $\hat{S}_z$ 的本征态中，本征值只有 $\pm\frac{\hbar}{2}$ 与量子数 $m_s=\pm\frac{1}{2}$ 对应. $\chi=\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$ 中，对 $S_z=\frac{\hbar}{2}$ 的本征态 $a=1,b=0$；对 $S_z=-\frac{\hbar}{2}$ 的本征态 $a=0,b=1$. 通常把 S_z 的本征态记为 $\chi_{m_s}(S_z)$，即

$$\chi_{\frac{1}{2}}(S_z)=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\ \chi_{-\frac{1}{2}}(S_z)=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}.$$

为了简便，有时把它们写成 $\chi_\pm$ 或 $\alpha_z=\alpha=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\beta_z=\beta=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$，$\alpha,\beta$ 是电子的两个线性独立的自旋态，是一组正交完备基矢. 以此基矢的表象叫 S_z 表象. 任一自旋态 $\chi=\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$ 在 S_z 表象中可展开为

$$\chi = a\alpha + b\beta.$$

15. 电子自旋算符$\hat{S}$可用无量纲的泡利算符σ表出为

$$\hat{S} = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}.$$

有时把泡利算符在各种表象中的矩阵表示统称为泡利矩阵. 但通常是在S_z表象,$\hat{\sigma}$的等价的矩阵表示中,选定

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

作为标准形式而称之为泡利矩阵. 凡不加说明引入σ矩阵时,都是指标准形式而言.

有的著述中,把S_z表象中这个选定的标准矩阵,称为是在泡利表象中的表示.

16. (1) 设 $A\alpha_x + B\beta_x = 0$, 即$\frac{A}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{B}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = 0$, $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} A+B \\ A-B \end{pmatrix} = 0$. 得 $A+B=0, A-B=0$, 必有 $A=B=0$.

可见, $A\alpha_x + B\beta_x = 0$ 只有 $A=B=0$ 时成立, 故 α_x 与 β_x 是线性无关的. 以之为基矢展开任一旋量

$$\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}[(a+b)\alpha_x + (a-b)\beta_x].$$

(2) 类似上问, 设 $A\alpha_y + B\beta_y = 0$, 即$\frac{A}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ \mathrm{i} \end{pmatrix} + \frac{B}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -\mathrm{i} \end{pmatrix} = 0$, $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} A+B \\ \mathrm{i}A-\mathrm{i}B \end{pmatrix} = 0$, 得 $A+B=0, \mathrm{i}(A-B)=0$, 必有 $A=B=0$.

故 α_y 与 β_y 是线性无关的. 以之为基矢展开任一旋量

$$\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}[(a-\mathrm{i}b)\alpha_y + (a+\mathrm{i}b)\beta_y].$$

17. 把 α_z 以 α_x 与 β_x 线性叠加表出为

$$\alpha_z=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\frac{1}{2}\left[\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}\right]=\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_x+\beta_x).$$

两项展开系数均为$\frac{1}{\sqrt{2}}$. 因而，S_x 取值 $\pm\frac{\hbar}{2}$ 的概率均为 $\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2=\frac{1}{2}$.

18. 除(1)为零外. 其余各问均为$\frac{1}{2}$. 参阅本章第 41 题(4).

19. 由所给公式 $\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j=\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k+\delta_{ij}$,

$i=j$ 时得出 $\hat{\sigma}_x^2=\hat{\sigma}_y^2=\hat{\sigma}_z^2=1$, 因而 $\hat{\sigma}^2=\hat{\sigma}_x^2+\hat{\sigma}_y^2+\hat{\sigma}_z^2=3$;

由公式 $i\neq j$ 时得出

$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y=-\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x=\mathrm{i}\hat{\sigma}_z$, $\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z=-\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y=\mathrm{i}\hat{\sigma}_x$,

$\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x=-\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z=\mathrm{i}\hat{\sigma}_y$

因而 $\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y+\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x=\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z+\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y=\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x+\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z=0$.

$[\hat{\sigma}_x,\hat{\sigma}_y]=2\mathrm{i}\hat{\sigma}_z$, $[\hat{\sigma}_y,\hat{\sigma}_z]=2\mathrm{i}\hat{\sigma}_x$, $[\hat{\sigma}_z,\hat{\sigma}_x]=2\mathrm{i}\hat{\sigma}_y$.

可写成 $\hat{\sigma}\times\hat{\sigma}=2\mathrm{i}\hat{\sigma}$ 或 $[\sigma_i,\sigma_j]=2\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_k$.

关于这些公式适用条件. 参阅第 29 题.

20. (1) 由于 $\hat{\sigma}_z^2=1$, 所以 $|\sigma_z|=\sqrt{\hat{\sigma}_z^2}=1$;

而 $\hat{\sigma}^2=\hat{\sigma}_x^2+\hat{\sigma}_y^2+\hat{\sigma}_z^2=3$, 故 $|\hat{\sigma}|=\sqrt{\hat{\sigma}^2}=\sqrt{3}$.

(2) $\hat{\sigma}\cdot\hat{\sigma}\times\hat{\sigma}=2\mathrm{i}\hat{\sigma}\cdot\hat{\sigma}=2\mathrm{i}\hat{\sigma}^2=6\mathrm{i}$.

由于 $\hat{\sigma}_z^2=1$, 故 $\hat{\sigma}_z^n=1$, n 偶; $\hat{\sigma}_z^n=\hat{\sigma}_z$, n 奇.

21. 由于 $\hat{\sigma}$ 三个分量间不对易. 因而，三个分量之积与顺序有关.

例如，已知 $\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z=-\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y=\mathrm{i}\hat{\sigma}_x$, 以 $\hat{\sigma}_x$ 左乘此式得 $\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z=\mathrm{i}\hat{\sigma}_x^2=\mathrm{i}$ 与 $\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y=-\mathrm{i}$.

类似的结果有 $\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z=\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y=\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x=\mathrm{i}$,

$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y=\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z=\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x=-\mathrm{i}.$$

22. 因为 $\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z=\mathrm{i}$ 与表象无关. 而乘积结果中 i 的出现使在任何表象中，三个泡利矩阵 σ_x、σ_y、σ_z 不可能都是实的，也不可能两个是纯虚的另一个是实矩阵.

23. (1) ③ 正确. 恒等式成立与 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 是否对易无关. 当 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 不对易时，要注意 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 在恒等式两边要有同样的顺序. 例如，$(\hat{\sigma}\cdot\hat{r})(\hat{\sigma}\cdot\hat{p})=\hat{r}\cdot\hat{p}+\mathrm{i}\hat{\sigma}\cdot(\hat{r}\times\hat{p})$.

(2) 取 $\hat{A}=\hat{B}=\hat{n}$(单位矢量). 由于 $\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{n}=0$, $\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{n}=1$,

所以 $\hat{\sigma}_n^2=(\hat{\sigma}\cdot\hat{n})(\hat{\sigma}\cdot\hat{n})=\hat{n}\cdot\hat{n}+\mathrm{i}\hat{\sigma}\cdot(\hat{n}\times\hat{n})=1$，即 $\hat{\sigma}_n^2$ 的本征值也是 ±1.

24. $$\hat{\sigma}_x\alpha=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\beta,\quad \hat{\sigma}_y\alpha=\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$
$$=\begin{pmatrix}0\\\mathrm{i}\end{pmatrix}=\mathrm{i}\beta,$$
$$\hat{\sigma}_x\beta=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\alpha,\quad \hat{\sigma}_y\beta=\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$
$$=\begin{pmatrix}-\mathrm{i}\\0\end{pmatrix}=-\mathrm{i}\alpha.$$

25. 由于 $\boldsymbol{S}=\frac{\hbar}{2}\sigma$，以下对 $\hat{\sigma}$ 讨论.

首先找如 $\overline{\sigma_z}=0$，态 $\eta=\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$ 中的 a 与 b 应满足的关系.

$$\overline{\sigma_z}=\eta^\dagger\sigma_z\eta=(a^*,\ b^*)\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=|a|^2-|b|^2=0,$$

使 $|a|=|b|=\frac{1}{\sqrt{2}}$. 于是，设 $a=\frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}$, $b=\frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\psi}$，得

$$\eta=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\\\mathrm{e}^{\mathrm{i}\psi}\end{pmatrix}.$$

再看 $\overline{\sigma_x}=0$ 对 η 的要求.

$$\overline{\hat{\sigma}_x}=\eta^{\dagger}\sigma_x\eta=\frac{1}{2}(e^{-i\phi},e^{-i\psi})\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}e^{i\phi}\\e^{i\psi}\end{pmatrix}=\cos\alpha=0.$$

其中，$\alpha\equiv\psi-\phi$.

类似地，$\overline{\hat{\sigma}_y}=\sin\alpha=0$，要求 $\sin\alpha=0$.

由于 α 无法满足 $\cos\alpha=\sin\alpha=0$. 所以，对 $S=\frac{1}{2}$ 的粒子，使 $\overline{S_x}=\overline{S_y}=\overline{S_z}=0$ 的 态 $\eta=\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$ 是不存在的.

26. 对自旋态 $\alpha=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$,

$$\overline{S}_x=\alpha^{\dagger}S_x\alpha=(1,0)\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=(1,0)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\frac{\hbar}{2}=0,$$

$$\overline{S}_y=\alpha^{\dagger}S_y\alpha=(1,0)\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=(1,0)\begin{pmatrix}0\\i\end{pmatrix}\frac{\hbar}{2}=0.$$

由于 $\hat{\sigma}_x^2=\hat{\sigma}_y^2=1$，$\hat{S}_x^2=\frac{\hbar^2}{4}\hat{\sigma}_x^2=\frac{\hbar^2}{4}$，$\hat{S}_y^2=\frac{\hbar^2}{4}\hat{\sigma}_y^2=\frac{\hbar^2}{4}$，得

$$\overline{S_x^2}=\frac{\hbar^2}{4}(1,0)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\frac{\hbar^2}{4},\quad\overline{S_y^2}=\frac{\hbar^2}{4}(1,0)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\frac{\hbar^2}{4}.$$

故 $$\overline{(\Delta S_x)^2}=\overline{S_x^2}-\overline{S_x}^2=\frac{\hbar^2}{4},\quad\overline{(\Delta S_y)^2}=\overline{S_y^2}-\overline{S_y}^2=\frac{\hbar^2}{4}.$$

27. (1) 本题给出的矩阵 σ' 与标准形式相比，可看出

$$\sigma'_x=\begin{pmatrix}0&-1\\-1&0\end{pmatrix}=-\sigma_x,\quad\sigma'_y=\begin{pmatrix}0&i\\-i&0\end{pmatrix}=-\sigma_y,$$

$$\sigma'_z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}=\sigma_z.$$

已知泡利矩阵 σ 与自旋算符 $\hat{\sigma}$ 具有相同的代数关系，故

$$\sigma'_x\sigma'_y=\sigma_x\sigma_y=i\sigma_z=i\sigma'_z,\quad\sigma'_y\sigma'_x=\sigma_y\sigma_x=-i\sigma_z=-i\sigma'_z,$$

即 $$\sigma'_x\sigma'_y=-\sigma'_y\sigma'_x=i\sigma'_z$$

与此类似，可证明 $\sigma'_y\sigma'_z=-\sigma'_z\sigma'_y=\mathrm{i}\sigma'_x,\sigma'_z\sigma'_x=-\sigma'_x\sigma'_z=\mathrm{i}\sigma'_y,\cdots$. 因而，题中给出的矩阵 σ'_x、σ'_y、σ'_z 也是 $\hat{\sigma}$ 的一个矩阵表示(S_z 表象).

(2) S_z 表象中，σ_z 应为对角矩阵，对角元应是其本征值 ±1. 通常取 $\sigma_z=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$.

设厄米矩阵 $\sigma_x=\sigma'_x$ 的一般形式为 $\sigma_x=\begin{pmatrix}a & b\\ b^* & c\end{pmatrix}$，$a$、$b$、$c$ 为待定复数.

由 $\sigma_x\sigma_z+\sigma_z\sigma_x=0$ 给出 $\begin{pmatrix}a & b\\ b^* & c\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a & b\\ b^* & c\end{pmatrix}=0.$

即 $\begin{pmatrix}a & -b\\ b^* & -c\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}a & b\\ -b^* & -c\end{pmatrix}=0.\qquad\begin{pmatrix}2a & 0\\ 0 & -2c\end{pmatrix}=0.$

由此得 $a=c=0$. 故 $\sigma_x=\begin{pmatrix}0 & b\\ b^* & 0\end{pmatrix}$.

又由 $\sigma_x^2=1$，即 $\begin{pmatrix}0 & b\\ b^* & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & b\\ b^* & 0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}|b|^2 & 0\\ 0 & |b|^2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$，得 $|b|^2=1$，令 $b=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}$ (α 实数)，

于是 $\qquad\sigma_x=\begin{pmatrix}0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha} & 0\end{pmatrix}$.

类似可求出 $\quad\sigma_y=\begin{pmatrix}0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta}\\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta} & 0\end{pmatrix}$，$\beta$ 实数.

其中，α 与 β 不是独立的. 这是由于条件 $\sigma_x\sigma_y+\sigma_y\sigma_x=0$ 的限制，使

$$\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\alpha-\beta)} & 0\\ 0 & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\alpha-\beta)}\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\alpha-\beta)} & 0\\ 0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\alpha-\beta)}\end{pmatrix}=0,$$

得 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\alpha-\beta)}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\alpha-\beta)}=0$，即 $\cos(\alpha-\beta)=0$.

由此，凡满足$|\alpha-\beta|=\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \cdots$的一对$\alpha$与$\beta$，都给出一组对应的矩阵$\sigma_y$与$\sigma_x$，它们与$\sigma_z$构成$\hat{\sigma}$的一个矩阵表示.

习惯上，约定取$\alpha=0, \beta=-\frac{\pi}{2}\left(\text{满足 } \alpha-\beta=\frac{\pi}{2}\right)$，如此得出的正是作为标准形式的泡利矩阵. 此后，本章中均以σ表之. 由矩阵表达式得出的其他表示将以σ'表出.

如取$\alpha=\pi, \beta=\frac{\pi}{2}\left(\text{满足 } \alpha-\beta=\frac{\pi}{2}\right)$得出的矩阵表示正是本题给出的矩阵$\sigma'_x=-\sigma_x, \sigma'_y=-\sigma_y, \sigma'_z=\sigma_z$.

从此例中σ与σ'矩阵的关系可看出. 由σ到σ'的这个变化相当于z轴取向不变而坐标系绕z轴转π角，使x及y轴均改取相反方向. 如图 46.

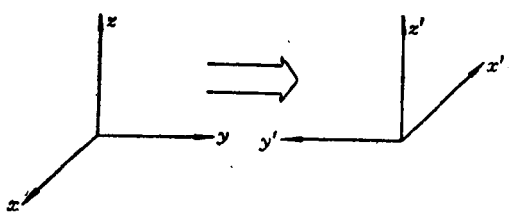


图 46

这说明泡利自旋算符$\hat{\sigma}$的矩阵表示存在非唯一性是由于矩阵σ_x及σ_y中出现的相角因子α及β有某种不确定性. 实质上在S_z表象是相当于z轴方向虽已确定，但x与y轴取向并未确定所引起.

(3) 在上问得出的矩阵表达式中

① 取$\alpha=\frac{\pi}{2}, \beta=0$，符合$\alpha-\beta=\frac{\pi}{2}$. 得出的$\sigma'$与标准形式$\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$的关系为

$$\sigma'_y=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}=\sigma_x,\ \sigma'_x=\begin{pmatrix}0 & \mathrm{i}\\ -\mathrm{i} & 0\end{pmatrix}=-\sigma_y,\ \sigma'_z=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}=\sigma_z.$$

这相当坐标系绕 z 轴转$-\frac{\pi}{2}$角，如图 47.

② 取 $\alpha=-\frac{\pi}{2},\beta=\pi$，符合$|\alpha-\beta|=\frac{3\pi}{2}$，则得出

$$\sigma'_x=\begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{pmatrix}=\sigma_y,\ \sigma'_y=\begin{pmatrix}0 & -1\\ -1 & 0\end{pmatrix}=-\sigma_x,\sigma'_z=\sigma_z.$$

相当坐标系绕 z 轴转$\frac{\pi}{2}$角. 如图 48.

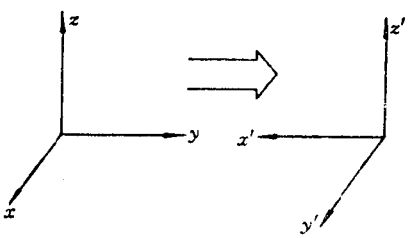


图 47

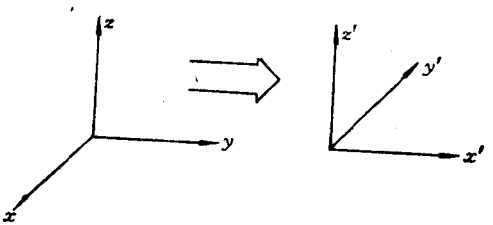


图 48

28. (1) 取 $\alpha=0,\beta=\frac{\pi}{2}$得出的 σ' 与泡利矩阵 σ 相比，有 $\sigma'_z=\sigma_z,\sigma'_y=-\sigma_y,\sigma'_x=\sigma_x$.

从 σ 到 σ' 的变换，相当坐标系的 y 轴反向而由右手坐标系变

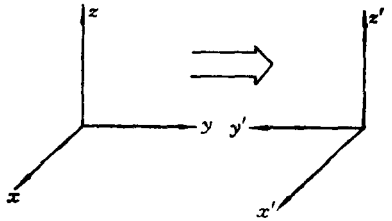


图 49

为左手坐标系，如图 49.

正如物理学中其他规律一样，σ 的基本性质如 $\sigma_x\sigma_y=-\sigma_y\sigma^x=\mathrm{i}\sigma_z,\cdots$ 是以右手坐标系表出的，而 $\sigma'_x\sigma'_y=-\sigma'_y\sigma'_x=-\mathrm{i}\sigma'_z,\cdots$ 正是以左手坐标系表出的相应关系.

由本章第 19 题知，泡利算符的所有基本性质，利用符号 e_{ijk} 可由一个公式 $\sigma_i\sigma_j=\mathrm{i}e_{ijk}\sigma_k+\delta_{ij}$ 表出. 这是对右手坐标系而言的，正是泡利矩阵 σ 具有的性质. 对左手坐标系，此式应为 $\sigma'_i\sigma'_j=-\mathrm{i}e_{ijk}\sigma'_k+\delta_{ij}$. 这正是本题中 σ' 所具有的性质.

由于本题得出的矩阵 σ' 与泡利算符仍有相同的基本性质(左手坐标系)，所以是 $\hat{\sigma}$ 的一个矩阵表示.

(2) 如取 $\alpha=\pi,\beta=-\frac{\pi}{2}$，满足 $\alpha-\beta=\frac{3\pi}{2}$. 得出的 $\sigma'_z=\sigma_z$、$\sigma'_y=\sigma_y$、$\sigma'_x=-\sigma_x$ 相当只有 x 轴取向反向而形成左手系.

29. (1) $\sigma'_z=\begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$与 $\sigma_z=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$均为对角矩阵. 对角元都是本征值 ±1，只是排列不同. 因而，作为 S_z 表象的矩阵表示，取 σ'_z 或 σ_z 都是可以的，标准形式中取 $\sigma_z=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$只是个通用的约定.

(2) 从上题(2)中的推导过程可看出，把 $\sigma_z=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$改取

$\sigma'_z=\begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$后，设厄米矩阵 σ'_x 的一般形式 $\sigma'_x=\begin{pmatrix}a & b\\ b^* & c\end{pmatrix}$，则由 $\sigma'_x\sigma'_z+\sigma'_z\sigma'_x=0$ 给出

$\begin{pmatrix}-2a & 0\\ 0 & 2c\end{pmatrix}=0$，即仍有 $a=c=0$.

σ'_x 仍可表为 $\sigma'_x=\begin{pmatrix}0 & e^{i\alpha}\\ e^{-i\alpha} & 0\end{pmatrix}$.

类似地，σ'_y 仍可表为 $\sigma'_y=\begin{pmatrix}0 & e^{i\beta}\\ e^{-i\beta} & 0\end{pmatrix}$.

由于 $\sigma'_x\sigma'_y+\sigma'_y\sigma'_x=0$ 的限制，相角因子中 α 与 β 仍要满足 $|\alpha-\beta|=\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2},\cdots$.

总之，改取 $\sigma'_z=\begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$仍有 $\sigma'_x=\begin{pmatrix}0 & e^{i\alpha}\\ e^{-i\alpha} & 0\end{pmatrix}$与 $\sigma'_y=\begin{pmatrix}0 & e^{i\beta}\\ e^{-i\beta} & 0\end{pmatrix}$.

(3) 通常取 $\sigma_z=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$时，$\hat{\sigma}_z$ 的本征值为 ±1 的本征矢分别以 $\chi_+=\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}$及 $\chi_-=\begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix}$表出. 这与对自旋波函数 $\chi=\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}$中，以 $|a|^2$ 代表 $S_z=+\frac{\hbar}{2}$的概率，以 $|b|^2$ 代表 $S_z=-\frac{\hbar}{2}$的概率的约定是一致的.

若改用 $\sigma'_z=\begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$，由于$\begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}=-\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}$，$\hat{\sigma}_z$的本征值为 $+1$ 的本征矢 $\chi_+=\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}$，这里却是 σ'_z 的本征值为 -1 的本征矢 $\chi'_-=\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}$了. 类似地有 $\chi'_+=\begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix}=\chi_-$.

这个结论是显然的. 因为所取 $\sigma'_z=-\sigma_z$. 由 σ_z 到 σ'_z 的变

换，相当于 z 轴取向的反向．相应的本征间必有

$$\chi'_{\mp}=\chi_{\pm}$$

30．泡利矩阵通常是以 S_z 表象表出．如取 S_y 表象，由于 $\hat{\sigma}$ 各分量的本征值均为 ±1，且不随表象而改变．显然，σ'_y 应是 S_z 表象中 $\sigma_z=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$ 一样的对角矩阵，即

$$\sigma'_y=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}=\sigma_z.$$

这相当把坐标系的 y' 轴确定在原 z 轴方向，但由于 x' 轴与 z' 轴的取向仍未确定．因而，S_y 表象中 $\hat{\sigma}$ 的矩阵表示也具有非唯一性．例如，可取

$$\sigma'_x=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}=\sigma_x,\ \sigma'_y=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}=\sigma_z,\ \sigma'_z=\begin{pmatrix}0 & \mathrm{i}\\ -1 & 0\end{pmatrix}$$
$$=-\sigma_y.$$

这相当于 y' 轴与 x' 轴取向是原坐标系绕 x 轴转 $\frac{\pi}{2}$ 而形成，如图 50.

当然 S_y 表系中也可将 y' 轴确定在原 z 轴的反方向，即取 $\sigma'_y=\begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$.

作为 S_y 表象中 $\hat{\sigma}$ 的矩阵表示的标准形式，通常是取

$$\sigma'_x=\begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{pmatrix}=\sigma_y,\ \sigma'_y=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}=\sigma_z,\ \sigma'_z=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}=\sigma_x.$$

以上取法的特点是：由 S_z 表象到 S_y 表象的变换．各矩阵的形式没有任何改变，也没有正负号的变化．只是 σ 各分量间按 x、y、z 的轮换．相应的坐标系变化如图 51.

对 S_x 表象，同样可由坐标系 x、y、z 的轮换得出为

$$\sigma'_x=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}=\sigma_z,\qquad \sigma'_y=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}=\sigma_x,$$

$$\sigma'_z=\begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{pmatrix}=\sigma_y.$$

相应的坐标系变化如图 52.

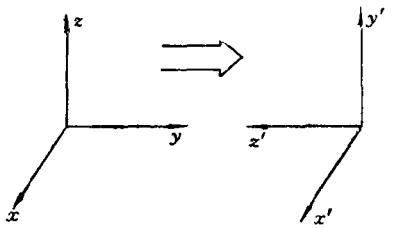


图 50

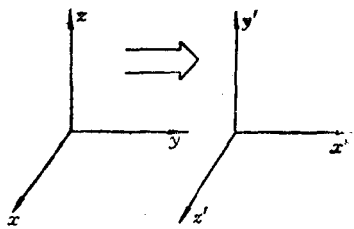


图 51

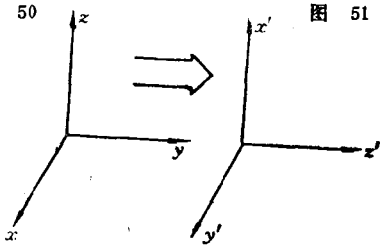


图 52

但是作这种坐标轮换时要注意，只作自旋算符的坐标轮换是可以的，若连同它们的本征矢量的矩阵形式一起轮换，则有可能出错.

详见：喀兴林，《大学物理》，1988 年，第 4 期，20 页.

31. 答案与表象选取有关.

例如，列矢量$\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}$满足$\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}$，是矩阵$\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$的本征矢(本征值为$+1$)，而矩阵$\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$在不同表象中与$\sigma$的不

同分量相连系.

S_z 表象：$\sigma_z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$，$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\alpha_z$，是 σ_z 的本征矢.

S_y 表象：$\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}=\sigma'_y$，故$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\alpha'_y$，是 σ'_y 的本征矢.

S_x 表象：$\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}=\sigma'_x$，同一个列矢量$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$又将是 σ'_x 的本征矢 α'_x 了.

题中给出其他几个列矢量也有同样性质，结果如下.

S_z 表象：

$$\beta_z=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix},\ \alpha_x=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix},\ \beta_x=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix},$$

$$\alpha_y=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\\mathrm{i}\end{pmatrix},\qquad \beta_y=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-\mathrm{i}\end{pmatrix}.$$

S_y 表象：由于 $\sigma'_z=\sigma_x,\sigma'_y=\sigma_z,\sigma'_x=\sigma_y$，故有

$$\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\beta'_y,\ \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}=\alpha'_z,\ \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}=\beta'_z,$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\\mathrm{i}\end{pmatrix}=\alpha'_x,\qquad \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-\mathrm{i}\end{pmatrix}=\beta'_x.$$

S_x 表象：由于 $\sigma'_x=\sigma_z,\sigma'_y=\sigma_z,\sigma'_z=\sigma_y$，故类似有

$$\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\beta'_x,\ \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}=\alpha'_y,\ \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}=\beta'_y,\ \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\\mathrm{i}\end{pmatrix}=\alpha'_z,$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-\mathrm{i}\end{pmatrix}=\beta'_z.$$

32. (1) 据表象理论，S_z 表象到 S_y 表象的幺正变换矩阵 S 就是把 $\hat{S}_y$ 在 S_z 表象的本征矢按列排列而成的矩阵，上题给出 S_z 表象中，σ_y 的本征矢 $\alpha_y=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\\mathrm{i}\end{pmatrix}$，$\beta_y=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-\mathrm{i}\end{pmatrix}$，因而，变换

矩阵

$$S=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ \mathrm{i} & -\mathrm{i}\end{pmatrix}.$$

如果把其中两列次序对调，即把 β_y 排在第一列，α_y 排在第二列，则可得出另一个变换矩阵

$$S'=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ -\mathrm{i} & \mathrm{i}\end{pmatrix}.$$

另外，上题中只给出一对 α_y、β_y，实际上可以给它们乘上一个相因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}$，例如 $\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ \mathrm{i}\end{pmatrix}$ 仍为 α_y. 由于 δ 可取任意值，因而 α_y 的形式是多种多样的，由此得出的 $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}-\mathrm{i}\\ 1\end{pmatrix}$ 及 $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}\mathrm{i}\\ -1\end{pmatrix}$，…都可作为 α_y. 类似 $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}\mathrm{i}\\ 1\end{pmatrix}$…也是 β_y. 由其中任一对 α_y、β_y 都可得出相应的变换矩阵，如

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}-\mathrm{i} & \mathrm{i}\\ 1 & 1\end{pmatrix};\ \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}-\mathrm{i} & 1\\ 1 & -\mathrm{i}\end{pmatrix};\cdots.$$

(2) 由表象理论知：S_z 表象到 S_y 表象的幺正变换矩阵元 $S_{ij}=(\varphi_i,\phi_j)=\varphi_i^{\dagger}\phi_j$，$i,j=1,2$. 其中

φ_i 为 σ_z 的本征矢(S_z 表象). 如取 $\varphi_1=\alpha_z=\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}$；$\varphi_2=\beta_z=\begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix}$.

ϕ_j 为 σ_y 的本征矢(S_z 表象). 如取 $\phi_1=\alpha_y=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ \mathrm{i}\end{pmatrix}$；$\phi_2=\beta_y=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -\mathrm{i}\end{pmatrix}$.

于是 $S_{11}=\varphi_1^{\dagger}\phi_1=(1,\ 0)\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}$，$S_{12}=\varphi_1^{\dagger}\phi_2=(1,0)\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-\mathrm{i}\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}$.

$$S_{21}=\varphi_2^{\dagger}\phi_1=(0,1)\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\\mathrm{i}\end{pmatrix}=\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}},$$

$$S_{22}=\varphi_2^{\dagger}\phi_2=(0,1)\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-\mathrm{i}\end{pmatrix}=\frac{-\mathrm{i}}{\sqrt{2}}.$$

即

$$S=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1&1\\\mathrm{i}&-\mathrm{i}\end{pmatrix}.$$

如求矩阵元 S_{ij} 时，把本征矢 α_y 与 β_y 互换，即改令 $\phi_1=\beta_y$，$\phi_1^2=\alpha_y$. 求出的变换矩阵即为

$$S'=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1&1\\-\mathrm{i}&\mathrm{i}\end{pmatrix}.$$

这里求出的结果正是(1)中写出的 S 与 S'. 对任一组 α_y 与 β_y' 都可类似地求出对应的变换矩阵.

(3) 变换矩阵取 $S=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1&1\\\mathrm{i}&-\mathrm{i}\end{pmatrix}$时，$S^{\dagger}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1&-\mathrm{i}\\1&\mathrm{i}\end{pmatrix}$

泡利矩阵 $\sigma(\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z)$ 由 S_z 表象经幺正矩阵 S 变换到 S_y 表象时，

$$\sigma_y'=S^{\dagger}\sigma_yS=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&-\mathrm{i}\\1&\mathrm{i}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&1\\\mathrm{i}&-\mathrm{i}\end{pmatrix}$$

$$=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&-\mathrm{i}\\1&\mathrm{i}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&-1\\\mathrm{i}&\mathrm{i}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}=\sigma_z,$$

$$\sigma_x'=S^{\dagger}\sigma_xS=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&-\mathrm{i}\\1&\mathrm{i}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&1\\\mathrm{i}&-\mathrm{i}\end{pmatrix}$$

$$=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & -\mathrm{i}\\ 1 & \mathrm{i}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mathrm{i} & -\mathrm{i}\\ 1 & 1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{pmatrix}=\sigma_y,$$

$$\sigma'_z=S^{\dagger}\sigma_z S=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & -\mathrm{i}\\ 1 & \mathrm{i}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 1\\ \mathrm{i} & -\mathrm{i}\end{pmatrix}$$

$$=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & -\mathrm{i}\\ 1 & \mathrm{i}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 1\\ -\mathrm{i} & \mathrm{i}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}=\sigma_x.$$

这恰是 30 题得出的、作为 S_y 表象中标准形式的矩阵表示.

由于 S_y 表象中，$\hat{\sigma}$ 的矩阵表示也是非唯一的. 因而，不是任一个由 S_z 到 S_y 表象的变换矩阵，把作为标准形式的泡利矩阵都变成同一结果.

例如，改取变换矩阵为 $S'=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ -\mathrm{i} & \mathrm{i}\end{pmatrix}$ 时，$S^{\dagger}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & \mathrm{i}\\ 1 & -\mathrm{i}\end{pmatrix}$，得出的将是另一组结果.

$$\sigma'_y=S'^{\dagger}\sigma_y S'=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & \mathrm{i}\\ 1 & -\mathrm{i}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 1\\ -\mathrm{i} & \mathrm{i}\end{pmatrix}$$

$$=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & \mathrm{i}\\ 1 & -\mathrm{i}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1 & 1\\ \mathrm{i} & \mathrm{i}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}=-\sigma_z,$$

$$\sigma'_x=S'^{\dagger}\sigma_x S'=\begin{pmatrix}0 & \mathrm{i}\\ -\mathrm{i} & 0\end{pmatrix}=-\sigma_y,$$

$$\sigma'_z=S'^{\dagger}\sigma_z S'=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}=\sigma_x.$$

由于出现 $\sigma'_y=\begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}=-\sigma_z$. 这相当把 y' 轴取为 z 轴的反方向. 相应的坐标系变化如图 53.

又如取 $S=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}-\mathrm{i} & 1\\ 1 & -\mathrm{i}\end{pmatrix}$ 时，$S^{\dagger}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}\mathrm{i} & 1\\ 1 & \mathrm{i}\end{pmatrix}$，

计算出 $\sigma'_z = S^\dagger \sigma_z S = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} = -\sigma_y$,

$$\sigma'_x = S^\dagger \sigma_x S = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \sigma_x,$$

$$\sigma'_y = S^\dagger \sigma_y S = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \sigma_z.$$

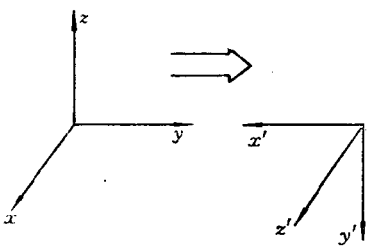


图 53

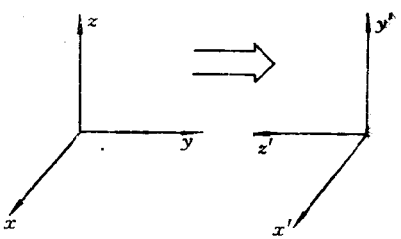


图 54

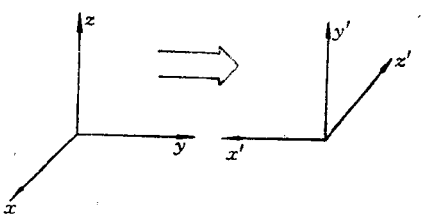


图 55

相应的坐标系变化如图 54.

又如取 $S = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -i & i \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$, 则结果为

$$\sigma'_z = S^\dagger \sigma_z S = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = -\sigma_x, \quad \sigma'_y = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \sigma_z,$$

$$\sigma'_x = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} = -\sigma_y.$$

相当于坐标系变化如图55.

33. (1) 转动算符 $\hat{R}_z(\theta)=e^{-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{L}_z}$ 中，由于 $\hat{L}_z=\hat{L}_z^{\dagger}$(厄米性)，$\hat{R}_z^{\dagger}(\theta)=e^{\frac{i}{\hbar}\theta\hat{L}_z}$，

满足 $\hat{R}_z^{\dagger}(\theta)\hat{R}_z(\theta)=\hat{R}_z(\theta)\hat{R}_z^{\dagger}(\theta)=1$，故 $\hat{R}_z(\theta)$ 是幺正算符.

(2) 设体系的任一态 $|\psi\rangle$，以基矢 $|k,m\rangle$ 展开为

$$|\psi\rangle=\sum_{k,m}C_{k,m}|k,m\rangle.$$

基矢 $|k,m\rangle$ 是包括 $\hat{L}_z$ 在内的力学量完全集的共同本征矢. 其中以 k 代表除与 $\hat{L}_z$ 对应的量子数 m 外，完全集中其他力学量对应的一组量子数. 由于 $\hat{L}_z|k,m\rangle=m\hbar|k,m\rangle$，

$$\hat{R}_z(\theta)|\psi\rangle=\sum_{k,m}C_{k,m}e^{-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{L}_z}|k,m\rangle=\sum_{k,m}C_{k,m}e^{-i\theta m}|k,m\rangle.$$

当 $\theta=2\pi$ 时，$e^{-i2m\pi}=1$，

$$\hat{R}_z(2\pi)|\psi\rangle=\sum_{k,m}C_{k,m}|k,m\rangle=|\psi\rangle.$$

因而，转动算符 $\hat{R}_z(2\pi)=1$，是恒等变换算符.

(3) 绕单位矢量 $\boldsymbol{n}=n_1\boldsymbol{i}+n_2\boldsymbol{j}+n_3\boldsymbol{k}$ 的方向，旋转有限角度 θ 的转动算符

$$\hat{R}_n(\theta)=e^{\frac{-i}{\hbar}\theta(\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\boldsymbol{n})}=e^{\frac{-i}{\hbar}\theta(\hat{L}_xn_1+\hat{L}_yn_2+\hat{L}_zn_3)}.$$

由于 $\hat{L}_x,\hat{L}_y,\hat{L}_z$ 三分量互不对易，故

$$\hat{R}_n(\theta)\neq e^{\frac{-i}{\hbar}\theta\hat{L}_xn_1}\,e^{\frac{-i}{\hbar}\theta\hat{L}_yn_2}e^{\frac{-i}{\hbar}\theta\hat{L}_zn_3}.$$

34. (1) 自旋态空间的转动算符 $\hat{R}_z(\theta)=e^{\frac{-i}{2}\theta\hat{\sigma}_z}$.

由定义 $e^{k\hat{A}}=1+k\hat{A}+\frac{k^2}{2!}\hat{A}^2+\cdots=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{k^n}{n!}\hat{A}^n$，

$$\hat{R}_z(\theta)=e^{\left(-i\frac{\theta}{2}\right)\hat{\sigma}_z}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{-i\theta}{2}\right)^n\cdot\hat{\sigma}_z^n.$$

已知 $\hat{\sigma}_z^n=1$, n 偶; $\hat{\sigma}_z^n=\hat{\sigma}_z$, n 奇.

因而在上式对 n 取和可对奇 n 与偶 n 分开进行, 得

$$\hat{R}_z(\theta)=\left(\sum_{n\text{偶}}+\sum_{n\text{奇}}\right)\frac{1}{n!}\left(\frac{-i\theta}{2}\right)^n\cdot\hat{\sigma}_z^n=\sum_{n\text{偶}}\frac{1}{n!}\left(\frac{-i\theta}{2}\right)^n+\sum_{n\text{奇}}\frac{1}{n!}\left(\frac{-i\theta}{2}\right)^n\cdot\hat{\sigma}_z$$

$$=\left[1-\frac{1}{2!}\left(\frac{\theta}{2}\right)^2+\frac{1}{4!}\left(\frac{\theta}{2}\right)^4+\cdots\right]-i\hat{\sigma}_z\left[\frac{\theta}{2}-\frac{1}{3!}\left(\frac{\theta}{2}\right)^3+\cdots\right].$$

由于

$$\sin x=x-\frac{x^3}{3!}+\frac{x^5}{5!}-\frac{x^7}{7!}+\cdots,\ \cos x=1-\frac{x^2}{2!}+\frac{x^4}{4!}-\frac{x^6}{6!}+\cdots,$$

故 $\hat{R}_z(\theta)=\cos\frac{\theta}{2}-i\hat{\sigma}_z\sin\frac{\theta}{2}$.

如取 S_z 表象, $\sigma_z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$, 则 $\hat{R}_z(\theta)$ 的矩阵表示为

$$R_z(\theta)=\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}-i\sin\frac{\theta}{2}&0\\0&\cos\frac{\theta}{2}+i\sin\frac{\theta}{2}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}e^{-i\frac{\theta}{2}}&0\\0&e^{i\frac{\theta}{2}}\end{pmatrix}.$$

(2) 由上问知 $\hat{R}_z(0)=\hat{R}_z(4\pi)=1$, 而 $\hat{R}_z(2\pi)=-1$, 不是恒等算符. 这意味着 $\hat{R}_z(2\pi)$ 将使自旋态变号, 但其模方并未改变.

因而仍具有相同的物理性质.

特别是力学量F在$\hat{R}_z(2\pi)$作用下,

$$\hat{F}'=\hat{R}_z(2\pi)\hat{F}\hat{R}_z^{\dagger}(2\pi)=\hat{F}.$$

可见，虽然$\hat{R}_z(2\pi)=-1$，但物理上并不引起任何可观测的效应.

(3) 很容易看出: $\hat{R}_z(2\pi)=-1$是自旋为半奇整数$\left(\text{如}\frac{1}{2},\ \frac{3}{2},\cdots\right)$的粒子均有的性质,对自旋为整数的粒子不成立.

35. (1) 以单位矢量$\boldsymbol{n}=n_1\boldsymbol{i}+n_2\boldsymbol{j}+n_3\boldsymbol{k}$的方向为轴，旋转有限角度$\theta$时,作用于自旋态空间上的转动算符

$$\hat{R}_n(\theta)=\mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{i}}{\hbar}\theta(\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\boldsymbol{n})}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\theta}{2}(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{n})},$$

与上题中$\hat{R}_z(\theta)$的差别只在以$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}=\sigma_n$代替了$\sigma_z$,按上题作类似计算展开$R_n(\theta)$时

$$\hat{R}_n(\theta)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{-\mathrm{i}\theta}{2}\right)^n(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{n})^n.$$

由前可知，$\sigma_n^2=(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})^2=1$，即$\sigma_n$的本征值也为$\pm1$，并且$\sigma_n^m=1$ n m偶;$\sigma_n^n=\sigma_n$ m 奇.

由于$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}=\sigma_n$与$\sigma_z$满足同样关系，所以计算最后结果必为

$$\hat{R}_n(\theta)=\cos\frac{\theta}{2}-\mathrm{i}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})\sin\frac{\theta}{2}.$$

(2) $\hat{R}_n(\theta)$的矩阵表示为$R_n(\theta)=\cos\frac{\theta}{2}\cdot I-\mathrm{i}\sin\frac{\theta}{2}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})$，式中$I=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$单位矩阵. 以泡利矩阵代入$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}=\sigma_xn_1+\sigma_yn_2+\sigma_zn_3$得出$S_z$表象中$\hat{R}_n(\theta)$的矩阵表示为

$$R_n(\theta)=\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2} & 0\\ 0 & \cos\frac{\theta}{2}\end{pmatrix}-\mathrm{i}\sin\frac{\theta}{2}\left[\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}n_1+\begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{pmatrix}n_2\right.$$

$$\left.+\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}n_3\right]=\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2} & 0\\ 0 & \cos\frac{\theta}{2}\end{pmatrix}$$

$$-\mathrm{i}\sin\frac{\theta}{2}\begin{pmatrix}n_3 & n_1-\mathrm{i}n_2\\ n_1+\mathrm{i}n_2 & -n_3\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}-\mathrm{i}n_3\sin\frac{\theta}{2} & (-\mathrm{i}n_1-n_2)\sin\frac{\theta}{2}\\ (-\mathrm{i}n_1+n_2)\sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2}+\mathrm{i}n_3\sin\frac{\theta}{2}\end{pmatrix}.$$

当 $\theta=2\pi$ 时，仍有 $R_n(2\pi)=-1$.

又如 $R_n(\theta)$ 中 $n_1=n_2=0, n_3=1$，即 $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{k}$ 时.

$$R_n(\theta)=\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}-\mathrm{i}\sin\frac{\theta}{2} & 0\\ 0 & \cos\frac{\theta}{2}+\mathrm{i}\sin\frac{\theta}{2}\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\theta}{2}} & 0\\ 0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\theta}{2}}\end{pmatrix}.$$

即为上题求出的 $R_z(\theta)$.

36. 由 34 题知：直角坐标系 z 轴取向不变，绕 z 轴转动 $\theta=\pi$ 时，转动算符

$$\hat{R}_z(\pi)=\cos\frac{\pi}{2}-\mathrm{i}\hat{\sigma}_z\sin\frac{\pi}{2}=-\mathrm{i}\hat{\sigma}_z,\ \hat{R}_z^{\dagger}(\pi)=\mathrm{i}\hat{\sigma}_z.$$

在幺正变换 $\hat{U}=\hat{R}_z(\pi)$ 的作用下，泡利算符 $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ 的变换为

$$\hat{\sigma}'_x=\hat{U}\hat{\sigma}_x\hat{U}^{\dagger}=(-\mathrm{i}\hat{\sigma}_z)\hat{\sigma}_x(\mathrm{i}\hat{\sigma}_z)=\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_z=\mathrm{i}\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z=-\hat{\sigma}_x,$$

$\hat{\sigma}'_y=\hat{U}\hat{\sigma}_y\hat{U}^{\dagger}=\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z=-\hat{\sigma}_y$,

$\hat{\sigma}'_z=\hat{\sigma}_z^3=\hat{\sigma}_z$.

$\hat{\sigma}$ 与$\hat{\sigma}'$ 的矩阵表示间也有同样关系.

37. (1) 上题中,如绕 z 轴转$-\frac{\pi}{2}$. 则转动算符

$$\hat{R}_z\left(-\frac{\pi}{2}\right)=\cos\left(-\frac{\pi}{4}\right)-\mathrm{i}\hat{\sigma}_z\sin\left(-\frac{\pi}{4}\right)=\frac{\sqrt{2}}{2}(1+\mathrm{i}\hat{\sigma}_z).$$

对应的幺正变换矩阵 $U=\frac{\sqrt{2}}{2}(1+\mathrm{i}\sigma_z)=\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}1+\mathrm{i} & 0\\ 0 & 1-\mathrm{i}\end{pmatrix}$,

$$U^{\dagger}=\frac{\sqrt{2}}{2}(1-\mathrm{i}\sigma_z)=\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}1-\mathrm{i} & 0\\ 0 & 1+\mathrm{i}\end{pmatrix}.$$

泡利矩阵的变换为

$$\sigma'_x=U\sigma_xU^{\dagger}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1+\mathrm{i} & 0\\ 0 & 1-\mathrm{i}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1-\mathrm{i} & 0\\ 0 & 1+\mathrm{i}\end{pmatrix}$$

$$=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0 & 1+\mathrm{i}\\ 1-\mathrm{i} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1-\mathrm{i} & 0\\ 0 & 1+\mathrm{i}\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}0 & \mathrm{i}\\ -\mathrm{i} & 0\end{pmatrix}=-\sigma_y,$$

$$\sigma'_y=U\sigma_yU^{\dagger}=\frac{1}{2}[(1+\mathrm{i}\sigma_z)\sigma_y(1-\mathrm{i}\sigma_z)]$$

$$=\frac{1}{2}[(\sigma_y+\mathrm{i}\sigma_z\sigma_y)(1-\mathrm{i}\sigma_z)]$$

$$=\frac{1}{2}[(\sigma_y+\sigma_x)(1-\mathrm{i}\sigma_z)]$$

$$=\frac{1}{2}[\sigma_y+\sigma_x-\mathrm{i}\sigma_y\sigma_z-\mathrm{i}\sigma_x\sigma_z]=\sigma_x,$$

$$\sigma'_z=U\sigma_zU^{\dagger}=\sigma_z.$$

这正是第 27 题中图 47 所示的结果.

(2) 如绕 z 轴旋转 $\theta=\frac{\pi}{2}$，则 $U=R_z\left(\frac{\pi}{2}\right)=\frac{\sqrt{2}}{2}(1-\mathrm{i}\sigma_z)$，$U^{\dagger}=\frac{\sqrt{2}}{2}(1+\mathrm{i}\sigma_z)$.

$$\sigma'_x=U\sigma_xU^{\dagger}=\frac{1}{2}[(1-\mathrm{i}\sigma_z)\sigma_x(1+\mathrm{i}\sigma_z)]=\sigma_y,$$

$$\sigma'_y=U\sigma_yU^{\dagger}=-\sigma_x,\quad \sigma'_z=U\sigma_zU^{\dagger}=\sigma_z.$$

对应的坐标系变化如图 48(第 27 题中).

(3) 不能. 如第 28 题得出的 $\sigma'_z=\sigma_z,\sigma'_y=-\sigma_y,\sigma'_x=\sigma_x$. 相当于坐标系的 y 轴反向. 这种由右手系到左手系的变换是无法从右手系只经绕轴转动而实现.

38. (1) 如采用变换矩阵 $U=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1+\mathrm{i} & 1+\mathrm{i}\\ \mathrm{i}-1 & 1-\mathrm{i}\end{pmatrix}$，则

$$U^{\dagger}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1-\mathrm{i} & -1-\mathrm{i}\\ 1-\mathrm{i} & 1+\mathrm{i}\end{pmatrix}.$$

由已知 S_z 表象中 $\sigma_x=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$，得 S_x 表象中

$$\sigma'_x=U\sigma_xU^{\dagger}=\frac{1}{4}\begin{pmatrix}1+\mathrm{i} & 1+\mathrm{i}\\ \mathrm{i}-1 & 1-\mathrm{i}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1-\mathrm{i} & -1-\mathrm{i}\\ 1-\mathrm{i} & 1+\mathrm{i}\end{pmatrix}$$

$$=\frac{1}{4}\begin{pmatrix}1+\mathrm{i} & 1+\mathrm{i}\\ 1-\mathrm{i} & \mathrm{i}-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1-\mathrm{i} & -1-\mathrm{i}\\ 1-\mathrm{i} & 1+\mathrm{i}\end{pmatrix}=\frac{1}{4}\begin{pmatrix}4 & 0\\ 0 & -4\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}=\sigma_z.$$

类似地可得出 $\sigma'_y=U\sigma_yU^{\dagger}=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}=\sigma_x$,

$$\sigma'_z=U\sigma_zU^{\dagger}=\begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{pmatrix}=\sigma_y.$$

(2) 从 S_z 表象到 S_x 表象的变换，相当把 x' 轴确定在原 z

轴方向，但这时 y' 轴与 z' 轴的取向未定. 从本题给出的 $\sigma'_x=\sigma_z$, $\sigma'_y=\sigma_x$, $\sigma'_z=\sigma_y$ 可看出，σ 到 σ' 的这个变化，相当于直角坐标系中先绕 y 轴转 $-\frac{\pi}{2}$，再绕 x'' 轴转 $-\frac{\pi}{2}$，如图 56.

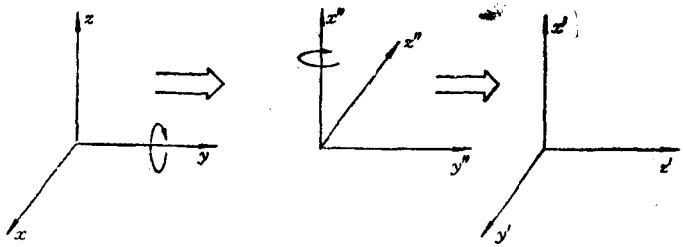


图 56

绕 y 轴转 $\left(-\frac{\pi}{2}\right)$ 时的转动算符

$$\hat{R}_y\left(-\frac{\pi}{2}\right)=\cos\left(-\frac{\pi}{4}\right)-\mathrm{i}\hat{\sigma}_y\sin\left(-\frac{\pi}{4}\right)=\frac{\sqrt{2}}{2}(1+\mathrm{i}\hat{\sigma}_y).$$

绕 x'' 轴转 $\left(-\frac{\pi}{2}\right)$ 的转动算符 $\hat{R}_{x''}\left(-\frac{\pi}{2}\right)=\frac{\sqrt{2}}{2}(1+\mathrm{i}\hat{\sigma}''_x)$. 由于 $\hat{\sigma}''_x=\hat{\sigma}_z$，所以 $\hat{R}_{x''}\left(-\frac{\pi}{2}\right)=\frac{\sqrt{2}}{2}(1+\mathrm{i}\sigma_z)$.

按照图 56 中给出的顺序，相继的两次转动，等效于由变换算符 $\hat{R}=\hat{R}_{x''}\left(-\frac{\pi}{2}\right)\hat{R}_y\left(-\frac{\pi}{2}\right)$ 一次完成的直接变换.

$$\hat{R}=\frac{1}{2}(1+\mathrm{i}\hat{\sigma}_z)(1+\mathrm{i}\hat{\sigma}_y).$$

由矩阵 $\sigma_z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$, $\sigma_y=\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{pmatrix}$ 得与 $\hat{R}$ 对应的变换矩阵

$$U=\frac{1}{2}(1+\mathrm{i}\sigma_z)(1+\mathrm{i}\sigma_y)=$$

$$=\frac{1}{2}\left[\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}+\mathrm{i}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\right]\left[\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}+\mathrm{i}\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{pmatrix}\right]$$

$$=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1+\mathrm{i} & 0\\ 0 & 1-\mathrm{i}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 1\\ -1 & 1\end{pmatrix}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1+\mathrm{i} & 1+\mathrm{i}\\ \mathrm{i}-1 & 1-\mathrm{i}\end{pmatrix}.$$

39. 从 S_z 表象的泡利矩阵进行表象变换，如取变换算符 $\hat{R}=\frac{1}{2}(1+\mathrm{i}\hat{\sigma}_y)(1+\mathrm{i}\hat{\sigma}_z)$，这相当相继两次转动如图 57 所示. 首先绕 z 轴转$\left(-\frac{\pi}{2}\right)$，转动算符 $\hat{R}_z\left(-\frac{\pi}{2}\right)=\frac{\sqrt{2}}{2}(1+\mathrm{i}\hat{\sigma}_z)$；再绕 x'' 轴转$\frac{\pi}{2}$，由于 $\sigma''_x=-\sigma_y$，故转动算符 $\hat{R}_{x''}\left(\frac{\pi}{2}\right)=\frac{\sqrt{2}}{2}(1-\mathrm{i}\hat{\sigma}''_x)$ $=\frac{\sqrt{2}}{2}(1+\mathrm{i}\hat{\sigma}_y)$.

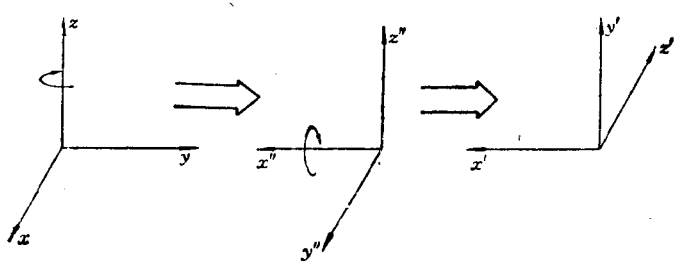


图 57

相继两次转动，结果是由 S_z 表象到 S_y 表象的变换，变换算符 $\hat{R}=\hat{R}_{x''}\left(\frac{\pi}{2}\right)\hat{R}_z\left(-\frac{\pi}{2}\right)=\frac{1}{2}(1+\mathrm{i}\hat{\sigma}_y)(1+\mathrm{i}\hat{\sigma}_z)$，其矩阵表示为

$$R=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1+\mathrm{i} & 1-\mathrm{i}\\ -\mathrm{i}-1 & 1-\mathrm{i}\end{pmatrix},\quad R^{\dagger}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1-\mathrm{i} & -1+\mathrm{i}\\ 1+\mathrm{i} & 1+\mathrm{i}\end{pmatrix}.$$

由 $\sigma'=R\sigma R^{\dagger}$ 求出

$$\sigma'_x=-\sigma_y,\quad \sigma'_y=\sigma_z,\quad \sigma'_z=-\sigma_x.$$

40. (1) $\hat{S}_n=\frac{\hbar}{2}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{n}=\frac{\hbar}{2}(\hat{\sigma}_x n_1+\hat{\sigma}_y n_2+\hat{\sigma}_z n_3)$. S_z 表象中

$$S_n=\frac{\hbar}{2}\left[\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}n_1+\begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{pmatrix}n_2+\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}n_3\right]$$

$$=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} n_3 & n_1-\mathrm{i}n_2 \\ n_1+\mathrm{i}n_2 & -n_3 \end{pmatrix}$$

$$=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} \\ \sin\theta \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix}.$$

(2) 对自旋态 $\chi=\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$,

$$\overline{S_n}=\chi^{\dagger}S_n\chi=(a^*,b^*)\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} \\ \sin\theta \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix}\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

$$=\frac{\hbar}{2}[(|a|^2-|b|^2)\cos\theta+(a^*b\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}+ab^*\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi})\sin\theta].$$

(3) $\hat{S}_z$ 的本征态 $\left(\text{本征值}S_z=\frac{\hbar}{2}\right)\alpha=\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, 即 $\chi=\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$中取 $a=1, b=0$, 故$\overline{S_n}=\alpha^{\dagger}S_n\alpha=\frac{\hbar}{2}\cos\theta$.

本征值 $S_z=-\frac{\hbar}{2}$的本征态 $\beta=\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, 即 $\chi=\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$中取$a=0$, $b=1$, 故$\overline{S_n}=\beta^{\dagger}S_n\beta=-\frac{\hbar}{2}\cos\theta$.

总之, 对$\hat{S}_z$ 的本征态, $\overline{S_n}=\pm\frac{\hbar}{2}\cos\theta=S_z\cos\theta$.

如取 $\boldsymbol{n}$ 方向为 z' 轴则与第 6 题中轨道角动量分量具有的 $\overline{L_{z'}}=m\hbar\cos\theta=L_z\cos\theta$ 是类似的.

(4) 设 $\hat{S}_z$ 的本征态中, S_n 取值$\pm\frac{\hbar}{2}$的概率为 $w_{\pm}$.

根据平均值的定义, $\overline{S_n}=w_+\left(\frac{\hbar}{2}\right)+w_-\left(-\frac{\hbar}{2}\right)$

$$=\frac{\hbar}{2}(w_+-w_-).$$

归一化要求 $w_++w_-=1$, 即 $w_-=1-w_+$. 又由上问知 $\overline{S_n}=S_z\cos\theta$. 代入 $\overline{S_n}$式, 得

$$S_z\cos\theta=\frac{\hbar}{2}[2w_+-1].$$

解出 $\quad w_+=\frac{1}{2}[2S_z\cos\theta/\hbar+1], w_-=\frac{1}{2}[1-2S_z\cos\theta/\hbar].$

对 $\hat{S}_z$ 的本征值 $S_z=+\frac{\hbar}{2}$ 的本征态，S_n 取值 $\pm\frac{\hbar}{2}$ 的概率为

$$w_+=\frac{1+\cos\theta}{2}=\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right),\ w_-=\frac{1-\cos\theta}{2}=\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right).$$

而对本征值 $S_z=-\frac{\hbar}{2}$ 的本征态，S_n 取值 $\pm\frac{\hbar}{2}$ 的概率为

$$w_+=\frac{1-\cos\theta}{2}=\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right),\ w_-=\frac{1+\cos\theta}{2}=\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right).$$

特别是当 $\theta=\frac{\pi}{2}$ 时($\boldsymbol{n}$ 与 z 轴垂直)，$w_\pm=\frac{1}{2}$，这表明：已知体系处于 $\hat{S}z$ 的本征态时，对与 z 轴垂直的 $\boldsymbol{n}$ 方向，找到 $S_n=\pm\frac{\hbar}{2}$ 的概率都是 $\frac{1}{2}$. (参阅第 18 题)

41. (1) 设 $\psi_{s_z=\pm\frac{\hbar}{2}}$ 是 $\hat{S}_z$ 的属于本征值 $S_z=\pm\frac{\hbar}{2}$ 的本征态，则对以方位角为 (θ,φ) 的 z' 轴，$\hat{S}_n$ 的本征态由第 7 题知

$$\psi_{s_n=\pm\frac{\hbar}{2}}=\hat{R}_z(\varphi)\hat{R}_y(\theta)\psi_{s_z=\pm\frac{\hbar}{2}}=\mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{i}\varphi}{2}\hat{\sigma}_z}\cdot\mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{i}\theta}{2}\hat{\sigma}_y}\cdot\psi_{s_z=\pm\frac{\hbar}{2}}.$$

取 $\hat{S}_z$ 表象，则 $\psi_{s_z=+\frac{\hbar}{2}}=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$，由第 34 题知

$$R_y(\theta)=\mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{i}}{2}\theta\sigma_y}=\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)-\mathrm{i}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\sigma_y$$

$$=\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2} & -\sin\frac{\theta}{2}\\ \sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2}\end{pmatrix},$$

$$R_z(\varphi)=e^{\frac{-i}{2}\varphi\sigma z}=\cos\left(\frac{\varphi}{2}\right)-i\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\sigma_z$$

$$=\begin{pmatrix} e^{\frac{-i}{2}\varphi} & 0 \\ 0 & e^{\frac{i}{2}\varphi} \end{pmatrix}.$$

由此得出，属于 $S_n=+\frac{\hbar}{2}$ 的本征函数

$$\psi_{s_n=+\frac{\hbar}{2}}=R_z(\varphi)R_y(\theta)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} e^{\frac{-i}{2}\varphi} & 0 \\ 0 & e^{\frac{i}{2}\varphi} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -\sin\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} e^{\frac{-i}{2}\varphi} & 0 \\ 0 & e^{\frac{i}{2}\varphi} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2}e^{\frac{-i}{2}\varphi} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{\frac{i}{2}\varphi} \end{pmatrix}.$$

属于 $S_n=-\frac{\hbar}{2}$ 的本征函数

$$\psi_{s_n=-\frac{\hbar}{2}}=R_z(\varphi)R_y(\theta)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} e^{\frac{-i}{2}\varphi} & 0 \\ 0 & e^{\frac{i}{2}\varphi} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -\sin\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} e^{\frac{-i}{2}\varphi} & 0 \\ 0 & e^{\frac{i}{2}\varphi} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -\sin\frac{\theta}{2} \\ \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} -\sin\frac{\theta}{2}\cdot e^{\frac{-i}{2}\varphi} \\ \cos\frac{\theta}{2}e^{\frac{i}{2}\varphi} \end{pmatrix}.$$

本征函数的具体形式依表象选择而定. 这里求出的$\psi_{s_n=\pm\frac{\hbar}{2}}$是$\hat{S}_z$表象中$\hat{S}_n$的本征函数.

如取$\hat{S}_n$表象,$\hat{S}_n=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$, $\hat{S}_n$的本征函数当然是

$$\alpha_n=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\beta_n=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}.$$

(2) 上问求出的$\psi_{s_n=\pm\frac{\hbar}{2}}$中,如取方位角$\theta=\frac{\pi}{2},\varphi=0$,则$n$方向即为$x$轴正方向,于是,$\hat{S}_z$表象中,$\hat{S}_x$的本征函数$\alpha_x=\psi_{s_x=\frac{\hbar}{2}}$为

$$\psi_{s_x=\frac{\hbar}{2}}=\begin{pmatrix}\cos\frac{\pi}{4}\\ \sin\frac{\pi}{4}\end{pmatrix}=\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix},$$

$$\beta_x=\psi_{s_x=-\frac{\hbar}{2}}=\begin{pmatrix}-\sin\frac{\pi}{4}\\ \cos\frac{\pi}{4}\end{pmatrix}=\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}-1\\1\end{pmatrix}.$$

如取$\theta=\varphi=\frac{\pi}{2}$. n方向即为y轴正方向. 于是$\hat{S}_z$表象中,$\hat{S}_y$的本征函数

$$\alpha_y=\psi_{s_y=\frac{\hbar}{2}}=\begin{pmatrix}\cos\frac{\pi}{4}e^{-i\frac{\pi}{4}}\\ \sin\frac{\pi}{4}e^{-i\frac{\pi}{4}}\end{pmatrix}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1-i\\1+i\end{pmatrix},$$

$$\beta_y=\psi_{s_y=-\frac{\hbar}{2}}=\begin{pmatrix}-\sin\frac{\pi}{4}e^{-\frac{i}{4}\pi}\\ \cos\frac{\pi}{4}e^{i\frac{\pi}{4}}\end{pmatrix}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}i-1\\ i+1\end{pmatrix}.$$

把以上结果与第 16 题中的

$$\alpha_x=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ 1\end{pmatrix},\qquad \beta_x=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -1\end{pmatrix},$$

$$\alpha_y=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix},\qquad \beta_y=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -i\end{pmatrix}$$

相比较，实质上并没有什么不同. 这是因为本征函数

$$\psi_{s_n=\frac{\hbar}{2}}=\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}e^{\frac{-i}{2}\varphi}\\ \sin\frac{\theta}{2}e^{\frac{i}{2}\varphi}\end{pmatrix}$$

与乘一个相因子$e^{\frac{i}{2}\varphi}$后得出的$\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{pmatrix}$两者并无实质差别. 对后者取$\theta=\varphi=\frac{\pi}{2}$即可得$\alpha_y=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix}$；取$\varphi=0$，$\theta=\frac{\pi}{2}$时，得$\alpha_x=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ 1\end{pmatrix}$.

类似地 $\psi_{s_n=-\frac{\hbar}{2}}=$

$$\begin{pmatrix}-\sin\frac{\theta}{2}e^{\frac{-i\varphi}{2}}\\ \cos\frac{\theta}{2}e^{\frac{i\varphi}{2}}\end{pmatrix}\text{与}\begin{pmatrix}\sin\frac{\theta}{2}\\ -\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{pmatrix}\text{及}\begin{pmatrix}-\sin\frac{\theta}{2}\\ \cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{pmatrix}$$

它们间都只差一个相因子，也无实质差别.

取 $\psi_{s_n=-\frac{\hbar}{2}}=\begin{pmatrix}\sin\frac{\theta}{2}\\ -\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{pmatrix}$，以 $\theta=\varphi=\frac{\pi}{2}$ 代入即得 $\beta_y=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -i\end{pmatrix}$. 取 $\theta=\frac{\pi}{2},\varphi=0$，得 $\beta_x=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -1\end{pmatrix}$.

42. (1) 二阶方阵有四个元素. 因此，任何四个线性无关的二阶方阵便可构成二阶方阵的完全集，为了证明 σ 矩阵与单位矩阵 I 是线性无关的. 用反证法，首先假定 $a_0I+a_x\sigma_x+a_y\sigma_y+a_z\sigma_z=0$. 以 σ 的标准形式代入，得

$$\begin{pmatrix}a_0+a_z & a_x-ia_y\\ a_x+ia_y & a_0-a_z\end{pmatrix}=0.$$

这要求每一元素均为零，即

$a_0+a_z=0, a_0-a_z=0, a_x+ia_y=0, a_x-ia_y=0.$

同时满足这四个条件的解，只有 $a_0=a_x=a_y=a_z=0$. 因此，σ 矩阵与单位矩阵 I 是线性无关的，它们构成二阶方阵的完全集，即任何二阶方阵均可以它们线性组合来表出.

(2) 取 $M=R_n(\theta)$，自旋态空间的转动矩阵，则展开式

$$\begin{aligned}M&=R_n(\theta)\\&=\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}-in_3\sin\frac{\theta}{2} & (-in_1-n_2)\sin\frac{\theta}{2}\\ (-in_1+n_2)\sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2}+in_3\sin\frac{\theta}{2}\end{pmatrix}\\&=a_0I+a_x\sigma_x+a_y\sigma_y+a_z\sigma_z.\end{aligned}$$

$$a_0=\frac{1}{2}\mathrm{Tr}M=\frac{1}{2}\left[\cos\frac{\theta}{2}-in_3\sin\frac{\theta}{2}+\cos\frac{\theta}{2}+in_3\sin\frac{\theta}{2}\right]$$

$$=\cos\frac{\theta}{2}.$$

$a_i=\frac{1}{2}\mathrm{Tr}(M\sigma_i)$中，以 a_x 为例，由于

$$M\sigma_x=\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}-\mathrm{i}n_3\sin\frac{\theta}{2} & (-\mathrm{i}n_1-n_2)\sin\frac{\theta}{2}\\ (-\mathrm{i}n_1+n_2)\sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2}+\mathrm{i}n_3\sin\frac{\theta}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}(-\mathrm{i}n_1-n_2)\sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2}-\mathrm{i}n_3\sin\frac{\theta}{2}\\ \cos\frac{\theta}{2}+\mathrm{i}n_3\sin\frac{\theta}{2} & (-\mathrm{i}n_1+n_2)\sin\frac{\theta}{2}\end{pmatrix},$$

$$a_x=\frac{1}{2}\mathrm{Tr}(M\sigma_x)=\frac{1}{2}\sin\frac{\theta}{2}[-\mathrm{i}n_1-n_2+n_2-\mathrm{i}n_1]$$

$$=-\mathrm{i}n_1\sin\frac{\theta}{2}.$$

类似地可求出

$$a_y=\frac{1}{2}\mathrm{Tr}(M\sigma_y)=-\mathrm{i}n_2\sin\frac{\theta}{2},\ a_z=\frac{1}{2}\mathrm{Tr}(M\sigma_z)$$

$$=-\mathrm{i}n_3\sin\frac{\theta}{2}.$$

最后，得

$$R_n(\theta)=\cos\frac{\theta}{2}I-\mathrm{i}\sin\frac{\theta}{2}[n_1\sigma_x+n_2\sigma_y+n_3\sigma_z]$$

$$=\cos\frac{\theta}{2}I-\mathrm{i}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})\sin\frac{\theta}{2}.$$

这正是第 35 题的结果，可见

$$R_n(\theta)=\mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{i}}{2}\theta(\sigma\cdot n)}=\cos\frac{\theta}{2}I-\mathrm{i}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})\sin\frac{\theta}{2}$$

正是以 σ 及 I 构成的完全集展开的结果.

本题是要求验证公式 $a_0=\frac{1}{2}\mathrm{Tr}M\cdot a_i=\frac{1}{2}\mathrm{Tr}(M\sigma_i)$ 才用以上方法求 a_0 及 a_i. 实际上，由于给出的 $R_n(\theta)$ 是 $\hat{S}_z$ 表象中的表示.

在(1)中知，对 $\hat{S}_z$ 表象

$$a_0 I + a_x\sigma_x + a_y\sigma_y + a_z\sigma_z = \begin{pmatrix} a_0+a_z & a_x - \mathrm{i}a_y \\ a_x + \mathrm{i}a_y & a_0 - a_z \end{pmatrix} = R_n(\theta).$$

所以，由已知 $R_n(\theta)$ 的矩阵元，立刻可求出 a_0、a_i. 由于

$$a_0 + a_z = \cos\frac{\theta}{2} - \mathrm{i}n_3\sin\frac{\theta}{2},\ a_0 - a_z = \cos\frac{\theta}{2} + \mathrm{i}n_3\sin\frac{\theta}{2},$$

$$a_x + \mathrm{i}a_y = (n_2 - \mathrm{i}n_1)\sin\frac{\theta}{2},\ a_x - \mathrm{i}a_y = (-\mathrm{i}n_1 - n_2)\sin\frac{\theta}{2},$$

故

$$a_0 = \cos\frac{\theta}{2},\ a_i = -\mathrm{i}n_i\sin\frac{\theta}{2},\ i = x, y, z.$$

43. (1) 设二维矩阵 A，满足 $A\sigma - \sigma A = 0$. 由上题 A 总可表为

$$A = a_0 I + a_x\sigma_x + a_y\sigma_y + a_z\sigma_z,$$

左乘 σ_x 得 $\quad \sigma_x A = a_0\sigma_x + a_x + \mathrm{i}a_y\sigma_z - \mathrm{i}a_z\sigma_y,$

右乘 σ_x 得 $\quad A\sigma_x = a_0\sigma_x + a_x - \mathrm{i}a_y\sigma_z + \mathrm{i}a_z\sigma_y,$

按题设 $\sigma_x A = A\sigma_x$ 得 $a_y\sigma_z - a_z\sigma_y = -a_y\sigma_z + a_z\sigma_y.$

即 $a_y\sigma_z = a_z\sigma_y$，而 σ_y 与 σ_z 是独立的，故必有 $a_y = a_z = 0$.

以 σ_y 分别左右乘 A 的展开式，可类似得出

$$a_0 = a_z = 0.$$

因此，$a_x = a_y = a_z = 0$，$A = a_0 I$ 为常数矩阵.

(2) 设二维矩阵 B，满足 $B\sigma = -\sigma B$.

右乘 σ_y 于 $B\sigma_x = -\sigma_x B$ 得，$B\sigma_x\sigma_y = -\sigma_x B\sigma_y$. 由于 $\sigma_x\sigma_y = \mathrm{i}\sigma_z$ 及 $B\sigma_y = -\sigma_y B$，使上式为 $\mathrm{i}B\sigma_z = \sigma_x\sigma_y B = \mathrm{i}\sigma_z B$，即 $B\sigma_z = \sigma_z B$.

而题设 $B\sigma_z = -\sigma_z B$，故必有 $B = 0$.

44. (1) 设 $\hat{P}_\pm = \frac{1}{2}[1 \pm \hat{\sigma}_z]$，则

$$\hat{P}_+ + \hat{P}_- = \frac{1}{2}(1+\hat{\sigma}_z) + \frac{1}{2}(1-\hat{\sigma}_z) = 1.$$

(2) $[\hat{P}_+, \hat{P}_-]=\frac{1}{4}(1+\hat{\sigma}_z)(1-\hat{\sigma}_z)-\frac{1}{4}(1-\hat{\sigma}_z)(1+\hat{\sigma}_z)=0$。

(因 $\hat{\sigma}_z^2=1$)

(3) $\hat{P}_+\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\frac{1}{2}(1+\hat{\sigma}_z)\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$

$$=\frac{1}{2}\left[\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\right]\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a\\0\end{pmatrix},$$

$$\hat{P}_-\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\frac{1}{2}(1-\hat{\sigma}_z)\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&0\\0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\b\end{pmatrix}.$$

(4) S_z 表象中

$\hat{P}_\pm=\frac{1}{2}\left[1\pm\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\right]$，即 $P_+=\begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix}$，$P_-=\begin{pmatrix}0&0\\0&1\end{pmatrix}$。

45. (1) $\sigma_\pm=\frac{1}{2}(\sigma_x\pm\sigma_y)=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0&1\mp\mathrm{i}\\1\pm\mathrm{i}&0\end{pmatrix}$。

(2) $\sigma_\pm^2=\frac{1}{4}[\sigma_x^2\pm\mathrm{i}\sigma_x\sigma_y\pm\mathrm{i}\sigma_y\sigma_x-\sigma_y^2]$

$$=\frac{1}{4}(\mp\sigma_z\pm\sigma_z)=0,$$

$$\sigma_+\sigma_-=\frac{1}{4}[\sigma_x^2+\mathrm{i}\sigma_x\sigma_y-\mathrm{i}\sigma_y\sigma_x+\sigma_y^2]$$

$$=\frac{1}{4}[2+2\sigma_z]=\frac{1}{2}(1+\sigma_z)=P_+,$$

$$\sigma_-\sigma_+=\frac{1}{4}[\sigma_x^2-\mathrm{i}\sigma_x\sigma_y+\mathrm{i}\sigma_y\sigma_x+\sigma_y^2]$$

$$=\frac{1}{2}(1-\sigma_z)=P_-,$$

$$[\sigma_+,\sigma_-]=\sigma_+\sigma_--\sigma_-\sigma_+=P_+-P_-=\sigma_z.$$

(3) 应用前面题中 $\sigma_x\alpha=\beta,\sigma_x\beta=\alpha,\sigma_y\alpha=\mathrm{i}\beta,\sigma_y\beta=-\mathrm{i}\alpha$ 有

$$\sigma_-\alpha=\frac{1}{2}(\sigma_x-\mathrm{i}\sigma_y)\alpha=\frac{1}{2}(\beta-\mathrm{i}^2\beta)=\beta,$$

$$\sigma_-\beta=\frac{1}{2}(\sigma_x-\mathrm{i}\sigma_y)\beta=\frac{1}{2}(\alpha+\mathrm{i}^2\alpha)=0,$$

$$\sigma_+\alpha=\frac{1}{2}(\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y)=\frac{1}{2}(\beta+\mathrm{i}^2\beta)=0$$

$$\sigma_+\beta=\frac{1}{2}(\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y)\beta=\frac{1}{2}(\alpha-\mathrm{i}^2\alpha)=\alpha.$$

46. (1) $P_{n_\pm}^2=\frac{1}{4}(1\pm\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})(1\pm\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})$

$$=\frac{1}{4}(1\pm2\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}+\sigma_n^2)=\frac{1}{2}(1\pm\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})=P_{n\pm},$$

式中 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}=\sigma_n$，自旋在 $\boldsymbol{n}$ 方向分量.

(2) $\hat{P}_{n_\pm}=\frac{1}{2}(1+\hat{\sigma}_n)$称自旋投影算符，其本征态 $\psi_{n_\pm}$即 $\hat{\sigma}_n$ 的本征态. 但本征值不同，而是 1 和 0. 即

$$\hat{P}_{n_\pm}\psi_{n_\pm}=\psi_{n_\pm},\quad \hat{P}_{n_\pm}\psi_{n_\mp}=0.$$

由于任自旋态 χ 均可以基矢 $\psi_{n_\pm}$ 展开为 $\chi=c_1\psi_{n_+}+c_2\psi_{n_-}$，

且 $\hat{P}_{n_+}\chi=c_1P_{n_+}\psi_{n_+}+c_2P_{n_+}\psi_{n_-}=c_1\psi_{n_+},\ \hat{P}_{n_-}\chi=c_2\psi_{n_-}.$

因而，$\hat{P}_{n_\pm}$的物理意义在于：$\hat{P}_{n_\pm}$作用于任一自旋态 χ，将得到 $\boldsymbol{n}$ 方向的自旋本征态 $\psi_{n_\pm}$.

47. (1) 以 $\hat{P}_{n_+}=\frac{1}{2}(1+\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{n})$作用于自旋态 $\chi=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$得

$$\psi_{n_+}=\psi_{S_n=\frac{\hbar}{2}}=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}.$$

由第 40 题

$$\sigma_n=\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}=\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\\ \sin\theta\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} & -\cos\theta\end{pmatrix}.$$

$$\psi_{n_+}=\frac{1}{2}\left[\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}\cos\theta&\sin\theta e^{-i\varphi}\\\sin\theta e^{i\varphi}&-\cos\theta\end{pmatrix}\right]\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$

$$=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1+\cos\theta&\sin\theta e^{-i\varphi}\\\sin\theta e^{i\varphi}&1-\cos\theta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}\dfrac{1+\cos\theta}{2}\\\dfrac{\sin\theta e^{i\varphi}}{2}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos^2\dfrac{\theta}{2}\\\sin\dfrac{\theta}{2}\cos\dfrac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{pmatrix}.$$

设归一化本征矢为$\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=N\begin{pmatrix}\cos^2\left(\dfrac{\theta}{2}\right)\\\sin\dfrac{\theta}{2}\cos\dfrac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{pmatrix}$，$N$ 为归一化常数.

归一化要求 $a^*a+b^*b=1$，即 $N^2\cos^2\dfrac{\theta}{2}=1$，$N=1/\cos\dfrac{\theta}{2}$.

于是，归一化的

$$\psi_{n_+}=\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\\\sin\dfrac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{pmatrix}\text{ 或 }\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}e^{-i\frac{\varphi}{2}}\\\sin\dfrac{\theta}{2}\cdot e^{i\frac{\varphi}{2}}\end{pmatrix}.$$

类似地，以 $\hat{P}_{n_-}$ 作用于 $\chi=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$，得

$$\psi_{n_-}=\frac{1}{2}(1-\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\sin^2\dfrac{\theta}{2}\\-\sin\dfrac{\theta}{2}\cos\dfrac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{pmatrix}.$$

由于归一化常数 $N=1/\sin\dfrac{\theta}{2}$，最后得归一化的

$$\psi_{n_-}=\begin{pmatrix}\sin\dfrac{\theta}{2}\\-\cos\dfrac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{pmatrix}\text{ 或 }\begin{pmatrix}\sin\dfrac{\theta}{2}e^{-i\frac{\varphi}{2}}\\-\cos\dfrac{\theta}{2}e^{i\frac{\varphi}{2}}\end{pmatrix}.$$

求出的 $\psi_{n_\pm}$ 与第 41 题的结论是相同的.

(2) 设 $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}=\hat{P}_{n_-}\psi_{S_n=\frac{\hbar}{2}}=\frac{1}{2}[1-\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}]\begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi} \end{pmatrix}$

$$=\frac{1}{2}\left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}-\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix}\right]\begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi} \end{pmatrix}$$

$$=\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1-\cos\theta & -\sin\theta e^{-i\varphi} \\ -\sin\theta e^{i\varphi} & 1+\cos\theta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi} \end{pmatrix},$$

则
$$a=\frac{1}{2}(1-\cos\theta)\cos\frac{\theta}{2}-\frac{1}{2}\sin\theta\sin\frac{\theta}{2}$$

$$=\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\cos\frac{\theta}{2}-\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\cos\frac{\theta}{2}=0,$$

$$b=\frac{1}{2}\sin\theta\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}+\frac{1}{2}(1+\cos\theta)\sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}$$

$$=-\sin\frac{\theta}{2}\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{i\varphi}+\sin\frac{\theta}{2}\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{i\varphi}=0.$$

类似地可有 $\hat{P}_{n_+}\psi_{S_n=-\frac{\hbar}{2}}=0$. 而

$$\hat{P}_{n_+}\psi_{S_n=\frac{\hbar}{2}}=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})\psi_{n_+}$$

$$=\frac{1}{2}\left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}+\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix}\right]\begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi} \end{pmatrix}$$

$$=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1+\cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi}\\ \sin\theta e^{i\varphi} & 1-\cos\theta\end{bmatrix}\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{pmatrix}$$

$$=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}(1+\cos\theta)\cos\frac{\theta}{2}+\sin\theta\sin\frac{\theta}{2}\\ \sin\theta\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}+(1-\cos\theta)\sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}\cos^3\left(\frac{\theta}{2}\right)+\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\cos\frac{\theta}{2}\\ e^{i\varphi}\sin\frac{\theta}{2}\left(\cos^2\frac{\theta}{2}+\sin^2\frac{\theta}{2}\right)\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{pmatrix}=\psi_{S_n=-\frac{\hbar}{2}}.$$

同样可得出　　$\hat{P}_{n_-}\psi_{S_n=-\frac{\hbar}{2}}=\psi_{S_n=-\frac{\hbar}{2}}$.

48. 将自旋态 $\chi=\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}$ 以基矢 $\psi_{n_\pm}$ 展开为

$$\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}=c_1\psi_{n_+}+c_2\psi_{n_-}$$

$$=c_1\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}e^{-\frac{i}{2}\varphi}\\ \sin\frac{\theta}{2}e^{\frac{i}{2}\varphi}\end{pmatrix}+c_2\begin{pmatrix}\sin\frac{\theta}{2}e^{\frac{-i}{2}\varphi}\\ -\cos\frac{\theta}{2}e^{\frac{i}{2}\varphi}\end{pmatrix},$$

即

$$ae^{\frac{i}{2}\varphi}=c_1\cos\frac{\theta}{2}+c_2\sin\frac{\theta}{2}\qquad①$$

$$be^{\frac{-i}{2}\varphi}=c_1\sin\frac{\theta}{2}-c_2\cos\frac{\theta}{2}\qquad②$$

$\sin\frac{\theta}{2}\times①-\cos\frac{\theta}{2}\times②$ 得，$c_2=a\sin\frac{\theta}{2}e^{\frac{i}{2}\varphi}-b\cos\frac{\theta}{2}e^{\frac{-i}{2}\varphi}$，

$\cos\frac{\theta}{2}\times①-\sin\frac{\theta}{2}\times②$ 得，$c_1=a\cos\frac{\theta}{2}e^{\frac{i}{2}\varphi}+b\sin\frac{\theta}{2}e^{\frac{-i}{2}\varphi}$，

$\hat{S}_n$ 对 $\chi=\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$态的平均值，由平均值定义

$$\overline{S}_n=|c_1|^2\cdot\frac{\hbar}{2}+|c_2|^2\cdot\left(-\frac{\hbar}{2}\right)=(|c_1|^2-|c_2|^2)\frac{\hbar}{2}$$

$$=\frac{\hbar}{2}[(|a|^2-|b|^2)\cos\theta+(ab^*e^{i\varphi}+a^*be^{-i\varphi})\sin\theta].$$

与第 40 题由 $\overline{S}_n=\chi^\dagger S_n\chi$ 求出结果一致.

49. $\hat{J}_\pm=\hat{J}_x\pm i\hat{J}_y$ 不是厄米算符，不能作为力学量. 因为 $\hat{J}_\pm$ 具有性质 $\hat{J}_\pm|j,m\rangle=\hbar\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\,|j,m\pm1\rangle$.

$\hat{J}_\pm$ 作用在$|j,m\rangle$态上，使磁量子数 m 增 1 或减 1. 故称 $\hat{J}_+$ 为上升算符，$\hat{J}_-$ 为下降算符.

50. 经典力学中，两角动量可按矢量相加法则简单地相加. 它们相加的角度可以是任意的（取决于体系的性质），因此得到的合角动量其数值与取向也是连续变化的.

量子力学中，角动量总是一个量子化的量. 不仅两个任意角动量的大小与取向是量子化的，如果它们相互耦合. 则合角动量的大小与取向也是量子化的，因此两角动量的耦合方式要受到限制，不能是任意的. 例如，在量子力学中，两角动量的耦合满足三角形关系，而按照经典方式描述，这种耦合的限制就相当于两角动量的夹角不能是任意的，而是量子化的.

51. 如果两角动量 $\hat{J}_1,\hat{J}_2$ 的有关量子数为 j_1、m_1；j_2、m_2. 合角动量 $\hat{J}$ 的量子数为 j、m.

以力学量完全集$(\hat{J}_1^2,\hat{J}_{1z},\hat{J}_2^2,\hat{J}_{2z})$ 的共同本征矢 $|j_1,m_1,j_2,m_2\rangle=|j_1,m_1\rangle|j_2,m_2\rangle$ 为基矢的表象称为非耦合表象. 以力学量完全集$(\hat{J}_1^2,\hat{J}_2^2,\hat{J}^2,\hat{J}_z)$的共同本征矢$|j_1,j_2,j,m\rangle$为基矢的表象称为耦合表象.

注意，这里所说的力学量完全集只是就角动量而言．当然，完全集中还包括其他力学量．例如，基矢$|\alpha j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$，其中以$\alpha$代表完全集中其他量子数．

耦合表象与非耦合表象基矢都构成完全集．因此，可以互相转换．

$$|j_1, j_2, j, m\rangle = \sum_{m_1, m_2} C^{j}_{m_1, m_2} |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle .$$

式中，幺正变换系数$C^{j}_{m_1, m_2} = \langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j_1, j_2, j, m\rangle$称为矢量耦合系数或C-G(Clebsch-Gordan)系数．

52. 若给定两角动量的量子数为j_1、m_1与j_2、m_2．则耦合角动量的量子数为$m = m_1 + m_2$及

$$j = j_1 + j_2,\ j_1 + j_2 - 1, \cdots,\ |j_1 - j_2| .$$

这表明j_1, j_2, j之间具有三角形三个边长的关系，所以称之为三角形关系．如图58．其中$\theta = \cos^{-1}[(j_1^2 + j_2^2 - j^2)/2j_1 j_2]$．

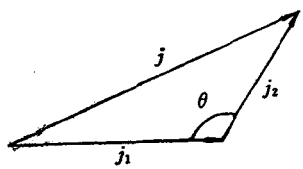


图 58

由此可知，$j_1 + j_2$为整数时，j也是整数．$j_1 + j_2$为半整数时，j也是半整数，所以$j_1 + j_2 + j$一定是整数．

三角形关系的适用条件：两角动量属于不同的自由度，而j_1，j_2仍为好量子数．

53. (1) 当j_1给定时，m_1可有$2j_1 + 1$个取值．当j_2给定时，m_2可有$2j_2 + 1$个取值．因而

$|j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle = |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$共有$(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$个，它们组成正交归一的完全系，是非耦合表象的基矢．

$|j_1, j_2, j, m\rangle$可由它们线性叠加为

$$|j_1, j_2, j, m\rangle = \sum_{m_1, m_2} C^{j}_{m_1, m_2} |j_1, j_2 j, m\rangle .$$

因而，当 j_1 和 j_2 给定时，相互独立的$|j,m\rangle$的数目也是$(2j_1+1)\cdot(2j_2+1)$个.

(2) $j_1=2$ 时，m_1 可取值为 0，±1，±2. $j_2=1$ 时，m_2 可取值为 0，±1.

j 可取值为：3，2，1. 由 $m=m_1+m_2$，故

当 $j=3, m=0,\pm1,\pm2,\pm3$，对应$|j,m\rangle$有 7 个；

$j=2, m=0,\pm1,\pm2$，对应$|j,m\rangle$有 5 个；

$j=1, m=0,\pm1$，对应$|j,m\rangle$有 3 个；

对应$|j,m\rangle$数目总共正是$(2j_1+1)(2j_2+1)=15$个.

54. (1) 如 $\hat{\boldsymbol{J}}_1$ 与 $\hat{\boldsymbol{J}}_2$ 是互相独立的两个角动量，则它们满足 $\hat{\boldsymbol{J}}_1\times\hat{\boldsymbol{J}}_1=\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{J}}_1$，$\hat{\boldsymbol{J}}_2\times\hat{\boldsymbol{J}}_2=\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{J}}_2$. 且 $\hat{\boldsymbol{J}}_1$与$\hat{\boldsymbol{J}}_2$ 是对易的. 即

$$\hat{J}_{1x}\hat{J}_{2y}=\hat{J}_{2y}\hat{J}_{1x},\cdots.$$

设$\hat{\boldsymbol{K}}=\hat{\boldsymbol{J}}_1-\hat{\boldsymbol{J}}_2$，分量 $\hat{K}_x=\hat{J}_{1x}-\hat{J}_{2x}$，$\hat{K}_y=\hat{J}_{1y}-\hat{J}_{2y}$，$\hat{K}_z=\hat{J}_{1z}-\hat{J}_{2z}$.

$$\begin{aligned}\hat{K}_x\hat{K}_y-\hat{K}_y\hat{K}_x&=(\hat{J}_{1x}-\hat{J}_{2x})(\hat{J}_{1y}-\hat{J}_{2y})-(\hat{J}_{1y}-\hat{J}_{2y})(\hat{J}_{1x}-\hat{J}_{2x})\\&=[\hat{J}_{1x},\hat{J}_{1y}]-[\hat{J}_{1x},\hat{J}_{2y}]+[\hat{J}_{1y},\hat{J}_{2x}]+[\hat{J}_{2x},\hat{J}_{2y}].\end{aligned}$$

由于$\hat{\boldsymbol{J}}_1$ 与 $\hat{\boldsymbol{J}}_2$ 对易，$[\hat{J}_{1x},\hat{J}_{1y}]=\mathrm{i}\hbar\hat{J}_{1z}$，$[\hat{J}_{2x},\hat{J}_{2y}]=\mathrm{i}\hbar\hat{J}_{2z}$，故 $\hat{K}_x\hat{K}_y-\hat{K}_y\hat{K}_x=\mathrm{i}\hbar[\hat{J}_{1z}+\hat{J}_{2z}]\neq\mathrm{i}\hbar\hat{K}_z$. 对$[\hat{K}_y,\hat{K}_z]$与$[\hat{K}_z,\hat{K}_x]$可得类似结果. 总之 $\hat{\boldsymbol{K}}\times\hat{\boldsymbol{K}}\neq\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{K}}$.

因此，两个独立的角动量$\hat{\boldsymbol{J}}_1$ 与 $\hat{\boldsymbol{J}}_2$ 之差. $\hat{\boldsymbol{K}}=\hat{\boldsymbol{J}}_1-\hat{\boldsymbol{J}}_2$ 不是角动量.

(2) 如果角动量$\boldsymbol{J}_1$ 与 $\hat{\boldsymbol{J}}_2$ 不是独立的，即它们不对易，并且 $\hat{\boldsymbol{J}}_1$ 和 $\boldsymbol{J}_2$ 的分量满足对易关系$[\hat{J}_{1x},\hat{J}_{2x}]=0$，$[\hat{J}_{1x},\hat{J}_{2y}]=\mathrm{i}\hbar\hat{J}_{2z}$，$[\hat{J}_{1x},\hat{J}_{2z}]=-\mathrm{i}\hbar J_{2y}$，以及它们的循环置换式，如 $[\hat{J}_{1y},\hat{J}_{2y}]=0$，$[\hat{J}_{1y},\hat{J}_{2x}]=-\mathrm{i}\hbar J_{2z}$，$[\hat{J}_{1z},\hat{J}_{2x}]=\mathrm{i}\hbar J_{2y}\cdots$，则

$$\hat{K}_x\hat{K}_y-\hat{K}_y\hat{K}_x$$
$$=[\hat{J}_{1x},\hat{J}_{1y}]-[\hat{J}_{1x},\hat{J}_{2y}]+[\hat{J}_{1y},\hat{J}_{2x}]+[\hat{J}_{2x},\hat{J}_{2y}]$$
$$=\mathrm{i}\hbar(\hat{J}_{1z}-\hat{J}_{2z}-\hat{J}_{2z}+\hat{J}_{2z})=\mathrm{i}\hbar(J_{1z}-J_{2z})=\mathrm{i}\hbar K_z.$$
$$\hat{K}_z\hat{K}_x-\hat{K}_x\hat{K}_z$$
$$=[\hat{J}_{1z},\hat{J}_{1x}]-[\hat{J}_{1z},\hat{J}_{2x}]+[\hat{J}_{1x},\hat{J}_{2z}]+[\hat{J}_{2z},\hat{J}_{2x}]$$
$$=\mathrm{i}\hbar(\hat{J}_{1y}-\hat{J}_{2y})=\mathrm{i}\hbar\hat{K}_y.$$

类似地，有 $\hat{K}_y\hat{K}_z-\hat{K}_z\hat{K}_y=\mathrm{i}\hbar\hat{K}_x$.

总之，此时 $\hat{\boldsymbol{K}}=\hat{\boldsymbol{J}}_1-\hat{\boldsymbol{J}}_2$ 满足 $\hat{\boldsymbol{K}}\times\hat{\boldsymbol{K}}=\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{K}}$，$\hat{\boldsymbol{K}}$ 才是角动量.

55. (1) 三个独立的角动量 $\hat{\boldsymbol{j}}_1$、$\hat{\boldsymbol{j}}_2$、$\hat{\boldsymbol{j}}_3$，令 $\hat{\boldsymbol{j}}_{12}=\hat{\boldsymbol{j}}_1+\hat{\boldsymbol{j}}_2$，$\hat{\boldsymbol{j}}_{23}=\hat{\boldsymbol{j}}_2+\hat{\boldsymbol{j}}_3$，则 $\hat{\boldsymbol{j}}_{12}^2$ 与 $\hat{\boldsymbol{j}}_{23}^2$ 不可对易. 证明如下：

$$\hat{j}_{12}^2=\hat{j}_1^2+\hat{j}_2^2+2\hat{j}_{1x}\hat{j}_{2x}+2\hat{j}_{1y}\hat{j}_{2y}+2\hat{j}_{1z}\hat{j}_{2z}$$
$$=\hat{j}_1^2+\hat{j}_2^2+2\hat{\boldsymbol{j}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{j}}_2,$$
$$\hat{j}_{23}^2=\hat{j}_2^2+\hat{j}_3^2+2\hat{j}_{2x}\hat{j}_{3x}+2\hat{j}_{2y}\hat{j}_{3y}+2\hat{j}_{2z}\hat{j}_{3z}$$
$$=\hat{j}_2^2+\hat{j}_3^2+2\hat{\boldsymbol{j}}_2\cdot\hat{\boldsymbol{j}}_3.$$

已知 $\hat{\boldsymbol{j}}_1$、$\hat{\boldsymbol{j}}_2$、$\hat{\boldsymbol{j}}_3$ 间相互对易，利用 $\hat{\boldsymbol{j}}_1\times\hat{\boldsymbol{j}}_1=\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{j}}_1$，…，及 $[\hat{j}_1^2,\hat{j}_{1x}]=[\hat{j}_1^2,\hat{j}_{1y}]=[\hat{j}_1^2,\hat{j}_{1z}]=0$，…可得

$$[\hat{j}_{12}^2,\hat{j}_{23}^2]=4[\hat{\boldsymbol{j}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{j}}_2,\hat{\boldsymbol{j}}_2\cdot\hat{\boldsymbol{j}}_3]=4\hat{j}_{1x}\hat{j}_{3y}[\hat{j}_{2x},\hat{j}_{2y}]+4\hat{j}_{1x}\hat{j}_{3z}[\hat{j}_{2x},\hat{j}_{2z}]+4\hat{j}_{1y}\hat{j}_{3x}[\hat{j}_{2y},\hat{j}_{2x}]+4\hat{j}_{1y}\hat{j}_{3z}[\hat{j}_{2y},\hat{j}_{2z}]+4\hat{j}_{1z}\hat{j}_{3x}[\hat{j}_{2z},\hat{j}_{2x}]+4\hat{j}_{1z}\hat{j}_{3y}[\hat{j}_{2z},\hat{j}_{2y}]=4\mathrm{i}\hbar(\hat{j}_{1x}\hat{j}_{3y}-\hat{j}_{1y}\hat{j}_{3x})\hat{j}_{2z}+4\mathrm{i}\hbar(\hat{j}_{1y}\hat{j}_{3z}-\hat{j}_{1z}\hat{j}_{3y})\hat{j}_{2x}+4\mathrm{i}\hbar(\hat{j}_{1z}\hat{j}_{3x}-\hat{j}_{1x}\hat{j}_{3z})\hat{j}_{2y}=4\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{j}}_2\cdot(\hat{\boldsymbol{j}}_1\times\hat{\boldsymbol{j}}_3)=-4\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{j}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{j}}_2\times\hat{\boldsymbol{j}}_3$，对任意 $\boldsymbol{j}_1$，$\boldsymbol{j}_2$，$\boldsymbol{j}_3$，一般不为零. 这是因为 $\boldsymbol{j}_1\cdot(\boldsymbol{j}_2\times\boldsymbol{j}_3)=0$ 正是 $\boldsymbol{j}_1$、$\boldsymbol{j}_2$、$\boldsymbol{j}_3$ 三个矢量共面的充要条件. 对任意三个角动量，一般是不成立的.

(2) 两个独立的角动量耦合时，只有一个耦合表象. 两个以上角动量耦合表象不只一个，与耦合次序有关.

例如，三个角动量耦合，三个中任两个先耦合成中间角动量，如$\boldsymbol{j}_1+\boldsymbol{j}_2=\boldsymbol{j}_{12}$或$\boldsymbol{j}_2+\boldsymbol{j}_3=\boldsymbol{j}_{23}$，再与第三个角动量耦合成$\boldsymbol{j}=\boldsymbol{j}_{12}+\boldsymbol{j}_3$或$\boldsymbol{j}=\boldsymbol{j}_{23}+\boldsymbol{j}_1$，并由此得出耦合表象的基矢$\varphi_{jm}$. 由于$\hat{j}_{12}^2$与$\hat{j}_{23}^2$不对易. 所以，对由不同耦合次序得出的耦合表象必须加以区分，如$|j,m\rangle_{1,2}$与$|j,m\rangle_{2,3}$…这正是两个以上角动量耦合的特点.

不同耦合表象间显然通过幺正变换相联系，这种幺正变换系数叫重耦合系数，可以用C-G系数表出.

56. (1) 轨道角动量与自旋角动量分别属于不同的自由度，作用于波函数的不同变量上，因而它们是互相对易的.

(2) 没有影响，对易关系属于角动量的本质特征，不因相互作用而改变.

57. 自旋轨道耦合的存在使得

(1) 体系的波函数不再能分解为空间波函数与自旋波函数的乘积；

(2) 体系的总哈密顿量含有自旋变量与轨道变量共存的项；

(3) 如果是有心力场，则总角动量依然守恒，但大小受到耦合的限制.

58. 由$\hat{J}^2=\hat{L}^2+\hat{S}^2+2\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}$得

$$\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}=\frac{1}{2}(\hat{J}^2-\hat{L}^2-\hat{S}^2),$$

$$\overline{\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}}=\left\langle s,l,j,m\left|\frac{1}{2}(\hat{J}^2-\hat{L}^2-\hat{S}^2)\right|s,l,j,m\right\rangle$$

$$=\frac{\hbar^2}{2}\left[j(j+1)-l(l+1)-\frac{3}{4}\right].$$

由于$|s,l,j,m\rangle$是$\hat{J}^2$、$\hat{J}_z$、$\hat{L}^2$、及$\hat{S}^2$的共同本征态，因此，上面求得的平均值亦即$\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}$的本征值.

59. $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}'$. $\hat{H}_0=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(r)$. 自旋轨道耦合项

$\hat{H}'$ 为

$$\hat{H}'=\frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}(\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}).$$

	$\hat{L}^2$	L_x	$\hat{L}_x$	$\hat{S}^2$	S_z	$\hat{S}_x$	$\hat{J}^2$	$\hat{J}_z$	J_z	$\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}$	$\hat{H}$	$\hat{H}_0$
$\hat{L}^2$												
$\hat{L}_x$			×				○	○	○	×	○	
$\hat{L}_z$		×					○	○	○	×	○	
$\hat{S}^2$												
$\hat{S}_x$						×	○	○	○	×	○	
$\hat{S}_z$					×		○	○	○	×	○	
$\hat{J}^2$		○	○		○	○						
$\hat{J}_x$		○	○		○	○			×			
$\hat{J}_z$		○	○		○	○		×				
$\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}$		×	×		×	×						
$\hat{H}$		○	○		○	○						○
$\hat{H}_0$											○	

说明：① 表中以○表示当不考虑自旋轨道耦合，即 $\hat{H}'=0$ 时对易。当 $\hat{H}'\neq 0$ 时不对易。

② 以空格表示对易.

③ 以“×”表示不对易.

60. 若力学量 $\hat{F}$ 与体系哈密顿量对易，则对应量子数 f 便可作为描述体系状态的特征参数，f 便称为好量子数.

由上题显见，当自旋轨道相互作用 $\hat{H}'\neq 0$ 时，l、S、j、m 都是好量子数.

61. 假定电子不同取向的两自旋态之间的能级差为 ΔE_s，此能级差相当于电子自旋具有进行频率

$$\omega_S=\frac{\Delta E_S}{\hbar}.$$

在无外磁场时，能级差由自旋轨道耦合 $\xi(r)\hat{S}\cdot\hat{L}$ 产生 ΔE_S. 若忽略自旋轨道耦合，则 $\omega_S\sim 0$.

当存在外磁场时，必须考虑自旋磁矩与外磁场的相互作用能.

如外磁场很强，以致可以忽略自旋轨道耦合作用，(即简单塞曼效应)，这时

$$\Delta E_S=\frac{e\hbar B}{2mc},\ \text{故}\ \omega_S=\frac{eB}{2mc}.$$

进动角：按照半经典进行模型如图 59.

已知 $S_z=\pm\frac{\hbar}{2}$,

$$S^2=s(s+1)\hbar^2=\frac{3}{4}\hbar^2,$$

$$|S|=\sqrt{s(s+1)}\hbar=\frac{\sqrt{3}}{2}\hbar,$$

$$\cos\theta_\pm=\frac{S_z}{|S|}=\pm\frac{\sqrt{3}}{3}$$

故进动角 $\theta_\pm=\cos^{-1}\left(\pm\frac{\sqrt{3}}{3}\right)=\begin{cases}55°\\125°.\end{cases}$

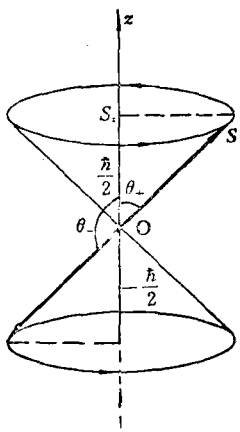


图 59

62. 两电子耦合，总自旋量子数 $S=0,1$.

$S=1$ 时，$m_S=1$(自旋同向)；0(自旋反向)；-1 (自旋同向).

$m_S=1, S_z=\hbar, S=\sqrt{s(s+1)}\hbar=\sqrt{2}\hbar,$

进动角 $\theta=\cos^{-1}\frac{1}{\sqrt{2}}=45°.$

类似可得：$S=1$, $m_S=-1$ 时，$\theta=135°$,

$S=1$, $m_S=0$ 时，$\theta=90°$;

$S=0$, $m_S=0$ 时；进动消失.

63. 如图 60，角动量矢量绕 z 轴进动，对 z 轴有固定的投影 $S_z=\frac{\hbar}{2}$. S 在与进动轴(z 轴) 垂直的平面(xy 平面) 内投影的运动. 由于方向不固定故 $\overline{S}_x=\overline{S}_y=0$.

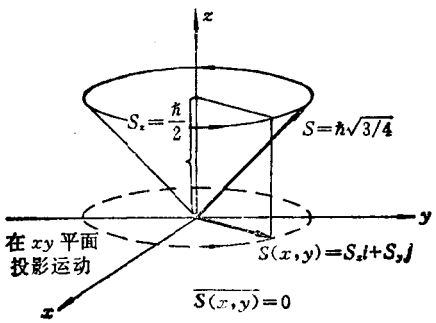


图 60

第 九 章

1. (4).

2. 如图 61 所示，对两个全同小球间的弹性碰撞，碰撞前可以给全同的小球标记编号，运动过程中每个小球都有确定的位置. 因而，作为经典的全同粒子的每个小球均有连续的确定的轨道. 原

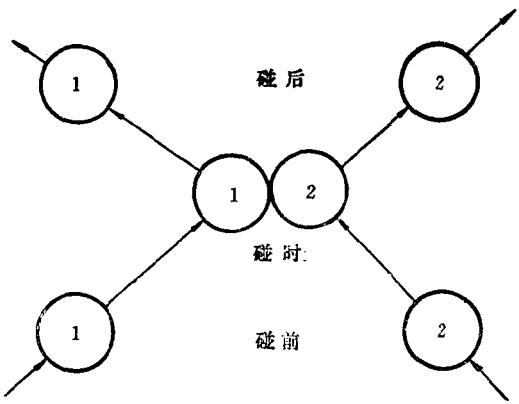


图 61

则上，我们可以沿各自的轨道对小球个别跟踪. 这样，在碰撞后任何时刻仍可区分哪个是 1 球，哪个是 2 球. 可见，两个经典的全同粒子间总是可区分的.

3. 图 62 所示是在质心系中以波包描述全同粒子(自旋为零)间弹性碰撞的示意图，划阴影线的区域代表某瞬时位置概率密度显著不为零的区域.

碰前：两波包完全分开，相向而行. 可以给粒子标记编号为[1],[2]

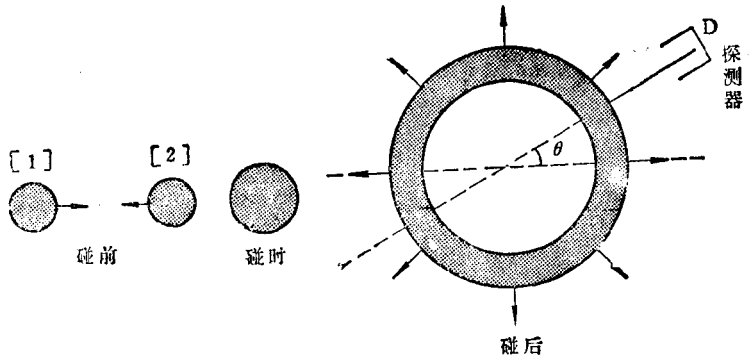


图 62

碰撞时：两波包重叠.

碰撞后：两粒子的概率密度的空间分布(以极坐标图表出).

当探测器D在与粒子[1] 的初始速度成 θ 角的方向接收到一个粒子时，根据动量守恒，另一个粒子必在与之相反的方向上. 由于两个粒子是全同的，所以此时无法区分D中接收的是哪个粒子.

可见，虽然在碰前可以对粒子标记编号，由于微观粒子具有波动性，当两个粒子的波在空间有重叠时，微观的全同粒子具有不可区分性.

4. (1) 全同粒子定域于空间的不同区域中，波函数完全不重叠.

例如，固体中点阵座上的原子在其平衡位置附近作微振动. 我们虽然不能从粒子的固有性质对各粒子加以分辨，但可以用各粒子的位置加以区分.

(2) 由于粒子自旋的方向而区分

例如，自旋为 $\frac{1}{2}$ 的两个全同粒子(如电子)在质心系中的弹性碰撞. 如图 63，图中实体箭头代表粒子动量，空心箭头代表粒子自旋态.

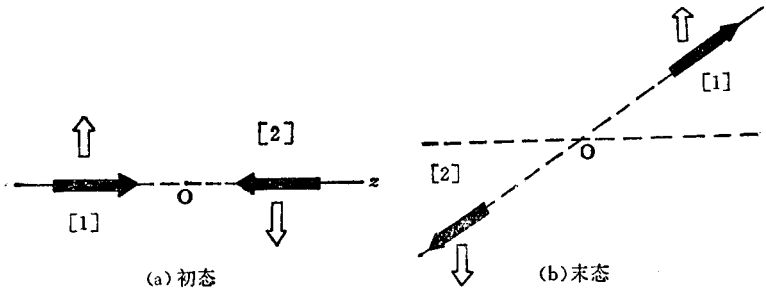


图 63

当两粒子间相互作用与自旋无关时，碰撞过程不改变粒子自旋取向. 碰前，如两粒子不处在相同的自旋态，如图 63(a) 所示，则在图 63(b)所示的末态中，根据粒子自旋取向可区分粒子[1] 与[2].

5. 微观的全同粒子即使是可区分时仍具有波动性，仍以波函数描述体系状态，波函数满足波动方程……总之，仍遵守量子力学规律，只是此时不存在波函数的交换对称性.

6. (1) 物理状态不变是指体系的微观态及宏观态都不因全同粒子间的交换而改变. 全同性原理中强调的是微观态(量子态)的不变.

(2) 交换任意两个粒子是指在描述全同粒子体系状态的波函数中，交换任意两个粒子的全部坐标(包括自旋……).

(3) 实质相同. 所以，全同性原理往往也被称为不可区分(分辨)原理.

7. 经典的全同粒子总是可以区分的. 在经典全同粒子系中交换任意两个粒子时，虽然体系的宏观态仍不变但微观态改变了. 所以，经典的全同粒子不存在全同性原理.

8. 哈密顿量的交换对称性——全同粒子系的哈密顿量对交

换任意两个粒子的全部坐标是不变的，在经典力学或量子力学中都存在. 由于经典的全同粒子总是可区分的. 所以哈密顿量的交换对称性引导不出什么新的结果.

量子力学中N个全同粒子的体系波函数为$\psi(1,2,\cdots,i,\cdots,j,\cdots,N)$，其中以$i$代表第$i$个粒子的全部坐标. 为简便，以两粒子体系为例.

已知，体系波函数$\psi(1,2)$满足波动方程

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

其中$\hat{H}(1,2)=\hat{H}(2,1)$为体系哈密顿量.

设$\hat{P}_{12}$为两粒子的交换算符，以$\hat{P}_{12}$作用于波方程两边得

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\hat{P}_{12}\psi)=\hat{H}(2,1)(\hat{P}_{12}\psi)=\hat{H}(1,2)(\hat{P}_{12}\psi).$$

这表明如果波函数$\psi(1,2)$是波动方程的解，则由$\hat{H}$的交换对称性可得出的结论只是：$\hat{P}_{12}\psi(1,2)=\psi(2,1)$也是这方程的解.

在此基础上，再由于微观粒子全同性原理才可得出波函数有对称性限制的结论(见下题).

9. 全同粒子对交换任意两粒子而具有确定的对称性——波函数的交换对称性，是微观粒子特有的全同性原理的具体表述.

由体系哈密顿量的交换对称性只可得出$\hat{P}_{ij}\psi$与ψ同是波方程的解. 再根据波函数的交换对称性，$\hat{P}_{ij}\psi$与ψ所描述的是同一状态. 因而，它们之间只相差一个常数，设为λ，则$\hat{P}_{ij}\psi=\lambda\psi$. 再以$\hat{P}_{ij}$作用等式两边，左边还原为$\psi$，得$\psi=\lambda^2\psi$. 即算符$\hat{P}_{ij}$的本征值$\lambda=\pm1$.

当$\lambda=1$时，$\hat{P}_{ij}\psi=\psi$，ψ是对称的.

当$\lambda=-1$时，$\hat{P}_{ij}\psi=-\psi$，ψ是反对称的.

必须强调，根据对称性的一般定义（见“对称性和守恒定律”

章)，交换对称性是指全同粒子体系的哈密顿量在交换算符作用下的不变性，但这在粒子是否可区分时都存在.

波函数的交换对称性则是作为量子力学基本假设之一的全同性原理的具体表述，而不是体系哈密顿量交换对称性的直接推论. 正是在体系哈密顿量交换对称性的基础上，全同性原理给体系波函数 ψ 在数学上加上一个条件 $\hat{P}_{ij}\psi=\lambda\psi$，从而使态分为对称与反对称两类.

在量子力学中提到交换对称性时，往往总是指波函数的交换对称性.

10 (1) 由于体系 $\hat{H}$ 的交换对称性，函数 $\hat{H}\psi$ 与 ψ 具有相同的对称性，仍为反对称的.

(2) 由波动方程 $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi$，得 $\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi$. 由 (1) 知，$\hat{H}\psi$ 与 ψ 具有相同的对称性. 所以，此时 $\frac{\partial\psi}{\partial t}$ 也是反对称的.

(3) 由前两问知，在 $t+\mathrm{d}t$ 时波函数 $\psi_{\mathrm{A}}+\frac{\partial\psi_{\mathrm{A}}}{\partial t}\mathrm{d}t$ 是两个反对称函数之和，仍具有反对称性. 依此类推，可知在 t 后任何时刻，体系波函数仍维持原对称性不变.

11. 设全同粒子系波函数 ψ 在交换 i 与 k，j 与 k 粒子坐标时是对称的，而在交换 i 与 j 粒子坐标时是反对称的，则有

$$\psi(\cdots,i,\cdots,j,\cdots,k,\cdots)=-\psi(\cdots,j,\cdots,i,\cdots,k,\cdots)=-\psi(\cdots,j,\cdots,k,\cdots,i,\cdots)=-\psi(\cdots,k,\cdots,j,\cdots,i,\cdots)=-\psi(\cdots,i,\cdots,j,\cdots,k,\cdots),$$

由此得 $$\psi(\cdots,i,\cdots j,\cdots,k,\cdots)=0.$$

即不存在具有所假设的对称性质的态.

12. 全同粒子是固有性质均相同的粒子. 在同样条件下，粒子的行为是相同的. 因而，体系的哈密顿量仍然是对称的. 由本

章第 10 题知，全同粒子系如处在 ψ_S 态则它将永远处在 ψ_S 态. 即使改变外场，也永远不会跃迁到 ψ_A 态.

13. 由于全同性原理，全同粒子系中交换任何一对粒子都不产生新的量子态. 在数学上体现为给体系波函数加上条件 $\hat{P}_{ij}\psi = \lambda\psi$ (对任 i, j)即为交换算符 $\hat{P}_{ij}$ 的本征值方程.

可见，由于波函数的交换对称性，描述全同粒子系的波函数只能是交换算符的本征函数. 自然界中能实现的全同粒子系的态，一定是交换算符的本征态，体系波函数总有确定的交换对称性.

其他对称性就没有这个特点. 例如，一个具有空间反射对称性的体系所处状态并不一定是宇称算符的本征态，即态不一定有一定的宇称(见"对称性"章).

14. 全同粒子系的态必须有确定的交换对称性. 真实的物理态应是既满足波动方程又满足交换对称性要求的那些态. 因而，对全同粒子系，态叠加原理应表述为：体系波动方程解的任意线性叠加中，满足交换对称性的那些态才是体系的可能态.

15. 全同性原理要求全同粒子系只能处在交换算符的本征态，交换算符的本征值为 $+1$ 与 -1，全同粒子系分别对应为对称态与反对称态.

具有对称态的粒子称为玻色子. 具有反对称态的粒子称为费米子.

实验证明：自旋为 $\hbar$ 的半整数倍的基本粒子(如电子，质子，中子，…)是费米子，遵守费米-狄拉克统计；自旋为零(如 π 介子)或为 $\hbar$ 整数倍(如光子) 的基本粒子是玻色子. 遵守玻色-爱因斯坦统计.

至于为什么个别粒子的自旋性质与由它组成的全同粒子系的波函数对称性之间存在确定的联系？早在 40 年代泡利(Pauli)等已对这个问题进行了探讨，指出这是个相对论性问题，在理论上作

了一些抽象的说明. 可参阅:

[1] 《物理学中的对称性》第二卷(中译本),仝道荣译,科学出版社,1986 年,p. 522, § 16. 3. 4 因果律和自旋统计定理;

[2] R. L. Liboff, *Introductory Quantum Mechanics*, 1980, p. 637, App. B, *Spin and Statistics*.

在非相对论量子力学中,自旋与统计的关系只能作为实验事实接受.

16. 首先,组成复杂粒子的各成员必须强束缚在一起,使复杂粒子可作为一个单独粒子存在. 其次,要使复杂粒子系能作为一类全同粒子系看待,体系中每个复杂粒子整体的固有性质(如质量,自旋、电荷,…)应完全相同并具有交换对称性. 这就要求体系中每个复杂粒子具有相同的内部状态,并且体系中复杂粒子间相互作用微弱,不使复杂粒子内部状态受到影响.

例如,多个同类原子核中,有的核处于基态,有些核处在不同的激发态时就不构成全同粒子系. 电子处于不同激发态的氢原子系也不是全同粒子系.

由复杂粒子组成的全同粒子系遵从什么统计,是由该粒子中所含费米基本粒子的奇偶性确定.

由于玻色子的交换,波函数不变号. 而交换两个费米子使波函数变号. 所以,含有奇数个费米基本粒子的复杂粒子是费米子,遵守费米-狄拉克统计. 含有偶数个费米基本粒子的复杂粒子是玻色子,遵守玻色-爱因斯坦统计.

17. 一个原子核是 A(质量数)个核子的集合,其中 Z(原子序数)个质子,$(A-Z)$个中子. 核子均属费米子. 对全同核系统,波函数在交换全同核时是对称还是反对称就要依核包含的核子数 A 的奇偶而定. 质量数 A 为奇数的核为费米子,质量数为偶的核为玻色子.

至于中性原子，原子核中有 A(质量数)个核子，核外有 Z(原子序数)个电子. 所以，$A+Z$ 为偶数者是玻色子，为奇数者是费米子.

18. 氢原子($A+Z=2$)，α 粒子($A=2$)，氦原子 ($A+Z=6$)，氘核($A=2$)是玻色子.

氘原子($A+Z=3$)，氚核($A=3$)，氮原子($A+Z=14+7=21$)是费米子.

必须再强调一下，例如，氢原子是玻色子的确切含义是指：

氢原子整体作为一个简单粒子组成的氢原子体系，能当作一类全同粒子系对待时，氢原子体系由对称波函数描述.

19. 上题解答中已强调指出：氦原子是玻色子的确切含义是指由氦原子组成全同粒子系时，氦原子体系的波函数应是对称的.

计算氦原子的量子能级时，氦原子是当作受外场(原子核的库仑场)作用的两电子体系(略去原子核的运动). 电子是费米子. 所以氦原子的定态波函数由反对称波函数描述.

20. 微观的全同粒子在某些情形下是可区分的（见本章第 4 题). 如晶体中原子定域在空间不同区域，波函数完全不重叠，全同性原理失效. 由这种定域的粒子组成的系统称为定域系. 含有多个、全同且近独立的定域子系的系统遵守玻耳兹曼统计.

满足全同性原理的全同粒子系称为非定域系. 其中由费米子组成的系统称为费米系. 由玻色子组成的系统称为玻色系.

量子力学中提到全同粒子系而不加说明时，都是指非定域系.

21. 受全同性原理支配的统计叫量子统计. 与之对比，把不受全同性原理限制的玻耳兹曼统计称为经典统计. 因此在全同粒子系中，定域系仍遵守玻耳兹曼统计.

量子统计与经典统计在统计基本原理上是没有区别的. 差别在于：量子统计中，由于全同性原理，全同粒子系内交换任两粒子

都不给出新的微观态. 而在玻尔兹曼统计中，计算一宏观态所包括可能的微观态的数目将不同，因而使两类统计分布不同.

在量子统计中，费米系统又受泡利不相容原理的制约，导致了与玻色统计的差异.

22. 对全同粒子系波函数 $\psi(q_1, q_2, \cdots, q_i, \cdots, q_N)$ 中，第 i 个粒子的全部坐标 q_i，为简便以 i 表出. 则波函数写为 $\psi(1,2,\cdots,i,\cdots,N)$.

以全同玻色子系 $(N=4)\psi(1,2,3,4)$ 为例.

(1) 由于 $\hat{P}_{12}\psi(1,2,3,4)=\psi(2,1,3,4)$,

而 $$\hat{P}_{34}\psi(1,2,3,4)=\psi(1,2,4,3),$$

故 $$\hat{P}_{34}\hat{P}_{12}\psi(1,2,3,4)=\hat{P}_{34}\psi(2,1,3,4)=\psi(2,1,4,3),$$

$$\hat{P}_{12}\hat{P}_{34}\psi(1,2,3,4)=\hat{P}_{12}\psi(1,2,4,3)=\psi(2,1,4,3).$$

可见，$\hat{P}_{34}$ 与 $\hat{P}_{12}$ 对易. 类似可证明：$\hat{P}_{14}$ 与 $\hat{P}_{23}$ 对易、$\hat{P}_{13}$ 与 $\hat{P}_{24}$ 对易、…….

总之，不同的两对粒子的交换算符 $(i\neq j\neq k\neq l)\hat{P}_{ij}$ 与 $\hat{P}_{kl}$ 对易. 即不同粒子间的交换与次序无关.

(2) 由于 $\hat{P}_{13}\hat{P}_{12}\psi(1,2,3,4)=\hat{P}_{13}\psi(2,1,3,4)=\psi(2,3,1,4)$,

而 $\hat{P}_{12}\hat{P}_{13}\psi(1,2,3,4)=\hat{P}_{12}\psi(3,2,1,4)=\psi(3,1,2,4)$.

可见，$\hat{P}_{12}$ 与 $\hat{P}_{13}$ 不对易. 类似有 $\hat{P}_{12}$ 与 $\hat{P}_{14}$ 不对易、$\hat{P}_{23}$ 与 $\hat{P}_{24}$ 不对易、…….

总之，$\hat{P}_{ij}$ 与 $\hat{P}_{il}$ 之间，当 $j\neq l$ 时，不对易.

23. (1) 偶数 $N=2k(k=1,2,\cdots)$ 个全同粒子组成的体系中，每个粒子可与 $(N-1)$ 个粒子交换，由于 $\hat{P}_{ij}=\hat{P}_{ji}$，所以独立的交换算符有 $\frac{1}{2}N(N-1)=k(2k-1)$ 个. 其中，只有 $i\neq j\neq k\neq l$ 时，$[\hat{P}_{ij}, \hat{P}_{kl}]=0$. 所以在独立的交换算符中，彼此对易的为 $\frac{1}{2}N=$

k 个.

例如，$N=4$，四个粒子编号为 1，2，3，4. $k=\frac{N}{2}=2$，独立的交换算符有 $k(2k-1)=6$ 个，它们是 $\hat{P}_{12},\hat{P}_{13},\hat{P}_{14},\hat{P}_{23},\hat{P}_{24},\hat{P}_{34}$.

在其中任取一个，例如 $\hat{P}_{12}$，只有$[\hat{P}_{12},\ \hat{P}_{34}]=0$；如取 $\hat{P}_{13}$ 只有$[\hat{P}_{13},\hat{P}_{24}]=0$；取 $\hat{P}_{14}$ 只有$[\hat{P}_{14},\hat{P}_{23}]=0$；…….

因而，在六个独立的交换算符中，彼此对易的只有 $k=2$ 个.

(2) 奇数 $N=2k+1$ 个粒子.

独立的交换算符有$\frac{1}{2}N(N-1)=k(2k+1)$个. 其中彼此对易的$\frac{1}{2}(N-1)=k$个.

例如，$k=1$，$N=2k+1=3$.

独立的 $\hat{P}_{ij}$ 有 $k(2k+1)=3$ 个，它们是 $\hat{P}_{12},\hat{P}_{13},\hat{P}_{23}$. 其中彼此对易的为 $k=1$ 个，即三个独立算符中，每个算符只与本身可对易.

又如，$N=2k+1=5$，即 $k=2$.

独立的 $\hat{P}_{ij}$ 有 $k(2k+1)=10$ 个，它们是$\hat{P}_{12},\hat{P}_{13},\hat{P}_{14},\hat{P}_{15},\hat{P}_{23},\hat{P}_{24},\hat{P}_{25},\hat{P}_{34},\hat{P}_{35},\hat{P}_{45}$. 其中彼此对易的为 $k=2$ 个. 例如，虽然与 $\hat{P}_{12}$ 对易的可有 $\hat{P}_{34}$，或 $\hat{P}_{45}$，或 $\hat{P}_{35}$. 但后三者中任两个都是不对易的. 所以彼此相互对易的仍只有两个.

24. 设波函数 ψ 是 N 粒子系波方程的任一个解. 置换就是把 ψ 中粒子编号重新排列. N 粒子系可有 $N!$ 个排列，相当于 $N!$ 个置换. 由于体系哈密顿量对每个置换都是不变的. 因而，置换过的每个波函数仍然是该方程的一个解.

所以，从 N 粒子系波动方程任一解出发，经过 $N!$ 个置换可以得到 $N!$ 个波函数，这些波函数的任意线性叠加仍是该方程的解.

例如，$N=2$ 时. 有两个置换算符. 一个即为两粒子间的交

换，亦称对换，一个是恒等置换．对应的波函数为 $\psi(2,1)$ 与 $\psi(1,2)$.

$N=3$ 时，波函数 $\psi(1,2,3)$ 经所有可能的六个置换，得到的六个波函数为 $\psi(1,2,3)$，$\psi(3,2,1)$，$\psi(1,3,2)$，$\psi(2,1,3)$，$\psi(2,3,1)$，$\psi(3,1,2)$.

(2) 如引入置换算符 $\hat{P}$ 描述使粒子编号重新排列的手续，N 粒子系有 $N!$ 个置换算符.

上问中得出 $N=3$ 的六个波函数．可以认为是 ψ 中粒子编号从自然序列 1,2,3 出发，即 $\psi(1,2,3)$ 经六个不同的置换算符 $\hat{P}_\alpha$ $(\alpha=1,2,\cdots,6)$ 作用的结果.

(3) 因为粒子编号的置换可以从自然序列 $1,2,3,\cdots$ 出发，通过一系列的对换，重新排列而得出．所以任一置换算符可分解为若干交换算符的乘积.

例如，$N=3$ 时．经置换得出的六个波函数中

$\psi(3,2,1)=\hat{P}_{13}\psi(1,2,3)$，$\psi(1,3,2)=\hat{P}_{23}\psi(1,2,3)$，$\psi(2,1,3)=\hat{P}_{12}\psi(1,2,3)$.

可见，对应的三个置换算符分别是交换算符 $\hat{P}_{13}$，$\hat{P}_{23}$，与 $\hat{P}_{12}$.

而 $\psi(2,3,1)=\hat{P}_{23}\hat{P}_{13}\psi(1,2,3)$，$\psi(3,1,2)=\hat{P}_{12}\hat{P}_{13}\psi(1,2,3)$，

$\psi(1,2,3)=\hat{P}_{31}\hat{P}_{13}\psi(1,2,3)$.

可见，前两个置换算符分别分解为 $\hat{P}_{23}\hat{P}_{13}$ 与 $\hat{P}_{12}\hat{P}_{13}$，恒等置换可分解为 $\hat{P}_{31}\hat{P}_{13}$.

(4) 任一置换可分解为若干交换算符的乘积，但分解不是唯一的．例如，$N=3$ 时，$N!=6$ 个波函数中的三个：

$$\psi(2,3,1)=\hat{P}_{23}\hat{P}_{13}\psi(1,2,3)=\hat{P}_{12}\hat{P}_{23}\psi(1,2,3)$$
$$=\hat{P}_{13}\hat{P}_{12}\psi(1,2,3)=\hat{P}_{23}\hat{P}_{12}\hat{P}_{23}\hat{P}_{12}\psi(1,2,3)=\cdots.$$
$$\psi(3,1,2)=\hat{P}_{12}\hat{P}_{13}\psi(1,2,3)=\hat{P}_{23}\hat{P}_{12}\psi(1,2,3)=\cdots.$$

$$\psi(1,2,3)=\hat{P}_{12}\hat{P}_{12}\psi(1,2,3)=\hat{P}_{12}\hat{P}_{13}\hat{P}_{23}\hat{P}_{13}\psi(1,2,3)$$
$$=\hat{P}_{23}\hat{P}_{13}\hat{P}_{12}\hat{P}_{13}\psi(1,2,3)=\cdots.$$

由此可明显看出，虽然给定的置换算符分解为若干交换算符的乘积不是唯一的，但在 $N=3$ 时的六个置换算符中，有三个总是只可分解为偶数个对换的乘积. 而另外三个置换算符又只能分解为奇数个对换的乘积，例如

$$\psi(3,2,1)=\hat{P}_{13}\psi(1,2,3)=\hat{P}_{23}\hat{P}_{13}\hat{P}_{12}\psi(1,2,3)=\cdots.$$

能分解为偶(奇)数个对换的置换叫偶(奇)置换.

由此例中已看到，恒等置换是偶置换. 因而，N 粒子系对应的 $N!$ 个置换中，偶置换与奇置换各占一半.

25. 由于交换全同粒子引起的简并叫交换简并.

粒子数为 N 的全同粒子系，薛定谔方程的定态解可以多到 $N!$ 重简并. 它与体系波函数 ψ 中，N 个粒子编号的 $N!$ 种置换对应.

例如，两粒子(全同且近独立)系，波函数以单粒子态 ϕ_i，ϕ_j 表出时，波动方程的解 $\psi(1,2)=\phi_i(1)\phi_j(2)$，对应能量为 $E=E_i+E_j$. 由于体系哈密顿量的交换对称性.

$\psi(2,1)=\phi_i(2)\phi_j(1)$ 也是波动方程的解，对应能量仍为 $E=E_i+E_j$. $i\neq j$ 时，两个相互独立的波函数 $\psi(1,2)$ 与 $\psi(2,1)$ 具有相同的能量本征值 E. 这就是 $N!=2$ 重交换简并.

由于全同性原理，$\psi(1,2)$ 与 $\psi(2,1)$ 都不满足交换对称性. 因此都不描写物理状态. 由 $\psi(1,2)$ 与 $\psi(2,1)$ 线性叠加得出的.

$\psi_S=\psi(1,2)+\psi(2,1)$ 与 $\psi_A=\psi(1,2)-\psi(2,1)$ 是满足交换对称性的波函数，因而是描写单粒子态 i 与 j 上各有一个粒子的物理状态，ψ_S 与 ψ_A 对应的能量均为 $E=E_i+E_j$，ψ_S 只适用于玻色子，ψ_A 只适用于费米子.

由此例看出，交换简并是波函数数学解的简并、还不是物理状

态的简并，全同性原理对波函数对称性的限制可能消除这种数学解的交换简并，这是其他简并不具有的特点.

26. (1) N 个全同粒子在 k 个单粒子态中分布.

可能态数: ① 定域系 $n_D=k^N$.

② 费米系 $n_F=k!/N!(k-N)!$. $(k\geqslant N)$

③ 波色系 $n_B=(N+k-1)!/N!(k-1)!$.

(2) 当 $N=3$, $k=2$ 时. 设三个粒子为 1,2. 3. 两个单粒子态 ϕ_A,ϕ_B 简写为 A,B.

① 定域系: 可能态数 $n_D=2^3=8$ 个.

为简便，把三个粒子依编号的自然次序 1,2,3 固定排好，而只写出每个粒子所处状态. 例如，ABB 代表 $\phi_A(1)\phi_B(2)\phi_B(3)$. 在这样符号下，$n_D=8$ 个可能态为

$AAA, AAB, ABA, BAA, ABB, BAB, BBA, BBB$.

② 费米系: 由于 $k<N(2<3)$. 受泡利不相容原理的限制，三个全同费米子不可能存在于两个单粒子态中.

③ 玻色系 $n_B=(3+2-1)!/3!1!=4$ 个可能态.

它们是 A^3, A^2B, AB^2, B^3.

27. 由上题(1)中得到的公式，对给出五组数据算出的 n_D, n_B, n_F 列表如下.

N	k	n_D	n_F	n_B	n_F+n_B
2	2	4	1	3	4
2	3	9	3	6	9
2	4	16	6	10	16
3	2	8	0	4	4
3	3	27	1	10	11

可见，只对 $N=2$, $n_B+n_F=n_D$. $N=3$ 时，$n_B+n_F<n_D$. 进一步计

算表明，凡 $N>2$，总有 $n_B+n_F<n_D$，即全同粒子系的可能态数，当 $N>2$ 时，可区分粒子系（定域系）的可能态总数总是大于反对称态数（费米系）与对称态数（玻色系）之和．这是因为全同粒子可区分时，不受交换对称限制的结果．这就表明：定域系可能态中，除了对称态与反对称态外，还有一些没有确定对称性或只有混杂对称性的态．

28．由本章 24 题知，从粒子数为 N 的全同粒子系任一个波函数可以得到与 $N!$ 个不同置换对应的 $N!$ 个波函数．这些波函数本身，一般说来，不都具有确定的交换对称性．

然而，这些波函数的任一线性叠加仍是该波方程的一个解．这正是构造具有交换对称性波函数的基础．

由本章 25 题中，$N=2$ 时 ψ_S 的构成可看出，所有 $N!$ 个波函数之和即是对称波函数 ψ_S．由此可得出，$N=3$ 时

$$\psi_S=c[\psi(1,2,3)+\psi(2,3,1)+\psi(3,1,2)+\psi(2,1,3)+\psi(1,3,2)+\psi(3,2,1)].$$

其中 c 是归一化常数．

ψ_S 中任何一对粒子交换引起的变化只是相加的诸函数中函数间的互换，而使整个波函数保持不变，因而 ψ_S 是对称波函数．

至于反对称波函数，同样由 $N=2$ 时 $\psi_A=\psi(1,2)-\psi(2,1)$ 可看出是由偶置换得出诸波函数之和，减去由奇置换得到的诸波函数之和构成．

由此可得出，$N=3$ 时

$$\psi_A=c'\{[\psi(1,2,3)+\psi(2,3,1)+\psi(3,1,2)]-[\psi(2,1,3)+\psi(1,3,2)+\psi(3,2,1)]\}.$$

其中 c' 是归一化常数．

ψ_A 中任一对粒子的交换，引起相减的奇偶置换波函数间的互换，结果使整个波函数变号．因而，ψ_A 是反对称波函数．

如三个粒子间无相互作用或只有微弱相互作用而可视为近独立时，体系的定态可以单粒子态乘积来描述.

设单粒子态为 $\varphi_i, \varphi_j, \varphi_k$, $i<j<k$, 则前式中

$\psi(1,2,3)=\varphi_i(1)\varphi_j(2)\varphi_k(3)$, $\psi(3,2,1)=\varphi_i(3)\varphi_j(2)\cdot\varphi_k(1)$, $\cdots$.

三个玻色子的对称波函数 ψ_S

$$\psi_S(1,2,3)=c\sum_\alpha \hat{P}_\alpha[\varphi_i(1)\varphi_j(2)\varphi_k(3)].$$

其中 $\hat{P}_\alpha$ 为置换算符. 取和是对 $N!=6$ 个置换而言.

三个费米子的反对称波函数 ψ_A

$$\psi_A(1,2,3)=c'\sum_\alpha \delta_P\hat{P}_\alpha[\varphi_i(1)\varphi_j(2)\varphi_k(3)]$$

$$=c'\begin{vmatrix}\varphi_i(1) & \varphi_i(2) & \varphi_i(3)\\ \varphi_j(1) & \varphi_j(2) & \varphi_j(3)\\ \varphi_k(1) & \varphi_k(2) & \varphi_k(3)\end{vmatrix}.$$

其中 $\delta_P=\pm1$, 对偶置换项 $\delta_P=+1$, 奇置换项 $\delta_P=-1$.

上式最后把 ψ_A 以斯莱特行列式表出时，由 δ_P 代表各项的正负号，在展开行列式时自动出现.

29. 玻色子与费米子的根本差别在于玻色子不受泡利不相容原理的限制.

设 N 个全同且近独立的玻色子中，n_1 个处于 i 态，n_2 个处于 j 态，$\cdots$. 必有

$$\sum_i n_i=N.$$

其中，任 n_i 可以为零，也可大于 1.

当此 N 个玻色子处于 N 个不同的单粒子态时，体系波函数

$$\psi=c\sum_\alpha \hat{P}_\alpha[\varphi_i(1)\varphi_j(2)\cdots\varphi_z(N)].$$

ψ 的归一化条件为 $\int \psi^* \psi \mathrm{d}\tau = 1$,

即 $c^2 \sum_{\alpha} \sum_{\alpha'} \int \hat{P}_{\alpha'} [\varphi_i(1)\varphi_j(2)\cdots\varphi_z(N)]^* \hat{P}_{\alpha} [\varphi_i(1)\varphi_j(2)\cdots$

$\varphi_z(N)] \mathrm{d}\tau = 1.$

其中 $\mathrm{d}\tau = \mathrm{d}q_1 \mathrm{d}q_2 \cdots \mathrm{d}q_N$

N 个单粒子波函数是正交归一化的,如 $\int \varphi_i^*(1)\varphi_j(1)\mathrm{d}q_1 = \delta_{ij}$.

上式中,对各种置换取和,共有 $N!$ 项,因而

$$c^2 N! = 1, \quad c = \frac{1}{\sqrt{N!}}.$$

这与N个费米子受泡利不相容原理限制,只能处于N个不同单粒子态时,$c = \frac{1}{\sqrt{N!}}$相同.

而当玻色子在单粒子态 i 中分布. n_i 可大于 1 时,体系波函数 ψ 的取和项中,$n_i!$ 种交换不产生新的状态. 此时,取和的项数不再是 $N!$ 项,而应为

$$N! \Big/ \prod_i n_i!.$$

因此,归一化常数应为

$$c = \sqrt{\frac{\prod_i n_i!}{N!}}.$$

可见,只有当所有 n_i 均为 1 时,才有 $c = \frac{1}{\sqrt{N!}}$.

30. 全同粒子间存在相互作用时,体系哈密顿量不再简单地为N项形式相同的单粒子哈密顿量之和.

求解体系的定态波方程时,由于粒子变数不能分离,体系能量不再等于各单粒子态能量之和. 体系波函数不再为单粒子波函数

之积. 严格说来,由于粒子间存在相互作用而不存在单粒子态.如粒子间相互作用微弱,可当作近独立看待时,相互作用可当作微扰,单粒子态也只是一种近似.

有相互作用时,全同粒子波函数是否仍可用各单粒子态描述呢?

有相互作用时,可以取各单粒子态矢的积为基矢,但必须进一步把基矢对称化,建立一组对称化基矢和一组反对称化基矢而构成对称表象.

可证明:由忽略相互作用的单粒子态乘积经叠加而组成的 ψ_S (或 ψ_A)构成N个粒子的对称(或反对称)态的完全系. N粒子系任何对称(或反对称)波函数都可用这组对称化(或反对称化)基矢展开,展开系数就是对称表象中的波函数.

例如,两粒子系. 对玻色系,任一对称波函数

$$\phi_S(1,2)=\sum_{i>j}\sum_j c(i,j)[\varphi_i(1)\varphi_j(2)+\varphi_i(2)\varphi_j(1)]$$

对费米系,任一反对称波函数

$$\begin{aligned}\phi_A(1,2)&=\sum_{i>j}\sum_j c(i,j)[\varphi_i(1)\varphi_j(2)-\varphi_i(2)\varphi_j(1)]\\&=\sum_{i>j}\sum_j c(i,j)\begin{vmatrix}\varphi_i(1) & \varphi_i(2)\\ \varphi_j(1) & \varphi_j(2)\end{vmatrix}.\end{aligned}$$

展开系数就是对称表象中的波函数.

全同粒子间有相互作用时,体系波函数仍有对称与反对称之分.

31. N个全同且近独立的费米子,体系波函数可表为斯莱特行列式

$$\psi_A(1,2,\cdots,N)=\frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix}\varphi_i(1),\varphi_i(2),\cdots,\varphi_i(N)\\ \varphi_j(1),\varphi_j(2),\cdots,\varphi_j(N)\\ \vdots\qquad\vdots\qquad\vdots\\ \varphi_z(1),\varphi_z(2),\cdots,\varphi_z(N)\end{vmatrix}.$$

如有两个或两个以上的粒子处于同一单粒子态，行列式中相当两个或两个以上的下标相同．因而，行列式等于零，即 $\psi_A=0$，这表示不可能有两个或两个以上的费米子处在同一单粒子态——泡利不相容原理．

全同粒子间相互作用不可忽略时，体系波函数，首先以单粒子态的乘积为基矢展开(以 $N=2$ 为例)

$$\psi(1,2)=\sum_i\sum_j c(i,j)\varphi_i(1)\varphi_j(2).$$

式中，$|c(i,j)|^2$ 的物理意义是：体系 ψ 中，发现粒子分布为，第一粒子处 i 态，第二粒子处 j 态的概率．

进一步考虑交换对称的限制．

对费米子系，必须满足 $\psi(1,2)=-\psi(2,1)$．即

$$\sum_i\sum_j c(i,j)\varphi_i(1)\varphi_j(2)=-\sum_i\sum_j c(i,j)\varphi_i(2)\varphi_j(1).$$

上式中，求和是对 i 与 j 的所有值，而它们又是取的同样的数值．所以，对等式左方的表示符号，i 与 j 互换时，一切都保持不变．即

$$\sum_j\sum_i c(j,i)\varphi_j(1)\varphi_i(2)=-\sum_i\sum_j c(i,j)\varphi_i(2)\varphi_j(1).$$

等式只有当同样函数的系数彼此相等时才成立．即

$$c(i,j)=-c(j,i).$$

当 $i=j$ 时，$c(i,i)=-c(i,i)$．因此，$c(i,i)=0$.

按照 $|c(i,i)|^2$ 的概率意义，全同费米子系即使粒子间存在相互作用，两个粒子处于同一单粒子态上的概率也为零．这就是广义的泡利原理——全同费米子间的相互作用不能忽略时的泡利不相容原理．

注意，这里给出的只是两粒子处在同一单粒子态的概率为零，

并不意味着各个粒子有确定的单粒子态. 即使在近独立的全同费米子系中，每个粒子也不是处于固定的单粒子态，而是既可以在 i 态出现，也可在 j 态出现，但两个粒子不可能出现在同一个单粒子态中.

32. 全同费米子体系波函数应具有反对称性.

$N=2$ 时，$\psi(1,2)=-\psi(2,1)$.

由上题知，这要求在展开式 $\psi(1,2)=\sum_{i,j}c(i,j)\varphi_i(1)\varphi_j(2)$ 中，应满足 $c(i,j)=-c(j,i)$.

因此，$c(i,i)=0$. 导致泡里不相容原理.

考虑到泡利不相容原理的限制，在求和式中应除去 $i=j$ 项，而分为 $i>j$ 部分与 $i<j$ 部分. 得

$$\psi(1,2)=\sum_{i>j}\sum_{j}c(i,j)\varphi_i(1)\varphi_j(2)$$

$$+\sum_{i<j}\sum_{j}c(i,j)\varphi_i(1)\varphi_j(2).$$

为了能以斯莱特行列式表出上式. 在第二个取和项中，把表示符号 i 与 j 互换则一切结果不变. 并考虑到 $c(i,j)=-c(j,i)$，可得

$$\psi(1,2)=\sum_{i>j}\sum_{j}c(i,j)[\varphi_i(1)\varphi_j(2)-\varphi_i(2)\varphi_j(1)]$$

$$=\sum_{i>j}\sum_{j}c(i,j)\begin{vmatrix}\varphi_i(1) & \varphi_i(2)\\ \varphi_j(1) & \varphi_j(2)\end{vmatrix}.$$

$i>j$ 的限制使展开式中不再出现 $c(i,i)$ 项，而满足泡利不相容原理. 这是在得到以斯莱特行列式展开的推导过程中，一开始就排除了取和中 $i=j$ 项的结果.

33. 设全同粒子系($N=2$) 的未对称化波函数为 $\psi(1,2)$，以 $\hat{S}_2$ 作用，得

$$\hat{S}_2\psi(1,2)=\frac{1}{2}(1+\hat{P}_{12})\psi(1,2)=\frac{1}{2}[\psi(1,2)+\psi(2,1)]$$

$$=\psi_S(1,2).$$

由 $\hat{S}_2$ 作用到未对称化波函数 $\psi(1,2)$ 上，即可得到对称波函数 ψ_S. 所以，把 $\hat{S}_2$ 称为两粒子系的对称化算符.

类似地. $\hat{A}_2\psi(1,2)=\frac{1}{2}(1-\hat{P}_{12})\psi(1,2)$

$$=\frac{1}{2}[\psi(1,2)-\psi(2,1)]=\psi_A.$$

所以，称 $\hat{A}_2$ 为两粒子系的反对称化算符.

34. 由上题. 如体系的未对称化波函数为 ψ，则

$\psi_S=c\sum_\alpha\hat{P}_\alpha\psi$. 式中，取和是对 $N!$ 个置换对应的 $N!$ 个置换算符而言.

上题中，$N=2$ 的对称化算符 $\hat{S}_2$，实质上就是把 $\frac{1}{N!}\sum_\alpha\hat{P}_\alpha=\frac{1}{2}[1+\hat{P}_{12}]$ 作用于未对称化波函数上得出 ψ_S.

类此，对 $N=3$ 的全同粒子系，对称化算符

$$\hat{S}_3=\frac{1}{3!}\sum_{\alpha=1}^{6}\hat{P}_\alpha.$$

把本章 24 题中 $N=3$ 的 $N!=6$ 个置换算符代入上式，得

$$\hat{S}_3=\frac{1}{6}[1+\hat{P}_{13}+\hat{P}_{23}+\hat{P}_{12}+\hat{P}_{23}\hat{P}_{13}+\hat{P}_{12}\hat{P}_{13}].$$

反对称化算符 $\hat{A}_3=\frac{1}{N!}\sum_\alpha\delta_P\hat{P}_\alpha$. $\delta_P=+1$，偶置换；$\delta_P=-1$，奇置换.

$$\hat{A}_3=\frac{1}{6}[1-\hat{P}_{13}-\hat{P}_{23}-\hat{P}_{12}+\hat{P}_{23}\hat{P}_{13}+\hat{P}_{12}\hat{P}_{13}].$$

如体系未对称化波函数为 ψ，则

$$\hat{S}_3\psi=\psi_S.\quad \hat{A}_3\psi=\psi_A.$$

推广到一般情况，粒子数为 N 的全同粒子系

对称化算符 $\hat{S}_N=\frac{1}{N!}\sum_{\alpha}^{N!}\hat{P}_\alpha.$

反对称化算符 $\hat{A}_N=\frac{1}{N!}\sum_{\alpha}^{N!}\delta_P\hat{P}_\alpha.$

如考虑到任一置换算符可分解为若干个交换算符的乘积．可以得到以下实用的计算公式．①

$$\hat{S}_N=\frac{1}{N}\left[1+\sum_{i=1}^{N-1}\hat{P}_{iN}\right]\hat{S}_{N-1}.\quad \hat{A}_N=\frac{1}{N}\left[1-\sum_{i=1}^{N-1}\hat{P}_{iN}\right]\hat{A}_{N-1}.$$

例如，已知 $\hat{S}_2=\frac{1}{2}[1+\hat{P}_{12}]$，$\hat{A}_2=\frac{1}{2}[1-\hat{P}_{12}]$．由上公式，可算出

$$\hat{S}_3=\frac{1}{3}\left[1+\sum_{i=1}^{2}\hat{P}_{i3}\right]\hat{S}_2=\frac{1}{6}[1+\hat{P}_{13}+\hat{P}_{23}][1+\hat{P}_{12}]$$

$$=\frac{1}{6}[1+\hat{P}_{13}+\hat{P}_{23}+\hat{P}_{12}+\hat{P}_{13}\hat{P}_{12}+\hat{P}_{23}\hat{P}_{12}].$$

$$\hat{A}_3=\frac{1}{3}\left[1-\sum_{i=1}^{2}\hat{P}_{i3}\right]\hat{S}_2=\frac{1}{6}[1-\hat{P}_{13}-\hat{P}_{23}-\hat{P}_{12}+\hat{P}_{13}\hat{P}_{12}$$

$$+\hat{P}_{23}\hat{P}_{12}].$$

由 $\hat{S}_3$ 应用公式又可算出 $\hat{S}_4$，……．

全同粒子系中，怎样由未对称化波函数构造反对称或对称波函数，是个非常重要的基本问题．

与 $\hat{S}_N$ 及 $\hat{A}_N$ 对应，可用杨氏图形象地表出．可参阅：朗道，

① 参阅 A. 梅西亚，《量子力学》(第二卷)中译本，科学出版社，1986，p. 132.

《量子力学》(中译本)上册，人教版，1980，p.281，§63，置换对称性.

35. 玻色系的粒子是不可区分的，服从玻色统计. 体系波函数以对称波函数 ψ_S 描述而构成对称化态矢空间 ε_S.

费米系粒子的特征是不可区分加不相容，服从费米统计. 体系波函数由反对称波函数 ψ_A 描述而构成反对称化态矢空间 ε_A.

定域系的粒子是可区分的，服从玻耳兹曼统计. 体系波函数不受交换对称性限制，以单粒子本征函数的直积为基矢构成态矢空间 ε.

态矢空间 ε 与 ε_S、ε_A 间有什么关系呢?

由于全同性原理的限制，在满足波方程解中，只有满足交换对称性要求的那些态矢才描述真实的物理态. 因而，ε_A 与 ε_S 都是 ε 的子空间. 由于把 ψ 划分出 ψ_A 与 ψ_S 是绝对的. 所以，ε_A 与 ε_S 是正交的子空间.

在本章 38 题将表明：一般情况下，子空间 ε_S 与 ε_A 不是互补的. 即 ε 不是 ε_A 与 ε_S 的直和.

36. N 个全同粒子的体系，态矢空间 ε 中任一 ψ 经对称化算符 $\hat{S}$ 作用即可得出 ψ_S，经反对称化算符 $\hat{A}$ 作用可得出 ψ_A.

并且，算符 $\hat{S}$ 与 $\hat{A}$ 满足作为投影算符的一切条件.

首先，$\hat{S}$ 与 $\hat{A}$ 都是厄米算符(见本章 37 题)；其次，$\hat{S}$ 与 $\hat{A}$ 满足自乘不变，$\hat{S}^2=\hat{S}$，$\hat{A}^2=\hat{A}$. 这是显然的. ψ_S 经 $\hat{S}$ 作用，显然应仍为 ψ_S，即

$$\hat{S}^2\psi=\hat{S}\psi_S=\psi_S=\hat{S}\psi$$

仍属 ε_S 空间，类似有 $\hat{A}^2\psi=\hat{A}\psi$；另外，$\hat{S}$ 与 $\hat{A}$ 还满足正交性，$\hat{S}\hat{A}=\hat{A}\hat{S}=0$.

这是 ψ_A 与 ψ_S 的划分有绝对性的体现. $\hat{A}(\hat{S}\psi)=\hat{A}\psi_S=0$. 表明：已有确定对称性的 ψ_S，不可能由 $\hat{A}$ 作用而变为具有反对称性.

ε_S 与 ε_A 是正交的子空间.

从态矢空间看.算符 $\hat{S}$ 的作用是把 ε 中任一 ψ 投影到 ε_S 上，所以把算符 $\hat{S}$ 称为到 ε_S 上的投影算符. 算符 $\hat{A}$ 的作用是把 ε 中任 ψ 投影到 ε_A 上，所以，把算符 $\hat{A}$ 称为到 ε_A 上的投影算符.

37. 设 $\hat{C}_N=1-(\hat{S}_N+\hat{A}_N)$，

$N=2$ 时，$\hat{C}_2=1-(\hat{S}_2+\hat{A}_2)$.

已知，$\hat{S}_2=\frac{1}{2}(1+\hat{P}_{12})$，$\hat{A}_2=\frac{1}{2}(1-\hat{P}_{12})$. 故 $\hat{S}_2+\hat{A}_2=1$. 因而，$\hat{C}_2=0$.

这表明，$N=2$ 时，子空间 ε_S 与 ε_A 是互补的.

态矢空间 ε 是 ε_S 与 ε_A 的直和.

对于 $N>2$ 的全同粒子系. 例如 $N=3$，由本章 34 题中的 $\hat{S}_3$ 及 $\hat{A}_3$，得 $\hat{S}_3+\hat{A}_3=\frac{1}{3}[1+\hat{P}_{13}\hat{P}_{12}+\hat{P}_{23}\hat{P}_{12}]\neq 1$，故 $\hat{C}_3\neq 0$.

此时，子空间 ε_S 与 ε_A 不再是互补的. 态矢空间 ε 不再是 ε_S 与 ε_A 的直和.

38. 交换算符 $\hat{P}_{ij}$ 是具有实本征值 ± 1 的线性算符，故而是厄米算符，满足 $\hat{P}_{ij}^{+}=\hat{P}_{ij}$. 并且，由于 $\hat{P}_{ij}^{2}=1$，即 $\hat{P}_{ij}=\hat{P}_{ij}^{-1}$，故 $\hat{P}_{ij}^{+}=\hat{P}_{ij}^{-1}$. 可见，$\hat{P}_{ij}$ 不但是厄米的又是幺正的.

已知，任一置换算符 $\hat{P}_\alpha$ 可分解为若干交换算符之积. 由于幺正算符之积仍是幺正的，故置换算符是幺正的，满足 $\hat{P}_\alpha^{+}=\hat{P}_\alpha^{-1}$. 但由于两厄米算符之积除非两者可对易，一般不再是厄米的. 这就使置换算符不一定具有厄米性.

例如，全同粒子数 $N=3$ 时，由本章 22 题知，交换算符 $\hat{P}_{ij}$ 与 $\hat{P}_{il}$ 间当 $j\neq l$ 时不对易，$\hat{P}_{12}\hat{P}_{13}\neq\hat{P}_{13}\hat{P}_{12}$. 与它们对应的置换算符 $\hat{P}_a=\hat{P}_{12}\hat{P}_{13}$ 与 $\hat{P}_c=\hat{P}_{13}\hat{P}_{12}$ 就不是厄米算符.

置换算符中那些只简单地等于某个交换算符，例如 $\hat{P}_\alpha=\hat{P}_{12}$，亦即可分解为某个交换算符与恒等交换算符之积的置换算符则是

厄米的.

总之,置换算符不总是厄米算符.

但对 $N!$ 个可能置换 $\hat{P}_\alpha$ 取和而构成的对称化算符

$$\hat{S}_N=\frac{1}{N!}\sum_\alpha \hat{P}_\alpha$$

则是厄米的. 以 $N=3$ 为例. 已知

$$\hat{S}_3=\frac{1}{6}[1+\hat{P}_{12}+\hat{P}_{23}+\hat{P}_{13}+\hat{P}_{12}\hat{P}_{13}+\hat{P}_{23}\hat{P}_{13}]$$

(见本章 34 题). 其中, 虽然 $\hat{P}_a=\hat{P}_{12}\hat{P}_{13}$ 与 $\hat{P}_b=\hat{P}_{23}\hat{P}_{13}$ 不是厄米算符,但由本章 24 题知

$$\psi(1,2,3)=\hat{P}_{12}\hat{P}_{13}\hat{P}_{23}\hat{P}_{13}\psi(1,2,3)=\hat{P}_a\hat{P}_b\psi(1,2,3).$$

及 $$\psi(1,2,3)=\hat{P}_{23}\hat{P}_{13}\hat{P}_{12}\hat{P}_{13}\psi(1,2,3)=\hat{P}_b\hat{P}_a\psi(1,2,3).$$

可看出: $\hat{P}_a\hat{P}_b=\hat{P}_b\hat{P}_a=1$. 即 $\hat{P}_a^{-1}=\hat{P}_b, \hat{P}_b^{-1}=\hat{P}_a$. $\hat{P}_a$ 与 $\hat{P}_b$ 互为逆. 又由于置换算符 $\hat{P}_\alpha$ 的幺正性: $\hat{P}_\alpha^+=\hat{P}_\alpha^{-1}$. 所以

$$\hat{S}_3^+=\frac{1}{3!}\sum_\alpha \hat{P}_\alpha^+=\frac{1}{3!}\sum_\alpha \hat{P}_\alpha^{-1}=\frac{1}{3!}\sum_\alpha \hat{P}_\alpha=\hat{S}_3,$$

$\hat{S}_3$ 是厄米的.

类似的讨论可知 $\hat{A}_3$ 也是厄米的. $\hat{S}_N$ 与 $\hat{A}_N$ 也是厄米的

第 十 章

1. 一般说来，严格求解能量本征值方程(即定态波方程)是困难的，通常能够精确求解的只是少数特例. 但如体系哈密顿量满足如下条件

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}'=\hat{H}_0+\lambda\hat{W},$$

其中，$\hat{H}'=\lambda\hat{W}$ 表示可以从 $\hat{H}$ 中分离的微弱相互作用，λ 为微参数. 而 $\hat{H}_0$ 是 $\hat{H}$ 中可以精确求解的部分. 即

$$\hat{H}_0\psi^0=E^0\psi^0.$$

其中，ψ^0，E^0 均为已知.

在以上的条件下，我们可以在 $\hat{H}_0$ 的基础上，逐级考虑 $\hat{H}'$ 的影响，以求得足够精确的近似解.

具体说来，可设待求的 E 与 ψ 按微参数 λ 展开，以瑞利-薛定谔展开为例，有

$$E=E^0+\lambda E^1+\lambda^2E^2+\cdots,$$

$$\psi=\psi^0+\lambda\psi^1+\lambda^2\psi^2+\cdots.$$

这里的 $E^1,E^2,\cdots;\psi^1,\psi^2,\cdots$ 分别是 $\hat{H}$ 的本征值与本征态的一级修正，二级修正，….

将这两个展开式代入体系波动方程

$$\hat{H}\psi=E\psi$$

便可得到各级近似方程. 然后根据需要来求得适当的近似解. 由于这种展开中，二级以上的高级修正难于实际计算，一般只求一级，二级修正. 因而，只在低级修正就足够精确时才有用.

2. 微扰 $\hat{H}'\ll\hat{H}_0$ 不能确切地表述由微扰 $\hat{H}'$ 引起的能量修正应很小这个要求.

定态非简并微扰精确到二级近似的能级公式：

$$E_n = E_n^0 + H'_{nn} + \sum_{m \neq n} \frac{|H'_{mn}|^2}{E_n^0 - E_m^0}.$$

式中，$H'_{m,n}$ 是微扰 $\hat{H}'$ 在未受微扰的 m 态及 n 态间的矩阵元，$(E_n^0 - E_m^0)$ 是该两态的能级差.

$\hat{H}'$ 作为微扰，对第 n 态应用微扰法的**必要条件是：对一个给定的 n 态来说，对任何 m 态 $(m \neq n)$ 都应有**

$$|H'_{m,n}| \ll |E_n^0 - E_m^0|.$$

因而，微扰 $\hat{H}' \ll \hat{H}_0$ 的精确含义应是：$\hat{H}'$ 在未受微扰的任两态 $(m \neq n)$ 的矩阵元远小于该两态的能级差.

例如，库仑场中微扰对量子能级的修正. 由于库仑场中，两个相邻能级之差是

$$E_n^0 - E_{n\pm1}^0 = -E_1^0\left[\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n\pm1)^2}\right] = \frac{\pm 2n - 1}{n^2(n\pm1)^2}E_1^0.$$

对低能级，即主量子数 n 很小时，$|E_n^0 - E_{n\pm1}^0| \gg |H'_{n,n\pm1}|$ 的条件很易满足. 但对高能级，即当 n 很大时.

$$E_n^0 - E_{n\pm1}^0 \propto \frac{1}{n^3} \to 0.$$

以致虽然 $\hat{H}' \ll \hat{H}_0$，但定态微扰适用条件不成立.

所以，定态微扰法可以计算低量子能级的修正，而不适用对高量子能级的修正.

3. 质量为 m 的粒子在势场 $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 + \beta x^3$ 中运动，求定态解时，当 $\beta = 0$ 即为具有离散谱 $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$ 的谐振子解. 当存在微扰 $\hat{H}' = \beta x^3$ 时，对很小的 β，

$$\beta\langle m|x^3|n\rangle \ll |E_n^0 - E_m^0| = \hbar\omega(n-m)$$

总是成立的. 但对 $\beta > 0$ 的任何值，总哈密顿算符 $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$ 总有连续谱. 微扰的存在改变了解的特征是由于微扰 $\hat{H}' = \beta x^3$ 根

本改变了原势场$V_0=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$的渐近行为. 如图 64.

由于在原点左方出现势垒. 对大的负 x 值，有 $E>V(x)$，即粒子总能量大于势能的渐近值. 所以，粒子具有连续能谱，粒子可沿 x 轴负方向穿透势垒而远去.

从以上讨论可看出：此例中尽管满足定态微扰的适用条件，但 $\beta>0$ 时，受微扰量并不连续地还原为无微扰量. 严格说来，微扰理论不再适用.

我们为什么仍应用微扰法对本例求解？其意义何在？通常我们总是在取 β 为小值下求低能级的修正. 此时，粒子穿透势垒的概率非常小，可以认为受到微扰作用的粒子仍具有离散的能谱，粒子在相当长时间处于平衡位置附近如图 65. 这种状态称为"准定态"(quasi-stationary state)或亚稳态.

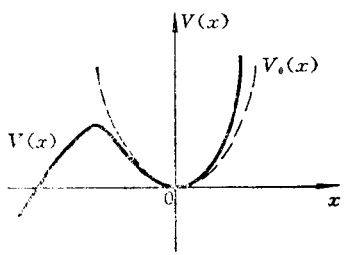


图 64

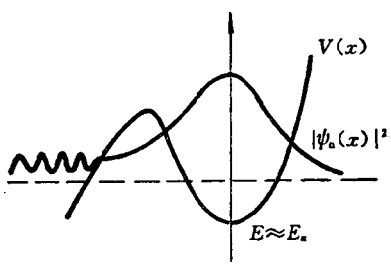


图 65

应用微扰法得出的束缚态解是准定态的良好近似.

4. 设满足$\hat{H}_0\psi_n^0=E_n^0\psi_n^0$的正交归一化零级波函数以$|n\rangle$，$|m\rangle$…表出. 已知$\langle n|\hat{H}'|n\rangle=H'_{nn}=E'_n$. 则

$$\bar{H}=\langle n|\hat{H}|n\rangle=\langle n|\hat{H}_0|n\rangle+\langle n|\hat{H}'|n\rangle=E_n^0+E'_n,$$

正是能量一级近似.

5. 定态微扰论中，总哈密顿算符 $\hat{H}=\hat{H}_0+\lambda\hat{H}'$. 一级近似波

函数

$$\psi_n = N\left[\psi_n^0 + \lambda\sum_{m\neq n}\frac{H'_{mn}}{E_n^0 - E_m^0}\psi_m^0\right]$$

式中引入参量 λ 是为标明各项属于 λ 的级别，求不同级近似时便于取舍. ψ_n 式中出现的 N 是归一化常数，因为式中 ψ_n^0，ψ_m^0 虽是归一化的，但 ψ_n 没归一化.

以下仍沿用上题中的符号，正交归一化的零级波函数 ψ_n^0，ψ_m^0，…，以 $|n\rangle$，$|m\rangle$…表出. 为区别，一级近似波函数以 $|\psi\rangle$ 表出.

首先，求 $|\psi_n\rangle$ 的归一化常数 N. 归一化要求

$$1 = \langle\psi_n|\psi_n\rangle = |N|^2\left\{\langle n| + \lambda\sum_{m\neq n}\frac{H'^{*}_{mn}}{E_n^0 - E_m^0}\langle m| n\rangle + \right.$$

$$\left. + \lambda\sum_{m\neq n}\frac{H'_{mn}}{E_n^0 - E_m^0}|m\rangle\right\}.$$

由于 $\langle m|n\rangle = \begin{cases}1 & m = n\\ 0 & m\neq n,\end{cases}$

$$\langle\psi_n|\psi_n\rangle = |N|^2\cdot\left[1 + \lambda^2\sum_{m\neq n}\left|\frac{H'_{mn}}{E_n^0 - E_m^0}\right|^2\right] = 1.$$

ψ_n 的归一化常数

$$|N|^2 = \frac{}{1 + \lambda^2\sum_{m\neq n}\left|\frac{H'_{mn}}{E_n^0 - E_m^0}\right|^2}.$$

可见，$|N|^2$ 与 1 只相差 λ^2 级小项，将 $|N|^2$ 展开为 λ 的级数，

$$|N|^2 \approx 1 - \lambda^2\sum_{m\neq n}\left|\frac{H'_{mn}}{E_n^0 - E_m^0}\right|^2.$$

总哈密顿量 $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda\hat{H}'$ 对归一化的一级近似波函数取平均，

$$\bar{H} = \langle\psi_n|\hat{H}|\psi_n\rangle = \langle\psi_n|\hat{H}_0 + \hat{H}'|\psi_n\rangle$$
$$= \langle\psi_n|\hat{H}_0|\psi_n\rangle + \lambda\langle\psi_n|\hat{H}'|\psi_n\rangle$$

$$=\langle\psi_n|E_n^0|\psi_n\rangle+\langle\psi_n|\hat{H}_0-E_n^0|\psi_n\rangle+\lambda\langle\psi_n|\hat{H}'|\psi_n\rangle.$$

H 式中包括三项积分:

第一项 $\langle\psi_n|E_n^0|\psi_n\rangle=E_n^0\langle\psi_n|\psi_n\rangle=E_n^0$;

第二项 $\langle\psi_n|\hat{H}_0-E_n^0|\psi_n\rangle$

$$=|N|^2\left\{\left[\langle n|+\lambda\sum_{m\neq n}\frac{H'^{*}_{mn}}{E_n^0-E_m^0}\langle m|\right](\hat{H}_0-E_n^0)\right.$$

$$\left.\cdot\left[|n\rangle+\lambda\sum_{m\neq n}\frac{H'_{mn}}{E_n^0-E_m^0}|m\rangle\right]\right\}$$

$$=|N|^2\left\{\langle n|+\lambda\sum_{m\neq n}\frac{H'^{*}_{mn}}{E_n^0-E_m^0}\right.$$

$$\left.\cdot\langle m|\lambda\sum_{m\neq n}\frac{H'_{mn}(E_m^0-E_n^0)}{E_n^0-E_m^0}|m\rangle\right\},$$

由于$|n\rangle$的正交归一性

$$\langle\psi_n|\hat{H}_0-E_n^0|\psi_n\rangle=-|N|^2\lambda^2\sum_{m\neq n}\frac{|H'_{mn}|^2}{E_n^0-E_m^0}\approx-\lambda^2\sum_{m\neq n}\frac{|H'_{mn}|^2}{E_n^0-E_m^0},$$

式中最后略去了与$|N|^2$相乘时出现的高于 λ^2 级的项;

第三项

$$\lambda\langle\psi_n|\hat{H}'|\psi_n\rangle=\lambda|N|^2\left\{\left[\langle n|+\lambda\sum_{m\neq n}\frac{H'^{*}_{mn}}{E_n^0-E_m^0}\langle m|\right]\hat{H}'\right.$$

$$\left.\cdot\left[|n\rangle+\lambda\sum_{m\neq n}\frac{H'_{mn}}{E_n^0-E_m^0}|m\rangle\right]\right\},$$

略去了 λ^3级以上小项后,

$$\lambda\langle\psi_n|\hat{H}'|\psi_n\rangle=|N|^2\left[\lambda H'_{nn}+\lambda^2 2\sum_{m\neq n}\frac{|H'_{mn}|^2}{E_n^0-E_m^0}\right],$$

由于$|N|^2\approx1-\lambda^2\sum_{m\neq n}\left|\frac{H'_{mn}}{E_n^0-E_m^0}\right|^2$，略去上式中由于$|N|^2$与括号[ ]中各项相乘时出现的 λ^3 以上项(即相当$|N|^2\approx1$)得

$$\lambda\langle\psi_n|\hat{H}'|\psi_n\rangle=\lambda H'_{nn}+\lambda^2 2\sum_{m\neq n}\frac{|H'_{mn}|^2}{E_n^0-E_m^0}.$$

由三项积分之和得

$$\bar{H}=E_n^0+\lambda H'_{nn}+\lambda^2\sum_{m\neq n}\frac{|H'_{mn}|^2}{E_n^0-E_m^0}.$$

这正是能量的二级近似值. 可见，能量的二级近似是总哈密顿算符$\hat{H}$对归一化的一级近似波函数的平均值.

对更高级的近似也可做类似证明，因此一般规律是：能量的$n+1$级近似等于$\hat{H}$对归一化的第n级近似波函数的平均值.

6. 已知，微扰论中，对能量为E_n^0的n态，能量二级修正

$$E_2'=\sum_{m\neq n}\frac{|H'_{mn}|^2}{E_n^0-E_m^0}.$$

如n态为基态，E_n^0最低，在上式的取和中，$m\neq n$的任一项均有$E_n^0-E_m^0<0$，故E_2'永为负.

对这个结果的物理描述，请参阅：

D. S. Saxon,《初等量子力学》，苏沃中等译，高教出版社，1985, p. 211.

7. $\sum_m|H'_{nm}|^2=\sum_m\langle n|\hat{H}'|m\rangle\langle m|\hat{H}'|n\rangle$.

由于未受扰$|m\rangle$满足封闭性关系$\sum_m|m\rangle\langle m|=1$，所以

$$\sum_m|H'_{nm}|^2=\langle n|\hat{H}'\cdot\hat{H}'|n\rangle=\langle n|H'^2|n\rangle=(H'^2)_{nn}.$$

8. 已知，对能级E_n^0的二级修正 $E_2'=\sum_{m\neq n}\frac{|H'_{nm}|^2}{E_n^0-E_m^0}$.

引入E_n^0和它最靠近的能级之间的能量差的绝对值为ΔE，则在E_2'的求和项中对所有的m，均有$|E_n^0-E_m^0|\geqslant\Delta E$.

于是，$|E_2'|$的上界为$|E_2'|\leqslant\frac{1}{\Delta E}\sum_{m\neq n}|H'_{nm}|^2$.

根据上题的结果 $\sum_m |H'_{nm}|^2=(H'^2)_{nn}$，因而

$$\sum_{m\neq n}|H'_{nm}|^2=\sum_m|H'_{nm}|^2-|H_{nn}|^2=(H'^2)_{nn}-|H'_{nn}|^2.$$

故 $|E'_2|$ 的上界为 $|E'_2|\leqslant\frac{1}{\Delta E}[(H'^2)_{nn}-(H'_{nn})^2]$.

即
$$|E'_2|\leqslant\frac{(\Delta H')^2}{\Delta E}.$$

给定态的能量二级修正的大小，要小于该态平均值附近的微扰 $\hat{H}'$ 的方均根偏差平方与该态和最靠近能级的能量间隔之比值.

9. 氢原子波函数 $|n\rangle=|nlm\rangle$. 能量为 $E_n^0=\frac{-1}{n^2}\cdot\frac{e^2}{2a_0}$，$a_0$ 为波尔半径.

基态 $|n\rangle=|1,0,0\rangle$，受微扰 $\hat{H}'=e\varepsilon z=e\varepsilon r\cos\theta$ 作用.

由上题，能量二级修正的上界 $|E'_2|\leqslant\frac{|\Delta H'|^2}{\Delta E}$，

其中，$\Delta E=|E_2^0-E_1^0|=\frac{3e^2}{8a_0}$，$|\Delta H'|^2=(H'^2)_{11}-|H'|^2_{11}$.

已知 $|100\rangle=\frac{1}{\sqrt{8\pi}}\left(\frac{2}{a_0}\right)^{3/2}e^{-r/a_0}$，而 $H'_{11}=\langle100|e\varepsilon r\cos\theta|100\rangle=0$，则

$$\begin{aligned}(H'^2)_{11}&=e^2\varepsilon^2\langle100|r\cos\theta|100\rangle\\&=\frac{e^2\varepsilon^2}{\pi a_0^3}\int_0^\infty r^4e^{-\frac{2r}{a_0}}dr\int_0^\pi\cos^2\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\phi\\&=\frac{4}{3a_0^3}e^2\varepsilon^2\int_0^\infty r^4e^{-\frac{2r}{a_0}}dr,\end{aligned}$$

又
$$\int_0^\infty r^4e^{-\frac{2r}{a_0}}dr=\frac{3}{4}a_0^5,$$

故
$$(H'^2)_{11}=e^2\varepsilon^2a_0^2.$$

最后得，$|E'_2|\leqslant\frac{8}{3}\varepsilon^2a_0^3$.

由微扰法对此例计算出：氢原子基态受 z 方向均匀电场 ε 作用，能量二级修正 $E_2'=-\frac{9}{4}\varepsilon^2 a_0^3$.

从这个例子可看出：虽然由 E_2' 的上界，得出的不是精确的结果，但确实是一个简单而有用的估计.

一般情况下，用定态微扰求出某能级的一级修正后，也可由 E_2' 的上界，评估只取一级修正的精确性.

10. 在能级非常靠近(即所谓近简并)的情况下，除了上题所述不能应用定态微扰法的特例之外. 一般而言，不能应用非简并态的定态微扰法，因为这时虽然能级是非简并的，但由于彼此靠得很近，在受到微扰之后，不一定是均匀平移，而可能是彼此相混，重新组合形成新的能级与新的态，这时对于近简并态应采用类似于简并态的微扰法来处理，即先在近简并态的子空间中将 $\hat{H}'$ 对角化，从而求得微扰后重新组合形成的能级与对应的态函数.

11. 能级简并一般说来总是与体系的某种对称性相联系，如微扰 $\hat{H}'$ 与 $\hat{H}_0$ 具有完全相同的对称性. 微扰只能使原来能级发生移动而不能发生分裂，即不会导致简并的解除. 此时无论求多少级修正，简并仍维持. 如微扰 $\hat{H}'$ 比 $\hat{H}_0$ 的对称性低. 微扰使体系的对称性受到部分甚至全部破坏. 这时原来的能级简并可以部分解除甚至完全解除，从对称性的考虑可指明：简并能级最多能分裂为几条，因而，如一级修正没达到，就可做二次……直到达简并解除的上限，但对能级分裂的大小等细节则提供不出任何信息.

请参阅：A. 梅西亚，《量子力学》第二卷(中译本)，科学出版社，1986年. p. 211.

12. (1)设体系级级 E_k^0 是 f 度简并的，f 个独立的本征函数 $\psi_{k\mu}^0(\mu=1,2,\cdots,f)$ 满足 $\hat{H}_0\psi_{k\mu}^0=E_k^0\psi_{k\mu}^0$，存在微扰 $\hat{H}'$ 时，由 $\psi_{k\mu}^0$ 某种线性叠加形成的 $\phi_{k\alpha}^0=\sum_{\mu=1}^{f}c_{\alpha\mu}\psi_{k\mu}^0(\alpha=1,2,\cdots,f)$，其中系数

$C^{-}_{\alpha\mu}$ 是确定的.

如以 $\phi^0_{k\mu}$ 为基矢的 f 维子空间中，能使微扰 $\hat{H}'$（因而 $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}'$）是对角化的，$\phi^0_{k\mu}$ 即为对 H' 的正确的零级波函数，即微扰 $\hat{H}'$ 为对角的表象的基矢就是正确的零级波函数.

可见，如开始选择的 $\psi^0_{k\mu}$ 已使 $\hat{H}'$ 对角化，$\psi^0_{k\mu}$ 即为"正确的"零级波函数.

(2) 能量一级修正 $E'_{k\mu}$ 是微扰 $\hat{H}'$ 对正确的零级波函数 $\phi^0_{k\alpha}$ 的平均值 $E^{(1)}_{k\alpha}=\langle\phi^0_{k\alpha}|\hat{H}'|\phi^0_{k\alpha}\rangle$.

(3) 类似对非简并态微扰讨论可得：对简并态微扰成立的必要条件为 $|H'_{k\alpha,j\beta}|\ll|E^0_k-E^0_j|$.

13. 正如上题(1)问中所述，对 f 度简并的能级 E^0_k，如开始选择的 f 个独立的 $\psi^0_{k\mu}$，已使 $\hat{H}'$ 对角化，即

$$\langle\psi^0_{k\mu}|\hat{H}'|\psi^0_{k\nu}\rangle=H'_{\mu\mu}\delta_{\mu\nu}.$$

此时，$\psi^0_{k\mu}$ 已是正确的零级波函数. 尽管能级 E^0_k 是简并的仍可直接应用非简并态微扰处理其一级近似问题.

14. 能级简并与波方程的近似解这两个概念的意义是不同的，没有什么直接的关联. 我们知道，能级简并主要是由于体系哈密顿量具有某种对称性. 只要保持这种对称性，那么即使是精确解，其能级也是简并的. 如氢原子. 如果对称性受到彻底破坏或部分破坏，那么一般说来，简并应当消除或部分消除.

应用微扰法求解定态问题时，得到的解一般均是近似解. 非简并态微扰的近似解，能级当然是非简并的. 简并态微扰法中由于微扰的作用. 不管能级简并是否能解除，或解除多少，得到的解一般也是近似解.

15. $\hat{H}$ 在 $\hat{H}_0$ 的表象中不是对角矩阵. 表示二者不对易，微扰 $\hat{H}'$ 与 $\hat{H}_0$，亦不对易，无共同本征态. 这时需要另求 $\hat{H}$ 的本征态.

若 $\hat{H}$ 在 $\hat{H}_0$ 的表象中已对角化，表示二者对易，这时微扰 $\hat{H}'$ 与

$\hat{H}_0$对易. 这时 $\hat{H}_0$的本征态即为$\hat{H}$与 $\hat{H}'$的共同本征态. 使求解大为简化.

16. 从理论上说，只要能写出力学量在某一表象中的矩阵元，便可以应用对角化方法求出该力学量的本征解. 但在实际上，这并不是一个普遍行之有效的方法. 因为对于稍微复杂的实际问题，久期方程已是高阶行列式方程，而高阶行列式方程通常都是无法精确求解的(近代可用电子计算机求解，那实际上亦是近似计算). 因此，尽管存在矩阵对角化方法，一般情况下也只能做到近似对角化.

17. 定态微扰与量子跃迁，是量子力学中两个不同类型的问题，它们的研究目标与手段都不一样. 定态微扰是定态问题，它考虑加入微扰作用之后，如何求出体系总哈密顿量的本征值与本征函数的修正项. 其出发点为定态波动方程.

量子跃迁问题是考虑体系在微扰作用下，波函数随时间变化的问题，是依据含时波方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t)=\hat{H}(t)\psi(t)$$

实际计算量子态间跃迁概率的问题.

一般说来，这两类问题都需应用近似方法求解.

18. 如果微扰作用平缓稳定，则将产生定态扰动效果，如能级与量子态偏移，简并消除等. 如果扰动作用是以准静态方式加于体系的(即变化极其缓慢)$\frac{\partial H'}{\partial t}\approx 0$，将不会产生跃迁效应. 相反，若扰动作用时间不长，则只可能发生跃迁而不会发生定态扰动效应. 对于一般情况，两种效应都可能发生.

这里，扰动时间长短，或变化快慢，是相对体系本身的所谓"特征时间"而言的. 如对于原子，其特征时间为 $\tau=\frac{1}{\omega_{mk}}\approx 10^{-15}$(秒)

因此人为施加的宏观扰动都可视为定态扰动. $\left(\omega_{mk}=\frac{\varepsilon_m-\varepsilon_k}{\hbar}\right.$为体系能级间距所对应的角频率).

19. 这里所说的常微扰是指在一定时间内保持不变，但是以阶跃形式加于体系的微扰，因此都要发生跃迁. 如图 66.

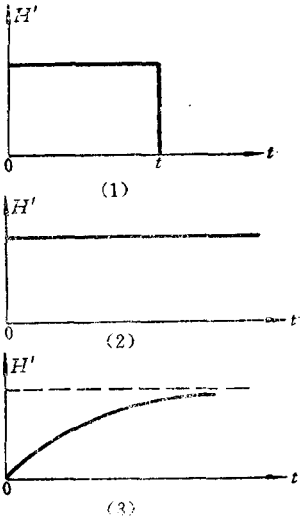


图 66

(1) 微扰于 0—t 时间加于体系可能发生跃迁，不会发生定态扰动效应.

(2) 体系于 0—∞ 时间内受到微扰作用，开始将发生跃迁，当 $t\to\infty$时将发生定态扰动效应.

(3) 纯粹的定态扰动如图66(3)所示，这时不可能发生跃迁.

20. 量子跃迁中，始末量子态能量可以不等，也可以相等. 对于后者，便称为等能跃迁. 如粒子的弹性散射，便属于等能跃迁. 粒子在散射前后处于不同的自由态，动量方向发生变化而能量保持不变.

21. 周期性微扰产生量子跃迁，类似于经典物理中的受迫振动. 当周期性微扰频率 ω 等于跃迁频率 ω_{mk} 时，跃迁概率最大，这种情况，也相当于共振. 另外，当 $t\to\infty$ 时跃迁峰趋于 δ 函数，这时只能产生频率 ω_{mk} 的跃迁. 这也如同在受迫振动中，当 $t\to\infty$时体系振动频率只能等于外界策动频率一样.

22. 常微扰中，从 k 态跃迁到一系列可能末态(连续能级，能态密度 $\rho(E_{k'})$) 跃迁速率 $w=\frac{2\pi}{\hbar}\rho(E_{k'})|H'_{kk'}|^2$ 称为黄金规则，这是因为它不但适用弹性散射，也适用于非弹性散射，也可应用于

粒子数可变的情况，在量子场论中，对散射及衰变问题都可应用. 黄金规则只对弱微扰适用.

23. 在通常量子力学(非相对论量子力学)中，处理光的吸收与辐射问题采用的是半经典方法. 这种方法将入射光用经典的电磁波来描述，光与原子（主要与原子中的电子）的相互作用也用经典电动力学的方法来表示. 例如将量子电磁体系展开为电偶极矩、电四极矩、磁偶极矩等多极结构. 以电磁波与不同近似的多极结构的相互作用为周期性微扰，以便以后使用量子跃迁方法求出相应的跃迁概率与跃迁速率. 由于这种方法综合运用了经典电动力学理论与量子跃迁理论，故称之为半经典方法. 这类方法在非相对论量子力学中经常应用.

24. 辐射(吸收)的频率取决于跃迁频率 ω_{mk}，即始末态能量差，如入射光是单色光，便等于入射光频率.

谱线强度取决于跃迁速率.

25. 按照经典电动力学、原子体系(电磁体系)可分解为电偶极子、电四极子、磁偶极子等等. 在受激跃迁问题中，如只考虑入射波与电偶极矩的作用，为一级近似，它适用于 $\lambda \gg a$ 的情况 (λ 为入射光波长，a为原子线度)，相应的跃迁称之为电偶极跃迁. 偶极跃矩阵元 $(k'|\boldsymbol{D}|k)$，$\boldsymbol{D}$ 为体系电偶极矩.

电偶极跃迁的选择定则为

$$\Delta l = \pm 1; \Delta m = \pm 1.$$

附带说明：二级近似为四级跃迁，相应选择定则为

$$\Delta l = 0, \pm 2; \Delta m = \pm 1.$$

26. 一般地说，禁戒跃迁就是被某一特定形式的跃迁选择定则所禁戒的其它形式的跃迁，例如，对于偶极跃迁来说，禁戒跃迁可指四级跃迁；对四级跃迁而言，禁戒跃迁可指八级跃迁等等，它因具体跃迁不同而所指不同.

有的书上，禁戒跃迁特指违背偶极跃迁选择定则的所有其他高级跃迁，这仅仅是个定义问题.

27. 这是量子电动力学范畴的问题，按照这种理论，通常所谓没有外场，是指外电磁场平均强度等于零. 但它们的平方平均值并不为零，这个场称为“零场”. 所以通常所谓没有外场的情形，原子仍然处于零场之中，正是由于零场的作用，使原子产生自发辐射. 从这个观点看来，受迫辐射与自发辐射之不同，只在于前者是高于零振动的外来电磁场振动引起，后者是由外电磁场的零振动所激发.

第十一章

1. 正电子 e^+ 入射于基态氢原子时，可能发生的碰撞类型为：

(1) 弹性散射：碰撞前后两粒子只有动能和动量交换，而粒子内部状态不变. 当正电子 e^+ 入射于基态氢原子时

$$e^+ + H \longrightarrow e^+ + H.$$

(2) 非弹性散射：碰撞过程中粒子内部状态有所改变

$e^+ + H \longrightarrow e^+ + H'$. (其中 H' 表示氢原子处于激发态.)

(3) 反应：复合体 $(e^+ + H)$ 分解为与 e^+ 及 H 不同的两个粒子或分解为两个以上的粒子，如

$$e^+ + H \longrightarrow p + 2\gamma.$$

碰撞过程中正负电子湮没为两个光子.

又如 $$e^+ + H \longrightarrow e^+ + p + e^-.$$

碰撞使H电离为质子p与电子 e^-. 在非相对论理论中，只能讨讨散射，一般教科书中往往把"碰撞"与"散射"混用而不加区分.

当入射正电子的能量 $E < 10.2$eV时，不可能使氢原子处于 $n=2$ 的激发态，只能出现弹性散射.

当 $10.2\text{eV} < E < 13.6$ eV 时，才可能出现非弹性散射.

2. 微观粒子(单一的及复合的) 间的碰撞实验是量子物理中最重要的实验技术，是研究物质结构、深刻认识微观过程的重要手段. 历史上，由于 α 粒子散射实验，建立了原子的有核模型. 电子与原子的碰撞实验(夫兰克-赫芝实验) 证实了原子中定态能级的存在. 原子核及基本粒子的许多重要性质都是经过各种碰撞实验得出的，并且碰撞实验也是产生基本粒子的主要方法. 量子碰撞也是与天体物理，激光……密切相关的基本过程.

量子碰撞理论是量子物理中一个非常重要的分支.

3. 以弹性散射为例，入射强度（单位时间穿过垂直于入射方向且相对靶为静止的单位截面的入射粒子数）为 N_0 的粒子流，经靶作用而散射（改变运动方向），如靶中有 n 个靶粒子（散射体），单位时间被散射的粒子总数为 N，在一定实验条件下 N 直接与 n 及 N_0 成正比

$$N=\sigma_t n N_0.$$

式中，比例系数 σ_t 具有面积量纲，$\sigma_t=\dfrac{N}{nN_0}$ 称为粒子被一个靶粒子散射的总截面，$\Sigma_t=n\sigma_t$ 称为粒子被靶散射的总截面，$\Sigma_t=\dfrac{N}{N_0}$. 其效果相当于入射方向上一横截面 Σ_t，凡穿过这个面积的粒子 $N=\Sigma_t N_0$ 都将发生散射.

为了描述散射角分布，可定义微分截面如下：

把靶中每个靶粒子（散射体）当作一点，并以之为原点建立坐标系. 取入射方向为 z 轴方向，如果被散射到 (θ,φ) 方向，立体角 $\mathrm{d}\Omega=\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi$ 中的粒子数为 $\mathrm{d}N$.

$$dN=nN_0\sigma(\theta,\varphi)\mathrm{d}\Omega.$$

系数 $\sigma(\theta,\varphi)$ 一般与 θ 及 φ 有关，也具有面积量纲.

$$\sigma(\theta,\varphi)=\frac{\mathrm{d}N}{N_0 n\mathrm{d}\Omega}$$

称为粒子被散射中心散射到 (θ,φ) 方向的散射截面，常简称为微分散射截面. 也有的书将 $\sigma(\theta,\varphi)\mathrm{d}\Omega$ 定义为微分截面.

与总截面中情况类似，$\Sigma(\theta,\psi)=n\sigma(\theta,\varphi)$ 也具有面积量纲，是粒子被靶散射到 (θ,φ) 方向的散射截面.

有些论著中定义截面时，是对所有靶粒子而言，因而，公式中不出现 n.

由于 $N=\int\mathrm{d}N$，所以，总截面 σ_t 与微分截面 $\sigma(\theta,\varphi)$ 的关系为

$$\sigma_t=\int\sigma(\theta,\varphi)\mathrm{d}\Omega.$$

以上对弹性散射的讨论很容易推广到一般情况，对给定碰撞过程，总截面的一般定义为：

在一给定的碰撞过程中，发生某事件的总截面 σ_t 等于单位时间，单个散射体（靶核）上，出现这种事件的数目除以对准靶核的入射粒子束的入射强度.

一般的微分截面定义，可类似得出. 但非弹性散射微分截面必与能量损失 ε 有关，一般情况下，截面还可能是描述碰撞的其他参量（如粒子自旋）的函数.

截面特别是微分截面更细致地表达了散射结果，并可从实测得出. 碰撞理论首要任务就是在理论上，从入射粒子与靶粒子的结构及相互作用出发，计算出碰撞截面，预言实验结果，因而，截面是描述碰撞的特征量.

4. 首先，入射粒子流的入射强度不能太强，以保证入射粒子间的相互作用可略去，使入射粒子能互相独立地进行碰撞. 但入射强度又不能太弱，要使实验中能有足够多的同一事件重复出现而被观测. 并且，入射强度要稳定.

其次，一般情况下，靶是由众多个散射体（靶粒子）构成的宏观靶. 这些散射体之间的距离，对于入射粒子的波长来说应足够大，以致可略去各散射体的散射波之间的相干，而使各个散射体独自起作用. 另外，靶必须足够薄以致可略去入射粒子被多个散射体作用的多次散射.

在这些条件下，实验观测到的才是单个入射粒子与单个散射体（靶粒子）碰撞结果的重复再现，N 才直接正比于 n 及 N_0. 由此才定义出总截面.

必须指出：不是任何散射实验都自动满足上述条件的. 例如，著名的戴维逊-革末实验（以及其他晶体衍射如热中子衍射，X 射线衍射），入射波长和靶中各散射体的间距大小相近. 因而，入射

粒子是由几个散射体相干地散射.

5. 例如,入射粒子 A(电子)与靶粒子 B(原子)间的非弹性散射. 入射电子与原子碰撞时,电子把自己能量的一部分 ε 交给原子而产生非弹性散射 (如果原子 B原来处在激发态还可能出现它把能量传递给电子 A,使电子 A 的初动能增大了 ε,这种碰撞称为"第二类"碰撞).

如果,能量损失 ε 取离散值,定义微分散射截面时,如以能量损失 ε 被散射到(θ,φ)方向 $\mathrm{d}\Omega$ 立体角中的粒子数为 $\mathrm{d}N_\varepsilon$,则

$$\mathrm{d}N_\varepsilon = nN_0\sigma(\varepsilon,\theta,\varphi,)\mathrm{d}\Omega.$$

其中,微分截面 $\sigma(\varepsilon,\theta,\varphi)$是与$\theta$、$\varphi$、$\varepsilon$ 有关的比例系数. 总截面

$$\sigma_{t,\varepsilon} = \int\sigma(\varepsilon,\theta,\varphi)\mathrm{d}\Omega.$$

如能量损失为连续值,对在 $\varepsilon-\varepsilon+\mathrm{d}\varepsilon$ 之间的能量损失,微分截面定义应为

$$\mathrm{d}N_\varepsilon = nN_0\sigma(\varepsilon,\theta,\varphi)\mathrm{d}\varepsilon\mathrm{d}\Omega.$$

其中,$\sigma(\varepsilon,\theta,\varphi)$是从 ε 到 $\varepsilon+\mathrm{d}\varepsilon$ 之间的能量损失非弹性散射到 $\mathrm{d}\Omega$ 中的微分截面.

6. 在本章 4 题已指出,散射问题通常是由理论上计算截面,预言实验结果,这需要已知体系的哈密顿量或粒子间相互作用……. 与之相反,"逆问题"是指直接从散射实验获得的各种信息来确定粒子间相互作用,例如从相移分析找中心势……. 逆问题是散射问题一个很重要的方面,已有专著论述参见 Chadan K. *and* P. C. Sabaner, *Inverse Problems in Quantun Scattering Theory*(1977).

7. 两体散射问题中,L系是相对于实验室为静止的坐标系,通常取靶粒子在碰前为静止. c.M系是相对于入射粒子 A 与靶粒子

B 组成的体系的质心永为静止的坐标系.

必须注意，L 系中靶粒子只是碰前为静止. 入射粒子与靶碰撞后，粒子被散射，靶也受到反冲. 只有与入射粒子相比，靶粒子当作有无穷大质量来处理时，反冲才可略去. 而质心系中，质心则永远是静止的. L系与 c、M 系都是惯性系.

散射现象一般是在 L 系观测.

微分截面$\sigma(\theta,\varphi)$中，θ及 φ 是与坐标系选择有关的量. 因而，微分散射截面必须在确定的坐标系中才有意义. 为了实际观测的需要，$\sigma(\theta,\varphi)$应以θ_L及 φ_L 表出 (下标表示是 L 系中的量). 但质心系便于理论计算，所以，往往在理论计算上先求出质心系中的散射截面，再转换到 L 系得出 L 系中的散射截面，以便和实验比较.

同一散射过程，L 系与 c、M系中的 θ 及φ不同，因而，微分截面是不同的. 显然，总截面与坐标系选择无关.

8. 非相对论两体散射问题中，靶粒子的作用等效于只与两粒子相对位置有关的势时，两体散射被约化为具有折合质量的单粒子在力心为固定的势场$V(\boldsymbol{r})$中对力心$(r=0)$的散射，这种散射叫势散射. 具有球对称的中心势的弹性散射是最简单也是最常见的势散射.

9. 这是在许多论著中，经常出现的提法，是不正确的.

如图 67，设在实验室系中，入射粒子(质量为 m)的矢径为 $\boldsymbol{r}_1$，

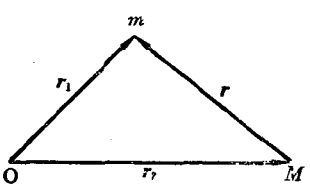


图 67

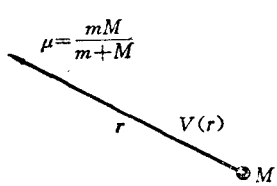


图 68

靶粒子(质量M)的矢径为 r_2.

两粒子相互作用势能 $V(r_1-r_2)=V(r)$，只与两粒子相对位置有关.

由 $r_1-r_2=r$，引入

$$x=x_1-x_2,$$

$$y=y_1-y_2,$$

$$z=z_1-z_2.$$

则，$r(x,y,z)$是以M为原点，三个轴方向分别与原来坐标轴平行的坐标系中(如图 68)，入射粒子的坐标称为相对坐标，这个坐标系我们称为相对坐标系(简称R 系)，显然，由于质点M在作加速运动，R 系是非惯性系.

两粒子系的能量本征方程以两粒子的坐标 r_1 及 r_2 表出时为

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla_1^2-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_2^2+V(|r_1-r_2|)\right]\Psi(r_1,r_2)$$

$$=E_t\Psi(r_1,r_2).$$

式中，E_t为系统总能量.

再引入质心坐标 $R(x,y,z)=\dfrac{mr_1+Mr_2}{m+M}$.

把方程中的变数由两粒子的坐标变换为两粒子的相对坐标 $r(x,y,z)$和质心坐标$R(X,Y,Z)$.

令
$$\nabla'^2=\frac{\partial^2}{\partial X^2}+\frac{\partial^2}{\partial Y^2}+\frac{\partial^2}{\partial Z^2},$$

$$\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

由
$$(m+M)X=mx_1+Mx_2$$

及
$$x=x_1-x_2$$

$\dfrac{\partial}{\partial x_1}=\dfrac{\partial X}{\partial x_1}\dfrac{\partial}{\partial X}+\dfrac{\partial x}{\partial x_1}\dfrac{\partial}{\partial x}=\dfrac{m}{m+M}\dfrac{\partial}{\partial X}+\dfrac{\partial}{\partial x}$，……. 类似可求出

$\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}, \frac{\partial^2}{\partial z_1^2}, \frac{\partial^2}{\partial y_1^2}, \cdots\cdots$

可得 $$\frac{1}{m}\nabla_1^2+\frac{1}{M}\nabla^2=\frac{1}{m+M}\nabla'^2+\frac{1}{\mu}\nabla^2.$$

式中 $$\mu=\frac{mM}{m+M}.$$ （折合质量）

方程化为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2(m+M)}\nabla'^2-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(r)\right]\Psi(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r})=E_t\Psi(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r}).$$

此方程可分离变量，令$\Psi=\phi(\boldsymbol{R})\psi(\boldsymbol{r})$，则可得出两个独立的方程：

其一为

$$-\frac{\hbar^2}{2(m+M)}\nabla'^2\phi(\boldsymbol{R})=E_c\phi(\boldsymbol{R}).$$

描述质心的运动，E_c是质心运动的能量.

另一个为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi(\boldsymbol{r})+V(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})=E\psi(\boldsymbol{r}).$$

式中，$E=E_t-E_c$为相对运动的能量.

这个方程的形式正是在以靶粒子M为原点的坐标系（R系）中，质量为$\mu=\frac{mM}{m+M}$（折合质量）的单粒子在中心势场$V(r)$中运动的波动方程. 由此可见，尽管R系是非惯性系，但只要把入射粒子的质量改为折合质量μ，入射粒子相对靶粒子的运动完全和惯性系中质量为μ的粒子在中心势场$V(r)$的运动相当. 这样就把两体问题中m相对于M的运动约化成质量为μ的单粒子在静止的势场中的运动.

以上分析清楚地表明：两体散射问题的这种约化，描述的是单粒子在非惯性系（R系）中的运动，它不是在质心系中的约化.

这个问题上经常产生混淆的原因可能是：在实际计算中，散射角及微分散射截面在相对坐标系（R系）与质心系（c、M系）中都是

相同的.

10. 散射体系的哈密顿量是不显含时间的，所以体系可能处于定态，可用定态方法求解. 氢原子及线性谐振子的定态是与分立谱对应的束缚态，求解是在满足无穷远条件 $\psi \xrightarrow[r\to\infty]{} 0$ 下，求能量的本征值与本征函数.

势散射问题中，散射态与连续谱对应，并且散射问题通常是在已知入射能量下求散射截面.

中心势场中的弹性散射中，定态散射波函数是定态波方程满足下列边界条件(无穷远条件)的解，

$$\psi \xrightarrow[r\to\infty]{} \psi_1+\psi_2=Ae^{ikz}+f(\theta,\psi)\frac{e^{ikr}}{r}.$$

其中，ψ_1是描述入射粒子的平面波 (沿 z 轴传播)，ψ_2 是散射粒子的振幅为 $f(\theta,\psi)$ 的球面散射波. 由于可证明微分截面由散射振幅表出为 $\sigma(\theta,\varphi)=|f(\theta\cdot\psi)|^2$，于是，散射问题归结为求散射振幅 $f(\theta,\varphi)$.

$f(\theta,\psi)$显然与势 $V(r)$ 具体形式有关，需通过解定态波方程而得出.

11. 严格的散射理论应该是反映散射进程的理论，因而必然是含时的. 定态方法中，以平面波描述入射粒子，根本无法反映从入射到散射的时间进程，但由于定态方法能很好地反映出散射结果给出相应的截面，因而可以作为计算截面而引用的一种方法.

以波包描述入射粒子时，从 $t=-\infty$ 入射波包自远处射向散射中心，进入散射势的作用范围后出现散射波包，随着 $t\to+\infty$而远离中心而去.

设入射粒子是在入射方向上以 $v_0=\frac{p_0}{m}$运动的自由粒子，对应的将是以 $\lambda=\frac{\hbar}{p}$为中心，由λ 附近的单色波叠加而成，以群速度

$v_0=\frac{p_0}{m}$运动的波包. 每个波包在空间都有一定的横向与纵向线度. 根据不确定关系，波包中各个 p 愈集中于 p_0 则 l 愈大，入射粒子束将由以速度 v_0 彼此平行地运动的一束入射波包表示. 这些波包除了将在不同时刻到达靶区发生散射外，彼此的差别只是横向位移 b 的不同(如图 69)，因为 b 与经典散射中瞄准距离（碰撞参

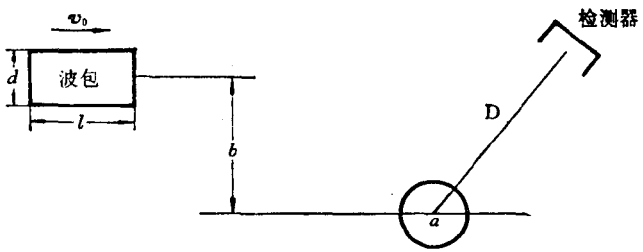


图 69

数)对应，这里我们也把位移 b 称为瞄准距离. 如果波包的横向线度 $d<2(b-a)$，入射波包永不进入散射势的作用范围 a 内，将仍以自由波包传播.

同样是由波长集中于 $\lambda=\frac{\hbar}{p_0}$附近的单色波组成，以群速$v_0=\frac{p_0}{m}$运动的波包，还可能有不同的形状. 但只要 $l\gg a, d\gg a$，即波包的线度比散射区的线度大得多，碰撞现象就不太受波包形状的影响. 截面中不出现描述波包形状的参数. 因而，我们可以假设入射波包束中，每个波包具有相同的形状，只是瞄准距离 b 不同.①

正是由于当波包的线度比散射势作用范围大得多时，波包的准确大小对散射截面影响不大. 为简便，我们常用无限宽的平面波计算截面，尽管物理上不够严格，但仍是合理的，所得结果与实

① 参阅：A. 梅西亚，《量子力学》第一卷(中译本)，科学出版社，1986年，p. 38a.

测相比也是令人满意的.

12. 纯库仑势是 $V(r)\propto\frac{1}{r}$ 的中心势，是作用半径为无穷大的长程势. 它与当 $r\to\infty$ 时，$V(r)$ 比 $\frac{1}{r}$ 更快地趋于零的短程势不同. 即使是以非常大的碰撞参数(瞄准距离)入射的粒子都受到散射，作为长程力的库仑力使任意远处的波发生畸变. 在库仑场中一般不存在具有平面波或寻常的球面波形式的解. 因而，凡对短程势的散射所作的结论不再适用. 例如，纯库仑势不满足玻恩近似，分波法中对相移也要改变定义……

库仑势散射可用抛物线坐标严格求解①.

纯库仑势是理想化的. 实际上，如原子核的库仑势是受核外电子屏蔽的库仑势，它满足玻恩近似.

13. 这是因为:

(1) 在势场范围内求出被散射粒子的状态是极其复杂的. 而在势场之外，由于可推知渐近解的形式，比较容易处理. 这样，不必求出势场范围内的解即可求出散射截面.

(2) 我们观察散射现象，收集被散射的粒子，由于实验手段是宏观的，一般必在距离散射中心从微观上是无穷远的地方，即在势场作用范围之外. 因此计算势场范围以内的解也是不必要的. 散射截面正是在势场作用范围外定义的.

14. 数学上，对入射粒子正前方向($\theta=0$)，微分散射截面是有意义的. 但由于正前方向上，有入射波与散射波间的干涉，这样，就不能区分究竟是散射粒子还是入射粒子. 所以，在入射粒子正前方向上，微分散射截面是一个没有直接观测意义的量.

事实上，在多数情况下，在 $\theta=0$ 附近，散射振幅是连续的，所以，正前方向的散射振幅是一个完全确定的量.

---

① 可参阅: 席夫，《量子力学》人教版，1982 p. 158，第五章§21库仑场的散射.

正前方向的微分散射截面可用外推法测量，即从 $\theta \neq 0$ 但在 $\theta = 0$ 附近(即非正前方向)测得微分散射截面，再外推求出 $\theta = 0$ 方向的微分散射截面.

15. 一维势垒问题中，只有两个方向，所以，不存在散射截面的概念，与之相当的概念为反射系数.

16. (1)中心力场中势能 $V(r)$ 只与粒子到散射中心的距离 r 有关. $V(r)$ 具有球对称性. 此外，取球坐标时如以入射方向并通过散射中心的轴线为极轴. 散射问题对这个 z 轴有旋转对称性，波函数 $\psi(r,\theta)$ 及散射振幅 $f(\theta)$ 都与角度 φ 无关.

(2) 由于 $V(r)$ 具有球对称性，可取能量 E、角动量 $\hat{L}^2$ 及 $\hat{L}_z$ 作为力学量完全集，定出作为完全系的一组定态波函数 $\phi_{lm}(r,\theta,\varphi) = R_l(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 的叠加，其中，$R_l(r)$ 为径向波函数，$Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 为球谐函数，每项 ψ_{lm} 是个球面波，称为一个分波. 由于 $\psi(r,\theta)$ 与 φ 无关，相当 $m=0$，而 Y_{l0} 可以勒让德多项式 $P_l(\cos\theta)$ 表出，通常把 $\phi_l(r,\theta) = R_l(r)P_l(\cos\theta)$ 中，与 $l=0$ 对应的称为 s 分波，与 $l=1$ 对应的称为 p 分波…….

(3) 初态 e^{ikz} 是粒子能量，动量及角动量 z 分量的共同本征态，对应的本征值分别为 $\frac{\hbar^2k^2}{2m}$、$\hbar k$ 和零.

(4) 初态 e^{ikz} 不是守恒量 $\hat{L}^2$ 的本征态，入射粒子的 $\hat{L}^2$ 不取确定值. 以平面波描述的入射粒子对散射中心有不同的角动量。因而，平面波 e^{ikz} 可展为与 $l=0$、1、2、…对应的 $\hat{L}^2$ 的不同本征态(不同分波)的叠加. 散射过程中虽 $\hat{L}^2$ 仍不取定值，但由于角动量是守恒量，$\hat{L}^2$ 测值的概率分布不变. 因而，各分波是独立的，不同分波的散射可分别处理. 中心势场对各分波的散射作用，使波函数中角度部分不变仍为 $P_l(\cos\theta)$，即仍属本征值 $l(l+1)\hbar^2$ 的 $\hat{L}^2$ 的本征函数. 散射的结果仅仅归结为每个分波的径向波函数中产

生一个相移 δ_l，散射振幅及截面都可通过各分波的相移 δ_l 表出。总截面为各分波的截面之和 $Q=\sum_l Q_l$. 计算截面归结为计算各分波的相移.

(5) 因为在求径向波函数的渐近形式时，用到了当 $r\to\infty$ 时，$V(r)$ 比 $\frac{1}{r}$ 更快地趋于零的条件，而库仑场 $V(r)\propto\frac{1}{r}$ 不满足这个要求.

17. 散射使 l 分波径向波函数产生的相移 δ_l，是散射势 $V(r)$ 作用的结果. 如 $V(r)=0$，则 $\delta_l=0$.

$V(r)>0$，粒子受到斥力将被向外，分波径向波函数将往外推. 这相当 $\delta_l<0$.

$V(r)<0$，粒子受到引力，分波径向波函数被拉向内，相当 $\delta_l>0$.

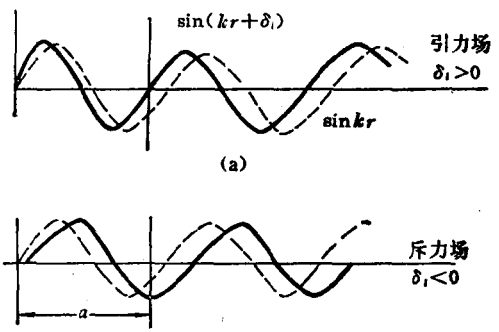


图 70

18. 已知在中心势散射问题中，求解波动方程的边界条件为（假定入射波为平面波）

$$\psi \xrightarrow[r\to\infty]{} e^{ikz}+f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}.$$

这是从物理上考虑得出 ψ 应满足的边界条件.

而

$$R_l(r) \xrightarrow[r\to\infty]{} \frac{Al}{kr}\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right)$$

仅仅是为了满足边界条件而得出 $R_l(r)$ 的渐近解的形式，这里 δ_l 仍是个数值未知的参数. 具体求出 δ_l 必须在满足上述 $R_l(r)$ 的渐近解的形式下，解径向方程

$$\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}R_l\right)+\left[k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}-V(r)\right]R_l=0.$$

方程中包含 $V(r)$，因此，相移 δ_l 必与 $V(r)$ 有关.

19. 中心力场中弹性散射振幅为

$$f(0)=\frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}\cdot\sin\delta_l\cdot\mathrm{P}_l(\cos\theta).$$

s 分波对应 $l=0$. 由于 $\mathrm{P}_0(\cos\theta)=1$，s 分波的散射振幅 $f(\theta)=\frac{1}{k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_0}\sin\delta_0$ 与 θ 无关. 因而，角分布 $|f|^2$ 是球对称的或者说是各向同性的.

20. 角分布 $q(\theta)=|f(\theta)|^2$

$$=\frac{1}{k^2}\left|\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}\cdot\sin\delta_l\cdot\mathrm{P}_l(\cos\theta)\right|^2.$$

若只考虑 s 分波与 p 分波散射，则有

$$q(\theta)=\frac{1}{k^2}|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_0}\cdot\sin\delta_0+3\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_1}\sin\delta_1\cos\theta|^2$$

$$=\frac{1}{k^2}[A_0+A_1\cos\theta+A_2\cos^2\theta].$$

其中，$A_0=\sin^2\delta_0$，$A_1=\sin\delta_0\sin\delta_1\cos(\delta_0-\delta_1)$，

$A_2=9\sin^2\delta_1$.

角分布为 $\cos\theta$ 的二次式分布，当 $\theta=0$ 时，概率最大.

21. 可应用半经典方法，估算应当计算多少分波的相移. 设势场作用范围(力程)为 a，而入射粒子瞄准距离为 b，如图 71. 显

然，应有 $b\leqslant a$，粒子角动量约为 $L\sim l\hbar\sim pb\leqslant pa$.

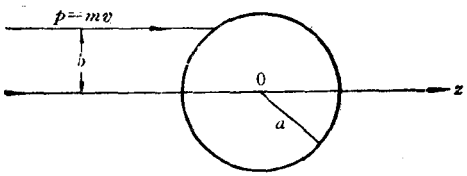


图 71

$$l_{\max}\leqslant\frac{p}{\hbar}a=\frac{a}{\lambda}.$$

λ 为入射粒子的德布罗意波长. 由 $p=\hbar k$, $l_{\max}\leqslant ka$. 可见，相移 δ_l 只要从 $l=0$ 算到 $l\sim ka$ 就行了.

这个估算与严格讨论得出的结论是一致的.

22. 散射过程就其后果而言是入射粒子在势场作用下由一个自由态跃迁到另一个自由态的过程. 如入射粒子能量较高，散射势的作用可以看作是微扰时，就可以把散射问题看作含时微扰跃迁问题. 我们可以把入射波作零级近似，按一级近似计算跃迁概率或直接求出一级近似波函数，从而求出散射截面. 这就是玻恩近似法的基本思想.

23. 理论上，分波法是解决散射问题的普遍方法，但在实际应用时，仍是一种近似处理方法，因为我们无法把所有的分波都计算出来. 只有当问题满足一定条件，使得只要计算少数低次分波的相移便可达到足够精度的情况下，分波法才有实用价值.

分波法中求截面归结为求各分波的相移 δ_l，δ_l 是 l 分波实际径向函数 $R_l(r)$ 的渐近形式与入射波中 l 分波的径向函数 $j_l(kr)$ 之间的相位差.

通常以相移 δ_l 表出的散射振幅 $f(\theta)$ 是在势 $V(r)$ 比 $\frac{1}{r}$ 衰减快

的条件下导出的，因而排除了对库仑势 $V(r)\propto\frac{1}{r}$ 的应用. 对于库仑势需改变相移定义专题讨论.

对衰减比 $\frac{1}{r}$ 快的短程势 $V(r)$，可以认为存在作用半径 a，即势场的作用范围是以散射中心为原点 a 为半径的球内. 当 $r\geqslant a$ 时，$V(r)$ 的作用即可略去. 根据球面贝塞尔函数的性质 $j_l(kr)$ 的第一个也是最大的极大值约在 $r=\frac{l}{k}$ 附近，而 r 远小于此值时

$$j_l(\rho)\xrightarrow[\rho\to 0]{}\frac{\rho^l}{(2l+1)!}.$$

l 愈大，$j_l(kr)$ 趋于零也愈快.

如果 $a\ll\frac{l}{k}$，则在势场作用范围内 $(r\leqslant a)$，j_l 值很小，因而 l 次以上的分波产生的相移均可略去，只计算 $l=0$ 到 $l\approx ka$ 的分波就可以了. ka 愈小，要考虑的分波就愈少. 特别是 $ka\ll 1$ 时，只须计算 $l=0$ 的 s 分波相移 δ_0 即可.

总之，对入射粒子能量 $E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$ 很小的低能散射以分波法求散射截面是个非常好的计算方法.

24. (1) 玻恩近似应用条件，通常是以三维空间中散射势 $V(r)$ 本身应确实可以当作微状的要求而得出的. 从其他考虑也可得出.

(2) 这两个条件中，低能条件比高能条件要严格得多. 第一个条件被满足时，玻恩近似对任何速度入射的粒子均成立. 而第二个条件表明：对足够快的粒子才能成立. 也就是说，低能条件满足时，高能条件就自动地且更好地满足. 因此，对低能粒子如势场可以当作微扰处理. 那么在高能情形下该势场一定能当作微扰处理，反过来就不一定成立.

因而，玻恩近似首先是个高能近似，对在高能区不适用的分波

法是个很好的补充.

必须指出，一维情形下，散射势作为微扰的条件，对所有ka均为$|V|\ll\frac{\hbar v}{a}$(即条件(2))，而在三维情形下推导出的条件，对一维将导致一级近似波函数具有发散性，因而是不适用的.

请参阅：朗道，《量子力学》(上册)(中译本)，人教版 1980 年，p. 196.

(3) 由于库仑力是长程力，不存在有限的势场作用半径a. 因而上面给出的两个条件不再适用，需专门讨论. 如入射粒子电荷为Z_1e，散射中心电荷为Z_2e时，库仑势$|V(r)|=\frac{Z_1Z_2e^2}{r^2}$. 作为粗略估计，可把高能近似条件中$a$改用为距离变量$r$，

则 $$|V|\ll\frac{\hbar v}{r},$$

得 $\frac{Z_1Z_2e^2}{\hbar v}\ll1$，作为适用条件.

可见，对高能粒子而言，库仑场可以当作微扰.

实际上，例如电子被原子散射即使不符合玻恩近似的适用条件，往往也能用它得出相当好的结果. 库仑势有个特有的性质，无论是严格的经典理论或严格的量子理论以及玻恩近似，所得到的截面公式都相同.

请参阅：玻姆，《量子理论》(中译本)，商务印书馆，1982，第廿一章 散射理论.

25. (1) 玻恩近似的基本思想是将散射势看作微扰. 高能情形下，作为一级近似可认为散射波函数与入射波函数相差不大，因而散射后粒子应具有比较确定的动量. 由测不准关系，其位置不确定量$|\Delta r|$应比较大. 设势场为短程势，作用范围为a，可认为有$|\Delta r|\gg a$. 而$|\Delta r|\cdot\Delta p\sim\hbar$，故有 $\Delta p=\frac{m}{p}\Delta T\sim\frac{\hbar}{|\Delta r|}\ll\frac{\hbar}{a}$. 在势

场范围内，$\Delta T\sim|V|$，得到$|V|\sim\Delta T\ll\frac{\hbar v}{a}$，这正是高能情形下近似条件.

(2) 用含时微扰处理散射问题时，总截面Q是自初态发生的有效跃迁速率的直接量度. 如散射势场作用可作微扰处理，这个跃迁速率必定很小.

玻恩近似适用时，总截面Q一定比与作用半径a对应的几何截面小得多. 即总截面$Q\ll\pi a^2$(几何截面). 在此不等式下，利用总截面公式，即可得出熟知的低能条件与高能条件.

$\alpha\ll\pi a^2$是玻恩近似判断时最有用的判据，但它只是玻恩近似适用性的必要条件，而不是充分条件.

参阅：A. 梅西亚，《量子力学》(第二卷)中译本，科学出版社，1986，p. 325.

26. 分波法在理论上是严格的理论，玻恩近似则相当于所有分波相移δ_l全都很小并且所有δ_l都能以势场为微扰的波动方程计算出.

关于玻恩近似情形下，中心力场散射相移δ_l的计算，可参阅：朗道，《量子力学》(下册)中译本，人教版，1982，p. 267，例题 4.

27. 分波法中散射总截面$Q=\Sigma Q_l$，表明各分波是独立地散射，总截面中没有不同分波间的干涉.

角分布是由微分截面$\sigma(\theta)$所确定的，分波法中微分截面

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2$$
$$=\frac{1}{k}\left|\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i\delta_l}\cdot\sin\delta_l\cdot P_l(\cos\theta)\right|^2.$$

如只有 s 分波($l=0$)，角分布是球对称的 (本章 19 题)；如只有 p 分波($l=1$)，$\sigma_1(\theta)\propto\cos^2\theta$. 如果既有 s 分波又有 p 分波，散射振幅将为

$$f(\theta)=A+B\cos\theta,$$

则　$\sigma(\theta)=|A|^2+|B|^2\cos^2\theta+(AB^*+BA^*)\cos\theta.$

角分布为$\cos\theta$的二次式分布(本章20题).

可见,一般情况下角分布与θ有关,并反映了不同l的分波间的干涉,如果考虑更高次分波,角分布$\sigma(\theta)$的形状可能会更复杂.

28. 三维球形方势阱的势场

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

其中$-V_0$变为V_0即为方势垒.

势阱$V(r)<0$为引力场. 势垒$V(r)>0$为斥力场.

在量子力学中二者统一描述为入射波经势场作用而散射，只是势场形式不同. 用分波法处理时表现为引力与斥力对应的相移δ_l符号不同.

另外,球方势阱中,在一定条件下可产生共振散射（参阅本章30题).

29. 半径为a的刚球散射,经典总截面$\alpha=\pi a^2$.

量子力学中:低能极限($ka\ll1$)下,总截面$\alpha=4\pi a^2$,为经典截面的四倍. 微分截面$\sigma(\theta)=a^2$为常数，散射粒子角分布呈各向同性.

低能极限$ka\ll1$,相当$\lambda\gg a$,当入射波波长远大于球体的尺度时,波的散射总有以上特征,所以这是纯量子效应.

高能极限($ka\gg1$)下,相当$\lambda\ll a$. 这时波动性应是非主导的.但量子力学得出的总截面$\alpha=2\pi a^2$却仍是经典截面的两倍.

事实上,当$\lambda<a$时,散射就要考虑来自高l分波的贡献,散射将表现出显著的非各向同性. 严格的讨论表明:高能极限下刚球散射的微分截面为①

---

① 参阅Morse, P. M. and H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics*, (1953), p. 1551.

$$\frac{1}{4}a^2\left[1+\mathrm{ctg}\left(\frac{1}{2}\theta\right)\mathrm{J}_1^2(ka\sin\theta)\right].$$

由于式中一阶贝塞尔函数对小的 x 有 $\mathrm{J}_1(x)\approx\frac{1}{2}x$，而对大的 x，将按 $\mathrm{J}_1(x)\sim\left(\frac{2}{\pi x}\right)^{\frac{1}{2}}\cos\left(x-\frac{3}{4}\pi\right)$ 而振荡，所以微分截面的公式中，第一项正是经典微分截面项 $\frac{1}{4}a^2$，是各向同性的．它将在总截面中给出经典值 πa^2，而总截面中另一半源于微分截面中第二项，它是集中在正前方向张角很窄 $\Delta\theta\approx\frac{\pi}{ka}$ 的锥体内的向前散射，这个窄而强的向前尖峰是由于入射波与出射的散射波间干涉而形成．

可见，对高能极限下，总截面 $\alpha=2\pi a^2$，可以说一半来自"经典"散射或"反射"散射，一半来自衍射散射或影散射(shadow scattering)．

因而，在经典极限下，波长是如此之短使正前方向散射的大的投影只对应很小的偏角不足以产生显著的观测效果．这样，实际有效的总截面仍只为经典值 πa^2．

30．散射总截面通常是入射粒子能量的函数，当入射粒子能量等于某些特定量值时，散射总截面呈现极大值的现象叫共振散射．

共振散射是散射实验中最显著的现象．微观领域中，原子物理、核物理、粒子物理……都经常遇到共振散射问题．

球方势阱 $V=\begin{cases}-V_0 & r\leqslant a\\ 0 & x>a\end{cases}$ 对低能入射粒子($ka\ll1$) 的散射，只考虑 $l=0$ 的 s 分波散射即可．

设径向波函数 $R(r)=\frac{u(r)}{r}$．

阱内：u 满足 $\frac{d^2u}{dr^2}+k^2u=0$，解为 $u(r)=A\sin k'r$；

阱外：u 满足 $\frac{d^2u}{dr^2}+ku=0$，解为 $u(r)=\sin(kr+\delta_0)$。

式中
$$k^2=\frac{2mE}{\hbar^2},$$
$$k'^2=k^2+k_0^2,$$
而
$$k_0^2=\frac{2mV_0}{\hbar^2}.$$

利用 $u(r)$ 及 $\ln u(r)$ 在 $r=a$ 的导数连续，得
$$A\sin k'a=\sin(ka+\delta_0)$$
$$k\operatorname{ctg}(ka+\delta_0)=k'\operatorname{ctg}k'a.$$

再利用求出的相移
$$\delta_0=\operatorname{tg}^{-1}\left[\frac{k}{k'}\operatorname{tg}k'a\right]-ka,$$

可得出阱内波函数的振幅
$$A^2=\frac{k^2}{k^2+k_0^2\cos^2k'a}.$$

当 $k'a=n\left(\frac{\pi}{2}\right)$，奇数 $n=1、3、5、\cdots$ 时，A^2 为极大时，$ka+\delta_0=n\left(\frac{\pi}{2}\right)$，因低能时 $ka\ll1$，故

$$\delta_0\approx n\left(\frac{\pi}{2}\right),$$

$$\sin^2\delta_0\approx1.$$

s 分波共振时散射总截面
$$Q=\frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0=\frac{4\pi}{k^2}.$$

虽然 $k'^2=k^2+k_0^2=\frac{2m}{\hbar}(E+V_0)$，

但低能情况相当 $E\ll V_0$，

使 $k' \approx k_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}$.

故质量为m的低能粒子被深度为V_0，宽为a的球方势阱散射如满足

$$k'a \approx k_0 a = a\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} = n\left(\frac{\pi}{2}\right),$$

即 $V_0 a^2 = \left(\frac{\hbar^2\pi^2}{8m}\right)n^2$，$n$为奇数，s分波与散射势产生共振. 散射总截面为s分波截面$\frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0$的最大值$\frac{4\pi}{k^2}$.

为什么在这个条件下可发生s分波与散射势的共振呢？

由条件 $V_0 a^2 \approx \left(\frac{\hbar^2\pi^2}{8m}\right)n^2$ 可看出：

$V_0 a^2 = \frac{\hbar^2\pi^2}{8m}$正是在球方势阱内($E<0$)“阱口”附近存在属于$l=0$的束缚态能级($E\approx 0$)的条件（为了表出束缚态只在$E<0$区存在，可把这个能级标为$E=0^-$）.

可见，以适当的低能而入射的粒子，可能几乎被势所束缚时，结果使波函数出现很大的畸变，产生强的散射效果形成共振.

这是个有普遍性的结论. 一般说来，只要势阱(不一定是方势阱)具有某l值(l不一定为0)的近于零的能级，则具有同样l值的粒子就会呈现低能共振散射.

31. 解球方势阱$V(r)$问题时，在径向波方程中，有效势为

$$V_e = V(r) + V_c$$
$$= V(r) + \frac{l(l+1)}{r^2}.$$

如图72所示.

$V(r)$是引力势，V_c是“离心势”，有效势V_e形式的“阱”中，能量$E<V_{max}$的正能粒子是否存在束缚态呢？

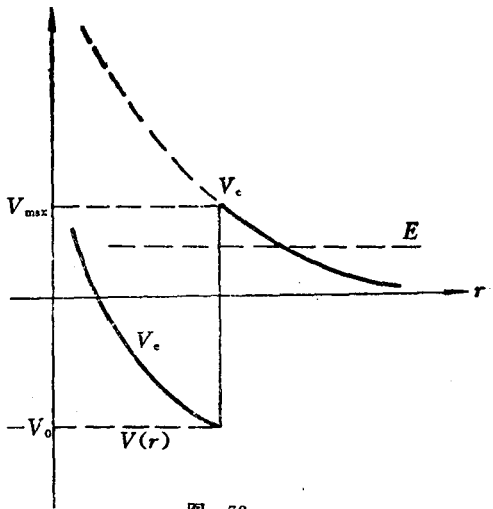


图 72

由于势垒穿透，能量如E的粒子可穿垒而出而成为自由粒子.

反之，如以能量E入射的自由粒子也有可能穿垒而入以一定的"寿命"存在阱中，又穿垒而出如自由粒子，这就是共振散射.

可见，正能粒子只能以一定寿命(反比于穿透概率)在V_e中形成似束缚态.

32. 低能电子(约 0.7 eV)被惰性气体(如氩、氪、…) 原子散射时，散射截面具有极低的极小值. 这个现象叫冉邵尔效应. 经典理论无法给出解释.

量子理论中，由于惰性气体原子具有闭合的电子壳层，原子场随距离减小比其他原子要快得多. 可以认为有明确的作用范围，而在原子范围内对入射电子又有强的引力作用，作为一级近似可以把电子被原子的散射，以电子经球方势阱散射来描述. 由上题知，低能粒子被球方势阱散射时，阱内波函数振幅

$$A^2=\frac{k^2}{k^2+k_0^2\cos^2 k'a}.$$

当 $k'a=n\pi(n=1、2、3、\cdots)$时，A^2 为极小，共振时，相应的 $ka+\delta_0=n\pi$.

对 $ka\ll1$，有 $\delta_0=n\pi$，$\sin^2\delta_0=0$.

这说明：球方势阱的吸引势足够强，使 $\delta_0=\pi$ 时，对 $l=0$ 的 s 分波，正好被"拉入"半个周期(如图 73).

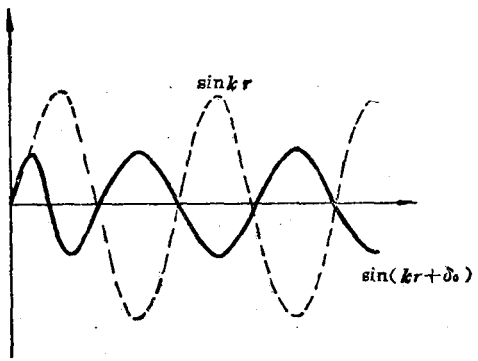


图 73

可见，当 $ka\ll1$，而吸引势又足够强，使只有 s 分波起作用，并且 $\delta_0=n\pi$ 时，$Q=\frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0=0$. 这种有散射势但没有散射现象正是冉鄂尔效应.

显然，这个散射极小截面只有在某一确定入射能量才会发生. 与前题中共振散射对比可看出，这个效应相当于共振透射.

33. 为了全面描述入射粒子与靶粒子间除弹性散射外其他可能的散射过程如非弹性散射……，常把入射粒子与靶粒子间相互作用以一个复势 $V=V_1-iV_2$ 表出. 其中 V_1 与 V_2 都是实的. 由此导出定域的几率守恒式为

$$\frac{\partial W}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{j}=-\frac{2V_2}{\hbar}W$$

其中 $W=|\psi|^2$ 为概率密度. $\boldsymbol{j}$ 为概率流密度.

通常我们总是设 $V_2 \geqslant 0$，这样，方程右边的作用象一个壑 $(\sin k)$，V_2 就代表对入射粒子束的定域吸收.

引入复势我们就可用"吸收"描述弹性散射外所有非弹性过程的总和. 这完全类似用复折射率描述具有吸收的介质光学性质. 所以，引入的复势常称为"光学模型势". 相应地，在应用分波法时，对复势可引入复相移. 总截面定义为弹性截面与吸收截面之和.

34. (1) 正前方向的弹性散射振幅与总截面间有一定关系是理所当然的. 因为存在光学定理的依据是概率守恒，在非相对论情形下代表粒子数守恒.

弹性散射中，入射粒子束沿一定方向入射，其中必有数量正比于总截面的一些粒子. 偏离入射方向向各方向散射而去. 散射中心的正前方向 $(\theta=0)$ 上，入射流必将被削弱，这是由于入射波与散射波间发生相消干涉，干涉项给出与入射方向相反的概率流的结果.

因而，光学定理的物理意义是：正前方向 $(\theta=0)$ 上，入射流被削弱，削弱的数值等于所有方向上的散射流的总和.

至于为什么总截面直接关连的只是散射振幅 $f(\theta)$ 的虚部以及系数 $\frac{k}{4\pi}$ 的出现，只能笼统地说：这是满足概率守恒的结果.

由概率守恒导出光学定理的计算，参阅：

钱伯初，曾谨言，《量子力学习题精选与剖析》，科学出版社，1988，p.525，12-1 题或席夫，《量子力学》(中译本)，人民教育出版社，1982. p. 156.

(2) 为了教学上需要，光学定理常常是用分波法求出中心力场中弹性散射振幅 $f(\theta)$，并取散射角 $\theta=0$，再与总截面 Q 对比而得出.

实质上，光学定理表达的是概率守恒，因而是个具有普遍意义的定理．当散射势不是中心势因而不具有球对称性以及散射过程不属于弹性散射等情况，光学定理依然适用．

总之，对任意势，任意散射过程，光学定理都成立．一般情况下，总截面 Q 应包括所有可能散射过程，即 Q 应为 $Q_{弹性}$ 与 $Q_{非弹性}$（或 $Q_{吸收}$）之和．

在狭义相对论情况下，光学定理仍然有效．

35．(1)质量为 m，波矢为 $\boldsymbol{K}_0=K\boldsymbol{n}_0$（$\boldsymbol{n}_0$ 为入射方向单位矢量）的入射粒子，经散射势 $V(\boldsymbol{r})$ 作用产生的弹性散射中，单位矢量为 $\boldsymbol{n}$ 的散射方向上，散射角为 θ，波矢为 $\boldsymbol{K}=K\boldsymbol{n}$，由玻恩近似得出散射振幅为①

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

式中 $\boldsymbol{K}=k(\boldsymbol{n}_0-\boldsymbol{n})$，$k=2k\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$.

对正前方向（$\boldsymbol{n}=\boldsymbol{n}_0$）$\theta=0$，由上式知正前方向散射振幅

$$f(0)=\frac{-m}{2\pi\hbar^2}\int V(r)\mathrm{d}\tau.$$

$f(0)$ 只正比于势的体积分．由此可知，玻恩近似中正前方向的弹性散射振幅总是实数．

从用玻恩一级近似求出的一些中心势的散射振幅中（参阅：曾谨言，《量子力学》下册，科学出版社，1981 年，p. 373，习题一，p. 661，答案）可明显看出这个特点．

例如，汤川势 $V(r)=V_0R\frac{e^{-r/R}}{r}$，式中 V_0 为势的强度，R 为力程．应用玻恩一级近似求出的弹性散射振幅

① 参阅：周世勋，《量子力学》，上海科技出版社，1961年，p. 268 或曾谨言，《量子力学》（下册），科学出版社，1981年，p. 360.

$$f(\theta)=-\frac{2mV_0R^3}{\hbar^2}\left(1+4k^2R^2\sin^2\frac{\theta}{2}\right)^{-1}$$

正是实的.

(2) 任何散射的精确解都应满足光学定理.

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

上问中弹性散射的正前方向散射振幅总是实的,正说明:玻恩一级近似解具有近似性. 这个近似性表现为:复的 $f(0)$ 其虚部与正前方向振幅模相比,可以忽略不计. 使得玻恩一级近似中必有

$$\mathrm{Im}f(0)\ll|f(0)|.$$

应用光学定理,得总截面 $Q\ll\frac{4\pi}{k}|f(0)|$.

玻恩一级近似得出的结果是否符合这个条件呢,我们只考察低能情形. 此时,散射是各向同性的

$$f(\theta)\approx f(0).$$

微分截面

$$\sigma=|f(0)|^2.$$

总截面

$$Q=4\pi|f(0)|^2.$$

上述条件将变为

$$k|f(0)|\ll 1.$$

仍以上问中给出 $f(0)$ 的汤川势为例,由于

$$|f(0)|=\frac{2mV_0R^3}{\hbar^2},$$

低能情形下 $kR\ll 1$ 条件给出为

$$kR\left(\frac{2mV_0R^2}{\hbar^2}\right)\ll 1.$$

通常给出的玻恩近似应用条件(低能情形下)

$$ka \ll 1 \qquad (a \text{ 为力程}),$$

$$|V| \ll \frac{\hbar^2}{ma^2},$$

即

$$\frac{m|V|a^2}{\hbar^2} \ll 1.$$

相比较可看出它与从光学定理给出的低能条件是自洽的. 但显然后者是比通常条件弱的条件.

高能情形也可作类似讨论，结果也是自洽的.

36. 由于微分截面 $\sigma = |f|^2$，所以，微分截面 σ 的测量能直接确定散射振幅 f 的模 $|f|$.

在本章 14 题中已指出，正前方向上的微分截面 $\sigma(0)$ 是个没有直接观测意义的量，但可由非正前方向微分截面的测量用外推法得出，从而可以确定 $|f(0)|$.

又知由光学定理，通过实测总截面可确定 $\mathrm{Im}f(0)$，于是可以计算出 $\mathrm{Re}f(0)$.

37. (1)两个经典粒子：θ 方向上，粒子 1 的散射振幅为 $f(\theta)$，粒子 2 的散射振幅为 $f(\pi-\theta)$. 由于是两个经典粒子，因此，在 θ 方向上测得粒子(无论是粒子 1 还是粒子 2)的微分截面.

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 + |f(\pi-\theta)|^2.$$

注意，无论两个经典粒子是否相同，此结论不变.

(2) α-α 粒子散射

α 粒子自旋为零，两个 α 粒子体系的波函数应是空间对称的. 在 θ 方向上，散射振幅应为

$$F(\theta) = f(\theta) + f(\pi-\theta)$$

才满足交换对称性的要求.

因此，微分截面为

$$\sigma(\theta) = |F(\theta)|^2$$

$$=|f(\theta)+f(\pi-\theta)|^2$$
$$=|f(\theta)|^2+|f(\pi-\theta)|^2+2\mathrm{Re}[f^*(\theta)f(\pi-\theta)].$$

最后一项是干涉项，是粒子波性的反映.

(3) 电子-电子散射

电子自旋为$\frac{\hbar}{2}$，双电子系波函数有单态与三重态两种，前者为自旋反对称态而空间波函数为对称态；后者为自旋对称态而空间波函数为反对称态.

对于单态　$F_S(\theta)=f(\theta)+f(\pi-\theta)$,

微分截面　$\sigma_S(\theta)=|f(\theta)+f(\pi-\theta)|^2$.

对于三重态　$F_A(\theta)=f(\theta)-f(\pi-\theta)$,

微分截面　$\sigma_A(\theta)=|f(\theta)-f(\pi-\theta)|^2$.

38. (1) 两非极化电子束相碰撞，它们的自旋取向是无规的. 按统计原理，诸微观态出现的概率是相等的. 因此，有$\frac{1}{4}$的概率处于单态，有$\frac{3}{4}$的概率处于三重态. 散射截面为

$$\sigma(\theta)=\frac{1}{4}\sigma_S(\theta)+\frac{3}{4}\sigma_A(\theta).$$

(2) 若两束极化电子束相碰撞，则应区别不同的极化情况分别讨论，下面列表说明.

入射电子束自旋取向		散射电子束自旋取向		微分截面$\sigma(\theta)$
电子束1	电子束2	θ方向	$\pi-\theta$方向	
+	+	+	+	$\|f(\theta)-f(\pi-\theta)\|^2$
−	−	−	−	$\|f(\theta)-f(\pi-\theta)\|^2$
+	−	+ −	− +	$\|f(\theta)\|^2$ $\|f(\pi-\theta)\|^2$
−	+	+ −	− +	$\|f(\pi-\theta)\|^2$ $\|f(\theta)\|^2$

一般地，如两电子束极化方向成任意夹角，那么可分解为上列四种情况的线性组合

第十二章

1. 对于处于基态的氢原子，玻尔半径等于薛定谔原子基态的最概然半径.

2. 这是由于电子从高能级跃迁到低能级时，相差的能量一部分转变为核的动能(为保持体系动量守恒)，不能完全转化为辐射光子的能量.

3. 量子数数目取决于定态波方程中的变量数目. 也即取决于体系自由度数目，对于不考虑自旋的单电子原子，其自由度为3，故量子数数目亦为3.

4. 能量量子化是由径向波函数的有限性所要求的. 角动量 $\hat{L}^2$ 与角动量投影 $\hat{L}_z$ 的量子化是由角分布函数 $\mathbf{Y}(\theta, \varphi)$ 的有限性与单值性所要求的. 从物理上说，能量量子化是由于电子在库仑势作用下处于束缚态的结果. 角动量量子化是由于空间方向的周期性(以 2π 为周期)所造成. 在量子力学中，轨道的概念失去了意义，当然也就无所谓轨道量子化.

5. 只要是有心力场，波函数中，r 与 θ、φ 变量即可分离，其角分布函数总是球谐函数 $\mathbf{Y}(\theta,\varphi)=\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$，不因势场 $V(r)$ 的形式不同而有变化.

6. 一般有心力场中由于势能 $V(r)$ 具有球对称性，总能量与空间取向无关，因而存在磁量子数 m 的简并性，能级值只与主量子数 n 及角量子数 l 有关，即相同的 n、l 而不同 m 的态有相等的能量. 对给定 l，$m=0,\pm1,\pm2,\cdots,\pm l$，共 $2l+1$ 个值，因而简并度为 $2l+1$.

$V(r)\propto\frac{1}{r}$ 的库仑场如氢原子中，比一般有心力场附加了 l 简

并，能量本征值只由 n 确定. 即相同的 n，但 l 不同的态也有相等的能量. 对于每个 n 值，l 值可从 0 变到 $n-1$，共 n 个可能值，每个 l 又有 $(2l+1)$ 个 m 值，故 E_n 的总简并度为 $\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)=n^2$.

碱金属原子中的价电子在屏蔽的库仑场中运动，此时仍为有心力场，但不再具有 $V(r)\propto\frac{1}{r}$ 的特性，因而不再具有 l 简并性，能量就与 l 有关了.

有人把库仑场不同于一般有心力场而特有的 l 简并，认为是属于偶然简并，而偶然简并的确切定义是指与体系全部对称性无关的因素所导致的简并.

库仑场比一般有心力场有更高的简并度，实质上正是由于有比球对称性这种几何对称性更高的对称性——动力学对称性所致.

参阅：席夫，《量子力学》(中译本)，人民教育出版社，1982年，p. 269.

所以只能说库仑场的 l 简并性是对球对称性引起的 m 简并的"附加"简并.

当然，一量子体系可能的对称性究竟是哪些？是随着人们认识不断深入的，微观领域内各种内部对称性的相继发现就是例证。

可见，有些被称为"偶然简并"的简并很可能正是尚未被认知的某种对称性的产物.

7. 氢原子径向分布特点：

(1) 电子径向分布平均半径随量子数 n 增大而增大；

(2) 径向波函数节点数目为 $n-l-1$.

8. 径向归一化条件为 $\int_0^\infty |R(r)|^2 r^2 \mathrm{d}r=1$.

9. 已知 $\boldsymbol{r}=x\boldsymbol{i}+y\boldsymbol{j}+z\boldsymbol{k}$，$\psi_{nem}(r,\theta,\varphi)=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$，

$x=r\sin\theta\cos\varphi$, $\bar{x}=\iiint r\sin\theta\cos\varphi R_{nl}^2|Y_{lm}|^2r^2\mathrm{d}r\mathrm{d}\cos\theta\mathrm{d}\varphi$.

其中$|Y_{lm}|^2$与φ无关.

由于$\int_0^{2\pi}\cos\varphi\mathrm{d}\varphi=0$,故$\bar{x}=0$.

类似地,因$y=r\sin\theta\sin\varphi$,$\bar{y}=0$.

而$z=r\cos\theta$, $\bar{z}=\int_{-1}^{1}|P_l^m|^2\cos\theta\mathrm{d}\cos\theta\int\cdots$.

利用递推关系

$$\cos\theta P_l^{|m|}(\cos\theta)=\frac{l+|m|}{2l+1}P_{l-1}^{|m|}(\cos\theta)+\frac{l-|m|+1}{2l+1}P_{l+1}^{|m|}(\cos\theta),$$

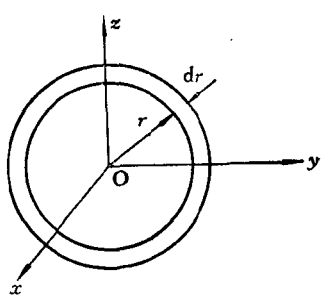
代入$\bar{z}$积分,再利用$P_l^{|m|}$的正交性

$$\int_{-1}^{+1}P_l^{|m|}(\cos\theta)P_k^{|m|}(\cos\theta)\mathrm{d}\cos\theta=0\quad(l\neq k),$$

得$\bar{z}=0$.

最后,得$\boldsymbol{r}=0$.

10. $|\psi_{100}|^2$在$r=0$有极大值,说明电子处在非常靠近原子核的小体元中的概率,比处在远离原子核的相同体积中的概率要大. 而电子最概然距离,是电子处在离原子核r到$r+\mathrm{d}r$的球壳间的概率,取极大值时得$r=a_0$. 如图74,即径向分布函数$\omega_{nl}(r)\mathrm{d}r=R_{nl}^2(r)r^2\mathrm{d}r$,取极大值时的$r$,此时体积元$4\pi r^2\mathrm{d}r$的大小随着$r$的增大而增大.



离核(原点)r至$r+\mathrm{d}r$的球壳

图 74

11. $\frac{1}{\bar{r}} \neq \overline{\left(\frac{1}{r}\right)}$，但由于

$$\bar{r}=\frac{n^2a_0}{z}\left[1+\frac{1}{2}\left\{1-\frac{l(l+1)}{n^2}\right\}\right]\approx\frac{n^2a_0}{z},$$

即大致正比于 n^2，也即 $\frac{1}{\bar{r}}$ 与 $\overline{\left(\frac{1}{r}\right)}=\frac{z}{n^2a_0}$ 数量级相同，故一般可认为 $\overline{\left(\frac{1}{r}\right)}\approx\frac{1}{\bar{r}}$. 但不可推广应用于任意 r^a. 例如，已知

$$\overline{\left(\frac{1}{r^4}\right)}=\frac{\frac{3}{2}z^4\left\{1-\frac{l(l+1)}{3n^2}\right\}}{a^4n^3l(l+1)\left(l+\frac{1}{2}\right)\left(l-\frac{1}{2}\right)\left(l+\frac{3}{2}\right)},\text{[对 s 态}(l=0)\text{]}$$

$\overline{\left(\frac{1}{r^4}\right)}$ 发散，$\overline{r^4}$ 则不如此，故 $\overline{\left(\frac{1}{r^4}\right)} \neq \frac{1}{\overline{r^4}}$.

12. 氢原子中电子径向波函数有节点，相当于驻波态，故波函数可为实函数；电子角向状态相当于行波态，故波函数必为复指数函数（$l=0$ 例外，相当于角向波矢为零）.

13. $\psi_{32}\to\psi_{31}$，$\psi_{32}\to\psi_{21}$ 的跃迁辐射是允许的.

14. N_{nl} 取负号是为了使 $R_{nl}(r)$ 在小的 r 值时为正值. 例如，

$$R_{20}(r)=\left(\frac{z}{2a_0}\right)^{3/2}\cdot\left(2-\frac{zr}{a_0}\right)e^{-\frac{zr}{2a_0}}.$$

如图 75.

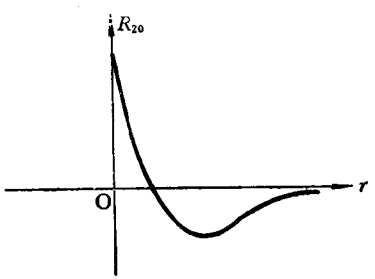


图 75

15. 设中子质量为 m_n，电子质量为 m_e，它们之间的万有引力为 $F=G\frac{m_n\cdot m_e}{r^2}$.

由 $\frac{m_ev^2}{r}=\frac{G\cdot m_n\cdot m_e}{r^2}$，得 $r=\frac{G\mu_n}{v^2}$.

由量子化条件 $rm_ev=nh$，$v=\frac{nh}{m_e\cdot r}$.

故 $r=\dfrac{Gm_n\cdot m_e^2\cdot r^2}{n^2\cdot\hbar^2}$,

$$r=\frac{n^2\hbar^2}{Gm_n\cdot m_e^2},$$

$$r_1=\hbar^2/G\mu_n\cdot m_e^2=0.24\times10^{40}a_0=1.2\times10^{31}\ \text{cm}$$

(a_0 为玻尔半径).

可见轨道半径非常之大,比现今认可的闭宇宙半径还大得多.

16. (1) $E=h\nu=-\dfrac{me^4}{z\hbar^2}\left(\dfrac{1}{2^2}-\dfrac{1}{1^2}\right)\approx2142(\text{eV})$.

(2) $a_\mu=a_0\dfrac{m_p}{m_\mu}\approx0.0023(\text{Å})$ (a_0 为玻尔半径).

(3) $v_n=e^2/n\hbar=\dfrac{\alpha c}{n}$ ($\alpha=e^2/c\hbar$ 为精细结构常数).

注意: 在有心力场中,粒子速度与质量无关.

17. 多电子原子的哈密顿量中应包含以下相互作用:

(1) 各电子与原子核间的库仑相互引力;

(2) 各电子间的相互作用;

(3) 电子自旋与轨道运动间的磁相互作用;

(4) 各电子自旋磁矩间的相互作用.

其中最重要的是属于库仑相互作用的(1)、(2)项,并且一般比磁相互作用强,而磁相互作用中,自旋间磁作用与自旋与轨道间磁作用相比又弱得多.

另外,原子核也有磁矩. 这样有些问题还须计入核磁矩与电子的轨道磁矩及自旋磁矩间的相互作用. 甚至有时还须考虑核的有限大小、其电荷分布的非球形对称等的影响.

处理具体问题时必须忽略一些关系不大的作用. 但即使只计入库仑作用(1)、(2)项,也无法精确解出三个以上相互作用粒子的波动方程. 实际求解时必需进一步简化,逐步近似求解.

18. 交换效应的物理本质起源于波粒二象性，是由于全同粒子的波函数之间的重叠、干涉而导致的一种纯量子效应. 交换能不是专门与电子的库仑作用联系在一起的. 粒子之间任何别的相互作用势能的平均值也包括两部分：一部分为直接部分，系由波函数的不重叠部分所贡献. 这部分与经典相互作用无异；另一部分即为交换部分，系由波函数的重叠部所贡献. 可见，两个全同粒子间的任何相互作用都会导致交换能.

如果我们考虑的是集中在空间不同部分的态的交换，或者能量差别很大的态的交换，交换能是很小的，交换效应可以略去不计(见下题).

例如，一般情况下，完全不考虑原子中光学电子与内层电子的交换效应.

19. 交换能的物理意义常被表为：交换能是两全同粒子"交换"量子态的频率的量度，其定量表述即为"交换时间与交换能成反比". 具体导出如下.

我们考虑两个全同粒子组成的体系(两个粒子分布于单粒子态 φ_n 态与 φ_m 态中)，研究当考虑到交换能时，体系随时间的变化.

定态波函数

对称态——$\psi_S=\frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_m(1)\varphi_n(2)+\varphi_m(2)\varphi_n(1)]e^{-\frac{i}{\hbar}E_S t}$

反对称态——$\psi_A=\frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_m(1)\varphi_n(2)-\varphi_m(2)\varphi_n(1)]e^{-\frac{i}{\hbar}E_A t}$

其中能量 $E_S=E_0+D-\varepsilon$, $E_A=E_0+D+\varepsilon$,

而 $E_0=E_n+E_m$, D 为库仑能，ε 为交换能.

考察非定态

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_S+\psi_A)=\frac{1}{2}e^{-i\omega_0 t}\{\phi_1(e^{-i\delta t}+e^{i\delta t})$$

$$+\phi_2(e^{-i\delta t}+e^{i\delta t})\}$$
$$=c_1(t)\phi_1+c_2(t)\phi_2.$$

式中 $\omega_0=\frac{E_0+D}{A}$, $\delta=\frac{\varepsilon}{\hbar}$,

$$\phi_1=\varphi_m(1)\varphi_n(2),\quad \phi_2=\varphi_m(2)\varphi_n(1),$$
$$c_1(t)=\cos\delta t e^{-i\omega_0 t}\qquad c_2(t)=ie^{-i\omega_0 t}\sin\delta t.$$

ψ 态中,双粒子系处于 ϕ_1 态,即第一个粒子处于 m 态,而第二个粒子处于 n 态的概率为

$$|c_1(t)|^2=\cos^2\delta t=\frac{1}{2}[1+\cos 2\delta t].$$

而 $|c_2(t)|^2=\sin^2\delta t=\frac{1}{2}[1-\cos 2\delta t]$ 则代表处在 ϕ_2 态(即第一个粒子处 n 态. 第二个粒子处 m 态)的概率. 概率随时间变化的频率 $\omega=2\delta$ 或周期 $T=\frac{\pi}{\delta}=\frac{\hbar\pi}{\varepsilon}$.

如果在初始时刻($t=0$)体系处于 ϕ_1 态,即 $|c_1(0)|^2=1$, $|c_2(0)|^2=0$,则经过时间 $\tau=\frac{\pi}{2\delta}$ 后,$|c_1|^2=0$, $|c_2|^2=1$, 即体系将处于 ϕ_2 态. 这就是说,如在时刻 $t=0$,体系的第一个粒子处 m 态. 第二个粒子处 n 态, 当过了时间间隔 $\Delta t=\tau$ 后, 第一个粒子转移到 n 态,第二个粒子转移到 m 态中,即发生了量子态的交换. 发生交换的时间 τ 称为"交换时间". 用交换能 ε 表出为 $\tau=\frac{\pi}{2\delta}=\frac{\pi\hbar}{2\varepsilon}$, 可见交换时间 τ 与交换能 ε 成反比. 特别是, 如不存在交换能($\varepsilon=0$),则 $\tau=\infty$.

例如,对氦原子($Z=2$)中的电子(它们处在 1s 态和 2s 态),通过交换能的计算, 得出交换时间 $\tau\approx 10^{-15}$ s. 但如果一个电子在 1s 态,另一个电子在 10s 态……, 交换时间的数量级将是若干年,交换效应实际上完全可忽略.

正是由于上述的"交换",量子态具有周期性(每隔$2\tau=T=\frac{\pi\hbar}{\varepsilon}$又恢复原状),即体系以一定频率$\omega=2\pi\nu=\frac{2\varepsilon}{\hbar}$"交换"量子态.所以说,交换能是两全同粒子"交换"量子态的频率的量度.

有人指出①这个解释是基于忽略电子自旋态而得出的,它不反映任何实际过程.如计入自旋则上述解释不再成立.

20. 正氦与仲氦之间并非完全不能相互转换,但发生转换的概率很小.因为虽然正氦与仲氦波函数都是反对称波函数,但正氦的空间波函数是反对称波函数,而仲氦的空间波函数是对称波函数.如果完全忽略自旋相互作用,则体系哈密顿量不包含自旋变量,并且关于两电子是对称的.这样,由薛定谔方程(关于空间波函数)

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi,\left(\text{或写为 }\mathrm{d}_t\psi=\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi\mathrm{d}t\right)$$

由于$\hat{H}$与ψ关于两电子有确定的交换对称性,因而$\mathrm{d}_t\psi$也具有同样的对称性.这就是说,在体系随时间的演化中,真空间波函数的交换对称性不会改变.这样,正氦与仲氦之间便不能自发相互转换.

即使引入外场作用(如光波作用),以上叙述仍然成立.当然,实际上自旋相互作用不能完全忽略,因此正氦与仲氦间的转换并不是完全不能发生.但是由于自旋相互作用非常微弱,发生转换概率是很小的.

21. 现在估算一下,光波作为微扰引起电子自旋方向改变(两个电子自旋反向平行的仲氦向具有同方向自旋的两个电子的正氦转变)的可能性.

---

① 参阅 A. S. Davydov, *Quantum Mechanics*, 1976, p. 306.

光波对原子作用中，光波的磁场B与电子磁矩$\frac{e\hbar}{2mc}$的相互作用能W_B的数量级为$W_B=\frac{e\hbar}{2mc}\cdot B$.

正是W_B的作用才可引起电子自旋方向的改变，而光波中电场E与电子电荷间相互作用能W_e的数量级为$W_e=ea\varepsilon$，其中a是原子的大小.

光波中ε与B是相等的，故

$$\frac{W_B}{W_e}\approx\frac{\hbar}{2mca},$$

其中$\frac{\hbar}{a}$具有原子中电子动量的数量级，因而$\frac{\hbar}{ma}$与电子速度v同数量级，

$$\frac{W_B}{W_e}\approx\frac{v}{c}\ll 1.$$

由于跃迁概率是与微扰能量的平方成正比的，所以，光引起电子自旋方向改变的跃迁概率是非常小的. 实际的跃迁只是对于电子坐标具有相同对称性的态之间的跃迁，即自旋不改变的跃迁.

可见，在忽略自旋相互作用的条件下，理论上正氦与仲氦之间不可能有跃迁. 实际上，自旋相互作用毕竟是存在的，但很小，所以跃迁是可能的但概率也是很小的. 故而用光照射基态的氦，实际上得到的仍是具有反向平行的自旋的激发态，即仍如仲氦的态.

如果用电子来轰击氦，入射电子可以留在原子中，而原子中的电子则从原子中打出去，因为入射电子束中电子的自旋方向可以是任意的，因此激发后留在体系中的两电子可能有同方向的自旋，从而实现了仲氦态到正氦态的转换.

22. 通常给出的氦能级图是单激发态的离散能级图. 如以基态作为能级起点，这些离散能级分布于零到一次电离能[电子组态$(1s,nl)$当$n\to\infty$时能量极限]之间，比这个能更高的单激发态是

连续态. 至于氦的双激发态，计算表明，它们的能值均大于一次电离能，它们将分布于第一电离能与第二电离能(此时He成为He^{++})之间，这些态往往是不稳定的而使He产生自电离成为He^+，另外，实测到氦的谱线中也有源于双激发态与单激发态间的跃迁，因而为了标出氦的"全部"能级，如图76，如仍以基态能作零起点，需要

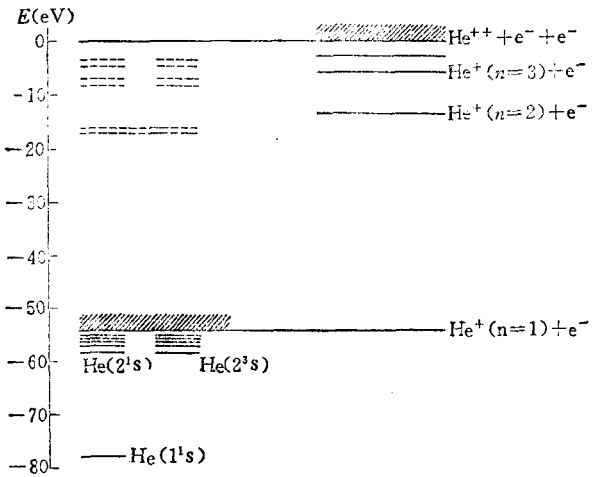


图76 氦的完全能级图

把能级极限高度由第一电离能升高到第二电离能. 第一电离能以下是通常能级图标出的单激发态的离散能级，而上半部能级的分布可形象地描述为：双激发态的离散能级"嵌"在连续谱之中.

参阅：吴大猷，《量子力学》(甲部)，科学出版社，1984，p. 397及 B. H. Bransden and C. J. Joachain, *Physics of Atoms and Molecules*, 1983, p. 257, 286.

23. 不正确，应更正如图77.

(1) 仲氦与正氦的第一激发态能级均大于 E_1+E_2.

(2) K 与 A 应标出有关的状态如 A_{12}, K_{12}, …，因为 $K_{12}\neq K_{11}$,

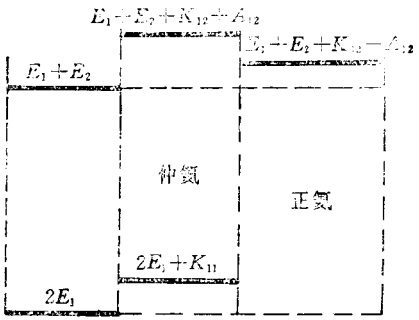


图 77

(3) 基态，交换能 $A_{11}=0$.

24. (1) 原子内部电场，数量级为 $\varepsilon_0\sim\frac{e}{a_0}=5.13\times10^9\ \mathrm{V/cm}$ (a_0 为玻尔半径)，实验用 $\varepsilon\sim10^5\ \mathrm{V/cm}$ 与之相比，完全可作微扰处理.

(2) 外电场只能部分解除简并，因为此时势场的球对称性虽受到破坏，但仍然存在对外电场方向的转动对称性.

(3) 微扰项 $\hat{H}'=e\varepsilon z$(电场沿正 z 方向)对空间反演是奇的，而氢原子基态波函数 $|nlm\rangle=|100\rangle$ 是非简并且具有确定的宇称(偶宇称). 因而，一级近似能量修正 $E_1'=\langle100|e\varepsilon z|100\rangle=0$(被积函数是奇函数)，这表明氢原子基态不存在一级斯塔克效应.

氢原子的激发态，电子能量 E_n 只与 n 有关，是 n^2 重简并的. $E=E_n$ 的态可以看作 l 从 0 到 $n-1$ 的各个态的叠加，各个态的宇称依 l 的奇偶而定. 所以，$E=E_n$ 的最普遍的态没有确定的宇称，对这样未扰动的态求 $\hat{H}'$ 的矩阵元时就不为零了. 因此在氢原子中除基态外可以观察到与场成正比的谱线分裂.

碱金属原子不存在 l 简并，量子能级 E_{nl} 只与 m 有关，是 $2l+1$ 度简并. 能量 E_{nl} 的态是 $m=-l$ 到 $m=+l$ 的各个态的叠加.

在这样态中求 $\hat{H}'$ 的矩阵元$\langle nlm|e\varepsilon z|nlm'\rangle$是 $\hat{H}'$ 在相同字称(l相同)未受扰态中计算的,必为零,即一级微扰能量修正为零. 因而碱金属原子不存在一级斯塔克效应.

计算能量二级修正即可得到与场平方成正比的裂矩.

25. 在相对论力学中解库仑力场中的狄拉克方程,得到能量本征值为

$$E_{nj}=-\frac{\mu e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 2\hbar^2 n^2}\left[1+\frac{\alpha^2}{n^2}\left(\frac{1}{j+1/2}-\frac{3}{4n}\right)\right].$$

式中 μ 为电子约化质量,n 为主量子数,j 为总角动量量子数,α 便是精细结构常数,$\alpha=e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar c\approx\frac{1}{137}$.

26. 谱线分裂与能级分裂是两回事. 在正常塞曼效应中,每条谱线分裂为三条谱线(这是由选择定则所制约的),而每个能级分裂数为 $2j+1$,j 为总角动量量子数,由于各能级都是等距分裂,所以,相邻能级间的跃迁的 ΔE 只有三种数值.

27. 多电子原子中,核外诸电子不但处于核势场中,诸电子间也存在着库仑相互作用,这种多体问题,即使近似求解也是很困难的.

量子力学中除了最轻的原子如氢、氦外,对所有原子的计算都采用"有心力场模型". 这个模型的核心是:假定原子中每个电子都在一个球对称的势场 $V(r)$ 中独立地运动,这个势场 $V(r)$ 代表了由原子核和其他所有电子共同产生的平均效应. 由于每个电子运动是独立的,因而,体系总波函数可以表为单电子波函数的乘积,我们就可由讨论一个电子在球对称势场 $V(r)$ 中运动的波方程入手,求解多体问题.

在此基础上,考虑到电子自旋,每个电子状态仍由 n, lm, m_s 四个量子数表征,再加上泡利不相容原理的限制,就可作为解释元素在周期表排列的基础.

有心力场模型中，球对称势 $V(r)$ 是待定的，可以由自洽场方法及托马斯-费米近似等确定，见以下两题.

28. 哈特里自洽场方法是确定有心力场模型中球对称势 $V(r)$ 的一个非常成功的方法.

哈特里方法中，多电子体系的第 k 个电子满足以下哈特里方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_k^2+V_k\right]\phi_k(\boldsymbol{r}_k)=E_k\phi_k(\boldsymbol{r}_k),k=1,2,\cdots Z,.$$

式中 $V_k=\dfrac{-Ze^2}{r_k}+\sum_{j\neq k}\int|\phi_j(\boldsymbol{r}_j)|^2\dfrac{e^2}{r_{jk}}\mathrm{d}^3r_j,r_{jk}=|\boldsymbol{r}_j-\boldsymbol{r}_k|.$

V_k 即为核势场及 k 电子以外其他所有电子对 k 电子的库仑作用，V_k 可由原子核的势及其他所有 $j\neq k$ 电子的波函数 $\phi_j(\boldsymbol{r}_j)$ 计算出.

原子内有 Z 个电子时必需联立求解 Z 个波函数 ϕ_k 的方程，直接求解是不可能的.

哈特里采用逐步逼近法求解. 首先，假设一个试探有心势 $V_0(r)$ 代替方程中的 V_k，由此求出诸电子的波函数 ϕ_k^0，再以此 ϕ_k^0 代入 V_k 式中求出 V_k'，再代入方程……，重复这个过程，直到在要求的精确度内前后自洽为止. 因而，哈特里方法又称为自洽场方法.

哈特里方法中假定体系波函数是各单电子波函数之积，福克改进为使用反对称化的波函数，类似推出一个福克方程，计算也较繁.

尽管这些方程组的有效解只能用数值表出，而不能给出解析表达式，但由于大型计算机的应用，使哈特里-福克(HF)方法得到了广泛的应用.

29. 费米-托马斯模型是对有大量电子的重原子，在统计近似

及准经典近似下求其有心势 $V(r)$ 的方法.

当有心势 $V(r)$ 在电子波长范围的变化足够缓慢时，在电子存在概率的主要区域内 $V(r)$ 可视为不变，因而，电子可视为自由的. 多电子原子中的电子，在统计近似下可作为费米电子气来处理.

另外，重原子中有大量电子处于高主量子数(nk)的状态. 根据对应原理，可以近似用某些经典方法处理，这就是准经典近似.

具体讨论如下：为了不使电子从原子中逃逸掉，即电子应处于束缚态，在与核距离 r 处，最大动能为 $-V(r)$. 根据费米统计，单位体积内，动能不超过 $\frac{p_F^2}{2m}$ 的电子数，即电子数密度

$$n(r)=\frac{p_F^3}{3\pi^2\hbar^3}.$$

以 $\frac{p_F^2}{2m}=-V(r)$ 代入得 $n(r)$ 与 $V(r)$ 关系为

$$n(r)=[-2mV(r)]^{3/2}/3\pi^2\hbar^3.$$

另一方面，距核 r 处，由核及核外电子产生的势能为 $V(r)$，所以静电势

$$\phi=\frac{-V(r)}{e}.$$

ϕ 可由具有连续分布的电子电荷密度 $\rho=-en(r)$，应用经典电动力学中的泊松方程

$$\nabla^2\phi=\frac{-\rho}{\varepsilon_0},$$

在边界条件 $\lim\limits_{r\to 0} r\phi=Ze/4\pi\varepsilon_0$，$\lim\limits_{r\to\infty}\phi=0$ 下加以确定.

与自洽场方法相比，费米-托马斯模型在原理及计算上均较为简单，但此模型中把电子分布看作是连续的，因而只对有大量电子的重原子(计算结果表明 $Z>10$)才给出良好的近似. 此外，原理的简单也带来了精确性不如自洽场高的缺点. 实用上，常以费米-

托马斯模型求出的 $V(r)$作为试探势，再应用自洽场方法进一步求解.

30. 不相容原理有弱条件与强条件两种表述.

弱条件：多电子原子中不可能有多于一个的电子占据同一量子态.

此即泡利不相容原理.

强条件：多电子体系的状态必需由反对称波函数来描述.(参阅"全同粒子"章.)

强条件为准确形式，它直接可由全同性原理得到. 弱条件可作近似表述，例如哈特里方法就用的是弱条件的不相容原理.

不相容原理具有极端重要的物理意义，它是多电子壳层结构的基础. 如果没有这一原理的限制，那末原子中所有电子都将聚集在 1s 态(能量最低)，第一激发态能级将很高，这样原子将不会对外产生电场，也很难被激发，不同元素化学性质的差别也消失了，也不可能相互作用而构成复合物质. 总之，若没有不相容定理，整个世界将变得面目全非，不相容原理是全部物质结构的微观支柱之一.

31. 从图 15 中我们可以看出，这些元素分成三个周期，每一周期以氢元素或碱金属元素开始，终止于惰性元素.

在每一周期内，诸元素电离能基本上是递增的，其原因是随着原子序数增大，核电荷增加，因而库仑吸引作用增强.

由惰性元素到下一周期的碱金属元素，电离能骤减，这是由于碱金属中增加的一个电子，跨入了下一个主壳层，与核的平均距离骤增，因而核对该电子的吸引作用大为减弱.

由 Be 到 B，由 Mg 到 Al，电离能稍减，这是由于增加的电子跨入了下一个次壳层(由 $l=0$ 到 $l=1$)，库仑作用稍减弱.

由 N 到 O，由 P 到 S，电离能稍减弱，其原因在下题中

说明.

32. P 轨道有三个空间状态，每个空间状态包含两个自旋态，当 P 轨道上有三个电子时，它们分别填充三个空间状态（分别是 $\hat{L}_x\hat{L}_y\hat{L}_z$ 的本征态），彼此距离较远，相互排斥作用小，故电离能较大. 当第四个电子填入时，它必然挤入上述三个空间状态之一（但自旋相反），同一空间态的两个电子平均距离较小，相互排斥较大，故电离能反而减小.

33. 类氢原子与氢原子的性质很接近，它的最外层有一个远离核的活泼电子，该电子可近似认为处于核及其他电子（统称原子实）所产生的平均场中，此平均场可近似看作是有效电荷为 1 的库仑场，为使这样的近似模型与真实情形更接近，可采用所谓里德堡修正. 这种修正在于给氢原子的主量子数 n 附加一修正量 $\Delta n(l)$. 于是类氢原子中，价电子的能级可表为

$$E_{nl}=-\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{[n+\Delta n(l)]^2}.$$

修正量 $\Delta n(l)$ 与量子数 n 无关，但与价电子角量子数 l 有关. 此外也与整个原子的总轨道角动量 L，与总自旋 S 有关. 随着 l 增大，修正量 $\Delta n(l)$ 将很快减小，于是上述能级将趋于氢原子能级.

34. 在多电子原子中，每一电子都可以认为是处于核场及其余电子所产生的平均场中运动，这种平均场仍然是一种有心力场，我们知道，处于有心力场的粒子其角分布函数是一定的（球谐函数），与有心力场的具体形式无关，故多电子原子与单电子原子角分布函数相同.

在有心力场中，粒子的径向分布与势场的具体形式有关，单电子原子的势场为库仑势，$U(r)\propto\frac{1}{r}$，而多电子原子的势场为屏蔽库仑势，因此，二者的径向分布函数也不同.

在接近原点(核)处,电子所受到的仅仅是核的纯库仑势(其余电子的平均势场在原点处几乎为零),因此,此处径向分布与单电子原子一样.

35. 如上题所述,多电子原子中的每一个电子都可以认为是处在核场及其余电子产生的平均场中运动. 这种平均场可以认为是由连续分布的电荷所产生的球对称库仑场. 由经典电学可以知道,球对称库仑场在距中心 r 处所产生的电势相当于在中心的一个点电荷在同一点所产生的电势,而此等效点电荷的数值,等于以 r 为半径的球内所有电荷之和. 由此可知,在多电子原子中,如电子位于接近核处,则只受到核的势场作用,这时

$$V(r)=-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}.$$

若位于原子最外层,则受到核电场与其余 $(Z-1)$ 个电子的平均场共同作用. 这两个场在外层产生的净势为

$$V(r)=\frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}.$$

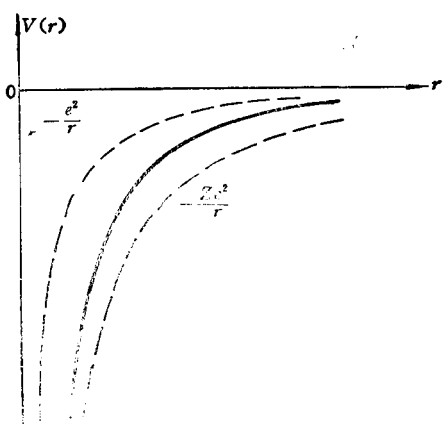


图 78

在原子中间任一点 r 处，一个电子受到的势场可表为

$$V(r)=-Z(r)\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}.$$

如图 78 显然有

$$Z(r)=\begin{cases}Z & r\to 0\\ 1 & r\to\infty.\end{cases}$$

对于处于 n 壳层(主量子数为 n)的电子，可取

$$Z_n=\overline{Z}_n(r)=\int_0^\infty |R_n(r)|^2 Z(r) r^2 \mathrm{d}r.$$

量 Z_n 称为壳层的有效 Z，这样 n 壳层电子受的有心势场表为

$$V_n(r)=\frac{-Z_n e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}.$$

由此，多电子原子，便可按单电子原子的波方程分别讨论每个电子，这些电子可以看作是独立运动，电子间相互作用已含在 Z_n[即 $V_n(r)$]中，而 $V_n(r)$，可由自洽场方法……求出.

36. 前已说明，多电子原子中一个电子的能量不仅取决于主量子数 n，而且取决于角量子数 l. 对于同一 n，l 较大的，能量也较大，因此有可能发生 n 较小、但 l 较大的态的能量大于 n 较大、但 l 较小的情形.

37. 洪德定则指出，当给定 n 与 l 时，基态电子按如下方式填充:

(1) 在满足不相容原理的前提下，使得总自旋 S 具有最大值;

(2) 在满足第 1 条的前提下，使得总轨道角动量 L 具有最大值;

(3) 当壳层未及半满时，总角动量 $J=|L-S|$;如超过半满，则 $J=L+S$. 洪德定则为经验法则，其中第 3 条可以推证出来，故严格说来它不是独立的，因此有的书上把此条略去.

洪德定则适用条件：

(1) 原子基态；

(2) 自旋轨道耦合很弱，即所谓 LS 耦合情形；

(3) 原子只有一个未满壳层，这时定则中的 S、L、J 即指整个原子（所有电子）的总自旋、总轨道角动量与总角动量. 如原子不止含有一个未满壳层，则上述定则只能限于一个壳层中应用.

38. 洪德定则虽是经验法则，但也可予以定性解释. 第一定则起源于不相容原理及电子间的库仑作用. 由于不相容原理，自旋同向的电子相互之间有排斥趋势，距离较远，故库仑相互作用能较自旋反向的状态为小. 因此诸电子在满足不相容原理的前提下，以及在 l 相同的情况下，总是首先取自旋同向的态，从而使总自旋具有可能的最大值. 第二条与第三条定则是由残存的自旋轨道相互作用所致，此相互作用能取决于自旋与轨道的相对取向，而数值则正比于轨道角动量. 当相对取向相反时，相互作用为负. 因此诸电子总是首先占据相对取向相反的态，并从 m_l 较大的态开始填充. 此后由于泡利原理的限制，再占据相对同向的态. 由于这时相互作用能为正，故从 m_l 较小的态开始填充. 洪德定则可图示如下(以 d 壳层为例)：

电子序号	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
m_s	−1/2	−1/2	−1/2	−1/2	−1/2	1/2	1/2	1/2	1/2	1/2
自旋取向	↓	↓	↓	↓	↓	↑	↑	↑	↑	↑
m_l	2	1	0	−1	−2	−2	−1	0	−1	−2
轨道取向	↑	↑	·	↓	↓	↓	↓	·	↑	↑
S	1/2	1	3/2	2	5/2	2	3/2	1	1/2	0
L	2	3	3	2	0	2	3	3	2	0
J	3/2	2	3/2	0	5/2	4	9/2	4	3/2	0

39. 当电子恰好半满时，有 $L=0$，这时两关系式 $J=|L-S|$

与 $J=L+S$ 合二为一了，即 $J=S$.

40. 原子谱项的一般表示形式为

$$^{2S+1}X_J$$

其中，X 为原子总轨道角动量的标记，不同 L 用不同大写字母表示.

L:	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
X:	S	P	D	F	G	H	I	K	L	M	N

左上角 S 为总自旋，$2S+1$ 称为谱项的多重度（当 $L\geqslant S$ 时，它即等于精细结构组分数），右下角 J 为原子总角动量.

对于满壳层，有 $L_f=0, S_f=0, J_f=0$（L_f、S_f、J_f 为满壳层的总轨道角动量、总自旋、总角动量），故确定原子光谱项，只须考虑未满壳层.

41.

元素	电子组态	基态谱项
$_1H$	$1s$	$^2S_{\frac{1}{2}}$
$_2He$	$1s^2$	$^1S_0$
$_3Li$	$1s^22s'$	$^2S_{\frac{1}{2}}$
$_6C$	$1s^22s^22p^2$	^3P
$_9F$	$1s^22s^22p^5$	$^2P_{3/2}$
$_{13}AL$	$1s^22s^22p^63s^23p'$	$^2P_{1/2}$
$_{19}K$	$1s^22s^22p^63s^23p^64s'$	$^2S_{1/2}$
$_{26}Fe$	$1s^22s^22p^63s^23p^63d^64s^2$	$^5D_4$
$_2He^+$	$1s'$	$^2S_{1/2}$
$_{11}Na^+$	$1s^22s^22p^6$	$^1S_0$
$_{11}Na^{\#}$	$1s^22s^22p^5$	$^2P_{3/2}$
$_{26}Fe^{\#}$	$1s^22s^22p^63s^23p^63d^6$	$^5D_4$

$_{26}Fe^{\#}$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5$	$^6S_{5/2}$
H_2	$1s^2$	$^1S_0$

42.

$_5B$ 与 $_9F$ 具有同类光谱项 ^2P.

$_{14}Si$ 与 $_{16}S$ 具有同类光谱项 ^3P.

$_{22}Ti$ 与 $_{28}Ni$ 具有同类光谱项 ^3F.

如果将未满壳层中尚未填充的状态数用空穴表示，则上述各组元素中第一元素的电子数（未满壳层中）等于第二元素的空穴数(同一未满壳层). 由于空穴态与等量电子态可用相同的量子数来表示,故每组元素具有相同类型的光谱项.

43. (1) 电子组态: $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^1$.

基态谱项: $^2S_{\frac{1}{2}}$.

(2) $^2P_{1/2}, ^2P_{3/2}$.

(3) 此一对能级分裂即能级精细结构，系由自旋轨道相互作用所产生，或者说是由电子自旋磁矩与核感应磁矩的相互作用所造成的(在相对电子静止的参考系中).

(4) J 值较大的能级较高，即谱项为 $^2P_{\frac{3}{2}}$ 的能级较高.

(5) 由于相互作用能(正比于能级裂距)正比于

$$S\cdot L\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\propto S\cdot L\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}\left(\frac{1}{r}\right)}{\mathrm{d}r}\propto r^{-3}\cdot S\cdot L\propto r^{-3},$$

故 $$n=-3.$$

44. 设电子体系处于一定状态时,磁矩为 μ,角动量为 J,则 g 因子可由下式定义

$$\mu=-g\frac{e}{2m}J. \quad (m \text{ 为电子质量})$$

g 因子正比于旋磁比 γ, $g=\frac{2m}{e}\gamma$.

此外，当原子能级在磁场中发生分裂时，裂距正比于 g 因子因此，g 因子有时称为劈裂因子.

g 因子表示式

$$g=\frac{1+J(J+1)+S(S+1)-L(L+1)}{2J(J+1)}.$$

45. 对于独态 $2S+1=1, S=0, J=L$，由上式可知 $g=1$.

对于 S 态 $L=0, J=S$，由上式得 $g=2$.

46. 由相对论量子力学可以得到自旋轨道相互作用能量为

$$\Delta E=\frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}\hat{L}\cdot\hat{S}.$$

这里，m 为电子质量，$V(r)$ 为作用于电子的有效势场，它可表为

$$V(r)=\frac{-Z(r)e^2}{r}.$$

可见，ΔE 随 r 减小而增大. 当 $r\to 0$，ΔE 急骤增大，因此，自旋轨道相互作用主要取决于 $V(r)$ 在 $r\sim 0$ 的区域中的特性. 我们知道，当 $r\to 0$ 时 $Z(r)\to Z$，$V(r)\to\frac{-Ze^2}{r}$.

所以，自旋轨道相互作用随 Z 增大而增大.

从物理上说，自旋轨道相互作用是电子自旋磁矩与核轨道磁矩(以电子为参考系)之间的磁相互作用.

电子自旋与自旋的耦合(以及所有电子之间的相互作用)，都不涉及核势场，故与原子序数无关.

47. 在多电子原子中，电子与核之间、电子与电子之间相互作用的情形是很不相同的. 对不同的原子可采用不同的近似处理. 以求原子总角量为例，有以下两种常见的近似程序：

(1) 先分别将所有活泼电子的自旋角动量与轨道角动量相耦合，构成总自旋角动量 $S=\sum_i S_i$ 与总轨道角动量 $L=\sum_i L_i$；

再将总自旋角动量与总轨道角动量相耦合，构成原子总角动量 $J=L+S$ 这样的近似程序称之为 LS 耦合.

(2) 先将每一电子的自旋与轨道角动量自相耦合，构成单电子总角动量 $J_i=S_i+L_i$;

再将所有单电子总角动量相耦合，构成原子总角动量 $J=\sum_i J_i$.

这样的近似程序称之为 jj 耦合.

LS 耦合中，假定单电子自旋轨道相互作用远小于原子内部的库仑作用. 这样的假定适用于轻原子. 实际上，对于大多数元素原子(Z 不很大)，这样的近似都不会引起很大误差.

jj 耦合则适用于相反的极端情形，即单电子自旋轨道相互作用远大于电子与电子之间的库仑作用，因此这种近似程序只适用少数 Z 很大的重元素原子. 上述两种耦合方式用来反映原子内部的实际结构，都存在着不同程度的偏差. 此外，也存在其他耦合方式. 例如，当原子处于高激发态时，可以认为，低能级的原子实是以 LS 耦合方式组构的，而原子实与高激发态电子之间采用 jj 耦合. 这种混合方式在所述情形下可能更为准确一些.

48. 本题所提问题是对于"LS 耦合"名称的一种误解. LS 耦合不适用于自旋轨道相互作用较强的情形，恰恰相反，它适用于自旋轨道相互作用很弱的情形. 这种情况下. 单电子的自旋与轨道角动量可以近似看作分别守恒，因此自旋与自旋、轨道角动量与轨道角动量之间便可以相互耦合而构成总自旋与总角动量. jj 耦合正相反，自旋轨道相互作用较强，单粒子自旋与轨道角动量不再分别守恒，故不能分别耦合.

49. 离子键又称异极键. 构成分子的诸原子交换电子，形成正负离子，通过静电吸引作用结合在一起，这样的分子键称为离

子键.

共价键又称同极键,构成分子的中性原子不能形成正负离子,而是通过两原子的价电子之间的交换力结合,这样的分子键称为共价键. 共价键可以分为非极性键与极性键,非极性分子电荷分布是对称的,正电荷中心与负电荷中心重合,整个分子电偶极矩为零,例如 H_2 分子. 极性键分子电荷分布不对称,电偶极矩不为零,例如 HCl 分子. 强极性共价键与离子键并无截然界限,往往是两种作用(异荷吸引力与交换力)并存.

轨道杂化是形成共价键过程中一种常见的效应. 它是将原子中价电子原来轨道状态进行重新组合构成杂化轨道,这些新的状态虽然就单电子而言较原来状态能量要高,但由于它往往具有更好的空间对称性,在形成共价键后,整个分子总能量将具有极小值.

50. 共价键的数目即所谓饱和性,取决于原子中未配对电子数目(配对电子指处于同一空间状态,自旋反向的一对电子). 共价键方向即交换作用最强的方向,它决定于价电子概率最大的取向.

51. 氢原子中有一个未配对电子,两个氢原子相结合,恰好两个价电子相配对(自旋反向)形成共价键分子. 这时如果有第三个氢原子加入,它必然与原先两价电子之一自旋同向,因而发生排斥,故不能形成 H_3. 当然更多氢原子也不能结合在一起形成分子.

氢分子中,仅当两电子自旋反平行(独态),交换力表现为引力,结合能才有负能区与极小值,两原子才能稳定结合. 如两电子自旋平行(三重态),交换力表现为斥力,结合能恒正,两原子不能稳定结合.

52. 这正是轨道杂化所产生的结果.

碳原子的电子组态为$(1s)^2(2s)^2(2p)^2$，似乎只有两个未配对电子$2p^2$，但按轨道杂化理论，可由一个2S轨道与三个2P轨道组合成四个杂化轨道，例如在CH_4分子中，

$$\psi_a=\frac{1}{2}(\psi_{2s}+\psi_{2px}+\psi_{2py}+\psi_{2pz})$$

$$\psi_b=\frac{1}{2}(\psi_{2s}+\psi_{2px}-\psi_{2py}-\psi_{2pz})$$

$$\psi_c=\frac{1}{2}(\psi_{2s}-\psi_{2px}+\psi_{2py}-\psi_{2pz})$$

$$\psi_d=\frac{1}{2}(\psi_{2s}-\psi_{2px}-\psi_{2py}+\psi_{2pz})$$

此四个混和态电子几率最大方向指向以C原子核为中心的正四面体的四个顶点方向．而$(2s)^2(2p)^2$四个电子在混合态下都是未配对的，因而可提供四个共价键．

第十三章

1. 几何形体的对称性是只与体系外部几何结构有关的三维空间中几何形体的对称性.

一个几何图形具有某种对称性的确切含义是指在某些变换(操作)下,几何图形的不变性. 例如,一正方形绕垂直于此图形并通过中心的轴转动 90° 仍复原为该正方形.

能使一几何图形复原的变换称为这个图形的对称变换或对称操作.

2. 物理体系具有某种对称性的准确含义是指体系的哈密顿量在某些变换下的不变性.

这些变换则称为体系的对称变换.

3. (1) 空间平移,空间转动,空间反射.

(2) 时间平移,时间反演.

(3) 洛伦兹变换.

(4) 只与体系内部性质有关的内部对称变换, 如正反粒子变换.

4. 首先,量子体系有着更广泛的对称性, 更重要的是在微观领域中, 粒子间有些相互作用至今还没有令人满意的理论. 这与经典物理已有完整的动力学规律很不同.

对微观现象中各种对称性的研究, 对探索粒子间未知规律起着非常重要的作用. 目前,高能物理的研究,所取得的进展大都来源于对称性的研讨.

5. 如图 79, 空间反射变换 P, 可由 C_2(绕轴旋转 π 角)及 σ_h (对垂直于轴的平面反射) 这两个基本变换相继作用而实现, 即 $P=\sigma_h C_2=C_2\sigma_h$.

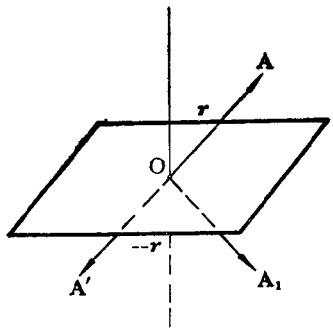


图 79

6. 量子体系的几何对称性由体系哈密顿量的对称性所确定. 体系的哈密顿量是参量如位置、动量、角动量……的函数. 而动能是以拉普拉斯算符 ∇^2 表出的，它对于旋转、反射、平移……空间变换都是不变的. 因而，哈密顿量对这些空间变换的不变性，实质上取决于动能以外的其他项的不变性. 例如，中心力场中运动的单粒子，哈密顿量中只含动能及势能 $V(r)$ 两项，势能 $V(r)$ 是球对称的，它对于通过原点的任意轴转动任意角度的所有旋转都是不变的. 此时，体系的几何对称性即可由势能的三维转动不变性来确定.

7. 如体系的哈密顿量为 $\hat{H}$，凡满足 $[\hat{A}, \hat{H}]=0$，且不显含时间的力学量 $\hat{A}$，称为体系的一个守恒量.

特点为：①在体系的任何态下，平均值不随时间变；②在体系的任何态下，概率分布不随时间变.

8. 量子体系的守恒量不一定取确定值，关键在于初始条件. 如初始时刻体系处于守恒量 $\hat{A}$ 的属于本征值 A_p 的本征态 ψ_p，即体系处于这个 ψ_p 态的概率为 1，处于其他态的概率为零.

$$|c_k(0)|^2=\begin{cases}1 & k=p\\ 0 & k\neq p.\end{cases}$$

由于体系的概率分布不随时间变，即$|c_k(t)|^2=|c_k(0)|^2$则以后任何t体系均处于同一个本征态，守恒量$\hat{A}$永取确定值A_p.

如初始时刻守恒量$\hat{A}$不取确定值，以后任何t也不取，但概率分布不随时间变，即取各值的相对概率不变，平均值不随时间变.

一个典型的例子请参阅散射章中有关分波法的16题.

9. 下列两种情况之一：

① $[\hat{F},\hat{H}]=0$，$\hat{H}$是体系的哈密顿量，此时$\hat{F}$是体系的守恒量；或②体系处在定态.

10. (1) 以x代表体系所有坐标. 由$\hat{G}$的定义

$$\psi'(x)=\hat{G}\psi(x).$$

由于坐标变换下归一化应不变，$(\psi,\psi)=(\psi',\psi')=(\hat{G}\psi,\hat{G}\psi)$，故$\hat{G}^+\hat{G}=\hat{G}\hat{G}^+=1$，即$\hat{G}^+=\hat{G}^{-1}$，$\hat{G}$为幺正算符.

(2) 坐标变换$\hat{G}$将哈密顿量$\hat{H}$中，一组坐标$x\to x'$、$\frac{\partial}{\partial x}\to\frac{\partial}{\partial x'}$，已知$\hat{G}$作用下$\hat{H}$不变，即$\hat{H}\left(x,\frac{\partial}{\partial x}\right)=\hat{H}\left(x',\frac{\partial}{\partial x'}\right)$，将$\hat{G}$作用在$\hat{H}\psi$上

$$\hat{G}\hat{H}\left(x,\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x)=\hat{H}\left(x',\frac{\partial}{\partial x'}\right)\psi(x')=\hat{H}\left(x',\frac{\partial}{\partial x'}\right)\hat{G}\psi(x),$$

$$\left\{\hat{G}\hat{H}\left(x,\frac{\partial}{\partial x}\right)-\hat{H}\left(x',\frac{\partial}{\partial x'}\right)\hat{G}\right\}\psi(x)=0.$$

由$\psi(x)$的任意性及$\hat{H}$的不变性，

$\hat{G}\hat{H}-\hat{H}\hat{G}=0$，即$[\hat{G},\hat{H}]=0$.

11. 不一定，守恒量是特殊的力学量，而力学量是以厄米算符表示的，对称变换算符$\hat{F}$是幺正的，即$\hat{F}^{-1}=\hat{F}^+$，但不一定是厄米

的. 只有幺正算符 $\hat{F}$ 又是厄米的，即满足 $\hat{F}=\hat{F}^{-1}=\hat{F}^{+}$ 的变换算符，或 $\hat{F}^{2}=1$，平方为恒等变换的对称变换算符如宇称算符才代表力学量，并且 $\hat{F}$ 满足守恒量条件时，才是体系的一个守恒量.

12. 物理学中体系的对称性，根源在于存在某种基本量的不可观测性，而体系的一种对称性常导致一种守恒定律，守恒定律是存在某种对称性的表现.

13. 物理上，空间的均匀性是指空间没有绝对原点，物理上空间各点都是等价的，物理规律在各点都是一样的. 在不同地点，在同样条件下作同一实验，结果必相同. 即物理规律在空间平移下是不变的. 对应的不可观测量是空间的绝对位置，空间平移不变导致动量守恒.

空间各向同性是指空间各个方向都是等价的，物理规律在空间转动下是不变的. 对应的不可观测量是空间的绝对方向，空间转动不变性导致角动量守恒.

时间的均匀性是指没有时间的绝对原点，物理规律在任何时刻都是一样的，即物理规律在时间平移下是不变的. 对应的不可观测量是绝对时间，时间平移不变导致能量守恒.

14. 表象变换是希尔伯空间中重新选择基矢问题，不涉及体系的对称性.

15. 大量的实验事实(宏观及微观)表明：物理上的守恒定律总伴随着某种对称性. 反之，不一定正确. 不是所有对称变换下的不变性都有对应的守恒定律，如时间反转对称(参阅本章 37 题).

无论是经典或量子体系，空间平移、空间转动、时间平移对称性都被公认是严格成立的，由这些对称性导出的动量、角动量、能量守恒定律是物理学中三个基本守恒定律.

有些对称性则是近似成立，常被称之为“破缺”的. 与之对应

的守恒定律在一些相互作用中并不守恒. 例如，空间反射对称性在弱作用中是不存在的，或者说，在弱作用中宇称不守恒.

检验一个对称性是否破缺的标准，只能是实验事实.

16. 由本章第 8 题知：这要由体系初态性质来决定. 例如，体系具有空间对称性，如在初始时刻($t=0$)处于一定宇称的状态下，则以后任何时刻仍具有同样的宇称.

17. (1)全部; (2)(5) 除动量外，都是; (3)(4)能量和宇称; (6)E 和 L_z; (7)只有 E;(8)E, L_z, p_x, p_y; (9)$L_z; p_x; p_y$.

18. (1)(2)共有的守恒量为：能量 E，总角动量 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}, J^2$. 此外，对(1)还有宇称 P.

19. (1) 三维中心力场中运动的粒子，角动量 L_x、L_y、L_z 均为守恒量且彼此不对易，所以，除角动量为零的态外，粒子能级总是简并的.

(2) 一维运动的自由粒子，守恒量 p_x 及宇称 P 不对易，所以，除动量值为零的态外，能级是简并的.

20. 不一定，所给两例中，都具有对原点的左右对称，但一维运动的束缚定态都是非简并的. 按上题判断能级是否简并的定理，两例中，宇称 P 为守恒量，但不存在与宇称不对易的另一个守恒量. 所以，能级是非简并的.

21. 例如，一维谐振子与一维运动的自由粒子，都具有空间反射对称性. 宇称均为体系的守恒量. 而一维谐振子是一维运动的束缚定态问题，能级是非简并的，能量本征态 $\psi_n(x)$ 就是宇称的本征态. 由于

$$\hat{P}\psi_n(x)=\psi_n(-x)=(-1)^n\psi_n(x),$$

能量本征态有确定的宇称 $(-1)^n$. 宇称的奇偶由量子数 n 的奇偶决定.

对一维运动的自由粒子；能级是二重简并的. 对应 $E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$.

能量本征态可取 $e^{\pm ikx}$. 但它们都不是宇称的本征态($k=0$ 除外)，不具有一定宇称.

22. (1) 一维无限深势阱中的粒子，能级是非简并的，并且，对 $x=\pm\frac{L}{2}$ 间的势阱具有空间反射对称性，宇称是守恒量. 所以，能量本征态 φ_n 即宇称的本征态. φ_n 的宇称为 $(-1)^{n+1}$，但给出的 $\psi(x,0)$ 是奇偶性不同的本征态的线性叠加不具有一定的宇称. 所以，以后任何 t 的 $\psi(x,t)$ 也不具有一定的宇称. 但宇称作为守恒量，其概率分布不随时而变. 由 $\psi(x,0)$ 中 φ_1 和 φ_2 的展开系数可知：对任何 t，粒子处在偶宇称态的概率为 $\left(\frac{4}{\sqrt{41}}\right)^2=\frac{16}{41}$；对任何 t，粒子处在奇宇称态的概率为 $\left(\frac{5}{\sqrt{41}}\right)^2=\frac{25}{41}$.

(2) 宇称作为守恒量，其平均值不随时而变，只对 $\psi(x,0)$ 求平均值 $\bar{P}$ 即可.

$$\bar{P}=\langle\psi|\hat{P}\psi\rangle.$$

已知 $$\hat{P}\psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{41}}[4\varphi_1-5\varphi_2],$$

$$\bar{P}=\frac{1}{41}[16(\varphi_1,\varphi_1)-25(\varphi_2,\varphi_2)]=\frac{-9}{41}.$$

23. (1) $$\psi_\pm(x)=\frac{1}{2}[1\pm\hat{P}]\psi(x)=\frac{1}{2}[1\pm\hat{P}]e^{ikx}$$

$$=\frac{1}{2}[e^{ikx}\pm e^{-ikx}],$$

$$\psi_+(x)+\psi_-(x)=\frac{1}{2}[e^{ikx}+e^{-ikx}]+\frac{1}{2}[e^{ikx}-e^{-ikx}]$$

$$=\cos kx+i\sin kx=e^{ikx}.$$

(2) $$\psi_+(x,0)=\frac{1}{2}[1+\hat{P}]\psi(x,0)$$

$$=\frac{1}{2}[1+\hat{P}]\frac{1}{\sqrt{41}}[4\varphi_1+5\varphi_2]$$

$$=\frac{1}{\sqrt{41}}\left[\frac{1}{2}(4\varphi_1+5\varphi_2)+\frac{1}{2}(4\varphi_1-5\varphi_2)\right]=\frac{4}{\sqrt{41}}\varphi_1,$$

$$\psi_-(x,0)=\frac{1}{2}[1-\hat{P}]\psi(x,0)=\frac{5}{\sqrt{41}}\varphi_2.$$

24. (1) 定态是体系能量有确定值的态，体系哈密顿量虽是守恒量，但不一定总有确定值.

(2) 一维束缚定态，能级才是非简并的.

(3) 只有 $\hat{F}$ 与 $\hat{G}$ 对易，它们才可能同时有确定测值.

25. 不对，由于 $\hat{F}_1$ 与 $\hat{F}_2$ 是体系的守恒量，所以 $\hat{F}_1$ 与 $\hat{F}_2$ 必为厄米算符，但 $\hat{F}_1\hat{F}_2$ 与 $\hat{F}_2\hat{F}_1$ 不一定是厄米的. 当 $\hat{F}_1$ 与 $\hat{F}_2$ 不可对易时，$\hat{G}=\mathrm{i}(\hat{F}_1\hat{F}_2-\hat{F}_2\hat{F}_1)$ 是厄米算符，并且 $\frac{\mathrm{d}\hat{G}}{\mathrm{d}t}=0$.

所以，$\hat{G}=\mathrm{i}(\hat{F}_1\hat{F}_2-\hat{F}_2\hat{F}_1)$ 才可能是体系的守恒量，具体例子见下题.

26. 已知 $\hat{L}_z\hat{p}_x-\hat{p}_x\hat{L}_z=\mathrm{i}\hbar\hat{p}_y$，当 $\hat{p}_x$ 及 $\hat{L}_z$ 为体系的守恒量时，由上题 $\hat{G}_2=\mathrm{i}(\hat{p}_x\hat{L}_z-\hat{L}_z\hat{p}_x)=\hbar\hat{p}_y$ 亦为体系的守恒量.

从对称性考虑：$\hat{p}_x$ 是守恒量意味着体系在 x 方向有平移不变性. 角动量 $\hat{L}_z$ 是守恒量，意味着体系有绕 z 轴的转动不变性. 由此可知，不仅 x 方向，在 xy 平面上，任意方向都有平移不变性，在 y 方向的平移不变性，导致 $\hat{p}_y$ 亦为守恒量.

在无限、均匀平面场中运动的粒子（均匀平面为 x-y 平面）就属这种情况.

27. 类似上题，已知守恒量 $\hat{L}_x$ 与 $\hat{L}_y$ 满足 $\hat{L}_x\hat{L}_y-\hat{L}_y\hat{L}_x=\mathrm{i}\hbar\hat{L}_z$，$\hat{G}=\mathrm{i}(\hat{L}_x\hat{L}_y-\hat{L}_yL_x)=-\hat{L}_z\hbar$ 亦为体系的守恒量.

再由 $\hat{L}^2=\hat{L}_x^2+\hat{L}_y^2+\hat{L}_z^2$ 知 $\hat{L}^2$ 亦为体系的守恒量.

从对称性考虑：L_x 与 L_y 为守恒量，说明体系对 x 轴，y 轴均

有转动不变性，这表明对与 x 轴及 y 轴有共同交点的任一轴也同样有转动不变性. 所有对称轴的共同交点正是体系的对称中心. 对通过中心的任一轴的转动均不改变体系的性质.

粒子在中心力场中的运动正是这种球对称的实例.

28. (1)、(2)、(5)中各对可对易;

(6) 只有 $\boldsymbol{a}$ 与 $\boldsymbol{n}$ 共线时，$D(a)$ 才与 $R_n(\beta)$ 对易.

29. (3) 正确，如简写为(1)，应强调是对 $\hat{H}$ 中与 r 有关的参量均应 $r\to -r$.

30. 有无穷小变换的对称变换叫连续变换. 连续变换必有一个在连续的范围内变化的参数. 有限的连续变换可看作无穷多个无穷小变换相继作用的结果.

三维空间转动中的欧拉角，时间平移中的时间 t，空间平移中的位置坐标，都是在一定区间内连续变化的参数. 这些变换都有相应的无穷小变换（本章 33 题）. 所以，它们是连续时空变换.

31. 连续变换对应的守恒量不一定有连续谱，如空间转动下的角动量.

32. (一) 空间转动：设绕任意方向（单位矢量为 $\boldsymbol{n}$）转动.

(1) 转 $\delta\theta$ 角时，无穷小变换 $\hat{R}(n,\delta\theta)=1-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\delta\theta\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L}$;

(2) 与变换对应的守恒量：角动量 $\boldsymbol{L}$;

(3) 绕 $\boldsymbol{n}$ 转 θ 角时，有限变换 $\hat{R}(n,\theta)$ 可视为 N 次转动的相继作用，每次转 $\frac{\theta}{N}$，当 $N\to\infty$ 时的结果，即

$$\hat{R}(\boldsymbol{n},\theta)=\lim_{N\to\infty}\left[1-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(\frac{\theta}{N}\right)\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L}\right]^N=\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\theta\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L}}.$$

(二) 空间平移：$\boldsymbol{r}\to\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}$.

(1) 无穷小变换 $\hat{U}(\delta a)=1-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\delta a\cdot p$;

(2) 与变换对应的守恒量：动量 p;

(3) 有限变换：$\hat{U}(a)=\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}a\cdot p}$;

(三) 时间平移：$t\to t+\tau$.

(1) 无穷小变换 $\hat{U}(\delta t)=1+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\delta t\hat{H}$;

(2) 与变换对应的守恒量：哈密顿量 $\hat{H}$(总能量);

(3) 有限变换：$\hat{U}(T)=\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\tau\hat{H}}$.

33. 宇称算符是厄米算符，守恒的厄米算符可代表守恒量，连续时空变换算符 $\hat{G}$ 不是厄米的，尽管 $[\hat{G},\hat{H}]=0$，G 不是守恒量.

正如“力学量与算符”章中证明过的，变换 $\hat{G}$ 存在生成元 $\hat{F}$，$\hat{G}$ 的生成元 $\hat{F}$ 是一个守恒的厄米算符，可作为守恒量. 例如，动量 $\hat{p}$ 即为空间平移变换算符的生成元.

34. 已知 $\psi_{nlm}\sim R_n(r)\mathrm{P}_l^m(\cos\theta)\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}$

其中，n 为主量子数，l 为角量子数，m 为磁量子数.

已知，空间反射变换 $\hat{P}$ 使 $r\to -r$. 在球坐标中，相当 $\varphi\to\pi+\varphi$，$\theta\to\pi-\theta$，

因而，$\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\to\mathrm{e}^{\mathrm{i}m(\pi+\varphi)}=(-1)^m\cdot\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}$，

$$\mathrm{P}_l^m(\cos\theta)\to\mathrm{P}_l^m(-\cos\theta)=(-1)^{l-m}\cdot\mathrm{P}_l^m(\cos\theta),$$

$$\hat{\mathrm{P}}\psi_{nlm}=(-1)^m\cdot(-1)^{l-m}\cdot\psi_{nlm}=(-1)^l\psi_{nlm}.$$

可见，波函数 ψ_{nlm} 的宇称只由角量子数 l 决定为 $(-1)^l$.

35. (1) 以上题中单粒子波函数为例，如两粒子的角量子数分别为 l_1 与 l_2，则两无关单粒子组合态的波函数为：$\psi_{n_1l_1m_1}\cdot\psi_{n_2l_2m_2}$，此系统的总宇称是两粒子的宇称的相乘 $(-1)^{l_1}(-1)^{l_2}=(-1)^{l_1+l_2}$，宇称量子数是相乘性量子数.

字称变换 ... 为总字称值将不随时间变化，即导致相乘性量子数守恒定律.

(2) 连续变换下的对称性可导致相加性量子数守恒定律. 例如，带电粒子与中性粒子波函数相对相位的不可测量性所对应的电荷规范不变性，导致电荷守恒. 电荷规范变换是一种连续变换，系统的总电荷是系统中各部分电荷之和. 因而，电荷量子数是相加性量子数.

[参阅：章乃森，《粒子物理学》上册，科学出版社，1986 年 p. 273 § 5.5.1.]

36. 因为时间只有正负两个方向. 时间各向同性，意味着在时间反转（$t\to -t$）变换下的不变性. 更确切应称为运动反演不变性. 对应的不可观测量是时间流动的方向，由于时间反转算符不是幺正的，也不是线性的，所以，时间反转对称性不导致守恒量①.

37.

物 理 量	r	t	P(动量)	$L=r\times p$	σ(自旋)	E	B
时间反转	r	$-t$	$-p$	$-L$	$-\sigma$	E	$-B$
空间反射	$-r$	t	$-p$	L	σ	$-E$	B

① 参阅：席夫，《量子力学》(中译本)，人民教育出版社，1982 年，p. 260.