# 量子力学课后习题详解

## 第一章　量子理论基础

1．1 由黑体辐射公式导出维恩位移定律：能量密度极大值所对应的波长 $\lambda_m$ 与温度 T 成反比，即

$$\lambda_m \text{ T=b（常量）；}$$

并近似计算 b 的数值，准确到二位有效数字。

解　根据普朗克的黑体辐射公式

$$\rho_v d_v = \frac{8\pi h v^3}{c^3} \cdot \frac{1}{e^{\frac{hv}{kT}} - 1} dv , \qquad (1)$$

以及

$$\lambda v = c , \qquad (2)$$

$$\rho_v dv = -\rho_v d\lambda , \qquad (3)$$

有

$$\begin{aligned} \rho_\lambda &= -\rho \frac{dv}{d\lambda} \\ &= -\rho_v(\lambda) \frac{d\left(\frac{c}{\lambda}\right)}{d\lambda} \\ &= \frac{\rho_v(\lambda)}{\lambda} \cdot c \\ &= \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1} , \end{aligned}$$

这里的 $\rho_\lambda$ 的物理意义是黑体内波长介于 λ 与 λ +d λ 之间的辐射能量密度。

本题关注的是 λ 取何值时，$\rho_\lambda$ 取得极大值，因此，就得要求 $\rho_\lambda$ 对 λ 的一阶导数为零，由此可求得相应的 λ 的值，记作 $\lambda_m$。但要注意的是，还需要验证 $\rho_\lambda$ 对 λ 的二阶导数在 $\lambda_m$ 处的取值是否小于零，如果小于零，那么前面求得的 $\lambda_m$ 就是要求的，具体如下：

$$\rho_\lambda^{'}=\frac{8\pi hc}{\lambda^6}\cdot\frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}}-1}\left(-5+\frac{hc}{\lambda kT}\cdot\frac{1}{1-e^{-\frac{hc}{\lambda kT}}}\right)=0$$

$$\Rightarrow \qquad -5+\frac{hc}{\lambda kT}\cdot\frac{1}{1-e^{-\frac{hc}{\lambda kT}}}=0$$

$$\Rightarrow \qquad 5(1-e^{-\frac{hc}{\lambda kT}})=\frac{hc}{\lambda kT}$$

如果令 x=$\frac{hc}{\lambda kT}$ ，则上述方程为

$$5(1-e^{-x})=x$$

这是一个超越方程。首先，易知此方程有解：x=0，但经过验证，此解是平庸的；另外的一个解可以通过逐步近似法或者数值计算法获得：x=4.97，经过验证，此解正是所要求的，这样则有

$$\lambda_m T=\frac{hc}{xk}$$

把 x 以及三个物理常量代入到上式便知

$$\lambda_m T=2.9\times10^{-3}m\cdot K$$

这便是维恩位移定律。据此，我们知识物体温度升高的话，辐射的能量分布的峰值向较短波长方面移动，这样便会根据热物体（如遥远星体）的发光颜色来判定温度的高低。

1．2 在 0K 附近，钠的价电子能量约为 3eV，求其德布罗意波长。

解　根据德布罗意波粒二象性的关系，可知

E=hv，

$$P=\frac{h}{\lambda}$$

如果所考虑的粒子是非相对论性的电子（$E_{动}<<\mu_e c^2$），那么

$$E=\frac{p^2}{2\mu_e}$$

如果我们考察的是相对性的光子，那么

E=pc

注意到本题所考虑的钠的价电子的动能仅为 3eV，远远小于电子的质量与光速平方的乘积，即$0.51\times10^6 eV$，因此利用非相对论性的电子的能量——动量关系式，这样，便有

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

$$= \frac{h}{\sqrt{2\mu_e E}}$$
$$= \frac{hc}{\sqrt{2\mu_e c^2 E}}$$
$$= \frac{1.24\times10^{-6}}{\sqrt{2\times0.51\times10^6\times3}}m$$
$$= 0.71\times10^{-9}m$$
$$= 0.71nm$$

在这里，利用了

$$hc = 1.24\times10^{-6}eV\cdot m$$

以及

$$\mu_e c^2 = 0.51\times10^6 eV$$

最后，对

$$\lambda = \frac{hc}{\sqrt{2\mu_e c^2 E}}$$

作一点讨论，从上式可以看出，当粒子的质量越大时，这个粒子的波长就越短，因而这个粒子的波动性较弱，而粒子性较强；同样的，当粒子的动能越大时，这个粒子的波长就越短，因而这个粒子的波动性较弱，而粒子性较强，由于宏观世界的物体质量普遍很大，因而波动性极弱，显现出来的都是粒子性，这种波粒二象性，从某种子意义来说，只有在微观世界才能显现。

1．3 氦原子的动能是 $E=\frac{3}{2}kT$（k 为玻耳兹曼常数），求 T=1K 时，氦原子的德布罗意波长。

解　根据

$$1k\cdot K = 10^{-3}eV,$$

知本题的氦原子的动能为

$$E=\frac{3}{2}kT=\frac{3}{2}k\cdot K=1.5\times10^{-3}eV,$$

显然远远小于 $\mu_{核}c^2$ 这样，便有

$$\lambda = \frac{hc}{\sqrt{2\mu_{核}c^2 E}}$$

$$=\frac{1.24\times10^{-6}}{\sqrt{2\times3.7\times10^{9}\times1.5\times10^{-3}}}m$$
$$=0.37\times10^{-9}m$$
$$=0.37nm$$

这里，利用了

$$\mu_{核}c^2=4\times931\times10^6eV=3.7\times10^9eV$$

最后，再对德布罗意波长与温度的关系作一点讨论，由某种粒子构成的温度为 T 的体系，其中粒子的平均动能的数量级为 kT，这样，其相庆的德布罗意波长就为

$$\lambda=\frac{hc}{\sqrt{2\mu c^2E}}=\frac{hc}{\sqrt{2\mu kc^2T}}$$

据此可知，当体系的温度越低，相应的德布罗意波长就越长，这时这种粒子的波动性就越明显，特别是当波长长到比粒子间的平均距离还长时，粒子间的相干性就尤为明显，因此这时就能用经典的描述粒子统计分布的玻耳兹曼分布，而必须用量子的描述粒子的统计分布——玻色分布或费米公布。

1．4 利用玻尔——索末菲的量子化条件，求：

（1）一维谐振子的能量；

（2）在均匀磁场中作圆周运动的电子轨道的可能半径。

已知外磁场 H=10T，玻尔磁子 $M_B=9\times10^{-24}J\cdot T^{-1}$，试计算运能的量子化间隔△E，并与 T=4K 及 T=100K 的热运动能量相比较。

解　玻尔——索末菲的量子化条件为

$$\oint pdq=nh$$

其中 q 是微观粒子的一个广义坐标，p 是与之相对应的广义动量，回路积分是沿运动轨道积一圈，n 是正整数。

（1）设一维谐振子的劲度常数为 k，谐振子质量为 μ，于是有

$$E=\frac{p^2}{2\mu}+\frac{1}{2}kx^2$$

这样，便有

$$p=\pm\sqrt{2\mu(E-\frac{1}{2}kx^2)}$$

这里的正负号分别表示谐振子沿着正方向运动和沿着负方向运动，一正一负正好表示一个来回，运动了一圈。此外，根据

$$E=\frac{1}{2}kx^2$$

可解出

$$x_{\pm}=\pm\sqrt{\frac{2E}{k}}$$

这表示谐振子的正负方向的最大位移。这样，根据玻尔——索末菲的量子化条件，有

$$\int_{x_-}^{x_+}\sqrt{2\mu(E-\frac{1}{2}kx^2)}dx+\int_{x_+}^{x_-}(-)\sqrt{2\mu(E-\frac{1}{2}kx^2)}dx=nh$$

$$\Rightarrow \qquad \int_{x_-}^{x+}\sqrt{2\mu(E-\frac{1}{2}kx^2)}dx+\int_{x_-}^{x_+}\sqrt{2\mu(E-\frac{1}{2}kx^2)}dx=nh$$

$$\Rightarrow \qquad \int_{x_-}^{x_+}\sqrt{2\mu(E-\frac{1}{2}kx^2)}dx=\frac{n}{2}h$$

为了积分上述方程的左边，作以下变量代换；

$$x=\sqrt{\frac{2E}{k}}\sin\theta$$

这样，便有

$$\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\sqrt{2\mu E\cos^2\theta}d\left(\sqrt{\frac{2E}{k}}\sin\theta\right)=\frac{n}{2}h$$

$$\Rightarrow \qquad \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}\sqrt{2\mu E}\cos\theta\cdot\sqrt{\frac{2E}{k}}\cos\theta d\theta=\frac{n}{2}h$$

$$\Rightarrow \qquad \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}2E\cdot\sqrt{\frac{\mu}{k}}\cos^2\theta d\theta=\frac{n}{2}h$$

这时，令上式左边的积分为 A，此外再构造一个积分

$$B=\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}2E\cdot\sqrt{\frac{\mu}{k}}\sin^2\theta d\theta$$

这样，便有

$$\begin{aligned}A+B&=\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}2E\cdot\sqrt{\frac{\mu}{k}}d\theta=2E\pi\cdot\sqrt{\frac{\mu}{k}},\\ A-B&=\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}2E\cdot\sqrt{\frac{\mu}{k}}\cos 2\theta d\theta\\ &=\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}E\sqrt{\frac{\mu}{k}}\cos 2\theta d(2\theta)\\ &=\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}}E\sqrt{\frac{\varpi}{k}}\cos\varphi d\varphi,\end{aligned} \qquad (1)$$

这里$\varphi$ =2 θ，这样，就有

$$A-B=\int_{-\pi}^{\pi}E\sqrt{\frac{\mu}{k}}d\sin\varphi=0 \qquad (2)$$

根据式（1）和（2），便有

$$A = E\pi\sqrt{\frac{\mu}{k}}$$

这样，便有

$$E\pi\sqrt{\frac{\mu}{k}} = \frac{n}{2}h$$

$$\Rightarrow \qquad E = \frac{n}{2\pi}h\sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$= nh\sqrt{\frac{\kappa}{m}},$$

其中 $h = \dfrac{h}{2\pi}$

最后，对此解作一点讨论。首先，注意到谐振子的能量被量子化了；其次，这量子化的能量是等间隔分布的。

（2）当电子在均匀磁场中作圆周运动时，有

$$\mu\frac{\upsilon^2}{R} = q\upsilon B$$

$$\Rightarrow \qquad p = \mu\upsilon = qBR$$

这时，玻尔——索末菲的量子化条件就为

$$\int_0^{2\pi} qBRd(R\theta) = nh$$

$$\Rightarrow \qquad qBR^2 \cdot 2\pi = nh$$

$$\Rightarrow \qquad qBR^2 = nh$$

又因为动能耐 $E = \dfrac{p^2}{2\mu}$，所以，有

$$E = \frac{(qBR)^2}{2\mu} = \frac{q^2B^2R^2}{2\mu}$$

$$= \frac{qBn\hbar}{2\mu} = nB\cdot\frac{q\hbar}{2\mu}$$

$$= nBN_B,$$

其中，$M_B = \dfrac{q\hbar}{2\mu}$ 是玻尔磁子，这样，发现量子化的能量也是等间隔的，而且

$$\Delta E = BM_B$$

具体到本题，有

$$\Delta E = 10 \times 9 \times 10^{-24} J = 9 \times 10^{-23} J$$

根据动能与温度的关系式

$$E = \frac{3}{2} kT$$

以及

$$1k \cdot K = 10^{-3} eV = 1.6 \times 10^{-22} J$$

可知，当温度 T=4K 时，

$$E = 1.5 \times 4 \times 1.6 \times 10^{-22} J = 9.6 \times 10^{-22} J$$

当温度 T=100K 时，

$$E = 1.5 \times 100 \times 1.6 \times 10^{-22} J = 2.4 \times 10^{-20} J$$

显然，两种情况下的热运动所对应的能量要大于前面的量子化的能量的间隔。

1．5 两个光子在一定条件下可以转化为正负电子对，如果两光子的能量相等，问要实现实种转化，光子的波长最大是多少？

解　关于两个光子转化为正负电子对的动力学过程，如两个光子以怎样的概率转化为正负电子对的问题，严格来说，需要用到相对性量子场论的知识去计算，修正当涉及到这个过程的运动学方面，如能量守恒，动量守恒等，我们不需要用那么高深的知识去计算，具休到本题，两个光子能量相等，因此当对心碰撞时，转化为正负电子对反需的能量最小，因而所对应的波长也就最长，而且，有

$$E = hv = \mu_e c^2$$

此外，还有

$$E = pc = \frac{hc}{\lambda}$$

于是，有

$$\frac{hc}{\lambda} = \mu_e c^2$$

$$\Rightarrow \quad \lambda = \frac{hc}{\mu_e c^2}$$

$$= \frac{1.24 \times 10^{-6}}{0.51 \times 10^{6}} m$$

$$= 2.4 \times 10^{-12} m$$

$$= 2.4 \times 10^{-3} nm$$

尽管这是光子转化为电子的最大波长，但从数值上看，也是相当小的，我们知道，电子是自然界中最轻的有质量的粒子，如果是光子转化为像正反质子对之

类的更大质量的粒子，那么所对应的光子的最大波长将会更小，这从某种意义上告诉我们，当涉及到粒子的衰变，产生，转化等问题，一般所需的能量是很大的。能量越大，粒子间的转化等现象就越丰富，这样，也许就能发现新粒子，这便是世界上在造越来越高能的加速器的原因：期待发现新现象，新粒子，新物理。

# 第二章波 函数和薛定谔方程

2.1 证明在定态中，几率流与时间无关。

证：对于定态，可令

$$\Psi(\vec{\mathrm{r}},\ \mathrm{t})=\psi(\vec{\mathrm{r}})\mathrm{f}(\mathrm{t})$$

$$=\psi(\vec{\mathrm{r}})\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathrm{Et}}$$

$$\vec{\mathrm{J}}=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2\mathrm{m}}(\Psi\nabla\Psi^{*}-\Psi^{*}\nabla\Psi)$$

$$=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2\mathrm{m}}[\psi(\vec{\mathrm{r}})\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathrm{Et}}\nabla\ (\psi(\vec{\mathrm{r}})\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathrm{Et}})^{*}-\psi^{*}(\vec{\mathrm{r}})\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathrm{Et}}\nabla\ (\psi(\vec{\mathrm{r}})\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathrm{Et}})]$$

$$=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2\mathrm{m}}[\psi(\vec{\mathrm{r}})\nabla\psi^{*}(\vec{\mathrm{r}})-\psi^{*}(\vec{\mathrm{r}})\nabla\psi(\vec{\mathrm{r}})]$$

可见$\vec{J}$与$t$无关。

2.2 由下列定态波函数计算几率流密度：

$$(1)\psi_1=\frac{1}{r}e^{ikr}\qquad(2)\psi_2=\frac{1}{r}e^{-ikr}$$

从所得结果说明$\psi_1$表示向外传播的球面波，$\psi_2$表示向内(即向原点) 传播的球面波。

解：$\vec{J}_1$和$\vec{J}_2$只有$r$分量

在球坐标中 $\nabla=\vec{\mathrm{r}}_0\frac{\partial}{\partial\mathrm{r}}+\vec{\mathrm{e}}_\theta\frac{1}{\mathrm{r}}\frac{\partial}{\partial\theta}+\vec{\mathrm{e}}_\varphi\frac{1}{\mathrm{r}\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}$

(1) $\vec{J}_1 = \frac{i\hbar}{2m}(\psi_1 \nabla \psi_1^* - \psi_1^* \nabla \psi_1)$

$= \frac{i\hbar}{2m}[\frac{1}{r}e^{ikr}\frac{\partial}{\partial r}(\frac{1}{r}e^{-ikr}) - \frac{1}{r}e^{-ikr}\frac{\partial}{\partial r}(\frac{1}{r}e^{ikr})]\vec{r}_0$

$= \frac{i\hbar}{2m}[\frac{1}{r}(-\frac{1}{r^2} - ik\frac{1}{r}) - \frac{1}{r}(-\frac{1}{r^2} + ik\frac{1}{r})]\vec{r}_0$

$= \frac{\hbar k}{mr^2}\vec{r}_0 = \frac{\hbar k}{mr^3}\vec{r}$

$\vec{J}_1$与$\vec{r}$ 同向。表示向外传播的球面波。

(2) $\vec{J}_2 = \frac{i\hbar}{2m}(\psi_2 \nabla \psi_2^* - \psi_2^* \nabla \psi)$

$= \frac{i\hbar}{2m}[\frac{1}{r}e^{-ikr}\frac{\partial}{\partial r}(\frac{1}{r}e^{ikr}) - \frac{1}{r}e^{ikr}\frac{\partial}{\partial r}(\frac{1}{r}e^{-ikr})]\vec{r}_0$

$= \frac{i\hbar}{2m}[\frac{1}{r}(-\frac{1}{r^2} + ik\frac{1}{r}) - \frac{1}{r}(-\frac{1}{r^2} - ik\frac{1}{r})]\vec{r}_0$

$= -\frac{\hbar k}{mr^2}\vec{r}_0 = -\frac{\hbar k}{mr^3}\vec{r}$

可见，$\vec{J}_2$与$\vec{r}$ 反向。表示向内(即向原点) 传播的球面波。

补充：设$\psi(x) = e^{ikx}$，粒子的位置几率分布如何？这个波函数能否归一化？

$\because \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} dx = \infty$

∴波函数不能按$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$方式归一化。

其相对位置几率分布函数为

$\omega = |\psi|^2 = 1$表示粒子在空间各处出现的几率相同。

2.3 一粒子在一维势场

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

中运动，求粒子的能级和对应的波函数。

解：$U(x)$与$t$无关，是定态问题。其定态 S—方程

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

在各区域的具体形式为

Ⅰ： $x<0$ $\quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_1(x)+U(x)\psi_1(x)=E\psi_1(x)$ ①

Ⅱ： $0\le x\le a$ $\quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_2(x)=E\psi_2(x)$ ②

Ⅲ： $x>a$ $\quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_3(x)+U(x)\psi_3(x)=E\psi_3(x)$ ③

由于(1)、(3)方程中，由于$U(x)=\infty$，要等式成立，必须

$$\psi_1(x)=0$$

$$\psi_2(x)=0$$

即粒子不能运动到势阱以外的地方去。

方程(2)可变为$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi_2(x)=0$

令$k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$，得

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2}+k^2\psi_2(x)=0$$

其解为 $\psi_2(x)=A\sin kx+B\cos kx$ ④

根据波函数的标准条件确定系数 A，B，由连续性条件，得

$$\psi_2(0)=\psi_1(0)$$ ⑤

$$\psi_2(a)=\psi_3(a)$$ ⑥

⑤ $\Rightarrow B=0$

⑥ $\Rightarrow A\sin ka=0$

$\because A\neq 0$

$\therefore \sin ka=0$

$\Rightarrow ka=n\pi \quad (n=1,2,3,\cdots)$

$$\therefore \psi_2(x)=A\sin\frac{n\pi}{a}x$$

由归一化条件

$$\int_{\infty}|\psi(x)|^2 dx = 1$$

得 $$A^2\int_0^a \sin^2\frac{n\pi}{a}xdx = 1$$

由 $$\int_b^a \sin\frac{m\pi}{a}x * \sin\frac{n\pi}{a}xdx = \frac{a}{2}\delta_{mn}$$

$$\Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

$$\therefore \psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x$$

$$\because k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\Rightarrow E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2 \qquad (n = 1,2,3,\cdots)$$ 可见 E 是量子化的。

对应于 $E_n$ 的归一化的定态波函数为

$$\psi_n(x,t) = \begin{cases}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}xe^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}, & 0 \le x \le a \\ 0, & x < a, \quad x > a\end{cases}$$

#

2.4. 证明（2.6-14）式中的归一化常数是 $A' = \frac{1}{\sqrt{a}}$

证： $$\psi_n = \begin{cases}A'\sin\frac{n\pi}{a}(x+a), & |x| < a \\ 0, & |x| \ge a\end{cases}$$

（2.6-14）

由归一化，得

$$1=\int_{\infty}|\psi_n|^2dx=\int_{-a}^{a}A'^2\sin^2\frac{n\pi}{a}(x+a)dx$$

$$=A'^2\int_{-a}^{a}\frac{1}{2}[1-\cos\frac{n\pi}{a}(x+a)]dx$$

$$=\frac{A'^2}{2}x\Big|_{-a}^{a}-\frac{A'^2}{2}\int_{-a}^{a}\cos\frac{n\pi}{a}(x+a)dx$$

$$=A'^2a-\frac{A'^2}{2}\cdot\frac{a}{n\pi}\sin\ \frac{n\pi}{a}(x+a)\Big|_{-a}^{a}$$

$$=A'^2a$$

∴归一化常数 $A'=\frac{1}{\sqrt{a}}$ #

2.5 求一维谐振子处在激发态时几率最大的位置。

解：$\psi(x)=\sqrt{\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}}\cdot 2\alpha x e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$

$$\omega_1(x)=|\psi_1(x)|^2=4\alpha^2\cdot\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}\cdot x^2e^{-\alpha^2x^2}$$

$$=\frac{2\alpha^3}{\sqrt{\pi}}\cdot x^2e^{-\alpha^2x^2}$$

$$\frac{d\omega_1(x)}{dx}=\frac{2\alpha^3}{\sqrt{\pi}}[2x-2\alpha^2x^3]e^{-\alpha^2x^2}$$

令 $\frac{d\omega_1(x)}{dx}=0$，得

$$x=0\qquad x=\pm\frac{1}{\alpha}\qquad x=\pm\infty$$

由 $\omega_1(x)$ 的表达式可知，$x=0$，$x=\pm\infty$ 时，$\omega_1(x)=0$。显然不是最大几率的位置。

而 $\frac{d^2\omega_1(x)}{dx^2}=\frac{2\alpha^3}{\sqrt{\pi}}[(2-6\alpha^2x^2)-2\alpha^2x(2x-2\alpha^2x^3)]e^{-\alpha^2x^2}$

$$=\frac{4\alpha^3}{\sqrt{\pi}}[(1-5\alpha^2x^2-2\alpha^4x^4)]e^{-\alpha^2x^2}$$

$$\frac{d^2\omega_1(x)}{dx^2}\Big|_{x=\pm\frac{1}{2}}=-2\frac{4\alpha^3}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{e}<0$$

可见 $x=\pm\frac{1}{\alpha}=\pm\sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}$ 是所求几率最大的位置。 #

2.6　在一维势场中运动的粒子，势能对原点对称：$U(-x)=U(x)$，证明粒子的定态波函数具有确定的宇称。

证：在一维势场中运动的粒子的定态 S-方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)+U(x)\psi(x)=E\psi(x) \qquad ①$$

将式中的$x$以$(-x)$代换，得

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2}\psi(-x)+U(-x)\psi(-x)=E\psi(-x) \qquad ②$$

利用$U(-x)=U(x)$，得

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2}\psi(-x)+U(x)\psi(-x)=E\psi(-x) \qquad ③$$

比较①、③式可知，$\psi(-x)$和$\psi(x)$都是描写在同一势场作用下的粒子状态的波函数。由于它们描写的是同一个状态，因此$\psi(-x)$和$\psi(x)$之间只能相差一个常数$c$。方程①、③可相互进行空间反演 $(x\leftrightarrow -x)$而得其对方，由①经$x\to -x$反演，可得③，

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

④

由③再经$-x\to x$反演，可得①，反演步骤与上完全相同，即是完全等价的。

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

⑤

④乘 ⑤，得

$$\psi(\mathrm{x})\psi(-\mathrm{x})=\mathrm{c}^2\psi(\mathrm{x})\psi(-\mathrm{x})$$

可见，$\boldsymbol{c^2=1}$

$$c=\pm 1$$

当$c=+1$时，　$\psi(-\mathrm{x})=\psi(\mathrm{x})$，$\Rightarrow\psi(x)$具有偶宇称，

当$c=-1$时，　$\psi(-x)=-\psi(x)$，$\Rightarrow\psi(x)$具有奇宇称，

当势场满足 $U(-x)=U(x)$时，粒子的定态波函数具有确定的宇称。#

2.7　一粒子在一维势阱中

$$U(x)=\begin{cases}U_0>0, & |x|>a\\ 0, & |x|\le a\end{cases}$$

运动，求束缚态$(0<E<U_0)$的能级所满足的方程。

解法一：粒子所满足的 S-方程为

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

按势能$U(x)$的形式分区域的具体形式为

$$\text{Ⅰ}:\quad -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{dx}^2}\psi_1(\mathrm{x})+\mathrm{U}_0\psi_1(\mathrm{x})=\mathrm{E}\psi_1(\mathrm{x}) \qquad -\infty<x<a$$

①

$$\text{Ⅱ}:\quad -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2}\psi_2(x)=E\psi_2(x) \qquad -a\le x\le a$$

②

$$\text{Ⅲ}:\quad -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{dx}^2}\psi_3(\mathrm{x})+\mathrm{U}_0\psi_3(\mathrm{x})=\mathrm{E}\psi_3(\mathrm{x}) \qquad a<x<\infty$$

③

整理后，得

$$\text{Ⅰ}:\quad \psi_1''-\frac{2\mu(U_0-E)}{\hbar^2}\psi_1=0 \qquad ④$$

$$\text{Ⅱ}:\ .\quad \psi_2''+\frac{2\mu\,\mathrm{E}}{\hbar^2}\psi_2=0 \qquad ⑤$$

$$\text{Ⅲ}:\quad \psi_3''-\frac{2\mu(U_0-E)}{\hbar^2}\psi_3=0 \qquad ⑥$$

令 $k_1^2=\dfrac{2\mu(U_0-E)}{\hbar^2}$　　$k_2^2=\dfrac{2\mu E}{\hbar^2}$

则

$$\text{Ⅰ}:\quad \psi_1''-k_1^2\psi_1=0 \qquad ⑦$$

$$\text{Ⅱ}:\ .\quad \psi_2''-k_2^2\psi_2=0 \qquad ⑧$$

$$\text{Ⅲ}:\quad \psi_3''-k_1^2\psi_1=0 \qquad ⑨$$

各方程的解为

$$\psi_1 = \mathrm{A}e^{-k_1 x} + \mathrm{B}e^{k_1 x}$$
$$\psi_2 = \mathrm{C}\sin k_2 x + \mathrm{D}\cos k_2 x$$
$$\psi_3 = \mathrm{E}e^{+k_1 x} + \mathrm{F}e^{-k_1 x}$$

由波函数的有限性，有

$$\psi_1(-\infty)\text{有限} \quad \Rightarrow A = 0$$
$$\psi_3(\infty)\text{有限} \quad \Rightarrow E = 0$$

因此

$$\psi_1 = \mathrm{B}e^{k_1 x}$$
$$\psi_3 = \mathrm{F}e^{-k_1 x}$$

由波函数的连续性，有

$$\psi_1(-a) = \psi_2(-a), \Rightarrow \mathrm{B}e^{-k_1 a} = -\mathrm{C}\sin k_2 a + \mathrm{D}\cos k_2 a \qquad (10)$$
$$\psi_1'(-a) = \psi_2'(-a), \Rightarrow k_1 \mathrm{B}e^{-k_1 a} = k_2 \mathrm{C}\cos k_2 a + k_2 \mathrm{D}\sin k_2 a \qquad (11)$$
$$\psi_2(a) = \psi_3(a), \Rightarrow \mathrm{C}\sin k_2 a + \mathrm{D}\cos k_2 a = \mathrm{F}e^{-k_1 a} \qquad (12)$$
$$\psi_2'(a) = \psi_3'(a), \Rightarrow k_2 \mathrm{C}\cos k_2 a - k_2 \mathrm{D}\sin k_2 a = -k_1 \mathrm{F}e^{-k_1 a} \qquad (13)$$

整理(10)、(11)、(12)、(13)式，并合并成方程组，得

$$e^{-k_1 a}\mathrm{B} + \sin k_2 a\mathrm{C} - \cos k_2 a\mathrm{D} + 0 = 0$$
$$k_1 e^{-k_1 a}\mathrm{B} - k_2 \cos k_2 a\mathrm{C} - k_2 \sin k_2 a\,\mathrm{D} + 0 = 0$$
$$0 + \sin k_2 a\mathrm{C} + \cos k_2 a\mathrm{D} - e^{-k_1 a}\mathrm{F} = 0$$
$$0 + k_2 \cos k_2 a\mathrm{C} - k_2 \sin k_2 a\mathrm{D} + k_1 e^{-k_1 a}\mathrm{F} = 0$$

解此方程即可得出 B、C、D、F，进而得出波函数的具体形式，要方程组有非零解，必须

$$\begin{vmatrix} e^{-k_1 a} & \sin k_2 a & -\cos k_2 a & 0 \\ k_1 e^{-k_1 a} & -k_2 \cos k_2 a & -k_2 \sin k_2 a & 0 \\ 0 & \sin k_2 a & \cos k_2 a & e^{-k_1 a} \\ 0 & k_2 \cos k_2 a & -k_2 \sin k_2 a & k_1 \mathrm{B}e^{-k_1 a} \end{vmatrix} = 0$$

$$0 = e^{-k_1 a}\begin{vmatrix} -k_2\cos k_2 a & -k_2\sin k_2 a & 0 \\ \sin k_2 a & \cos k_2 a & -e^{-k_1 a} \\ k_2\cos k_2 a & -k_2\sin k_2 a & k_1 e^{-k_1 a} \end{vmatrix} -$$

$$-k_1 e^{-k_1 a}\begin{vmatrix} \sin k_2 a & -\cos k_2 a & 0 \\ \sin k_2 a & \cos k_2 a & -e^{-k_1 a} \\ k_2\cos k_2 a & -k_2\sin k_2 a & k_1 e^{-k_1 a} \end{vmatrix} =$$

$$= e^{-k_1 a}[-k_1 k_2 e^{-k_1 a}\cos^2 k_2 a + k_2^2 e^{-k_1 a}\sin k_2 a\cos k_2 a +$$
$$+ k_1 k_2 e^{-k_1 a}\sin^2 k_2 a + k_2^2 e^{-k_1 a}\sin k_2 a\cos k_2 a] -$$
$$- k_1 e^{-k_1 a}[k_1 e^{-k_1 a}\sin k_2 a\cos k_2 a + k_2 e^{-k_1 a}\cos^2 k_2 a +$$
$$+ k_1 e^{-k_1 a}\sin k_2 a\cos k_2 a - k_2 e^{-k_1 a}\sin^2 k_2 a]$$
$$= e^{-2k_1 a}[-2k_1 k_2\cos 2k_2 a + k_2^2\sin 2k_2 a - k_1^{\,2}\sin 2k_2 a]$$
$$= e^{-2k_1 a}[(k_2^2 - k_1^2)\sin 2k_2 a - 2k_1 k_2\cos 2k_2 a]$$

$\because \quad e^{-2k_1 a} \neq 0$

$$\therefore (k_2^2 - k_1^2)\sin 2k_2 a - 2k_1 k_2\cos 2k_2 a = 0$$

即 $(k_2^2 - k_1^2)tg2k_2 a - 2k_1 k_2 = 0$ 为所求束缚态能级所满足的方程。#

解法二：接（13）式

$$-C\sin k_2 a + D\cos k_2 a = \frac{k_2}{k_1}C\cos k_2 a + \frac{k_2}{k_1}D\sin k_2 a$$

$$C\sin k_2 a + D\cos k_2 a = -\frac{k_2}{k_1}C\cos k_2 a + \frac{k_2}{k_1}D\sin k_2 a$$

$$\begin{vmatrix} \frac{k_2}{k_1}\cos k_2 a+\sin k_2 a & \frac{k_2}{k_1}\sin k_2 a-\cos k_2 a \\ \frac{k_2}{k_1}\cos k_2 a+\sin k_2 a & -(\frac{k_2}{k_1}\sin k_2 a-\cos k_2 a) \end{vmatrix}=0$$

$$-(\frac{k_2}{k_1}\cos k_2 a+\sin k_2 a)(\frac{k_2}{k_1}\sin k_2 a-\cos k_2 a)$$

$$-(\frac{k_2}{k_1}\cos k_2 a+\sin k_2 a)(\frac{k_2}{k_1}\sin k_2 a-\cos k_2 a)=0$$

$$(\frac{k_2}{k_1}\cos k_2 a+\sin k_2 a)(\frac{k_2}{k_1}\sin k_2 a-\cos k_2 a)=0$$

$$\frac{k_2^2}{k_1^2}\sin k_2 a\cos k_2 a+\frac{k_2}{k_1}\sin^2 k_2 a-\frac{k_2}{k_1}\cos^2 k_2 a-\sin k_2 a\cos k_2 a=0$$

$$(-1+\frac{k_2^2}{k_1^2})\sin 2k_2 a-\frac{2k_2}{k_1}\cos 2k_2 a=0$$

$$(k_2^2-k_1^2)\sin 2k_2 a-2k_1 k_2\cos 2k_2 a=0$$

#

解法三：

$$(11)-(13)\Rightarrow 2k_2 D\sin k_2 a=k_1 e^{-k_1 a}(B+F)$$

$$(10)+(12)\Rightarrow 2D\cos k_2 a=e^{-k_1 a}(B+F)$$

$$\frac{(11)-(13)}{(10)+(12)}\Rightarrow k_2 tgk_2 a=k_1 \qquad (a)$$

$$(11)+(13)\Rightarrow 2k_2 C\cos k_2 a=-k_1(F-B)e^{-ik_1 a}$$

$$(12)-(10)\Rightarrow 2C\sin k_2 a=(F-B)e^{-ik_1 a}$$

$$\frac{(11)+(13)}{(12)-(10)}\Rightarrow k_2 ctgk_2 a=-k_1$$

令 $\xi=k_2 a$，$\eta=k_2 a$，则

$$\xi\,tg\xi=\eta \qquad (c)$$

或

$$\xi\,ctg\xi=-\eta \qquad (d)$$

$$\xi^2+\eta^2=(k_1^2+k_2^2)=\frac{2\mu U_0 a^2}{\hbar^2} \qquad (f)$$

合并(a)、(b)：

$$tg2k_2a=\frac{2k_1k_2}{k_2^2-k_1^2}$$ 利用 $\mathrm{tg2k_2a}=\frac{2\mathrm{tgk_2a}}{1-\mathrm{tg^2k_2a}}$

#

解法四：（最简方法-平移坐标轴法）

Ⅰ：$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi_1''+U_0\psi_1=E\psi_1$ （x≤0）

Ⅱ：$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi_2''=E\psi_2$ （0＜x＜2a）

Ⅲ：$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi_3''+U_0\psi_3=E\psi_3$ （x≥2a）

$$\Rightarrow\begin{cases}\psi_1''-\frac{2\mu(U_0-E)}{\hbar^2}\psi_1=0\\ \psi_2''+\frac{2\mu E}{\hbar^2}\psi_2=0\\ \psi_3''-\frac{2\mu(U_0-E)}{\hbar^2}\psi_3=0\end{cases}$$

$$\begin{cases}\psi_1''-\mathrm{k_1^2}\psi_1=0 & (1)\\ \psi_2''+\mathrm{k_2^2}\psi_2=0 & (2)\\ \psi_3''-\mathrm{k_1^2}\psi_3=0 & (3)\end{cases}\qquad \mathrm{k_1^2}=2\mu(\mathrm{U_0-E})/\hbar^2,\quad \mathrm{k_2^2}=2\mu\mathrm{E}/\hbar^2$$

束缚态 $0<E<U_0$

$$\psi_1=Ae^{+k_1x}+Be^{-k_1x}$$
$$\psi_2=C\sin k_2x+D\cos k_2x$$
$$\psi_3=Ee^{+k_1x}+Fe^{-k_1x}$$

$\psi_1(-\infty)$有限 $\Rightarrow B=0$

$\psi_3(\infty)$有限 $\Rightarrow E=0$

因此

$$\therefore\psi_1=Ae^{k_1x}$$
$$\psi_3=Fe^{-k_1x}$$

由波函数的连续性，有

$$\psi_1(0)=\psi_2(0),\Rightarrow \mathrm{A=D} \qquad (4)$$
$$\psi_1'(0)=\psi_2'(0),\Rightarrow \mathrm{k_1A=k_2C} \qquad (5)$$
$$\psi_2'(2\mathrm{a})=\psi_3'(2\mathrm{a}),\Rightarrow \mathrm{k_2C\cos 2k_2a-k_2D\sin 2k_2a=-k_1Fe^{-2k_1a}} \qquad (6)$$
$$\psi_2(2\mathrm{a})=\psi_3(2\mathrm{a}),\Rightarrow \mathrm{C\sin 2k_2a+D\cos 2k_2a=Fe^{-2k_1a}} \qquad (7)$$

(7)代入(6)

$$\boldsymbol{C\sin 2k_2a + D\cos 2k_2a = -\frac{k_2}{k_1}C\cos 2k_2a + \frac{k_2}{k_1}D\sin 2k_2a}$$

利用(4)、(5)，得

$$\frac{k_1}{k_2}A\sin 2k_2a + A\cos 2k_2a = -A\cos 2k_2a + \frac{k_2}{k_1}D\sin 2k_2a$$

$$A[(\frac{k_1}{k_2} - \frac{k_2}{k_1})\sin 2k_2a + 2\cos 2k_2a] = 0$$

$$\because A \neq 0$$

$$\therefore (\frac{k_1}{k_2} - \frac{k_2}{k_1})\sin 2k_2a + 2\cos 2k_2a = 0$$

两边乘上$(-k_1k_2)$即得

$$(k_2^2 - k_1^2)\sin 2k_2a - 2k_1k_2\cos 2k_2a = 0$$

#

2.8 分子间的范德瓦耳斯力所产生的势能可以近似表示为

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 \quad , \\ U_0, & 0 \le x < a, \\ -U_1, & a \le x \le b, \\ 0, & b < x \quad , \end{cases}$$

求束缚态的能级所满足的方程。

解：势能曲线如图示，分成四个区域求解。

定态 S-方程为

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

对各区域的具体形式为

$$\text{Ⅰ}：\ -\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi_1'' + U(x)\psi_1 = E\psi_1 \qquad (x < 0)$$

$$\text{Ⅱ}：\ -\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi_2'' + U_0\psi_2 = E\psi_2 \qquad (0 \le x < a)$$

$$\text{Ⅲ}：\ -\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi_3'' - U_1\psi_3 = E\psi_3 \qquad (a \le x \le b)$$

$$\text{Ⅳ}：\ -\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi_4'' + 0 = E\psi_4 \qquad (b < x)$$

对于区域Ⅰ，$U(x)=\infty$，粒子不可能到达此区域，故

$$\psi_1(x)=0$$

而 ．$\psi_2''-\frac{2\mu(U_0-E)}{\hbar^2}\psi_2=0$ ①

$$\psi_3''+\frac{2\mu(U_1+E)}{\hbar^2}\psi_3=0 \quad ②$$

$$\psi_4''+\frac{2\mu E}{\hbar^2}\psi_4=0 \quad ③$$

对于束缚态来说，有$-U<E<0$

$\therefore\ \psi_2''-k_1^2\psi_2=0$ $\quad k_1^2=\frac{2\mu(U_0-E)}{\hbar^2}$ ④

$\psi_3''+k_3^2\psi_3=0$ $\quad k_3^2=\frac{2\mu(U_1+E)}{\hbar^2}$ ⑤

$\psi_4''+k_4^2\psi_4=0$ $\quad k_4^2=-2\mu E/\hbar^2$ ⑥

各方程的解分别为

$\psi_2=Ae^{k_1x}+Be^{-k_1x}$

$\psi_3=C\sin k_2x+D\cos k_2x$

$\psi_4=Ee^{+k_3x}+Fe^{-k_3x}$

由波函数的有限性，得

$\psi_4(\infty)$有限，$\Rightarrow E=0$

$$\therefore\ \psi_4=Fe^{-k_3x}$$

由波函数及其一阶导数的连续，得

$\psi_1(0)=\psi_2(0)\ \Rightarrow B=-A$

$$\therefore\ \psi_2=A(e^{k_3x}-e^{-k_3x})$$

$\psi_2(a)=\psi_3(a)\Rightarrow A(e^{k_3x}-e^{-k_3x})=C\sin k_2a+D\cos k_2a$ ⑦

$\psi_3'(a)=\psi_3'(a)\Rightarrow Ak_1(e^{k_3a}+e^{-k_3a})=Ck_2\cos k_2a-Dk_2\sin k_2a$ ⑧

$\psi_3(b)=\psi_4(b)\Rightarrow C\sin k_2b+D\cos k_2b=Fe^{-k_3b}$

⑨

$\psi_3'(b)=\psi_4'(b)\Rightarrow Ck_2\sin k_2b-Dk_2\cos k_2b=-Fk_3e^{-k_3b}$ ⑩

由⑦、⑧，得 $\frac{k_1}{k_2}\frac{e^{k_1a}+e^{-k_1a}}{e^{k_1a}-e^{-k_1a}}=\frac{C\cos k_2a-D\cos k_2a}{C\sin k_2a+D\cos k_2a}$ (11)

由 ⑨、⑩得 $(k_2\cos k_2b)C-(k_2\sin k_2b)D=(-k_3\sin k_2b)C-(k_3\cos k_2b)D$

$$(\frac{k_2}{k_3}\cos k_2b+\sin k_2b)C=(-\frac{k_2}{k_3}\cos k_2b+\sin k_2b)D=0 \qquad (12)$$

令 $\beta=\frac{e^{k_1a}+e^{-k_1a}}{e^{k_1a}-e^{-k_1a}}\cdot\frac{k_1}{k_2}$，则①式变为

$$(\beta\sin k_2a-\cos k_2a)C+(\beta\cos k_2a+\sin k_2a)D=0$$

联立(12)、(13)得，要此方程组有非零解，必须

$$\begin{vmatrix}(\frac{k_2}{k_3}\cos k_2b+\sin k_2b) & (-\frac{k_2}{k_3}\sin k_2b+\cos k_2b)\\ (\beta\sin k_2a-\cos k_2a) & (\beta\cos k_2a+\sin k_2a)\end{vmatrix}=0$$

即 $(\beta\cos k_2a+\sin k_2a)(\frac{k_2}{k_3}\cos k_2b+\sin k_2b)-(\beta\sin k_2a-\cos k_2a)\cdot$

$$\cdot(-\frac{k_2}{k_3}\sin k_2b+\cos k_2b)=0$$

$$\beta\frac{k_2}{k_3}\cos k_2b\cos k_2a+\frac{k_2}{k_3}\sin k_2b\sin k_2a+\beta\sin k_2b\cos k_2a+$$

$$+\sin k_2b\sin k_2a+\beta\frac{k_2}{k_3}\sin k_2b\sin k_2a-\frac{k_2}{k_3}\sin k_2b\cos k_2a)-$$

$$-\beta\cos k_2b\sin k_2a+\cos k_2b\cos k_2a=0$$

$$\sin k_2(b-a)(\beta-\frac{k_2}{k_3})+\cos k_2(b-a)((\beta\frac{k_2}{k_3}+1)=0$$

$$tgk_2(b-a)=(1+\frac{k_2}{k_3}\beta)\Big/(\frac{k_2}{k_3}-\beta)$$

把 $\beta$ 代入即得

$$tgk_2(b-a)=(1+\frac{k_2}{k_3}\frac{e^{k_1a}+e^{-k_1a}}{e^{k_1a}-e^{-k_1a}})\Big/(\frac{k_2}{k_3}-\frac{k_1}{k_2}\frac{e^{k_1a}+e^{-k_1a}}{e^{k_1a}-e^{-k_1a}})$$

此即为所要求的束缚态能级所满足的方程。#

附：从方程⑩之后也可以直接用行列式求解。见附页。

$$\begin{vmatrix} (e^{k_1a}-e^{-k_1a}) & -\sin k_2a & -\cos k_2a & 0 \\ (e^{k_1a}+e^{-k_1a})k_2 & -k_2\cos k_2a & k_2\sin k_2a & 0 \\ 0 & \sin k_2b & \cos k_2b & -e^{-k_3a} \\ 0 & k_2\cos k_2b & -k_2\sin k_2b & k_3e^{-k_3a} \end{vmatrix} = 0$$

$$0 = (e^{k_1a}-e^{-k_1a}) \begin{vmatrix} -k_2\cos k_2a & k_2\sin k_2a & 0 \\ \sin k_2b & \cos k_2b & -e^{-k_3a} \\ k_2\cos k_2b & -k_2\sin k_2b & k_3e^{-k_3a} \end{vmatrix} -$$

$$-k_1(e^{k_1a}+e^{-k_1a}) = \begin{vmatrix} -\sin k_2a & -\cos k_2a & 0 \\ \sin k_2b & \cos k_2b & -e^{-k_3a} \\ k_2\cos k_2b & -k_2\sin k_2b & k_3e^{-k_3a} \end{vmatrix}$$

$$= (e^{k_1a}-e^{-k_1a})(-k_2k_3e^{-k_3a}\cos k_2a\cos k_2b - k_2^2e^{-k_3a}\sin k_2a$$
$$\cos k_2b - k_2k_3e^{-k_3a}\sin k_2a\sin k_2b - k_2^2e^{-k_3a}\cos k_2a\sin k_2b)$$
$$-k_1(e^{k_1b}+e^{-k_1b})(k_2k_3e^{-k_3b}\sin k_2a\cos k_2b - k_2e^{-k_3b}\cos k_2a$$
$$\cos k_2b + k_3e^{-k_3b}\cos k_2a\sin k_2b + k_2e^{-k_3b}\sin k_2a\sin k_2b))$$

$$= (e^{k_1a}-e^{-k_1a})[-k_2k_3\cos k_2(b-a) + k_2^2\sin k_2(b-a)]e^{-k_3b}$$
$$-(e^{k_1a}-e^{-k_1a})[k_1k_3\sin k_2(b-a) + k_1k_2\cos k_2(b-a)]e^{-k_3b}$$
$$= e^{k_1a}[-(k_1+k_3)k_2\cos k_2(b-a) + (k_2^2-k_1k_3)\sin k_2(b-a)]e^{-k_3b}$$
$$e^{-k_1a}[(k_1-k_3)k_2\cos k_2(b-a) + (k_2^2+k_1k_3)\sin k_2(b-a)]e^{-k_3b}$$
$$= 0$$

$$\Rightarrow [-(k_1+k_3)k_2 + (k_2^2-k_1k_3)tgk_2(b-a)]e^{-k_3b}$$
$$-[(k_1-k_3)k_2 + (k_2^2+k_1k_3)tgk_2(b-a)]e^{-k_3b} = 0$$
$$[(k_2^2-k_1k_3)e^{2k_1a} - (k_2^2+k_1k_3)]tgk_2(b-a) - (k_1+k_3)k_2e^{2k_1a}$$
$$-(k_1-k_3)k_2 = 0$$

此即为所求方程。 #

# 补充练习题一

1、设 $\psi(x) = Ae^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$ ($\alpha$为常数)，求 A = ？

解：由归一化条件，有

$$1 = \mathrm{A}^2\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\alpha^2\mathrm{x}^2}\mathrm{d}(\mathrm{x}) = \mathrm{A}^2\frac{1}{\alpha}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\alpha^2\mathrm{x}^2}\mathrm{d}(\alpha\,\mathrm{x})$$

$$= \mathrm{A}^2\frac{1}{\alpha}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\mathrm{y}^2}\mathrm{dy} = \mathrm{A}^2\frac{1}{\alpha}\sqrt{\pi}$$ 利用 $\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\mathrm{y}^2}\mathrm{dy} = \sqrt{\pi}$

$$\therefore A=\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} \qquad \#$$

2、求基态微观线性谐振子在经典界限外被发现的几率。

解：基态能量为$E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega$

设基态的经典界限的位置为$a$，则有

$$E_0=\frac{1}{2}\mu\omega^2a^2=\frac{1}{2}\hbar\omega$$

$$\therefore \mathrm{a}=\sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}=\frac{1}{\alpha}=\mathrm{a}_0$$

在界限外发现振子的几率为

$$\omega=\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\alpha^2x^2}dx+\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\int_{a_0}^{\infty}e^{-\alpha^2x^2}dx \quad (\psi_0=\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}e^{-\alpha^2x^2})$$

$$=\frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}}\int_{a_0}^{\infty}e^{-\alpha^2x^2}dx \qquad (\text{偶函数性质})$$

$$=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_{a_0}^{\infty}e^{-(\alpha x)^2}d(\alpha x)$$

$$=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_{1}^{\infty}e^{-y^2}dy$$

$$=\frac{2}{\sqrt{\pi}}[\int_{-\infty}^{\infty}e^{-y^2}dy-\int_{-\infty}^{1}e^{-y^2}dy]$$

$$=\frac{2}{\sqrt{\pi}}[\sqrt{\pi}-\frac{\sqrt{2\pi}}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\sqrt{2}}e^{-t^2/2}dt] \qquad (\text{令}y=\frac{1}{\sqrt{2}}t)$$

式中$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\sqrt{2}}e^{-t^2/2}dt$为正态分布函数$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{x}e^{-t^2/2}dt$

当$x=\sqrt{2}$时的值$\psi(\sqrt{2})$。查表得$\psi(\sqrt{2})\doteq 0.92$

$$\therefore \omega\doteq\frac{\partial}{\sqrt{\pi}}[\sqrt{\pi}-\sqrt{\pi}\times 0.92] \quad =2(1-0.92)=0.16$$

∴在经典极限外发现振子的几率为 0.16。 #

3、试证明$\psi(x)=\sqrt{\frac{\alpha}{3\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}(2\alpha^3x^3-3\alpha x)$是线性谐振子的波函数，并求此波

函数对应的能量。

证：线性谐振子的 S-方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx}\psi(x)+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2\psi(x)=E\psi(x) \qquad ①$$

把$\psi(x)$代入上式，有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx}}\psi(\mathrm{x})=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx}}[\sqrt{\frac{\alpha}{3\sqrt{\pi}}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2\mathrm{x}^2}(2\alpha^3\mathrm{x}^3-3\alpha\mathrm{x})]$$

$$=\sqrt{\frac{\alpha}{3\sqrt{\pi}}}[-\alpha^2\mathrm{x}(2\alpha^3\mathrm{x}^3-3\alpha\mathrm{x})+(6\alpha^3\mathrm{x}^2-3\alpha)]\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2\mathrm{x}^2}$$

$$=\sqrt{\frac{\alpha}{3\sqrt{\pi}}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2\mathrm{x}^2}(-2\alpha^5\mathrm{x}^4+9\alpha^3\mathrm{x}^2-3\alpha)$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(\mathrm{x})}{\mathrm{dx}^2}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx}}\left[\sqrt{\frac{\alpha}{3\sqrt{\pi}}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2\mathrm{x}^2}(-2\alpha^5\mathrm{x}^4+9\alpha^3\mathrm{x}^2-3\alpha)\right]$$

$$=\sqrt{\frac{\alpha}{3\sqrt{\pi}}}\left[-\alpha^2\mathrm{x}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2\mathrm{x}^2}(-2\alpha^5\mathrm{x}^4+9\alpha^3\mathrm{x}^2-3\alpha)+\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2\mathrm{x}^2}(-8\alpha^5\mathrm{x}^3+18\alpha^3\mathrm{x})\right]$$

$$=(\alpha^4\mathrm{x}^2-7\alpha^2)\sqrt{\frac{\alpha}{3\sqrt{\pi}}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2\mathrm{x}^2}(2\alpha^3\mathrm{x}^3-3\alpha\mathrm{x})$$

$$=(\alpha^4\mathrm{x}^2-7\alpha^2)\psi(\mathrm{x})$$

把$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)$代入①式左边，得

$$左边=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2\psi(x)$$

$$=7\alpha^2\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi(x)-\frac{\hbar^2}{2\mu}\alpha^4x^2\psi(x)+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2\psi(x)$$

$$=7\cdot\frac{\mu\omega}{\hbar}\cdot\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi(x)-\frac{\hbar^2}{2\mu}(\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}})^4x^2\psi(x)+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2\psi(x)$$

$$=\frac{7}{2}\hbar\omega\psi(x)-\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2\psi(x)+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2\psi(x)$$

$$=\frac{7}{2}\hbar\omega\psi(x)$$

$$右边=E\psi(x)$$

当$E=\frac{7}{2}\hbar\omega$时，左边 = 右边。 $\mathrm{n}=3$

$\psi(x)=\sqrt{\frac{\alpha}{3\sqrt{\pi}}}\frac{d}{dx}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}(2\alpha^3x^3-3\alpha x)$，是线性谐振子的波函数，其对应的能量为$\frac{7}{2}\hbar\omega$。

# 第三章 量子力学中的力学量

3.1 一维谐振子处在基态$\psi(x)=\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{\alpha^2x^2}{2}-\frac{i}{2}\omega t}$，求：

(1)势能的平均值$\overline{U}=\frac{1}{2}\mu\omega^2\overline{x^2}$；

(2)动能的平均值$\overline{T}=\frac{\overline{p^2}}{2\mu}$；

(3)动量的几率分布函数。

解：(1) $\overline{U}=\frac{1}{2}\mu\omega^2\overline{x^2}=\frac{1}{2}\mu\omega^2\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}x^2e^{-\alpha^2x^2}dx$

$$=\frac{1}{2}\mu\omega^2\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\cdot2\frac{1}{2^2\alpha^2}\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}=\frac{1}{2}\mu\omega^2\frac{1}{2\alpha^2}=\frac{1}{4}\mu\omega^2\cdot\frac{\hbar}{\mu\omega}$$

$$=\frac{1}{4}\hbar\omega$$

$$\int_0^{\infty}x^{2n}e^{-ax^2}dx=\frac{1\cdot3\cdot5\cdot\cdots\cdot(2n-1)}{2^{n+1}a^n}\sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

(2) $\overline{T}=\frac{\overline{p^2}}{2\mu}=\frac{1}{2\mu}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\hat{p}^2\psi(x)dx$

$$=\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{2\mu}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}(-\hbar^2\frac{d^2}{dx^2})e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}dx$$

$$=\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\frac{\hbar^2}{2\mu}\alpha^2\int_{-\infty}^{\infty}(1-\alpha^2x^2)e^{-\alpha^2x^2}dx$$

$$=\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\frac{\hbar^2}{2\mu}\alpha^2[\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\alpha^2x^2}dx-\alpha^2\int_{-\infty}^{\infty}x^2e^{-\alpha^2x^2}dx]$$

$$= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \frac{\hbar^2}{2\mu} \alpha^2 [\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} - \alpha^2 \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha^3}]$$

$$= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \frac{\hbar^2}{2\mu} \alpha^2 \frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha} = \frac{\hbar^2}{4\mu} \alpha^2 = \frac{\hbar^2}{4\mu} \cdot \frac{\mu\omega}{\hbar}$$

$$= \frac{1}{4} \hbar\omega$$

或 $$\overline{T} = E - \overline{U} = \frac{1}{2}\hbar\omega - \frac{1}{4}\hbar\omega = \frac{1}{4}\hbar\omega$$

(3) $c(p) = \int \psi_p^*(x)\psi(x)dx$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} e^{-\frac{i}{\hbar}Px} dx$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} e^{-\frac{i}{\hbar}Px} dx$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 (x+\frac{ip}{\alpha^2\hbar})^2 - \frac{p^2}{2\alpha^2\hbar^2}} dx$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{p^2}{2\alpha^2\hbar^2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 (x+\frac{ip}{\alpha^2\hbar})^2} dx$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{p^2}{2\alpha^2\hbar^2}} \frac{\sqrt{2}}{\alpha} \sqrt{\pi} = \sqrt{\frac{1}{\alpha\hbar\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{p^2}{2\alpha^2\hbar^2}}$$

动量几率分布函数为

$$\omega(p) = |c(p)|^2 = \frac{1}{\alpha\hbar\sqrt{\pi}} e^{-\frac{p^2}{\alpha^2\hbar^2}}$$

#

3.2.氢原子处在基态 $\psi(r,\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$，求：

(1)r 的平均值；

(2)势能 $-\frac{e^2}{r}$ 的平均值；

(3)最可几半径；

(4)动能的平均值；

(5)动量的几率分布函数。

解：(1) $\bar{r}=\int r|\psi(r,\theta,\varphi)|^2 d\tau=\frac{1}{\pi a_0^3}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\int_0^{\infty} re^{-2r/a_0}r^2\sin\theta\, drd\theta\, d\varphi$

$$=\frac{4}{a_0^3}\int_0^{\infty} r^3 a^{-2r/a_0}dr$$

$\int_0^{\infty} x^n e^{-ax}dx=\frac{n!}{a^{n+1}}$

$$=\frac{4}{a_0^3}\frac{3!}{\left(\frac{2}{a_0}\right)^4}=\frac{3}{2}a_0$$

(2) $\overline{U}=\overline{(-\frac{e^2}{r})}=-\frac{e^2}{\pi a_0^3}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\int_0^{\infty}\frac{1}{r}e^{-2r/a_0}r^2\sin\theta\, drd\theta\, d\varphi$

$$=-\frac{e^2}{\pi a_0^3}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\int_0^{\infty} e^{-2r/a_0}r\sin\theta\, drd\theta\, d\varphi$$

$$=-\frac{4e^2}{a_0^3}\int_0^{\infty} e^{-2r/a_0}r\, dr$$

$$=-\frac{4e^2}{a_0^3}\frac{1}{\left(\frac{2}{a_0}\right)^2}=-\frac{e^2}{a_0}$$

(3)电子出现在 r+dr 球壳内出现的几率为

$$\omega(r)dr=\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}[\psi(r,\theta,\varphi)]^2 r^2\sin\theta\, drd\theta\, d\varphi=\frac{4}{a_0^3}e^{-2r/a_0}r^2dr$$

$$\omega(r)=\frac{4}{a_0^3}e^{-2r/a_0}r^2$$

$$\frac{d\omega(r)}{dr}=\frac{4}{a_0^3}(2-\frac{2}{a_0}r)re^{-2r/a_0}$$

令 $\frac{d\omega(r)}{dr}=0,\Rightarrow r_1=0,\quad r_2=\infty,\quad r_3=a_0$

当 $r_1=0,\ r_2=\infty$时，$\omega(r)=0$为几率最小位置

$$\frac{d^2\omega(r)}{dr^2}=\frac{4}{a_0^3}(2-\frac{8}{a_0}r+\frac{4}{a_0^2}r^2)e^{-2r/a_0}$$

$$\left.\frac{d^2\omega(r)}{dr^2}\right|_{r=a_0}=-\frac{8}{a_0^3}e^{-2}<0$$

∴ $r = a_0$ 是最可几半径。

(4) $\hat{T} = \frac{1}{2\mu}\hat{p}^2 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2$ $\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\left[\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi^2}\right]$

$$\overline{T} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\int_0^{\infty}\frac{1}{\pi a_0^3}e^{-r/a_0}\nabla^2(e^{-r/a_0})r^2\sin\theta\, dr d\theta\, d\varphi$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\int_0^{\infty}\frac{1}{\pi a_0^3}e^{-r/a_0}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}[r^2\frac{d}{dr}(e^{-r/a_0})]r^2\sin\theta\, dr d\theta\, d\varphi$$

$$= -\frac{4\hbar^2}{2\mu a_0^3}(-\frac{1}{a_0}\int_0^{\infty}(2r - \frac{r^2}{a_0})e^{-r/a_0}\, dr$$

$$= \frac{4\hbar^2}{2\mu a_0^4}(2\frac{a_0^2}{4} - \frac{a_0^2}{4}) = \frac{\hbar^2}{2\mu a_0^2}$$

(5) $c(p) = \int\psi^*_{\vec{p}}(\vec{r})\psi(r,\theta,\varphi)d\tau$

$$c(p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int_0^{\infty}\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}e^{-r/a_0}r^2 dr\int_0^{\pi}e^{-\frac{i}{\hbar}pr\cos\theta}\sin\theta\, d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi$$

$$= \frac{2\pi}{(2\pi\hbar)^{3/2}\sqrt{\pi a_0^3}}\int_0^{\infty}r^2e^{-r/a_0}dr\int_0^{\pi}e^{-\frac{i}{\hbar}pr\cos\theta}d(-\cos\theta)$$

$$= \frac{2\pi}{(2\pi\hbar)^{3/2}\sqrt{\pi a_0^3}}\int_0^{\infty}r^2e^{-r/a_0}dr\frac{\hbar}{ipr}e^{-\frac{i}{\hbar}pr\cos\theta}\Big|_0^{\pi}$$

$$= \frac{2\pi}{(2\pi\hbar)^{3/2}\sqrt{\pi a_0^3}}\frac{\hbar}{ip}\int_0^{\infty}re^{-r/a_0}(e^{\frac{i}{\hbar}pr} - e^{-\frac{i}{\hbar}pr})dr$$

$\int_0^{\infty}x^n e^{-ax}dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$

$$= \frac{2\pi}{(2\pi\hbar)^{3/2}\sqrt{\pi a_0^3}}\frac{\hbar}{ip}[\frac{1}{(\frac{1}{a_0} - \frac{i}{\hbar}p)^2} - \frac{1}{(\frac{1}{a_0} + \frac{i}{\hbar}p)^2}]$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2a_0^3\hbar^3}ip\pi}\frac{4ip}{a_0\hbar(\frac{1}{a_0^2} + \frac{p^2}{\hbar^2})^2}$$

$$= \frac{4}{\sqrt{2a_0^3\hbar^3}\pi a_0}\frac{a_0^4\hbar^4}{(a_0^2p^2 + \hbar^2)^2}$$

$$= \frac{(2a_0\hbar)^{3/2}\hbar}{\pi(a_0{}^2p^2+\hbar^2)^2}$$

动量几率分布函数

$$\omega(p) = |c(p)|^2 = \frac{8a_0^3\hbar^5}{\pi^2(a_0p^2+\hbar^2)^4}$$

#

3.3 证明氢原子中电子运动所产生的电流密度在球极坐标中的分量是

$$J_{er} = J_{e\theta} = 0$$

$$J_{e\varphi} = \frac{e\hbar m}{\mu r\sin\theta}|\psi_{n\ell m}|^2$$

证：电子的电流密度为

$$\vec{J}_e = -e\vec{J} = -e\frac{i\hbar}{2\mu}(\psi_{n\ell m}\nabla\psi^*_{n\ell m} - \psi^*_{n\ell m}\nabla\psi_{n\ell m})$$

$\nabla$ 在球极坐标中为

$$\nabla = \vec{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\vec{e}_\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \vec{e}_\varphi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

式中 $\vec{e}_r$、$\vec{e}_\theta$、$\vec{e}_\varphi$ 为单位矢量

$$\vec{J}_e = -e\vec{J} = -e\frac{i\hbar}{2\mu}[\psi_{n\ell m}(\vec{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\vec{e}_\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \vec{e}_\varphi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi})\psi^*_{n\ell m}$$
$$-\psi^*_{n\ell m}(\vec{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\vec{e}_\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \vec{e}_\varphi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi})\psi_{n\ell m}]$$

$$= -\frac{ie\hbar}{2\mu}[\vec{e}_r(\psi_{n\ell m}\frac{\partial}{\partial r}\psi^*_{n\ell m} - \psi^*_{n\ell m}\frac{\partial}{\partial r}\psi_{n\ell m}) + \vec{e}_\theta(\psi_{n\ell m}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\psi^*_{n\ell m}$$
$$-\psi^*_{n\ell m}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\psi_{n\ell m}) + \vec{e}_\varphi(\frac{1}{r\sin\theta}\psi_{n\ell m}\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi^*_{n\ell m} - \frac{1}{r\sin\theta}\psi^*_{n\ell m}\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi_{n\ell m})]$$

$\because \psi_{n\ell m}$ 中的 $r$ 和 $\theta$ 部分是实数。

$$\therefore \quad \vec{J}_e = -\frac{ie\hbar}{2\mu r\sin\theta}(-im|\psi_{n\ell m}|^2 - im|\psi_{n\ell m}|^2)\vec{e}_\varphi = -\frac{e\hbar m}{\mu r\sin\theta}|\psi_{n\ell m}|^2\vec{e}_\varphi$$

可见，$J_{er} = J_{e\theta} = 0$

$$J_{e\varphi} = -\frac{e\hbar m}{\mu r\sin\theta}|\psi_{n\ell m}|^2$$

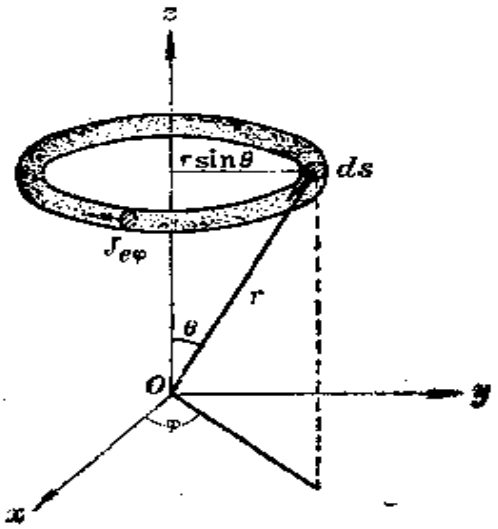
#

3.4　由上题可知，氢原子中的电流可以看作是由许多圆周电流组成的。

(1)求一圆周电流的磁矩。

(2)证明氢原子磁矩为

$$M = M_z = \begin{cases} -\dfrac{me\hbar}{2\mu} & (SI) \\ -\dfrac{me\hbar}{2\mu c} & (CGS) \end{cases}$$




原子磁矩与角动量之比为

$$\frac{M_z}{L_z} = \begin{cases} -\dfrac{e}{2\mu} & (SI) \\ -\dfrac{e}{2\mu c} & (CGS) \end{cases}$$

这个比值称为回转磁比率。

解：(1) 一圆周电流的磁矩为

$$dM = iA = J_{e\varphi} dS \cdot A \qquad （\boldsymbol{i} 为圆周电流，\ \boldsymbol{A} 为圆周所围面积）$$

$$= -\frac{e\hbar m}{\mu r \sin\theta} |\psi_{n\ell m}|^2 dS \cdot \pi (r\sin\theta)^2$$

$$= -\frac{e\hbar m}{\mu} \pi r \sin\theta |\psi_{n\ell m}|^2 dS$$

$$= -\frac{e\hbar m}{\mu} \pi r^2 \sin\theta |\psi_{n\ell m}|^2 dr d\theta \qquad (dS = r dr d\theta)$$

(2)氢原子的磁矩为

$$M = \int dM = \int_0^{\pi}\int_0^{\infty} -\frac{e\hbar m}{\mu} \pi |\psi_{n\ell m}|^2 r^2 \sin\theta \, dr d\theta$$

$$= -\frac{e\hbar m}{2\mu} \cdot 2\pi \int_0^{\pi}\int_0^{\infty} |\psi_{n\ell m}|^2 r^2 \sin\theta \, dr d\theta$$

$$= -\frac{e\hbar m}{2\mu} \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty} |\psi_{n\ell m}|^2 r^2 \sin\theta \, dr d\theta d\varphi$$

$$\boldsymbol{= -\frac{e\hbar m}{2\mu}} \qquad \boldsymbol{(SI)}$$

在 ***CGS*** 单位制中　$M == -\dfrac{e\hbar m}{2\mu c}$

原子磁矩与角动量之比为

$$\frac{M_z}{L_z}=\frac{M}{L_z}=-\frac{e}{2\mu}\quad (SI)$$

$$\frac{M_z}{L_z}=-\frac{e}{2\mu c}\quad (CGS)\qquad \#$$

3.5　一刚性转子转动惯量为 I，它的能量的经典表示式是 $\boldsymbol{H=\frac{L^2}{2I}}$，L 为角动量，求与此对应的量子体系在下列情况下的定态能量及波函数：

(1)　转子绕一固定轴转动：

(2)　转子绕一固定点转动：

解：(1)设该固定轴沿 Z 轴方向，则有

$$\boldsymbol{L^2=L_Z^2}$$

哈米顿算符　　$\boldsymbol{\hat{H}=\frac{1}{2I}\hat{L}_Z^2=-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{d^2}{d\varphi^2}}$

其本征方程为　($\hat{H}$与$t$无关，属定态问题)

$$\boldsymbol{-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{d^2}{d\varphi^2}\phi(\varphi)=E\phi(\varphi)}$$

$$\boldsymbol{\frac{d^2\phi(\varphi)}{d\varphi^2}=-\frac{2IE}{\hbar^2}\phi(\varphi)}$$

令　$\boldsymbol{m^2=\frac{2IE}{\hbar^2}}$，则

$$\frac{d^2\phi(\varphi)}{d\varphi^2}+m^2\phi(\varphi)=0$$

取其解为　　$\boldsymbol{\phi(\varphi)=Ae^{im\varphi}}$　　($\boldsymbol{m}$ 可正可负可为零)

由波函数的单值性，应有

$$\boldsymbol{\phi(\varphi+2\pi)=\phi(\varphi)\Rightarrow e^{im(\varphi+2\pi)}=e^{im\varphi}}$$

即　　$\boldsymbol{e^{i2m\pi}=1}$

∴m= 0，±1，±2，…

转子的定态能量为 $\boldsymbol{E_m=\frac{m^2\hbar^2}{2I}}$　　(m= 0，±1，±2，…)

可见能量只能取一系列分立值，构成分立谱。　　定态波函数为

$$\phi_m = Ae^{im\varphi}$$

A 为归一化常数，由归一化条件

$$1 = \int_0^{2\pi} \phi_m^* \phi_m d\varphi = A^2 \int_0^{2\pi} d\varphi = A^2 2\pi$$

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

∴ 转子的归一化波函数为

$$\phi_m = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{im\varphi}$$

综上所述，除 m=0 外，能级是二重简并的。

(2)取固定点为坐标原点，则转子的哈米顿算符为

$$\hat{H} = \frac{1}{2I}\hat{L}^2$$

$\hat{H}$与$t$无关，属定态问题，其本征方程为

$$\frac{1}{2I}\hat{L}^2 Y(\theta,\varphi) = EY(\theta,\varphi)$$

(式中$Y(\theta,\varphi)$设为$\hat{H}$的本征函数，$E$为其本征值)

$$\hat{L}^2 Y(\theta,\varphi) = 2IEY(\theta,\varphi)$$

令 $2IE = \lambda\hbar^2$，则有

$$\hat{L}^2 Y(\theta,\varphi) = \lambda\hbar^2 Y(\theta,\varphi)$$

此即为角动量$\hat{L}^2$的本征方程，其本征值为

$$L^2 = \lambda\hbar^2 = \ell(\ell+1)\hbar^2 \qquad (\ell = 0,\ 1, 2, \cdots)$$

其波函数为球谐函数$Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = N_{\ell m} P_\ell^{|m|}(\cos\theta) e^{im\varphi}$

∴ 转子的定态能量为

$$E_\ell = \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2I}$$

可见，能量是分立的，且是$(2\ell+1)$重简并的。

#

3.6　设 t=0 时，粒子的状态为

$$\psi(x) = A[\sin^2 kx + \tfrac{1}{2}\cos kx]$$

求此时粒子的平均动量和平均动能。

解：$\psi(x) = A[\sin^2 kx + \frac{1}{2}\cos kx] = A[\frac{1}{2}(1-\cos 2kx) + \frac{1}{2}\cos kx]$

$$= \frac{A}{2}[1 - \cos 2kx + \cos kx]$$

$$= \frac{A}{2}[1 - \tfrac{1}{2}(e^{i2kx} - e^{-i2kx}) + \tfrac{1}{2}(e^{ikx} + e^{-ikx})]$$

$$= \frac{A\sqrt{2\pi\hbar}}{2}[e^{i0x} - \tfrac{1}{2}e^{i2kx} - \tfrac{1}{2}e^{-i2kx} + \tfrac{1}{2}e^{ikx} + \tfrac{1}{2}e^{-ikx}] \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

可见，动量 $p_n$ 的可能值为 $0 \quad 2k\hbar \quad -2k\hbar \quad k\hbar \quad -k\hbar$

动能 $\frac{p_n^2}{2\mu}$ 的可能值为 $0 \quad \frac{2k^2\hbar^2}{\mu} \quad \frac{2k^2\hbar^2}{\mu} \quad \frac{k^2\hbar^2}{2\mu} \quad \frac{k^2\hbar^2}{2\mu}$

对应的几率 $\omega_n$ 应为

$$(\frac{A^2}{4} \quad \frac{A^2}{16} \quad \frac{A^2}{16} \quad \frac{A^2}{16} \quad \frac{A^2}{16}) \cdot 2\pi\hbar$$

$$(\frac{1}{2} \quad \frac{1}{8} \quad \frac{1}{8} \quad \frac{1}{8} \quad \frac{1}{8}) \cdot A^2\pi\hbar$$

上述的 A 为归一化常数，可由归一化条件，得

$$1 = \sum_n \omega_n = (\frac{A^2}{4} + 4 \times \frac{A^2}{16}) \cdot 2\pi\hbar = \frac{A^2}{2} \cdot 2\pi\hbar$$

$\therefore \quad A = 1/\sqrt{\pi\hbar}$

$\therefore$ 动量 $p$ 的平均值为

$$\bar{p} = \sum_n p_n \omega_n$$

$$= 0 + 2k\hbar \times \frac{A^2}{16} \cdot 2\pi\hbar - 2k\hbar \times \frac{A^2}{16} \cdot 2\pi\hbar + k\hbar \times \frac{A^2}{16} \cdot 2\pi\hbar - k\hbar \times \frac{A^2}{16} \cdot 2\pi\hbar = 0$$

$$\overline{T}=\overline{\frac{p^2}{2\mu}}=\sum_n\frac{p_n^2}{2\mu}\omega_n$$

$$=0+\frac{2k^2\hbar^2}{\mu}\cdot\frac{1}{8}\times2+\frac{k^2\hbar^2}{2\mu}\times\frac{1}{8}\times2$$

$$=\boldsymbol{\frac{5k^2\hbar^2}{8\mu}}$$

#

3.7　一维运动粒子的状态是

$$\psi(x)=\begin{cases}Axe^{-\lambda x}, & \text{当}x\geq0\\ 0, & \text{当}x<0\end{cases}$$

其中$\lambda>0$，求：

(1)粒子动量的几率分布函数；

(2)粒子的平均动量。

解：(1)先求归一化常数，由

$$1=\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x)|^2dx=\int_0^{\infty}A^2x^2e^{-2\lambda x}dx$$

$$=\frac{1}{4\lambda^3}A^2$$

$$\therefore A=2\lambda^{3/2}$$

$$\psi(x)=2\lambda^{3/2}xe^{-2\lambda x}\qquad(x\geq0)$$

$$\psi(x)=0\qquad(x<0)$$

$$c(p)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-ikx}\psi(x)dx=(\frac{1}{2\pi\hbar})^{1/2}\cdot2\lambda^{3/2}\int_{-\infty}^{\infty}xe^{-(\lambda+ik)x}\psi(x)dx$$

$$=(\frac{2\lambda^3}{2\pi\hbar})^{1/2}[-\frac{x}{\lambda+ik}e^{-(\lambda+ik)x}\Big|_0^{\infty}+\frac{1}{\lambda+ik}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-(\lambda+ik)x}dx$$

$$=(\frac{2\lambda^3}{2\pi\hbar})^{1/2}\frac{x}{(\lambda+ik)^2}==(\frac{2\lambda^3}{2\pi\hbar})^{1/2}\frac{1}{(\lambda+i\frac{p}{\hbar})^2}$$

动量几率分布函数为

$$\omega(p)=|c(p)|^2=\frac{2\lambda^3}{\pi\hbar}\frac{1}{(\lambda^2+\frac{p^2}{\hbar^2})^2}=\frac{2\lambda^3\hbar^3}{\pi}\frac{1}{(\hbar^2\lambda^2+p^2)^2}$$

(2) $\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\hat{p}\psi(x)dx = -i\hbar\int_{-\infty}^{\infty} 4\lambda^3 x e^{-\lambda x}\frac{d}{dx}(e^{-\lambda x})dx$

$$= -i\hbar 4\lambda^3\hbar\int_{-\infty}^{\infty} x(1-\lambda x)e^{-2\lambda x}dx$$

$$= -i\hbar 4\lambda^3\hbar\int_{-\infty}^{\infty} (x-\lambda x^2)e^{-2\lambda x}dx$$

$$= -i\hbar 4\lambda^3\hbar(\frac{1}{4\lambda^2}-\frac{1}{4\lambda^2})$$

$$= 0$$

#

3.8.在一维无限深势阱中运动的粒子，势阱的宽度为$a$，如果粒子的状态由波函数

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

描写，A 为归一化常数，求粒子的几率分布和能量的平均值。

解：由波函数$\psi(x)$的形式可知一维无限深势阱的分布如图示。粒子能量的本征函数和本征值为

$$\psi(x)\begin{cases}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x, & 0 \le x \le a \\ 0, & x \le 0, \quad x \ge a\end{cases}$$

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

动量的几率分布函数为$\omega(E) = |C_n|^2$

$$C_n = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\psi(x)dx = \int_0^a \sin\frac{n\pi}{a}x\psi(x)dx$$

先把$\psi(x)$归一化，由归一化条件，

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x)|^2 dx = \int_0^a A^2x^2(a-x)dx = A^2\int_0^a x^2(a^2-2ax+x^2)dx$$

$$= A^2\int_0^a (a^2x^2-2ax^3+x^4)dx$$

$$= A^2(\frac{a^5}{3}-\frac{a^5}{2}+\frac{a^5}{5}) = A^2\frac{a^5}{30}$$

$$\therefore A = \sqrt{\frac{30}{a^5}}$$

$$\therefore\quad C_n=\int_0^a\sqrt{\frac{2}{a}}\cdot\sqrt{\frac{30}{a^5}}\sin\frac{n\pi}{a}x\cdot x(a-x)dx$$

$$=\frac{2\sqrt{15}}{a^3}[a\int_0^a x\sin\frac{n\pi}{a}xdx-\int_0^a x^2\sin\frac{n\pi}{a}xdx]$$

$$=\frac{2\sqrt{15}}{a^3}[-\frac{a^2}{n\pi}x\cos\frac{n\pi}{a}x+\frac{a^3}{n^2\pi^2}\sin\frac{n\pi}{a}x+\frac{a}{n\pi}x^2\cos\frac{n\pi}{a}x$$
$$-\frac{2a^2}{n^2\pi^2}x\sin\frac{n\pi}{a}x-\frac{2a^3}{n^3\pi^3}\cos\frac{n\pi}{a}x]\Big|_0^a$$

$$=\frac{4\sqrt{15}}{n^3\pi^3}[1-(-1)^n]$$

$$\therefore\quad \omega(E)=|C_n|^2=\frac{240}{n^6\pi^6}[1-(-1)^n]^2$$

$$=\begin{cases}\dfrac{960}{n^6\pi^6}, & n=1,\ 3,\ 5,\ \cdots\\ 0, & n=2,\ 4,\ 6,\ \cdots\end{cases}$$

$$\overline{E}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x)\hat{H}\psi(x)dx=\int_0^a\psi(x)\frac{\hat{p}^2}{2\mu}\psi(x)dx$$

$$=\int_0^a\frac{30}{a^5}x(x-a)\cdot[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2}x(x-a)]dx$$

$$=\frac{30\hbar^2}{\mu a^5}\int_0^a x(x-a)dx=\frac{30\hbar^2}{\mu a^5}(\frac{a^3}{2}-\frac{a^3}{3})$$

$$=\frac{5\hbar^2}{\mu a^2}$$

3.9.设氢原子处于状态

$$\psi(r,\theta,\varphi)=\frac{1}{2}R_{21}(r)Y_{10}(\theta,\varphi)-\frac{\sqrt{3}}{2}R_{21}(r)Y_{1-1}(\theta,\varphi)$$

求氢原子能量、角动量平方及角动量 Z 分量的可能值，这些可能值出现的几率和这些力学量的平均值。

解：在此能量中，氢原子能量有确定值

$$E_2=-\frac{\mu e_s^2}{2\hbar^2n^2}=-\frac{\mu e_s^2}{8\hbar^2}\qquad(n=2)$$

角动量平方有确定值为

$$L^2 = \ell(\ell+1)\hbar^2 = 2\hbar^2 \qquad (\ell = 1)$$

角动量 Z 分量的可能值为

$$L_{Z1} = 0 \; L_{Z2} = -\hbar$$

其相应的几率分别为

$$\frac{1}{4}, \qquad \frac{3}{4}$$

其平均值为

$$\overline{L}_Z = \frac{1}{4}\times 0 - \hbar \times \frac{3}{4} = -\frac{3}{4}\hbar$$

3.10 一粒子在硬壁球形空腔中运动，势能为

$$U(r) = \begin{cases} \infty, & r \geq a; \\ 0, & r < a \end{cases}$$

求粒子的能级和定态函数。

解：据题意，在 $r \geq a$ 的区域，$U(r) = \infty$，所以粒子不可能运动到这一区域，即在这区域粒子的波函数

$$\psi = 0 \qquad (r \geq a)$$

由于在 $r < a$ 的区域内，$U(r) = 0$。只求角动量为零的情况，即 $\ell = 0$，这时在各个方向发现粒子的几率是相同的。即粒子的几率分布与角度 $\theta$、$\varphi$ 无关，是各向同性的，因此，粒子的波函数只与 $r$ 有关，而与 $\theta$、$\varphi$ 无关。设为 $\psi(r)$，则粒子的能量的本征方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{d}{dr}(r^2\frac{d\psi}{dr}) = E\psi$$

令 $U(r) = rE\psi, \quad k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$，得

$$\frac{d^2u}{dr^2} + k^2u = 0$$

其通解为

$$u(r) = A\cos kr + B\sin kr$$

$$\therefore -\psi(r) = \frac{A}{r}\cos kr + \frac{B}{r}\sin kr$$

波函数的有限性条件知， $\psi(0) =$ 有限，则

$$A = 0$$

$$\therefore \quad \psi(r) = \frac{B}{r}\sin kr$$

由波函数的连续性条件，有

$$\psi(a) = 0 \ \Rightarrow \ \frac{B}{a}\sin ka = 0$$

$$\because B \neq 0 \quad \therefore ka = n\pi \qquad (n = 1,2,\cdots)$$

$$k = \frac{n\pi}{a}$$

$$\therefore \qquad E_n = \frac{n^2\pi^2 2^{\hbar}}{2\mu a^2}$$

$$\psi(r) = \frac{B}{r}\sin\frac{n\pi}{a}r$$

其中 B 为归一化，由归一化条件得

$$1 = \int_0^{\pi} d\theta = \int_0^{\pi} d\varphi = \int_0^{a} |\psi(r)|^2 r^2 \sin\theta \, dr$$

$$= 4\pi \cdot \int_0^{a} B^2 \sin^2 \frac{n\pi}{a} r dr = 2\pi \, aB^2$$

$$\therefore \qquad B = \sqrt{\frac{1}{2\pi \, a}}$$

$\therefore$ 归一化的波函数

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

#

3.11. 求第 3.6 题中粒子位置和动量的测不准关系 $\overline{(\Delta x)^2} \cdot \overline{(\Delta p)^2} = ?$

解： $\overline{p} = 0$

$$\overline{p^2} = 2\mu \overline{T} = \frac{5}{4}k^2\hbar^2$$

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} A^2 x[\sin^2 kx + \frac{1}{2}\cos kx]^2 dx = 0$$

$$\overline{x^2} = \int_{-\infty}^{\infty} A^2 x^2[\sin^2 kx + \frac{1}{2}\cos kx]^2 dx = \infty$$

$$\overline{(\Delta x)^2} \cdot \overline{(\Delta p)^2} = (\overline{x^2} - \bar{x}^2) = (\overline{p^2} - \bar{p}^2) = \infty$$

3.12　粒子处于状态

$$\psi(x) = (\frac{1}{2\pi\xi^2})^{1/2} \exp[\frac{i}{\hbar} p_0 x - \frac{x^2}{4\xi^2}]$$

式中$\xi$为常量。当粒子的动量平均值，并计算测不准关系$\overline{(\Delta x)^2} \cdot \overline{(\Delta p)^2} = ?$

解：①先把$\psi(x)$归一化，由归一化条件，得

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi\xi^2} e^{-\frac{x^2}{2\xi^2}} dx = \frac{1}{\sqrt{2\xi^2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\frac{x}{2\xi^2})^2} d(\frac{x}{2\xi^2})$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\xi^2\pi}} \sqrt{\pi} = (\frac{1}{2\pi\xi^2})^{1/2}$$

$$\therefore \xi^2 = \frac{1}{2\pi} \qquad /$$

∴　是归一化的

$$\psi(x) = \exp[\frac{i}{\hbar} p_0 x - \frac{\pi}{2} x^2]$$

② 动量平均值为

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* (-i\hbar \frac{d}{dx}) \psi dx = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}p_0 x - \frac{\pi}{2}x^2} (\frac{i}{\hbar} p_0 - \pi x) e^{\frac{i}{\hbar}p_0 x - \frac{\pi}{2}x^2} dx$$

$$= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} (\frac{i}{\hbar} p_0 - \pi x) e^{-\pi x^2} dx$$

$$= p_0 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\pi x^2} dx + i\pi\hbar \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\pi x^2} dx$$

$$= p_0$$

③　　$\overline{(\Delta x)^2} \cdot \overline{(\Delta p)^2} = ?$

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x \psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\pi x^2} dx \qquad \text{（奇被积函数）}$$

$$\overline{x^2} = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\pi x^2} dx = -\frac{1}{2\pi} x e^{-\pi x^2}\Big|_{-\infty}^{\infty} + \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\pi x^2} dx$$

$$= -\frac{1}{2\pi}$$

$$\overline{p^2} = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{d^2}{dx} \psi \, dx = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} p_0 x - \pi x^2} \frac{d^2}{dx} e^{\frac{i}{\hbar} p_0 x - \pi x^2} \, dx$$

$$= \hbar^2 (\pi + \frac{p_0^2}{\hbar}) + i 2\pi \hbar p_0 \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\pi x^2} dx - \pi^2 \hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\pi x^2} \, dx$$

$$= \hbar^2 (\pi + \frac{p_0^2}{\hbar}) + 0 + (-\pi^2 \hbar^2) \frac{1}{2\pi} = (\frac{\pi}{2} \hbar^2 + p_0^2)$$

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

$$\overline{(\Delta p)^2} = \overline{p^2} - \bar{p}^2 = (\frac{\pi}{2} \hbar^2 + p_0^2) - p_0^2 = \frac{\pi}{2} \hbar^2$$

$$\overline{(\Delta x)^2} \cdot \overline{(\Delta p)^2} = \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{\pi}{2} \hbar^2 = \frac{1}{4} \hbar^2$$

#

3.13 利用测不准关系估计氢原子的基态能量。

解：设氢原子基态的最概然半径为 R，则原子半径的不确定范围可近似取为

$$\Delta r \approx R$$

由测不准关系

$$\overline{(\Delta r)^2} \cdot \overline{(\Delta p)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

得

$$\overline{(\Delta p)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4R^2}$$

对于氢原子，基态波函数为偶宇称，而动量算符 $\vec{p}$ 为奇宇称，所以

$$\bar{p} = 0$$

又有

$$\overline{(\Delta p)^2} = \bar{p}^2 - \overline{p^2}$$

所以 $\overline{p^2}=\overline{(\Delta p)^2}\geq\frac{\hbar^2}{4R^2}$

可近似取 $\overline{p^2}\approx\frac{\hbar^2}{R^2}$

能量平均值为 $\overline{E}=\frac{\overline{P^2}}{2\mu}-\frac{\overline{e_s^2}}{r}$

作为数量级估算可近似取 $\frac{\overline{e_s^2}}{r}\approx\frac{e_s^2}{R}$

则有 $\overline{E}\approx\frac{\hbar^2}{2\mu R^2}-\frac{e_s^2}{R}$

基态能量应取 $\overline{E}$ 的极小值，由

$$\frac{\partial\overline{E}}{\partial R}=-\frac{\hbar^2}{\mu R^3}+\frac{e_s^2}{R^2}=0$$

得 $R=\frac{\hbar^2}{\mu e_s^2}$

代入 $\overline{E}$，得到基态能量为 $\overline{E_{\min}}=-\frac{\mu e_s^4}{2\hbar^2}$

# 补充练习题二

1. 试以基态氢原子为例证明：$\psi$**不是** $\hat{T}$**或** $\hat{U}$ 的本征函数，而是 $\hat{T}+\hat{U}$ 的本征函数。

**解：** $\psi_{100}=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}(\frac{1}{a_0})^{3/2}2e^{-r/a_0}$ $\qquad(\frac{1}{a_0}=\frac{\mu e_s^2}{\hbar^2})$

$$\hat{T}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}[\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r})+\frac{1}{\sin\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta})+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}]$$

$$\hat{U}=-\frac{e_s^2}{r}$$

$$\hat{T}\psi_{100}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial\psi_{100}}{\partial r})$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{\sqrt{\pi}}(\frac{1}{a_0})^{3/2}\cdot\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}e^{-r/a_0})$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{\sqrt{\pi}}(\frac{1}{a_0})^{3/2}(\frac{1}{a_0^2}-\frac{2}{a_0 r})e^{-r/a_0}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}(\frac{1}{a_0^2}-\frac{2}{a_0 r})\psi_{100}$$

$$\neq \text{常数}\times\psi_{100}$$

$\psi_{100}$不是$\hat{T}$的本征函数

$$\hat{U}\psi_{100}=-\frac{e_s^2}{r}\psi_{100}$$

可见，$\psi_{100}$不是$\hat{U}$的本征函数

而 $$(\hat{T}+\hat{U})\psi_{100}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{\sqrt{\pi}}(\frac{1}{a_0})^{3/2}(\frac{1}{a_0^2}-\frac{2}{a_0 r})e^{-r/a_0}-\frac{e_s^2}{r}\psi_{100}$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{a_0^2}\psi_{100}+\frac{\hbar^2}{\mu a_0 r}\psi_{100}-\frac{\hbar^2}{\mu a_0 r}\psi_{100}$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{a_0^2}\psi_{100}$$

可见，$\psi_{100}$是$(\hat{T}+\hat{U})$的本征函数。

2．证明：$L=\sqrt{6}\hbar$，$L=\pm\hbar$的氢原子中的电子，在$\theta=45°$和$135°$的方向上被发现的几率最大。

解： $\because W_{\ell m}(\theta,\varphi)d\Omega=|Y_{\ell m}|^2 d\Omega$

$\therefore\ W_{\ell m}(\theta,\varphi)=|Y_{\ell m}|^2$

$L=\sqrt{6}\hbar$，$L=\pm\hbar$的电子，其$\ell=2$，$m=\pm1$

$$\because\ Y_{21}(\theta,\varphi)=-\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\, e^{i\varphi}$$

$$Y_{2-1}(\theta,\varphi)=-\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\, e^{-i\varphi}$$

$$\therefore W_{2\pm1}(\theta,\varphi)=\left|Y_{\ell m}\right|^2=\frac{15}{8\pi}\sin^2\theta\cos^2\theta=\frac{15}{32\pi}\sin^2 2\theta$$

当$\theta=45°$和$135°$时

$W_{2\pm1}=\dfrac{15}{32\pi}$为最大值。即在$\theta=45°$，$\theta=135°$方向发现电子的几率最大。

在其它方向发现电子的几率密度均在$0$～$\dfrac{15}{32\pi}$之间。

3．试证明：处于 1s，2p 和 3d 态的氢原子的电子在离原子核的距离分别为$a_0$、$4a_0$和$9a_0$的球壳内被发现的几率最大($a_0$为第一玻尔轨道半径 )。

证：①对 1s 态，$n=1,\ \ell=0,\ R_{10}=(\dfrac{1}{a_0})^{3/2}e^{-r/a_0}$

$$W_{10}(r)=r^2R_{10}^2(r)=(\frac{1}{a_0})^3 4r^2e^{-2r/a_0}$$

$$\frac{\partial W_{10}}{\partial r}=(\frac{1}{a_0})^3 4(2r-\frac{2}{a_0}r^2)e^{-2r/a_0}$$

令 $\dfrac{\partial W_{10}}{\partial r}=0$ $\Rightarrow r_1=0,\ \ r_2=\infty,\ \ r_3=a_0$

易见 ，当$\Rightarrow r_1=0,\ r_2=\infty$时，$W_{10}=0$不是最大值。

$W_{10}(a_0)=\dfrac{4}{a_0}e^{-2}$为最大值，所以处于 1s 态的电子在 $r=a_0$ 处被发现的几率最大。

②对 2p 态的电子$n=2,\ \ell=1,\ R_{21}=(\dfrac{1}{2a_0})^{3/2}\dfrac{r}{\sqrt{3}a_0}e^{-r/2a_0}$

$$W_{21}(r)=r^2\left|R_{21}\right|^2=(\frac{1}{2a_0})^3\frac{r^4}{3a_0^2}r^2e^{-r/a_0}$$

$$\frac{\partial W_{21}}{\partial r}=\frac{1}{24a_0^5}r^3(4-\frac{r}{a_0})e^{-r/a_0}$$

令 $\frac{\partial W_{21}}{\partial r}=0$ $\Rightarrow r_1=0,\quad r_2=\infty,\quad r_3=4a_0$

易见 ，当$\Rightarrow r_1=0,\ r_2=\infty$时，$W_{21}=0$为最小值。

$$\frac{\partial^2 W_{21}}{\partial r^2}=\frac{1}{24a_0^5}r^2(12-\frac{8r}{a_0}+\frac{r^2}{a_0^2})e^{-r/a_0}$$

$$\left.\frac{\partial^2 W_{21}}{\partial r^2}\right|_{r=4a_0}=\frac{1}{24a_0^5}\times16a_0^2(12-32+16)e^{-4}=-\frac{8}{3a_0^3}e^{-4}<0$$

∴ $r=4a_0$为几率最大位置，即在$r=4a_0$的球壳内发现球态的电子的几率最大。

③对于 3d 态的电子 $n=3,\quad \ell=2,\quad R_{32}=(\frac{2}{a_0})^{3/2}\frac{1}{81\sqrt{15}}(\frac{r}{a_0})^2e^{-r/3a_0}$

$$W_{32}(r)=r^2\left|R_{32}\right|^2=\frac{1}{a^7}\frac{1}{81^2\times15}r^6e^{-r/3a_0}$$

$$\frac{\partial W_{32}}{\partial r}=\frac{8}{81^2\times15a_0^7}r^5(6-\frac{2r}{3a_0})e^{-2r/3a_0}$$

令 $\frac{\partial W_{32}}{\partial r}=0$ $\Rightarrow r_1=0,\quad r_2=\infty,\quad r_3=9a_0$

易见 ，当$\Rightarrow r_1=0,\ r_2=\infty$时，$W_{32}=0$为几率最小位置。

$$\frac{\partial^2 W_{32}}{\partial r^2}=\frac{16}{81^2\times15a_0^7}(15r^2-\frac{4r^5}{a_0}+\frac{2r^6}{9a_0^2})e^{-2r/3a_0}$$

$$\left.\frac{\partial^2 W_{32}}{\partial r^2}\right|_{r=9a_0}=\frac{1}{81^2\times15a_0^7}(9a_0)^4(15-\frac{36a_0}{a_0}+\frac{2\times81a_0^2}{9a_0^2})e^{-6}$$

$$=-\frac{16}{5a_0^3}e^{-6}<0$$

∴ $r=9a_0$为几率最大位置，即在$r=9a_0$的球壳内发现球态的电子的几率最大。

4. 当无磁场时，在金属中的电子的势能可近似视为

$$U(x)=\begin{cases}0, & x\le 0 \quad \text{(在金属内部)}\\ U_0, & x\ge 0 \quad \text{(在金属外部)}\end{cases}$$

其中 $U_0>0$，求电子在均匀场外电场作用下穿过金属表面的透射系数。

解：设电场强度为$\varepsilon$，方向沿 x 轴负向，则总势能为

$$V(x)=-e\varepsilon x \quad (x\le 0),$$

$$\mathrm{V}(x)=U_0-e\varepsilon x \qquad (x\ge 0)$$

势能曲线如图所示。则透射系数为

$$D\approx \exp[-\frac{2}{\hbar}\int_{x_2}^{x_1}\sqrt{2\mu(U_0-e\varepsilon x-E)}dx]$$

式中$E$为电子能量。$x_1=0$，$x_2$由下式确定

$$p=\sqrt{2\mu(U_0-e\varepsilon x-E)}=0$$

$$\therefore\ x_2=\frac{U_0-E}{e\varepsilon}$$

令 $x=\frac{U_0-E}{e\varepsilon}\sin^2\theta$，则有

$$\int_{x_2}^{x_1}\sqrt{2\mu(U_0-e\varepsilon x-E)}dx=\int_0^{2\pi}\sqrt{2\mu(U_0-E)}\cdot\frac{U_0-E}{e\varepsilon}2\sin^2\theta\, d\theta$$

$$=2\frac{U_0-E}{e\varepsilon}\sqrt{2\mu(U_0-E)}\left(-\frac{\cos^3\theta}{3}\right)\Bigg|_0^{2\pi}$$

$$=\frac{2}{3}\frac{U_0-E}{e\varepsilon}\sqrt{2\mu(U_0-E)}$$

$\therefore$透射系数 $D\approx\exp[-\frac{2}{3\hbar}\frac{U_0-E}{e\varepsilon}\sqrt{2\mu(U_0-E)}]$

5．指出下列算符哪个是线性的，说明其理由。

① $4x^2\frac{d^2}{dx^2}$；　② $[\ ]^2$；　③ $\sum_{K=1}^{n}$

解：①$4x^2\frac{d^2}{dx^2}$是线性算符

$$\because\ 4x^2\frac{d^2}{dx^2}(c_1u_1+c_2u_2)=4x^2\frac{d^2}{dx^2}(c_1u_1)+4x^2\frac{d^2}{dx^2}(c_2u_2)$$
$$=c_1\cdot 4x^2\frac{d^2}{dx^2}u_1+c_2\cdot 4x^2\frac{d^2}{dx^2}u_2$$

②$[\ ]^2$ 不是线性算符

$$\because\ [c_1u_1+c_2u_2]^2=c_1^2u_1^2+2c_1c_2u_1u_2+c_2^2u_2^2$$
$$\neq c_1[u_1]^2+c_2[u_2]^2$$

③$\sum_{K=1}^{n}$ 是线性算符

$$\sum_{K=1}^{n}c_1u_1+c_2u_2=\sum_{K=1}^{N}c_1u_1+\sum_{K=1}^{N}c_2u_2=c_1\sum_{K=1}^{N}u_1+c_2\sum_{K=1}^{N}u_2$$

6．指出下列算符哪个是厄米算符，说明其理由。

$$\frac{d}{dx},\qquad i\frac{d}{dx},\qquad 4\frac{d^2}{dx^2}$$

解：$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\frac{d}{dx}\phi\,dx=\psi^*\phi\Big|_{-\infty}^{\infty}-\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d}{dx}\psi^*\phi\,dx$

当 $x\to\pm\infty$，$\psi\to 0$，$\phi\to 0$

$$\therefore\quad \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\frac{d}{dx}\phi\,dx=-\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d}{dx}\psi^*\phi\,dx=-\int_{-\infty}^{\infty}(\frac{d}{dx}\psi)^*\phi\,dx$$
$$\neq\int_{-\infty}^{\infty}(\frac{d}{dx}\psi)^*\phi\,dx$$

$\therefore\ \frac{d}{dx}$不是厄米算符

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*i\frac{d}{dx}\phi\,dx=i\psi^*\phi\Big|_{-\infty}^{\infty}-i\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d}{dx}\psi^*\phi\,dx$$
$$=-i\int_{-\infty}^{\infty}(\frac{d}{dx}\psi)^*\phi\,dx=\int_{-\infty}^{\infty}(i\frac{d}{dx}\psi)^*\phi\,dx$$

$\therefore i\frac{d}{dx}$是厄米算符

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^{*}4\frac{d^{2}}{dx^{2}}\phi\,dx=4\psi^{*}\frac{d\phi}{dx}\Big|_{-\infty}^{\infty}-4\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\psi^{*}}{dx}\frac{d\phi}{dx}dx$$

$$=-4\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\psi^{*}}{dx}\frac{d\phi}{dx}dx=4\frac{d\psi^{*}}{dx}\phi+4\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d^{2}\psi^{*}}{dx^{2}}\phi\,dx$$

$$=-4\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d^{2}}{dx^{2}}\psi^{*}\phi\,dx=\int_{-\infty}^{\infty}(4\frac{d^{2}}{dx^{2}}\psi)^{*}\phi\,dx$$

$\therefore 4\frac{d^{2}}{dx^{2}}$是厄米算符

7、下列函数哪些是算符$\frac{d^{2}}{dx^{2}}$的本征函数，其本征值是什么？

①$x^{2}$，　②　$e^{x}$，　③$\sin x$，　④$3\cos x$，　⑤$\sin x+\cos x$

解：①$\frac{d^{2}}{dx^{2}}(x^{2})=2$

$\therefore$　　$x^{2}$不是$\frac{d^{2}}{dx^{2}}$的本征函数。

②　$\frac{d^{2}}{dx^{2}}e^{x}=e^{x}$

$\therefore$　　$e^{x}$不是$\frac{d^{2}}{dx^{2}}$的本征函数，其对应的本征值为1。

③$\frac{d^{2}}{dx^{2}}(\sin x)=\frac{d}{dx}(\cos x)=-\sin x$

$\therefore$　　可见，$\sin x$是$\frac{d^{2}}{dx^{2}}$的本征函数，其对应的本征值为－1。

④$\frac{d^{2}}{dx^{2}}(3\cos x)=\frac{d}{dx}(-3\sin x)=-3\cos x-(3\cos x)$

$\therefore$　　$3\cos x$　是$\frac{d^{2}}{dx^{2}}$的本征函数，其对应的本征值为－1。

⑤$\frac{d^{2}}{dx^{2}}(\sin x+\cos x)=\frac{d}{dx}(\cos x-\sin x)=-\sin x-\cos x$

$=-(\sin x+\cos x)$

$\therefore$　$\sin x+\cos x$是$\frac{d^{2}}{dx^{2}}$的本征函数，其对应的本征值为－1。

8、试求算符 $\hat{F} = -ie^{ix}\frac{d}{dx}$ 的本征函数。

解：$\hat{F}$ 的本征方程为

$$\hat{F}\phi = F\phi$$

即 $$-ie^{ix}\frac{d}{dx} = F\phi$$

$$\frac{d\phi}{\phi} = iFe^{ix}dx = -d(Fe^{ix}\frac{d}{dx}) = d(-Fe^{ix}\frac{d}{dx})$$

$$\ln\phi = -Fe^{ix}\frac{d}{dx} + \ln c$$

$$\phi = ce^{-Fe^{-ix}}$$ （$\hat{F}$是$F$ 的本征值）

9、如果把坐标原点取在一维无限深势阱的中心，求阱中粒子的波函数和能级的表达式。

解：
$$U(x) = \begin{cases} 0, & |x| \le \frac{a}{2} \\ \infty, & |x| \ge \frac{a}{2} \end{cases}$$

方程（分区域）：

Ⅰ： $U(x) = \infty$ $\therefore$ $\psi_I(x) = 0$ $(x \le -\frac{a}{2})$

Ⅲ：$U(x) = \infty$ $\therefore$ $\psi_{III}(x) = 0$ $(x \ge \frac{a}{2})$

Ⅱ：$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} = E\psi_{II}$$

$$\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2}\psi_{II} = 0$$

令 $$k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$$

$$\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2}+k^2\psi_{II}=0$$

$$\psi_{II}=A\sin(kx+\delta)$$

标准条件：$\begin{cases}\psi_I(-\frac{a}{2})=\psi_{II}(-\frac{a}{2})\\ \psi_{II}(\frac{a}{2})=\psi_{III}(\frac{a}{2})\end{cases}$

$$\therefore \quad A\sin(-ka+\delta)=0$$

$$\because \quad A\neq 0$$

$$\therefore \quad \sin(-ka+\delta)=0$$

取 $\delta-k\frac{a}{2}=0$，即 $\delta=k\frac{a}{2}$

$$\therefore \quad \psi_{II}(x)=A\sin k(x+\frac{a}{2})$$

$$A\sin ka=0$$
$$\Rightarrow \sin ka=0$$

$$\therefore \quad ka=n\pi \qquad (n=1,2,\cdots)$$

$$k=\frac{\pi}{a}n$$

$$\therefore \quad \text{粒子的波函数为} \qquad \psi(x)=\begin{cases}A\sin\frac{\pi n}{a}(x+\frac{a}{2}), & |x|\le\frac{a}{2}\\ 0, & |x|\ge\frac{a}{2}\end{cases}$$

粒子的能级为 $E=\frac{\hbar^2}{2\mu}k^2=\frac{n^2\pi^2k^2}{2\mu a}$ $\qquad (n=1,2,3,\cdots)$

由归一化条件，得

$$1=\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x)|^2d\tau=A^2\int_{-a/2}^{a/2}\sin^2\frac{n\pi}{a}(x+\frac{a}{2})dx$$

$$=A^2\int_{-a/2}^{a/2}\frac{1}{2}[1-\cos\frac{2n\pi}{a}(x+\frac{a}{2})]dx$$

$$=A^2\cdot\frac{a}{2}-A^2\int_{-a/2}^{a/2}\cos\frac{2n\pi}{a}(x+\frac{a}{2})dx$$

$$= \frac{a}{2}A^2 - A^2 \cdot \frac{a}{2n\pi}\sin\frac{2n\pi}{a}(x+\frac{a}{2})\Big|_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}$$

$$= \frac{a}{2}A^2$$

$\therefore \quad A = \sqrt{\frac{2}{a}}$

$\therefore$ 粒子的归一化波函数为

$$\psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi n}{a}(x+\frac{a}{2}), & |x| \le \frac{a}{2} \\ 0, & |x| \ge \frac{a}{2} \end{cases}$$

10、证明：处于 1s、2p 和 3d 态的氢原子中的电子，当它处于距原子核的距离分别为$a_0$、$4a_0$、$9a_0$的球壳处的几率最（$a_0$为第一玻尔轨道半径）。

证：$1s:\ \omega(r)_{10}dr = |R_{10}|^2 r^2 dr$

$$= (\frac{1}{a_0})^3 \cdot 4e^{-2r/a_0} \cdot r^2 dr$$

$$\omega_{10}(r) = (\frac{1}{a_0})^3 \cdot 4r^2 e^{-2r/a_0}$$

$$\frac{d\omega_{10}}{dr} = 4(\frac{1}{a_0})^3 \cdot (2r - \frac{2}{a_0}r^2)e^{-2r/a_0}$$

$$= 8(\frac{1}{a_0})^3 \cdot (1 - \frac{1}{a_0}r)re^{-2r/a_0}$$

令 $\frac{d\omega_{10}}{dr} = 0$，则得

$$r_{11} = 0 \qquad r_{11} = a_0$$

$$\frac{d^2\omega_{10}}{dr^2} = 8(\frac{1}{a_0})^3 \cdot [(1 - \frac{2}{a_0}r) - \frac{\partial r}{a_0}(1 - \frac{r}{a_0})e^{-2r/a_0}]$$

$$= 8(\frac{1}{a_0})^3 \cdot (1 - \frac{4r}{a_0} + \frac{2r^2}{a_0^2})e^{-2r/a_0}]$$

$$\left.\frac{d^2\omega_{10}}{dr^2}\right|_{r_{11}=0} > 0 \qquad \therefore r_{11}=0 \text{ 为几率最小处。}$$

$$\left.\frac{d^2\omega_{10}}{dr^2}\right|_{r_{11}=a_0} < 0 \qquad \therefore r_{11}=a_0 \text{ 为几率最大处。}$$

$$2p:\ \omega_{21}(r)dr = |R_{21}|^2 r^2 dr$$

$$= (\frac{1}{2a_0})^3 \cdot \frac{r^2}{3a_0^2} e^{-r/a_0} \cdot r^2 dr$$

$$\omega_{21}(r) = (\frac{1}{2a_0})^3 \cdot \frac{r^2}{3a_0^2} e^{-r/a_0}$$

$$\frac{d\omega_{21}}{dr} = \frac{1}{24a_0^5} \cdot (4 - \frac{1}{a_0} r) r^3 e^{-r/a_0}$$

$$\frac{d^2\omega_{21}}{dr^2} = \frac{1}{24a_0^5}(1 - \frac{8}{a_0} r + \frac{r^2}{a_0^2})\ r^2 e^{-r/a_0}]$$

令 $\frac{d\omega_{21}}{dr} = 0$，则得

$$r_{21} = 0 \qquad r_{22} = 4a_0$$

$$\left.\frac{d^2\omega_{21}}{dr^2}\right|_{r_{22}=4a_0} < 0 \qquad \therefore \qquad r_{22} = 4a_0 \text{ 为最大几率位置。}$$

当 $0 < r < 4a_0$ 时，

$$\frac{d^2\omega_{10}}{dr^2} > 0 \qquad \therefore r = 0 \text{ 为几率最小位置。}$$

$$3d:\ \omega_{32}(r) = |R_{32}|^2 = \frac{8}{98415a_0^7} r^6 e^{-\frac{2r}{3a_0}}$$

$$\frac{d\omega_{32}}{dr} = \frac{8}{98415a_0^7}(5 - \frac{2r}{3a_0}) r^5 e^{-\frac{2r}{3a_0}}$$

令 $\frac{d\omega_{32}}{dr} = 0$，得

$$r_{31} = 0, \qquad r_{32} = 9a_0$$

同理可知　　$r_{31}=0$ 为几率最小处。

$r_{32}=9a_0$ 为几率最大处。

11、求一维谐振子处在第一激发态时几率最大的位置。

解：$\psi_1(x)=\sqrt{\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}}\cdot 2\alpha x e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$

$$\omega_1(x)=|\psi_1(x)|^2=\frac{2\alpha^3}{\sqrt{\pi}}x^2e^{-\alpha^2x^2}$$

$$\frac{d\omega_1}{dx}=\frac{4\alpha^3}{\sqrt{\pi}}(x-\alpha^2x^3)e^{-\alpha^2x^2}$$

$$=\frac{4\alpha^3}{\sqrt{\pi}}(1-\alpha^2x^2)xe^{-\alpha^2x^2}$$

$$\frac{d^2\omega_1}{dx^2}=\frac{4\alpha^3}{\sqrt{\pi}}(1-5\alpha^2x^2+2\alpha^4x^4)e^{-\alpha^2x^2}$$

令　$\frac{d\omega_1}{dx}=0$，得

$$x_1=0,\quad x_2=\pm\frac{1}{2}=\pm\sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega_0}}=\pm x_0$$

$\left.\frac{d^2\omega_1}{dx^2}\right|_{x_1=0}>0$，　　$\therefore$　　$x_1=0$ 为几率最小处。

$\left.\frac{d^2\omega_1}{dx^2}\right|_{x_2=\pm\frac{1}{2}}<0$，　　$\therefore$　　$x_2=\pm\frac{1}{2}=\pm x_0$ 为几率最大处。

6．设氢原子处在 $\psi(r,\theta,\phi)=\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}e^{-r/a_0}$ 的态（$a_0$ 为第一玻尔轨道半径），求

①$r$ 的平均值；

②势能 $-\frac{e^2}{r}$ 的平均值。

解：①$\bar{r}=\int_0^\infty\frac{1}{\pi a_0^3}r^3e^{-2r/a_0}dr\int_0^\pi\sin\theta\,d\theta\int_0^{2\pi}d\phi$

$$= \frac{1}{\pi a_0^3} \times 3 \times 2 \times 1 \times (\frac{a_0}{2})^3 \times (\frac{a_0}{2}) \times 4\pi$$

$$= \frac{3}{2} a_0$$

② $$-\overline{\frac{e_s^2}{r}} = -e^2 \cdot \frac{1}{\pi a_0^3} \cdot 4\pi \int_0^\infty r e^{-\frac{2r}{a_0}} dr$$

$$= -\frac{e_s^2}{a_0^3} \times 4 \times (\frac{a_0}{2}) \times (\frac{a_0}{2})$$

$$= -\frac{e_s^2}{a_0}$$

12、粒子在势能为

$$U = \begin{cases} U_1, & \text{当} x \le 0 \\ 0, & \text{当} 0 < x < a \\ U_2, & \text{当} x \ge a \end{cases}$$

的场中运动。证明对于能量 $E < U_1 < U_2$ 的状态，其能量由下式决定：

$$ka = n\pi - \sin^{-1} \frac{\hbar k}{\sqrt{2\mu U_1}} - \frac{\hbar k}{\sqrt{2\mu U_2}}$$

（其中 $k = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}$ ）

证：方程

Ⅰ： $$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi_I}{dx^2} + U_1 \psi_I = E\psi_{II} \qquad (x \le 0)$$

Ⅱ： $$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + 0\psi_{II} = E\psi_{II} \qquad (< 0 x < A)$$

Ⅲ： $$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi_{III}}{dx^2} + U_2 \psi_{III} = E\psi_{III} \qquad (x \ge 0)$$

令 $\alpha = \sqrt{\frac{2\mu(U_1 - E)}{\hbar^2}}, \quad k = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}, \quad \beta = \sqrt{\frac{2\mu(U_2 - E)}{\hbar^2}},$

则得

Ⅰ： $\frac{d^2\psi_I}{dx^2}+\alpha^2\psi_I=0$

Ⅱ： $\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2}+k^2\psi_{II}=0$

Ⅲ： $\frac{d^2\psi_{III}}{dx^2}+\beta^2\psi_{III}=0$

其通解为

$$\psi_I=C_1e^{\alpha x}+D_1e^{-\alpha x}$$

$$\psi_{II}=A\sin(kx+\delta)$$

$$\psi_{III}=C_2e^{\beta x}+D_2e^{-\beta x}$$

利用标准条件，由有限性知

$$x\longrightarrow-\infty,\ \psi_I\longrightarrow 0, D_1=0$$

$$x=+\infty,\ \psi_{III}=0, C_2=0$$

$\therefore$ $$\psi_I=C_1e^{\alpha x}$$

$$\psi_{II}=A\sin(kx+\delta)$$

$$\psi_{III}=D_2e^{-\beta x}$$

由连续性知

$$\psi_I(0)=\psi_{II}(0)\Rightarrow C_1=A\sin\delta$$

①

$$\psi_I'(0)=\psi_{II}'(0)\Rightarrow \alpha C_1=kA\cos\delta$$

②

$$\psi_{II}(a)=\psi_{III}(a)\Rightarrow A\sin(ka+\delta)=D_2e^{-\beta a}\qquad ③$$

$$\psi_{II}'(a)=\psi_{III}'(a)\Rightarrow kA\cos(ka+\delta)=-\beta D_2e^{-\beta a}\qquad ④$$

由①、②，得

$$tg\delta=\frac{k}{\alpha}$$

⑤

由③、④，得

$$tg(ka+\delta)=-\frac{k}{\beta}$$

⑥

而 $tg(ka+\delta)=\dfrac{tgka+tg\delta}{1-tgka\cdot tg\delta}$

把⑤、⑥代入，得 $\dfrac{tgka+tg\delta}{1-tgka\cdot tg\delta}=-\dfrac{k}{\beta}$

整理，得 $-tgka=\dfrac{\dfrac{k}{\beta}+tg\delta}{1-\dfrac{k}{\beta}tg\delta}$

$$tg(n\pi-ka)=\frac{\frac{k}{\beta}+tg\delta}{1-\frac{k}{\beta}tg\delta}$$

令 $tg\tau=\dfrac{k}{\beta}$

$$tg(n\pi-ka)=\frac{\frac{k}{\beta}+tg\delta}{1-\frac{k}{\beta}tg\delta}=tg(\tau+\delta)$$

$\therefore$ $n\pi-ka=\tau+\delta$

$ka=n\pi-\tau-\delta$

由 $\sin x=\dfrac{tgx}{\sqrt{1+tg^2x}}$，得

$$\sin\tau=\frac{k/\beta}{\sqrt{1+(\frac{k}{\beta})^2}}=\frac{k}{\sqrt{\beta^2+k^2}}=\frac{\hbar k}{\sqrt{2\mu U_2}}$$

$$\sin\delta=\frac{k/\alpha}{\sqrt{1+(\frac{k}{\alpha})^2}}=\frac{k}{\sqrt{\alpha^2+k^2}}=\frac{\hbar k}{\sqrt{2\mu U_1}}$$

$$ka = n\pi - \sin^{-1}\frac{\hbar k}{\sqrt{2\mu U_1}} - \sin^{-1}\frac{\hbar k}{\sqrt{2\mu U_2}}$$ ###

13、设波函数$\psi(x) = \sin x$，求$[(\frac{d}{dx})x]^2\psi - [x\frac{d}{dx}] = ?$

解：$$\text{原式} = [(\frac{d}{dx})x][(\frac{d}{dx})x]\psi - [x\frac{d}{dx}][x\frac{d}{dx}]\psi$$

$$= [(\frac{d}{dx})x][\sin x + x\cos x]\psi - [x\frac{d}{dx}][x\cos x]\psi$$

$$= (\sin x + xx) + x(\cos x + \cos x - x) - x(x - x)$$

$$= \sin x + 2x\cos x$$

14、说明：如果算符$\hat{A}$和$\hat{B}$都是厄米的，那么

$(\hat{A} + \hat{B})$也是厄米的

证：$$\int \psi_1^*(\hat{A} + \hat{B})\psi_2 d\tau = \int \psi_1^* \hat{A}\psi_2 d\tau + \int \psi_1^* \hat{B}\psi_2 d\tau$$

$$= \int \psi_2(\hat{A}\psi_1)^* d\tau + \int \psi_2(\hat{B}\psi_1)^* d\tau$$

$$= \int \psi_2[(\hat{A} + \hat{B})\psi_1]^* d\tau$$

$\therefore$ $\hat{A} + \hat{B}$也是厄米的。

15、问下列算符是否是厄米算符：

① $\hat{x}\hat{p}_x$ ② $\frac{1}{2}(\hat{x}\hat{p}_x + \hat{p}_x\hat{x})$

解：①$$\int \psi_1^*(\hat{x}\hat{p}_x)\psi_2 d\tau = \int \psi_1^* \hat{x}(\hat{p}_x\psi_2)d\tau$$

$$= \int (\hat{x}\psi_1)^* \hat{p}_x\psi_2 d\tau = \int (\hat{p}_x\hat{x}\psi_1)^* \psi_2 d\tau$$

因为 $\hat{p}_x\hat{x} \neq \chi\hat{p}_x$

$\therefore$ $\hat{x}\hat{p}_x$ 不是厄米算符。

②$$\int \psi_1^*[\frac{1}{2}(\hat{x}\hat{p}_x + \hat{p}_x\hat{x})]\psi_2 d\tau = \frac{1}{2}\int \psi_1^*(\hat{x}\hat{p}_x)\psi_2 d\tau + \frac{1}{2}\int \psi_1^*(\hat{p}_x\hat{x})\psi_2 d\tau$$

$$=\frac{1}{2}\int(\hat{p}_x\hat{x}\psi_1)^*\psi_2 d\tau+\frac{1}{2}\int(\hat{x}\hat{p}_x\psi_1)^*\psi_2 d\tau$$

$$=\int[\frac{1}{2}(\hat{x}\hat{p}_x+\hat{p}_x\hat{x}))\psi_1]^*\psi_2 d\tau$$

$$=\int[\frac{1}{2}(\hat{p}_x\hat{x}+\hat{x}\hat{p}_x)\psi_1]^*\psi_2 d\tau$$

$\therefore$ $\frac{1}{2}(\hat{x}\hat{p}_x+\hat{p}_x\hat{x})$ 是厄米算符。 ##

16、如果算符 $\hat{\alpha}$、$\hat{\beta}$ 满足关系式 $\hat{\alpha}\hat{\beta}-\hat{\beta}\hat{\alpha}=1$，求证

① $\hat{\alpha}\hat{\beta}^2-\hat{\beta}^2\hat{\alpha}=2\hat{\beta}$

② $\hat{\alpha}\hat{\beta}^3-\hat{\beta}^3\hat{\alpha}=3\hat{\beta}^2$

证： ① $\hat{\alpha}\hat{\beta}^2-\hat{\beta}^2\hat{\alpha}=(1+\hat{\beta}^2\hat{\alpha})-\hat{\beta}^2\hat{\alpha}$

$$=\hat{\beta}^2+\hat{\beta}\hat{\alpha}\hat{\beta}-\hat{\beta}^2\hat{\alpha}$$

$$=\hat{\beta}^2+\hat{\beta}(1+\hat{\alpha}\hat{\beta})-\hat{\beta}^2\hat{\alpha}$$

$$=2\hat{\beta}$$

② $\hat{\alpha}\hat{\beta}^3-\hat{\beta}^3\hat{\alpha}=(2\hat{\beta}+\hat{\beta}^2\hat{\alpha})\hat{\beta}-\hat{\beta}^3\hat{\alpha}$

$$=2\hat{\beta}^2+\hat{\beta}^2\hat{\alpha}\hat{\beta}-\hat{\beta}^3\hat{\alpha}$$

$$=2\hat{\beta}^2+\hat{\beta}^2(1+\hat{\beta}\hat{\alpha})-\hat{\beta}^3\hat{\alpha}$$

$$=3\hat{\beta}^2$$

17、求 $\hat{L}_x\hat{P}_x-\hat{P}_x\hat{L}_x=?$

$$\hat{L}_y\hat{P}_x-\hat{P}_x\hat{L}_y=?$$

$$\hat{L}_z\hat{P}_x-\hat{P}_x\hat{L}_z=?$$

解： $\hat{L}_x\hat{P}_x-\hat{P}_x\hat{L}_x=(\hat{y}\hat{P}_z-\hat{z}\hat{P}_y)\hat{P}_x-\hat{P}_x(\hat{y}\hat{P}_z-\hat{z}\hat{P}_y)$

$$=\hat{y}\hat{P}_z\hat{P}_x-\hat{z}\hat{P}_y\hat{P}_x-\hat{P}_x\hat{y}\hat{P}_z+\hat{P}_x\hat{z}\hat{P}_y)$$

$$= \hat{y}\hat{P}_z\hat{P}_x - \hat{z}\hat{P}_y\hat{P}_x - \hat{y}\hat{P}_z\hat{P}_x + \hat{z}\hat{P}_y\hat{P}_x)$$

$$= 0$$

$$\hat{L}_y\hat{P}_x - \hat{P}_x\hat{L}_y = (\hat{z}\hat{P}_x - \hat{x}\hat{P}_z)\hat{P}_x - \hat{P}_x(\hat{z}\hat{P}_x - \hat{x}\hat{P}_z)$$

$$= \hat{z}\hat{P}_x^2 - \hat{x}\hat{P}_z\hat{P}_x - \hat{P}_x\hat{z}\hat{P}_z + \hat{P}_x\hat{x}\hat{P}_z)$$

$$= \hat{z}\hat{P}_x^2 - \hat{x}\hat{P}_z\hat{P}_x - \hat{z}\hat{P}_x^2 + \hat{P}_x\hat{x}\hat{P}_z)$$

$$= -(\hat{x}\hat{P}_x - \hat{P}_x\hat{x})\hat{P}_z$$

$$= -i\hbar\hat{P}_z$$

$$\hat{L}_z\hat{P}_x - \hat{P}_x\hat{L}_z = (\hat{x}\hat{P}_y - \hat{y}\hat{P}_x)\hat{P}_x - \hat{P}_x(\hat{x}\hat{P}_y - \hat{y}\hat{P}_x)$$

$$= \hat{x}\hat{P}_y\hat{P}_x - \hat{y}\hat{P}_x^2 - \hat{P}_x\hat{x}\hat{P}_y + \hat{P}_x\hat{y}\hat{P}_x$$

$$= \hat{x}\hat{P}_x\hat{P}_y - \hat{y}\hat{P}_x^2 - \hat{P}_x\hat{x}\hat{P}_y + \hat{y}\hat{P}_x^2$$

$$= (\hat{x}\hat{P}_x - \hat{P}_x\hat{x})\hat{P}_y$$

$$= i\hbar\hat{P}_y$$

18、 $\hat{L}_x\hat{x} - \hat{x}\hat{L}_x = ?$

$\hat{L}_y\hat{x} - \hat{x}\hat{L}_y = ?$

$\hat{L}_z\hat{x} - \hat{x}\hat{L}_z = ?$

解： $\hat{L}_x\hat{x} - \hat{x}\hat{L}_x = (\hat{y}\hat{P}_z - \hat{z}\hat{P}_y)\hat{x} - \hat{x}(\hat{y}\hat{P}_z - \hat{z}\hat{P}_y)$

$$= \hat{y}\hat{P}_z\hat{x} - \hat{z}\hat{P}_y\hat{x} - \hat{x}\hat{y}\hat{P}_z + \hat{x}\hat{z}\hat{P}_y$$

$$= \hat{y}\hat{P}_z\hat{x} - \hat{z}\hat{P}_y\hat{x} - \hat{y}\hat{P}_z\hat{x} + \hat{z}\hat{P}_y\hat{x}$$

$$= 0$$

$$\hat{L}_y\hat{x} - \hat{x}\hat{L}_y = (\hat{z}\hat{P}_x - \hat{x}\hat{P}_z)\hat{x} - \hat{x}(\hat{z}\hat{P}_x - \hat{x}\hat{P}_z)$$

$$= \hat{z}\hat{P}_x\hat{x} - \hat{x}\hat{P}_z\hat{x} - \hat{x}\hat{z}\hat{P}_x + \hat{x}^2\hat{P}_z$$

$$= \hat{z}(\hat{P}_x\hat{x} - \hat{x}\hat{P}_x)$$

$$= -i\hbar\hat{z}$$

$$\hat{L}_z\hat{x} - \hat{x}\hat{L}_z = (\hat{x}\hat{P}_y - \hat{y}\hat{P}_x)\hat{x} - \hat{x}(\hat{x}\hat{P}_y - \hat{y}\hat{P}_x)$$

$$= \hat{x}^2\hat{P}_y - \hat{y}\hat{P}_x\hat{x} - \hat{x}^2\hat{P}_y - \hat{y}\hat{x}\hat{P}_x$$

$$= \hat{y}(\hat{x}\hat{P}_x - \hat{P}_x\hat{x})$$

$$= -i\hbar\hat{y}$$

# 第四章　态和力学量的表象

4.1.求在动量表象中角动量 $L_x$ 的矩阵元和 $L_x^2$ 的矩阵元。

解：$(L_x)_{p'p} = (\frac{1}{2\pi\hbar})^3 \int e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}'\cdot\vec{r}} (y\hat{p}_z - z\hat{p}_y) e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} d\tau$

$$= (\frac{1}{2\pi\hbar})^3 \int e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}'\cdot\vec{r}} (yp_z - zp_y) e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} d\tau$$

$$= (\frac{1}{2\pi\hbar})^3 \int e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}'\cdot\vec{r}} (-i\hbar)(p_z\frac{\partial}{\partial p_y} - p_y\frac{\partial}{\partial p_z}) e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} d\tau$$

$$= (-i\hbar)(p_z\frac{\partial}{\partial p_y} - p_y\frac{\partial}{\partial p_z})(\frac{1}{2\pi\hbar})^3 \int e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{r}} d\tau$$

$$= i\hbar(p_y\frac{\partial}{\partial p_z} - p_z\frac{\partial}{\partial p_y})\delta(\vec{p} - \vec{p}')$$

$$(L_x^2)_{p'p} = \int \psi^*_{\vec{p}'}(\vec{x}) L_x^2 \psi_{\vec{p}} d\tau$$

$$= (\frac{1}{2\pi\hbar})^3 \int e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}'\cdot\vec{r}} (y\hat{p}_z - z\hat{p}_y)^2 e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} d\tau$$

$$= (\frac{1}{2\pi\hbar})^3 \int e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}'\cdot\vec{r}} (y\hat{p}_z - z\hat{p}_y)(y\hat{p}_z - z\hat{p}_y) e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} d\tau$$

$$= (\frac{1}{2\pi\hbar})^3 \int e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}'\vec{r}} (y\hat{p}_z - z\hat{p}_y)(i\hbar)(p_y\frac{\partial}{\partial p_z} - p_z\frac{\partial}{\partial p_y}) e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}'\vec{r}} d\tau$$

$$= (i\hbar)(p_y\frac{\partial}{\partial p_z} - p_z\frac{\partial}{\partial p_y})(\frac{1}{2\pi\hbar})^3 \int e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}'\cdot\vec{r}} (y\hat{p}_z - z\hat{p}_y) e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} d\tau$$

$$= -\hbar^2 (p_y \frac{\partial}{\partial p_z} - p_z \frac{\partial}{\partial p_y})^2 (\frac{1}{2\pi\hbar})^3 \int e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{r}} d\tau$$

$$= -\hbar^2 (p_y \frac{\partial}{\partial p_z} - p_z \frac{\partial}{\partial p_y})^2 \delta(\vec{p} - \vec{p}')$$

#

4.2 求能量表象中，一维无限深势阱的坐标与动量的矩阵元。

解：基矢：$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x$

能量：$\boldsymbol{E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2\mu a^2}}$

对角元：$x_{mm} = \int_0^a \frac{2}{a} x \sin^2 \frac{m\pi}{a} x dx = \frac{a}{2}$

$$\int u \cos nu du = \frac{1}{n^2} \cos nu + \frac{u}{n} \sin nu + c$$

当时，$\boldsymbol{m \neq n}$ $\quad x_{mn} = \frac{2}{a} \int_0^a (\sin \frac{m\pi}{a} x) \cdot x \cdot (\sin \frac{n\pi}{a}) dx$

$$= \frac{1}{a} \int_0^a x \left[ \cos \frac{(m-n)\pi}{a} x - \cos \frac{(m+n)\pi}{a} x \right] dx$$

$$= \frac{1}{a} \left[ [\frac{a^2}{(m-n)^2 \pi^2} \cos \frac{(m-n)\pi}{a} x + \frac{ax}{(m-n)\pi} \sin \frac{(m-n)\pi}{a} x] \right|_0^a$$

$$- [\frac{a^2}{(m+n)^2 \pi^2} \cos \frac{(m+n)\pi}{a} x + \frac{ax}{(m+n)\pi} \sin \frac{(m+n)\pi}{a} x] \Big|_0^a \Big]$$

$$= \frac{a}{\pi^2} \left[ (-1)^{m-n} - 1 \right] \left[ \frac{1}{(m-n)^2} - \frac{1}{(m+n)^2} \right]$$

$$= \frac{a}{\pi^2} \frac{4mn}{(m^2 - n^2)^2} \left[ (-1)^{m-n} - 1 \right]$$

$$p_{mn}=\int u_m^{*}(x)\hat{p}u_n(x)dx=-i\hbar\int_0^a\frac{2}{a}\sin\frac{m\pi}{a}x\cdot\frac{d}{dx}\sin\frac{n\pi}{a}xdx$$

$$=-i\frac{2n\pi\hbar}{a^2}\int_0^a\sin\frac{m\pi}{a}x\cdot\cos\frac{n\pi}{a}xdx$$

$$=-i\frac{n\pi\hbar}{a^2}\int_0^a\left[\sin\frac{(m+n)\pi}{a}x+\sin\frac{(m-n)\pi}{a}x\right]dx$$

$$=i\frac{n\pi\hbar}{a^2}\left[\frac{a}{(m+n)\pi}\cos\frac{(m+n)\pi}{a}x+\frac{a}{(m-n)\pi}\cos\frac{(m-n)\pi}{a}x\right]\Bigg|_0^a$$

$$=i\frac{n\pi\hbar}{a^2}\frac{a}{\pi}\left[\frac{1}{(m+n)}+\frac{1}{(m-n)}\right]\left[(-1)^{m-n}-1\right]$$

$$=\left[(-1)^{m-n}-1\right]\frac{i2mn\hbar}{(m^2-n^2)a}$$

$$\int\sin mu\cos nudu=-\frac{\cos(m+n)u}{2(m+n)}-\frac{\cos(m-n)u}{2(m-n)}+C$$

#

4.3 求在动量表象中线性谐振子的能量本征函数。

解：定态薛定谔方程为

$$-\frac{1}{2}\mu\omega^2\hbar^2\frac{d^2}{dp^2}C(p,t)+\frac{p^2}{2\mu}C(p,t)=EC(p,t)$$

即 $$-\frac{1}{2}\mu\omega^2\hbar^2\frac{d^2}{dp^2}C(p,t)+(E-\frac{p^2}{2\mu})C(p,t)=0$$

两边乘以$\frac{2}{\hbar\omega}$，得

$$-\frac{1}{\frac{1}{\mu\omega\hbar}}\frac{d^2}{dp^2}C(p,t)+(\frac{2E}{\hbar\omega}-\frac{p^2}{\mu\omega\hbar})C(p,t)=0$$

令$\xi=\sqrt{\frac{1}{\mu\omega\hbar}}p=\beta\,p,\quad\beta=\sqrt{\frac{1}{\mu\omega\hbar}}$

$$\lambda=\frac{2E}{\hbar\omega}$$

$$\frac{d^2}{d\xi^2}C(p,t)+(\lambda-\xi^2)C(p,t)=0$$

跟课本 P.39(2.7-4)式比较可知，线性谐振子的能量本征值和本征函数为

$$E_n = (n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega$$

$$C(p,t) = N_n e^{-\frac{1}{2}\beta^2 p^2} H_n(\beta p) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

式中 $\boldsymbol{N_n}$ 为归一化因子，即

$$N_n = (\frac{\beta}{\pi^{1/2}2^n n!})^{1/2}$$

#

4.4.求线性谐振子哈密顿量在动量表象中的矩阵元。

解：$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2$

$$H_{pp'} = \int \psi_p^*(x)\hat{H}\psi_p(x)dx$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar}\int e^{-\frac{i}{\hbar}px}(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2)e^{\frac{i}{\hbar}p'x}dx$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2\mu}(\frac{i}{\hbar}p')^2\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(p'-p)x}dx + \frac{1}{2}\mu\omega^2\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{\frac{i}{\hbar}(p'-p)x}dx$$

$$= \frac{p'^2}{2\mu}\delta(p'-p) + \frac{1}{2}\mu\omega^2\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}(\frac{\hbar}{i})^2\frac{\partial^2}{\partial p'^2}e^{\frac{i}{\hbar}(p'-p)x}dx$$

$$= \frac{p'^2}{2\mu}\delta(p'-p) + \frac{1}{2}\mu\omega^2(\frac{\hbar}{i})^2\frac{\partial^2}{\partial p'^2}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{\alpha\pi\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}(p'-p)x}dx$$

$$= \frac{p^2}{2\mu}\delta(p'-p) - \frac{1}{2}\mu\omega^2\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial p'^2}\delta(p'-p)$$

$$= \frac{p^2}{2\mu}\delta(p'-p) - \frac{1}{2}\mu\omega^2\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial p^2}\delta(p'-p)$$

#

4.5　设已知在 $\hat{L}^2$ 和 $\hat{L}_Z$ 的共同表象中，算符 $\hat{\boldsymbol{L}}_x$ 和 $\hat{\boldsymbol{L}}_y$ 的矩阵分别为

$$\boldsymbol{L}_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{L}_y = \frac{\sqrt{2}\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&-i&0\\i&0&-i\\0&i&0\end{pmatrix}$$

求它们的本征值和归一化的本征函数。最后将矩阵 $\boldsymbol{L}_x$ 和 $\boldsymbol{L}_y$ 对角化。

解：$\boldsymbol{L}_x$的久期方程为

$$\begin{vmatrix} -\lambda & \frac{\hbar}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{\hbar}{\sqrt{2}} & -\lambda & \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{\hbar}{\sqrt{2}} & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \quad \Rightarrow \quad -\lambda^3 + \hbar^2\lambda = 0$$

$$\Rightarrow \lambda_1 = 0,\ \lambda_2 = \hbar,\ \lambda_3 = -\hbar$$

$\therefore \hat{\boldsymbol{L}}_x$的本征值为$\boldsymbol{0},\ \hbar, -\hbar$

$\hat{\boldsymbol{L}}_x$的本征方程

$$\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \boldsymbol{0} & \boldsymbol{1} & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{1} & \boldsymbol{0} & \boldsymbol{1} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{1} & \boldsymbol{0} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \boldsymbol{a_1} \\ \boldsymbol{a_2} \\ \boldsymbol{a_3} \end{pmatrix} = \boldsymbol{\lambda}\begin{pmatrix} \boldsymbol{a_1} \\ \boldsymbol{a_2} \\ \boldsymbol{a_3} \end{pmatrix}$$

其中$\boldsymbol{\psi} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{a_1} \\ \boldsymbol{a_2} \\ \boldsymbol{a_3} \end{pmatrix}$设为$\hat{\boldsymbol{L}}_x$的本征函数$\hat{\boldsymbol{L}}^2$和$\hat{\boldsymbol{L}}_Z$共同表象中的矩阵

当$\boldsymbol{\lambda_1 = 0}$时，有

$$\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} a_2 \\ a_1 + a_3 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow a_3 = -a_1, \quad a_2 = 0$$

$$\therefore \ \psi_0 = \begin{pmatrix} a_1 \\ 0 \\ -a_1 \end{pmatrix}$$

由归一化条件

$$1 = \psi_0^+\psi_0 = (a_1^*, 0, -a_1^*)\begin{pmatrix} a_1 \\ 0 \\ -a_1 \end{pmatrix} = 2|a_1|^2$$

取 $a_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$

$$\psi_0=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\0\\-\frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}$$ 对应于 $\hat{\boldsymbol{L}}_x$ 的本征值 0 。

当 $\boldsymbol{\lambda_2=\hbar}$ 时，有

$$\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix}=\hbar\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}a_2\\\frac{1}{\sqrt{2}}(a_1+a_3)\\\frac{1}{\sqrt{2}}a_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix}\Rightarrow\begin{cases}a_2=\sqrt{2}a_1\\a_2=\sqrt{2}a_3\\a_3=a_1\end{cases}$$

$$\therefore\quad \psi_{\hbar}=\begin{pmatrix}a_1\\\sqrt{2}a_1\\a_1\end{pmatrix}$$

由归一化条件

$$\boldsymbol{1=(a_1^*,\sqrt{2}a_1^*,a_1^*)\begin{pmatrix}a_1\\\sqrt{2}a_1\\a_1\end{pmatrix}=4|a_1|^2}$$

取 $\boldsymbol{a_1=\frac{1}{2}}$

$\therefore$ 归一化的 $\boldsymbol{\psi_{\hbar}=\begin{pmatrix}\frac{1}{2}\\\frac{1}{\sqrt{2}}\\\frac{1}{2}\end{pmatrix}}$ 对应于 $\hat{\boldsymbol{L}}_x$ 的本征值 $\hbar$

当 $\boldsymbol{\lambda_2=-\hbar}$ 时，有

$$\boldsymbol{\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix}=-\hbar\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix}}$$

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}a_1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(a_1+a_3) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -a_1 \\ -a_2 \\ -a_3 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} a_2 = -\sqrt{2}a_1 \\ a_2 = -\sqrt{2}a_3 \\ a_3 = a_1 \end{cases}$$

$$\therefore \quad \psi_{-\hbar} = \begin{pmatrix} a_1 \\ -\sqrt{2}a_1 \\ a_1 \end{pmatrix}$$

由归一化条件

$$1 = (a_1^*, -\sqrt{2}a_1^*, a_1^*)\begin{pmatrix} a_1 \\ -\sqrt{2}a_1 \\ a_1 \end{pmatrix} = 4|a_1|^2$$

取 $a_1 = \frac{1}{2}$

$\therefore$归一化的$\psi_{-\hbar} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}$对应于$\hat{L}_x$的本征值$-\hbar$

由以上结果可知，从$\hat{L}^2$和$\hat{L}_z$的共同表象变到$\hat{L}_x$表象的变换矩阵为

$$S = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$\therefore$对角化的矩阵为$L_x' = S^+ L_x S$

$$L_x' = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$$=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&0&0\\ \frac{1}{\sqrt{2}}&1&\frac{1}{\sqrt{2}}\\ -\frac{1}{\sqrt{2}}&1&-\frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}&\frac{1}{2}&\frac{1}{2}\\ 0&\frac{1}{\sqrt{2}}&-\frac{1}{\sqrt{2}}\\ -\frac{1}{\sqrt{2}}&\frac{1}{2}&\frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

$$=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&0&0\\ 0&\sqrt{2}&0\\ 0&0&-\sqrt{2}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&0&0\\ 0&\hbar&0\\ 0&0&-\hbar\end{pmatrix}$$

按照与上同样的方法可得

$\hat{L}_y$ 的本征值为 $0,\ \hbar,-\hbar$

$\hat{L}_y$ 的归一化的本征函数为

$$\psi_0=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\ 0\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}\qquad \psi_{\hbar}=\begin{pmatrix}\frac{1}{2}\\ \frac{i}{\sqrt{2}}\\ -\frac{1}{2}\end{pmatrix}\qquad \psi_{-\hbar}=\begin{pmatrix}\frac{1}{2}\\ -\frac{i}{\sqrt{2}}\\ -\frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

从 $\hat{L}^2$ 和 $\hat{L}_z$ 的共同表象变到 $\hat{L}_y$ 表象的变换矩阵为

$$S=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}&\frac{1}{2}&\frac{1}{2}\\ 0&\frac{i}{\sqrt{2}}&-\frac{i}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}}&-\frac{1}{2}&-\frac{1}{2}\end{pmatrix}\Rightarrow S^{+}=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}&0&\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{2}&-\frac{i}{\sqrt{2}}&-\frac{1}{2}\\ \frac{1}{2}&\frac{i}{\sqrt{2}}&-\frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

利用 S 可使 $\hat{L}_y$ 对角化

$$L_y'=S^{+}L_yS=\begin{pmatrix}0&0&0\\ 0&\hbar&0\\ 0&0&-\hbar\end{pmatrix}$$

#

4.6 求连续性方程的矩阵表示

解：连续性方程为

$$\frac{\partial\omega}{\partial t}=-\nabla\cdot\vec{J}$$

$$\therefore \qquad \vec{J}=\frac{i\hbar}{2\mu}(\psi\nabla\psi^{*}-\psi^{*}\nabla\psi)$$

而 $$\nabla\cdot\vec{J}=\frac{i\hbar}{2\mu}\nabla\cdot(\psi\nabla\psi^{*}-\psi^{*}\nabla\psi)$$

$$=\frac{i\hbar}{2\mu}(\psi\nabla^{2}\psi^{*}-\psi^{*}\nabla^{2}\psi)$$

$$=\frac{1}{i\hbar}(\psi\hat{T}\psi^{*}-\psi^{*}\hat{T}\psi)$$

$$\therefore \qquad i\hbar\frac{\partial\omega}{\partial t}=(\psi^{*}\hat{T}\psi-\psi\hat{T}\psi^{*})$$

$$i\hbar\frac{\partial(\psi^{*}\psi)}{\partial t}=(\psi^{*}\hat{T}\psi-\psi\hat{T}\psi^{*})$$

写成矩阵形式为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi^{+}\psi)=\psi^{+}\hat{T}\psi-\psi\hat{T}\psi^{+}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi^{+}\psi)=\psi^{+}\hat{T}\psi-(\psi^{+}\hat{T}\psi)^{*}=\overline{T}-\overline{T}^{*}=0$$

# 第五章　微扰理论

5.1 如果类氢原子的核不是点电荷，而是半径为$\boldsymbol{r_0}$、电荷均匀分布的小球，计算这种效应对类氢原子基态能量的一级修正。

解：这种分布只对$\boldsymbol{r<r_0}$的区域有影响，对$\boldsymbol{r\geq r_0}$的区域无影响。据题意知

$$\hat{H}'=U(r)-U_0(r)$$

其中$\boldsymbol{U_0(r)}$是不考虑这种效应的势能分布，即

$$U（r）=-\frac{ze^{2}}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

$\boldsymbol{U(r)}$为考虑这种效应后的势能分布，在$\boldsymbol{r\geq r_0}$区域，

$$U(r)=-\frac{Ze^{2}}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

在 $r < r_0$ 区域，$U(r)$ 可由下式得出，

$$U(r) = -e\int_r^{\infty} E dr$$

$$E = \begin{cases} \dfrac{1}{4\pi\varepsilon_0 r^2} \cdot \dfrac{Ze}{\frac{4}{3}\pi r_0^3} \cdot \dfrac{4}{3}\pi r^3 = \dfrac{Ze}{4\pi\varepsilon_0 r_0^3} r, & (r \le r_0) \\ \dfrac{Ze}{4\pi\varepsilon_0 r^2} & (r \ge r_0) \end{cases}$$

$$U(r) = -e\int_r^{r_0} E dr - e\int_{r_0}^{\infty} E dr$$

$$= -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0^3}\int_r^{r_0} r dr - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\int_{r_0}^{\infty}\frac{1}{r^2} dr$$

$$= -\frac{Ze^2}{8\pi\varepsilon_0 r_0^3}(r_0^2 - r^2) - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0} = -\frac{Ze^2}{8\pi\varepsilon_0 r_0^3}(3r_0^2 - r^2)$$

$(r \le r_0)$

$$\hat{H}' = U(r) - U_0(r) = \begin{cases} -\dfrac{Ze^2}{8\pi\varepsilon_0 r_0^3}(3r_0^2 - r^2) + \dfrac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} & (r \le r_0) \\ 0 & (r \ge r_0) \end{cases}$$

由于 $r_0$ 很小，所以 $\hat{H}' << \hat{H}^{(0)} = -\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + U_0(r)$，可视为一种微扰，由它引起的一级修正为（基态 $\psi_1^{(0)} = (\dfrac{Z^3}{\pi a_0^3})^{1/2} e^{-\frac{Z}{a_0}r}$）

$$E_1^{(1)} = \int_{\infty} \psi_1^{(0)*} \hat{H}' \psi_1^{(0)} d\tau$$

$$= \frac{Z^3}{\pi a_0^3}\int_0^{r_0} [-\frac{Ze^2}{8\pi\varepsilon_0 r_0^3}(3r_0^2 - r^2) + \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}] e^{-\frac{2Z}{a_0}r} 4\pi r^2 dr$$

$\therefore r << a_0$，故 $e^{-\frac{2Z}{a_0}r} \approx 1$。

$$\therefore \quad E_1^{(1)} = -\frac{Z^4 e^2}{2\pi\varepsilon_0 a_0^3 r_0^3}\int_0^{r_0}(3r_0^2 r^2 - r^4) dr + \frac{Z^4 e^2}{\pi\varepsilon_0 a_0^3}\int_0^{r_0} r dr$$

$$= -\frac{Z^4 e^2}{2\pi\varepsilon_0 a_0^3 r_0^3}(r_0^5 - \frac{r_0^5}{5}) + \frac{Z^4 e^2}{2\pi\varepsilon_0 a_0^3} r_0^2$$

$$= \frac{Z^4 e^2}{10\pi\varepsilon_0 a_0^3} r_0^2$$

$$= \frac{2Z^4 e_s^2}{5a_0^3} r_0^2$$

#

5.2 转动惯量为 I、电偶极矩为 $\vec{D}$ 的空间转子处在均匀电场在 $\vec{\varepsilon}$ 中，如果电场较小，用微扰法求转子基态能量的二级修正。

解：取 $\vec{\varepsilon}$ 的正方向为 Z 轴正方向建立坐标系，则转子的哈米顿算符为

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2I} - \vec{D}\cdot\vec{\varepsilon} = \frac{1}{2I}\hat{L}^2 - D\varepsilon\cos\theta$$

取 $\hat{H}^{(0)} = \frac{1}{2I}\hat{L}^2$，　　$\hat{H}' = -D\varepsilon\cos\theta$，则

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}'$$

由于电场较小，又把 $\hat{\boldsymbol{H}}'$ 视为微扰，用微扰法求得此问题。

$\hat{\boldsymbol{H}}^{(0)}$ 的本征值为 $E_\ell^{(0)} = \frac{1}{2I}\ell(\ell+1)\hbar^2$

本征函数为　　$\psi_\ell^{(0)} = Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$

$\hat{\boldsymbol{H}}^{(0)}$ 的基态能量为 $E_0^{(0)} = 0$，为非简并情况。根据定态非简并微扰论可知

$$E_0^{(2)} = \sum_\ell{}' \frac{\left|\mathrm{H}'_{\ell 0}\right|^2}{E_0^{(0)} - E_\ell^{(0)}}$$

$$H'_{\ell 0} = \int \psi_\ell^{*(0)} \hat{H}' \psi_0^{(0)} d\tau = \int Y_{\ell m}^* (-D\varepsilon\cos\theta) Y_{00} \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$$

$$= -D\varepsilon \int Y_{\ell m}^* (\cos\theta\, Y_{00}) \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$$

$$= -D\varepsilon \int Y_{\ell m}^* \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{10} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$$

$$= -\frac{D\varepsilon}{\sqrt{3}} \int Y_{\ell 0}^* Y_{10} \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$$

$$= -\frac{D\varepsilon}{\sqrt{3}} \delta_{\ell 1}$$

$$E_0^{(2)}=\sum_{\ell}{}'\frac{\left|\mathrm{H}'_{\ell 0}\right|^2}{E_0^{(0)}-E_\ell^{(0)}}=-\sum_{\ell}{}'\frac{D^2\varepsilon^2\cdot 2I}{3\ell(\ell+1)\hbar^2}\left|\delta_{\ell 1}\right|^2=-\frac{1}{3\hbar^2}D^2\varepsilon^2 I$$

#

5.3 设一体系未受微扰作用时有两个能级：$E_{01}$及$E_{02}$，现在受到微扰 $\hat{\boldsymbol{H}}'$ 的作用，微扰矩阵元为$H'_{12}=H'_{21}=a$，$H'_{11}=H'_{22}=b$；$\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{b}$ 都是实数。用微扰公式求能量至二级修正值。

解：由微扰公式得

$$E_n^{(1)}=H'_{nn}$$

$$E_n^{(2)}=\sum_{m}{}'\frac{\left|H'_{mn}\right|^2}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}$$

得 $\qquad E_{01}^{(1)}=H'_{11}=b \qquad E_{02}^{(1)}=H'_{22}=b$

$$E_{01}^{(2)}=\sum_{m}{}'\frac{\left|H'_{m1}\right|^2}{E_{01}-E_{0m}}=\frac{a^2}{E_{01}-E_{02}}$$

$$E_{02}^{(2)}=\sum_{m}{}'\frac{\left|H'_{m1}\right|^2}{E_{02}-E_{0m}}=\frac{a^2}{E_{02}-E_{01}}$$

∴ 能量的二级修正值为

$$E_1=E_{01}+b+\frac{a^2}{E_{01}-E_{02}}$$

$$E_2=E_{02}+b+\frac{a^2}{E_{02}-E_{01}}$$

#

5.4 设在 $\boldsymbol{t=0}$ 时，氢原子处于基态，以后受到单色光的照射而电离。设单色光的电场可以近似地表示为 $\boldsymbol{\varepsilon\sin\omega t}$，$\boldsymbol{\varepsilon}$ 及 $\boldsymbol{\omega}$ 均为零；电离电子的波函数近似地以平面波表示。求这单色光的最小频率和在时刻 $\boldsymbol{t}$ 跃迁到电离态的几率。

解：①当电离后的电子动能为零时，这时对应的单色光的频率最小，其值为

$$\hbar\omega_{\min}=h\nu_{\min}=E_\infty-E_1=\frac{\mu e_s^4}{2\hbar^2}$$

$$\nu_{\min}=\frac{\mu e_s^4}{2\hbar^2 h}=\frac{13.6\times1.6\times10^{-19}}{6.62\times10^{-34}}=3.3\times10^{15}\,Hz$$

②$\boldsymbol{t=0}$ 时，氢原子处于基态，其波函数为

$$\phi_k = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$$

在 $t$ 时刻，　$\phi_m = (\frac{1}{2\pi\hbar})^{3/2} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}$

微扰　$\hat{H}'(t) = e\vec{\varepsilon}\cdot\vec{r}\sin\omega t = \frac{e\vec{\varepsilon}\cdot\vec{r}}{2i}(e^{i\omega t} - e^{-i\omega t})$

$$= \hat{F}(e^{i\omega t} - e^{-i\omega t})$$

其中 $\hat{F} = \frac{e\vec{\varepsilon}\cdot\vec{r}}{2i}$

在 $t$ 时刻跃迁到电离态的几率为

$$W_{k\to m} = |a_m(t)|^2$$

$$a_m(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t H'_{mk} e^{i\omega_{mk}t'} dt'$$

$$= \frac{F_{mk}}{i\hbar}\int_0^t (e^{i(\omega_{mk}+\omega)t'} - e^{i(\omega_{mk}-\omega)t'})dt'$$

$$= -\frac{F_{mk}}{\hbar}[\frac{e^{i(\omega_{mk}+\omega)t} - 1}{\omega_{mk}+\omega} - \frac{e^{i(\omega_{mk}-\omega)t} - 1}{\omega_{mk}-\omega}]$$

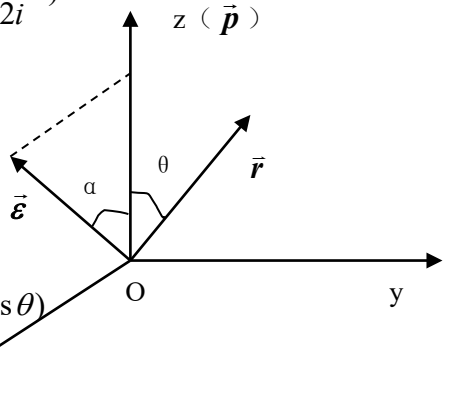
对于吸收跃迁情况，上式起主要作用的第二项，故不考虑第一项，

$$a_m(t) = \frac{F_{mk}}{\hbar}\frac{e^{i(\omega_{mk}-\omega)t} - 1}{\omega_{mk}-\omega}$$

$$W_{k\to m} = |a_m(t)|^2 = \frac{|F_{mk}|^2}{\hbar^2}\frac{(e^{i(\omega_{mk}-\omega)t} - 1)(e^{i(\omega_{mk}-\omega)t} - 1)}{(\omega_{mk}-\omega)^2}$$

$$= \frac{4|F_{mk}|^2 \sin^2 \frac{1}{2}(\omega_{mk}-\omega)t}{\hbar^2(\omega_{mk}-\omega)^2}$$

其中 $F_{mk} = \int \phi_m^* \hat{F} \phi_k d\tau = (\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}})^{3/2} \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \int e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} (\frac{e\vec{\varepsilon}\cdot\vec{r}}{2i}) e^{-r/a_0} d$




取电子电离后的动量方向为 Z 方向，

取 $\vec{\varepsilon}$ 、 $\vec{p}$ 所在平面为 $xoz$ 面，则有

$$\vec{\varepsilon}\cdot\vec{r} = \varepsilon_x x + \varepsilon_y y + \varepsilon_z z$$

$$= (\varepsilon\sin\alpha)(r\sin\theta\cos\varphi) + (\varepsilon\cos\alpha)(r\cos\theta)$$

$$= \varepsilon r\sin\alpha\sin\theta\cos\varphi + \varepsilon\cos\alpha r\cos\theta$$

$$F_{mk}=(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}})^{3/2}\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\frac{e}{2i}\int e^{-\frac{i}{\hbar}p\ r\cos\theta}(\varepsilon\, r\sin\alpha\sin\theta\cos\varphi+\varepsilon\, r\cos\alpha\cos\theta)e^{-r/a_0}d\tau$$

$$F_{mk}=(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}})^{3/2}\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\frac{e}{2i}$$

$$\int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi}e^{-\frac{i}{\hbar}p\,r\cos\theta}(\varepsilon r\sin\alpha\sin\theta\cos\varphi+\varepsilon\, r\cos\alpha\cos\theta)e^{-r/a_0}r^2\sin\theta dr d\theta\, d\varphi$$

$$=(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}})^{3/2}\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\frac{e}{2i}\int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi}e^{-\frac{i}{\hbar}p\,r\cos\theta}(\varepsilon\cos\alpha\, r^3\cos\theta\sin\theta)e^{-r/a_0}dr d\theta\, d\varphi$$

$$=(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}})^{3/2}\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\frac{e\varepsilon\cos\alpha}{2i}2\pi\int_0^\infty r^3e^{-r/a_0}dr[\int_0^\pi e^{-\frac{i}{\hbar}p\,r\cos\theta}\cos\theta\sin\theta\, d\theta$$

$$=\frac{e\varepsilon\cos\alpha}{i2\pi\hbar\sqrt{2a_0^3\hbar}}\int_0^\infty r^3e^{-r/a_0}[\frac{-\hbar}{ipr}(e^{-\frac{i}{\hbar}p\ r}+e^{\frac{i}{\hbar}pr})+\frac{\hbar^2}{p^2r^2}(e^{-\frac{i}{\hbar}pr}-e^{\frac{i}{\hbar}pr})]dr$$

$$=\frac{e\varepsilon\cos\alpha}{i2\pi\hbar\sqrt{2a_0^3}}\frac{16p}{ia_0\hbar}\frac{1}{(\frac{1}{a_0^2}+\frac{p^2}{\hbar^2})^3}$$

$$=-\frac{16pe\varepsilon\cos\alpha(a_0\hbar)^{7/2}}{\sqrt{8}\pi(a_0^2p^2+\hbar^2)^3}$$

$$\therefore\quad W_{k\to m}=\frac{4|F_{mk}|^2\sin^2\frac{1}{2}(\omega_{mk}-\omega)t}{\hbar^2(\omega_{mk}-\omega)^2}$$

$$=\frac{128p^2e^2\varepsilon^2\cos^2\alpha a_0^7\hbar^5}{\pi^2(a_0^2p^2+\hbar^2)^6}\frac{\sin^2\frac{1}{2}(\omega_{mk}-\omega)t}{(\omega_{mk}-\omega)^2}$$

#

5.5 基态氢原子处于平行板电场中，若电场是均匀的且随时间按指数下降，即

$$\varepsilon=\begin{cases}0, & \text{当}t\le 0\\ \varepsilon_0e^{-t/\tau}, & \text{当}t\ge 0(\tau\text{为大于零的参数})\end{cases}$$

求经过长时间后氢原子处在 2p 态的几率。

解：对于 2p 态，$\ell=1$，$m$ 可取 0, ±1 三值，其相应的状态为

$$\psi_{210}\qquad\psi_{211}\qquad\psi_{21-1}$$

氢原子处在 2p 态的几率也就是从$\psi_{100}$跃迁到$\psi_{210}$、$\psi_{211}$、 $\psi_{21-1}$的几率之和。

由 $$a_m(t)=\frac{1}{i\hbar}\int_0^t H'_{mk}e^{i\omega_{mk}t'}dt'$$

$$H'_{210,100}=\int\psi^*_{210}\hat{H}'\psi_{100}d\tau \qquad (\hat{H}'=e\varepsilon(t)r\cos\theta)$$

$$=\int R_{21}Y^*_{10}e\varepsilon(t)r\cos\theta\, R_{10}Y_{00}d\tau \qquad (\text{取}\vec{\varepsilon}\text{方向为 Z 轴方向})$$

$$=e\varepsilon(t)\int_0^\infty R_{21}r^3R_{10}dr\int_0^{2\pi}\int_0^\pi Y^*_{10}Y_{00}\cos\theta\sin\theta d\theta\, d\varphi$$

$$(\cos\theta Y_{00}=\frac{1}{\sqrt{3}}Y_{10})$$

$$=e\varepsilon(t)f\int_0^{2\pi}\int_0^\pi Y^*_{10}\frac{1}{\sqrt{3}}Y_{10}\sin\theta d\theta\, d\varphi$$

$$=\frac{1}{\sqrt{3}}e\varepsilon(t)f$$

$$f=\int_0^\infty R^*_{21}(r)R_{10}(r)r^3dr=\frac{256}{81\sqrt{6}}a_0$$

$$=(\frac{1}{2a_0})^{3/2}\frac{2}{\sqrt{3}a_0}\cdot(\frac{1}{a_0})^{3/2}\int_0^\infty r^4e^{-\frac{3}{2a_0}r}dr$$

$$=\frac{1}{\sqrt{6}}\frac{1}{a_0^4}\cdot\frac{4!\times2^5}{3^5}a_0^5=\frac{256}{81\sqrt{6}}a_0$$

$$H'_{210,100}=\int\psi^*_{210}\hat{H}'\psi_{100}d\tau=\frac{1}{\sqrt{3}}e\varepsilon(t)f$$

$$=\frac{e\varepsilon(t)}{\sqrt{3}}\frac{256}{81\sqrt{6}}a_0=\frac{128\sqrt{2}}{243}e\varepsilon(t)a_0$$

$$H'_{211,100}=e\varepsilon(t)\int_0^\infty\psi^*_{211}r\cos\theta\psi_{100}d\tau$$

$$=e\varepsilon(t)\int_0^\infty R_{21}r^3R_{10}dr\int_0^{2\pi}\int_0^\pi Y^*_{11}\cos\theta Y_{00}\sin\theta\, d\theta\, d\varphi$$

$$=e\varepsilon(t)\int_0^\infty R_{21}r^3R_{10}dr\int_0^{2\pi}\int_0^\pi Y^*_{11}\frac{1}{\sqrt{3}}Y_{10}\sin\theta\, d\theta\, d\varphi$$

$$=0$$

$$H'_{21-1,100}=\int\psi^*_{21-1}\hat{H}'\psi_{100}d\tau$$

$$=e\varepsilon(t)\int_0^\infty R_{21}r^3R_{10}dr\int_0^\pi\int_0^{2\pi}Y^*_{1-1}\cos\theta Y_{00}\sin\theta\, d\theta\, d\varphi$$

$$= e\varepsilon(t)\int_0^{\infty} R_{21} r^3 R_{10} dr \int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} Y_{1-1}^{*} \frac{1}{\sqrt{3}} Y_{10} \sin\theta \, d\theta \, d\varphi$$

$$= 0$$

由上述结果可知，$W_{100\to 211} = 0$，　　$W_{100\to 21-1} = 0$

$\therefore$　　$W_{1s\to 2p} = W_{100\to 210} + W_{100\to 211} + W_{100\to 21-1}$

$$= W_{100\to 210} = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t H'_{210,100} e^{i\omega_{21}t'} dt'\right|^2$$

$$= \frac{2}{\hbar^2}\left(\frac{128}{243}\right)^2 (ea_0\varepsilon_0)^2 \left|\int_0^t e^{i\omega_{21}t'} e^{-t'/\tau} dt'\right|^2$$

$$= \frac{2}{\hbar^2}\left(\frac{128}{243}\right)^2 e^2 a_0^2 \varepsilon_0{}^2 \frac{\left|e^{i\omega_{21}t - \frac{t}{\tau}} - 1\right|^2}{\omega_{21}^2 + \frac{1}{\tau^2}}$$

当$t \to \infty$时，

$$\omega_{1s\to 2p} = \frac{2}{\hbar^2}\left(\frac{128}{243}\right)^2 e^2 a_0^2 \varepsilon_0{}^2 \frac{1}{\omega_{21}^2 + \frac{1}{\tau^2}}$$

其中 $\omega_{21} = \frac{1}{\hbar}(E_2 - E_1) = \frac{\mu e_s^4}{2\hbar^3}\left(1 - \frac{1}{4}\right) = \frac{3\mu e_s^4}{8\hbar^3} = \frac{3e_s^2}{8\hbar a_0}$

#

5.6 计算氢原子由第一激发态到基态的自发发射几率。

解：　　$A_{mk} = \frac{4e_s^2\omega_{mk}^3}{3\hbar c^3}\left|\vec{r}_{mk}\right|^2$

由选择定则$\Delta\ell = \pm 1$，知$2s \to 1s$是禁戒的

故只需计算$2p \to 1s$的几率

$$\omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$$

$$= \frac{\mu e_s^4}{2\hbar^3}\left(1 - \frac{1}{4}\right) = \frac{3}{8}\frac{\mu e_s^4}{\hbar^3}$$

而　　$\left|\vec{r}_{21}\right|^2 = \left|x_{21}\right|^2 + \left|y_{21}\right|^2 + \left|z_{21}\right|^2$

2p 有三个状态，即 $\psi_{210}$，$\psi_{211}$，$\psi_{21-1}$

(1)先计算 z 的矩阵元 $z = r\cos\theta$

$$(z)_{21m,100} = \int_0^\infty R_{21}^*(r)R_{10}(r)r^3dr \cdot \int \psi_{1m}^* \cos\theta\, Y_{00}d\Omega$$

$$= f\int Y_{1m}^* \frac{1}{\sqrt{3}} Y_{00}d\Omega$$

$$= f\frac{1}{\sqrt{3}}\delta_{m0}$$

$$\Rightarrow (z)_{210,100} = \frac{1}{\sqrt{3}}f$$

$$(z)_{211,100} = 0$$

$$(z)_{21-1,100} = 0$$

(2)计算 x 的矩阵元 $x = r\sin\theta\cos\varphi = \frac{r}{2}\sin\theta(e^{i\varphi} + e^{-i\varphi})$

$$(x)_{21m,100} = \frac{1}{2}\int_0^\infty R_{21}^*(r)R_{10}(r)r^3dr \cdot \int Y_{1m}^* \sin\theta\,(e^{i\varphi} + e^{-i\varphi})Y_{00}d\Omega$$

$$= \frac{1}{2}f \cdot \sqrt{\frac{2}{3}}\int Y_{1m}^*(-\mathrm{Y}_{11} + Y_{1-1})d\Omega$$

$$= \frac{1}{\sqrt{6}}f(-\delta_{m1} + \delta_{m-1})$$

$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{i\varphi}$ $Y_{1-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{-i\varphi}$

$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$

$$\Rightarrow (x)_{210,100} = 0$$

$$(x)_{211,100} = -\frac{1}{\sqrt{6}}f$$

$$(x)_{21-1,100} = \frac{1}{\sqrt{6}}f$$

(3)计算 $y$ 的矩阵元 $y = r\sin\theta\sin\varphi = \frac{1}{2i}r\sin\theta(e^{i\varphi} - e^{-i\varphi})$

$$(y)_{21m,100}=\frac{1}{2i}\int_0^\infty R_{21}^*(r)R_{10}(r)r^3dr\cdot\int Y_{1m}^*\sin\theta(e^{i\varphi}-e^{-i\varphi})\,Y_{00}d\Omega$$

$$=\frac{1}{2i}f\cdot\sqrt{\frac{2}{3}}(-\delta_{m1}-\delta_{m-1})$$

$$=\frac{1}{i\sqrt{6}}f(-\delta_{m1}-\delta_{m-1})$$

$$\Rightarrow(y)_{210,100}=0$$

$$(y)_{211,100}=\frac{i}{\sqrt{6}}f$$

$$(y)_{21-1,100}=\frac{i}{\sqrt{6}}f$$

$$\Rightarrow\left|\vec{r}_{2p\to1s}\right|^2=(2\times\frac{f^2}{6}+2\times\frac{f^2}{6}+\frac{1}{3}f^2)=f^2$$

(4)计算 $f$

$$f=\int_0^\infty R_{21}^*(r)R_{10}(r)r^3dr=\frac{256}{81\sqrt{6}}a_0$$

$$=(\frac{1}{2a_0})^{3/2}\frac{2}{\sqrt{3}a_0}\cdot(\frac{1}{a_0})^{3/2}\int_0^\infty r^4e^{-\frac{3}{2a_0}r}dr$$

$$=\frac{1}{\sqrt{6}}\frac{1}{a_0^4}\cdot\frac{4!\times2^5}{3^5}a_0^5=\frac{256}{81\sqrt{6}}a_0=a_0\frac{2^7}{3^4}\sqrt{\frac{2}{3}}$$

$$f^2=\frac{2^{15}}{3^9}a_0^2$$

$$A_{2p\to1s}=\frac{4e_s^2\omega_{21}^3}{3\hbar c^3}\left|\vec{r}_{21}\right|^2$$

$$=\frac{4e_s^2}{3\hbar c^3}\cdot(\frac{3}{8}\frac{\mu e_s^4}{\hbar^3})^3\cdot\frac{2^{15}}{3^9}a_0^2$$

$$=\frac{2^8}{3^7}\cdot\frac{\mu^3e_s^{14}}{\hbar^{10}c^3}(\cdot\frac{\hbar^2}{\mu\,e_s^2})^2$$

$$=\frac{2^8}{3^7}\cdot\frac{\mu e_s^{10}}{\hbar^6c^3}=1.91\times10^9\,s^{-1}$$

$$\tau = \frac{1}{A_{21}} = 5.23\times10^{-10}\,s = 0.52\times10^{-9}\,s \qquad \#$$

5.7　计算氢原子由 2p 态跃迁到 1s 态时所发出的光谱线强度。

解：$J_{2p\to1s} = N_{2p}A_{2p\to1s}\cdot\hbar\omega_{21}$

$$= N_{2p}\cdot\frac{2^8}{3^7}\frac{\mu e_s^{10}}{c^3\hbar^6}\cdot\frac{3}{8}\cdot\frac{\mu e_s^4}{\hbar^2}$$

$$= N_{2p}\cdot\frac{2^5}{3^6}\cdot\frac{\mu^2 e_s^{14}}{\hbar^8 c^3} \qquad \hbar\omega_{21} = 10.2eV$$

$$= N_{2p}\cdot\frac{2^5}{3^6}\cdot\frac{e_s^{10}}{c^3\hbar^4 a_0^2}$$

$$= N_{2p}\times3.1\times10^{-9}W$$

若　　$N_{2p} = 10^{-9}$，则 $J_{21} = 3.1W$　　#

5.8 求线性谐振子偶极跃迁的选择定则

解：　　$A_{mk} \propto |\vec{r}_{mk}|^2 = |x_{mk}|^2$

$$x_{mk} = \int\phi_m^* x\phi_k dx$$

由　$x\phi_k = \frac{1}{\alpha}[\sqrt{\frac{k}{2}}\phi_{k-1} + \sqrt{\frac{k+1}{2}}\phi_{k+1}]$

$$\int\phi_m^*\phi_n dx = \delta_{mn}$$

$$x_{mk} = \frac{1}{\alpha}[\sqrt{\frac{k}{2}}\delta_{m,k-1} + \sqrt{\frac{k+1}{2}}\delta_{m,k+1}]$$

$\Rightarrow m = k\pm1$时，　$x_{mk}\neq0$

即选择定则为　　$\Delta m = m-k = \pm1$　　#

# 补充练习三

1、　一维无限深势阱 $(0 < x < a)$ 中的粒子受到微扰

$$H'(x)=\begin{cases}2\lambda\dfrac{x}{a} & (0\le x\le\dfrac{a}{2})\\ 2\lambda(1-\dfrac{x}{a}) & (\dfrac{a}{2}\le x\le a)\end{cases}$$

作用，试求基态能级的一级修正。

解：基态波函数（零级近似）为

$$\psi_1^{(0)}=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi}{a}x \qquad (0\le x\le a)$$

$$\psi_1^{(0)}=0 \qquad (x<0,\ x>a)$$

∴能量一级修正为

$$E_1^{(1)}=\int\psi_1^{(0)}*H'\psi_1^{(0)}dx$$

$$=\frac{2}{a}\int_0^{a/2}2\lambda\frac{x}{a}\sin^2\frac{\pi}{a}xdx+\frac{2}{a}\int_{a/2}^{a}2\lambda(1-\frac{x}{a})\sin^2\frac{\pi}{a}xdx$$

$$=\frac{2\lambda}{a^2}[\int_0^{a/2}x(1-\cos\frac{2\pi}{a}x)dx+a\int_{a/2}^{a}(1-\cos\frac{2\pi}{a}x)dx$$

$$-\int_{a/2}^{a}x(1-\cos\frac{2\pi}{a}x)dx]$$

$$=\frac{2\lambda}{a^2}[(\frac{1}{2}x^2-\frac{a}{2\pi}x\sin\frac{2\pi}{a}x-\frac{a^2}{4\pi^2}\sin\frac{2\pi}{a}x)\Big|_0^{a/3}+a(x-$$

$$-\frac{a}{2\pi}\sin\frac{2\pi}{a}x)\Big|_{a/2}^{a}(\frac{1}{2}x^2-\frac{a}{2\pi}x\sin\frac{2\pi}{a}x-\frac{a^2}{4\pi^2}\cos\frac{2\pi}{a}x)\Big|_{a/2}^{a}]$$

$$=\frac{2\lambda}{a^2}[\frac{1}{8}a^2+\frac{a^2}{2\pi^2}+\frac{a^2}{2}-(\frac{1}{8}a^2-\frac{a^2}{2\pi^2})]$$

$$=\frac{2\lambda}{a^2}(\frac{a^2}{4}+\frac{a^2}{\pi^2})=\lambda(\frac{1}{2}+\frac{2}{\pi^2})$$

2、具有电荷为$q$的离子，在其平衡位置附近作一维简谐振动，在光的照射下发生跃迁。设入射光的能量为$I(\omega)$。其波长较长，求：

① 原来处于基态的离子，单位时间内跃迁到第一激发态的几率。

②讨论跃迁的选择定则。

（提示：利用积分关系$\int_0^\infty x^{2n}e^{-\alpha x^2}=\dfrac{1\cdot3\cdot5\cdot\cdots\cdot(2n-1)}{2^{n+1}}\sqrt{\dfrac{\pi}{a}}$

答：① $\omega_{0\to1}=\dfrac{4\pi^2q_s^2}{3\hbar^2}\left|x_{10}\right|^2I(\omega)=\dfrac{2\pi^2q_s^2}{3\mu\hbar\omega}I(\omega)$

②仅当 $\Delta m=\pm1$ 时，$xmk\neq0$，所以谐振子的偶极跃迁的选择定则是 $\Delta m=\pm1$）

解：① $\hat{F}=\dfrac{1}{2}q\varepsilon_0x\qquad(e\to q)$

$$\therefore\ \omega_{k\to m}=\frac{4\pi^2q^2}{3\times4\pi\varepsilon_0\hbar^2}\left|\vec{r}_{mk}\right|^2I(\omega_{mk})$$

$$=\frac{4\pi^2q_s^2}{3\hbar^2}\left|\vec{r}_{mk}\right|^2I(\omega_{mk})\qquad(令q_s^2=\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0})$$

$$\omega_{0\to1}=\frac{4\pi^2q_s^2}{3\hbar^2}\left|x_{10}\right|^2I(\omega)$$

(对于一维线性谐振子 $\vec{r}_n\sim x\vec{i}$)

其中 $x_{10}=\int\psi_1^*x\psi_0dx$

一维线性谐振子的波函数为

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{\alpha}{\pi^{1/2}2^nn!}}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}H_n(dx)$$

$$\therefore\ \psi_{10}=\int_{-\infty}^{\infty}(\sqrt{\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}}\cdot2\alpha xe^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2})x\sqrt{\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}dx$$

$$=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\alpha^2\int_{-\infty}^{\infty}x^2e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}dx$$

$$=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{2}{\alpha}\int_0^{\infty}y^2e^{-y^2}dy$$

$$=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{1}{\alpha}[(-ye^{-y^2})\Big|_0^{\infty}+\int_0^{\infty}e^{-y^2}dy]$$

$$=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\cdot\frac{1}{\alpha}\cdot\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}=\frac{1}{\sqrt{2}\alpha}$$

$$\therefore\qquad\omega_{0\to1}=\frac{4\pi^2q_s^2}{3\hbar^2}\left|\frac{1}{\sqrt{2}\alpha}\right|^2I(\omega)=\frac{2\pi^2q_s^2}{3\alpha^2\hbar^2}I(\omega)=\frac{2\pi^2q_s^2}{3\mu\omega\hbar}I(\omega)$$

② 跃迁几率 $\alpha \quad |x_{mk}|^2$，当 $x_{mk}=0$ 时的跃迁为禁戒跃迁。

$$x_{mk}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^* x\psi_k dx$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^*\frac{1}{\alpha}\left(\sqrt{\frac{k+1}{2}}\psi_{k+1}+\sqrt{\frac{k}{2}}\psi_{k-1}\right)dx$$

$$=\begin{cases}\neq 0, & m=k\pm 1 \quad (\text{即}\Delta m=\pm 1)\text{时；}\\ =0, & m\neq k\pm 1 \quad (\text{即}\Delta m\neq\pm 1)\text{时.}\end{cases}$$

可见，所讨论的选择定则为 $\Delta m=\pm 1$。

#

3、电荷 e 的谐振子，在 $t=0$ 时处于基态，$t>0$ 时处于弱电场 $\varepsilon=\varepsilon_0 e^{-t/\tau}$ 之中($\tau$ 为常数)，试求谐振子处于第一激发态的几率。

解：取电场方向为 $x$ 轴正方向，则有

$$\hat{H}'=-e\varepsilon\, x=-e\varepsilon\, xe^{-t/\tau}$$

$$\phi_0=\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$$

$$\phi_1=\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}2\alpha x e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$$

$$H'_{10}=\int\phi_1^* H'(t)\phi_0 dx$$

$$=\frac{2\alpha^2}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\alpha^2x^2}(-e\varepsilon_0 xe^{-t/\tau})dx$$

$$=\frac{e\varepsilon_0\alpha^2}{\sqrt{2\pi}}e^{-t/\tau}\int_{-\infty}^{\infty}2x^2e^{-\alpha^2x^2}dx$$

$$=\frac{e\varepsilon_0\alpha^2}{\sqrt{2\pi}}e^{-t/\tau}\left[-\frac{x}{\alpha^2}e^{-\alpha^2x^2}\Big|_{-\infty}^{\infty}+\int_{-\infty}^{\infty}\frac{x}{\alpha^2}e^{-\alpha^2x^2}dx\right]$$

$$=\frac{e\varepsilon_0\alpha^2}{\sqrt{2\pi}}e^{-t/\tau}\frac{1}{\alpha^2}+\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\alpha^2x^2}dx$$

$$=\frac{e\varepsilon}{\sqrt{2\pi}}e^{-t/\tau}\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}=\frac{e\varepsilon_0}{\sqrt{2}\alpha}e^{-t/\tau}$$

$$a_1(t)=\frac{1}{i\hbar}\int_0^t H'_{10}e^{i\omega_{mk}t'}dt'$$

$$= -\frac{e\varepsilon_0}{i\sqrt{2}\hbar\alpha}\int_0^t e^{i(\omega t'-\frac{t'}{\tau})}dt'$$

$$= -\frac{e\varepsilon_0}{\sqrt{2}\alpha\, i\hbar}\frac{1}{(i\omega-\frac{1}{\tau})}(e^{i(\omega t-\frac{t}{\tau})}-1)$$

当经过很长时间以后，即当$t\to\infty$时，$e^{-t/\tau}\to 0$。

$$\therefore \qquad a_1(t)=\frac{e\varepsilon_0}{\sqrt{2}\alpha\, i\hbar}\frac{\tau}{(i\omega\tau-1)}$$

$$\omega_{0\to 1}=|a_1(t)|^2=\frac{e^2\varepsilon_0^2\tau^2}{2\alpha^2\hbar^2(\omega^2\tau^2+1)}$$

$$=\frac{e^2\varepsilon_0^2\tau^2}{2\mu\omega\hbar(\omega^2\tau^2+1)}$$

实际上在$t\geq 5\tau$以后即可用上述结果。

#

# 第七章　自旋与全同粒子

7.1. 证明：$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z=i$

证：由对易关系$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y-\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x=2i\hat{\sigma}_z$　　及

反对易关系$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y+\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x=0$，　　得

$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y=i\hat{\sigma}_z$$

上式两边乘$\hat{\sigma}_z$，得

$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z=i\hat{\sigma}_z^2 \qquad \because\ \hat{\sigma}_z^2=1$$

$$\therefore\ \hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z=i$$

7.2　求在自旋态$\chi_{\frac{1}{2}}(S_z)$中，$\hat{S}_x$和$\hat{S}_y$的测不准关系：

$$\overline{(\Delta S_x)^2}\,\overline{(\Delta S_y)^2}=?$$

解：在 $\hat{\boldsymbol{S}}_z$ 表象中 $\chi_{\frac{1}{2}}(S_z)$、$\hat{\boldsymbol{S}}_x$、$\hat{\boldsymbol{S}}_y$ 的矩阵表示分别为

$$\chi_{\frac{1}{2}}(S_z)=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\qquad \hat{\boldsymbol{S}}_x=\frac{\hbar}{\boldsymbol{2}}\begin{pmatrix}\boldsymbol{0}&\boldsymbol{1}\\\boldsymbol{1}&\boldsymbol{0}\end{pmatrix}\qquad \hat{S}_y=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}$$

∴ 在 $\chi_{\frac{1}{2}}(S_z)$ 态中

$$\overline{S_x}=\chi_{\frac{1}{2}}^{+}S_x\chi_{\frac{1}{2}}=(1\quad 0)\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=0$$

$$\overline{S_x^2}=\chi_{\frac{1}{2}}^{+}\hat{S}_x^2\chi_{\frac{1}{2}}=(1\quad 0)\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\frac{\hbar^2}{4}$$

$$\overline{(\Delta S_x)^2}=\overline{S_x^2}-\overline{S_x}^2=\frac{\hbar^2}{4}$$

$$\overline{S_y}=\chi_{\frac{1}{2}}^{+}\hat{S}_y\chi_{\frac{1}{2}}=(1\quad 0)\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=0$$

$$\overline{S_y^2}=\chi_{\frac{1}{2}}^{+}\hat{S}_y^2\chi_{\frac{1}{2}}=(1\quad 0)\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\frac{\hbar^2}{4}$$

$$\overline{(\Delta S_y)^2}=\overline{S_y^2}-\overline{S_y}^2=\frac{\hbar^2}{4}$$

$$\overline{(\Delta S_x)^2}\,\overline{(\Delta S_y)^2}=\frac{\hbar^4}{16}$$

讨论：由 $\hat{\boldsymbol{S}}_x$、$\hat{\boldsymbol{S}}_y$ 的对易关系

$$[\hat{\boldsymbol{S}}_x,\ \hat{\boldsymbol{S}}_y]=i\hbar\hat{\boldsymbol{S}}_z$$

要求 $\overline{(\Delta S_x)^2}\,\overline{(\Delta S_y)^2}\geq\frac{\hbar^2\overline{S_z}^2}{4}$　　$\overline{(\Delta S_x)^2}\,\overline{(\Delta S_y)^2}=\frac{\hbar^4}{16}$　①

在 $\chi_{\frac{1}{2}}(S_z)$ 态中，$\overline{S_z}=\frac{\hbar}{2}$

∴ $\overline{(\Delta S_x)^2}\,\overline{(\Delta S_y)^2}\geq\frac{\hbar^4}{16}$

可见①式符合上式的要求。

7. 3. 求 $\hat{\boldsymbol{S}}_x=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$及$\hat{\boldsymbol{S}}_y=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&-i\\-i&0\end{pmatrix}$的本征值和所属的本征函数。

解：$\hat{\boldsymbol{S}}_x$的久期方程为

$$\begin{vmatrix}-\lambda&\frac{\hbar}{2}\\\frac{\hbar}{2}&-\lambda\end{vmatrix}=0 \qquad \lambda^2-(\frac{\hbar}{2})^2=0\Rightarrow\lambda=\pm\frac{\hbar}{2}$$

$\therefore$ $\hat{\boldsymbol{S}}_x$的本征值为$\pm\frac{\hbar}{2}$。

设对应于本征值$\frac{\hbar}{2}$的本征函数为 $\chi_{1/2}=\begin{pmatrix}a_1\\b_1\end{pmatrix}$

由本征方程 $\hat{S}_x\chi_{1/2}=\frac{\hbar}{2}\chi_{1/2}$ ，得

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\b_1\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}a_1\\b_1\end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \quad \begin{pmatrix}b_1\\a_1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a_1\\b_1\end{pmatrix} \quad\Rightarrow\quad b_1=a_1$$

由归一化条件 $\chi^{+}_{1/2}\chi_{1/2}=1$，得

$$(a_1^*,a_1^*)\begin{pmatrix}a_1\\a_1\end{pmatrix}=1$$

即 $2|a_1|^2=1$ $\therefore$ $a_1=\frac{1}{\sqrt{2}}$ $b_1=\frac{1}{\sqrt{2}}$

对应于本征值$\frac{\hbar}{2}$的本征函数为 $\chi_{1/2}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$

设对应于本征值$-\frac{\hbar}{2}$的本征函数为 $\chi_{-1/2}=\begin{pmatrix}a_2\\b_2\end{pmatrix}$

由本征方程 $\hat{S}_x\chi_{-1/2}=-\frac{\hbar}{2}\chi_{-1/2}\begin{pmatrix}a_2\\b_2\end{pmatrix}$

$$\Rightarrow \quad \begin{pmatrix}b_2\\a_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-a_2\\-b_2\end{pmatrix}\Rightarrow b_2=-a_2$$

由归一化条件，得

$$(a_2^*,-a_2^*)\begin{pmatrix}a_2\\-a_2\end{pmatrix}=1$$

即 $2|a_2|^2=1$ $\therefore$ $a_2=\frac{1}{\sqrt{2}}$ $b_2=-\frac{1}{\sqrt{2}}$

对应于本征值$-\frac{\hbar}{2}$的本征函数为 $\chi_{-1/2}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$

同理可求得$\hat{\boldsymbol{S}}_y$的本征值为$\pm\frac{\hbar}{2}$。其相应的本征函数分别为

$$\chi_{\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\i\end{pmatrix}\qquad\qquad \chi_{-\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-i\end{pmatrix}$$

7.4 求自旋角动量$(\cos\alpha,\cos\beta,\cos\gamma)$方向的投影

$$\hat{S}_n=\hat{S}_x\cos\alpha+\hat{S}_y\cos\beta+\hat{S}_z\cos\gamma$$

本征值和所属的本征函数。

在这些本征态中，测量$\hat{\boldsymbol{S}}_z$有哪些可能值？这些可能值各以多大的几率出现？$\hat{\boldsymbol{S}}_z$的平均值是多少？

解：在$\hat{\boldsymbol{S}}_z$ 表象，$\hat{\boldsymbol{S}}_n$的矩阵元为

$$\hat{S}_n=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\cos\alpha+\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\cos\beta+\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\cos\gamma$$

$$S_n=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\cos\gamma&\cos\alpha-i\cos\beta\\\cos\alpha+i\cos\beta&-\cos\gamma\end{pmatrix}$$

其相应的久期方程为

$$\begin{vmatrix}\frac{\hbar}{2}\cos\gamma-\lambda&\frac{\hbar}{2}(\cos\alpha-i\cos\beta)\\\frac{\hbar}{2}(\cos\alpha+i\cos\beta)&-\frac{\hbar}{2}\cos\gamma-\lambda\end{vmatrix}=0$$

即 $\lambda^2-\frac{\hbar^2}{4}\cos^2\gamma-\frac{\hbar^2}{4}(\cos^2\alpha+\cos^2\beta)=0$

$$\lambda^2-\frac{\hbar^2}{4}=0 \qquad (\text{利用}\cos^2\alpha+\cos^2\beta+\cos^2\gamma=1)$$

$$\Rightarrow\ \lambda=\pm\frac{\hbar}{2}$$

所以$\hat{\boldsymbol{S}}_{\boldsymbol{n}}$的本征值为$\pm\frac{\hbar}{2}$。

设对应于$\boldsymbol{S_n}=\frac{\hbar}{2}$的本征函数的矩阵表示为$\chi_{\frac{1}{2}}(S_n)=\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$，则

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\cos\gamma & \cos\alpha-i\cos\beta\\ \cos\alpha+i\cos\beta & -\cos\gamma\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow a(\cos\alpha+i\cos\beta)-b\cos\gamma=b$$

$$b=\frac{\cos\alpha+i\cos\beta}{1+\cos\gamma}$$

由归一化条件，得$1=\chi^{+}_{\frac{1}{2}}\chi_{\frac{1}{2}}=(a^*,b^*)\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=|a|^2+|b|^2$

$$|a|^2+\left|\frac{\cos\alpha+i\cos\beta}{1+\cos\gamma}\right|^2|a|^2=1$$

$$\frac{2}{1+\cos\gamma}|a|^2=1$$

$$\chi_{\frac{1}{2}}(S_n)=\begin{pmatrix}\sqrt{\dfrac{1+\cos\gamma}{1}}\\ \dfrac{\cos\alpha+i\cos\beta}{\sqrt{2(1+\cos\gamma)}}\end{pmatrix}$$

$$\chi_{\frac{1}{2}}(S_n)=\begin{pmatrix}\sqrt{\dfrac{1+\cos\gamma}{1}}\\ \dfrac{\cos\alpha+i\cos\beta}{\sqrt{2(1+\cos\gamma)}}\end{pmatrix}$$

$$\chi_{\frac{1}{2}}(S_n)=\sqrt{\frac{1+\cos\gamma}{2}}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+\frac{\cos\alpha+i\cos\beta}{\sqrt{2(1+\cos\gamma)}}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

$$=\sqrt{\frac{1+\cos\gamma}{2}}\chi_{\frac{1}{2}}+\frac{\cos\alpha+i\cos\beta}{\sqrt{2(1+\cos\gamma)}}\chi_{-\frac{1}{2}}$$

$$\chi_{\frac{1}{2}}(S_n)=\sqrt{\frac{1+\cos\gamma}{2}}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+\frac{\cos\alpha+i\cos\beta}{\sqrt{2(1+\cos\gamma)}}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

$$=\sqrt{\frac{1+\cos\gamma}{2}}\chi_{\frac{1}{2}}+\frac{\cos\alpha+i\cos\beta}{\sqrt{2(1+\cos\gamma)}}\chi_{-\frac{1}{2}}$$

可见， $\hat{\boldsymbol{S}}_z$ 的可能值为 $\frac{\hbar}{2}$ $-\frac{\hbar}{2}$

相应的几率为 $\frac{1+\cos\gamma}{2}$ $\frac{\cos^2\alpha+\cos^2\beta}{2(1+\cos\gamma)}=\frac{1-\cos\gamma}{2}$

$$\overline{S}_z=\frac{\hbar}{2}\frac{1+\cos\gamma}{2}-\frac{\hbar}{2}\frac{1-\cos\gamma}{2}=\frac{\hbar}{2}\cos\gamma$$

同理可求得 对应于 $S_n=-\frac{\hbar}{2}$ 的本征函数为

$$\chi_{-\frac{1}{2}}(S_n)=\begin{pmatrix}\sqrt{\frac{1-\cos\gamma}{2}}\\-\frac{\cos\alpha+i\cos\beta}{\sqrt{2(1-\cos\gamma)}}\end{pmatrix}$$

在此态中， $\hat{\boldsymbol{S}}_z$ 的可能值为 $\frac{\hbar}{2}$ $-\frac{\hbar}{2}$

相应的几率为 $\frac{1-\cos\gamma}{2}$ $\frac{1+\cos\gamma}{2}$

$$\overline{S}_z=-\frac{\hbar}{2}\cos\gamma$$

7.5 设氢的状态是 $\psi=\begin{pmatrix}\frac{1}{2}R_{21}(r)Y_{11}(\theta,\varphi)\\-\frac{\sqrt{3}}{2}R_{21}(r)Y_{10}(\theta,\varphi)\end{pmatrix}$

①求轨道角动量 z 分量 $\hat{\boldsymbol{L}}_z$ 和自旋角动量 z 分量 $\hat{\boldsymbol{S}}_z$ 的平均值；

②求总磁矩 $\hat{\vec{M}}=-\frac{e}{2\mu}\hat{\vec{L}}-\frac{e}{\mu}\hat{\vec{S}}$

的 z 分量的平均值（用玻尔磁矩子表示）。

解：ψ可改写成

$$\psi=\frac{1}{2}R_{21}(r)Y_{11}(\theta,\varphi)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}-\frac{\sqrt{3}}{2}R_{21}(r)Y_{10}(\theta,\varphi)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

$$=\frac{1}{2}R_{21}(r)Y_{11}(\theta,\varphi)\chi_{\frac{1}{2}}(S_z)-\frac{\sqrt{3}}{2}R_{21}(r)Y_{10}(\theta,\varphi)\chi_{-\frac{1}{2}}(S_z$$

从ψ的表达式中可看出 $\hat{\boldsymbol{L}}_z$ 的可能值为　　$\hbar$　　0

相应的几率为　　$\frac{1}{4}$　　$\frac{3}{4}$

$\Rightarrow\quad \overline{L}_z=\frac{\hbar}{4}$

$\hat{\boldsymbol{S}}_z$ 的可能值为　　$\frac{\hbar}{2}$　　$-\frac{\hbar}{2}$

相应的几率 $|C_i|^2$ 为　　$\frac{1}{4}$　　$\frac{3}{4}$

$$\overline{S}_z=\sum|C_i|^2S_{zi}=\frac{\hbar}{2}\times\frac{1}{4}-\frac{\hbar}{2}\times\frac{3}{4}=-\frac{\hbar}{4}$$

$$\overline{M}_z=-\frac{e}{2\mu}\overline{L}_z-\frac{e}{\mu}\overline{S}_z=-\frac{e}{2\mu}\times\frac{\hbar}{4}-\frac{e}{\mu}\times(-\frac{\hbar}{4})$$

$$=\frac{e}{2\mu}\times\frac{\hbar}{4}=\frac{1}{4}M_B$$

7.6　一体系由三个全同的玻色子组成，玻色子之间无相互作用。玻色子只有两个可能的单粒子态。问体系可能的状态有几个？它们的波函数怎样用单粒子波函数构成？

解：体系可能的状态有 4 个。设两个单粒子态为 $\phi_i$，$\phi_j$，则体系可能的状态为

$$\Phi_1=\phi_i(q_1)\phi_i(q_2)\phi_i(q_3)$$

$$\Phi_2=\phi_j(q_1)\phi_j(q_2)\phi_j(q_3)$$

$$\Phi_3=\frac{1}{\sqrt{3}}[\phi_i(q_1)\phi_i(q_2)\phi_j(q_3)+\phi_i(q_1)\phi_i(q_3)\phi_j(q_2)$$
$$+\phi_i(q_2)\phi_i(q_3)\phi_j(q_1)]$$

$$\Phi_4=\frac{1}{\sqrt{3}}[\phi_j(q_1)\phi_j(q_2)\phi_i(q_3)+\phi_j(q_1)\phi_j(q_3)\phi_i(q_2)$$
$$+\phi_j(q_2)\phi_j(q_3)\phi_i(q_1)]$$

7.7 证明 $\chi_S^{(1)},\chi_S^{(2)},\chi_S^{(3)}$ 和 $\chi_A$ 组成的正交归一系。

解：$\chi_S^{(1)+}\chi_S^{(1)}=[\chi_{1/2}(S_{1z})\chi_{1/2}(S_{2z})]^+[\chi_{1/2}(S_{1z})\chi_{1/2}(S_{2z})]$

$$=\chi_{1/2}^+(S_{2z})\chi_{1/2}^+(S_{1z})\chi_{1/2}(S_{1z})\chi_{1/2}(S_{2z})$$

$$=\chi_{1/2}^+(S_{2z})\chi_{1/2}(S_{2z})$$
$$=1$$

$$\chi_S^{(1)+}\chi_S^{(2)}=[\chi_{1/2}(S_{1z})\chi_{1/2}(S_{2z})]^+[\chi_{-1/2}(S_{1z})\chi_{-1/2}(S_{2z})]$$

$$=\chi_{1/2}^+(S_{2z})\chi_{1/2}^+(S_{1z})\chi_{-1/2}(S_{1z})\chi_{-1/2}(S_{2z})$$

=0

$$\chi_S^{(1)+}\chi_S^{(3)}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\chi_{1/2}(S_{1z})\chi_{1/2}(S_{2z})]^+\cdot$$
$$\cdot[\chi_{1/2}(S_{1z})\chi_{-1/2}(S_{2z})+\chi_{-1/2}(S_{1z})\chi_{1/2}(S_{2z})]$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}}[\chi_{1/2}^+(S_{2z})\chi_{1/2}^+(S_{1z})\chi_{1/2}(S_{1z})\chi_{-1/2}(S_{2z})+$$
$$+\chi_{1/2}^+(S_{2z})\chi_{1/2}^+(S_{1z})\chi_{-1/2}(S_{1z})\chi_{1/2}(S_{2z})]$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}}[\chi_{1/2}^+(S_{2z})\chi_{-1/2}(S_{2z})+0]$$

同理可证其它的正交归一关系。

$$\chi_S^{(3)+}\chi_S^{(3)}=\frac{1}{2}[\chi_{1/2}(S_{1z})\chi_{-1/2}(S_{2z})+\chi_{-1/2}(S_{1z})\chi_{1/2}(S_{2z})]^+\cdot$$
$$\cdot[\chi_{1/2}(S_{1z})\chi_{-1/2}(S_{2z})+\chi_{-1/2}(S_{1z})\chi_{1/2}(S_{2z})]$$

$$=\frac{1}{2}[\chi_{1/2}(S_{1z})\chi_{-1/2}(S_{2z})]^+[\chi_{1/2}(S_{1z})\chi_{-1/2}(S_{2z})]$$
$$+\frac{1}{2}[\chi_{1/2}(S_{1z})\chi_{-1/2}(S_{2z})]^+[\chi_{1/2}(S_{2z})\chi_{-1/2}(S_{1z})]$$

$$+\frac{1}{2}[\chi_{1/2}(S_{2z})\chi_{-1/2}(S_{1z})]^{+}[\chi_{1/2}(S_{1z})\chi_{-1/2}(S_{1z})]$$
$$+\frac{1}{2}[\chi_{1/2}(S_{2z})\chi_{-1/2}(S_{1z})]^{+}[\chi_{1/2}(S_{2z})\chi_{-1/2}(S_{1z})]$$
$$=\frac{1}{2}+0+0+\frac{1}{2}=1$$

7.8 设两电子在弹性辏力场中运动，每个电子的势能是$U(r)=\frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2$。如果电子之间的库仑能和$U(r)$相比可以忽略，求当一个电子处在基态，另一电子处于沿 x 方向运动的第一激发态时，两电子组成体系的波函数。

解：电子波函数的空间部分满足定态S-方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla\psi(r)+U(r)\psi(r)=E\psi(r)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2})\psi(r)+\frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2\psi(r)=E\psi(r)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2})\psi(r)+\frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2\psi(r)=E\psi(r)$$

考虑到 $r^2=x^2+y^2+z^2$，令

$$\psi(r)=X(x)Y(y)Z(z)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2})XYZ+\frac{1}{2}\mu\omega^2(x^2+y^2+z^2)XYZ=EXYZ$$

$$(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{X}\frac{\partial^2 X}{\partial x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2)+(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{Y}\frac{\partial^2 Y}{\partial x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2y^2)$$
$$+(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2z^2)=E$$

$$\Rightarrow\quad(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{X}\frac{\partial^2 X}{\partial x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2)=E_x$$

$$(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{Y}\frac{\partial^2 Y}{\partial x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2y^2)=E_y$$

$$(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2z^2)=E_z$$

$$E=E_x+E_y+E_z$$

$$\Rightarrow \quad X_n(x) = N_n e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} H_n(\alpha x)$$

$$Y_m(y) = N_m e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 y^2} H_m(\alpha y)$$

$$Z_\ell(z) = N_\ell e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 z^2} H_\ell(\alpha z)$$

$$\psi_{nm\ell}(r) = N_n N_m N_\ell e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2} H_n(\alpha x) H_m(\alpha y) H_\ell(\alpha z)$$

$$\psi_{nm\ell}(r) = N_n N_m N_\ell e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2} H_n(\alpha x) H_m(\alpha y) H_\ell(\alpha z)$$

$$E_{nm\ell} = (n + m + \ell + \tfrac{3}{2})\hbar\omega$$

其中 $N_n = \sqrt{\dfrac{\alpha}{\pi^{1/2} 2^n n!}}$，　　$\alpha = \sqrt{\dfrac{\mu\omega}{\hbar}}$

对于基态 $n = m = \ell = 0$，$H_0 = 1$

$$\Rightarrow \psi_0 = \psi_{000}(r) = (\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}})^{3/2} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2}$$

对于沿 x 方向的第一激发态 $n = 1$，$m = \ell = 0$，　　$H_1(x) = 2\alpha x$

$$\psi_0 = \psi_{000}(r) = (\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}})^{3/2} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2}$$

$$\psi_1 = \psi_{100}(r) = \frac{2\alpha^{5/2}}{\sqrt{2}\pi^{3/4}} x e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2}$$

两电子的空间波函数能够组成一个对称波函数和一个反对称波函数，其形式为

$$\psi_S(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_0(r_1)\psi_1(r_2) + \psi_1(r_1\psi_0(r_2))]$$

$$= \frac{\alpha^4}{\pi^{3/2}}[x_2 e^{-\frac{1}{2}\alpha^2(r_1^2 + r_2^2)} + x_1 e^{-\frac{1}{2}\alpha^2(r_1^2 + r_2^2)}]$$

$$= \frac{\alpha^4}{\pi^{3/2}}(x_2 + x_1) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2(r_1^2 + r_2^2)}$$

$$\psi_A(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_0(r_1)\psi_1(r_2) - \psi_0(r_2)\psi_1(r_1)]$$

$$= \frac{\alpha^4}{\pi^{3/2}}(x_2 - x_1) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2(r_1^2 + r_2^2)}$$

而两电子的自旋波函数可组成三个对称态和一个反对称态，即

$\chi_{\mathrm{S}}^{(1)}$、$\chi_{\mathrm{S}}^{(2)}$、$\chi_{\mathrm{S}}^{(3)}$和$\chi_{\mathrm{A}}$

综合两方面，两电子组成体系的波函数应是反对称波函数，即

独态：　　$\Phi_1 = \psi_S(r_1, r_2)\chi_A$

三重态：
$$\begin{cases} \Phi_2 = \psi_A(r_1, r_2)\chi_S^{(1)} \\ \Phi_3 = \psi_A(r_1, r_2)\chi_S^{(2)} \\ \Phi_4 = \psi_A(r_1, r_2)\chi_S^{(3)} \end{cases}$$

## 主要参考书：

[1] 周世勋，《量子力学教程》，高教出版社，1979

[2] 张宏宝编　量子力学教程学习辅导书，高等教育出版社 2004.2