量子力学习题解答与剖析

张鹏飞 阮图南 朱栋培 吴 强 著

曾谨言著《量子力学（第四版）》100%习题详解

- 中国科大资深教师担纲编写
- 内容组织编排贴近学生需求
- 知识方法并重启发学生思考
- 学习量子力学必备参考用书

科学出版社

(O-4223.0101)

量子力学习题解答与剖析

www.sciencep.com

ISBN 978-7-03-030573-2

9 787030 305732 >

定 价：49.00 元

高等教育出版中心　数理出版分社
电　话：010-64015178
E-mail，mph@mail.sciencep.com

量子力学习题解答与剖析

张鹏飞　阮图南　朱栋培　吴　强　著

学　出　版　社

北　京

要理解这个世界上我们所见到的几乎所有现象背后，
自然界真正如何运行，我们非违背常识不可.

R. P. Feynman

前　言

本书给出曾谨言先生所著《量子力学（第四版）（卷Ⅰ、卷Ⅱ）》（科学出版社）的全部习题解答, 各章内容均遵照该书顺序排列. 这是我们在中国科学技术大学多年从事量子力学教学的过程中逐步编写而成的.

二十多年来, 曾谨言先生所著教材在国内量子力学教学中一直被广泛采用. 尤其是《量子力学（第四版）（卷Ⅰ、卷Ⅱ）》, 体系完整, 内容全面, 条理清晰, 叙述透彻, 因而深受青年学生以及教师的欢迎. 特别是曾先生还根据量子力学的前沿进展、国内量子力学教学情况以及读者反映的信息, 对该书作了多次修订, 使得它不断完善. 曾先生在该书的序言里说:“卷Ⅰ适合作为本科生学习量子力学的进一步深入的参考书, 卷Ⅱ则可作为研究生学习高等量子力学的主要参考书. 青年物理学工作者在学完本书以后, 可以比较顺利地进入与量子力学有关的各前沿领域的研究工作.” 我们还认为卷Ⅰ非常适合用于学时较多的本科量子力学课程（如中国科学技术大学 6 学分 120 学时的量子力学课程）教学, 卷Ⅱ非常适合用作高年级本科生或者研究生的高等量子力学教材. 本书作为曾先生所著教材的学习辅导材料, 可供本科生在初学量子力学时或者复习考研时参考之用, 也可为研究生学习高等量子力学提供一定的帮助.

本书融汇编者多年来从事量子力学教学的经验与体会, 力求解答详尽, 叙述清晰. 此外, 正如我们在教学中所做的那样, 在编写过程中我们始终注意两点:（1）贴近学生, 书主要是给学生用的, 应当根据学生的特点, 在内容组织、编排上多从利于学生学习的角度考虑; （2）知识与方法并重, 注重启发, 激发学生的学习主动性, 积极引导学生活学活用, 引导学生思考以深入发掘物理内涵.

只要你用心揣摩就会发现量子力学习题常有多种解法, 即所谓解无定法,“不管白猫黑猫, 能抓到老鼠的都是好猫”, 本书中的很多习题正是有多种解法. 一些题存在的多种解法, 我们并不试图列出全部, 而是尽量选取其中较有启发性的. 若解法有繁有简, 除少数特别巧妙的列出外, 我们往往还有意给出较繁的解法, 这样做主要是为了利于大多数同学学习. 同学懂了以后, 自己会给出最简单的解法.

本书最先的底稿是阮图南教授所做的部分习题, 以及编者之一（张）多年来做曾先生所著教材里的习题而积累起来的几个笔记本. 曾先生教材里的题目, 不少都量子力学味道浓, 或者具有一定科研背景. 对部分这样的题目, 我们几位编者曾以较大的兴趣做了一些讨论和思考. 此外, 在我们的教学过程中, 学生与我们富有启发性的讨论以及我们与学生的交流, 也促进了我们对一些问题的思考. 这些讨论和思考, 使我们或者是得到了一些新的解法, 或者是对一些题的物理实质和内涵作了更多的剖析和发掘, 在书中以“解法二”、“解法三”等或者以“讨论”、“说明”等形式附上. 个别题因为这种附加的内容较多, 以致于题目的解答显得冗长且不太合乎标准, 这些从一般解题要求来看并不必须, 我们却认为恰恰是这些附加的内容对于启发学生的学习和思考是有益的, 因而是本书的重要特色之一. 还有若干题的巧妙解法（特别有一些解法, 还是我们原先意想不到的）来源于历年选课同学的作业.

此外, 对于部分典型题的解答或相关背景材料, 我们参考了国内外一些优秀的而且是我们非常欣赏的习题解答书或者教材的内容（这些著作的名称也在本书正文的注释或者参考文献里列出）, 充分吸收其精华, 其中有钱伯初教授与曾谨言教授所著《量子力学习题精选与剖析（第三

版）》一书. 该书内容丰富, 叙述清晰, 精到地演绎如何运用量子力学原理去分析处理各种具体问题, 特别是对于部分习题做了深入细致的物理剖析, 在细微处精彩展现了两位量子力学教学名师深湛的功底. 该书是编写本书的重要参考书之一, 我们在编写过程中从该书得到了很多启发, 也学到了它的很多优点.

本书可供学习量子力学或者高等量子力学参考使用, 主要目的是为了方便大家学习或者复习巩固. 当然我们最不希望同学图这样的"方便", 只是简单地拿本书的习题解答来应付作业. 我们愿意在此提醒各位同学, 只有自己动手用心做一定数量的习题, 才能把量子力学学到手①. 就如沈惠川教授在他的《经典力学题谱》一书的序言里所说"光说不练假把戏, 光练不说傻把戏, 又说又练才是真把戏", 也好比一个人学习游泳一定要下水一样. 我们向手头有这本书的同学建议, 当拿到一个习题时应当: (1) 自己先做; (2) 如果自己反复思考都不得要领, 那可以先查阅一下本书, 边看边思考, 想清楚解题要点后, 合上书, 仍是自己独立完成. 习题做完以后, 再翻开书看看, 把自己做的与书中的解法比较, 这样学得踏实, 等等. 我们希望本书给同学提供的不是思想的束缚, 也不是拐杖, 而是启发, 是灵感. 正如诗是做不完的一样, 量子力学习题的解法往往层出不穷. 我们期望, 同学们在自己用心做一些题以后会发现乐趣, 同时会给出一些更好的解法. 假若同学们发现了更多更好的解法, 本书也就起到了抛砖引玉的作用, 这正是我们最希望看到的.

同学可以针对自己的特点选择一些题来做, 像本书习题较为丰富, 有难有易, 数学上也是有繁有简. 每个同学特点不一样, 有些同学数学很好, 有些同学数学可能弱一点. 我们觉得, 数学稍弱的同学, 不妨选一些数学较简然而物理味足的题来做. 学习量子力学, 不应让繁琐的数学演算成为学习和领会量子力学物理实质的障碍. 数学是物理学的工具, 数学演算绝不是量子力学的全部. 量子力学除了要用心学, 学到脑子里, 还要学到手上. 通过做习题, 就会了解如何运用所学知识, 对它的领会也会更加深入. 做习题绝不仅仅是想明白怎么做, 还要动手一步一步把它做出来. "想通了"跟"做出来"是两码事. 思考可以跳跃, 有时也许会出错. 自己动手做的, 你只要一步一步都不含糊, 做完了一般都很有把握. 所以, 我们总是主张同学一定要自己动手做一些习题, 哪怕你时间不多, 只能做一部分. 平常学习中, 应在对所学知识作复习、总结的基础上, 在对相关原理和概念充分理解的基础上做题, 这样就不会盲目. 做题时, 应当先看清题目, 明白题目的全部条件和要求, 再回忆学过的知识, 多方面思考, 不妨画画草图或者写写算式作辅助, 寻找解题思路. 想通了怎么解题以后, 开始遵从逻辑的顺序, 利用题目的条件、已知的概念、原理、事实, 一步一步演绎, 直到到达结论.

题解完后, 最好再检查题目解答是否完整, 再琢磨琢磨题目有没有更妙的解法? 它能否运用到一些特例? 它能否推广? 条件能否减弱? 等等. 不过这时, 最重要的应该还不止于此, 这时最重要的应该是试着进一步思考这个题的物理实质和内涵, 思考它可能的更深的物理意义, 所谓"察物内之物, 思理中之理". 我们总是觉得, 量子力学最妙的地方也许就在于它有很多值得"玩味"的地方, 似是而非、似非而是容易糊涂的往往又是本质所在的地方很多, 这些地方常需要较深入的思考才能真正理解和领会, 所谓"浅尝难知其真味". 现在很多同学选一门课, 他/她最关心的只是最后他/她这门课的成绩有多高, GPA 是多少. 可是我们真正觉得, 就量子力学这门课的学习而言, 光会做题能考高分甚至能拿 100 分也许还是不太够的. 不少题有重要物理背景, 量子力学味道浓, 它的物理内涵、它深层的物理意义往往都值得"玩味"和"琢磨". 只有这种"玩味"、这种"琢磨", 才可能给你带来"顿悟"之喜, 才可能把你导向对物理原理真实和深入的领会, 才可能把你导向对量子力学精髓的真正领悟.

---

① 我们在《量子力学学习指导》一书的前言里写过一个量子力学学习的建议, 该文在互联网上也可以找到, 感兴趣的同学可以找来看.

曾谨言先生非常信任的让我们编写本书, 并且一直关心本书编写的进展情况. 杨国桢院士曾在我校倡导加强量子力学教学. 为此, 中国科学技术大学本科教学从 2004 年秋季学期开始, 增设 6 学分 120 学时的量子力学（量子力学 A）. 这一远见之举一定程度上也促进了本书的编写, 因为它使我们在量子力学教学上投入了更多的时间和热情. 王安民、尹民教授等给予了许多鼓励和帮助. 沈惠川教授等则一直关心此书的编写, 而且与编者之一（张）平常富有启发的讨论也使本书在很多方面得到了改进. 张永德教授与编者之一（张）有过多次交流, 给了年轻人很多启发和教益. 本书的编写还得到了许多老师的关心和帮助. 对于所有这些, 我们在此一并深致谢意.

我们还特别感谢我校历年来选修我们量子力学课程的同学, 感谢他们对量子力学的兴趣, 感谢他们与我们富有启发性的讨论, 感谢他们的各种意见. 对历年来的助教王舸、葛红林、成斌、马小三、王安、刘键恒、邹冰、尹鹏程等人的工作也在此致以谢意.

感谢尹甸、谷德阳等同学在 LATEX 排版上提供的热情帮助.

虽然我们希望做到最好并且也尽了力, 但由于我们的水平有限, 书中不当之处在所难免. 对此, 我们恳请广大读者谅解, 并诚挚欢迎读者提出宝贵的意见和建议. 我们的联系方式如下：

Email: zhpf@ustc.edu.cn

Tel: 0551-3600630

编　者

2009 年 9 月于合肥

目　录

前言

第 1 章　量子力学的诞生……1

第 2 章　波函数与 Schrödinger 方程……12

第 3 章　一维定态问题……27

第 4 章　力学量用算符表达……76

第 5 章　力学量随时间的演化与对称性……107

第 6 章　中心力场……129

第 7 章　粒子在电磁场中的运动……164

第 8 章　表象变换与量子力学的矩阵形式……170

第 9 章　自旋……178

第 10 章　力学量本征值问题的代数解法……218

第 11 章　束缚定态微扰论……231

第 12 章　量子跃迁……270

第 13 章　散射理论……287

第 14 章　其他近似方法……315

第 15 章　量子力学与经典力学的关系……337

第 16 章　二次量子化……352

第 17 章　相对论量子力学……365

附录　几个积分和级数公式……376

主要参考文献……379

后记……380

第 1 章　量子力学的诞生

1.1　试用量子化条件, 求谐振子的能量. 谐振子势能 $V(x)$ 取为

$$\frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

解　设粒子质量为 m, 在题给势场中作一维运动, 其总能量表达式为

$$E=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2 \tag{1.1}$$

由上式解出粒子动量为

$$p=\sqrt{2m\left(E-\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)} \tag{1.2}$$

要求 $E-\frac{1}{2}m\omega^2x^2\geqslant 0$, 即有 $-\frac{1}{\omega}\sqrt{\frac{2E}{m}}\leqslant x\leqslant\frac{1}{\omega}\sqrt{\frac{2E}{m}}$. 令 $x_m=\frac{1}{\omega}\sqrt{\frac{2E}{m}}$, 根据 Bohr-Sommerfeld 量子化条件得

$$\begin{aligned}nh=\oint p\mathrm{d}x&=\int_{-x_m}^{x_m}p\mathrm{d}x-\int_{-x_m}^{x_m}(-p)\mathrm{d}x=2\int_{-x_m}^{x_m}p\mathrm{d}x\\&=2\int_{-x_m}^{x_m}\sqrt{2m\left(E-\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)}\mathrm{d}x=4m\omega\int_0^{x_m}\sqrt{x_m^2-x^2}\mathrm{d}x\end{aligned}$$

其中 n 取正整数, 即 $n=1,2,\cdots$. 对上式积分 (可采用分部积分法, 或者对积分变量作代换 $x=x_m\sin\omega t$) 得

$$\begin{aligned}nh&=4m\omega\int_0^{x_m}\sqrt{x_m^2-x^2}\mathrm{d}x=4m\omega\,\frac{1}{2}\left[x\sqrt{x_m^2-x^2}+x_m^2\arcsin\frac{x}{x_m}\right]\Bigg|_0^{x_m}\\&=4m\omega\frac{2E}{m\omega^2}\frac{\pi}{2}=\frac{2\pi E}{\omega}\end{aligned} \tag{1.3}$$

所以 $E=\frac{nh}{2\pi}\omega=n\hbar\omega$①. 解完本题后, 我们请读者到后面看一看写在题 1.4 后的说明.

1.2　用量子化条件求限制在箱内运动的粒子的能量. 箱的长宽高分别为为 a, b 和 c.

解　选取坐标使得 x, y, z 轴分别沿箱的长、宽、高方向, 箱的一个顶点为 $(0,0,0)$, 其对角点为 (a,b,c). 粒子能量表达式为 $\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}=\frac{1}{2m}(p_x^2+p_y^2+p_z^2)$.

对箱中一个粒子的运动, 注意其 x 方向运动, 某一时刻从 $x=0$ 出发, 到 $x=a$, 与箱壁碰撞后动量 (速度) 反向返回再回到 $x=0$, 与箱壁碰撞后再沿正 x 方向运动. 这是一个周期运动, 根据 Bohr-Sommerfeld 量子化条件得

$$n_1h=\oint p_x\mathrm{d}x=\int_0^a p_x\mathrm{d}x-\int_0^a(-p_x)\mathrm{d}x=2\int_0^a p_x\mathrm{d}x=2ap_x$$

① 量子力学的结果则给出 $E=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$.

其中 $n_1 = 1, 2, \cdots$, 所以 $p_x = n_1 h/(2a) = \pi n_1 \hbar/a$. 同理得 $p_y = n_2 h/(2b)$, $p_z = n_3 h/(2c)$, 而 n_2, n_3 均为正整数. 这样得粒子能量的可能取值为

$$E = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2}\right) \tag{1.4}$$

式中 n_1, n_2, n_3 均为正整数, 即可取 $n_1, n_2, n_3 = 1, 2, \cdots$.

1.3 平面转子的转动惯量为 I, 求它的能量允许值.

解 转子的转动惯量为 I, 则其能量表达式为

$$E = T = \frac{L^2}{2I} \tag{1.5}$$

其中 L 为角动量. 角动量量子化条件 (根据 Bohr-Sommerfeld 量子化条件) 给出[①]

$$L = n\hbar$$

其中 n 取正整数, 即 $n = 1, 2, \cdots$ 代入式 (1.5) 得到

$$E = \frac{n^2\hbar^2}{2I}, \qquad n = 1, 2, 3, \cdots \tag{1.6}$$

1.4 有一个带电 q 质量为 m 的粒子在平面内运动, 垂直于平面方向有磁场 $\boldsymbol{B}$. 求粒子能量允许值.

解 设题给磁场的方向沿 z 轴, 则其磁矢势 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A})$ 可以取为

$$\boldsymbol{A} = \frac{1}{2}\boldsymbol{B} \times \boldsymbol{r} = -\frac{1}{2}By\boldsymbol{e}_x + \frac{1}{2}Bx\boldsymbol{e}_y$$

即有 $A_x = -\frac{1}{2}By$, $A_y = \frac{1}{2}Bx$. 粒子运动方程 (磁场单位采用 Gauss 制) 为

$$m\boldsymbol{a} = \frac{q}{c}\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B} \tag{1.7}$$

其中 $\boldsymbol{v} = \dot{\boldsymbol{r}}, \boldsymbol{a} = \ddot{\boldsymbol{r}}$. 由上式得 $m\dot{\boldsymbol{r}} \cdot \boldsymbol{a} = 0$, 或者 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\dfrac{1}{2}m\dot{r}^2\right) = 0$, 即能量守恒. 式 (1.7) 即

$$m\left(a_1\boldsymbol{e}_x + a_2\boldsymbol{e}_y\right) = \frac{q}{c}\left(v_1\boldsymbol{e}_x + v_2\boldsymbol{e}_y\right) \times B\boldsymbol{e}_z = \frac{qB}{c}\left(v_2\boldsymbol{e}_x - v_1\boldsymbol{e}_y\right)$$

也就是

$$m\dot{v}_1 = \frac{qB}{c}v_2, \qquad m\dot{v}_2 = -\frac{qB}{c}v_1 \tag{1.8}$$

这样得

$$\ddot{v}_1 = -\left(\frac{qB}{mc}\right)^2 v_1 = -\omega^2 v_1, \qquad \ddot{v}_2 = -\omega^2 v_2 \tag{1.9}$$

其中 $\omega = \dfrac{|q|B}{mc}$. 求解上述微分方程组可得

$$\begin{aligned} v_1 &= -v\sin(\omega t + \phi) \\ v_2 &= \frac{mc}{qB}\dot{v}_1 = \frac{mc}{qB}\omega\cos(\omega t + \phi) = -\frac{q}{|q|}v\cos(\omega t + \phi) \end{aligned} \tag{1.10}$$

由此得

$$x - x_0 = \frac{v}{\omega}\cos(\omega t + \phi), \qquad y - y_0 = -\frac{q}{|q|}\frac{v}{\omega}\sin(\omega t + \phi)$$

---

① 量子力学的结果则给出 $n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \cdots$.

可见粒子作匀速圆周运动, 速度大小为 v, 角速度大小为 ω, 轨道半径为 $r=\dfrac{v}{\omega}$. 不妨取 $x_0=y_0=0$, 则

$$x=\frac{v}{\omega}\cos(\omega t+\phi),\qquad y=-\frac{q}{|q|}\frac{v}{\omega}\sin(\omega t+\phi)$$

令 $\phi=0$, 则上式为 $x=\dfrac{v}{\omega}\cos\omega t,\quad y=-\dfrac{q}{|q|}\dfrac{v}{\omega}\sin\omega t$, 此式给出

$$\begin{aligned}&p_x=m\dot{x}=-mv\sin\omega t,\quad p_y=m\dot{y}=-\frac{q}{|q|}mv\cos\omega t\\&\mathrm{d}x=-v\sin\omega t\mathrm{d}t,\quad \mathrm{d}y=-\frac{q}{|q|}v\cos\omega t\mathrm{d}t\end{aligned}\tag{1.11}$$

为了用量子化条件, 下面计算 $\oint\boldsymbol{p}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{l}$, 其中 $\boldsymbol{p}=m\boldsymbol{v}+\dfrac{q}{c}\boldsymbol{A}$. 先分项计算 $\oint p_x\mathrm{d}x=\oint mv_x\mathrm{d}x+\oint\dfrac{q}{c}A_x\mathrm{d}x$.

$$\begin{aligned}\oint mv_x\mathrm{d}x&=\int_0^T(-mv\sin\omega t)v(-\sin\omega t)\mathrm{d}t=\frac{mv^2}{\omega}\int_0^{2\pi}\sin^2\theta\mathrm{d}\theta=\frac{mv^2}{\omega}\pi\\\oint\frac{q}{c}A_x\mathrm{d}x&=\oint\frac{q}{c}\left(-\frac{1}{2}By\right)\mathrm{d}x=-\frac{qB}{2c}\oint y\mathrm{d}x=\frac{|q|Bv^2}{2c\omega^2}\sin\omega t\mathrm{d}\cos\omega t\\&=-\frac{|q|Bv^2}{2c\omega^2}\int_0^T\sin^2\omega t\mathrm{d}t=-\frac{|q|Bv^2}{2c\omega}\int_0^{2\pi}\sin^2\theta\mathrm{d}\theta=-\frac{|q|Bv^2}{2c\omega}\pi=-\frac{mv^2}{2\omega}\pi\end{aligned}$$

因而

$$\oint p_x\mathrm{d}x=\oint mv_x\mathrm{d}x+\oint\frac{q}{c}A_x\mathrm{d}x=\frac{qBv^2}{c\omega}\pi-\frac{qBv^2}{2c\omega}\pi=\frac{mv^2}{2\omega}\pi\tag{1.12}$$

同样的, 对于 $\oint p_y\mathrm{d}y$, 由

$$\begin{aligned}\oint mv_y\mathrm{d}y&=\int_0^T(mv\cos\omega t)v\cos\omega t\mathrm{d}t=\frac{mv^2}{\omega}\int_0^{2\pi}\cos^2\theta\mathrm{d}\theta=\frac{mv^2}{\omega}\pi\\\oint\frac{q}{c}A_y\mathrm{d}y&=\frac{q}{c}\oint\frac{1}{2}Bx\mathrm{d}y=-\frac{|q|B}{2c}\oint x\mathrm{d}y=-\frac{|q|Bv^2}{2c\omega^2}\int_0^T\cos\omega t\mathrm{d}\sin\omega t\\&=-\frac{|q|Bv^2}{2c\omega^2}\int_0^T\cos^2\omega t\mathrm{d}t=-\frac{mv^2}{2\omega}\int_0^{2\pi}\cos^2\theta\mathrm{d}\theta=-\frac{mv^2}{2\omega}\pi\end{aligned}$$

得到

$$\oint p_y\mathrm{d}y=\oint mv_y\mathrm{d}y+\oint\frac{q}{c}A_y\mathrm{d}y=\frac{mv^2}{\omega}\pi-\frac{mv^2}{2\omega}\pi=\frac{mv^2}{2\omega}\pi\tag{1.13}$$

这样式 (1.12)、式 (1.13) 给出

$$\oint\boldsymbol{p}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{l}=\oint p_x\mathrm{d}x+\oint p_y\mathrm{d}y=\frac{mv^2}{2\omega}\pi+\frac{mv^2}{2\omega}\pi=\frac{mv^2}{\omega}\pi=nh$$

其中 n 取正整数, 即 $n=1,2,\cdots$. 由上式得 $\dfrac{mv^2}{\omega}\pi=nh$. 这样粒子能量[①] 为

$$E=T=\frac{1}{2}mv^2=n\hbar\omega,\qquad n=1,2,\cdots$$

而 $\omega=\dfrac{|q|B}{mc}$.

---

① 量子力学的结果则给出 $E_n=\left(n+\dfrac{1}{2}\right)\hbar\omega$.

另解　量子化条件为 $\oint \boldsymbol{p}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{l}=nh$, 而

$$\begin{aligned}\oint_C \boldsymbol{p}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{l}&=\oint_C \left(m\boldsymbol{v}+\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{l}=\oint_C m\boldsymbol{v}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{l}+\frac{q}{c}\oint_C \boldsymbol{A}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{l}\\&=\int_0^T m\boldsymbol{v}\cdot \boldsymbol{v}\mathrm{d}t+\frac{q}{c}\iint_S \nabla\times \boldsymbol{A}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{s}=\int_0^T mv^2\mathrm{d}t+\frac{q}{c}\iint_S \boldsymbol{B}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{s}\\&=mv^2\int_0^T \mathrm{d}t-\frac{q}{c}BS=mv^2T-\frac{q}{c}B\pi R^2=mv^2\frac{2\pi}{\omega}-m\omega\cdot\pi\cdot\frac{v^2}{\omega^2}=\frac{mv^2}{\omega}\pi\end{aligned}$$

其中 $\omega=\dfrac{|q|B}{mc}$ 为粒子回旋 (cyclotron) 频率. 同样由量子化条件, 知 $mv^2T-\dfrac{q}{c}B\pi R^2=nh$, 这样粒子能量为

$$E=T=\frac{1}{2}mv^2=n\hbar\omega$$

其中 n 取正整数, 即 $n=1,2,\cdots$.

说明　按照量子力学, 上述几题中所采用的早期量子论的做法是不正确的, 特别其物理图像根本是错误的. 前面题 1.1、题 1.2 与题 1.4 都是先从经典轨道运动出发, 而经典轨道在量子力学中是从根本上被放弃的. 那么为什么这几个例子中用早期量子论的做法得到的量子化能量却是基本正确的呢? 其原因在于在问题中引入了 Plank 作用量子. 另外, 量子力学本身正是因为早期量子论的不足, 而建立起来并逐步得到完善的.

1.5　用量子力学可以证明 (WKB 近似, 见本书卷 II 第 2 章), 对于下列不同形式的势阱 (图 1.1), 量子化条件略有不同.

(a) $\oint p\mathrm{d}x=\left(n+\dfrac{1}{2}\right)h,\quad n=0,1,2,\cdots$

(b) $\oint p\mathrm{d}x=\left(n+\dfrac{3}{4}\right)h,\quad n=0,1,2,\cdots$

(c) $\oint p\mathrm{d}x=(n+1)\,h,\quad n=0,1,2,\cdots$

或

$$\oint p\mathrm{d}x=nh,\quad n=1,2,3,\cdots$$

上述公式中 $p=\sqrt{2m\left[E-V(x)\right]}$. 利用上述公式, 计算在下列势阱中粒子的能量允许值.

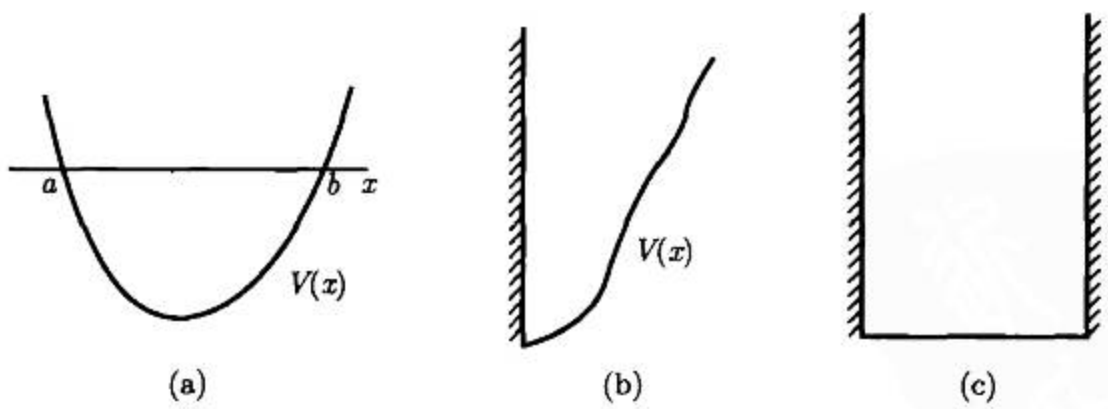

图 1.1　不同形式的势阱

(1) 势阱 (见图 1.2)

$$V(x)=g|x|$$

先进行量纲分析, 然后求能量允许值.

(2) 势函数

$$V(x)=\begin{cases}\infty, & x<0\\ e\mathcal{E}x, & x>0\end{cases}$$

式中, $\mathcal{E}$ 为均匀电场强度, $-e$ 为粒子电荷 (见图 1.3).

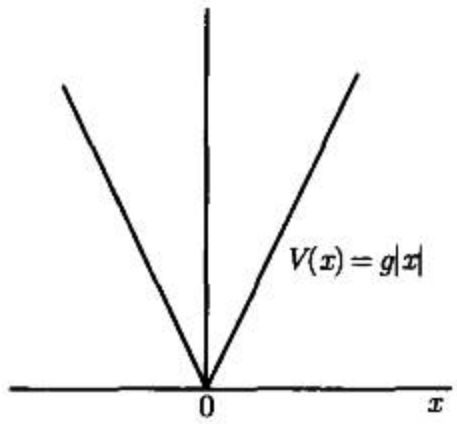

图 1.2　回复力大小恒定的势函数

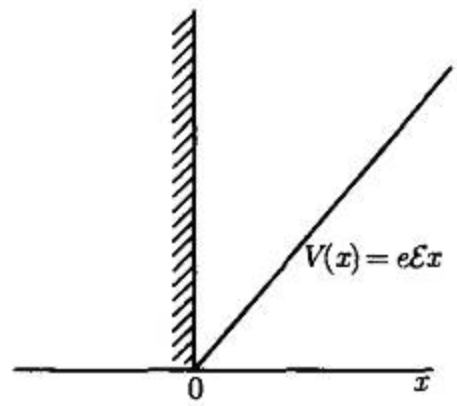

图 1.3　半空间中的线性势

解　(1) 先进行量纲分析. 粒子处在题给势场中, 其能量 E 可能值有关的量应包括粒子质量 m、势函数的唯一参数 g, 再加上一个 Plank 常量 $\hbar$. 这样可以令 $E = fg^{\alpha}m^{\beta}\hbar^{\gamma}$, 其中 f 为无量纲量. g 的量纲是 $[g] = [E/r] = [E]/[r]$, 即牛顿力学中力的量纲. 将有关量的量纲列表如下:

	g	m	$\hbar$	E
M	1	1	1	1
L	1	0	2	2
T	-2	0	-1	-2

若两个量相等, 其量纲必相等. 由此列出如下关于量纲指数的方程组:

$$\begin{cases} \alpha+\beta+\gamma=1 \\ \alpha+0+2\gamma=2 \\ -2\alpha+0-\gamma=-2 \end{cases}$$

解上面线性方程组, 得 $\alpha = 2/3, \beta = -1/3, \gamma = 2/3$. 由此得

$$E = f_1\left(\frac{g^2\hbar^2}{m}\right)^{\frac{1}{3}} \tag{1.14}$$

其中 f_1 为无量纲参数.

在上述量纲分析基础上, 我们不妨选取自然量纲, 取 $m = g = \hbar = 1$, 在最后只需将能量补上上述量纲即可. 这样题给势函数可记为 $V(x) = |x|$. 总能量为

$$E = \frac{p^2}{2} + |x|$$

由上式解出粒子动量为

$$p = \sqrt{2\left(E - |x|\right)}$$

要求 $E - |x| \geqslant 0$, 即有 $-E \leqslant x \leqslant E$. 令 $x_m = E$. 根据势函数特点, 应采用题给的 (a) 情形的量子化条件, 即有

$$\oint \sqrt{2\left(E - |x|\right)}\mathrm{d}x = \left(n + \frac{1}{2}\right)2\pi \tag{1.15}$$

其中 $n = 0, 1, 2, \cdots$. 上式等号左边的积分为

$$\oint\sqrt{2\left(E-|x|\right)}\mathrm{d}x=2\sqrt{2}\int_{-x_m}^{x_m}\sqrt{E-|x|}\mathrm{d}x=4\sqrt{2}\int_0^{x_m}\sqrt{E-x}\mathrm{d}x$$
$$=4\sqrt{2}\cdot\frac{2}{3}\left(E-x\right)^{\frac{3}{2}}\Big|_0^{x_m}=\frac{8\sqrt{2}}{3}E^{\frac{3}{2}}\tag{1.16}$$

式 (1.15)、式 (1.16) 给出

$$E=E_n=\left[\frac{3\pi}{4\sqrt{2}}\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]^{\frac{2}{3}}$$

根据式 (1.14), 恢复能量量纲得题给势阱中粒子的能量允许值为

$$E_n=\left(\frac{g^2\hbar^2}{2m}\right)^{1/3}\cdot\left[\frac{3\pi}{4}\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]^{2/3}$$

(2) 粒子处在题给势场中, 其能量 E 可能值有关的量应包括粒子质量 m, 势函数的参数 $e\mathcal{E}$, 再加上一个 Plank 常量 $\hbar$. 除 $m,\hbar$ 与第 (1) 小题相同外, $e\mathcal{E}$ 的量纲也与第 (1) 小题的 g 相同, 因此按第 (1) 小题的量纲分析结果, 能量允许值应为

$$E=f_2\left(\frac{e^2\mathcal{E}^2\hbar^2}{m}\right)^{\frac{1}{3}}\tag{1.17}$$

其中 f_2 为无量纲参数. 我们不妨先选取自然量纲, 取 $m=g=\hbar=1$. 粒子在题给势阱中限于在 $x>0$ 区域运动, 在自然量纲下的总能量表示为

$$E=\frac{p^2}{2}+x$$

由上式解出粒子动量为

$$p=\sqrt{2\left(E-x\right)}$$

要求 $E-x\geqslant 0$, 即有 $0<x\leqslant E$. 令 $x_m=E$. 根据势函数特点, 应采用题给的 (b) 情形的量子化条件, 即有

$$\oint\sqrt{2\left(E-x\right)}\mathrm{d}x=\left(n+\frac{3}{4}\right)2\pi\tag{1.18}$$

上式等号左边的积分为

$$\oint\sqrt{2\left(E-x\right)}\mathrm{d}x=2\sqrt{2}\int_0^{x_m}\sqrt{E-x}\mathrm{d}x=-2\sqrt{2}\cdot\frac{2}{3}\left(E-x\right)^{\frac{3}{2}}\Big|_0^{x_m}=\frac{4\sqrt{2}}{3}E^{\frac{3}{2}}\tag{1.19}$$

式 (1.18)、式 (1.19) 给出

$$E=E_n=\frac{1}{2}\left[3\pi\left(n+\frac{3}{4}\right)\right]^{\frac{2}{3}}$$

根据式 (1.17), 恢复能量量纲得题给势阱中粒子的能量允许值为

$$E_n=\frac{1}{2}\left(\frac{9\pi^2e^2\mathcal{E}^2\hbar^2}{m}\right)^{1/3}\cdot\left(n+\frac{3}{4}\right)^{2/3}$$

其中 n 为非负整数, 即 $n=0,1,2,\cdots$.

1.6 中心力场 $V(r)$ 中, 角动量为 0 的粒子 (在经典力学中这是什么图像?) 的能量量子化条件为

$$2\int_0^{\infty}\sqrt{2mE-V(r)}\mathrm{d}r=\left(n+\frac{3}{4}\right)h,\quad n=0,1,2,\cdots$$

设 $V(r)=-\dfrac{e^2}{r}$(Coulomb 势), 求粒子能量允许值.

解 在经典力学中, 粒子角动量为 0, 意味着它的速度与位置矢量方向相同, 即粒子始终沿径向运动①. 我们姑且采用这种图像求解本题. 设题给 Coulomb 势场中运动的 0 角动量粒子能量为 $E(E<0)$, 按题给量子化条件

$$2\int_0^{\infty}\sqrt{2mE+\frac{e^2}{r}}\mathrm{d}r=\left(n+\frac{3}{4}\right)h \tag{1.20}$$

其中 $n=0,1,2,\cdots$. 式 (1.20) 左边被积函数要求 $2mE+\dfrac{e^2}{r}\geqslant 0$, 这给出 $r\leqslant -e^2/2mE$, 令 $r_m=-e^2/2mE$. 上式左边 $\int_0^{\infty}\to\int_0^{r_m}$, 再令 $x=-r/r_m$ 得

$$\begin{aligned}2\int_0^{r_m}\sqrt{2mE+\frac{e^2}{r}}\mathrm{d}r&=\frac{2e^2}{\sqrt{-2mE}}\int_0^1\sqrt{\frac{1}{x}-1}\mathrm{d}x=\frac{4e^2}{\sqrt{-2mE}}\int_0^1\sqrt{1-x}\mathrm{d}\sqrt{x}\\&=\frac{4e^2}{\sqrt{-2mE}}\int_0^i\sqrt{1-x^2}\mathrm{d}x=\frac{4e^2}{\sqrt{-2mE}}\cdot\frac{1}{2}\left(x\sqrt{1-x^2}+\arcsin x\right)\Big|_0^1\\&=\frac{\pi e^2}{\sqrt{-2mE}}\end{aligned} \tag{1.21}$$

式 (1.20)、式 (1.21) 给出

$$E=E_n=-\frac{me^4}{2\hbar^2}\left(n+\frac{3}{4}\right)^{-2}$$

其中 $n=0,1,2,\cdots$. 或者为

$$E_n=-\frac{me^4}{2\hbar^2\left(n-1/4\right)^2}$$

其中 $n=1,2,\cdots$.

说明 量子力学相应计算结果为将上式分母中 $(n-1/4)^2$ 换为 n^2, 其余不变. 因此对于 n 较小的情况 (粒子基态或者低激发态), 上述计算与量子力学计算结果有较大出入, 对于 $n\gg 1$ 的情况, 上述计算与量子力学计算结果一致.

1.7 对于高速运动粒子 (静质量 m), 能量及动量由下式给出:

$$E=mc^2/\sqrt{1-v^2/c^2}\quad (v\text{ 是粒子速度})$$

$$p=mv/\sqrt{1-v^2/c^2}=Ev/c^2$$

试根据 Hamilton 量

$$H=E=\sqrt{m^2c^4+p^2c^2}$$

及正则方程来验证这两式. 由此求出粒子速度与 de Broglie 波的群速之间关系. 计算其相速, 并证明相速大于光速 c.

解 Hamilton 方程组

$$\dot{q}_i=\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial H}{\partial p_i},\quad \dot{p}_i=\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t}=-\frac{\partial H}{\partial q_i} \tag{1.22}$$

对于题给自由粒子的 Hamilton 量, 上面第二式给出 $p=\text{const.}$ 的平凡结果. 因 $v=\dot{q}_i$, 第一式为

$$v=\frac{\partial}{\partial p}\sqrt{m^2c^4+c^2p^2}=\frac{c^2p}{\sqrt{m^2c^4+c^2p^2}} \tag{1.23}$$

---

① 在量子力学中, 0 角动量态即 s 态, 则是在空间各个角度方向等概率出现, 它与经典力学中粒子角动量为 0 的状态无法对应. 实际上, 量子力学的 0 角动量态是没有经典对应的.

由此解得

$$p = \frac{mv^2}{\sqrt{1-\dfrac{v^2}{c^2}}} \tag{1.24}$$

把上式代入题给 Hamilton 量表达式即得

$$E = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2} = mc^2/\sqrt{1 - v^2/c^2} \tag{1.25}$$

从而

$$p = mv/\sqrt{1 - v^2/c^2} = Ev/c^2 \tag{1.26}$$

按 de Broglie 关系, 物质波的频率、波数分别为

$$k = \frac{p}{\hbar}, \quad \omega = \frac{E}{\hbar} \tag{1.27}$$

因而 de Broglie 波的相速度

$$v_p = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = \frac{c^2}{v} \tag{1.28}$$

因为 $v < c$, 故相速度 $v_p > c$. 式 (1.25)、式 (1.27) 给出 de Broglie 如下色散关系:

$$\omega(k) = \frac{1}{\hbar}\sqrt{\frac{m^2c^4}{\hbar^2} + c^2k^2} \tag{1.29}$$

从而得物质波的波包群速度为

$$v_g = \frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k} = \frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}\sqrt{\frac{m^2c^4}{\hbar^2} + c^2k^2} = \frac{c^2k}{\sqrt{\dfrac{m^2c^4}{\hbar^2} + c^2k^2}}$$

再由式 (1.25)、式 (1.27) 以及式 (1.26) 即得

$$v_g = \frac{c^2p}{\sqrt{m^2c^4 + c^2p^2}} = \frac{c^2p}{E} = v \tag{1.30}$$

可见 de Broglie 波的群速与粒子速度相等.

1.8 按照特殊相对论, 粒子能量、动量和质量的关系式, $E^2 = p^2c^2 + m^2c^4$, 求:

(1) 非相对论近似下的能量展开式

$$E = mc^2\left[1 + \left(\frac{pc}{mc^2}\right)^2\right]^{1/2} = mc^2 + \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3c^2} + \cdots$$

上式右边 mc^2 为静止能 (rest energy), $\dfrac{p^2}{2m}$ 为非相对论极限下的动能, $-\dfrac{p^4}{8m^3c^2}$ 为最低级相对论修正.

(2) 在极高速情况下 (高能物理实验中经常碰到), 求能量的近似展开

$$E = pc\left[1 + \left(\frac{mc^2}{pc}\right)^2\right]^{1/2} = pc + \frac{1}{2}\frac{m^2c^4}{pc} + \cdots$$

对于无静质量 ($m = 0$) 粒子 (例如光子), $E = pc$.

解 (1) 题给粒子能量、动量和质量的关系式 (三角关系) 又可写为

$$E = \left(p^2c^2 + m^2c^4\right)^{1/2} \tag{1.31}$$

非相对论情形下, 粒子速度 $v \ll c$, 从而 $p = \dfrac{m}{\sqrt{1-v^2/c^2}}v \approx mv \ll mc$, 也就是 $\dfrac{pc}{mc^2} \ll 1$. 将粒子能量关系式 (1.31) 按照 $\left(\dfrac{pc}{mc^2}\right)^2$ 作 Taylor 展开即得

$$E = mc^2\left[1+\left(\frac{pc}{mc^2}\right)^2\right]^{1/2} = mc^2\left[1+\frac{1}{2}\left(\frac{pc}{mc^2}\right)^2 - \frac{1}{8}\left(\frac{pc}{mc^2}\right)^4 + \cdots\right] = mc^2 + \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3c^2} + \cdots$$

(2) 在极高速情况下, 粒子速度 $v \approx c$, 而 $p = \dfrac{m}{\sqrt{1-v^2/c^2}}v = \dfrac{v/c}{\sqrt{1-v^2/c^2}}mc \gg mc$, 此时 $\dfrac{mc^2}{pc} \ll 1$. 将粒子能量关系式 (1.31) 按照 $\left(\dfrac{mc^2}{pc}\right)^2$ 作 Taylor 展开即得

$$E = pc\left[1+\left(\frac{mc^2}{pc}\right)^2\right]^{1/2} = pc\left[1+\frac{1}{2}\left(\frac{mc^2}{pc}\right)^2 + \cdots\right] = pc + \frac{1}{2}\frac{m^2c^4}{pc} + \cdots$$

对于无静质量 ($m=0$) 粒子 (例如光子), 式 (1.31) 直接给出 $E = pc$.

1.9 (1) 试用 Fermat 最短光程原理导出光的折射定律: $n_1 \sin\alpha_1 = n_2 \sin\alpha_2$. (2) 光的波动说的拥护者曾经向光的微粒论者提出下列非难: 如认为光是“粒子”, 则其运动遵守最小作用原理, $\delta\int p\mathrm{d}l = 0$. 若认为 $p = mv$, 则 $\delta\int v\mathrm{d}l = 0$, p 指粒子“动量”, v 指粒子“速度”. 这样将导出下列折射定律: $n_2 \sin\alpha_1 = n_1 \sin\alpha_2$, 这明显违反实验事实. 即使考虑相对论效应, 对于自由粒子, $p = Ev/c^2$ 仍然成立, E 是粒子能量, 从一种介质到另一种介质, E 不改变. 因此, 仍然得到 $\delta\int p\mathrm{d}l = 0$. 矛盾依然存在. 你怎样解决这矛盾?

参阅 L. de Broglie, *Le Journal de Physique et la Radium*, **7**(1926),1.

解 (1) 由 Fermat 最短光程原理知光线在同一均匀各向同性介质中沿直线传播. 因此光线从介质 I(折射率设为 n_1) 的一点 A 传播到介质 II (折射率设为 n_2) 的一点 B 走的路程是两段直线. 我们将根据 Fermat 最短光程原理确定光线与两种介质分解面 S 的交点 P.

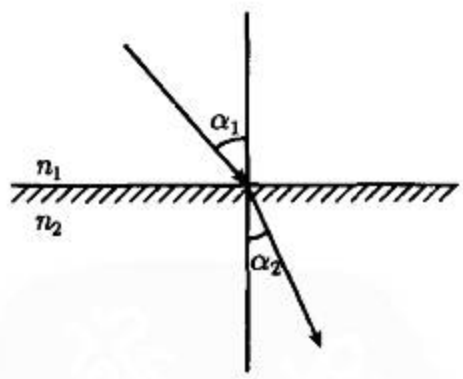

图 1.4 光的折射

设过 A, B 且与两种介质分界面 S 垂直的平面为 II, 则 P 必在平面 II 内. 若否, 则可以过 P 点作平面 II 的垂足 P'. $AP'P$ 为直角三角形, 其直边长度 $|AP'|$ 必小于斜边长度 $|AP|$; 同样 $|BP'|$ 小于斜边长度 $|BP|$, 因此 $n_1|AP'| + n_2|BP'| < n_1|AP| + n_2|BP|$. 这样 APB 不是最短光程. 由矛盾知 P 必在平面 II 内. 平面 II 既是入射光线与分解面垂线构成的面 (入射面), 也是折射光线与分解面垂线构成的面 (折射面). 因此入射面与折射面共面, 这是由 Fermat 最短光程原理得到的折射定律的第一个内容.

设 A, B 到分界面距离分别是 a, b(都是定值), 入射角与折射角分别为 α_1, α_2, 则光线从 A 到 B 的总光程为

$$l = n_1|AP| + n_2|BP| = n_1 a\sec\alpha_1 + n_2 b\sec\alpha_2 \tag{1.32}$$

由于 A, B 都是确定点, 因此若过 A, B 点向平面 S 的垂足 A', B', 则 $|A'B'| = c$ 为常数, 即有

$$a\tan\alpha_1 + b\tan\alpha_2 = c \tag{1.33}$$

为常数. Fermat 最短光程原理要求式 (1.32) 中 l 最小, 即有

$$0 = \delta l = n_1 a\delta\sec\alpha_1 + n_2 b\delta\sec\alpha_2 = n_1 a\sec\alpha_1\tan\alpha_1\delta\alpha_1 + n_2 b\sec\alpha_2\tan\alpha_2\delta\alpha_2 \tag{1.34}$$

再对式 (1.33) 求微分得

$$a\sec^2\alpha_1\delta\alpha_1 + b\sec^2\alpha_2\delta\alpha_2 = 0 \tag{1.35}$$

式 (1.34)、式 (1.35) 消去 $\delta\alpha_1, \delta\alpha_2$ 即得

$$n_1\sin\alpha_1 = n_2\sin\alpha_2$$

即为折射定律的第二个内容, 即入射角与折射角.

(2) 此论证存在两个错误: 一是由于光子不同于具有确定静质量的实物粒子, 不能把基于确定静质量的关于实物粒子的动量关系用到光子上. 二是更不能把实物粒子运动的速度 v 与光波在介质中的速度 (相速)

$$v_p = \frac{c}{n}$$

(n 为介质的折射率) 混淆, 此处认为 $v = v_p$ 是造成错误的根源.

解决上述矛盾的关键在于分清波的相速 v_p、波包的群速 v_g 以及实物粒子的运动速度 v 三个不同的概念, 并找出其中的关系. 最小作用量原理与 Fermat 最短光程原理本身也并不是“矛盾”的, 关键要用正确的光子动量关系.

波的相速 v_p 为

$$v_p = \frac{\omega}{k} \tag{1.36}$$

而波包的群速 v_g 为

$$v_g = \frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k} \tag{1.37}$$

因此, 若波包的色散关系 $\omega(k)$ 是线性的, 则 $v_p = v_g$; 若色散关系 $\omega(k)$ 是非线性的, 则一般 $v_p \neq v_g$. 而实物粒子速度为

$$v = \frac{\partial H}{\partial p} \tag{1.38}$$

对于光波而言, 色散关系为

$$\omega(k) = \begin{cases} ck, & \text{真空} \\ \dfrac{c}{n}k, & \text{介质} \end{cases}$$

式中 c 是真空中的光速, n 为介质折射率. 光在真空中传播, 色散关系为线性, 故真空中

$$v_p = v_g$$

但在介质中, 通常 n 与频率 ω 有关. 此时

$$\mathrm{d}\omega = \frac{c}{n}\mathrm{d}k - \frac{ck}{n^2}\mathrm{d}n = v_p\mathrm{d}k - \frac{ck}{n^2}\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}\omega}\mathrm{d}\omega$$

故一般

$$v_g = \frac{v_p}{1 + \dfrac{ck}{n^2}\dfrac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}\omega}} \neq v_p$$

光子不同于具有确定静质量的实物粒子, 不能把基于确定静质量的关于实物粒子的动量关系用到光子上. 对于真空中或者介质中的光子, 其动量、能量由 de Broglie 关系给出

$$p = \frac{h}{\lambda}, \quad E = h\nu \tag{1.39}$$

其中 λ 为光波波长, ν 为光波频率, 该关系也受 Cerenkov 辐射等实验现象的结果所支持.

对于自由运动的实物粒子, 题 1.7 对几个速度进行了讨论, 给出

$$v_p = \frac{c^2}{v}, \quad v_g = v < c < v_p \tag{1.40}$$

结论是物质波的波包的群速 v_g 与相速 v_p 不等 (正是由于波包的色散关系的非线性), 但与粒子速度 v 相等.

在题述论证中, 错误地认为粒子运动的速度 v 总是与相应的 de Broglie 波的相速 v_p 相等, 才导致了错误的折射定律.

下面我们给出对光子的最小作用量原理应用到本问题正确的处理. 光子具有“粒子”性, 则应遵守最小作用量原理

$$\delta \int p \mathrm{d}l = 0 \tag{1.41}$$

其中 p 由式 (1.39) 给出, 而介质中光波的波长 λ 介质折射率 n 之间的关系

$$\lambda = \frac{\lambda_0}{n} \tag{1.42}$$

式中 λ_0 为光在真空中的波长. 因此介质中光子动量为

$$p = \frac{nh}{\lambda_0} \tag{1.43}$$

它和介质折射率成正比而非反比. 将式 (1.42) 代入式 (1.43) 可得

$$0 = \delta \int \frac{h}{\lambda_0/n} \mathrm{d}l = \frac{h}{\lambda_0} \delta \int n \mathrm{d}l$$

也就是

$$\delta \int n \mathrm{d}l = 0$$

此即 Fermat 原理, 这导致折射定律. 因此最小作用量原理与 Fermat 最短光程原理是一致的.

说明 假设实物粒子物质波波包在传播过程中能量守恒, 则 $p = \dfrac{E}{c^2} v$. 最小作用量原理为

$$0 = \delta \int p \mathrm{d}l = \delta \int \frac{E}{c^2} v \mathrm{d}l = E\delta \int \frac{v}{c^2} \mathrm{d}l = E\delta \int \frac{1}{v_p} \mathrm{d}l$$

也就有 $\delta \int v \mathrm{d}l = 0$ 以及 $\delta \int \dfrac{1}{v_p} \mathrm{d}l = 0$, 我们也可把后者称为最短波程原理. 因此对实物粒子, 最小作用量原理与 Fermat 原理也是一致的.

第 2 章　波函数与 Schrödinger 方程

2.1　对于一维自由粒子, 设 $\psi(x,0)=\dfrac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_0x/\hbar}$, 求 $\psi(x,t)$.

解法一　质量为 m 的一维自由粒子的传播子 (Propagator) 为

$$G(x,x';t,t')=\sqrt{\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar t}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar}\frac{(x-x')^2}{t-t'}}$$

这样

$$\begin{aligned}\psi(x,t)&=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x'G(x,x';t,0)\psi(x,0)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x'\sqrt{\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar t}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar}\frac{(x-x')^2}{t}+\mathrm{i}p_0x'/\hbar}\\&=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\sqrt{\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar t}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x'\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar}\frac{x'^2}{t}+\mathrm{i}p_0(x'+x)/\hbar}\\&=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\sqrt{\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar t}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_0x/\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x'\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar}\frac{x'^2}{t}+\mathrm{i}p_0x'/\hbar}\end{aligned}$$

利用附录中的广义 Gauss 积分公式 (A.5) 得

$$\psi(x,t)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\sqrt{\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar t}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_0x/\hbar}\sqrt{\frac{2\pi\hbar t}{-\mathrm{i}m}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{p_0^2t}{2m\hbar}}$$

令 $E_0=p_0^2/2m$ 为该态的能量本征值, 则上式可化为

$$\psi(x,t)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_0x-E_0t)/\hbar}=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(p_0x-\frac{p_0^2t}{2m}\right)/\hbar}$$

解法二　自由粒子的初态 $\psi(x,0)$ 是动量 $\hat{p}$ 的本征态, 本征值为 p_0. $\psi(x,0)$ 也是能量算符 $H=\hat{p}^2/(2m)$ 本征态, 能量本征值为 $E_0=p_0^2/(2m)$. 从而粒子 t 时刻的波函数为定态解如下:

$$\psi(x,t)=\psi(x,0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar}=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_0x/\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_0t/\hbar}=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(p_0x-\frac{p_0^2t}{2m}\right)/\hbar}$$

解法三　一维自由粒子的 Hamilton 量为 $H=\hat{p}^2/(2m)$, 它不含时间, 从而体系的时间演化算符为 $U(t,0)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}$, 这样

$$\begin{aligned}\psi(x,t)&=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}\psi(x,0)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2t/\hbar}\psi(x,0)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\hbar}{2m}\nabla^2t}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_0x/\hbar}\\&=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\hbar t}{2m}\left(-\frac{p_0^2}{\hbar^2}\right)}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_0x/\hbar}=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(p_0x-\frac{p_0^2t}{2m}\right)/\hbar}\end{aligned}$$

我们看到, 解法二、解法三所得结果与解法一相同.

2.2　对于一维自由运动粒子, 设 $\psi(x,0)=\delta(x)$, 求 $|\psi(x,t)|^2$.

提示　利用 Fresnel 积分公式

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\cos\xi^2\mathrm{d}\xi=\int_{-\infty}^{+\infty}\sin\xi^2\mathrm{d}\xi=\sqrt{\pi/2},\quad \text{或}\quad \int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\xi^2}\mathrm{d}\xi=\sqrt{\pi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi/4}$$

解法一　将 $\psi(x,0)$ 作 Fourier 展开 $\psi(x,0)=\delta(x)=\dfrac{1}{2\pi\hbar}\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}$, 这样

$$\begin{aligned}\psi(x,t)&=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}\psi(x,0)=\mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{i}t}{\hbar}\frac{\hat{p}^2}{2m}}\psi(x,0)=\mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{i}t}{\hbar}\frac{\hat{p}^2}{2m}}\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\\&=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{p^2t}{2m\hbar}+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\end{aligned}\tag{2.1}$$

上面最后一个等号用到了平面波的本征方程, 而式中指数肩膀上的因子可作变换

$$\frac{p^2t}{2m\hbar}-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px=\frac{t}{2m\hbar}\left(p^2-\frac{2mx}{t}p\right)=\frac{-\mathrm{i}t}{2m\hbar}\left[\left(p-\frac{mx}{t}\right)^2-\frac{m^2x^2}{t^2}\right]=\frac{-\mathrm{i}t}{2m}\left(p-\frac{mx}{t}\right)^2+\mathrm{i}\frac{mx^2}{2t}$$

代入前式得

$$\psi(x,t)=\frac{\mathrm{i}}{2\pi\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{mx^2}{2t\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{p^2t}{2m\hbar}}=\frac{1}{2\pi\hbar}\sqrt{\frac{2m\hbar}{t}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{mx^2}{2t\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p^2}$$

利用 Fresnel 积分公式即得

$$\psi(x,t)=\sqrt{\frac{2m\hbar}{4\pi^2\hbar^2t}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{mx^2}{2t\hbar}}\sqrt{\frac{\pi}{\mathrm{i}}}=\sqrt{\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar t}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{mx^2}{2t\hbar}}$$

即有[①] $\psi(x,t)=\sqrt{\dfrac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar t}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{mx^2}{2t\hbar}}$, 因而 $|\psi(x,t)|^2=\dfrac{m}{2\pi\hbar t}$.

解法二　(关于求 $\psi(x,t)$) 在得到式 (2.1) 后, 利用后面附录中的广义 Gauss 积分公式 (A.5) 即得

$$\psi(x,t)=\sqrt{\frac{2m\hbar}{4\pi^2\hbar^2t}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{mx^2}{2t\hbar}}\sqrt{\frac{\pi}{\mathrm{i}}}=\sqrt{\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar t}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{mx^2}{2t\hbar}}$$

说明　由本题结果可知 δ- 函数的如下一种表达式

$$\delta(x)=\lim_{t\to0}\sqrt{\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar t}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}mx^2}{2t\hbar}}=\lim_{t\to\infty}\sqrt{\frac{2}{\pi}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha x^2}$$

2.3　设一维自由粒子的初态为

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

证明

$$\psi(x,t)=\left(\frac{\alpha^2}{2\pi}\right)^{1/4}\frac{1}{(\alpha^2+\mathrm{i}\hbar t/2m)^{1/2}}\exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{4(\alpha^2+\mathrm{i}\hbar t/2m)}\right]$$

$$|\psi(x,t)|^2=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\alpha(t)}\exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{2\alpha(t)^2}\right],\quad \alpha(t)=\left(\alpha^2+\frac{\hbar^2t^2}{4m^2\alpha^2}\right)^{1/2}$$

参阅, S. M. Blinder, Am. J. Phys, **36**(1968), 525.

---

①根据 Propagator 的物理意义, 此处求得的 $\psi(x,t)$ 即自由粒子的 Propagator.

证法一 在坐标表象中, 一维自由粒子的 Hamilton 量 $H=\dfrac{p^2}{2m}=-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}$, 它不含时, 从而体系的时间演化算符为 $U(t,0)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}$. 故根据初态写出 t 时刻的波函数为

$$\begin{aligned}\psi(x,t)&=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}\psi(x,0)\\&=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{\mathrm{i}\hbar t}{2m}\right)^n\frac{\partial^{2n}}{\partial x^{2n}}\exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{4\alpha^2}\right]\cdot\frac{1}{(2\pi\alpha^2)^{1/4}}\end{aligned}\tag{2.2}$$

我们知道 $f(x,t)=\dfrac{1}{\sqrt{\lambda t}}\exp\left[-\dfrac{(x-x_0)^2}{4\lambda t}\right]$ 是点源扩散函数, 满足扩散方程[①]

$$\frac{\partial}{\partial t}f=\lambda\frac{\partial^2}{\partial x^2}f$$

或者令 $\lambda t=\alpha^2$, 由上式得

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\frac{1}{\alpha}\exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{4\alpha^2}\right]=\frac{\partial}{\partial\alpha^2}\frac{1}{\alpha}\exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{4\alpha^2}\right]\tag{2.3}$$

此式也可直接验证, 把它代入式 (2.2) 得

$$\begin{aligned}\psi(x,t)&=\left(\frac{\alpha^2}{2\pi}\right)^{1/4}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{\mathrm{i}\hbar t}{2m}\right)^n\frac{\partial^{2n}}{\partial x^{2n}}\frac{1}{\alpha}\exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{4\alpha^2}\right]\\&=\left(\frac{\alpha^2}{2\pi}\right)^{1/4}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{\mathrm{i}\hbar t}{2m}\right)^n\frac{\partial^{n}}{\partial(\alpha^2)^{n}}\frac{1}{\alpha}\exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{4\alpha^2}\right]\\&=\left(\frac{\alpha^2}{2\pi}\right)^{1/4}\frac{1}{(\alpha^2+\mathrm{i}\hbar t/2m)^{1/2}}\exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{4\left(\alpha^2+\mathrm{i}\hbar t/2m\right)}\right]\end{aligned}\tag{2.4}$$

最后一个等号用到了平移算符的性质 $\mathrm{e}^{a\frac{\partial}{\partial z}}f(z)=\sum\limits_{n=0}^{\infty}\dfrac{a^n}{n!}\dfrac{\partial^n}{\partial z^n}f(z)=f(z+a)$. 式 (2.4) 给出

$$\begin{aligned}|\psi(x,t)|^2&=\frac{\alpha}{(2\pi)^{1/2}}\frac{1}{(\alpha^4+\hbar^2t^2/4m^2)^{1/2}}\exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{4}\left(\frac{1}{\alpha^2+\mathrm{i}\hbar t/2m}+c.c.\right)\right]\\&=\frac{\alpha}{(2\pi)^{1/2}}\frac{1}{(\alpha^4+\hbar^2t^2/4m^2)^{1/2}}\exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{4}\frac{2\alpha^2}{\alpha^4+\hbar^2t^2/4m^2}\right]\end{aligned}$$

或者为

$$|\psi(x,t)|^2=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\alpha(t)}\exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{4\alpha(t)^2}\right],\quad\alpha(t)=\left(\alpha^2+\frac{\hbar^2t^2}{4m^2\alpha^2}\right)^{1/2}\tag{2.5}$$

证法二 (关于 $\psi(x,t)$) 利用 Propagator 作计算

$$\begin{aligned}\psi(x,t)&=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x'G(x,x';t,0)\psi(x',0)=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x'\sqrt{\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar t}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar}\frac{(x-x')^2}{t}}\psi(x',0)\\&=\sqrt{\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar t\alpha\sqrt{2\pi}}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x'\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar}\frac{(x-x')^2}{t}-\frac{1}{4\alpha^2}(x'-x_0)^2}\end{aligned}$$

---

① 可以作一类比, 题 2.2 初态为 δ- 函数的时间演化态满足 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sqrt{\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar t}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{mx^2}{2t\hbar}}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\sqrt{\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar t}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{mx^2}{2t\hbar}}$$

$$= A\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x' \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar}\frac{(x-x')^2}{t} - \frac{1}{4\alpha^2}(x'-x_0)^2} \tag{2.6}$$

其中 $A = \sqrt{\dfrac{m}{2\pi \mathrm{i}\hbar t \alpha\sqrt{2\pi}}}$. 上式中指数肩膀上因子作变换

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar}\frac{(x-x')^2}{t} - \frac{(x'-x_0)^2}{4\alpha^2} &= \frac{\mathrm{i}m}{2\hbar t}(x^2 - 2xx' + x'^2) - \frac{(x'-x_0)^2}{4\alpha^2} \\ &= \left(-\frac{1}{4\alpha^2} + \frac{\mathrm{i}m}{2\hbar t}\right)x'^2 + \left(\frac{x_0}{2\alpha^2} - \frac{\mathrm{i}mx}{\hbar t}\right)x' + \mathrm{i}\frac{m}{2\hbar t}x^2 - \frac{x_0^2}{4\alpha^2}\end{aligned}$$

代入前面式 (2.6), 利用附录中的广义 Gauss 积分公式 (A.5) 得

$$\psi(x,t) = A\sqrt{\frac{\pi}{\dfrac{1}{4\alpha^2} - \dfrac{\mathrm{i}m}{2\hbar t}}}\exp\left\{\frac{\left(\dfrac{x_0}{2\alpha^2} - \dfrac{\mathrm{i}mx}{\hbar t}\right)^2}{4\left(\dfrac{1}{4\alpha^2} - \dfrac{\mathrm{i}m}{2\hbar t}\right)} + \mathrm{i}\frac{m}{2\hbar t}x^2 - \frac{x_0^2}{4\alpha^2}\right\} \tag{2.7}$$

式中

$$A\sqrt{\frac{\pi}{\dfrac{1}{4\alpha^2} - \dfrac{\mathrm{i}m}{2\hbar t}}} = \sqrt{\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar t\alpha\sqrt{2\pi}}\frac{\pi}{\dfrac{1}{4\alpha^2} - \dfrac{\mathrm{i}m}{2\hbar t}}} = \left(\frac{\alpha^2}{2\pi}\right)^{1/4}\frac{1}{(\alpha^2 + \mathrm{i}\hbar t/2m)^{1/2}} \tag{2.8}$$

简记 $a = \dfrac{1}{2\alpha^2}, b = \dfrac{m}{\mathrm{i}\hbar t}$, 式 (2.7) 指数肩膀上由下式给出:

$$\begin{aligned}\frac{(ax_0 + bx)^2}{2(a+b)} - \frac{b}{2}x^2 - \frac{a}{2}x_0^2 &= \frac{a^2x_0^2 + 2abx_0x + b^2x^2 - a(a+b)x_0^2 - b(a+b)x^2}{2(a+b)} \\ &= -\frac{ab}{2(a+b)}(x-x_0)^2 = -\frac{1}{2(1/a+1/b)}(x-x_0)^2 \\ &= -\frac{1}{4(\alpha^2 + \mathrm{i}\hbar t/2m)}(x-x_0)^2\end{aligned} \tag{2.9}$$

将式 (2.8)、式 (2.9) 结果代入式 (2.7) 即得

$$\psi(x,t) = \left(\frac{\alpha^2}{2\pi}\right)^{1/4}\frac{1}{(\alpha^2 + \mathrm{i}\hbar t/2m)^{1/2}}\exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{4(\alpha^2 + \mathrm{i}\hbar t/2m)}\right]$$

说明 上面从式 (2.7) 到式 (2.9) 的运算较为繁琐. 为了采用简单的做法, 可令

$$\psi(x,0) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px_0}\psi_0(x,0) = \mathrm{e}^{-x_0\frac{\partial}{\partial x}}\psi_0(x,0) = \psi_0(x-x_0,0)$$

其中 $\psi_0(x,0) = \dfrac{1}{(2\pi\alpha^2)^{1/4}}\exp\left[-\dfrac{x^2}{4\alpha^2}\right]$. 这样

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Ht}\psi(x,0) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Ht}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px_0/\hbar}\psi_0(x,0) \\ &= \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px_0}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Ht}\psi_0(x,0) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px_0}\psi_0(x,t) = \psi_0(x-x_0,t)\end{aligned}$$

$\psi(x,t) = \psi_0(x-x_0,t)$, 其中用到了 $[p,H] = 0$. 而利用 Propagator 计算 $\psi_0(x,t)$ 时, 上面式 (2.9) 中取 $x_0 = 0$, 这样计算可大为简化.

证法三 (关于 $\psi(x,t)$) 按前说明 $\psi_0(x,0)=\psi_0(x-x_0,0)$ 以及 $\psi(x,t)=\psi_0(x-x_0,t)$, 故可先考虑 ψ_0 的时间演化态. 将初态 $\psi_0(x,0)$ 按平面波 (H 本征态) 展开

$$\psi_0(x,0)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{d}p \tag{2.10}$$

其中

$$\begin{aligned}\varphi(p)&=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x,0)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{d}x=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\frac{1}{(2\pi\alpha^2)^{1/4}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{4\alpha^2}-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{d}x\\&=\left(\frac{2\alpha^2}{\pi\hbar^2}\right)^{1/4}\mathrm{e}^{-\frac{\alpha^2p^2}{\hbar^2}}\end{aligned} \tag{2.11}$$

上面最后一个等号用到了附录中的广义 Gauss 积分公式 (A.5). 自由粒子平面波 $e^{\mathrm{i}px/\hbar}$ 是 H 本征态, 能量本征值为 $E_p=p^2/2m$. 这样

$$\begin{aligned}\psi_0(x,t)&=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px-\frac{\mathrm{i}p^2t}{2m\hbar}}\mathrm{d}p\\&=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\left(\frac{2\alpha^2}{\pi\hbar^2}\right)^{1/4}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\left(\frac{\alpha^2}{\hbar^2}+\frac{\mathrm{i}t}{2m\hbar}\right)p^2+\frac{\mathrm{i}x}{\hbar}p}\mathrm{d}p\\&=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\left(\frac{2\alpha^2}{\pi\hbar^2}\right)^{1/4}\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\dfrac{\alpha^2}{\hbar^2}+\dfrac{\mathrm{i}t}{2m\hbar}}}\exp\left[-\frac{x^2}{4\left(\dfrac{\alpha^2}{\hbar^2}+\dfrac{\mathrm{i}t}{2m\hbar}\right)\hbar^2}\right]\end{aligned}$$

上面最后一个等号用到了附录中的广义 Gauss 积分公式 (A.5). 对上面式子化简即得到

$$\psi_0(x,t)=\left(\frac{\alpha^2}{2\pi}\right)^{1/4}\frac{1}{(\alpha^2+\mathrm{i}\hbar t/2m)^{1/2}}\exp\left[-\frac{x^2}{4\left(\alpha^2+\mathrm{i}\hbar t/2m\right)}\right] \tag{2.12}$$

再由 $\psi(x,t)=\psi_0(x-x_0,t)$ 即得所证结果.

2.4 设一维自由粒子的初态为

$$\psi(x,0)=(2\pi\alpha^2)^{-1/4}\exp\left[\mathrm{i}k_0(x-x_0)-\left(\frac{x-x_0}{2\alpha}\right)^2\right]\quad(\alpha>0)$$

求 $t>0$ 时 $\psi(x,t)$ 及波包运动特征.

参阅钱伯初、曾谨言, 《量子力学习题精选与剖析》(第二版, 1998, 科学出版社), 第一章.

解 本题初态与题 2.3 相比, 多了平面波因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0(x-x_0)}$, 要求 $\psi(x,t)$, 仍可以用题 2.3 的几种办法. 这里采用另一种办法, 它需要利用题 2.3 的结果. 题给初态记为

$$\psi(x,0)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}x_0\hat{p}/\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0x}\psi_0(x,0)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}x_0\hat{p}/\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0\hat{x}}\psi_0(x,0) \tag{2.13}$$

其中

$$\psi_0(x,0)=\frac{1}{(2\pi\alpha^2)^{1/4}}\exp\left[-\frac{x^2}{4\alpha^2}\right] \tag{2.14}$$

与题 2.3 的第二种、第三种证明过程中的定义相同. 利用时间演化算符, $t>0$ 时

$$\begin{aligned}\psi(x,t)&=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\psi(x,0)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}x_0\hat{p}/\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0\hat{x}}\psi_0(x,0)\\&=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}x_0\hat{p}/\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0\hat{x}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\psi_0(x,0)\end{aligned} \tag{2.15}$$

对于一维自由粒子, Hamilton 量为 $\hat{H}=\dfrac{\hat{p}^2}{2m}$, 这样有

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\hat{x}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}=\hat{x}+\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}\left[\hat{x},\hat{H}\right]+0=\hat{x}+\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}\frac{\mathrm{i}\hbar\hat{p}}{m}=\hat{x}-\frac{t\hat{p}}{m}$$

因而

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0\hat{x}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}=\exp\left[\mathrm{i}k_0\left(\hat{x}-\frac{t\hat{p}}{m}\right)\right]=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_0t\hat{p}/m}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0\hat{x}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hbar k_0^2t/2m}$$

这里用了 Baker-Hausdorff 公式. 上式代入式 (2.15) 得

$$\begin{aligned}\psi(x,t)=&\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(x_0+k_0t/m)\hat{p}/\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0\hat{x}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hbar k_0^2t/m}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\psi_0(x,0)\\=&\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hbar k_0^2t/m}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(x_0+k_0t/m)\hat{p}/\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0\hat{x}}\psi_0(x,t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hbar k_0^2t/m}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(x_0+k_0t/m)\hat{p}/\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0x}\psi_0(x,t)\end{aligned}\tag{2.16}$$

其中 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(x_0+k_0t/m)\hat{p}/\hbar}$ 为平移算符, 而 $\psi_0(x,t)$ 由题 2.3 的式 (2.12) 给出. 这样我们得到

$$\psi(x,t)=\left(\frac{\alpha^2}{2\pi}\right)^{1/4}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hbar k_0^2t/2m}}{\left(\alpha^2+\mathrm{i}\hbar t/2m\right)^{1/2}}\exp\left[\mathrm{i}k_0\left(x-x_0-k_0t/m\right)-\frac{\left(x-x_0-k_0t/m\right)^2}{4\left(\alpha^2+\mathrm{i}\hbar t/2m\right)}\right]\tag{2.17}$$

或者

$$\psi(x,t)=\left(\frac{\alpha^2}{2\pi}\right)^{1/4}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0(x-x_0-k_0t/2m)}}{\left(\alpha^2+\mathrm{i}\hbar t/2m\right)^{1/2}}\exp\left[-\frac{\left(x-x_0-k_0t/m\right)^2}{4\left(\alpha^2+\mathrm{i}\hbar t/2m\right)}\right]\tag{2.17'}$$

由此给出

$$|\psi(x,t)|^2=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\alpha\left(t\right)}\exp\left[-\frac{\left(x-x_0-k_0t/m\right)^2}{2\alpha\left(t\right)^2}\right],\quad\alpha\left(t\right)=\left(\alpha^2+\frac{\hbar^2t^2}{4m^2\alpha^2}\right)^{1/2}\tag{2.18}$$

从计算得到的 $\psi(x,t)$, $|\psi(x,t)|^2$ 知, 粒子态为一运动的波包. 波包中心 (概率最大点处) 的位置为

$$x_c(t)=x_0+k_0t/m=x_0+vt\tag{2.19}$$

其中 $v=\hbar k_0/m$. 可见波包中心从 x_0 开始, 以匀速 $v=\hbar k_0/m$ 运动. $v=\hbar k_0/m$ 正是波包的群速度.

为进一步讨论波包运动特征, 我们来计算一些特征量. 易知波函数已归一化, 由式 (2.18) 得到位置期望值

$$\begin{aligned}\overline{x}(t)=&\int_{-\infty}^{+\infty}x\left|\psi(x,t)\right|^2\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{+\infty}x\frac{1}{\sqrt{2\pi}\alpha\left(t\right)}\exp\left[-\frac{\left(x-x_c(t)\right)^2}{4\alpha\left(t\right)^2}\right]\mathrm{d}x\\=&\int_{-\infty}^{+\infty}\left(x'+x_c(t)\right)\frac{1}{\sqrt{2\pi}\alpha\left(t\right)}\exp\left[-\frac{x'^2}{4\alpha\left(t\right)^2}\right]\mathrm{d}x'=x_c(t)\end{aligned}\tag{2.20}$$

可见对于本题的状态 $\psi(x,t)$, 粒子位置期望值等于波包中心位置 $\overline{x}(t)=x_c(t)$. 而位置均方差为

$$\begin{aligned}(\Delta x)^2=&\int_{-\infty}^{+\infty}\left[x-\overline{x}(t)\right]^2\left|\psi(x,t)\right|^2\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\left[x-x_c(t)\right]^2}{\sqrt{2\pi}\alpha\left(t\right)}\exp\left[-\frac{\left(x-x_c(t)\right)^2}{4\alpha\left(t\right)^2}\right]\mathrm{d}x\\=&\int_{-\infty}^{+\infty}x'^2\frac{1}{\sqrt{2\pi}\alpha\left(t\right)}\exp\left[-\frac{x'^2}{4\alpha\left(t\right)^2}\right]\mathrm{d}x'=\alpha\left(t\right)^2\end{aligned}\tag{2.21}$$

位置涨落为

$$\Delta x(t)=\alpha\left(t\right)=\left(\alpha^2+\frac{\hbar^2t^2}{4m^2\alpha^2}\right)^{1/2}\tag{2.22}$$

对于自由粒子, 动量是守恒量, 动量期望值、涨落不随时间改变, 计算时可选初态进行, 可直接代题给初态 [式 (2.13), 该态已经归一化] 计算. 动量期望值为

$$\begin{aligned}\overline{p}=&\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x,0)^*\hat{p}\psi(x,0)\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}x_0\hat{p}/\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0\hat{x}}\psi_0(x,0)\right]^*\hat{p}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}x_0\hat{p}/\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0\hat{x}}\psi_0(x,0)\mathrm{d}x\\=&\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}x_0\hat{p}/\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}x_0\hat{p}/\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0\hat{x}}\psi_0(x,0)\right]^*\hat{p}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0\hat{x}}\psi_0(x,0)\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0\hat{x}}\psi_0(x,0)\right]^*\hat{p}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0\hat{x}}\psi_0(x,0)\mathrm{d}x\\=&\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x,0)\left(\hat{p}+\hbar k_0\right)\psi(x,0)\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x,0)\hat{p}\psi(x,0)\mathrm{d}x+\hbar k_0\\=&-\mathrm{i}\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_0(x)\frac{\partial}{\partial x}\psi_0(x)\mathrm{d}x+\hbar k_0=\hbar k_0\end{aligned}\tag{2.23}$$

上面利用了 $\psi_0(x)$ 的实数性, 以及 $\overline{p}$ 的实数条件. 动量均方差为

$$\begin{aligned}(\Delta p)^2=&\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}x_0\hat{p}/\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0\hat{x}}\psi_0(x,0)\right]^*\left(\hat{p}-\overline{p}\right)^2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}x_0\hat{p}/\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0\hat{x}}\psi_0(x,0)\mathrm{d}x\\=&\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0\hat{x}}\psi_0(x,0)\right]^*\left(\hat{p}-\overline{p}\right)^2\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0\hat{x}}\psi_0(x,0)\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_0^*(x,0)\hat{p}^2\psi_0(x,0)\mathrm{d}x\\=&-\hbar^2\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_0(x)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_0(x)\mathrm{d}x=\hbar^2\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\frac{\partial}{\partial x}\psi_0(x)\right]\left[\frac{\partial}{\partial x}\psi_0(x)\right]\mathrm{d}x\end{aligned}$$

最后一步用了分部积分. 再代入式 (2.14) 所给 $\psi_0(x)$ 进一步计算得动量均方差为

$$(\Delta p)^2=\frac{\hbar^2}{4\alpha^2}\tag{2.24}$$

而动量涨落为

$$\Delta p=\frac{\hbar}{2\alpha}\tag{2.25}$$

从式 (2.19)、式 (2.20) 和式 (2.22) 可知, 随着时间增加, 波包在以 v 速度运动的同时逐渐扩散. 这主要表现在两方面, 波包宽度 Δx 增大, 波包中心强度减弱. 试将 $\psi(x,t)$ 按平面波如下展开:

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx-\frac{\mathrm{i}k^2\hbar t}{2m}}\mathrm{d}k\tag{2.26}$$

由于 $\hat{p}$ 是守恒量, 展开系数 $\varphi(k)$ 与时间无关, 代入初态 $\psi(x,0)$ 计算得

$$\begin{aligned}\varphi(k)=&\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x,0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\mathrm{d}x=\frac{(2\pi\alpha^2)^{-1/4}}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[\mathrm{i}k_0\left(x-x_0\right)-\left(\frac{x-x_0}{2\alpha}\right)^2\right]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\mathrm{d}x\\=&\left(\frac{2\alpha^2}{\pi}\right)^{1/4}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx_0-\alpha^2(k-k_0)^2}\end{aligned}\tag{2.27}$$

因而

$$|\varphi(k)|^2=\left(\frac{2\alpha^2}{\pi}\right)^{1/2}\mathrm{e}^{-2\alpha^2(k-k_0)^2}\tag{2.28}$$

由于波包按确定的系数 $\varphi(k)$ 作平面波展开, 而各平面波分量的相速度不同, 从而导致波包在运动的同时逐渐扩散. 式 (2.28) 看出, $|\varphi(k)|^2$ 的峰值在 $k=k_0$ 处, 这对应波包平面波展开的最大分量; 其相速度 $v=\hbar k_0/m$ 正好与波包群速度 [式 (2.19)] 以及波包平均位置 [式 (2.20)] 运动速度相等. 从式 (2.18) 看出, 波包中心处

$$|\psi(x,t)|^2=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta x(t)}$$

可见波包中心强度减弱与波包宽度成反比. 根据式 (2.25), 式 (2.22) 所给的波包宽度又可表示为

$$\Delta x(t)=\left[\left(\frac{\hbar}{\Delta p}\right)^2+\left(\frac{\Delta p}{m}\right)^2 t^2\right]^{1/2}$$

上式表明动量涨落 Δp 是波包扩散的原因, Δp 越大, 波包扩散越快.

2.5 一维自由粒子的初态为 $\psi(x,0)$, 证明在足够长时间后

$$\psi(x,t)=\sqrt{\frac{m}{\hbar t}}\exp\left[-\mathrm{i}\frac{\pi}{4}\right]\exp\left[\frac{\mathrm{i}mx^2}{2\hbar t}\right]\varphi\left(\frac{mx}{\hbar t}\right)$$

其中

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

提示 利用 $\lim\limits_{\alpha\to\infty}\sqrt{\dfrac{\alpha}{\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi/4}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha x^2}=\delta(x)$.

证明 自由粒子的 Hamilton 量为 $H=\dfrac{1}{2m}\hat{p}^2$, 其时间演化算符为 $U(t,0)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}$, 这样

$$\begin{aligned}\psi(x,t)&=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}\psi(x,0)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\hbar t}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}}\psi(x,0)\\&=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\hbar t}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}k\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\varphi(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}k\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\hbar t}{2m}k^2+\mathrm{i}kx}\varphi(k)\end{aligned}$$

也就是

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}k\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\hbar k^2 t}{2m}+\mathrm{i}kx}\varphi(k)\tag{2.29}$$

其中

$$\frac{\hbar t}{2m}k^2-kx=\frac{\hbar t}{2m}\left[k^2-\frac{2mx}{\hbar t}k\right]=\frac{\hbar t}{2m}\left[\left(k-\frac{mx}{\hbar t}\right)^2-\frac{m^2x^2}{\hbar^2t^2}\right]=\frac{\hbar t}{2m}\left[k-\frac{mx}{\hbar t}\right]^2-\frac{m}{2\hbar t}x^2$$

代入式 (2.29), 得

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

上式被积函数中的指数函数具有 δ- 函数的性质. 利用 $\lim\limits_{\alpha\to\infty}\sqrt{\dfrac{\alpha}{\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi/4}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha x^2}=\delta(x)$, 则有

$$\lim_{t\to\infty}\psi(x,t)=\sqrt{\frac{m}{\hbar t}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{mx^2}{2\hbar t}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}k\delta(k)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}\varphi\left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar}}k+\frac{mx}{\hbar t}\right)=\sqrt{\frac{m}{\hbar t}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}mx^2}{2\hbar t}}\varphi\left(\frac{mx}{\hbar t}\right)$$

也就是在足够长时间后的波函数为

$$\psi(x,t)\approx\sqrt{\frac{m}{\hbar t}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}mx^2}{2\hbar t}}\varphi\left(\frac{mx}{\hbar t}\right)\tag{2.30}$$

即为所证.

讨论 式 (2.30) 取绝对值平方, 即得

$$|\psi(x,t)|^2 \approx \frac{m}{\hbar t}\left|\varphi\left(\frac{mx}{\hbar t}\right)\right|^2 \tag{2.31}$$

其物理意义为：在足够长时间后，各不同 k 值的分波已经互相分离，波群在 x 处的主要成分为 $k=mx/\hbar t$，即 $x=\hbar kt/m$，强度正比于 $\left|\varphi\left(\frac{mx}{\hbar t}\right)\right|^2$. 因子 $\frac{m}{\hbar t}$ 描述整个波包的扩散，波包强度和 t 成反比（参看题 2.4 的讨论）.

设整个波包中最强的动量成分为 $\hbar k_0$，即 $k=k_0$ 时最大. 由式 (2.31) 可见，当 t 足够大以后，$|\psi(x,t)|^2$ 的最大值出现在 $mx/\hbar t=k_0$，即 $x=\hbar kt/m$ 处，这表明波包平面波展开的最大分量为 k_0，这和题 2.4 的结论是一致的.

如将本题式 (2.31) 用到题 2.4 中的 Gauss 型波包，得在足够长时间后

$$|\psi(x,t)|^2 \approx \sqrt{\frac{1}{2\pi}}\frac{m\alpha}{\hbar t}\exp\left[-2\alpha^2\left(\frac{mx}{\hbar t}-k_0\right)^2\right]$$

在式 (2.18) 的严格解中，取 $t\to\infty$，这时 $x\to\infty$，以及 $\alpha^2+\frac{\hbar^2t^2}{4m^2\alpha^2}\approx\frac{\hbar^2t^2}{4m^2\alpha^2}$，可见结果与此一致.

说明 本题还可以利用自由粒子的 Propagator 求解，请读者自行考虑.

2.6 设质量为 m 的粒子在恒定势场 $V(\boldsymbol{r})$ 中运动，已知其波函数为 $\psi(\boldsymbol{r},t)$.

(1) 试证明其能量平均值 $\overline{H}=\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}w$，其中 w 为能量密度如下给出：

$$w=\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^*(\boldsymbol{r},t)\cdot\nabla\psi(\boldsymbol{r},t)+\psi^*(\boldsymbol{r},t)V(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{2.32}$$

提示 利用归一化条件 $\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\psi^*(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t)=1$，对 ψ 在 $r\to\infty$ 处的行为的限制，即 $\psi\to r^{-3/2-\varepsilon}(\varepsilon>0)$.

(2) 试证明能量守恒公式

$$\frac{\partial w}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{s}=0 \tag{2.33}$$

其中 $\boldsymbol{s}$ 称为能流密度，如下给出：

$$\boldsymbol{s}=-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial\psi^*(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}\nabla\psi(\boldsymbol{r},t)+\frac{\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}\nabla\psi^*(\boldsymbol{r},t)\right] \tag{2.34}$$

证明 (1) 题给粒子 Hamilton 量为 $H=-1/(2m)\hbar\nabla^2+V(\boldsymbol{r})$，这样其能量平均值为

$$\begin{aligned}\overline{H}&=\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\psi^*(\boldsymbol{r},t)H\psi(\boldsymbol{r},t)\\&=\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\psi^*(\boldsymbol{r},t)\nabla^2\psi(\boldsymbol{r},t)+\psi^*(\boldsymbol{r},t)V(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r},t)\right]\end{aligned} \tag{2.35}$$

利用 Gauss 定理，式 (2.35) 中的第一项为

$$\begin{aligned}\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\psi^*(\boldsymbol{r},t)\nabla^2\psi(\boldsymbol{r},t)&=\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\left[\nabla\cdot(\psi^*(\boldsymbol{r},t)\nabla\psi(\boldsymbol{r},t))-\nabla\psi^*(\boldsymbol{r},t)\cdot\nabla\psi(\boldsymbol{r},t)\right]\\&=\oint_S \mathrm{d}\boldsymbol{s}\cdot[\psi^*(\boldsymbol{r},t)\nabla\psi(\boldsymbol{r},t)]-\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\nabla\psi^*(\boldsymbol{r},t)\cdot\nabla\psi(\boldsymbol{r},t)\end{aligned}$$

波函数归一化条件 $\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\psi^*(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t)=1$，要求当 $r\to\infty$ 时 $\psi\to r^{-3/2-\varepsilon}(\varepsilon>0)$，从而 $\nabla\psi\to r^{-5/2-\varepsilon}$. 这样 $r\to\infty$ 的边界面上面积分

$$\oint_S \mathrm{d}\boldsymbol{s}\cdot[\psi^*(\boldsymbol{r},t)\nabla\psi(\boldsymbol{r},t)]\sim r^2r^{-3/2-\varepsilon}r^{-5/2-\varepsilon}=r^{-2-2\varepsilon}\to 0$$

因此在 $r \to \infty$ 的全空间边界面 S 上, 面积分的结果为零.

$$\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\psi^*(\boldsymbol{r},t)\nabla^2\psi(\boldsymbol{r},t) = -\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\nabla\psi^*(\boldsymbol{r},t)\cdot\nabla\psi(\boldsymbol{r},t)$$

上式代入式 (2.35) 得 $\overline{H} = \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}w$, 而其中 w 如式 (2.32) 所给, 即得所证.

(2) 由上面能量密度 w 以及能流密度 $\boldsymbol{s}$ 的表达式 (2.32)、式 (2.34) 得

$$\begin{aligned}
\nabla\cdot\boldsymbol{s} =& -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla\dot{\psi}^*\cdot\nabla\psi + \nabla\psi^*\cdot\nabla\dot{\psi} + \dot{\psi}^*\nabla^2\psi + \dot{\psi}\nabla^2\psi^*\right)\\
=& -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla\dot{\psi}^*\cdot\nabla\psi + \nabla\psi^*\cdot\nabla\dot{\psi}\right) + \dot{\psi}^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi\right) + \dot{\psi}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^*\right)\\
=& -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial t}\left(\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi\right) + \dot{\psi}^*\left(H-V\right)\psi + \dot{\psi}\left(H-V\right)\psi^*\\
=& -\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi + \psi^*V\psi\right) + \dot{\psi}^*\mathrm{i}\hbar\dot{\psi} - \dot{\psi}\mathrm{i}\hbar\dot{\psi}^*\\
=& -\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi + \psi^*V\psi\right) = -\frac{\partial w}{\partial t}
\end{aligned}$$

即得所证的式 (2.33). 而能流密度 $\boldsymbol{s}$ 也可以表示为

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{s} =& -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\nabla\psi(\boldsymbol{r},t)\frac{\mathrm{i}}{\hbar}H\psi^*(\boldsymbol{r},t) - \nabla\psi^*(\boldsymbol{r},t)\frac{\mathrm{i}}{\hbar}H\psi(\boldsymbol{r},t)\right]\\
=& \frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}\left[\nabla\psi(\boldsymbol{r},t)H\psi^*(\boldsymbol{r},t) - \nabla\psi^*(\boldsymbol{r},t)H\psi(\boldsymbol{r},t)\right]
\end{aligned}$$

讨论 (关于动量关系) 由动量平均值定义

$$\overline{\boldsymbol{p}} = \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\psi^*(\boldsymbol{r},t)(-\mathrm{i}\hbar\nabla)\psi(\boldsymbol{r},t) = \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\pi(\boldsymbol{r},t)$$

定义动量密度为

$$\pi(\boldsymbol{r},t) = \psi^*(\boldsymbol{r},t)(-\mathrm{i}\hbar\nabla)\psi(\boldsymbol{r},t)$$

此式对时间的微商为

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\pi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} =& \dot{\psi}^*(\boldsymbol{r},t)(-\mathrm{i}\hbar\nabla)\psi(\boldsymbol{r},t) + \psi^*(\boldsymbol{r},t)(-\mathrm{i}\hbar\nabla)\dot{\psi}(\boldsymbol{r},t)\\
=& \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r},t)\right]\psi^*(\boldsymbol{r},t)\cdot\nabla\psi(\boldsymbol{r},t) - \psi^*(\boldsymbol{r},t)\nabla\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r},t)\right]\psi(\boldsymbol{r},t)
\end{aligned}$$

注意上式中 ∇ 的微分性和矢量性得

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\pi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} =& -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla\cdot\nabla\psi^*\right)\nabla\psi + \frac{\hbar^2}{2m}\psi^*\nabla\nabla\cdot\nabla\psi + V(\boldsymbol{r},t)\psi^*\nabla\psi - V(\boldsymbol{r},t)\psi^*\nabla\psi - \psi^*(\nabla V(\boldsymbol{r},t))\psi\\
=& -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\cdot\left[\left(\nabla\psi^*\right)\nabla\psi\right] + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^*\cdot\nabla\nabla\psi + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla\cdot\left[\psi^*\nabla\nabla\psi\right]\\
& -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^*\cdot\nabla\nabla\psi - \psi^*(\nabla V)\psi\\
=& -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\cdot\left[\left(\nabla\psi^*\right)\left(\nabla\psi\right)\right] + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla\cdot\left[\psi^*\nabla\nabla\psi\right] - \psi^*(\nabla V)\psi
\end{aligned}$$

上式即为

$$\frac{\partial\pi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\cdot\left[\left(\nabla\psi^*\right)\left(\nabla\psi\right)\right] + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla\cdot\left[\psi^*\nabla\nabla\psi\right] - \psi^*(\nabla V)\psi$$

定义 $\overrightarrow{T}=(\nabla\psi^*)(\nabla\psi)-\psi^*\nabla\nabla\psi$, 则有

$$\frac{\partial\pi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\cdot\overrightarrow{T}=-\psi^*\psi(\nabla V)$$

上式为关于动量的微分关系, 而 $\overrightarrow{T}$ 可称为动量流密度张量. 如果外力不存在 ($\nabla V=0$), 则体系的动量是守恒的.

2.7 考虑含复势的 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+\left[V_1(\boldsymbol{r})+\mathrm{i}V_2(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r},t)$$

其中 $V_1(\boldsymbol{r})$ 与 $V_2(\boldsymbol{r})$ 为实函数.

(a) 证明粒子的概率 (粒子数) 不守恒;

(b) 证明粒子在空间体积 Ω 中概率随时间变化为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\iiint_\Omega\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\psi^*\psi=-\frac{\hbar}{2\mathrm{i}m}\oint_{\partial\Omega}(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{s}+\frac{2}{\hbar}\iiint_\Omega\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}V_2(\boldsymbol{r})\psi^*\psi$$

证明 根据 Schrödinger 方程以及其复数共轭式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+(V_1+\mathrm{i}V_2)\psi,\quad -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^*+(V_1-\mathrm{i}V_2)\psi^*$$

直接验算得

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi)=-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi^*\nabla^2\psi-\psi\nabla^2\psi^*)+2\mathrm{i}V_2\psi^*\psi=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)+2\mathrm{i}V_2\psi^*\psi$$

上式可写为

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{j}=\frac{2}{\hbar}V_2\rho\tag{2.36}$$

其中

$$\rho=\psi^*\psi,\quad \boldsymbol{j}=\frac{\hbar^2}{2m\mathrm{i}}(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)\tag{2.37}$$

分别为概率密度以及概率流密度.

式 (2.36) 右边不等于零, 意味着粒子的概率 (粒子数) 不守恒. 将此式对空间 Ω 积分, 则得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_\Omega\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\rho+\oint_{\partial\Omega}\boldsymbol{j}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{s}=\frac{2}{\hbar}\int_\Omega\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}V_2\rho.\tag{2.38}$$

即为所证的等式. 此式可见, 粒子的概率 (粒子数) 不守恒.

2.8 按照粒子密度分布 ρ 和粒子流密度分布 $\boldsymbol{j}$ 的表示式

$$\rho(\boldsymbol{r},t)=\psi^*(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t),\quad \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)=\frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}\left[\psi^*(\boldsymbol{r},t)\nabla\psi(\boldsymbol{r},t)-\psi(\boldsymbol{r},t)\nabla\psi^*(\boldsymbol{r},t)\right]$$

如下定义粒子的速度分布

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

证明 $\nabla\times\boldsymbol{v}=0$. 设想 $\boldsymbol{v}$ 描述一个速度场, 则 $\boldsymbol{v}$ 是一个无旋场.

证明 根据 Schrödinger 方程, 可导出概率守恒方程, 并定义概率流密度, 即如题所给. 题中定义粒子的速度分布 $\boldsymbol{v}=\dfrac{\boldsymbol{j}}{\rho}$, 则有

$$\begin{aligned}\boldsymbol{v}=\frac{\boldsymbol{j}}{\rho}&=-\frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}\left[\frac{\nabla\psi(\boldsymbol{r},t)}{\psi(\boldsymbol{r},t)}-\frac{\nabla\psi^*(\boldsymbol{r},t)}{\psi^*(\boldsymbol{r},t)}\right]=\frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}\left[\nabla\ln\psi(\boldsymbol{r},t)-\nabla\ln\psi^*(\boldsymbol{r},t)\right]\\&=\frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}\left[\nabla\left(\ln\psi(\boldsymbol{r},t)-\ln\psi^*(\boldsymbol{r},t)\right)\right]=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\nabla\ln\frac{\psi^*(\boldsymbol{r},t)}{\psi(\boldsymbol{r},t)}.\end{aligned}$$

可见 $\boldsymbol{v}$ 正比于一个标量场 $\psi^*(\boldsymbol{r},t)/\psi(\boldsymbol{r},t)$ 的对数的梯度. 梯度场无旋, 故 $\boldsymbol{v}$ 是一个无旋场.

2.9 在非定域势 $V(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ 中粒子的 Schrödinger 方程表示为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{r},t)+\int V(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}',t)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{2.39}$$

求概率守恒对非定域势的要求. 此时, 只依赖于波函数 ψ 在空间一点的值的概率流是否存在?

解 对题给 Schrödinger 方程取复数共轭得

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(\boldsymbol{r},t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^*(\boldsymbol{r},t)+\int V^*(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\psi^*(\boldsymbol{r}',t)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{2.40}$$

$\psi^*(\boldsymbol{r},t)\times$ 式 (2.39)$-$ 式 (2.40)$\times\psi(\boldsymbol{r},t)$ 得

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t)=&-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\cdot\left[\psi^*(\boldsymbol{r},t)\nabla\psi(\boldsymbol{r},t)-\psi(\boldsymbol{r},t)\nabla\psi^*(\boldsymbol{r},t)\right]\\&+\int\left[\psi^*(\boldsymbol{r},t)V(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}',t)-V^*(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\psi^*(\boldsymbol{r}',t)\psi(\boldsymbol{r},t)\right]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\end{aligned} \tag{2.41}$$

如果没有非定域势 $V(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ 有关的积分项, 则上式就是标准的概率守恒方程: 概率密度为 $\rho(\boldsymbol{r})=\psi^*(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t)$, 概率密度的变化等于概率流的散度; 若对全空间积分, 则根据波函数可积条件散度项的积分等于零, 因此全空间的概率守恒.

现在非定域势 $V(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ 存在的情况下, 考察概率守恒对 $V(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ 的要求. 式 (2.41) 两边对全空间积分, 根据波函数可积条件散度项的积分等于零, 这样得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int\psi^*(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t)\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int\left[\psi^*(\boldsymbol{r},t)V(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}',t)-V^*(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\psi^*(\boldsymbol{r}',t)\psi(\boldsymbol{r},t)\right]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'$$

概率守恒要求上式左边为零, 右边可进行积分变量交换 $(\boldsymbol{r}\leftrightarrow\boldsymbol{r}')$, 这样即可得到

$$\int\psi^*(\boldsymbol{r},t)\left[V(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')-V^*(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r}',t)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'=0$$

上式被积函数中, ψ 作为体系的状态具有任意性, 因此上式给出 $V(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')=V^*(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r})$. 这就是概率守恒对非定域势的要求.

在这种情况下, 关于概率密度的微分方程式 (2.41) 仍存在对全空间的积分项, 因此只依赖于波函数 ψ 在空间一点的值的概率流一般不存在.

2.10 设 N 粒子系的 Hamilton 量为

$$H=-\sum_{i=1}^{N}\frac{\hbar^2\nabla_i^2}{2m}+\sum_{i<j}^{N}V_{ij}(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r}_j)$$

$\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N,t)$ 是它的任一态函数. 定义

$$\rho(\boldsymbol{r},t)=\sum_i\rho_i(\boldsymbol{r},t),\quad \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)=\sum_i\boldsymbol{j}_i(\boldsymbol{r},t)$$

其中

$$\rho_1(\boldsymbol{r}_1,t)=\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2\cdots\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_N\psi^*\psi$$

$$\rho_2(\boldsymbol{r}_2,t)=\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_3\cdots\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_N\psi^*\psi$$

$$\cdots\cdots$$

$$\boldsymbol{j}_1(\boldsymbol{r}_1,t)=\frac{\hbar}{2\mathrm{i}m}\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2\cdots\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_N\left(\psi^*\nabla_1\psi-\psi\nabla_1\psi^*\right)$$

$$\boldsymbol{j}_2(\boldsymbol{r}_2,t)=\frac{\hbar}{2\mathrm{i}m}\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_3\cdots\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_N\left(\psi^*\nabla_2\psi-\psi\nabla_2\psi^*\right)$$

$$\cdots\cdots$$

求证

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0$$

证明 我们先写下该粒子系的 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N,t)=\left[-\sum_{i=1}^{N}\frac{\hbar^2\nabla_i^2}{2m}+\sum_{i<j}^{N}V_{ij}(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r}_j)\right]\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N,t)\tag{2.42}$$

其复数共轭为

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N,t)=\left[-\sum_{i=1}^{N}\frac{\hbar^2\nabla_i^2}{2m}+\sum_{i<j}^{N}V_{ij}(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r}_j)\right]\psi^*(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N,t)\tag{2.43}$$

$\psi^*(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N,t)\times$ 式 (2.42)$-$ 式 (2.43)$\times\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N,t)$ 得

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\psi&=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left[\psi^*\sum_{i=1}^{N}\nabla_i^2\psi-\psi\sum_{i=1}^{N}\nabla_i^2\psi^*\right]=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\sum_{i=1}^{N}\left[\psi^*\nabla_i\cdot\nabla_i\psi-\psi\nabla_i\cdot\nabla_i\psi^*\right]\\&=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\sum_{i=1}^{N}\nabla_i\cdot\left[\psi^*\nabla_i\psi-\psi\nabla_i\psi^*\right]\end{aligned}\tag{2.44}$$

式中 ψ^* 与 ψ 的变量均是 $\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N,t$, 上面最后一个等号用到了 ∇ 算子的矢量性和微分性质.

现在对式 (2.44) 两边作多重积分 $\int\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2\cdots\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_N$, 即有

$$\frac{\partial}{\partial t}\int\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2\cdots\mathrm{d}^3\psi^*\psi=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\int\mathrm{d}^3r_2\cdots\mathrm{d}^3r_N\nabla_1\cdot\left[\psi^*\nabla_1\psi-\psi\nabla_1\psi^*\right]+0+0+\cdots+0$$

上式右边的一系列“0”是利用波函数可积条件对散度项的积分导致的. 按题给定义, 上式就是

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_1(\boldsymbol{r}_1,t)+\nabla_1\cdot\boldsymbol{j}_1(\boldsymbol{r}_1,t)=0$$

把变量 $\boldsymbol{r}_1$ 换为 $\boldsymbol{r}$ 即

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_1(\boldsymbol{r},t)+\nabla\cdot\boldsymbol{j}_1(\boldsymbol{r},t)=0$$

同理有 $\dfrac{\partial}{\partial t}\rho_2(\boldsymbol{r},t)+\nabla\cdot\boldsymbol{j}_2(\boldsymbol{r},t)=0,\cdots,\dfrac{\partial}{\partial t}\rho_N(\boldsymbol{r},t)+\nabla\cdot\boldsymbol{j}_N(\boldsymbol{r},t)=0$. 故对这 N 个式子求和得

$$\frac{\partial}{\partial t}\sum_i\rho_i(\boldsymbol{r},t)+\nabla\cdot\sum_i\boldsymbol{j}_i(\boldsymbol{r},t)=0$$

也即

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\boldsymbol{r},t)+\nabla\cdot\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)=0$$

2.11 写出动量表象中的不含时间的 Schrödinger 方程.

解 我们将从如下坐标表象定态 Schrödinger 方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x)+V(x)\psi(x)=E\psi(x) \tag{2.45}$$

出发推导动量表象定态 Schrödinger 方程. 将波函数 $\psi(x)$ 按动量本征态展开, 即作 Fourier 展开

$$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p)\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}p \tag{2.46}$$

其反变换为

$$\varphi(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}x \tag{2.47}$$

现对式 (2.45) 两边作 Fourier 变换 $\left(\text{同乘 }\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar}\text{ 并对 }x\text{ 作积分}\right)$, 左边第一项给出

$$\begin{aligned}-\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\frac{\hbar^2}{2\mu}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x)\cdot\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}x&=-\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\frac{\hbar^2}{2\mu}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}x\\&=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\frac{p^2}{2\mu}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}x=\frac{p^2}{2\mu}\varphi(p)\end{aligned} \tag{2.48}$$

上面第一个等号作了 2 次分部积分. 而左边第二项给出

$$\begin{aligned}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}V(x)\psi(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}x&=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}V(x)\varphi(p')\mathrm{e}^{\mathrm{i}p'x/\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}p'\mathrm{d}x\\&=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\int_{-\infty}^{+\infty}V(x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}p'x/\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}x\right)\varphi(p')\mathrm{d}p'\\&=\int_{-\infty}^{\infty}V_{pp'}\varphi(p')\mathrm{d}p'\end{aligned} \tag{2.49}$$

其中

$$V_{pp'}=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}V(x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p'-p)x/\hbar}\mathrm{d}x \tag{2.50}$$

对式 (2.45) 两边作 Fourier 变换时右边给出 $E\varphi(p)$, 这样再综合式 (2.48)、式 (2.49), 我们写下如下动量表象定态 Schrödinger 方程

$$\frac{p^2}{2\mu}\varphi(p)+\int_{-\infty}^{\infty}V_{pp'}\varphi(p')\mathrm{d}p'=E\varphi(p) \tag{2.51}$$

另外, 由式 (2.50)

$$\begin{aligned}V_{pp'}&=\int_{-\infty}^{+\infty}V(x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p'-p)x/\hbar}\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{+\infty}V\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p'-p)x/\hbar}\mathrm{d}x\\&=V\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p'-p)x/\hbar}\mathrm{d}x=V\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\delta(p-p')\end{aligned}$$

代入式 (2.51), 得动量表象中 Schrödinger 方程的另一种形式

$$\frac{p^2}{2\mu}\varphi(p)+V\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\varphi(p)=E\varphi(p) \tag{2.51'}$$

同样的, 我们可以从三维坐标表象定态 Schrödinger 方程通过 Fourier 变换得到动量表象定态 Schrödinger 方程, 如下所示:

$$\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}\varphi(\boldsymbol{p})+\iiint \mathrm{d}\boldsymbol{p}' V_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'}\varphi(\boldsymbol{p}')=E\varphi(\boldsymbol{p}) \tag{2.52}$$

其中

$$V_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'}=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\iiint \mathrm{d}\boldsymbol{x} V(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\cdot\boldsymbol{x}} \tag{2.53}$$

动量表象中 Schrödinger 方程的另一种形式

$$\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}\varphi(\boldsymbol{p})+V\left(\mathrm{i}\hbar\nabla_p\right)\varphi(\boldsymbol{p})=E\varphi(\boldsymbol{p}) \tag{2.52'}$$

2.12 设粒子在对数中心势 $V(r)=V_0\ln(r/r_0)$ 中运动 ($V_0, r_0\neq 0$, 常数), 证明粒子的能谱与其质量无关.

提示 做尺度变换, 令 $\boldsymbol{r}'=\sqrt{m}\boldsymbol{r}$, m 是粒子质量.

证明 记粒子的质量为 m, 在对数中心势中运动的定态 Schrödinger 方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+V_0\ln\frac{r}{r_0}\right]\psi(\boldsymbol{x})=E\psi(\boldsymbol{x})$$

做尺度变换, 令 $\boldsymbol{r}'=\sqrt{m/m_0}\boldsymbol{r}$, m 是粒子质量, m_0 是某一特定的质量单位如质子质量 m_p. 则上式变为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0}\left(\frac{\partial^2}{\partial x'^2}+\frac{\partial^2}{\partial y'^2}+\frac{\partial^2}{\partial z'^2}\right)+V_0\ln\frac{r'}{r_0}\right]\psi(\boldsymbol{x})=\left(E-\frac{1}{2}V_0\ln\frac{m}{m_0}\right)\psi(\boldsymbol{x})$$

上面定态 Schrödinger 方程除了能量本征值中的 $\left(-\frac{1}{2}V_0\ln\frac{m}{m_0}\right)$ 外, 与粒子质量 m 无关. 因此如果我们忽略能谱的整体移动 $\left(-\frac{1}{2}V_0\ln\frac{m}{m_0}\right)$, 则粒子的能谱与其质量无关.

第 3 章　一维定态问题

3.1　粒子在一维势场 $V(x)$ 中运动, 证明属于不同能级的束缚态波函数彼此正交.

证明　设 ψ_1, ψ_2 是体系的任意两个束缚定态, 相应的能量分别为 $E_1, E_2 (E_1 \neq E_2)$, 也就有

$$H\psi_1 = E_1\psi_1, \quad H\psi_2 = E_2\psi_2$$

其中 H 为体系的 Hamilton 量. 束缚态满足平方可积, 从而根据 Schwarz 不等式, ψ_1, ψ_2 的内积 (ψ_1, ψ_2) 是一个有限的量.

现考虑 $(\psi_1, H\psi_2)$. Hamilton 量 H 是 Hermite 算符, 因此 $(\psi_1, H\psi_2) = (H\psi_1, \psi_2)$, 这给出

$$E_2(\psi_1, \psi_2) = E_1(\psi_1, \psi_2), \quad (E_2 - E_1)(\psi_1, \psi_2) = 0$$

因 $E_1 \neq E_2$, 必有 $(\psi_1, \psi_2) = 0$, 即 ψ_1, ψ_2 正交.

事实上, 对任意 Hermite 算符, 相应于其不同本征值的可归一化本征态都正交.

3.2　质量为 m 的粒子在如下一维无限深方势阱 (见图 3.1) 中

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

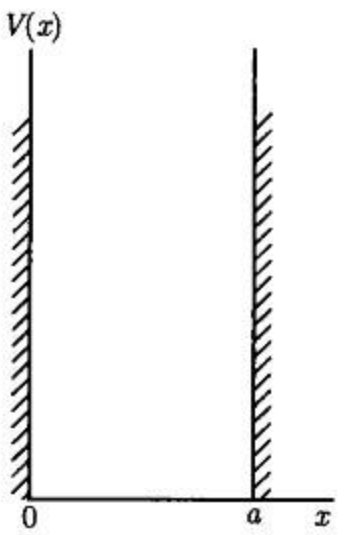

图 3.1　一维无限深方势阱

处于第 n 个定态. 证明

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

并证明当 $n \to \infty$, 以上结果与经典结论一致.

证明　我们先写出粒子归一化定态波函数 (时间演化因子不妨略去). 当 $0 < x < a$ 时

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\frac{n\pi x}{a} \tag{3.1}$$

而当 $x < 0$ 或者 $x > a$ 时, $\psi(x) = 0$. 这样

$$\begin{aligned} \overline{x} &= \int_{-\infty}^{\infty} x\,|\psi(x)|^2\,\mathrm{d}x = \frac{2}{a}\int_0^a x \sin^2\frac{n\pi}{a}x\mathrm{d}x = \frac{2}{a}\left(\frac{a}{\pi}\right)^2\int_0^\pi x\sin^2 nx\mathrm{d}x \\ &= \frac{a}{\pi^2}\int_0^\pi x(1-\cos 2nx)\mathrm{d}x = \frac{a}{\pi^2}\left[\frac{x^2}{2} + \frac{x}{2n}\sin 2nx + \frac{1}{(2n)^2}\cos 2nx\right]\Big|_0^\pi = \frac{a}{2} \end{aligned} \tag{3.2}$$

上式用到了积分公式 (A.10). 而

$$\begin{aligned} \overline{x^2} &= \int_{-\infty}^{\infty} x^2\,|\psi(x)|^2\,\mathrm{d}x = \frac{2}{a}\int_0^a x^2 \sin^2\frac{n\pi}{a}x\mathrm{d}x = \frac{2}{a}\left(\frac{a}{\pi}\right)^3\int_0^\pi x^2\sin^2 nx\mathrm{d}x \\ &= \frac{a^2}{\pi^3}\int_0^\pi \left(x^2 - x^2\cos 2nx\right)\mathrm{d}x = \frac{a^2}{\pi^3}\left\{\frac{x^3}{3} + \left[\frac{x^2}{2n} - \frac{2}{(2n)^3}\right]\sin 2nx + \frac{2x}{(2n)^2}\cos 2nx\right\}\Big|_0^\pi \\ &= \frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2n^2\pi^2} \end{aligned} \tag{3.3}$$

上式用到了积分公式 (A.11)(当然采用分部积分法也一样). 由式 (3.2) 与式 (3.3) 得

$$(\Delta x)^2=\overline{(x-\overline{x})^2}=\overline{x^2}-\overline{x}^2=\frac{a^2}{3}-\frac{a^2}{2n^2\pi^2}-\frac{a^2}{4}=\frac{a^2}{12}-\frac{a^2}{2n^2\pi^2}=\frac{a^2}{12}\left(1-\frac{6}{n^2\pi^2}\right) \tag{3.4}$$

由此得

$$\Delta x=\frac{a}{2\sqrt{3}}\sqrt{1-\frac{6}{n^2\pi^2}} \tag{3.5}$$

作为对比, 下面作一经典力学计算. 按经典力学图像, 粒子将在势阱中 $(0<x<a)$ 做往返周期运动. 不妨设粒子初始时刻 $t=0$ 位于 $x=0$ 处且向 $x>0$ 方向运动, 在到达 $x=a$ 前, 粒子做匀速运动. 此段时间内, $\dot{v}=0$, $v=v_0$, $x=vt$. 粒子到达 $x=a$ 瞬间 $(t=\tau=a/v)$, 与势阱壁发生碰撞, 并且其速度方向反向 (大小不变), 此后粒子向 $x<0$ 方向运动, 在到达 $x=0$ 前, 粒子做匀速运动. 此段时间内, $\dot{v}=0$, $v=-v_0$, $x=a-v(t-a/v)=2a-vt$. 粒子到达 $x=0$ 瞬间 $(t=2\tau=2a/v)$, 与势阱壁发生碰撞, 并且其速度方向反向 (大小不变), 此后粒子向 $x>0$ 方向运动. 粒子运动开始一个新的周期. 依次类推, 粒子在势阱中第 n 个往返周期运动中

$$x=\begin{cases}-2(n-1)a+v_0t, & 2(n-1)a<v_0t<(2n-1)a\\ 2na-v_0t, & (2n-1)a<v_0t<2na\end{cases}$$

为了计算坐标、动量的期望值和涨落, 只需在任意一个周期计算. 例如设粒子初始时刻 $t=0$ 位于 $x=0$ 处且向 $x>0$ 方向运动, 可取 $t=0$ 到 $T=2a/v$ 的周期进行计算. 关于坐标期望值的计算如下

$$\begin{aligned}\overline{x}_c&=\frac{1}{T}\int_0^T x(t)\mathrm{d}t=\frac{1}{T}\int_0^{a/v}x(t)\mathrm{d}t+\frac{1}{T}\int_{a/v}^{2a/v}x(t)\mathrm{d}t\\&=\frac{1}{T}\int_0^{a/v}vt\mathrm{d}t+\frac{1}{T}\int_{a/v}^{2a/v}(2a-vt)\,\mathrm{d}t=\frac{v}{2a}\left(\frac{1}{2}\frac{a^2}{v}+\frac{2a^2}{v}-\frac{2a^2}{v}+\frac{1}{2}\frac{a^2}{v}\right)=\frac{a}{2}\end{aligned}$$

而坐标平方的期望值为

$$\begin{aligned}\overline{x^2}_c&=\frac{1}{T}\int_0^T x(t)^2\mathrm{d}t=\frac{1}{T}\int_0^{a/v}x(t)^2\mathrm{d}t+\frac{1}{T}\int_{a/v}^{2a/v}x(t)^2\mathrm{d}t\\&=\frac{1}{T}\int_0^{a/v}v^2t^2\mathrm{d}t-\frac{1}{T}\int_{a/v}^{0}v^2t'^2\mathrm{d}t'=\frac{v}{2a}\left(\frac{1}{3}\frac{a^3}{v}+\frac{1}{3}\frac{a^3}{v}\right)=\frac{a^2}{3}\end{aligned}$$

可见与量子力学计算的结果式 (3.2)、式 (3.3) 当 $n\to\infty$ 情形一致.

附 (关于动量期望值以及涨落的计算) 在第 n 个定态下, 动量期望值为

$$\begin{aligned}\overline{p}&=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\psi^*(x)\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x)=\frac{2\hbar}{a\mathrm{i}}\int_0^a\mathrm{d}x\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\frac{\partial}{\partial x}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\\&=\frac{2\hbar}{a\mathrm{i}}\frac{n\pi}{a}\int_0^a\mathrm{d}x\sin\frac{n\pi}{a}x\cos\frac{n\pi}{a}x=\mathrm{i}\frac{n\hbar\pi}{a^2}\frac{a}{2n\pi}\cos\frac{2n\pi}{a}x\Big|_0^a=0\end{aligned} \tag{3.6}$$

即 $\overline{p}=0$, 这也是一般束缚定态的普遍结果 (参见题 4.25). 再利用 p 的 Hermite 性

$$\begin{aligned}\overline{p^2}&=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\psi^*(x)\,p^2\psi(x)=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\,|p\psi(x)|^2\\&=\frac{2\hbar^2}{a}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2\int_0^a\mathrm{d}x\cos^2\frac{n\pi}{a}x=\frac{1}{a}\left(\frac{\hbar n\pi}{a}\right)^2\int_0^a\mathrm{d}x\left(1+\cos\frac{2n\pi}{a}x\right)\\&=\frac{1}{a}\left(\frac{\hbar n\pi}{a}\right)^2\left(a+\frac{a}{2n\pi}\sin\frac{2n\pi}{a}x\Big|_0^a\right)=\left(\frac{\hbar n\pi}{a}\right)^2\end{aligned} \tag{3.7}$$

即有 $(\Delta p)^2=\sqrt{(p-\overline{p})^2}=\overline{p^2}-\overline{p}^2=\left(\dfrac{\hbar n\pi}{a}\right)^2=2mE_n$, 其中 E_n 为定态能量, 因此动量涨落为

$$\Delta p=\frac{\hbar n\pi}{a}$$

再结合式 (3.5) 给出

$$\Delta x\Delta p=\frac{\hbar}{2\sqrt{3}}\sqrt{n^2\pi^2-6}\geqslant\frac{\hbar}{2}$$

当 $n\to\infty$ 情形: $\Delta x=\dfrac{a}{2\sqrt{3}}$, $\Delta p\to\infty$.

经典力学的计算结果是

$$\begin{aligned}\overline{p}_c&=m\frac{1}{T}\int_0^T v(t)\mathrm{d}t=\frac{m}{T}\int_0^{a/v}v(t)\mathrm{d}t+\frac{m}{T}\int_{a/v}^{2a/v}v(t)\mathrm{d}t\\&=\frac{m}{T}\int_0^{a/v}v\mathrm{d}t+\frac{m}{T}\int_{a/v}^{2a/v}(-v)\,\mathrm{d}t=0;\\\overline{p^2}_c&=\frac{m^2}{T}\int_0^T v(t)^2\mathrm{d}t=\frac{m^2}{T}\int_0^{a/v}v(t)^2\mathrm{d}t+\frac{m^2}{T}\int_{a/v}^{2a/v}x(t)^2\mathrm{d}t\\&=\frac{m^2}{T}\int_0^{a/v}v^2\mathrm{d}t+\frac{m^2}{T}\int_{a/v}^{2a/v}(-v)^2\,\mathrm{d}t=m^2v^2\end{aligned}$$

即动量期望值与动量的长落分别为

$$\overline{p_c}=0,\qquad\Delta p_c=mv=\sqrt{2mE}$$

其中 $E=\dfrac{1}{2}mv^2$ 为该经典粒子的能量. 上式结果与量子力学相应计算结果式 (3.6)、式 (3.7′) 一致.

3.3 设粒子处于无限深方势阱

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

中, 状态用波函数 $\psi(x)=Ax(a-x)$ 描述, A 是归一化常数.

(a) 求归一化常数 A;

(b) 求粒子处于能量本征态 $\psi_n(x)=\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi x}{a}$ 的概率 P_n, 特别是 P_1;

(c) 通过作图来比较 $\psi(x)$ 与 $\psi_1(x)$ 的曲线. 从 $P_1\gg P_n(n\neq1)$ 来说明两条曲线非常相似;

(d) 求 $\psi(x)$ 下的能量期望值及涨落.

解 (a) 归一化条件

$$\begin{aligned}1&=\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x)|^2\mathrm{d}x=\int_0^a|\psi(x)|^2\mathrm{d}x=\int_0^a|A|^2x^2(a-x)^2\mathrm{d}x\\&=|A|^2\int_0^a\mathrm{d}x\left(x^4-2ax^3+a^2x^2\right)=|A|^2\left(\frac{1}{5}a^5-2\frac{1}{4}a^5+\frac{1}{3}a^5\right)=\frac{1}{30}|A|^2a^5\end{aligned}$$

这样可取归一化常数

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

(b) 题给无限深势阱中粒子归一化的能量本征态为

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}\tag{3.8}$$

其中 $n=1,2,3,\cdots$, 相应的能量 $E_n=\dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$. $\psi(x)$ 可用这组完备的本征函数展开

$$\psi(x)=\sum_n c_n\psi_n(x) \tag{3.9}$$

由 $\psi_n(x)$ 的正交归一性得

$$c_n=\int_0^a \psi_n^*(x)\psi(x)\mathrm{d}x=\frac{\sqrt{60}}{a^3}\int_0^a x(a-x)\sin\frac{n\pi x}{a}\mathrm{d}x \tag{3.10}$$

可类似题 3.2 所做进行分部积分, 或者直接利用积分公式 (A.12)、式 (A.13) 完成上面积分即得

$$c_n=\frac{2\sqrt{60}}{\pi^3n^3}\left[1-(-1)^n\right] \tag{3.11}$$

此式当 n 为偶数时为零, 只有当 n 为奇数时才不为 0. 故式 (3.9) 的求和只对奇数 n 求, 即有

$$\psi(x)=\frac{1}{\pi^3}\sqrt{\frac{1920}{a}}\left\{\sin\frac{\pi x}{a}+\frac{1}{27}\sin\frac{3\pi x}{a}+\cdots+\frac{1}{(2k-1)^3}\sin\frac{(2k-1)\pi x}{a}+\cdots\right\} \tag{3.12}$$

即 $\psi(x)$ 是各第奇数个能量本征态的叠加.

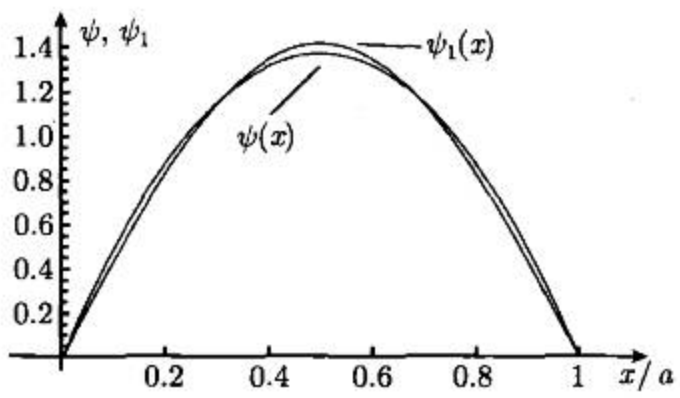

图 3.2 $\psi(x)$ 与 $\psi_1(x)$ 的曲线

由此即可求粒子处于能量本征态的概率. 对于 n 为奇数, 粒子处于 $\psi_n(x)=\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi x}{a}$ 的概率为

$$P_n=c_n^*c_n=\left(\frac{4\sqrt{60}}{\pi^3n^3}\right)^2=\frac{960}{\pi^6n^6} \tag{3.13}$$

若 n 为偶数, 则相应概率 $P_n=0$. 特别处于基态 ψ_1 的概率为

$$P_1=\frac{960}{\pi^6}=0.998$$

(c) $\psi(x)$ 与 $\psi_1(x)$ 的曲线[①] 如图 3.2 所示.

由于 $P_1\gg P_n(n\neq 1)$, $\psi(x)$ 处于 $\psi_n(x)$ (其中 $n\neq 1$) 的概率远小于处于 $\psi_1(x)$ 的概率, 也就是说 $\psi(x)$ 基本上处于 $\psi_1(x)$ 态. 因此 $\psi(x)$ 与 $\psi_1(x)$ 两条曲线非常相似.

(d) 能量的期望值可以按照已知概率分布的公式计算

$$\overline{E}=\sum_{n=1}^{\infty}c_n^*c_n\cdot E_n=\sum_{n(\mathrm{odd})=1}^{\infty}\frac{960}{\pi^6n^6}\cdot\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}=\frac{960\hbar^2}{2m\pi^4a^2}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{(2k-1)^4} \tag{3.14}$$

将式 (A.27) 的第二式 (可采用 Fourier 级数法计算) 代入式 (3.14) 得

$$\overline{E}=\frac{5\hbar^2}{ma^2} \tag{3.15}$$

能量的涨落指能量的不确定度 $\Delta E=\sqrt{\overline{E^2}-\overline{E}^2}$. 现需求能量平方的期望值

$$\overline{E^2}=\sum_{n=1}^{\infty}c_n^*c_nE_n^2=\sum_{n(\mathrm{odd})=1}^{\infty}\frac{960}{\pi^6n^6}\cdot\frac{n^4\pi^4\hbar^4}{4m^2a^4}=\frac{240\hbar^4}{\pi^2m^2a^4}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{(2k-1)^2} \tag{3.16}$$

① 为用 Mathematica 软件所绘.

将式 (A.27) 的第一式 (可采用 Fourier 级数法计算) 代入式 (3.16) 得

$$\overline{E^2} = \frac{30\hbar^4}{m^2a^4} \tag{3.17}$$

这样由式 (3.14)、式 (3.17) 得

$$\Delta E = \sqrt{\frac{30\hbar^4}{m^2a^4} - \frac{25\hbar^4}{m^2a^4}} = \frac{\sqrt{5}\hbar^2}{ma^2} \tag{3.18}$$

另解 (关于能量期望值、能量涨落的计算) 我们在坐标表象利用归一化波函数 $\psi(x)$ 通过积分直接计算能量期望值

$$\begin{aligned}\overline{E} &= \int_0^a \psi^* \hat{H}\psi \mathrm{d}x = A^2 \int_0^a (ax - x^2) \cdot \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)(ax - x^2)\mathrm{d}x \\ &= -\frac{30}{a^5} \cdot \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^a -2(ax - x^2)\mathrm{d}x = \frac{5\hbar^2}{ma^2}\end{aligned}$$

同样, 为求 ΔE. 现在坐标表象利用 $\psi(x)$ 直接计算

$$\begin{aligned}\overline{E^2} &= \int_0^a \psi^* \hat{H}^2\psi \mathrm{d}x = \int_0^a \left(\hat{H}\psi\right)^* \hat{H}\psi \mathrm{d}x = A^2 \int_0^a \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(ax - x^2)\right] \cdot \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(ax - x^2)\right] \mathrm{d}x \\ &= \frac{30}{a^5} \cdot \frac{\hbar^4}{4m^2} \int_0^a 2 \cdot 2\mathrm{d}x = \frac{30\hbar^4}{m^2a^4}\end{aligned}$$

说明 上面积分中如果 $\hat{H}^2 = \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ 全部朝后作用, 则会在 $x = 0, a$ 处产生奇异性. 那需要做奇异函数积分, 结果是一样的.

3.4 质量为 m 的粒子在一维无限深势阱 (与题 3.2 同) 运动, 设其初态

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_1(x) + \psi_2(x)\right]$$

求 $\psi(x,t) = ?$ $\overline{x}(t) = ?$ $\overline{H} = ?$ $\overline{H^2} = ?$

解 初态为两个能量本征态的叠加, 这样 t 时刻的状态为

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_1(x)\exp(-\mathrm{i}E_1t/\hbar) + \psi_2(x)\exp(-\mathrm{i}E_2t/\hbar)\right] \tag{3.19}$$

其中 $E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}$, $E_2 = \frac{2\pi^2\hbar^2}{\mu a^2}$. ψ_1, ψ_2 均已归一化, 这样 $\psi(x,t)$ 也已归一化. 根据波函数 $\psi(x,t)$ 计算, t 时刻粒子位置期望值为

$$\begin{aligned}\bar{x}(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t)x\psi(x,t) = \int_0^a \psi^*(x,t)x\psi(x,t) \\ &= \frac{1}{2}\int_0^a \left[\psi_1(x)x\psi_1(x) + \psi_2(x)x\psi_2(x)\right]\mathrm{d}x + \frac{1}{2}\int_0^a \Big[\psi_1(x)x\psi_2(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_2-E_1)t/\hbar} \\ &\quad + \psi_2(x)x\psi_1(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_1-E_2)t/\hbar}\Big]\mathrm{d}x \\ &= \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}a + \frac{1}{2}a\right) + \frac{1}{2}\left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_2-E_1)t/\hbar}\int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x}{a}x\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{2\pi x}{a}\mathrm{d}x + c.c.\right] \\ &= \frac{1}{2}a - \frac{16a}{9\pi^2}\cos\frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar}\end{aligned}$$

也就是

$$\bar{x}(t)=\frac{1}{2}a-\frac{16a}{9\pi^2}\cos\omega_{21}t$$

其中 $\omega_{21}=\dfrac{E_2-E_1}{\hbar}=\dfrac{3\pi^2\hbar}{2ma^2}$.

H 是守恒量, 故要计算 $\overline{H}$ 以及 $\overline{H^2}$, 只需对初态进行计算即可. 初态为两个归一化的能量本征态的叠加, 故立得

$$\overline{H}=\frac{1}{2}(E_1+E_2)=\frac{5}{2}E_1=\frac{5\pi^2\hbar}{4ma^2},\quad \overline{H^2}=\frac{1}{2}\left(E_1^2+E_2^2\right)=\frac{17}{2}E_1^2=\frac{17\pi^4\hbar^2}{8m^2a^4}$$

因此在 $\psi(x,t)$ 下的能量涨落为

$$\Delta H=\sqrt{\overline{H^2}-\overline{H}^2}=\frac{3}{2}E_1=\frac{3\pi^4\hbar^2}{4m^2a^4}$$

3.5 一维无限深方势阱

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

中的粒子, 设处于 $\psi_n(x)$ 态. 求其动量分布概率. 当 $n\gg1$ 时, 与经典粒子运动比较.

解 粒子 $\psi_n(x)$ 态波函数为

$$\psi_n(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi x}{a}, & 0<x<a\\ 0, & x<0,x>a\end{cases}\tag{3.20}$$

它的动量空间波函数为

$$\begin{aligned}\varphi_n(p)&=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p\frac{x}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\psi(x)=\int_0^a\mathrm{d}x\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p\frac{x}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x=\frac{1}{2\mathrm{i}\sqrt{a\pi\hbar}}\int_0^a\mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p\frac{x}{\hbar}}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{n\pi}{a}x}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{n\pi}{a}x}\right)\\
&=\frac{1}{2\mathrm{i}\sqrt{a\pi\hbar}}\int_0^a\mathrm{d}x\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(\frac{n\pi}{a}-\frac{p}{\hbar}\right)x}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(\frac{n\pi}{a}+\frac{p}{\hbar}\right)x}\right]=\frac{1}{2\mathrm{i}\sqrt{a\pi\hbar}}\left[\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(\frac{n\pi}{a}-\frac{p}{\hbar}\right)x}}{\mathrm{i}\left(\frac{n\pi}{a}-\frac{p}{\hbar}\right)}-\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(\frac{n\pi}{a}+\frac{p}{\hbar}\right)x}}{-\mathrm{i}\left(\frac{n\pi}{a}+\frac{p}{\hbar}\right)}\right]\Bigg|_0^a\\
&=\frac{1}{2\sqrt{a\pi\hbar}}\left(\frac{1-\mathrm{e}^{\mathrm{i}n\pi-\mathrm{i}\frac{pa}{\hbar}}}{\frac{n\pi}{a}-\frac{p}{\hbar}}+\frac{1-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\pi-\mathrm{i}\frac{pa}{\hbar}}}{\frac{n\pi}{a}+\frac{p}{\hbar}}\right)\\
&=\frac{\sqrt{\hbar}}{2\sqrt{a\pi}}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{n\pi}{2}-\mathrm{i}\frac{pa}{2\hbar}}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{n\pi}{2}-\mathrm{i}\frac{pa}{2\hbar}}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{n\pi}{2}+\mathrm{i}\frac{pa}{2\hbar}}}{p-n\hbar\pi/a}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{n\pi}{2}-\mathrm{i}\frac{pa}{2\hbar}}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{n\pi}{2}+\mathrm{i}\frac{pa}{2\hbar}}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{n\pi}{2}-\mathrm{i}\frac{pa}{2\hbar}}}{p+n\hbar\pi/a}\right)\end{aligned}$$

上面结果可以表示[①]为

$$\varphi_n(p)=\frac{1}{2\mathrm{i}}\sqrt{\frac{a}{\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{n\pi}{2}-\mathrm{i}\frac{pa}{2\hbar}}\left[\frac{\sin\left(p-n\hbar\pi/a\right)a/2\hbar}{\left(p-n\hbar\pi/a\right)a/2\hbar}-(-1)^n\frac{\sin\left(p+n\hbar\pi/a\right)a/2\hbar}{\left(p+n\hbar\pi/a\right)a/2\hbar}\right]\tag{3.21}$$

也可表示为

$$\varphi_n(p)=\frac{1}{2\mathrm{i}}\sqrt{\frac{a}{\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{n\pi}{2}-\mathrm{i}\frac{pa}{2\hbar}}\left[F\left(p-\frac{n\hbar\pi}{a}\right)-(-1)^nF\left(p+\frac{n\hbar\pi}{a}\right)\right]\tag{3.22}$$

---

① 本来上述积分对于 $p=\pm\dfrac{n\hbar\pi}{a}$ 情况需要单独处理. 但由 Rieman 积分的性质, $\varphi_n(p)$ 连续. 因而对自变量为 $p=\pm\dfrac{n\hbar\pi}{a}$ 时, 只要按照连续函数取值就可以了.

其中

$$F(p)=\frac{\sin\left(pa/2\hbar\right)}{pa/2\hbar} \tag{3.23}$$

这样粒子动量为 p 的概率分布为

$$|\varphi(p)|^2=\frac{a}{4\pi\hbar}\left|F\left(p-\frac{n\hbar\pi}{a}\right)-(-1)^nF\left(p+\frac{n\hbar\pi}{a}\right)\right|^2 \tag{3.24}$$

这是连续分布.

式 (3.24) 当 $n\gg1$ 时, 其 $p=\pm\dfrac{n\hbar\pi}{a}$ 交叉项贡献很小, 此时

$$|\varphi(p)|^2=\frac{a}{4\pi\hbar}\left[F\left(p-\frac{n\hbar\pi}{a}\right)^2+F\left(p+\frac{n\hbar\pi}{a}\right)^2\right] \tag{3.25}$$

根据 $F(p)$ 的特点, 概率主要集中于动量为 $p=\pm\dfrac{n\hbar\pi}{a}$ 附近. 而 $p=\pm\dfrac{n\hbar\pi}{a}=\pm\sqrt{2mE_n}$ 正是能量为 $E=E_n=\dfrac{n^2\pi^2\hbar}{2ma^2}$ 的经典粒子动量值. 可见此时与经典粒子运动一致.

图 3.3 画出了 $n=6$ 情况的动量分布概率, 可见概率主要集中于动量为 $p=\pm\dfrac{6\hbar\pi}{a}$ 附近, 而且交叉项贡献已经很小.

作为对比, 图 3.4、图 3.5 也画出了 $n=1,2$ 情况的动量分布概率 (横坐标比例与图 3.3 不同), $n=1$ 情况与 $n\gg1$ 情况不同, $p=\pm\dfrac{\hbar\pi}{a}$ 交叉项有显著贡献.

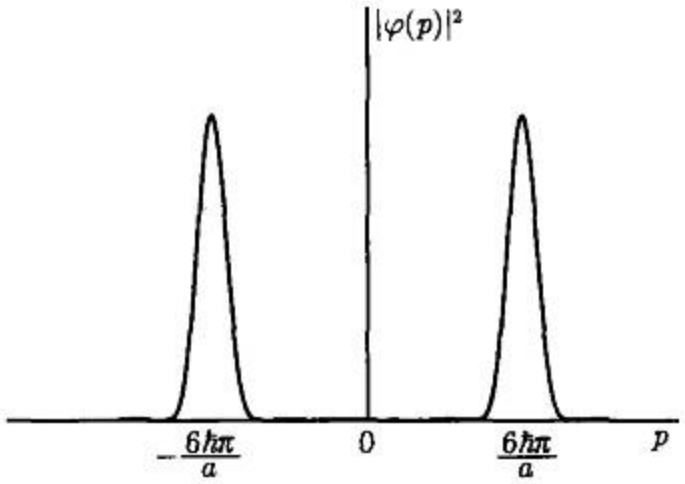

图 3.3 动量分布概率 $n=6$

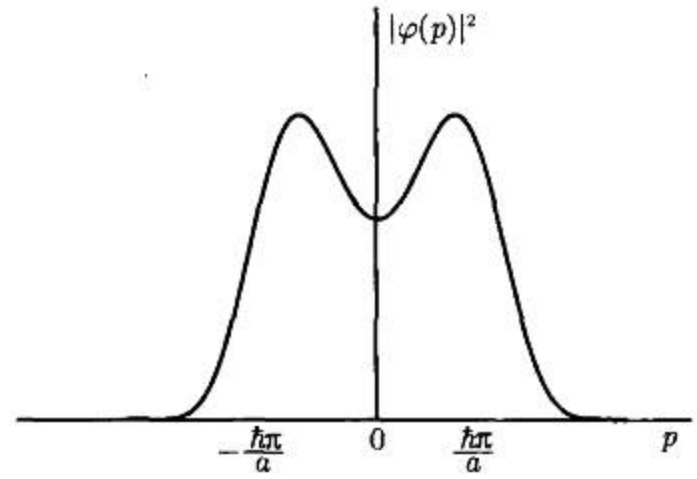

图 3.4 动量分布概率 $n=1$

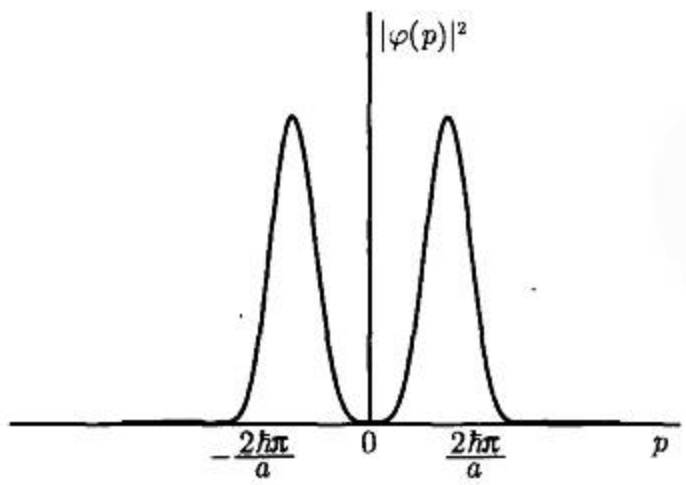

图 3.5 动量分布概率 $n=2$

说明 关于无限深方势阱中粒子的动量分布, 曾有若干轮的所谓 Pauli 与 Landau 孰是孰非之争. 我们推荐读者阅读观点不尽相同的两篇文献: (1) 张永德. 量子力学 [M]. 北京: 科学出版社, 2002: 52~57; (2) 倪光炯, 陈苏卿. 高等量子力学 [M]. 2 版. 上海: 复旦大学出版社, 2004: 450~452.

3.6 粒子在如下不对称势阱中运动

$$V(x)=\begin{cases}V_1, & x<0\\ 0, & 0<x<a\\ V_2, & x>a\end{cases}$$

其中 $V_1>V_2>0$(如图 3.6), 试求能量本征值和本征函数.

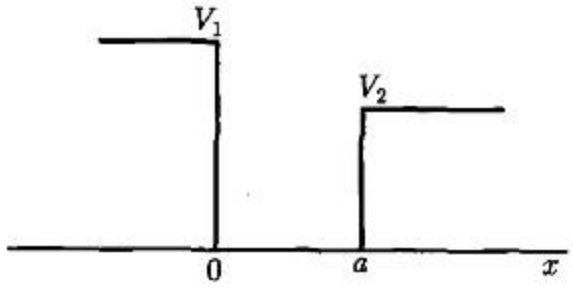

图 3.6 不对称方势阱

解法一 我们对于题给的势阱, 求粒子的束缚态解 $(0<E<V_2)$. 根据势函数的特点, 应进行分区求解. 在 $x<0$ 区域, 粒子的 Schrödinger 方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)+V_1\psi(x)=E\psi(x)$$

或者

$$\psi''(x)=\frac{2m}{\hbar^2}(V_1-E)\psi(x)=\kappa_1^2\psi(x) \tag{3.26}$$

其中 $\kappa_1=\sqrt{2m(V_1-E)}/\hbar$, 这样求得满足边界条件的波函数为

$$\psi(x)=C_1\mathrm{e}^{\kappa_1 x},\quad x<0 \tag{3.27}$$

在 $0<x<a$ 区域, 粒子的 Schrödinger 方程

$$\psi''(x)=-\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x)=-k^2\psi(x) \tag{3.28}$$

其中 $k=\sqrt{2mE}/\hbar$, 求得

$$\psi(x)=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \tag{3.29}$$

粒子在 $x>a$ 区域的 Schrödinger 方程

$$\psi''(x)=\frac{2m}{\hbar^2}(V_2-E)\psi(x)=\kappa_2^2\psi(x) \tag{3.30}$$

其中 $\kappa_2=\sqrt{2m(V_2-E)}/\hbar$, 这样求得满足边界条件的波函数为

$$\psi(x)=C_2\mathrm{e}^{-\kappa_2 x},\quad x>a \tag{3.31}$$

在 $x=0,a$ 两处, 势函数为有限跳跃点, 因而波函数以及其导数连续. 由此写下

$$\begin{cases}C_1=A+B, & -\mathrm{i}\dfrac{\kappa_1}{k}C_1=A-B\\ C_2\mathrm{e}^{-a\kappa_2}=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}, & \dfrac{\mathrm{i}\kappa_2}{k}C_2\mathrm{e}^{-a\kappa_2}=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}-B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}\end{cases}$$

或者

$$\begin{cases}\left(1-\mathrm{i}\dfrac{\kappa_1}{k}\right)C_1=2A, & \left(1+\mathrm{i}\dfrac{\kappa_1}{k}\right)C_1=2B\\ \left(1+\mathrm{i}\dfrac{\kappa_2}{k}\right)C_2\mathrm{e}^{-a\kappa_2}=2A\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}, & \left(1-\mathrm{i}\dfrac{\kappa_2}{k}\right)C_2\mathrm{e}^{-a\kappa_2}=2B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}\end{cases}$$

消去 A 和 B, 得

$$\frac{(k+\mathrm{i}\kappa_2)C_2\mathrm{e}^{-a\kappa_2}}{(k-\mathrm{i}\kappa_1)C_1}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka},\quad \frac{(k+\mathrm{i}\kappa_1)C_1}{(k-\mathrm{i}\kappa_2)C_2\mathrm{e}^{-a\kappa_2}}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}$$

再消去 C_1 和 C_2, 得

$$e^{2ika}=\frac{(k+i\kappa_1)(k+i\kappa_2)}{(k-i\kappa_2)(k-i\kappa_1)},\qquad e^{ika}=\pm\frac{k+i\kappa_1}{k-i\kappa_2}\sqrt{\frac{V_2}{V_1}}$$

这样

$$e^{ika}=\pm\frac{(k+i\kappa_1)(k+i\kappa_2)}{k^2+\kappa_2^2}\sqrt{\frac{V_2}{V_1}}=\pm\frac{k^2+ik(\kappa_1+\kappa_2)-\kappa_1\kappa_2}{k^2+\kappa_2^2}\sqrt{\frac{V_2}{V_1}}$$

或者

$$\cos ka=\pm\frac{k^2-\kappa_1\kappa_2}{k^2+\kappa_2^2}\sqrt{\frac{V_2}{V_1}}=\pm\frac{E-\sqrt{(V_1-E)(V_2-E)}}{V_2}\sqrt{\frac{V_2}{V_1}}$$

$$\sin ka=\pm\frac{k(\kappa_1+\kappa_2)}{k^2+\kappa_2^2}\sqrt{\frac{V_2}{V_1}}=\pm\frac{\sqrt{E}\left(\sqrt{V_1-E}+\sqrt{V_2-E}\right)}{V_2}\sqrt{\frac{V_2}{V_1}}$$

由上面两式即得

$$\tan ka=\frac{k(\kappa_1+\kappa_2)}{k^2-\kappa_1\kappa_2}=\frac{\sqrt{E}\left(\sqrt{V_1-E}+\sqrt{V_2-E}\right)}{E-\sqrt{(V_1-E)(V_2-E)}}\tag{3.32}$$

再将式 (3.32) 化为半角形式. 利用

$$\tan x=\frac{\sin x}{\cos x}=\frac{2\sin\frac{x}{2}\cos\frac{x}{2}}{\cos^2\frac{x}{2}-\sin^2\frac{x}{2}}=\frac{2}{\cot\frac{x}{2}-\tan\frac{x}{2}}$$

式 (3.32) 即化为

$$\left(\tan\frac{ka}{2}\right)^2+2\frac{k^2-\kappa_1\kappa_2}{k(\kappa_1+\kappa_2)}\tan\frac{ka}{2}-1=0$$

解此二次方程得·

$$\begin{aligned}\tan\frac{ka}{2}&=-\frac{k^2-\kappa_1\kappa_2}{k(\kappa_1+\kappa_2)}\pm\sqrt{\left(\frac{k^2-\kappa_1\kappa_2}{k(\kappa_1+\kappa_2)}\right)^2+1}\\&=-\frac{k^2-\kappa_1\kappa_2}{k(\kappa_1+\kappa_2)}\pm\frac{1}{k(\kappa_1+\kappa_2)}\sqrt{(k^2+\kappa_1^2)(k^2+\kappa_2^2)}\end{aligned}$$

再将 k,κ_1,κ_2 和能量 E 的关系式代入得

$$\tan\frac{a}{2\hbar}\sqrt{2mE}=-\frac{E-\sqrt{V_1-E}\sqrt{V_2-E}}{\sqrt{E}\left(\sqrt{V_1-E}+\sqrt{V_2-E}\right)}\pm\frac{\sqrt{V_1V_2}}{\sqrt{E}\left(\sqrt{V_1-E}+\sqrt{V_2-E}\right)}\tag{3.32'}$$

方程 (3.32) 或 (3.32′) 可用于确定能级, 都是超越方程, 形式也都较为繁琐.

解法二　在 $0<x<a$ 区间波函数表示为

$$\psi(x)=A\sin(kx+\delta)\tag{3.33}$$

和第一种解法相同, 我们现在先写出边界处波函数及导数连续条件. 在 $x=0$ 处的方程为

$$C_1=A\sin\delta,\quad \kappa_1C_1=kA\cos\delta\tag{3.34}$$

在 $x=a$ 处的方程为

$$A\sin(ka+\delta)=C_2e^{-\kappa_2a},\quad -kA\cos(ka+\delta)=C_2\kappa_2De^{-\kappa_2a}\tag{3.35}$$

式 (3.34)、式 (3.35) 中的两式各自分别相除得

$$\tan\delta=\frac{k}{\kappa_1}=\sqrt{\frac{E}{V_1-E}},\quad \tan(ka+\delta)=-\frac{k}{\kappa_2}=-\sqrt{\frac{E}{V_2-E}} \tag{3.36}$$

上面两式又分别可化为如下形式

$$\sin\delta=\frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_1}},\quad \sin(ka+\delta)=-\frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_2}} \tag{3.36'}$$

可知由式 (3.36) 所得结果与第一种解法的式 (3.32) 完全相同. 而由式 (3.36′) 可得

$$ka=n\pi-\arcsin\frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_1}}-\arcsin\frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_2}} \tag{3.37}$$

其中 $n=1,2,3,\cdots$ 由于 $k=\sqrt{2mE}/\hbar$, 式 (3.37) 也为确定能量本征值的超越方程. 一般情况下, 给定一个 n, 相应于一个能量本征值, 这可采用图解法近似求解.

图 3.7 中横坐标为 k, 纵坐标为 y. 直线 $y=ak$ 与各 $y_n(n=1,2,3,\cdots)$ 曲线的交点相应于第 n 个能级的能量. 若 $V_1,V_2\to\infty$, 这是无限深方势阱情形, 这时各 $y_n(n=1,2,3,\cdots)$ 成为半无限长直线, 与直线 $y=ka$ 的交点给出 $k_n=n\pi/a$, 故能量本征值为 $E_n=n^2\pi^2/2ma^2$, 与求解无限深方势阱所得结果相同. 若 V_1 以及 V_2 中一个为有限值, 一个无限大, 则可知结果相应于对称方势阱的奇宇称态.

若 V_1 以及 V_2 均为有限值, 当 $V_1=V_2$ 时, 图中 y_1 的右边界点处 $y_1=0$, 则直线 $y=ak$ 与 y_1 必有交点, 这就是我们所知的对称方势阱至少有一个束缚态. 题给情形, $V_1>V_2$, 则由式 (3.37) 知图中 y_1 的右边界点处 $y_1=\dfrac{\pi}{2}-\arcsin\dfrac{V_2}{V_1}\neq 0$. 此时并不一定有束缚态, 由式 (3.37) 或者图 3.7 知存在束缚态的充要条件是

$$\frac{\sqrt{2mV_2}}{\hbar}a\geqslant\frac{\pi}{2}-\arcsin\frac{V_2}{V_1} \tag{3.38}$$

当势阱两边高度 V_1、V_2 给定时, 上式给出势阱宽度的限制. 势阱宽度过窄则不存在束缚态, 存在束缚态则要求势阱宽度满足

$$a\geqslant\frac{\hbar}{\sqrt{2mV_2}}\left(\frac{\pi}{2}-\arcsin\frac{V_2}{V_1}\right) \tag{3.38'}$$

对于给定的势阱参数 V_1、V_2 以及 a, 假如由式 (3.37) 或者图解法求得各 $k_n(n=1,2,3,\cdots)$, 则相应的能量为

$$E_n=\frac{\hbar^2k_n^2}{2m}$$

结合式 (3.27)、式 (3.31)、式 (3.33) 至式 (3.35)、式 (3.36′), 相应的定态波函数为

$$\psi_n=\begin{cases}A_n\dfrac{\hbar k_n}{\sqrt{2mV_1}}\mathrm{e}^{\kappa_{1n}x}, & x<0\\ A_n\sin(k_nx+\delta_n), & 0<x<a\\ -A_n\dfrac{\hbar k_n}{\sqrt{2mV_2}}\mathrm{e}^{-\kappa_{2n}(x-a)}, & x>a\end{cases}$$

其中 $\kappa_{1n}=\sqrt{2m(V_1-E_n)}/\hbar$, $\kappa_{2n}=\sqrt{2m(V_2-E_n)}/\hbar$, $\delta_n=\arcsin\dfrac{\hbar k}{\sqrt{2mV_1}}$. 再由归一化条件 $\int|\psi_n|^2\mathrm{d}x=1$, 其中的系数 A_n 可取为

$$A_n=\sqrt{\frac{2}{a+1/\kappa_{1n}+1/\kappa_{2n}}}$$

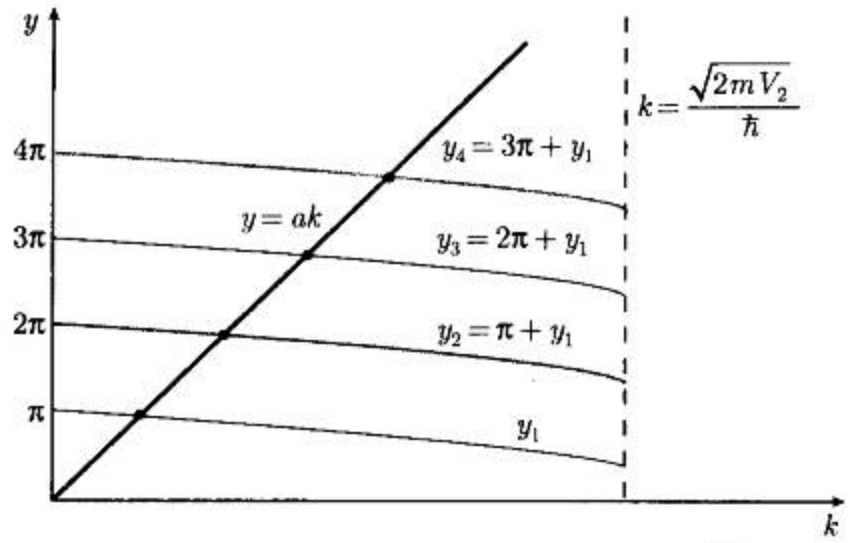

图 3.7　图解法近似求解式 (3.37), 其中 $y_1=\pi-\arcsin\dfrac{\hbar k}{\sqrt{2mV_1}}-\arcsin\dfrac{\hbar k}{\sqrt{2mV_2}}$, 虚线 $k=\sqrt{2mV_2}/\hbar$ 为边界线

3.7　粒子在深度为 V_0, 宽度为 a 的对称方势阱中运动 (参见图 3.8). 求: (1) 在阱口附近刚好出现一条束缚能级 (即 $E\approx V_0$) 的条件. (2) 束缚能级总数, 并与无限深势阱比较, 用不确定度关系定性说明.

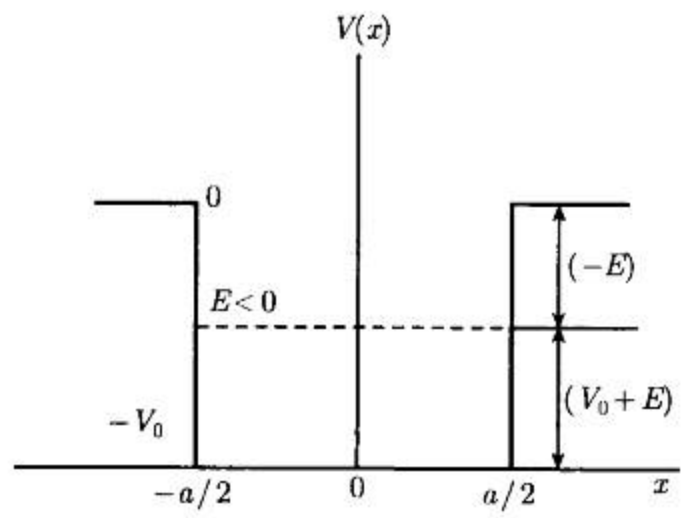

图 3.8　有限深对称方势阱

解　对于题给的势函数, 粒子的定态当其能量 E 小于 V 时为束缚态, E 大于 V_0 时为散射态或游离态. 考虑粒子的束缚定态, 其能量本征方程为

$$\psi''+\frac{2m}{\hbar^2}[E-V(x)]\psi=0 \tag{3.39}$$

我们令

$$\sqrt{2mE}/\hbar=k,\quad \sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar=\beta,\quad \sqrt{2mV_0}/\hbar=k_0 \tag{3.40}$$

则式 (3.39) 可以分区间写为

$$\psi''+k^2\psi=0,\qquad |x|\leqslant a/2 \tag{3.41a}$$

$$\psi''-\beta^2\psi=0,\qquad |x|\geqslant a/2 \tag{3.41b}$$

根据束缚态无限远处的边界条件, 式 (3.41b) 的解应取为

$$\psi(x)=\begin{cases} Ae^{-\beta x}, & x\geqslant a/2\\ Be^{\beta x}, & x\leqslant -a/2\end{cases} \tag{3.42}$$

其中 A,B 为常数, 对于奇、偶宇称解应分别满足 $A=-B, A=B$. 阱内波函数可由式 (3.41a) 解出, 奇、偶宇称解分别为

$$\begin{aligned}&\text{奇宇称}\quad \psi(x)=C_1\sin kx,\\ &\text{偶宇称}\quad \psi(x)=C_2\cos kx,\end{aligned}\qquad |x|\leqslant a/2 \tag{3.43}$$

其中 C_1,C_2 为常数, 它们与式 (3.42) 中的 A,B 可通过波函数连接条件以及归一化条件确定.

$x=\pm a/2$ 处为势函数有限跳跃点, 波函数及其一阶导数应连续. 当阱口刚好出现束缚态能级时, $E\approx V_0, \beta\approx 0$, 因此

$$\psi'(x)=\begin{cases} -\beta Ae^{-\beta x}\approx 0, & x\geqslant a/2\\ \beta Be^{\beta x}\approx 0, & x\leqslant -a/2\end{cases} \tag{3.44}$$

根据 ψ' 的连续性, 并由式 (3.43), 即得 ($E \approx V_0$, $k \approx k_0$)

$$\begin{aligned} &\text{奇宇称} \quad \psi'(a/2) \approx C_1 k_0 \cos \frac{k_0 a}{2} \approx 0, \quad k_0 a = \pi, 3\pi, 5\pi, \cdots \\ &\text{偶宇称} \quad \psi'(a/2) \approx -C_2 k_0 \sin \frac{k_0 a}{2} \approx 0, \quad k_0 a = 2\pi, 4\pi, 6\pi, \cdots \end{aligned} \tag{3.45}$$

综合奇宇称、偶宇称两种情况, 阱口刚好出现束缚能级的条件为

$$k_0 a = n\pi, \quad n = 1, 2, 3 \cdots \tag{3.46}$$

根据式 (3.40), 上式表示为

$$\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} = n^2\pi^2, \quad n = 1, 2, 3, \cdots \tag{3.47}$$

一维对称方势阱总有一条束缚能级①. 当 V_0 较小时, 即当 $\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} < \pi^2$ 时, 势阱一定存在且只存在一条束缚能级 (偶宇称态②). 根据式 (3.45) 以及式 (3.40), 随着 V_0 逐渐增加, 到满足 $\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} = \pi^2$ 时, 能量 $E = V_0$ 的态也是束缚态; 也就是此时除基态外, 阱口将再出现一个能级 (奇宇称态), 这样共有二个束缚态能级, 对应基态与第一激发态. 随着 V_0 增加, 当 $\pi^2 < \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} < (2\pi)^2$ 时, 势阱存在基态与第一激发态两个束缚态. V_0 继续增加, 当 $\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} = (2\pi)^2$ 时, 除基态与第一激发态以外, 阱口将再出现一个能级 (偶宇称态), 这是第三个能级, 即第二激发态. 依此类推. 由此可知, 对于给定的 V_0a^2, 束缚定态能级总数为

$$N = 1 + \left[\frac{a}{\pi\hbar}\sqrt{2mV_0}\right] \tag{3.48}$$

这里符号 $[A]$ 表示不超过 A 的最大整数.

当粒子在宽度为 a 的无限深方势阱中运动时, 能级为

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

则 $E < V_0$ 的能级总数为

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

与式 (3.48) 比较可知, 如果只计算 $E < V_0$ 的能级数, 则有限深 (V_0) 势阱的能级数比无限深势阱的能级数多一个. 这一结果可从 Hellmann-Feynman 定理理解, 因无限深方势阱的每一个能级均高于有限深方势阱的相应能级.

3.8 同上题, 设粒子处于第 n 个束缚态 ψ_n, E_n, 如 $V_0 \gg E_n$, 计算粒子在阱外出现的概率.

解 题 3.7 给出了束缚定态波函数的计算, 其结果见式 (3.42)、式 (3.43). 设束缚定态能量为 $E(E < V_0)$, 如式 (3.40) 所给, 令

$$k = \sqrt{2mE}/\hbar, \quad \beta = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar, \quad k_0 = \sqrt{2mV_0}/\hbar \tag{3.49}$$

对题给 $V_0 \gg E_n$ 情形, $k \ll \beta$.

① 如参见曾谨言, 量子力学 (第四版卷 I)[M], 北京: 科学出版社, 2007, p. 70.

② 读者可以思考, 这里依次出现的束缚态, 为什么一定具有确定的宇称? 而且为什么一定按照偶、奇、偶 $\cdots$ 的顺序依次出现?

我们先选取奇宇称态波函数进行计算, 按式 (3.42)、式 (3.43), 它可表示为

$$\psi(x)=\begin{cases} A\mathrm{e}^{-\beta x}, & x\geqslant a/2 \\ B\sin kx, & |x|\leqslant a/2 \\ -A\mathrm{e}^{\beta x}, & x\leqslant -a/2 \end{cases} \tag{3.50}$$

其中 A,B 为常数, 可通过波函数连接条件以及归一化条件确定.

$x=a/2$ 处 ψ 的连续性给出

$$A\mathrm{e}^{-\frac{\beta a}{2}}=B\sin\frac{ka}{2} \tag{3.51}$$

$x=a/2$ 处 ψ' 的连续性给出

$$-A\beta\mathrm{e}^{-\frac{\beta a}{2}}=Bk\cos\frac{ka}{2} \tag{3.52}$$

式 (3.51)、式 (3.52) 两式相除得能级公式

$$\tan\frac{ka}{2}=-\frac{k}{\beta} \tag{3.53}$$

在 $k\ll\beta$ 情形下, 上式给出

$$ka=n\pi-0^{+},\quad n=2,4,6,\cdots \tag{3.54}$$

0^{+} 表示正的小量. 代入式 (3.49), 给出能级为

$$E_n=\frac{\hbar^2k^2}{2m}\approx\frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2 \tag{3.55}$$

这正是无限深势阱的能级公式.

现在计算粒子在阱内、外出现的概率. 式 (3.50) 所给的波函数尚未归一化, 如下先求阱内、外出现的相对概率 P_{in}、P_{out}

$$P_{\text{in}}=\int_{\text{阱内}}|\psi|^2\mathrm{d}x=2|B|^2\int_0^{a/2}\sin^2kx\mathrm{d}x=|B|^2\frac{a}{2}\left(1-\frac{\sin ka}{ka}\right) \tag{3.56}$$

$$P_{\text{out}}=\int_{\text{阱外}}|\psi|^2\mathrm{d}x=2|A|^2\int_{a/2}^{\infty}\mathrm{e}^{-2\beta x}\mathrm{d}x=\frac{|A|^2}{\beta}\mathrm{e}^{-\beta a}=|B|^2\frac{1}{\beta}\sin^2\frac{ka}{2} \tag{3.57}$$

与式 (3.50) 相比知, P_{out} 也可表示为 $P_{\text{out}}=\dfrac{1}{\beta}\left|\psi\left(\dfrac{a}{2}\right)\right|^2$. 根据上面式 (3.56)、式 (3.57), 粒子在阱外出现的概率为

$$p_{\text{out}}=\frac{P_{\text{out}}}{P_{\text{in}}+P_{\text{out}}}=\frac{\sin^2\dfrac{ka}{2}}{\sin^2\dfrac{ka}{2}+\dfrac{\beta a}{2}\left(1-\dfrac{\sin ka}{ka}\right)} \tag{3.58}$$

在 $V_0\gg E_n$ 情形下, $ka\approx n\pi(n=2,4,6,\cdots)$, 此时 $\sin^2\dfrac{ka}{2}$ 和 $\dfrac{\sin ka}{ka}$ 均接近于零, 由上面式 (3.56)、式 (3.57) 可知粒子出现在阱外概率远小于阱内概率. 利用式 (3.53), 易得

$$1+\cot^2\frac{ka}{2}=\frac{k^2+\beta^2}{k^2}=\frac{V_0}{E_n}$$

从而

$$\sin^2\frac{ka}{2}=\frac{E_n}{V_0}$$

代入式 (3.58) 得, 粒子出现在阱外概率

$$p_{\text{out}} \approx \frac{2E_n}{a\beta V_0} \approx \frac{2\hbar}{a\sqrt{2mV_0}} \frac{E_n}{V_0} \tag{3.59}$$

若对偶宇称态波函数进行计算 [相应结果附后], 在 $V_0 \gg E_n$ 情形下, 所得结果与此相同.

根据能级公式 (3.53) 以及 $V_0 \gg E_n$, 可知

$$\sqrt{2mV_0} \gg n\pi\hbar/a \tag{3.60}$$

因此阱外概率

$$p_{\text{out}} \ll \frac{2E_n}{n\pi V_0} \ll \frac{2}{n\pi}$$

附 (对偶宇称态波函数的计算) 波函数可表示为

$$\psi(x) = \begin{cases} C\mathrm{e}^{-\beta|x|}, & |x| \geqslant a/2 \\ D\cos kx, & |x| \leqslant a/2 \end{cases} \tag{3.61}$$

其中 C、D 为常数. $x = a/2$ 处 ψ 的连续性给出

$$C\mathrm{e}^{-\frac{\beta a}{2}} = D\cos\frac{ka}{2} \tag{3.62}$$

$x = a/2$ 处 ψ' 的连续性给出

$$-C\beta\mathrm{e}^{-\frac{\beta a}{2}} = -Dk\sin\frac{ka}{2} \tag{3.63}$$

式 (3.62)、式 (3.63) 相除得能级公式

$$\cot\frac{ka}{2} = \frac{k}{\beta} \tag{3.64}$$

在 $k \ll \beta$ 情形下, 上式给出

$$ka = n\pi - 0^+, \quad n = 1, 3, 5, \cdots \tag{3.65}$$

0^+ 表示正的小量. 代入式 (3.49), 给出能级公式 (与式 (3.55) 同, 只不过这里 n 取奇数).

粒子在阱内、外出现的相对概率分别为

$$P_{\text{in}} = \int_{\text{阱内}} |\psi|^2 \mathrm{d}x = 2|D|^2 \int_0^{a/2} \cos^2 kx \mathrm{d}x = |D|^2 \frac{a}{2}\left(1 + \frac{\sin ka}{ka}\right) \tag{3.66}$$

$$P_{\text{out}} = \int_{\text{阱外}} |\psi|^2 \mathrm{d}x = 2|C|^2 \int_{a/2}^{\infty} \mathrm{e}^{-2\beta x} \mathrm{d}x = \frac{|C|^2}{\beta}\mathrm{e}^{-\beta a} = |D|^2 \frac{1}{\beta}\cos^2\frac{ka}{2} \tag{3.67}$$

与式 (3.61) 相比知, P_{out} 也可表示为 $P_{\text{out}} = \frac{1}{\beta}\left|\psi\left(\frac{a}{2}\right)\right|^2$. 根据上面式 (3.66)、式 (3.67), 粒子在阱外出现的概率为

$$p_{\text{out}} = \frac{P_{\text{out}}}{P_{\text{in}} + P_{\text{out}}} = \frac{\cos^2\frac{ka}{2}}{\cos^2\frac{ka}{2} + \frac{\beta a}{2}\left(1 + \frac{\sin ka}{ka}\right)} \tag{3.68}$$

在 $V_0 \gg E_n$ 情形下, 得到结果与式 (3.59) 同.

3.9 设粒子在一维无限深势阱中运动, 试求粒子作用于势阱壁上的平均力.

提示　先考虑有限深势阱 (如图 3.9), 然后让深度 $V_0 \to \infty$. 粒子对壁的作用力

$$F(x) = \frac{\partial V}{\partial x} = V_0 \left[\delta\left(x - \frac{a}{2}\right) + \delta\left(x + \frac{a}{2}\right)\right]$$

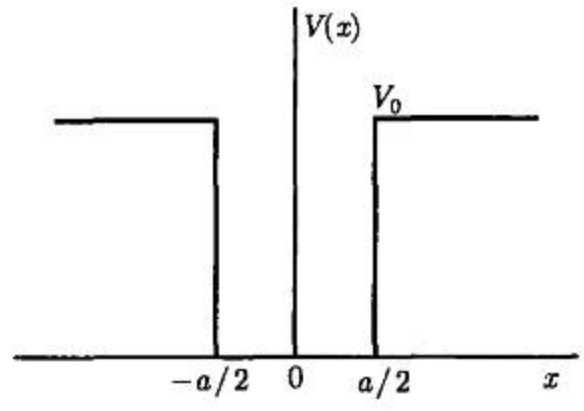

图 3.9　有限深方势阱

解　无限深方势阱可以视为有限深 (深度为 V_0) 势阱当 $V_0 \to \infty$ 的极限情形. 我们先考虑有限深势阱, 粒子所受作用力为 $-\mathrm{d}V/\mathrm{d}x$, 因而粒子对阱壁的作用力为

$$F(x) = \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x} = V_0\delta\left(x - \frac{a}{2}\right) - V_0\delta\left(x + \frac{a}{2}\right) \tag{3.69}$$

其中第一项作用于阱壁右侧 ($x = a/2$), 第二项作用于阱壁左侧 ($x = -a/2$). 这样设粒子的波函数为 $\psi(x)$, 式 (3.69) 右边第一项给出粒子作用于 $x = a/2$ 壁上的平均力为

$$\langle F_{右}\rangle = \frac{\int V_0\delta\left(x - \frac{a}{2}\right)|\psi(x)|^2\mathrm{d}x}{\int |\psi(x)|^2\mathrm{d}x} = V_0\frac{\left|\psi\left(\frac{a}{2}\right)\right|^2}{\int |\psi(x)|^2\mathrm{d}x} \tag{3.70}$$

其中积分均为全空间积分. 粒子在该势阱中运动的束缚定态波函数 $\psi(x)$ 已在题 3.8 作了求解. 利用上题结果, 无论是奇宇称态或者是偶宇称态, 均有 $\left|\psi\left(\frac{a}{2}\right)\right|^2 = \beta P_{\mathrm{out}}$, 这样作用于 $x = a/2$ 壁上的平均力为

$$\langle F_{右}\rangle = V_0\frac{\beta P_{\mathrm{out}}}{P_{\mathrm{in}} + P_{\mathrm{out}}} = \beta p_{\mathrm{out}}V_0 \tag{3.71}$$

与粒子出现在阱外概率 p_{out} 成正比. 上式中 P_{in}、P_{out} 则是指粒子在阱内、外出现的相对概率, 这里采用了题 3.8 的记号.

同样的, 取式 (3.69) 右边第二项计算给出

$$\langle F_{左}\rangle = -\langle F_{右}\rangle = -\beta p_{\mathrm{out}}V_0 \tag{3.72}$$

根据粒子处于奇宇称定态或者是偶宇称定态, 粒子出现在阱外概率 p_{out} 分别由上题的式 (3.58) 或者式 (3.68) 给出. 在 $V_0 \gg E$ 的情况下, 则 p_{out} 均可由式 (3.59) 给出, 即

$$p_{\mathrm{out}} \approx \frac{2E_n}{a\beta V_0} \tag{3.73}$$

代入式 (3.71) 得

$$\langle F_{右}\rangle \approx \frac{2E_n}{a} \tag{3.74}$$

V_0/E 越大, 上式越精确. 在 $V_0 \to \infty$, 即无限深势阱, 上式取等号①.

说明 1　一维束缚定态 ψ_n 下必有

$$\left\langle\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle_n = 0$$

只要对 ψ_n 所满足的定态 Schrödinger 方程两边乘以 $\frac{\mathrm{d}\psi_n}{\mathrm{d}x}$ 之后, 两边对全空间积分即得上式. 而此式说明了为何 $\langle F_{左}\rangle = -\langle F_{右}\rangle$.

① 这一点, 也可令精确等式 $\left\langle F_{右}\right\rangle = \beta p_{\mathrm{out}}V_0$ 中 $V_0 \to \infty$ 得到.

说明 2　式 (3.74) 可作解释: 若固定无限深势阱壁左侧而令右侧缓慢向外移动微小距离 Δa, 则粒子对外做功 $\langle F_{右}\rangle \Delta a$, 结果导致能级降低, 根据能量守恒定律, 应有

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

与式 (3.74) 一致.

说明 3　(经典考虑) 在无限深方势阱中, 粒子速度大小为 v, 则粒子往返运动周期 $T = \dfrac{2a}{v}$. 右边势阱壁受到平均作用力为

$$\overline{F}_{右} = -\frac{-mv - mv}{T} = \frac{2mv}{2a/v} = \frac{mv^2}{a} = \frac{2E}{a} \tag{3.75}$$

右边势阱壁受到平均作用力为

$$\overline{F}_{左} = -\frac{2E}{a} = -\overline{F}_{右} \tag{3.76}$$

这与定态情形的结果一致.

说明 4　式 (3.74) 对于奇宇称、偶宇称的定态均成立, 都表示为 2 倍能量除以阱宽. 若是非定态 (即定态的叠加态) 的情形, 很容易认为结果就是 2 倍平均能量除以阱宽, 但结果并非如此. 试设粒子的初态为 ϕ, 已归一化. 则按式 (3.70)

$$\langle F_{右}\rangle = V_0\left|\phi\left(\frac{a}{2}\right)\right|^2 \tag{3.77}$$

设题 3.8 所求奇宇称、偶宇称定态 ψ_n 的归一化态记为 ϕ_n. 任意给定的归一化初态 ϕ, 必可表示为 ϕ_n 的展开, 即

$$\phi = \sum_{n=1}^{\infty} C_n\phi_n, \quad C_n = \int_{-\infty}^{+\infty}\phi_n^*(x)\phi(x)\mathrm{d}x \tag{3.78}$$

上式代入式 (3.77), 得

$$\langle F_{右}\rangle = V_0\sum_n |C_n|^2\left|\phi_n\left(\frac{a}{2}\right)\right|^2 + V_0\sum_{m\neq n} C_m^*C_n\phi_m^*\left(\frac{a}{2}\right)\phi_n\left(\frac{a}{2}\right) \tag{3.79}$$

同理可得

$$-\langle F_{左}\rangle = V_0\sum_n |C_n|^2\left|\phi_n\left(\frac{a}{2}\right)\right|^2 + V_0\sum_{m\neq n} C_m^*C_n(-1)^{m+n}\phi_m^*\left(\frac{a}{2}\right)\phi_n\left(\frac{a}{2}\right) \tag{3.80}$$

上式已经考虑了 ϕ_n 的宇称性质. 可见 $(-\langle F_{左}\rangle)$ 与 $\langle F_{右}\rangle$ 的表达式的第一项相等, 但交叉求和项不一定相等, 因而一般 $\langle F_{左}\rangle \neq -\langle F_{右}\rangle$, 这与定态情形不同.

进一步计算需要知道各归一化定态波函数 ϕ_n 在 $x = a/2$ 处的值. 这可由题 3.8 的结果得到. 题 3.8 给出, 各定态波函数 ψ_n(未归一化)$x = a/2$ 处的值满足

$$\left|\psi_n\left(\frac{a}{2}\right)\right|^2 = \beta P_{\text{out}}^{(n)} \tag{3.81}$$

其中 $P_{\text{out}}^{(n)}$ 是该态下粒子在阱外的相对概率. 因而对于由 ψ_n 作归一化 (不妨设乘以正实数) 得到的 ϕ_n, 必有

$$\left|\phi_n\left(\frac{a}{2}\right)\right|^2 = \beta p_{\text{out}}^{(n)} \tag{3.82}$$

其中 $p_{\text{out}}^{(n)}$ 是该态下粒子在阱外的相对概率. ϕ_n 是一维束缚定态, 可取为实数. 既然式 (3.82) 确定

了 $\phi_n\left(\frac{a}{2}\right)$ 的模长, 我们只需再定出 $\phi_n\left(\frac{a}{2}\right)$ 的正负号即可确定 $\phi_n\left(\frac{a}{2}\right)$. 设 ϕ_n 是通过对 ϕ_n 乘以正实数得到的归一化态, 则 $\phi_n\left(\frac{a}{2}\right)$ 与 $\psi_n\left(\frac{a}{2}\right)$ 的正负号相同. 通过题 3.8 的式 (3.50)、式 (3.54) 以及式 (3.61)、式 (3.65), 不妨设那里的常数 B, D 都是正数, 则得

$$\operatorname{sign}\left[\phi_n\left(\frac{a}{2}\right)\right]=\operatorname{sign}\left[\psi_n\left(\frac{a}{2}\right)\right]=(-1)^{\left[\frac{n-1}{2}\right]} \tag{3.83}$$

(-1) 的幂指数上面的 $[\,]$ 表示取整数. 在 $V_0 \gg E$ 的情况下, 则 p_{out} 均可由式 (3.57) 给出, 再综合式 (3.82)、式 (3.83) 得

$$\phi_n\left(\frac{a}{2}\right)=(-1)^{\left[\frac{n-1}{2}\right]}\sqrt{\frac{2E_n}{aV_0}} \tag{3.84}$$

把上面结果代入式 (3.79) 以及式 (3.80), 并利用 ϕ 的归一化条件得

$$\langle F_{右}\rangle=\frac{1}{2a}\langle E\rangle+\frac{1}{2a}\sum_{m\neq n}C_m^*C_n(-1)^{\left[\frac{m-1}{2}\right]+\left[\frac{n-1}{2}\right]}\sqrt{E_mE_n} \tag{3.85}$$

$$-\langle F_{左}\rangle=\frac{1}{2a}\langle E\rangle+\frac{1}{2a}\sum_{m\neq n}C_m^*C_n(-1)^{m+n+\left[\frac{m-1}{2}\right]+\left[\frac{n-1}{2}\right]}\sqrt{E_mE_n} \tag{3.86}$$

上面是对初始时刻状态 ϕ 作的计算. 若对 t 时刻作计算, 则只需将上面两式中的系数作下面替换即可

$$C_n\to C_n\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt/\hbar},\quad C_m^*\to C_m\mathrm{e}^{\mathrm{i}E_mt/\hbar}$$

将呈现出在非定态下, 粒子对势阱壁的平均作用力随时间变化的特征.

例如取初态为

$$\phi_a=\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1+\phi_2)$$

则 $C_1=C_2=\frac{1}{\sqrt{2}}$, 代入式 (3.85)、式 (3.86) 计算得

$$\langle F_{右}\rangle_a=\frac{1}{2a}\left(\frac{E_1+E_2}{2}+\sqrt{E_1E_2}\right),\quad \langle F_{左}\rangle_a=\frac{1}{2a}\left(-\frac{E_1+E_2}{2}+\sqrt{E_1E_2}\right)$$

上面对 E_1、E_2 的算术平均来源于态下能量的平均, 而几何平均来源于式 (3.85) 中的交叉项的求和, 二者量级相同. 将无限深方势阱能级结果 $E_2=4E_1$ 代入得

$$\langle F_{右}\rangle_a=\frac{9E_1}{4a},\quad \langle F_{左}\rangle_a=-\frac{E_1}{4a}$$

若取

$$\phi_b=\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1-\phi_2)$$

则 $C_1=-C_2=\frac{1}{\sqrt{2}}$, 代入式 (3.85)、式 (3.86) 计算得

$$\langle F_{右}\rangle_b=\frac{1}{2a}\left(\frac{E_1+E_2}{2}-\sqrt{E_1E_2}\right)=\frac{E_1}{4a},\quad \langle F_{左}\rangle_b=\frac{1}{2a}\left(-\frac{E_1+E_2}{2}-\sqrt{E_1E_2}\right)=-\frac{9E_1}{4a}$$

若取

$$\phi_c=\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1+\mathrm{i}\phi_2)$$

则代入式 (3.85)、式 (3.86) 计算得

$$\langle F_{右}\rangle_c=\frac{1}{2a}\left(\frac{E_1+E_2}{2}+0\right)=\frac{5E_1}{4a},\quad \langle F_{左}\rangle_c=-\frac{5E_1}{4a}$$

上面计算和例子表明, 对于非定态 (即定态的迭加态) 的情形, 粒子对于阱壁的作用力一般并非是 2 倍平均能量除以阱宽, 而且一般左边阱壁与右边阱壁某一时刻受到的作用力并不相等.

3.10 考虑粒子 ($E>0$) 在下列阶跃势 (图 3.10) 壁 ($x=0$) 处的反射系数.

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

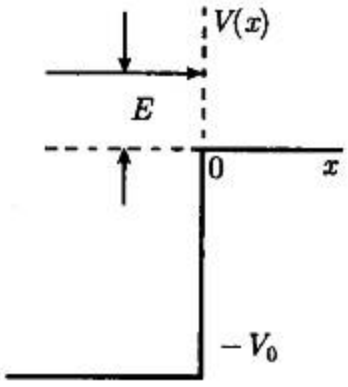

图 3.10 阶跃势对粒子的散射

解 阶跃势的势能函数分为两个区域. 对于 $x<0$ 区域, 粒子波函数方程 $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x)-V_0\psi(x)=E\psi(x)$, 即为 $\psi''(x)+\frac{2m}{\hbar^2}(E+V_0)\psi(x)=0$, 或者

$$\psi''(x)+k'^2\psi(x)=0$$

其中 $k'=\sqrt{2m(E+V_0)}/\hbar$, 上式解得

$$\psi(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'x}+r\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'x} \tag{3.87}$$

对于 $x>0$ 区域, 粒子波函数方程 $-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)=E\psi(x)$, 或者

$$\psi''(x)+k^2\psi(x)=0$$

其中 $k=\sqrt{2mE}/\hbar$. 上式满足边界条件的波函数为

$$\psi(x)=s\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \tag{3.88}$$

由式 (3.87) 得, 入射粒子流密度与反射粒子流密度分别为

$$j_i=\frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'x}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'x}-\mathrm{c.c.}\right)=\frac{\hbar k'}{m},\qquad j_r=-|r|^2j_i$$

由式 (3.88) 得, 透射粒子流密度为

$$j_s=\frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}-\mathrm{c.c.}\right)|s|^2=\frac{\hbar k}{m}|s|^2=\frac{k}{k'}|s|^2j_i$$

$x=0$ 点波函数及导数的连续性给出

$$1+r=s \tag{3.89}$$

$$1-r=\frac{k}{k'}s \tag{3.90}$$

式 (3.89) 与 (3.90) 两式相加得

$$2=\left(1+\frac{k}{k'}\right)s,\quad s=\frac{2k'}{k+k'}$$

式 (3.89)、式 (3.90) 两式相减得

$$2r=\left(1-\frac{k}{k'}\right)s=\frac{k'-k}{k'}\cdot\frac{2k'}{k+k'}=2\frac{k'-k}{k+k'}$$

即得

$$r=\frac{k'-k}{k+k'},\ s=\frac{2k'}{k+k'}$$

再把 k,k' 与能量 E 的关系代入得

$$r=\frac{\sqrt{E+V_0}-\sqrt{E}}{\sqrt{E+V_0}+\sqrt{E}},\quad s=\frac{2\sqrt{E+V_0}}{\sqrt{E+V_0}+\sqrt{E}}$$

因而所求的反射系数为

$$\left|\frac{j_r}{j_i}\right|=|r|^2=\frac{V_0^2}{\left(\sqrt{E+V_0}+\sqrt{E}\right)^4}$$

3.11 试证明对于任意势垒 (如图 3.11), 粒子的反射系数 R 及透射系数 S 满足 $R+S=1$ (取 $E>V_0$).

证明 因势函数 $V(x)$ 没有给定, 故无法求解反射与透射波函数, 因而无法计算相应的概率流密度. 但对于如图势垒, 我们注意到势函数 $V(x)$ 满足

$$\lim_{x\to-\infty}V(x)=0,\quad \lim_{x\to\infty}V(x)=V_0 \tag{3.91}$$

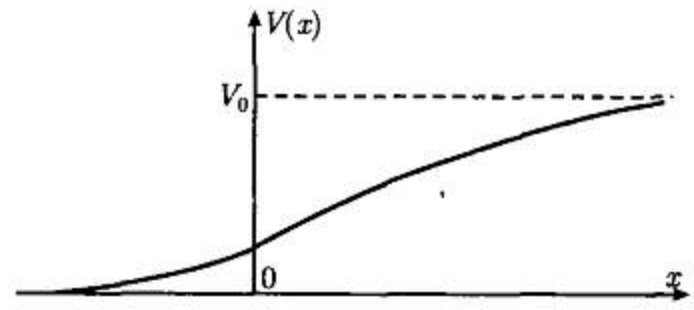

图 3.11 势垒的势函数

故由此考查波函数 $\psi(x)$ 的渐近行为. 当 $x\to-\infty$ 时波函数可取为

$$\psi(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1x}+r\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1x} \tag{3.92}$$

其中 $k_1=\sqrt{2mE}/\hbar$. 式 (3.92) 表示为入射波与反射波的叠加. 入射粒子流密度与反射粒子流密度分别为

$$j_i=\frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1x}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1x}-\text{c.c.}\right)=\frac{\hbar k_1}{m},\qquad j_r=-|r|^2j_i$$

因而反射系数为

$$R=\left|\frac{j_r}{j_i}\right|=|r|^2$$

$x\to\infty$ 时波函数可取为

$$\psi(x)=s\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_2x} \tag{3.93}$$

其中 $k_2=\sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar$. 式 (3.93) 表示透射波, 透射粒子流密度为

$$j_s=|s|^2\frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_2x}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_2x}-\text{c.c.}\right)=|s|^2\frac{\hbar k_2}{m}=|s|^2\frac{k_2}{k_1}j_i$$

故透射系数为

$$S=\frac{j_s}{j_i}=|s|^2\frac{k_2}{k_1}$$

在 x 轴上任取两点 x_1,x_2. 由于定态条件, x_1,x_2 之间粒子的总概率不变, 根据粒子概率守恒 ($V(x)$ 是实函数), x_1,x_2 两点的概率流密度相等 ($j_1=j_2$). 可见对于一维定态问题, 概率流密度处处相等. 现在取 $x_1=-\infty$, $x_2=\infty$. 由式 (3.92), $x=-\infty$ 处粒子流密度为

$$j_{-\infty}=\frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}\left[\psi^*(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi(x)-\text{c.c.}\right]\Big|_{x=-\infty}=j_i+j_r=\left(1-|r|^2\right)j_i=(1-R)\,j_i$$

由式 (3.93), $x=\infty$ 处粒子流密度为

$$j_\infty = \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi^*(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi(x) - \text{c.c.}\right]\Big|_{x=\infty} = j_s = |s|^2\frac{k_2}{k_1}j_i = Sj_i$$

这样, $j_{-\infty} = j_\infty$ 给出 $R+S=1$.

3.12 设 $V(x) = \dfrac{-V_0}{\exp(x/a)+1}$ (如图 3.12), 其中 V_0, a 为正的常数量, 试求该势垒对于质量为 m、能量为 E 的粒子的反射系数 R.

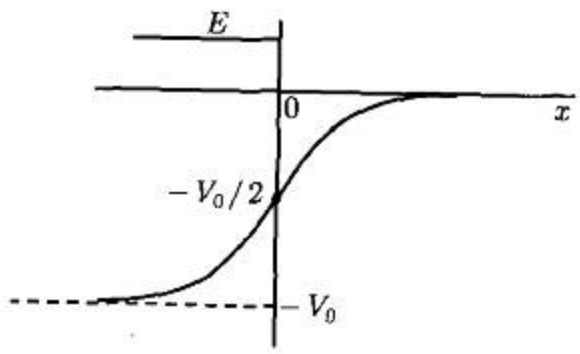

图 3.12 势垒 $V(x) = \dfrac{-V_0}{\exp(x/a)+1}$

解 题给势场中, 粒子散射定态 ψ 满足的 Schrödinger 方程为

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{V_0}{\mathrm{e}^{x/a}+1}\right)\psi = 0 \tag{3.94}$$

散射边条件为

$$\psi = \begin{cases} C_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_2x} + C_2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_2x}, & x\to-\infty \\ \text{const}\times s\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1x}, & x\to+\infty \end{cases} \tag{3.95}$$

其中 $k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$, $k_2 = \sqrt{2m(E+V_0)}/\hbar$. 作变量代换

$$\xi = -\mathrm{e}^{-x/a}, \quad -\infty < \xi < 0 \tag{3.96}$$

同时令

$$\psi = \xi^{-\mathrm{i}k_2a}u(\xi) \tag{3.97}$$

其中 $u(\xi)$ 当 $\xi\to 0$(即 $x\to\infty$) 时应趋于一个常数. 将式 (3.97) 代入式 (3.94), 注意 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} = \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\dfrac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}x} = -\dfrac{1}{a}\xi\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}$, 通过演算可得

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi &= -\frac{1}{a}\xi\left[-\mathrm{i}k_2a\xi^{-\mathrm{i}k_2a-1}u(\xi) + \xi^{-\mathrm{i}k_2a}u(\xi)\right] = \mathrm{i}k_2\xi^{-\mathrm{i}k_2a}u(\xi) - \frac{1}{a}\xi^{-\mathrm{i}k_2a+1}u'(\xi) \\
\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi &= -\frac{1}{a}\xi\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi \\
&= -\frac{1}{a}\xi\left\{\mathrm{i}k_2(-\mathrm{i}k_2a)\xi^{-\mathrm{i}k_2a}u(\xi) + \left(\mathrm{i}k_2 - \frac{1-\mathrm{i}k_2a}{a}\right)\xi^{-\mathrm{i}k_2a}u'(\xi) - \frac{1}{a}\xi^{-\mathrm{i}k_2a+1}u''(\xi)\right\}
\end{aligned}$$

另外

$$\frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{V_0}{\mathrm{e}^{x/a}+1}\right)\psi = \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + V_0 - \frac{V_0}{\mathrm{e}^{-x/a}+1}\right)\psi = \left(k_2^2 - \frac{k_2^2-k_1^2}{1-\xi}\right)\xi^{-\mathrm{i}k_2a}u(\xi)$$

结果式 (3.94) 化为如下关于 $u(\xi)$ 的方程

$$\xi(1-\xi)u'' - (1-2\mathrm{i}k_2a)(1-\xi)u' + (k_2^2-k_1^2)a^2u = 0 \tag{3.98}$$

式 (3.98) 是一个超几何方程①

$$H(\alpha,\beta,\gamma,\xi) = 0 \tag{3.99}$$

① 王竹溪, 郭敦仁. 特殊函数概论, 北京: 北京大学出版社, 2000. 本题有关的参考 p.131~133, p.157.

它的参数如下给出：

$$\begin{cases} \alpha+\beta+1=1-2\mathrm{i}k_2a \\ \alpha\beta=\left(k_1^2-k_2^2\right)a^2 \\ \gamma=-\left(1+2\mathrm{i}k_2a\right) \end{cases} \quad \text{或} \quad \begin{cases} \alpha=\mathrm{i}\left(k_1-k_2\right)a \\ \beta=-\mathrm{i}\left(k_1+k_2\right)a \\ \gamma=-2\mathrm{i}k_2a+1 \end{cases}$$

其解为超几何函数

$$u=\mathrm{F}\left[\mathrm{i}\left(k_1-k_2\right)a,-\mathrm{i}\left(k_1+k_2\right)a,-2\mathrm{i}k_2a+1,\xi\right] \tag{3.100}$$

超几何方程 (3.99) 的另一个解 $\xi^{1-\gamma}\mathrm{F}(\alpha-\gamma+1,\beta-\gamma+1,2-\gamma,\xi)$ 不满足边界条件, 弃之.

求反射系数要关心 $x\to-\infty$ 波函数 ψ 的渐近行为, 此时 $\xi\to-\infty$. 利用超几何函数满足的如下等式：

$$\begin{aligned} \mathrm{F}(\alpha,\beta,\gamma;z)=&\frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\beta-\alpha)}{\Gamma(\beta)\Gamma(\gamma-\alpha)}\left(-\frac{1}{z}\right)^{\alpha}\mathrm{F}\left(\alpha,\alpha+1-\gamma,\alpha+1-\beta,\frac{1}{z}\right) \\ &+\frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\alpha-\beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\gamma-\beta)}\left(-\frac{1}{z}\right)^{\beta}\mathrm{F}\left(\beta,\beta+1-\gamma,\beta+1-\alpha,\frac{1}{z}\right) \end{aligned} \tag{3.101}$$

[要求 $|\arg(-z)|<\pi$]以及 $\mathrm{F}(\alpha,\beta,\gamma;0)=1$, 式 (3.97)、式 (3.100) 给出当 $\xi\to-\infty$(即 $x\to-\infty$) 时波函数 ψ 的渐近式为

$$\psi\approx\xi^{-\mathrm{i}k_2a}\left[C_1(-\xi)^{\mathrm{i}(k_2-k_1)a}+C_2(-\xi)^{\mathrm{i}(k_2+k_1)a}\right]=(-\xi)^{-\mathrm{i}k_2a}\left[C_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1x}+C_2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1x}\right] \tag{3.102}$$

其中

$$C_1=\frac{\Gamma(-2\mathrm{i}k_1a)\Gamma(-2\mathrm{i}k_2a+1)}{\Gamma[-\mathrm{i}(k_1+k_2)a]\Gamma[-\mathrm{i}(k_1+k_2)a+1]},\quad C_2=\frac{\Gamma(2\mathrm{i}k_1a)\Gamma(-2\mathrm{i}k_2a+1)}{\Gamma[\mathrm{i}(k_1-k_2)a]\Gamma[\mathrm{i}(k_1-k_2)a+1]}$$

这样所求的反射系数 $R=\left|C_2/C_1\right|^2$. 利用公式

$$\Gamma(x)\Gamma(1-x)=\frac{\pi}{\sin\pi x}$$

以及 $\sin\mathrm{i}x=\mathrm{i}\sinh x$ 可得到

$$R=\left(\frac{\sinh[\pi(k_1-k_2)a]}{\sinh[\pi(k_1+k_2)a]}\right)^2 \tag{3.103}$$

由式 (3.103) 可见, 当 $E\to0(k_1\to0)$ 时 R 变为 1, 即全反射. 由 sinh 函数的性质, R 不存在零点, 即不存在全透的情况, 只有当 $E\to\infty$ 时, $k_2\approx k_1=\sqrt{2mE}/\hbar$, $k_1-k_2\approx-k_1\dfrac{V_0}{2E}\to0$), 代入式 (3.103) 可知此时 R 按下面规律趋于零：

$$R=\left(\frac{\pi V_0a}{\hbar}\right)^2\frac{2m}{E}\mathrm{e}^{-\frac{4\pi a}{\hbar}\sqrt{2mE}}$$

也就是在经典力学极限情形下 R 趋于 0.

3.13 考虑方势垒对粒子的散射, 如图 3.13 (取 $E<V_0$). (1) 设入射波为单色平面波

$$\exp[\mathrm{i}(kx-\omega t)],\quad \omega=E/\hbar=\hbar k^2/2m \tag{3.104}$$

求反射波函数. (2) 设入射波为波包

$$\psi_i(x,t)=\int\mathrm{d}kA(k)\exp\left[\mathrm{i}(kx-\omega t)\right] \tag{3.105}$$

其中 $A(k)$ 是以 k_0 为对称中心的分布较窄的函数. 设 ψ_i 是宽度很窄 (Δx 很小) 的波包, 求反射波函数, 写出反射波包中心的运动方程, 并求反射弛豫时间.

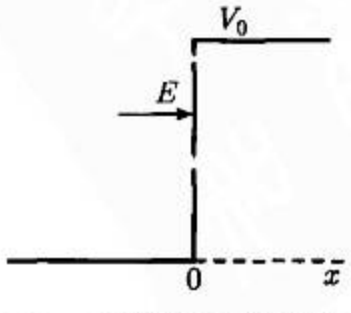

图 3.13 方势垒对粒子的散射

解 (1) 入射波为单色平面波, 粒子必处于定态 (定态散射). 定态波函数可以写成如下分离变量的形式

$$\psi(x,t)=\psi(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \tag{3.106}$$

而 $\psi(x)$ 满足能量本征方程

$$\psi''+\frac{2m}{\hbar}\left[E-V(x)\right]\psi=0 \tag{3.107}$$

若令

$$k=\sqrt{2mE}/\hbar,\quad \xi=\sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar \tag{3.108}$$

则结合边界条件, 式 (3.107) 的解可表示为

$$\psi(x)=\begin{cases}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+r\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}, & x<0\\ d\mathrm{e}^{-\xi x}, & x>0\end{cases} \tag{3.109}$$

式中 r 项为反射波, d 项为衰减波.

$x=0$ 处势函数只有有限跳跃, ψ 和 ψ' 应连续, 这给出

$$1+r=d,\quad \mathrm{i}k(1-r)=-\xi d$$

联立求解得

$$r=\frac{k-\mathrm{i}\xi}{k+\mathrm{i}\xi},\quad d=\frac{2k}{k+\mathrm{i}\xi} \tag{3.110}$$

注意 $|r|=1$, 这表明反射波和入射波振幅相等, 仅相位有所不同. 为了明确相位关系, 将 r 写为

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

而

$$\theta(k)=2\arctan\frac{\xi}{k}=2\arctan\sqrt{\frac{V_0-E}{E}} \tag{3.111}$$

从而反射波波函数可以表示为

$$\psi_r(x,t)=r\exp\left[-\mathrm{i}(kx+\omega t)\right]=\exp\left[-\mathrm{i}(kx+\omega t+\theta(k))\right] \tag{3.112}$$

其中 ω 也是入射波的频率, 即

$$\omega=\frac{E}{\hbar}=\frac{\hbar k^2}{2m} \tag{3.113}$$

反射波 (3.112) 与入射波 (3.104) 相比, 传播方向反向, 并且有一个附加的位相 $\theta(k)$.

(2) 入射波为题给的波包

$$\psi_i(x,t)=\int\mathrm{d}kA(k)\exp\left[\mathrm{i}(kx-\omega t)\right] \tag{3.114}$$

根据 Schrödinger 方程的线性性质, 反射波可如下叠加得到

$$\psi_r(x,t)=\int\mathrm{d}kA(k)\exp\left[-\mathrm{i}(kx+\omega t+\theta(k))\right] \tag{3.115}$$

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

$$\left.\frac{\partial A(k)}{\partial k}\right|_{k=k_0}=0 \tag{3.116}$$

因此, 入射波波包的中心位置由下式决定:

$$\frac{\partial}{\partial k}(kx-\omega t)\Big|_{k=k_0}=0 \tag{3.117}$$

上式的意义为, 在 $k\approx k_0$ 附近, 各分波的相位一致, 叠加的结果形成极大. 利用式 (3.113)、式 (3.117) 的解为

$$x-\frac{\hbar k_0}{m}t=0$$

这就是入射波波包中心的运动方程.

类似的, 反射波的波包中心位置由下式决定:

$$\frac{\partial}{\partial k}\left[kx+\omega t+\theta(k)\right]\Big|_{k=k_0}=0 \tag{3.118}$$

其中含有 $\dfrac{\partial\theta(k)}{\partial k}$. 为此将式 (3.111) 写成

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

两边对 k 求导, 得到

$$-\mathrm{i}\frac{\partial\theta}{\partial k}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta(k)}=\frac{\hbar^2}{2mV_0}2\left(k-\mathrm{i}\xi\right)\left(1-\mathrm{i}\frac{\partial\xi}{\partial k}\right) \tag{3.119}$$

再由式 (3.108) 知 $k^2+\xi^2=2mV_0/\hbar^2$, 即可得

$$\frac{\partial\xi}{\partial k}=-\frac{k}{\xi}$$

此式代入式 (3.119) 得

$$\frac{\partial\theta(k)}{\partial k}=-\frac{2}{\xi} \tag{3.120}$$

将上式代入式 (3.118), 即得反射波波包中心的运动方程

$$x+\frac{\hbar k_0}{m}t-\frac{2}{\xi_0}=0 \tag{3.121}$$

其中 $\xi_0=\sqrt{2m\left(V_0-E_0\right)}/\hbar$, $E_0=\hbar^2k_0^2/2m$, k_0 为入射波包的波数.

式 (3.121) 中令 $x=0$, 即得反射弛豫时间

$$t_R=\frac{2}{\xi_0v_0}=\frac{2m}{\xi_0\hbar k_0}=\frac{\hbar}{\sqrt{E_0(V_0-E_0)}}\quad\left(E_0=\frac{\hbar^2k_0^2}{2m}\right) \tag{3.122}$$

入射波能够进入势垒的有效深度约为 $1/\xi_0$, 粒子往返这段距离所需时间为

$$t_R\approx\frac{2/\xi_0}{\hbar k_0/m}=\frac{2m}{\hbar k_0\xi_0} \tag{3.122'}$$

这样得到的结果与式 (3.122) 一致. 因而弛豫时间可定性解释为粒子在其进入势垒的有效深度往返所需时间.

3.14 能量为 E 的平行粒子束以 θ 角入射到 $x=0$ 界面, 如图 3.14. 在 $x<0$ 区域 $V=0$, $x>0$ 区域 $V=V_0$. 试分析粒子束的反射和折射.

参阅 J. D. Jackson, Classical Electrodynamics, 7.3 节. 普遍结果见钱伯初、曾谨言, 《量子力

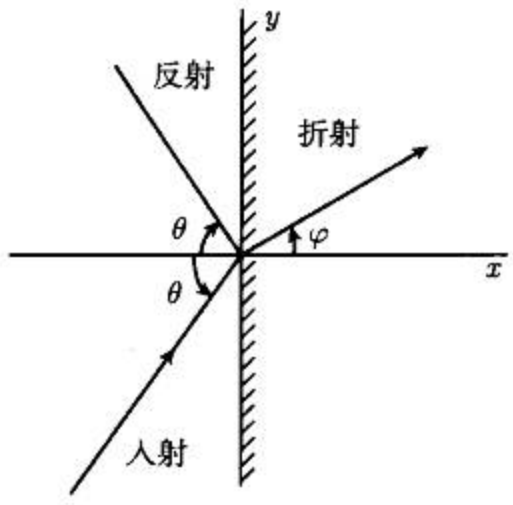

图 3.14　势跃变界面的反射与折射

学习题精选与剖析》, 第二版, 上册 (1998), 题 1.13.

解　入射、反射、折射粒子束均用平面波表示. 取入射面为 xy 平面, 则入射波可以表示为

$$\psi_0 = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{r}}, \quad \boldsymbol{k}_0 = (k_1, k_2, 0) \tag{3.123}$$

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

$$E = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_1^2 + k_2^2\right) \tag{3.124}$$

$$\theta = \arctan\frac{k_2}{k_1} = \arcsin\frac{k_2}{k_0} \tag{3.125}$$

由于 $\partial V/\partial y = \partial V/\partial z = 0$, 或者说粒子在 y, z 方向不受力, 故反射和折射时粒子动量的 y 分量和 z 分量与入射粒子相同. 以 $\boldsymbol{k}_R$ 表示反射波波矢量, 由于反射波出现于 $x < 0$ 区域, $V = 0$, 所以 $|\boldsymbol{k}_R|$ 必须等于 $|\boldsymbol{k}_0|$, 因此

$$\boldsymbol{k}_R = (-k_1, k_2, 0) \tag{3.126}$$

与式 (3.123) 比较知, 反射角等于入射角. 这就是反射定律.

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

$$\hbar^2\boldsymbol{k}_D^2/2m = E + V_0 \tag{3.127}$$

$\boldsymbol{k}_D$ 的直角坐标分量可以写成

$$\boldsymbol{k}_D = (k, k_2, 0) \tag{3.128}$$

由式 (3.124)、式 (3.127) 以及式 (3.128) 易见, k 和 k_1 间有下列关系:

$$k^2 - k_1^2 = 2mV_0/\hbar^2 \tag{3.129}$$

设折射角为 φ, 则有

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

也就有

$$\frac{\sin\theta}{\sin\varphi} = \left(1 + \frac{V_0}{E}\right)^{1/2} = n \tag{3.130}$$

称 n 为折射率, 则式 (3.130) 相当于光学中的折射定律.

到此确定了反射、折射波的波数, 也即确定了各自的传播方向. 下面再根据边界处波函数的连接条件求入射、反射、折射波的振幅及相位关系. 不妨设

$$\text{入射波} \qquad \psi_i = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{r}} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_1x + k_2y)} \tag{3.131}$$

$$\text{反射波} \qquad \psi_r = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_R\cdot\boldsymbol{r}} = r\mathrm{e}^{\mathrm{i}(-k_1x + k_2y)} \tag{3.132}$$

$$\text{折射波} \qquad \psi_d = d\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_D\cdot\boldsymbol{r}} = d\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx + k_2y)} \tag{3.133}$$

系数 r, d 待定, 一般是复数. 根据边界处波函数及其导数的连续性, 即有

$$(\psi_0 + \psi_r)|_{x=0} = \psi_d|_{x=0} \tag{3.134}$$

$$\left(\frac{\partial\psi_0}{\partial x} + \frac{\partial\psi_r}{\partial x}\right)\bigg|_{x=0} = \left.\frac{\partial\psi_d}{\partial x}\right|_{x=0} \tag{3.135}$$

上面两式中代入入射、反射、折射波的波函数式 (3.131)、式 (3.132)、式 (3.133) 即得

$$1+r=d, \quad (1-r)k_1=dk$$

联立求解

$$r=\frac{k_1-k}{k_1+k}, \quad d=\frac{2k_1}{k_1+k} \tag{3.136}$$

由于 $k_1<k$, 所以 r 是负实数, d 是正实数. 亦即折射波和入射波同相, 反射波和入射波反相. 根据折射波和入射波波数的角度关系

$$\begin{aligned} k_1 &= k_0\cos\theta = k_0\sqrt{1-\sin^2\theta} \\ k &= k_D\cos\phi = k_0\sqrt{n^2-\sin^2\theta} \end{aligned} \tag{3.137}$$

式 (3.136) 可以写成

$$r=\frac{\cos\theta-\sqrt{n^2-\sin^2\theta}}{\cos\theta+\sqrt{n^2-\sin^2\theta}}, \quad d=\frac{2\cos\theta}{\cos\theta+\sqrt{n^2-\sin^2\theta}} \tag{3.138}$$

根据概率密度流公式

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

我们可以求得入射粒子流量为 $\hbar k_1/m$, 反射粒子流量为 $\hbar k_1|r|^2/m$, 折射粒子流量为 $\hbar k|d|^2/m$, 所以

$$\frac{\text{反射流强度}}{\text{入射流强度}}=|r|^2=\left(\frac{\cos\theta-\sqrt{n^2-\sin^2\theta}}{\cos\theta+\sqrt{n^2-\sin^2\theta}}\right)^2=\left(\frac{k_1-k}{k_1+k}\right)^2 \tag{3.139}$$

$$\frac{\text{折射流强度}}{\text{入射流强度}}=\frac{k}{k_1}|d|^2=\frac{4kk_1}{(k_1+k)^2} \tag{3.140}$$

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

$$\frac{\text{反射流强度}}{\text{入射流强度}}=\frac{(n-1)^2}{(n+1)^2}, \quad \frac{\text{折射流强度}}{\text{入射流强度}}=\frac{4n}{(n+1)^2} \tag{3.141}$$

3.15 粒子在如图 3.15 所示势场中运动

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

(1) 求能级公式. (2) 讨论极限情况, $a\to 0$, $V_0\to\infty$, 但 $2aV_0=\gamma$(有限值).

解 (1) 由于 $V(x)\geqslant 0$, 所以 $E>0$. 因位势具有反射对称性, 所以能量本征态有确定宇称. 对于确定能量本征值的本征态, 在 $V(x)\to\infty$ 处, 波函数应该趋于 0, 所以在无限深方势阱外波函数恒为零, 表示为

$$\psi(x)=0, \quad |x|\geqslant L \tag{3.142}$$

(a) $E<V_0$ 情况. 令

$$k=\sqrt{2mE}/\hbar, \quad \xi=\sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar \tag{3.143}$$

能量本征方程可以写为

$$\begin{aligned} \psi''-\xi^2\psi&=0, \quad |x|<a \\ \psi''+k^2\psi&=0, \quad a<|x|<L \end{aligned} \tag{3.144}$$

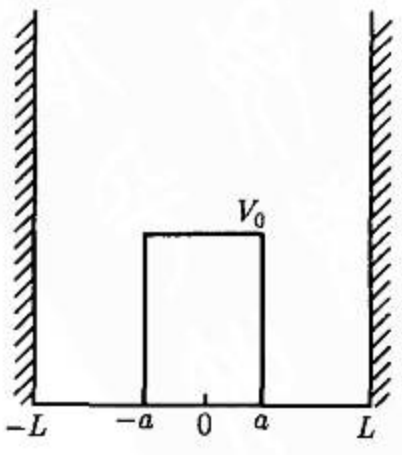

图 3.15 带有限对称势垒的无限深方势阱

满足边界条件 (3.142) 的偶宇称态解的势阱内部分波函数为

$$\psi = \begin{cases} \cosh \xi x = \dfrac{1}{2}\left(\mathrm{e}^{\xi x} + \mathrm{e}^{-\xi x}\right), & |x| < a \\ A \sin k(L-x), & a < x < L \\ A \sin k(L+x), & -L < x < -a \end{cases} \tag{3.145}$$

$x = a$ 处为势的有限跳跃点, 故波函数及其导数连续, 也就有 $(\ln \psi)'$ 连续, 由此即可得出偶宇称态能级方程

$$k \cot k(L-a) = -\xi \tanh \xi a \tag{3.146}$$

满足边界条件 (3.142) 的奇宇称态解的势阱内部分波函数为

$$\psi = \begin{cases} \sinh \xi x = \dfrac{1}{2}\left(\mathrm{e}^{\xi x} + \mathrm{e}^{-\xi x}\right), & |x| < a \\ B \sin k(L-x), & a < x < L \\ -B \sin k(L+x), & -L < x < -a \end{cases} \tag{3.147}$$

由 $x = a$ 处 $(\ln \psi)'$ 的连续条件, 即可得出奇宇称态能级方程

$$k \cot k(L-a) = -\xi \coth \xi a \tag{3.148}$$

(b) $E > V_0$ 情况, 令

$$\eta = \sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar \tag{3.149}$$

能量本征方程可以写为

$$\begin{aligned} &\psi'' + \eta^2 \psi = 0, \quad |x| < a \\ &\psi'' + k^2 \psi = 0, \quad a < |x| < L \end{aligned} \tag{3.150}$$

满足边界条件 (3.142) 的偶宇称态解的势阱内部分波函数为

$$\psi = \begin{cases} \cos \eta x = \dfrac{1}{2}\left(\mathrm{e}^{\xi x} + \mathrm{e}^{-\xi x}\right), & |x| < a \\ C \sin k(L-x), & a < x < L \\ C \sin k(L+x), & -L < x < -a \end{cases} \tag{3.151}$$

由 $x = a$ 处 $(\ln \psi)'$ 的连续条件, 即可得出偶宇称态能级方程

$$k \cot k(L-a) = \eta \tan \eta a \tag{3.152}$$

满足边界条件 (3.142) 的奇宇称态解的势阱内部分波函数为

$$\psi = \begin{cases} \sin \eta x, & |x| < a \\ D \sin k(L-x), & a < x < L \\ -D \sin k(L+x), & -L < x < -a \end{cases} \tag{3.153}$$

由 $x = a$ 处 $(\ln \psi)'$ 的连续条件, 即可得出奇宇称态能级方程

$$k \cot k(L-a) = -\eta \cot \eta a \tag{3.154}$$

(2) $a \to 0$, $V_0 \to \infty$, 但 $2aV_0 = \gamma$, 此时

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

这种极限情况相当于在 $x = 0$ 处存在一个 δ 势垒

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

可取近似

$$\xi^2 a \approx 2mV_0 a/\hbar^2 = m\gamma/\hbar^2, \quad \xi a \ll 1 \tag{3.155}$$

这样对于偶宇称态, 式 (3.146) 右边为

$$\xi \tanh \xi a \approx m\gamma/\hbar^2 \approx \xi^2 a \approx m\gamma/\hbar^2$$

从而式 (3.146) 变为

$$k \cot k(L-a) = -m\gamma/\hbar^2 \tag{3.156}$$

而对于奇宇称态, 式 (3.148) 右边 $\to -\infty$, 因而

$$\tan k(L-a) = \tan kL \to 0$$

其解为 $k = \dfrac{n\pi}{L}$, 其中 $n = 1, 2, 3, \cdots$, 故能级为

$$E = \frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi h}{L}\right)^2 \tag{3.157}$$

结果等价于平底无限深势阱, 因为奇宇称态 $\psi(0) = 0$, 故 $x = 0$ 处的 $\delta-$ 势垒不起作用.

以上式 (3.156)、式 (3.157) 与题 3.25 相应结果一致.

3.16 设质量为 m 的粒子在下列势阱中运动:

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 \\ \dfrac{1}{2}m\omega^2 x^2, & x > 0 \end{cases}$$

求粒子的能级.

解 $x < 0$ 区域, 粒子的波函数 $\phi(x)$ 满足 $\phi(x) \equiv 0$. $x > 0$ 区域粒子的波函数满足边界条件 $\phi(0) = 0$, $\phi(\infty) = 0$, 与普通谐振子能量本征态比较知粒子能量本征态为

$$\phi_n(x) = \sqrt{2}\psi_{2n+1}(x), \quad n = 0, 1, 2, \cdots$$

其中 $\psi_{2n+1}(x)$ 即为普通谐振子的奇宇称波函数, 而粒子能量本征值为

$$E_n = \left(2n + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \cdots$$

3.17 设在一维无限深势阱 (图 3.1) 中运动的粒子的状态用

$$\psi(x) = \frac{4}{\sqrt{a}} \sin\frac{\pi x}{a} \cos^2\frac{\pi x}{a}$$

描述, 求粒子能量的可能测值及相应的概率.

解 粒子第 n 个定态波函数为[①]

$$\psi_n(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi x}{a}, & 0<x<a\\ 0, & x<0,\ x>a\end{cases}\tag{3.158}$$

其中 n 取正整数, 而相应的能量为 $E_n=\dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$. 题给粒子状态的波函数阱内部分为

$$\begin{aligned}\psi(x)&=\frac{4}{\sqrt{a}}\sin\frac{\pi x}{a}\cos^2\frac{\pi x}{a}=\frac{2}{\sqrt{a}}\sin\frac{\pi x}{a}\left(1+\cos\frac{2\pi x}{a}\right)\\&=\frac{1}{\sqrt{a}}\left(2\sin\frac{\pi x}{a}+\sin\frac{3\pi x}{a}-\sin\frac{\pi x}{a}\right)=\frac{1}{\sqrt{a}}\sin\frac{\pi x}{a}+\frac{1}{\sqrt{a}}\sin\frac{3\pi x}{a}\end{aligned}$$

对照式 (3.158), 题给粒子状态的波函数可表示为

$$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2}}\psi_1(x)+\frac{1}{\sqrt{2}}\psi_3(x)\tag{3.159}$$

即 ψ_1 与 ψ_3 的叠加, 其概率幅均为 $\dfrac{1}{\sqrt{2}}$, 而其概率均为 $\dfrac{1}{2}$. 因此该粒子能量可能测值为

$$E_1=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2},\quad \frac{9\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

相应的概率均为 1/2.

3.18 写出在动量表象中谐振子的定态 Schrödinger 方程, 并求出动量概率分布.

解 一维无限谐振子的 Hamilton 量为

$$H=\frac{1}{2\mu}\hat{p}^2+\frac{1}{2}\mu\omega^2\hat{x}^2$$

在坐标表象中

$$\hat{x}=x,\quad \hat{p}^2=-\hbar^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$$

在动量表象中

$$\hat{p}=p,\quad \hat{x}^2=-\hbar^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}p^2}$$

这两个算符在两个表象中的关系是完全对称的, 考虑到 Hamilton 量里两个算符前面的系数, 只要作变换

$$\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2\to\frac{1}{2\mu}p^2$$

或 $x\to p/\mu\omega$ 就可以. 动量表象中谐振子的定态 Schrödinger 方程

$$\left(\frac{p^2}{2m}-\frac{m\omega^2\hbar^2}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}p^2}\right)\varphi(p)=E\varphi(p)$$

谐振子坐标表象中的能量本征波函数可见教材[②], 于是得到动量表象中相应于能量本征值

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

---

① 曾谨言, 量子力学 (第四版卷 I)[M], 北京: 科学出版社, 2007, p.65~66.
② 曾谨言, 量子力学 (第四版卷 I)[M], 北京: 科学出版社, 2007, p83.

的能量本征波函数为

$$\varphi_n(p)=N'_n\mathrm{H}_n(\alpha p/\mu\omega)\mathrm{e}^{-\alpha^2p^2/2\mu\omega}=N'_n\mathrm{H}_n(\beta p)\mathrm{e}^{-\beta^2p^2/2}$$

其中 $\beta=\alpha/\mu\omega=1/\sqrt{\mu\hbar\omega}$, 归一化系数 $N'_n=\dfrac{1}{\sqrt{2^n\cdot n!}}$. 由此可得定态动量概率分布

$$|\varphi_n(p)|^2=\frac{1}{2^n\cdot n!}\exp(-p^2/\mu\hbar\omega)\left[\mathrm{H}_n(p/\sqrt{\mu\hbar\omega})\right]^2$$

3.19 质量为 m 的粒子在谐振子势 $V_1(x)=\dfrac{1}{2}Kx^2(K>0)$ 中运动, 处于基态. (1) 如弹性系数突然增大一倍, 即势场突然变为 $V_2(x)=Kx^2$, 随即测量粒子能量, 求粒子处于 V_2 势场的基态的概率. (2) 势场由 V_1 突变为 V_2 后, 不进行测量, 经过一段时间 τ 后, 让势场重新恢复成 V_1. 问 τ 取什么值时, 粒子正好恢复到原来势场 τ 的基态 (概率 100%)?

解 (1) 粒子的波函数 $\psi(x,t)$ 随时间的变化应满足 Schrödinger 方程

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

因此当 V 发生突变 (由 V_1 突变为 V_2), 但变化量有限时, $\psi(x,t)$ 仍是 t 的连续函数, 亦即 V 突变时 $\psi(x,t)$ 不变.

V_1 场和 V_2 场的基态波函数分别记为 ψ_0 和 ϕ_0, 当势场突然由 V_1 变成 V_2 的瞬时, 粒子的波函数仍为势场突变前所处的 ψ_0. 在 ψ_0 态测得粒子处于 ϕ_0 态的概率为 $|\langle\phi_0\,|\psi_0\rangle|^2$.

将题给的势场突变前后的谐振子势 V_1 以及 V_2 如下用各自的自然频率表示:

$$V_1(x)=\frac{1}{2}kx^2=\frac{1}{2}m\omega_1^2x^2,\quad \omega_1^2=\frac{k}{m} \tag{3.160}$$

$$V_2(x)=kx^2=\frac{1}{2}m\omega_2^2x^2\quad \omega_2^2=\frac{2k}{m} \tag{3.161}$$

因而

$$\omega_2=\sqrt{2}\omega_1 \tag{3.162}$$

谐振子基态波函数可见教材①, 这样 ψ_0 和 ϕ_0 如下写出:

$$\psi_0(x)=\frac{\sqrt{\alpha}}{\pi^{1/4}}\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2/2},\quad \alpha^2=m\omega_1/\hbar \tag{3.163}$$

$$\phi_0(x)=\frac{\sqrt{\beta}}{\pi^{1/4}}\mathrm{e}^{-\beta^2x^2/2},\quad \beta^2=m\omega_2/\hbar \tag{3.164}$$

这里 ψ_0 和 ϕ_0 均已经归一化. 由于 $\omega_2=\sqrt{2}\omega_1$, 上面 β^2 与 α^2 满足

$$\beta^2=\sqrt{2}\alpha^2 \tag{3.165}$$

可计算在 ψ_0 态找到 ϕ_0 的概率幅为

$$\langle\phi_0\,|\psi_0\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}\phi_0^*(x)\psi_0(x)\mathrm{d}x=\sqrt{\frac{\alpha\beta}{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}(\alpha^2+\beta^2)x^2}\mathrm{d}x=\left(\frac{2\alpha\beta}{\alpha^2+\beta^2}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{3.166}$$

这样所求概率为

$$|\langle\phi_0\,|\psi_0\rangle|^2=\frac{2\alpha\beta}{\alpha^2+\beta^2}=\frac{2\beta/\alpha}{1+\beta^2/\alpha^2}=\frac{2^{5/4}}{1+\sqrt{2}}=0.9852 \tag{3.167}$$

① 曾谨言, 量子力学 (第四版卷 I)[M], 北京: 科学出版社, 2007, p84.

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

$$\psi(x,0)=\psi_0(x) \tag{3.168}$$

V_2 势场的第 n 个归一化能量本征态记为 ϕ_n, 相应能级为

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_2 \tag{3.169}$$

将 ψ_0 用各 ϕ_n 展开

$$\psi_0(x)=\sum_n C_n\phi_n(x) \tag{3.170}$$

由于 ψ_0 是偶宇称态, 而 ϕ_n 的宇称为 $(-1)^n$, 上面展开式中只可能出现偶宇称的 ϕ_n.

当 $0<t<\tau$, 态根据 Schrödinger 方程按照 V_2 势场的 Hamilton 量演化, 因而

$$\psi(x,t)=\sum_n C_n\phi_n(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt/\hbar}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_2t/2}\sum_n C_n\phi_n(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\omega_2t} \tag{3.171}$$

按照题意, $\psi(x,\tau)$ 与 ψ_0 为同一个态, 或者 $\psi(x,\tau)\sim\psi_0$, 这要求

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\omega_2\tau}=1,\quad n=0,2,4\cdots \tag{3.172}$$

亦即

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_2\tau}=\pm1 \tag{3.173}$$

满足这条件的 τ 值为

$$\tau=l\frac{\pi}{\omega_2}=\sqrt{\frac{m}{2K}} \tag{3.174}$$

其中 $l=1,2,3,\cdots$. 若满足此条件, 则当 $t=\tau$ 时, 势场又由 V_1 变成 V_2 后, 粒子即又处于 V_1 势场的基态 ψ_0.

3.20 设粒子在周期场 $V(x)=V_0\cos bx$ 中运动, 写出它在 p 表象中的 Schrödinger 方程.

解 在题 2.11 中, 我们通过 Fourier 变换, 根据坐标表象 Schrödinger 方程写下在一维势场 $V(x)$ 中运动粒子的 p 表象中的 Schrödinger 方程 (2.51′), 即

$$\frac{p^2}{2\mu}\varphi(p)+V\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\varphi(p)=E\varphi(p) \tag{3.175}$$

代入题给的势函数, 即得

$$\left\{\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}V_0\left[\exp\left(b\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)+\exp\left(-b\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\right]\right\}\varphi(p)=E\varphi(p)$$

3.21 设势场 (见图 3.16)

$$V(x)=V_0\left(\frac{a}{x}-\frac{x}{a}\right)^2,\quad a,x>0$$

求粒子能级与波函数. 证明其能谱形状与谐振子相似.

解 设粒子质量为 m. 体系的定态 Schrödinger 方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi+V_0\left(\frac{a}{x}-\frac{x}{a}\right)^2\psi=E\psi \tag{3.176}$$

或者

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi+\frac{V_0}{a^2}\left(\frac{a^2}{x}-x\right)^2\psi=E\psi \tag{3.176'}$$

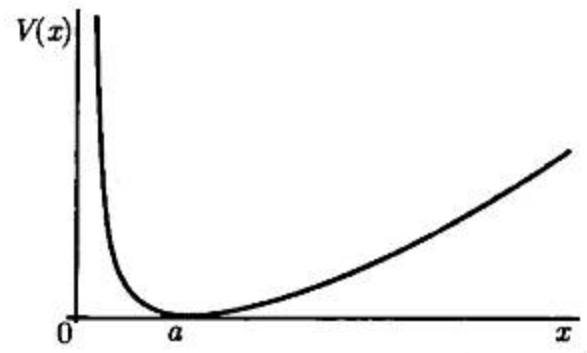

图 3.16 势函数 $V(x)=V_0\left(\frac{a}{x}-\frac{x}{a}\right)^2$

经观察, 取能量量纲的参数

$$\Lambda=\left(\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{V_0}{a^2}\right)^{1/2}=\frac{\hbar}{a}\sqrt{\frac{V_0}{2m}} \tag{3.177}$$

式 (3.176') 除以参数 Λ, 将方程无量纲化. 我们定义如下无量纲参数和无量纲变量

$$\epsilon=\frac{E}{\Lambda},\quad b=\sqrt{2mV_0}\frac{a}{\hbar}=\frac{V_0}{\Lambda},\quad y=\sqrt{\frac{V_0}{\Lambda a^2}}x=\frac{\sqrt{b}}{a}x \tag{3.178}$$

函数 $\psi(x)=\varphi(y)$, 这样式 (3.176') 变为

$$-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2}\varphi(y)+\left(\frac{b}{y}-y\right)^2\varphi(y)=\epsilon\varphi(y) \tag{3.179}$$

为了求解上述方程, 我们可以先考察在 $y\to 0, y\to\infty$ 处波函数的渐近行为, 当 $x\to\infty$ 时, 方程 (3.179) 简化为

$$-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2}\varphi(y)+y^2\varphi(y)=0 \tag{3.180}$$

可以验证, $y\to\infty$ 时, $\varphi(y)$ 的渐近行为是

$$\varphi(y)\sim\mathrm{e}^{\pm y^2/2} \tag{3.181}$$

考虑到束缚态边界条件, 只能取

$$\varphi\propto\mathrm{e}^{-y^2/2},\quad \text{当}y\to\infty$$

当 $y\to 0$ 时, 方程 (3.179) 简化为

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2}\varphi(y)-\frac{b^2}{y^2}\varphi(y)=0 \tag{3.182}$$

或者

$$y^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2}\varphi(y)-b^2\varphi(y)=0$$

对此方程, 取 $\varphi(y)\sim y^\lambda$ 形式的解, 代入方程得

$$\lambda(\lambda-1)=b^2$$

解得

$$\lambda=\frac{1\pm\sqrt{1+4b^2}}{2} \tag{3.183}$$

束缚态波函数可积条件要求 $\varphi(y)\sim y^\lambda$ 的 $\lambda>-1/2$. 当 $b\geqslant\sqrt{3}/2$ 时, 束缚态波函数可积条件要求式 (3.183) 中只能取 "+" 的一个. 而当 $0<b<\sqrt{3}/2$ 时, 两个 λ 均满足 $\lambda>-1/2$, 即均可能

给出束缚态解. 而对于束缚定态解, 能量 E 是有限的, 我们再注意到当 $x \to 0^+$ 时, $V \to +\infty$, 故而要求 $x \to 0^+$ 时, $\psi(x) \to 0$. 故上式要求 $\lambda > 0$. 因而 $\lambda < 0$ 情况应排除. 总之我们取

$$\lambda = \frac{1+\sqrt{1+4b^2}}{2} \tag{3.183'}$$

通过以上分析, $\varphi(y)$ 在 $y \to 0, \infty$ 的渐近行为分别是 $\varphi(y) \propto y^\lambda$ 与 $\varphi(y) \propto \mathrm{e}^{-y^2/2}$, 这样可设

$$\varphi(y) = y^\lambda \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}y^2} u(y) \tag{3.184}$$

式 (3.184) 代入式 (3.179), 因

$$\begin{aligned}
\varphi'(y) &= \left[\lambda y^{\lambda-1}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}y^2} - y^{\lambda+1}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}y^2}\right] u(y) + y^\lambda \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}y^2} u'(y) \\
\varphi''(y) &= y^\lambda \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}y^2} u''(y) + 2\left[\frac{\lambda}{y} - y\right] y^\lambda \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}y^2} u'(y) \\
&\quad + \left[\lambda(\lambda-1)\, y^{\lambda-2}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}y^2} - \lambda y^\lambda \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}y^2} - (\lambda+1)\, y^\lambda \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}y^2} + y^{\lambda+2}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}y^2}\right] u(y) \\
&= y^\lambda \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}y^2} u''(y) + 2\left[\frac{\lambda}{y} - y\right] y^\lambda \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}y^2} u'(y) + \left[\frac{b^2}{y^2} - (2\lambda+1) + y^2\right] y^\lambda \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}y^2} u(y)
\end{aligned}$$

式 (3.179) 可化为

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2}u(y) - 2\left(y - \frac{\lambda}{y}\right)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}y}u(y) + (\epsilon + 2b - 2\lambda - 1)\, u(y) = 0 \tag{3.185}$$

再令

$$\xi = y^2 = \frac{b}{a^2}x^2 \tag{3.186}$$

并记 $u(y) = v(\xi)$. 利用 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}y} = \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\dfrac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}y} = 2y\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}$ 以及 $\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2} = 2\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} + 4\xi\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}$, 式 (3.185) 又可化为

$$\xi\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}v(\xi) + \left(\lambda + \frac{1}{2} - \xi\right)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}v(\xi) - \left(\frac{\lambda}{2} + \frac{1}{4} - \frac{\epsilon+2b}{4}\right)v(\xi) = 0 \tag{3.187}$$

此式为合流超几何方程①, 其形式为

$$\xi\frac{\mathrm{d}^2 v}{\mathrm{d}\xi^2} + (\gamma - \xi)\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\xi} - \beta v = 0 \tag{3.187'}$$

其中 $\gamma = \lambda + 1/2$, $\beta = \left(\dfrac{\lambda}{2} + \dfrac{1}{4} - \dfrac{\epsilon+2b}{4}\right)$.

在 $\xi = 0$ 的邻域中式 (3.187') 的解析解表示为合流超几何函数 $\mathrm{F}(\beta, \gamma, \xi)$, 要得到满足束缚态条件的解, $\mathrm{F}(\beta, \gamma, \xi)$ 须中断为一个多项式. 这要求 β 是一个小于或者等于 0 的整数, 即

$$\beta = -n, \quad n = 0, 1, 2, \cdots$$

因此有

$$\frac{\lambda}{2} + \frac{1}{4} - \frac{\epsilon+2b}{4} = -n$$

① 曾谨言, 量子力学 (第四版卷 I)[M], 北京: 科学出版社, 2007, 附录五, p.522-523; 王竹溪、郭敦仁, 特殊函数概论, 北京: 北京大学出版社, 2000, 第六章.

或者

$$\epsilon = 4n + 2\lambda + 1 - 2b$$

其中 ϵ, λ 的定义见式 (3.178)、式 (3.183′). 这样解得能量 E 本征值为

$$E_n = \frac{2\hbar}{a}\sqrt{\frac{2V_0}{m}}\left[n + \frac{1}{2} + \frac{1}{4}\left(\sqrt{\frac{8mV_0a}{\hbar^2} + 1} - \sqrt{\frac{8mV_0a}{\hbar^2}}\right)\right] \tag{3.188}$$

其中 $n = 0, 1, 2, \cdots$. 若令

$$\omega = \frac{2\sqrt{2V_0/m}}{a} \tag{3.189}$$

则式 (3.188) 可简写为

$$E_n = \hbar\omega\left[n + \frac{1}{2} + \frac{1}{4}\left(\sqrt{1 + \frac{8mV_0a^2}{\hbar^2}} - \sqrt{\frac{8mV_0a^2}{\hbar^2}}\right)\right] \tag{3.190}$$

式 (3.190) 即为粒子的定态能级, 它与频率如式 (3.189) 所给 ω 的线性谐振子的能谱相同, 只是零点能相应的增加了 $\frac{1}{4}\hbar\omega\left(\sqrt{1 + 8mV_0a^2/\hbar^2} - \sqrt{8mV_0a^2/\hbar^2}\right)$, 与 E_n 相应的定态波函数是

$$\psi_n(x) = c_n x^\lambda \mathrm{e}^{-\frac{b}{2a^2}x^2}\mathrm{F}\left(-n, \lambda + \frac{1}{2}, \frac{b}{a^2}x^2\right) \tag{3.191}$$

式中 c_n 为归一化常数, 而 b, λ 的定义见式 (3.178)、式 (3.183′).

3.22 在动量表象中, 求解 δ 势阱 $V(x) = -\gamma\delta(x)$ 的束缚定态能量和波函数, 其中 γ 是一正的常数量. 计算 Δx 与 Δp, 并验证不确定度关系.

解 设势阱中运动的粒子质量为 μ, 在 x 表象的定态方程

$$\left(\frac{p^2}{2\mu} - \gamma\delta(x)\right)\psi(x) = E\psi(x) \tag{3.192}$$

现设

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p)\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}p \tag{3.193}$$

式 (3.192) 两边作 Fourier 变换, 即得在 p 表象的定态方程①

$$\frac{p^2}{2\mu}\varphi - \frac{\gamma}{\sqrt{2\pi\hbar}}\psi(0) = E\varphi \tag{3.194}$$

或者

$$(p^2 - 2\mu E)\varphi(p) = \frac{2\mu\gamma}{\sqrt{2\pi\hbar}}\psi(0) = A \tag{3.194′}$$

其中 A 为一个常数, 与 p 无关. 这样上式给出

$$\varphi(p) = \frac{A}{p^2 - 2\mu E} \tag{3.195}$$

即为动量表象的能量本征函数. 将式 (3.195) 代入式 (3.194′) 右边, 并利用 $\psi(0)$ 的 Fourier 变换 [式 (3.193) 取 $x = 0$] 得

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\frac{1}{p^2 - 2\mu E} = \frac{\pi\hbar}{\gamma\mu} \tag{3.196}$$

① 在 δ 位势情形, 通过对 x 表象的 Schrödinger 方程作 Fourier 变换, 比从一般的 p 表象的 Schrödinger 方程 [如见式 (2.51)] 出发要简捷一些.

此为能量本征值方程.

对于束缚态 $E<0$, 令 $\kappa=\sqrt{-2\mu E}/\hbar$, 则式 (3.196) 的左边定积分为

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\frac{1}{p^2+\hbar^2\kappa^2}=\frac{1}{\hbar\kappa}\arctan\frac{p}{\hbar\kappa}\bigg|_{-\infty}^{+\infty}=\frac{\pi}{\hbar\kappa}$$

代入式 (3.196) 即得

$$\kappa=\frac{\gamma\mu}{\hbar^2}$$

可见决定束缚态能级的方程式 (3.196) 只有上述 κ 一个值. 因此

$$E=-\frac{\hbar^2\kappa^2}{2\mu}=-\frac{\mu\gamma^2}{2\hbar^2}$$

对应唯一的一个束缚态. 相应的波函数由式 (3.195) 给出. 其中常数 A 可以由归一化条件确定, 根据

$$1=\int\mathrm{d}p\left|\varphi(p)\right|^2=|A|^2\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\frac{1}{\left(p^2-2\mu E\right)^2}=|A|^2\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}p}{\left(p^2+\hbar^2\kappa^2\right)^2}=\frac{\pi\left|A\right|^2}{2\left(\hbar\kappa\right)^3}$$

可知归一化系数可以取

$$A=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\left(\hbar\kappa\right)^{3/2}=\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2}\left(\frac{\mu\gamma}{\hbar}\right)^{3/2}$$

因而归一化的定态波函数为

$$\varphi(p)=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\left(\frac{\mu\gamma}{\hbar}\right)^{3/2}\frac{1}{p^2+\dfrac{\mu^2\gamma^2}{\hbar^2}}=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\left(\hbar\kappa\right)^{3/2}\frac{1}{p^2+\hbar^2\kappa^2}\tag{3.197}$$

这样 p 和 p^2 的期望值为

$$\overline{p}=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\varphi^*(p)p\varphi(p)=A^2\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{p\mathrm{d}p}{(p^2+\hbar^2\kappa^2)^2}=0$$

$$\overline{p^2}=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\varphi^*(p)p^2\varphi(p)=A^2\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{p^2\mathrm{d}p}{(p^2+\hbar^2\kappa^2)^2}=\frac{A^2\pi}{2\hbar\kappa}=\hbar^2\kappa^2$$

因而得 $\Delta p=\sqrt{\overline{p^2}-(\overline{p})^2}=\hbar\kappa$. 在 p 表象中, 坐标力学量表示为算符 $\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial p}$, 利用力学量平均值公式即得坐标以及坐标平方的期望值分别为

$$\overline{x}=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\varphi^*(p)\ \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\varphi(p)=A^2\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{p^2+\hbar^2\kappa^2}\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\frac{1}{p^2+\hbar^2\kappa^2}\mathrm{d}p=0,$$

$$\overline{x^2}=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\varphi^*(p)\hat{x}^2\varphi(p)=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\left[\hat{x}\varphi(p)\right]^*\left[\hat{x}\varphi(p)\right]=\hbar^2\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\frac{\partial}{\partial p}\frac{1}{p^2+\hbar^2\kappa^2}\right|^2\mathrm{d}p$$

$$=4A^2\hbar^2\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{p^2\mathrm{d}p}{(p^2+\hbar^2\kappa^2)^4}=\frac{A^2\pi}{4\hbar^3\kappa^5}=\frac{1}{2\kappa^2}$$

这样

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

因此

$$\Delta x\Delta p=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}$$

上式与不确定度关系式 $\Delta x\Delta p \geqslant \hbar/2$ 是一致的.

讨论 将动量表象定态波函数 (3.197) 代入式 (3.193), 即得相应的坐标表象波函数为

$$\psi(x)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\varphi\left(p\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\sqrt{\frac{2}{\pi}}\left(\hbar\kappa\right)^{3/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\frac{1}{p^2+\hbar^2\kappa^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}$$

对于 $x>0$ 与 $x<0$ 两种情况, 采用留数积分法可以求出

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\frac{1}{p^2+\hbar^2\kappa^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}=\frac{\pi}{\hbar\kappa}\mathrm{e}^{-\kappa|x|}$$

这样

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

这与在坐标表象中求解得到的结果完全一致.

3.23 在动量表象中计算粒子 (能量 $E>0$) 对于势垒 $V(x)=\gamma\delta(x)$ 的透射系数. 与坐标表象中的计算结果进行比较.

解 设粒子质量为 μ, 在 x 表象的定态 Schrödinger 方程

$$\left(\frac{p^2}{2\mu}+\gamma\delta(x)\right)\psi(x)=E\psi(x) \tag{3.198}$$

现设

$$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p)\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}p \tag{3.199}$$

式 (3.198) 两边作 Fourier 变换, 即得在 p 表象的定态方程

$$\frac{p^2}{2\mu}\varphi+\frac{\gamma}{\sqrt{2\pi\hbar}}\psi(0)=E\varphi \tag{3.200}$$

或者

$$(p^2-\hbar^2k^2)\varphi(p)+\frac{2\mu\gamma}{\sqrt{2\pi\hbar}}\psi(0)=0 \tag{3.201}$$

其中 $k=\sqrt{2\mu E}/\hbar$.

根据 δ 函数的基本公式 $(x-x_0)\delta(x-x_0)=0$, 可知式 (3.201) 的通解为

$$\varphi(p)=C_1\delta(p-\hbar k)+C_2\delta(p+\hbar k)-\frac{2m\gamma}{\sqrt{2\pi\hbar}}\frac{\psi(0)}{(p^2-\hbar^2k^2)} \tag{3.202}$$

其中 C_1, C_2 与 $\psi(0)$ 待定.

式 (3.202) 代入式 (3.199), 得到 x 表象中的波函数

$$\psi(x)=\frac{C_1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\mathrm{i}kx}+\frac{C_2}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-\mathrm{i}kx}-\frac{2m\gamma}{2\pi\hbar}\psi(0)\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{p^2-\hbar^2k^2}e^{\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}p \tag{3.203}$$

上面表达式中包含一个奇异函数积分, 记为

$$I(k)=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{p^2-\hbar^2k^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}p \tag{3.204}$$

该积分的被积函数在 $p=\pm\hbar k$ 处有两个一阶奇点. 若延拓到 p 的复平面积分, 相对于极点选取不同的积分路径, 就得到不同的积分结果. 积分路径应根据 ψ 所需满足的边界条件选取, 但是因

为还有 C_1, C_2 两个待定参数, 所以积分路径的选取仍然可以有一定的自由度. 我们对积分路径按如下方式选取①

$$I_r(k)=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{\left(p+\mathrm{i}0^+\right)^2-\hbar^2k^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}p \tag{3.205}$$

其中 0^+ 表示正的小量. 利用式 (A.17)

$$I_r(k)=\begin{cases}0, & x>0\\ \dfrac{\mathrm{i}\pi}{\hbar k}(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}), & x<0\end{cases} \tag{3.206}$$

式 (3.203) 中的积分现代以 I_r, 并考虑边界和分区连接点处 ψ 的行为, 以进一步确定有关系数. 当 $x>0$, 式 (3.206) 右端为 0 代入式 (3.203), 得

$$\sqrt{2\pi\hbar}\psi(x)=C_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+C_2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \tag{3.207}$$

设入射波 $\sim\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$, 则在 $x>0$ 区域应该只有透射波, 即 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$ 项, 而不能存在 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$ 项. 因此

$$C_2=0 \tag{3.208}$$

从而

$$\psi(x)=\frac{C_1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx},\quad x>0 \tag{3.209}$$

当 $x\to 0$, 式 (3.206) 右端为 0, 则由式 (3.203) 得到

$$\psi(0)=(C_1+C_2)/\sqrt{2\pi\hbar}=C_1/\sqrt{2\pi\hbar} \tag{3.210}$$

当 $x<0$, 式 (3.203) 中的积分代以式 (3.206) 得

$$\psi(x)=\frac{C_1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}-\frac{m\gamma}{\pi\hbar}\psi(0)\frac{\mathrm{i}\pi}{\hbar k}(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx})=\frac{C_1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\left[\left(1+\frac{\mathrm{i}m\gamma}{\hbar^2k}\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}-\frac{\mathrm{i}m\gamma}{\hbar^2k}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\right] \tag{3.211}$$

上式为入射波 ($\sim\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$) 与反射波 ($\sim\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$) 的叠加. 与透射波 (3.209) 比较, 即得透射振幅为

$$s=\frac{C_1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\Big/\left[\frac{C_1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\left(1+\frac{\mathrm{i}m\gamma}{\hbar^2k}\right)\right]=\frac{1}{1+\dfrac{\mathrm{i}m\gamma}{\hbar^2k}} \tag{3.212}$$

因而透射系数为

$$|s|^2=\frac{1}{1+(m\gamma/\hbar^2k)^2} \tag{3.213}$$

结果和坐标表象中的计算结果②完全一样.

3.24 粒子在双 δ 势阱中运动 (图 3.17)

$$V(x)=-\gamma\left[\delta(x+a)+\delta(x-a)\right]$$

求束缚态能级公式.

---

① 可以有别的选取, 读者不妨试试.

② 曾谨言, 量子力学 (第四版卷 I)[M], 北京: 科学出版社, 2007, p.86~87.

解法一　设粒子质量为 m, 该粒子在题给势场中运动的定态 Schrödinger 方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x)-\gamma\left[\delta(x+a)+\delta(x-a)\right]\psi(x)=E\psi(x) \tag{3.214}$$

除了 $x=\pm a$ 以外, $V(x)=0$, 因而束缚定态的能量 $E<0$(否则是游离态), 令

$$\kappa=\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}\quad 或\quad E=-\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} \tag{3.215}$$

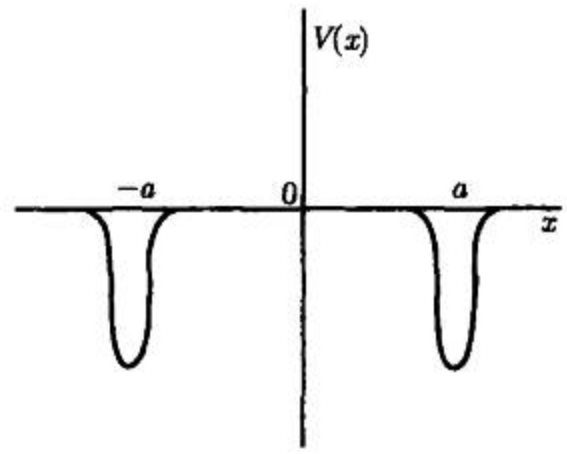

图 3.17　双 δ 势阱

再定义特征长度

$$b=\frac{\hbar^2}{m\gamma} \tag{3.216}$$

这样能量本征方程 (3.214) 可以写成

$$\psi''-\kappa^2\psi-\frac{2}{b}\left[\delta(x+a)+\delta(x-a)\right]\psi(x)=0 \tag{3.217}$$

在 $x=-a$ 附近积分, 可得 ψ' 跃变条件

$$\psi'(-a+0^+)-\psi'(-a+0^-)=\frac{2}{b}\psi(-a) \tag{3.218}$$

类似地, $x=a$ 处 ψ' 跃变条件为

$$\psi'(a+0^+)-\psi'(a+0^-)=\frac{2}{b}\psi(a) \tag{3.219}$$

可见在 $x=-a$ 与 $x=a$ 处, ψ' 均是有限跳跃, 因而 ψ 连续.

除了 $x=0$ 与 $x=a$ 两个奇点外, 式 (3.217) 化为

$$\psi''-\kappa^2\psi=0 \tag{3.220}$$

其解为

$$\mathrm{e}^{\pm\kappa x} \tag{3.221}$$

式 (3.214) 在 $x=0$ 与 $x=a$ 两个奇点以外的各个空间区域的解都可以由这两个特解叠加而成.

因位势 $V(x)$ 具有反射对称性, 所以束缚定态有确定宇称. 先讨论偶宇称态, 其波函数 ψ_+ 满足 $\psi_+(-x)=\psi_+(x)$, 在 $x\to\pm\infty$ 处 $\psi_+=0$(束缚态条件) 的解为

$$\psi_+(x)=\begin{cases}A\mathrm{e}^{\kappa x}, & x<-a\\ \cosh kx=\dfrac{1}{2}(\mathrm{e}^{\kappa x}+\mathrm{e}^{-\kappa x}), & -a\leqslant x\leqslant a\\ A\mathrm{e}^{-\kappa x}, & x>a\end{cases} \tag{3.222}$$

$x=a$ 处 ψ 的连续条件以及 ψ' 的跃变条件 (3.218) 给出

$$\cosh\kappa a=A\mathrm{e}^{-\kappa a} \tag{3.223}$$

$$\kappa\sinh\kappa a+A\kappa\mathrm{e}^{-\kappa a}=\frac{2}{b}\cosh\kappa a \tag{3.224}$$

上面两式消去 A, 即得

$$(2-\kappa b)\cosh\kappa a=\kappa b\sinh\kappa a$$

或者

$$\kappa b = 1 + \mathrm{e}^{-2\kappa a} \tag{3.225}$$

通过上式解出 κ, 即可由式 (3.215) 确定偶宇称束缚态的能量 E; 上式可见 κ 从而 E 是 a、b 的函数. 式 (3.225) 看出, κ 的可能取值范围

$$\frac{1}{b} < \kappa < \frac{2}{b}$$

因此 E 的可能取值范围为

$$-\frac{2m\gamma^2}{\hbar^2} < E < -\frac{m\gamma^2}{2\hbar^2}$$

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

若定义无量纲量 $\varepsilon = \kappa b$, 则上式又可表示为

$$\varepsilon = 1 + \mathrm{e}^{-\frac{2a}{b}\varepsilon} \tag{3.226}$$

构造函数 $f_+(\varepsilon) = \varepsilon - \mathrm{e}^{-\frac{2a}{b}\varepsilon} - 1$, 问题转化为求 $f_+(\varepsilon) = 0$ 的正根. 由 $f_+(0) < 0$ 以及 $f_-(\infty) > 0$ 知 $f_+(\varepsilon) = 0$ 必有正根. 再由于 $f'(\varepsilon) = 1 + \frac{2a}{b}\mathrm{e}^{-\frac{2a}{b}\varepsilon} > 0$, 因此 $f_+(\varepsilon) = 0$ 在 $\varepsilon > 0$ 上只有一个根 ε^*. 这相应于系统唯一的偶宇称束缚态, 其能量为

$$E = -\frac{m\gamma^2}{2\hbar^2}\varepsilon^*$$

$f_+(\varepsilon) = 0$ 为一超越方程, 无法解析求解, 可以采用作图或者数值解法. 对应于不同的 a/b, 用数值方法求得 ε^* 如下:

a/b	0	0.1	0.2	0.3	0.5	0.7	1	2	3	5	$+\infty$
ε^*	2	1.710	1.540	1.425	1.278	1.189	1.109	1.017	1.002	1.000	1

下面讨论奇宇称态, 其波函数 ψ_- 满足 $\psi_-(-x) = -\psi_-(x)$, 在 $x \to \pm\infty$ 处 $\psi_- = 0$(束缚态条件) 的解为

$$\psi_-(x) = \begin{cases} -B\mathrm{e}^{\kappa x}, & x < -a \\ \sinh kx = \dfrac{1}{2}(\mathrm{e}^{\kappa x} - \mathrm{e}^{-\kappa x}), & -a \leqslant x \leqslant a \\ B\mathrm{e}^{-\kappa x}, & x > a \end{cases} \tag{3.227}$$

$x = a$ 处 ψ 的连续条件以及 ψ' 的跃变条件 (3.218) 给出

$$\sinh \kappa a = B\mathrm{e}^{-\kappa a} \tag{3.228}$$

$$\kappa \cosh \kappa a + B\kappa \mathrm{e}^{-\kappa a} = \frac{2}{b}\sinh \kappa a \tag{3.229}$$

上面两式消去 B, 即得

$$(2 - \kappa b)\sinh \kappa a = \kappa b \cosh \kappa a$$

或者

$$\kappa b = 1 - \mathrm{e}^{-2\kappa a} \tag{3.230}$$

通过上式解出 κ, 即可由式 (3.215) 确定奇宇称束缚态的能量 E; 上式可见 κ 从而 E 是 a, b 的函数. 式 (3.230) 看出, κ 的可能取值范围

$$0 < \kappa < \frac{1}{b}$$

因此 E 的可能取值范围为

$$-\frac{m\gamma^2}{\hbar^2} < E < 0$$

若定义无量纲量 $\varepsilon = \kappa b$, 则上式又可表示为

$$\varepsilon = 1 - \mathrm{e}^{-\frac{2a}{b}\varepsilon} \tag{3.231}$$

构造函数 $f(\varepsilon) = \varepsilon - 1 + \mathrm{e}^{-\frac{2a}{b}\varepsilon}$, 问题转化为求 $f(\varepsilon)$ 的正根, 即求解

$$f(\varepsilon) = \varepsilon - 1 + \mathrm{e}^{-\frac{2a}{b}\varepsilon} = 0 \tag{3.232}$$

上面构造的函数 $f(\varepsilon)$ 满足 $f(0) = 0$①, $f(+\infty) = +\infty$. $f'(\varepsilon) = 1 - \dfrac{2a}{b}\mathrm{e}^{-\frac{2a}{b}\varepsilon}$, 当 $\varepsilon > 0$ 时 $f'(\varepsilon) > f'(0) = 1 - \dfrac{2a}{b}$. 故当 $b \geqslant 2a$ 时, $f'(\varepsilon) > 0$, $f'(\varepsilon)$ 在 $(0, +\infty)$ 上恒正, 知 $f(\varepsilon)$ 在此区间上是增函数, 结合 $f(0) = 0$ 知在 $(0, +\infty)$ 上 $f(\varepsilon) > 0$, 故当 $b \geqslant 2a$ 时 $f(\varepsilon)$ 没有正根, 因此此时不存在奇宇称束缚态. 因此存在奇宇称束缚态的必要条件是 $b < 2a$. 当 $b < 2a$ 时, $f''(\varepsilon) = \dfrac{4a^2}{b^2}\mathrm{e}^{-\frac{2a}{b}\varepsilon} > 0$, 可见 $f'(\varepsilon)$ 是增函数. $f'(0) = 1 - \dfrac{2a}{b} < 0$, $f'(+\infty) = 1$. 根据连续函数中值定理并由 $f'(\varepsilon)$ 是增函数, $f'(\varepsilon)$ 在 $(0, +\infty)$ 上有唯一零点, 设为 ε_0. 由 $f'(\varepsilon_0) = 1 - \dfrac{2a}{b}\mathrm{e}^{-\frac{2a}{b}\varepsilon_0} = 0$ 解得 $\varepsilon_0 = \dfrac{b}{2a}\ln\dfrac{2a}{b}$. 当 $0 < \varepsilon < \varepsilon_0$ 时, $f'(\varepsilon) < 0$; 当 $\varepsilon > \varepsilon_0$ 时, $f'(\varepsilon) > 0$. 因此当 $0 < \varepsilon < \varepsilon_0$ 时, $f(\varepsilon)$ 从 0 递减到 $f(\varepsilon_0) = \dfrac{b}{2a}\ln\dfrac{2a}{b} + \dfrac{b}{2a} - 1 (< 0)$ 为最小值. 当 $\varepsilon > \varepsilon_0$ 时, $f(\varepsilon)$ 从 $\dfrac{b}{2a}\ln\dfrac{2a}{b} + \dfrac{b}{2a} - 1$ 递增到 $f(+\infty) = +\infty$. 由连续函数中值定理并由于 $f(\varepsilon)$ 在 $\varepsilon > \varepsilon_0$ 上的递增性, $f(\varepsilon)$ 在 $\varepsilon > \varepsilon_0$ 上由唯一的根 ε^*, 这相应于系统唯一的奇宇称束缚态. ε^* 相应于 $\kappa = \varepsilon^*/b$, 奇宇称束缚态能量为

$$E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\varepsilon^{*2}}{b^2}$$

由式 (3.232) 知, κ 的取值范围为

$$0 < \kappa < \frac{1}{b}$$

这相应于奇宇称束缚态能量可能的范围为

$$-\frac{\hbar^2}{2mL^2} < E^* < 0$$

式 (3.232) 为一超越方程, 无法解析求解. 对应于不同的 a/b, 用数值方法求得 ε^* 如下:

a/b	0.5^+	0.6	0.7	0.8	1	1.2	1.5	2	3	$+\infty$
ε^*	0^+	0.314	0.511	0.642	0.797	0.879	0.941	0.980	0.998	1

解法二 (动量空间) 设

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p)\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}p \tag{3.233}$$

① 即 $\varepsilon = 0$ 为 $f(\varepsilon)$ 的根, 这相应于 $\kappa = 0 (E = 0)$, 不是束缚态能量.

式 (3.214) 两边作 Fourier 变换, 即得在 p 表象的定态方程

$$(p^2+\hbar^2\kappa^2)\varphi(p)=\frac{2\mu\gamma}{\sqrt{2\pi\hbar}}\left[\psi(-a)\mathrm{e}^{\mathrm{i}pa/\hbar}+\psi(a)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}pa/\hbar}\right] \tag{3.234}$$

其中 $\hbar\kappa=\sqrt{-2mE}$ 同式 (3.215), E 是束缚定态的能量, 而 $x\to\infty$ 处 $V=0$, 故 $E<0$.

根据 δ 函数的基本公式 $(x-x_0)\delta(x-x_0)=0$, 可知式 (3.234) 的解为

$$\begin{aligned}\varphi(p)=&C_1\delta(p-\mathrm{i}\hbar\kappa)+C_2\delta(p+\mathrm{i}\hbar\kappa)+\frac{2m\gamma}{\sqrt{2\pi\hbar}}\frac{\psi(-a)\mathrm{e}^{\mathrm{i}pa/\hbar}+\psi(a)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}pa/\hbar}}{p^2+\hbar^2\kappa^2}\\ =&\frac{2m\gamma}{\sqrt{2\pi\hbar}}\frac{\psi(-a)\mathrm{e}^{\mathrm{i}pa/\hbar}+\psi(a)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}pa/\hbar}}{p^2+\hbar^2\kappa^2}\end{aligned} \tag{3.235}$$

式 (3.235) 代入式 (3.234), 得到 x 表象中的波函数

$$\psi(x)=\frac{m\gamma}{\pi\hbar}\left\{\psi(-a)\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}p(x+a)/\hbar}}{p^2+\hbar^2\kappa^2}\mathrm{d}p+\psi(a)\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}p(x-a)/\hbar}}{p^2+\hbar^2\kappa^2}\mathrm{d}p\right\} \tag{3.236}$$

对上面表达式中包含的两个积分, 利用式 (A.20) 即得束缚定态的一般表达式

$$\psi(x)=\frac{1}{\kappa b}\left[\psi(-a)\mathrm{e}^{-\kappa|x+a|}+\psi(a)\mathrm{e}^{-\kappa|x-a|}\right] \tag{3.237}$$

其中特征长度 $b=\dfrac{\hbar^2}{m\gamma}$, 见式 (3.216). 上面 $\psi(-a)$ 与 $\psi(a)$ 分别为波函数 $\psi(x)$ 在 $x=-a$ 与 $x=a$ 处的值, 可视为待定常数.

因位势 $V(x)$ 具有反射对称性, 所以束缚定态有确定宇称. 先讨论偶宇称态, 其波函数 ψ_+ 满足 $\psi_+(-x)=\psi_+(x)$, 也就有 $\psi_+(-a)=\psi_+(a)$. 因而偶宇称束缚定态波函数可如下给出:

$$\psi_+(x)=\frac{1}{\kappa b}\psi_+(a)\left(\mathrm{e}^{-\kappa|x+a|}+\mathrm{e}^{-\kappa|x-a|}\right) \tag{3.238}$$

其中 $\psi_+(a)\neq0$, 不然 $\psi_+(x)$ 恒等于零. 上式取 $x=a$ 得

$$\psi_+(a)=\frac{1}{\kappa b}\psi_+(a)\left(\mathrm{e}^{-2\kappa a}+1\right)$$

此即

$$\kappa b=1+\mathrm{e}^{-2\kappa a}$$

这一样给出解法一的偶宇称束缚定态能级公式 (3.225).

奇宇称态波函数 ψ_- 满足 $\psi_-(-x)=-\psi_-(x)$, 也就有 $\psi_-(-a)=-\psi_-(a)$. 因而偶宇称束缚定态波函数可如下给出:

$$\psi_-(x)=\frac{1}{\kappa b}\psi_-(a)\left(\mathrm{e}^{-\kappa|x-a|}-\mathrm{e}^{-\kappa|x+a|}\right) \tag{3.239}$$

其中 $\psi_-(a)\neq0$, 不然 $\psi_-(x)$ 恒等于零. 上式取 $x=a$ 得

$$\psi_-(a)=\frac{1}{\kappa b}\psi_-(a)\left(1-\mathrm{e}^{-2\kappa a}\right)$$

此即

$$\kappa b=1-\mathrm{e}^{-2\kappa a}$$

这一样给出解法一的奇宇称束缚定态能级公式 (3.230).

解法三 (散射振幅的极点) 根据散射理论, 散射振幅在复波数平面上正虚轴上的极点, 对应势阱的束缚能级①, 据此我们可通过势阱的散射振幅求束缚能级.

双 $\delta-$ 势垒的散射问题在题 3.26 中进行讨论. 将所得结论中的 $\delta-$ 势的强度反号, 则也就是相应双 $\delta-$ 势阱的散射问题的解. 我们注意题 3.26 中的双 $\delta-$ 势分别位于 $x=0$ 与 $x=a$, 而本题则位于 $x=\pm a$. 但是散射振幅是 $x\to\infty$ 透射波或者 $x\to-\infty$ 反射波与 $x\to-\infty$ 入射波复波幅的比, 与坐标原点的选取无关. 我们注意本题双 $\delta-$ 势的间隔为 $2a$, 为题 3.26 双 $\delta-$ 势的间隔的 2 倍, 这样我们直接利用题 3.26 的式 (3.277) 写下本题的透射振幅

$$D=\frac{\theta^2}{(-\theta+\mathrm{i})^2+\mathrm{e}^{4\mathrm{i}ak}}=\frac{1}{\left(1-\dfrac{\mathrm{i}}{\theta}\right)^2+\dfrac{1}{\theta^2}\mathrm{e}^{4\mathrm{i}ak}} \tag{3.240}$$

其中 $\theta=\dfrac{\hbar^2k}{m\gamma}=kb$, 或者 $\dfrac{1}{\theta}=\dfrac{1}{kb}$. 透射振幅 D 的表达式的极点也就是 D 表达式分母的零点方程

$$\left(1+\frac{\mathrm{i}}{\theta}\right)^2+\frac{1}{\theta^2}\mathrm{e}^{4\mathrm{i}ak}=0$$

我们寻找式 (3.240) 在 k 复平面上正虚轴上的极点, 令 $k=\mathrm{i}\kappa$, 其中 $\kappa>0$. 利用

$$\left(1-\frac{\mathrm{i}}{kb}\right)^2-\frac{\mathrm{i}^2}{k^2b^2}\mathrm{e}^{4\mathrm{i}ak}=\left(1-\frac{\mathrm{i}}{kb}+\frac{\mathrm{i}}{kb}\mathrm{e}^{4\mathrm{i}ak}\right)\left(1-\frac{\mathrm{i}}{kb}-\frac{\mathrm{i}}{kb}\mathrm{e}^{4\mathrm{i}ak}\right)$$

即得

$$\left(1-\frac{1}{\kappa b}+\frac{1}{\kappa b}\mathrm{e}^{-2\kappa a}\right)\left(1-\frac{1}{\kappa b}-\frac{1}{\kappa b}\mathrm{e}^{-2\kappa a}\right)=0$$

因而得

$$1-\frac{1}{\kappa b}+\frac{1}{\kappa b}\mathrm{e}^{-2\kappa a}=0,\quad \text{或}\ 1-\frac{1}{\kappa b}-\frac{1}{\kappa b}\mathrm{e}^{-2\kappa a}=0$$

由它们可确定束缚定态能级. 与先前的解法所得结果式 (3.226), (3.230) 完全一致.

说明 用这种方法, 对于强度不同的双 δ 势阱一样可利用题 3.26 的式 (3.277) 得到束缚定态能级.

3.25 粒子在势场 (图 3.18)

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

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

解 由于 $V(x)\geqslant 0$, 所以 $E>0$. 在 $V(x)\to\infty$ 处, 波函数应该趋于 0, 所以有边界条件

$$\psi(x)=0,\quad |x|\geqslant L \tag{3.241}$$

也就是波函数只在阱内 ($|x|\leqslant L$) 不为零. 在阱内能量本征方程为

$$\psi''+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E-V_0\delta(x)\right]\psi=0 \tag{3.242}$$

$x=0$ 处, ψ 连续条件给出

$$\psi(0^+)=\psi(0^-) \tag{3.243}$$

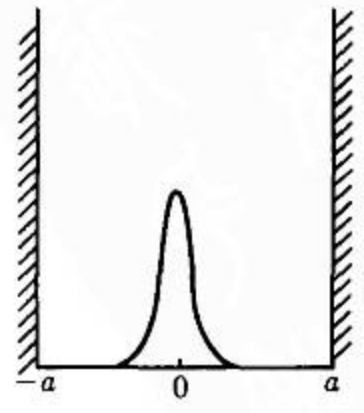

图 3.18 无限深势阱中央有一个 δ 势垒

① 可见曾谨言, 量子力学 (第四版卷 I)[M], 北京: 科学出版社, 2007, p.91~93 讨论以及 p92 脚注所引文献.

而 ψ' 的跃变条件为

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = \frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi(0) \tag{3.244}$$

现令

$$k = \sqrt{2mE}/\hbar \tag{3.245}$$

$x \neq 0$ 处, 式 (3.242) 可以写成

$$\psi'' + k^2\psi = 0 \tag{3.246}$$

其解为

$$\psi = \sin kx, \quad \cos kx \tag{3.247}$$

在 $-a < x < 0$ 和 $0 < x < a$ 两个区域, ψ 均可表示成 $\sin kx$ 和 $\cos kx$ 的线性叠加, 同时还要满足边界条件 (3.241) 和 $x = 0$ 处连接条件式 (3.243)、式 (3.244).

因位势 $V(x)$ 具有反射对称性, 所以束缚定态有确定宇称. 先讨论奇宇称态, 由于 $\psi(-x) = -\psi(x)$, 当 $x \to 0$, 必有 $\psi(0) = 0$, 则由式 (3.244) 就有 $\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = 0$, 即 ψ 在 $x = 0$ 处是连续的. 由此可见, δ 势垒的存在对奇宇称态并无影响, 波函数和能级应和无限深势阱的相同, 波函数为

$$\psi(x) = C\sin kx, \quad -a < x < a \tag{3.248}$$

由边界条件 (3.241), 得到

$$k = n\pi/a, \quad n = 1, 2, 3, \cdots \tag{3.249}$$

给出能级为

$$E = \frac{\hbar^2k^2}{2m} = \frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2, \quad n = 1, 2, 3, \cdots \tag{3.250}$$

归一化的能量本征函数为

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}, \quad n = 1, 2, 3, \cdots \tag{3.251}$$

由式 (3.247) 的解叠加的偶宇称态 ψ(满足 $\psi(-x) = \psi(x)$) 的一般形式为

$$\psi = \begin{cases} A\cos kx + B\sin kx, & 0 < x < a \\ A\cos kx - B\sin kx, & -a < x < 0 \end{cases} \tag{3.252}$$

由边界条件 (3.241), 得到

$$A\cos ka + B\sin ka = 0 \tag{3.253}$$

由 ψ' 跃变条件 (3.244), 得到

$$Bk = mV_0A/\hbar^2 \tag{3.254}$$

联立式 (3.253)、式 (3.254) 即得能级方程

$$\tan ka = -\frac{\hbar^2}{m\gamma a}ka = -\frac{b}{a}ka \tag{3.255}$$

其中 $b = \hbar^2/m\gamma$ 是 δ 势垒的特征长度, 对于给定的 a, b 后, 可用图解法或数值解法求出 k, 而偶宇称能级

$$E = \frac{\hbar^2k^2}{2m} \tag{3.256}$$

当 $a \gg bn\pi$, 即 $\gamma \gg n\pi\hbar^2/ma$, 式 (3.255) 可近似为 $\tan ka \approx 0$, 由此得近似解

$$ka \approx n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \cdots \tag{3.257}$$

给出近似能级

$$E \approx \frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2, \quad n = 1, 2, 3, \cdots \tag{3.258}$$

这种情况下相当于 δ 势垒作用足够强, 阻碍了两边粒子的穿透, 将原来的无限深势阱分隔成两个宽为 a 的无限深势阱, 上式也即其能级公式.

当 $a \ll b$, 即 $\gamma \ll \hbar^2/ma$ 时, 式 (3.255) 近似为 $\cot ka \approx 0$, 由此得近似解

$$ka \approx \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi, \quad n = 0, 1, 2, \cdots \tag{3.259}$$

给出近似能级

$$E = \frac{1}{2m}\left[\frac{(2n+1)\pi\hbar}{2a}\right]^2, \quad n = 0, 1, 2, \cdots \tag{3.260}$$

这种情况下相当于 δ 势垒作用足够弱, 粒子从一边到另一边的穿透基本不受阻碍. 这样 δ 势垒基本可以忽略. 式 (3.260) 正是无限深势阱中偶宇称态的能级公式.

式 (3.250) 和式 (3.260) 可以统一写成

$$E = \frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{2a}\right)^2, n = 1, 2, 3, \cdots \tag{3.261}$$

偶数 n 对应奇宇称态, 上式给出精确能级; 奇数 n 对应偶宇称态, 上式给出近似能级.

3.26 粒子以能量 E 入射到一个双 δ 势垒 (图 3.19),

$$V(x) = \gamma\left[\delta(x) + \delta(x-a)\right]$$

求反射和透射概率以及发生完全透射的条件.

解 粒子以能量 E 入射, H 为守恒量, 从而粒子在运动过程中能量保持恒定, 这是定态的特点. 设粒子质量为 m, 为作更一般的讨论, 记 $x = 0, x = a$ 处势垒强度分别为 γ_1, γ_2(题给 $\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma$). 该粒子在题给势场中运动的定态 Schrödinger 方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x) + \left[\gamma_1\delta(x) + \gamma_2\delta(x-a)\right]\psi(x) = E\psi(x) \tag{3.262}$$



图 3.19 双 δ 势垒的散射

可令

$$k = \sqrt{2mE}/\hbar, \quad C_{1,2} = 2a(m\gamma_{1,2}/\hbar^2) \tag{3.263}$$

$C_{1,2}$ 为无量纲量. 这样能量本征方程 (3.262) 可以写成

$$\psi'' + k^2\psi - \left[\frac{C_1}{a}\delta(x) + \frac{C_2}{a}\delta(x-a)\right]\psi = 0 \tag{3.264}$$

在 $x = 0$ 附近积分, 可得 ψ' 跃变条件

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = \frac{C_1}{a}\psi(0) \tag{3.265}$$

类似地, $x=a$ 处 ψ' 跃变条件为

$$\psi'(a+0^+)-\psi'(a+0^-)=\frac{C_2}{a}\psi(a) \tag{3.266}$$

可见在 $x=0$ 与 $x=a$ 处, ψ' 均是有限跳跃, 因而 ψ 连续.

除了 $x=0$ 与 $x=a$ 两个奇点外, 式 (3.264) 化为

$$\psi''+k^2\psi=0 \tag{3.267}$$

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

$$\psi(x)=\begin{cases}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+R\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}, & x>a\\ A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}, & 0<x<a\\ D\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}, & x>a\end{cases} \tag{3.268}$$

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

下面确定 R、D. 利用 $x=0$ 处波函数 ψ 的连续性以及 ψ' 跃变条件 (3.265) 得

$$1+R=A+B \tag{3.269}$$

$$\mathrm{i}k(A-B-1+R)=\frac{C_1}{a}(A+B) \tag{3.270}$$

利用 $x=a$ 处波函数 ψ 的连续性以及 ψ' 跃变条件 (3.266) 得

$$A\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}=D\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} \tag{3.271}$$

$$\mathrm{i}k(D-A)\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}+\mathrm{i}kB\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}=\frac{C_2}{a}D\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} \tag{3.272}$$

联立式 (3.269)、式 (3.270) 得

$$B=(\mathrm{i}\theta_1-1)A-\mathrm{i}\theta_1 \tag{3.273}$$

$$R=\mathrm{i}\theta_1 A-(1+\mathrm{i}\theta_1) \tag{3.274}$$

其中无量纲参数如下定义:

$$\theta_{1,2}=\frac{2ak}{C_{1,2}}=\frac{\hbar^2 k}{m\gamma_{1,2}} \tag{3.275}$$

联立式 (3.271)、式 (3.272) 得

$$D=\frac{\theta_2}{\theta_2+\mathrm{i}}A=\mathrm{i}\theta_2 B\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}ak} \tag{3.276}$$

将式 (3.273) 代入式 (3.276), 即可解出 A、B、D, 再利用式 (3.274), 即可求出 R. 结果如下:

$$\begin{aligned}A&=\frac{\theta_1(\theta_2+\mathrm{i})}{(\theta_1+\mathrm{i})(\theta_2+\mathrm{i})+\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ak}}, & B&=\frac{-\mathrm{i}\theta_1\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ak}}{(\theta_1+\mathrm{i})(\theta_2+\mathrm{i})+\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ak}}\\ R&=\frac{1-\mathrm{i}\theta_2-(1+\mathrm{i}\theta_1)\,\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ak}}{(\theta_1+\mathrm{i})(\theta_2+\mathrm{i})+\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ak}}, & D&=\frac{\theta_1\theta_2}{(\theta_1+\mathrm{i})(\theta_2+\mathrm{i})+\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ak}}\end{aligned} \tag{3.277}$$

无量纲参数 $\theta_{1,2}$ 的定义见式 (3.275). 而反射概率 $|R|^2$ 与透射概率 $|D|^2$ 分别如下给出:

$$\begin{aligned}|R|^2&=\frac{1-\mathrm{i}\theta_2-(1+\mathrm{i}\theta_1)\,\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ak}}{(\theta_1+\mathrm{i})(\theta_2+\mathrm{i})+\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ak}}\,\frac{1+\mathrm{i}\theta_2-(1-\mathrm{i}\theta_1)\,\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}ak}}{(\theta_1-\mathrm{i})(\theta_2-\mathrm{i})+\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}ak}}\\ &=\frac{\left(2+\theta_1^2+\theta_2^2\right)-\left[(1+\mathrm{i}\theta_1)\,(1+\mathrm{i}\theta_2)\,\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ak}+c.c.\right]}{(\theta_1+\mathrm{i})(\theta_2+\mathrm{i})(\theta_1-\mathrm{i})(\theta_2-\mathrm{i})+1+\left[(\theta_1-\mathrm{i})(\theta_2-\mathrm{i})\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ak}+c.c.\right]}\end{aligned}$$

$$= \frac{\left(2+\theta_1^2+\theta_2^2\right)+2\left(\theta_1\theta_2-1\right)\cos 2ak+2\left(\theta_1+\theta_2\right)\sin 2ak}{\left(\theta_1^2+1\right)\left(\theta_2^2+1\right)+1+2\left(\theta_1\theta_2-1\right)\cos 2ak+2\left(\theta_1+\theta_2\right)\sin 2ak} \tag{3.278}$$

$$|D|^2 = \frac{\theta_1\theta_2}{(\theta_1+\mathrm{i})(\theta_2+\mathrm{i})+\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ak}} \frac{\theta_1\theta_2}{(\theta_1-\mathrm{i})(\theta_2-\mathrm{i})+\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}ak}}$$

$$= \frac{\theta_1^2\theta_2^2}{\left(\theta_1^2+1\right)\left(\theta_2^2+1\right)+1+2\left(\theta_1\theta_2-1\right)\cos 2ak+2\left(\theta_1+\theta_2\right)\sin 2ak} \tag{3.279}$$

满足 $|R|^2+|D|^2=1$. 对于本题上式中取 $\theta_1=\theta_2=\theta=\hbar^2k/m\gamma$.

完全透射条件为 $R=0$, 由式 (3.277) 知此时

$$\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ak} = \frac{1-\mathrm{i}\theta_2}{1+\mathrm{i}\theta_1} \tag{3.280}$$

上式两边取复数模, 可知 $\theta_1^2=\theta_2^2$, 因而 $\theta_1=\pm\theta_2$. 这时透射波振幅 D 可以表示成

$$D = \mp\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}ak}$$

显然此时 $|D|^2=1$. 式 (3.280) 意味着对于给定的势, 只能有特定能量的粒子可以完全透射. 将式 (3.280) 表示为

$$\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ak} = \mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\alpha_\pm} \tag{3.281}$$

其中 $\theta_1=\theta_2$ 情况取 $\alpha_-=\arctan\theta$, $\theta_1=-\theta_2$ 情况取 $\alpha_-=0$. 式 (3.281) 的 $k>0$ 的解为

$$k = \frac{n\pi-\alpha_\pm}{a}, \quad n=1,2,3,\cdots \tag{3.282}$$

这种粒子能量为

$$E = \frac{\hbar^2k^2}{2m} = \frac{\hbar^2\left(n\pi-\alpha_\pm\right)^2}{2ma^2} \tag{3.283}$$

说明 1 从式 (3.277) 看透射系数知, 除非 $\theta_{1,2}\to 0$ (这时 $\gamma_{1,2}\to\infty$), D 总不为零.

说明 2 如保持 γ_1,γ_2 不变, 而令 $a\to 0$, 即两个 δ 势垒合而为一, $V(x)=\left(\gamma_1+\gamma_2\right)\delta(x)$, 这时式 (3.277) 给出透射系数

$$D = \frac{1}{1+\mathrm{i}\left(\dfrac{1}{\theta_1}+\dfrac{1}{\theta_2}\right)}$$

透射概率为

$$|D|^2 = \frac{1}{1+\dfrac{m^2\left(\gamma_1+\gamma_2\right)^2}{\hbar^4k^2}}$$

这与粒子对于单 δ 势垒的透射问题相应结果一致①.

说明 3 本题同样可以在动量表象中求解.

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

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

求发生完全反射的动量值.

① 见题 3.23 或者参见曾谨言, 量子力学 (第四版卷 I)[M], 北京: 科学出版社, 2007, p.86~87.

解法一 (坐标表象) 为了便于讨论, 先设 δ 势垒总数为 N, 最后再令 $N \to \infty$. 各势垒位置依次为

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

它们将 $-\infty < x < \infty$ 空间分隔成 $(N+1)$ 个区间, 记 $(n-1)a < x < na$ 区间为第 n 区 [$x < 0$, 为第 0 区, $x > Na$ 为第 N 区]. 波函数 ψ 满足能量本征方程

$$\psi''(x) + k^2\psi(x) - \frac{2m\gamma}{\hbar^2}\sum_n \delta(x-na)\psi(x) = 0 \tag{3.284}$$

在各个区域中, 式 (3.284) 的解只能取 $\mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}kx}$ 的形式. 设第 n 区中波函数为

$$\psi_n(x) = D_n \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + R_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \tag{3.285}$$

其中 $D_0 = 1$, $R_N = 0$.

在 $x = na$ 处, ψ 的连续条件为

$$\psi_n(na) = \psi_{n+1}(na), \quad n = 0,\ 1,\ \cdots,\ N-1 \tag{3.286}$$

该点 ψ' 的连续条件为

$$\psi'_{n+1}(na) - \psi'_n(na) = \frac{2m\gamma}{\hbar^2}\psi_n(na) \tag{3.287}$$

将式 (3.285) 代入式 (3.286)、式 (3.287) 得

$$R_{n+1} - R_n = (D_n - D_{n+1})\mathrm{e}^{2\mathrm{i}nka} \tag{3.288}$$

$$R_{n+1} - R_n = \mathrm{i}\alpha(R_n + D_n \mathrm{e}^{2\mathrm{i}nka}) \tag{3.289}$$

其中无量纲数 α 如下定义

$$\alpha = \frac{m\gamma}{k\hbar^2} \tag{3.290}$$

由于一共有 $(N+1)$ 个分区, 除 $D_0 = 1$, $R_N = 0$ 外尚有 $2N$ 个未知量 R_n、D_n. 而式 (3.288)、式 (3.289) 则为 $2N$ 个线性方程组成的方程组, 由此方程组原则上可以确定这 $2N$ 个未知量. 一般情况下, 求解较为复杂.

按照本题的要求, 我们试着讨论下式成立时将有何结论

$$e^{2\mathrm{i}nka} = 1,\ n = 0,\ 1,\ 2,\ \cdots \tag{3.291}$$

这时式 (3.288) 给出

$$\begin{aligned}
&D_0 - D_1 = R_1 - R_0 \\
&D_1 - D_2 = R_2 - R_1 \\
&\cdots\cdots \\
&D_n - D_{n+1} = R_{n+1} - R_n \\
&\cdots\cdots \\
&D_{N-1} - D_N = -R_{N-1}
\end{aligned} \tag{3.292}$$

由于最后一个区域中只有透射波, $R_N = 0$. 以上各式相加, 即得

$$D_0 + R_0 = D_N \tag{3.293}$$

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

$$\text{反射概率}=|R_0/D_0|^2,\quad \text{透射概率}=|D_N/D_0|^2 \tag{3.294}$$

概率守恒要求

$$|D_0|^2=|R_0|^2+|D_N|^2 \tag{3.295}$$

式 (3.293)、式 (3.295) 表明, $D_0(-R_0)$ 与 D_N 作为复数, 在复平面上构成直角三角形的三边.

式 (3.292) 给出

$$R_n+D_n=R_{n+1}+D_{n+1}=\cdots=D_N \tag{3.296}$$

式 (3.289) 给出

$$R_{n-1}-R_n=\mathrm{i}\alpha(R_n+D_n)=\mathrm{i}\alpha D_n, n=0,1,2,\cdots \tag{3.297}$$

也就是

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

按递推法解出

$$-R_0=\mathrm{i}N\alpha D_N,\quad -R_1=\mathrm{i}(N-1)\alpha D_N \tag{3.298}$$

给定入射波 $D_0\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$ 后, 由于 $|R_0|\leqslant|D_0|$, 根据上式当 δ 势垒总数 N 趋于 ∞ 时, $D_N\to 0$. 进而式 (3.293) 给出

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

亦即透射概率为 0, 反射概率为 1. 由式 (3.298) 还可看出, 各 R_n $(n=0,1,2,\cdots)$ 是“同相”的, 其数值则按等差数列逐级递减. 各 D_n 也按同样的规律变化.

根据上面分析, 满足式 (3.291) 时发生完全反射, 这要求

$$\exp(2\mathrm{i}ka)=1 \tag{3.299}$$

由此式解出

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

其中, $m=1,\ 2,\ 3,\ \cdots$ 相应的动量值为

$$p=\hbar k=m\frac{\pi\hbar}{a}$$

而入射波波长为

$$\lambda=\frac{2\pi}{k}=\frac{1}{m}(2a)$$

在此条件下, 从相邻的两个 $\delta-$ 势垒反射回来的波位相相同, 使总的反射波幅达到最强, 而透射波则逐级变弱, 最后衰减为 0.

解法二 (动量表象) 设粒子质量为 μ, 在 x 表象的定态 Schrödinger 方程为

$$\left[\frac{p^2}{2\mu}+\gamma\sum_{n=0}^{\infty}\delta(x-na)\right]\psi(x)=E\psi(x) \tag{3.300}$$

可设

$$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p)\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}p \tag{3.301}$$

式 (3.300) 两边作 Fourier 变换, 可得如下 p 表象的定态方程:

$$(p^2-\hbar^2k^2)\varphi(p)=-\frac{2\mu\gamma}{\sqrt{2\pi\hbar}}\sum_n\psi(na)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}pna/\hbar} \tag{3.302}$$

其中 $k=\sqrt{2\mu E}/\hbar$.

根据 δ 函数的基本公式 $(x-x_0)\delta(x-x_0)=0$, 可知式 (3.302) 的通解为

$$\varphi(p)=\sqrt{2\pi\hbar}A\delta(p-\hbar k)+\sqrt{2\pi\hbar}B\delta(p+\hbar k)-\frac{2m\gamma}{\sqrt{2\pi\hbar}}\sum_n\frac{\psi(na)}{(p^2-\hbar^2k^2)}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}pna/\hbar} \tag{3.303}$$

其中 A,B 与 $\psi(na)$ 为常数.

式 (3.303) 代入式 (3.301), 得到 x 表象中的波函数

$$\psi(x)=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}-\frac{m\gamma}{\pi\hbar}\sum_n\psi(na)\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{p^2-\hbar^2k^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p(x-na)/\hbar}\mathrm{d}p \tag{3.304}$$

上面表达式中包含的各积分, 记为

$$I(n,k)=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{p^2-\hbar^2k^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p(x-na)/\hbar}\mathrm{d}p \tag{3.305}$$

这些积分的被积函数在 $p=\pm\hbar k$ 处有两个一阶奇点. 若延拓到 p 的复平面积分, 相对于极点选取不同的积分路径, 就得到不同的积分结果. 积分路径应根据 ψ 所需满足的边界条件选取, 但是因为还有 A,B 两个待定参数, 所以积分路径的选取仍然可以有一定的自由度. 我们对积分路径按如下方式选取

$$I_a(n,k)=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{(p-\mathrm{i}0^+)^2-\hbar^2k^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p(x-na)/\hbar}\mathrm{d}p \tag{3.306}$$

其中 0^+ 表示正的小量. 利用式 (A.17)

$$I_a(n,k)=\begin{cases}\dfrac{\mathrm{i}\pi}{\hbar k}[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(x-na)}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x-na)}], & x>na\\ 0, & x<na\end{cases} \tag{3.307}$$

式 (3.304) 中的各积分现代以 I_a. 当 $x\to+\infty$(即 $x>na$, $n=0,1,2,\cdots$), 式 (3.307) 代入式 (3.304), 得

$$\psi(x)\overset{x\to\infty}{\longrightarrow}\left[A-\mathrm{i}\frac{m\gamma}{\hbar^2k}\sum_n\psi(na)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kna}\right]\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+\left[B+\mathrm{i}\frac{m\gamma}{\hbar^2k}\sum_n\psi(na)\mathrm{e}^{+\mathrm{i}kna}\right]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \tag{3.308}$$

设入射波 $\sim\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$, 则在 $x\to+\infty$ 区域应该只有透射波, 即 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$ 项, 而不能存在 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$ 项. 因此由式 (3.308)

$$B=-\mathrm{i}\frac{m\gamma}{\hbar^2k}\sum_n\psi(na)\mathrm{e}^{+\mathrm{i}kna} \tag{3.309}$$

当 $x-na<0$ (即 $x<na$, $n=0,\ 1,\ 2,\ \cdots$), 式 (3.304) 中的积分代以式 (3.307)[都等于零] 得

$$\psi(x)=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \tag{3.310}$$

其中第一项为入射波, 第二项为反射波.

如果出现完全反射, $x \to \infty$ 处透射波振幅应等于 0, 即式 (3.308) 中 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$ 项系数为 0, 这时

$$A = \mathrm{i}\frac{m\gamma}{\hbar^2 k}\sum_n \psi(na)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kna} \tag{3.311}$$

而且反射概率 $|B|^2/|A|^2 = 1$, 也就是 $|B| = |A|$, 由式 (3.309)、式 (3.311) 得

$$\left|\sum_n \psi(na)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kna}\right| = \left|\sum_n \psi(na)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kna}\right| \tag{3.312}$$

式 (3.312) 成立条件是

$$\exp(2\mathrm{i}ka) = 1 \tag{3.313}$$

这与解法一所得式 (3.299) 相同.

第 4 章　力学量用算符表达

4.1　证明 $F(p)=\sum_{n=0}^{\infty} A_n p^n$ (A_n 实数) 是厄米算符.

证明　厄米算符的定义见教材, 算符 O 的厄米共轭算符 $O^\dagger$ 定义为对任意的态 ψ 与 φ, 有下面内积关系

$$(\psi, O^\dagger \varphi) = (O\psi, \varphi) \tag{4.1}$$

这样对于算符 A, B 以及 c 数 λ, 对任意的态 ψ 与 φ, 均有

$$\begin{aligned}
(AB\psi, \varphi) &= \left(B\psi, A^\dagger \varphi\right) = \left(\psi, B^\dagger A^\dagger \varphi\right) \\
\left((A+B)\psi, \varphi\right) &= (A\psi + B\psi, \varphi) = (A\psi, \varphi) + (B\psi, \varphi) \\
&= \left(\psi, A^\dagger \varphi\right) + \left(\psi, B^\dagger \varphi\right) = \left(\psi, A^\dagger \varphi + B^\dagger \varphi\right) = \left(\psi, (A^\dagger + B^\dagger)\varphi\right) \\
(\lambda A\psi, \varphi) &= \lambda^* (A\psi, \varphi) = \lambda^* \left(\psi, A^\dagger \varphi\right) = \left(\psi, \lambda^* A^\dagger \varphi\right)
\end{aligned}$$

由此可见

$$\begin{aligned}
(AB)^\dagger &= B^\dagger A^\dagger \\
(A+B)^\dagger &= B^\dagger + A^\dagger \\
(\lambda A)^\dagger &= \lambda^* A^\dagger
\end{aligned} \tag{4.2}$$

这些为厄米共轭的运算法则. 再由 p 是厄米算符 ($p = p^\dagger$)

$$F(p)^\dagger = \sum_{n=0}^{\infty} (A_n p^n)^\dagger = \sum_{n=0}^{\infty} A_n^* (p^n)^\dagger = \sum_{n=0}^{\infty} A_n \left(p^\dagger\right)^n = \sum_{n=0}^{\infty} A_n p^n = F(p)$$

也就是 $F(p)^\dagger = F(p)$, 因此 $F(p)$ 是厄米算符.

4.2　证明 $\sum_{n,m=0}^{\infty} A_{n,m} \frac{(p^n x^m + x^m p^n)}{2}$ ($A_{n,m}$ 实数) 是厄米算符.

证明　按照厄米共轭的运算法则 (4.2), 直接验算

$$\begin{aligned}
\left[\sum_{n,m=0}^{\infty} A_{n,m} \frac{(p^n x^m + x^m p^n)}{2}\right]^\dagger &= \sum_{n,m=0}^{\infty} \left(\frac{A_{n,m}}{2}\right)^* (p^n x^m + x^m p^n)^\dagger \\
&= \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{A_{n,m}}{2} \left[(p^n x^m)^\dagger + (x^m p^n)^\dagger\right] \\
&= \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{A_{n,m}}{2} \left[(x^m)^\dagger (p^n)^\dagger + (p^n)^\dagger (x^m)^\dagger\right] \\
&= \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{A_{n,m}}{2} \left[x^m p^n + p^n x^m\right] \\
&= \sum_{n,m=0}^{\infty} A_{n,m} \frac{(p^n x^m + x^m p^n)}{2}
\end{aligned}$$

可见算符 $\sum_{n,m=0}^{\infty} A_{n,m}\frac{(p^n x^m + x^m p^n)}{2}$ 的厄米共轭等于其本身, 故为厄米算符.

4.3 设 $[q,p]=\mathrm{i}\hbar$, $f(q)$ 是 q 的可微函数, 证明

(1) $[q,p^2f]=2\mathrm{i}\hbar pf$; (2) $[q,pfp]=\mathrm{i}\hbar(fp+pf)$; (3) $[q,fp^2]=2\mathrm{i}\hbar fp$; (4) $[p,p^2f]=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}p^2f'$;

(5) $[p,pfp]=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}pf'p$; (6) $[p,fp^2]=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}f'p^2$

证明 利用对易子的运算性质 $[A,BC]=B[A,C]+[A,B]C$, 利用 $[q,p]=\mathrm{i}\hbar$ 得

$$\begin{aligned}
[q,p^2f]&=[q,p^2]f+p^2[q,f]=[q,p^2]f\\
&=[q,p]pf+p[q,p]f=\mathrm{i}\hbar pf+p\mathrm{i}\hbar f=2\mathrm{i}\hbar pf\\
[q,pfp]&=[q,p]fp+p[q,fp]=\mathrm{i}\hbar fp+p[q,f]p+pf[q,p]\\
&=\mathrm{i}\hbar fp+pf\mathrm{i}\hbar=\mathrm{i}\hbar(fp+pf)\\
[q,fp^2]&=[q,f]p^2+f[q,p^2]=f[q,p^2]\\
&=f[q,p]p+fp[q,p]=f\mathrm{i}\hbar p+fp\mathrm{i}\hbar=2\mathrm{i}\hbar fp
\end{aligned}$$

由于 $[q,p]=\mathrm{i}\hbar$, 在 q 表象中 $p=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q}$, 因而

$$[p,f(q)]=\left[-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q},f(q)\right]=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q}f(q)+\mathrm{i}\hbar f(q)\frac{\partial}{\partial q}=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial f}{\partial q}$$

这样

$$\begin{aligned}
[p,p^2f]&=p^2[p,f]+[p,p^2]f=p^2[p,f]=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}p^2f'\\
[p,pfp]&=p[p,fp]+[p,p]fp=p[p,fp]=pf[p,p]+p[p,f]p=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}pf'p\\
[p,fp^2]&=[p,f]p^2+f[p,p^2]=[p,f]p^2=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}f'p^2
\end{aligned}$$

证毕.

4.4 设算符 A 和 B 与它们的对易式 $[A,B]$ 都对易, 证明

$$[A,B^n]=nB^{n-1}[A,B],\quad [A^n,B]=nA^{n-1}[A,B]$$

证明 利用对易子的运算性质 $[A,BC]=B[A,C]+[A,B]C$

$$[A,B^n]=[A,B^{n-1}]B+B^{n-1}[A,B] \tag{4.3}$$

进而利用 $[A,B]$ 与 A 和 B 都对易, 采用递推的办法得

$$\begin{aligned}
[A,B^n]&=[A,B^{n-1}]B+B^{n-1}[A,B]=[A,B^{n-2}]B^2+B^{n-2}[A,B]B+B^{n-1}[A,B]\\
&=[A,B^{n-2}]B^2+2B^{n-1}[A,B]=\cdots=nB^{n-1}[A,B]
\end{aligned}$$

即得

$$[A,B^n]=nB^{n-1}[A,B] \tag{4.4}$$

对上式取厄米共轭, 并利用 $[A,B]$ 与 B 的对易性, 即得

$$[B^n,A]=nB^{n-1}[B,A]$$

对上式作交换 $A \leftrightarrow B$, 即得

$$[A^n, B] = nA^{n-1}[A, B] \tag{4.5}$$

说明 也可从式 (4.3) 出发, 采用归纳法证明.

4.5 证明

$$[A, B^n] = \sum_{s=0}^{n-1} B^s [A, B] B^{n-s-1}$$

并由此证明

$$[q, p^n] = ni\hbar p^{n-1}$$

其中 q, p 是一维体系的正则坐标及相应的正则动量.

证明 利用对易子的运算性质 $[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C$, 并采用递推的办法

$$\begin{aligned}
[A, B^n] &= \left[A, B^{n-1}\right] B + B^{n-1}[A, B] = \left[A, B^{n-2}\right] B^2 + B^{n-2}[A, B] B + B^{n-1}[A, B] \\
&= \left[A, B^{n-3}\right] B^3 + B^{n-3}[A, B] B^2 + B^{n-2}[A, B] B + B^{n-1}[A, B] = \cdots \\
&= \sum_{s=0}^{n-1} B^s [A, B] B^{n-s-1}
\end{aligned}$$

q, p 是一维体系的正则坐标及相应的正则动量, 加量子化条件后满足 $[q, p] = \mathrm{i}\hbar$, 由上式即得

$$[q, p^n] = \sum_{s=0}^{n-1} p^s [q, p] p^{n-s-1} = \sum_{s=0}^{n-1} p^s \mathrm{i}\hbar p^{n-s-1} = ni\hbar p^{n-1}$$

说明 更简便的, 上式也可利用题 4.4 的结果证明.

4.6 设 $F(x, p)$ 是 x_k 和 p_k 的整函数, 证明

$$[p_k, F] = -\mathrm{i}\hbar \frac{\partial F}{\partial x_k}, \quad [x_k, F] = \mathrm{i}\hbar \frac{\partial F}{\partial p_k}$$

整函数是指 $F(x, p)$ 可以展开成

$$F(x, p) = \sum_{m,n=0}^{\infty} \sum_{k,l=1}^{3} C_{kl}^{mn} x_k^m p_l^n$$

而 C_{kl}^{mn} 是数值系数.

证明 利用量子力学基本对易关系式 $[x_k, p_l] = \mathrm{i}\hbar\delta_{kl}$, 即有

$$\begin{aligned}
[p_k, F] &= [p_k, \sum_{m,n=0}^{\infty} \sum_{i,j=1}^{3} C_{ij}^{mn} x_i^m p_j^n] = \sum_{m,n=0}^{\infty} \sum_{i,j=1}^{3} [p_k, x_i^m p_j^n] = \sum_{m,n=0}^{\infty} \sum_{i,j=1}^{3} C_{ij}^{mn} [p, x_i^m] p_j^n \\
&= \sum_{m,n=0}^{\infty} \sum_{i,j=1}^{3} C_{ij}^{mn} \sum_{l=0}^{m-1} x_i^l [p_k, x_i] x_i^{m-l-1} p^n = \sum_{m,n=0}^{\infty} \sum_{i,j=1}^{3} C_{ij}^{mn} (-\mathrm{i}\hbar\delta_{ki}) m x_i^{m-1} p_j^n \\
&= \sum_{m,n=0}^{\infty} C_{mn} (-\mathrm{i}\hbar) \frac{\partial x_i^m}{\partial x_k} p_j^n = -\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial x_k} \sum_{m,n=0}^{\infty} \sum_{i,j=1}^{3} C_{ij}^{mn} x_i^m p_j^n = -\mathrm{i}\hbar \frac{\partial F}{\partial x_k}
\end{aligned}$$

以及

$$[x_k,F]=[x_k,\sum_{m,n=0}^{\infty}\sum_{i,j=1}^{3}C_{ij}^{mn}x_i^m p_j^n]=\sum_{m,n=0}^{\infty}\sum_{i,j=1}^{3}C_{ij}^{mn}[x_k,x^m p^n]\sum_{m,n=0}^{\infty}\sum_{i,j=1}^{3}C_{ij}^{mn}x_i^m[x_k,p_j^n]$$

$$=\sum_{m,n=0}^{\infty}\sum_{i,j=1}^{3}C_{ij}^{mn}x^m\sum_{l=0}^{n-1}p_j^l[x_k,p_j]p_j^{n-l-1}=\sum_{m,n=0}^{\infty}\sum_{i,j=1}^{3}C_{ij}^{mn}x_i^m\mathrm{i}\hbar\delta_{kj}np_j^{n-1}$$

$$=\sum_{m,n=0}^{\infty}\sum_{i,j=1}^{3}C_{ij}^{mn}x_i^m\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p_k}p_j^n=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p_k}\sum_{m,n=0}^{\infty}\sum_{i,j=1}^{3}C_{ij}^{mn}x_i^m p_j^n=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial F}{\partial p_k}$$

即已得所证结果.

4.7 证明

$$\lim_{\hbar\to 0}\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\hat{A},\hat{B}\right]=\{A,B\}_{\mathrm{P.B.}}$$

其中 $A(q,p)$, $B(q,p)$ 是经典正则坐标、动量的整函数, 上式右边为经典 Poisson 括号

$$\{A,B\}_{\mathrm{P.B.}}=\frac{\partial A}{\partial q}\frac{\partial B}{\partial p}-\frac{\partial A}{\partial p}\frac{\partial B}{\partial q}$$

而左边对易括号中的 $\hat{A}$, $\hat{B}$ 是相应的算符.

证明 按题设 $A(q,p)$, $B(q,p)$ 都是整函数, 故可表示为

$$A=\sum_{k,l=0}^{\infty}A_{kl}q^k p^l,\quad B=\sum_{m,n=0}^{\infty}B_{mn}q^m p^n$$

其中 A_{kl}, B_{mn} 都是常数量. 根据对易子的运算性质得

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right]=\left[\sum_{k,l=0}^{\infty}A_{kl}\hat{q}^k\hat{p}^l,\sum_{m,n=0}^{\infty}B_{mn}\hat{q}^m\hat{p}^n\right]=\sum_{k,l}A_{kl}\sum_{m,n}B_{mn}\left[\hat{q}^k\hat{p}^l,\hat{q}^m\hat{p}^n\right]$$

$$=\sum_{k,l}A_{kl}\sum_{m,n}B_{mn}\left\{\hat{q}^m\left[\hat{q}^k,\hat{p}^n\right]\hat{p}^l+\hat{q}^k\left[\hat{p}^l,\hat{q}^m\right]\hat{p}^n\right\}\tag{4.6}$$

由于 $[\hat{q},\hat{p}]=\mathrm{i}\hbar$, 则

$$\left[\hat{q}^k,\hat{p}^n\right]=\sum_{s=0}^{k-1}q^s\left[\hat{q},\hat{p}^n\right]\hat{q}^{k-s-1}=\mathrm{i}n\hbar\sum_{s=0}^{k-1}\hat{q}^s\hat{p}^{n-1}\hat{q}^{k-s-1}$$

$$\left[\hat{p}^l,\hat{q}^m\right]=\sum_{t=0}^{l-1}\hat{p}^t\left[\hat{p},\hat{q}^m\right]\hat{p}^{l-t-1}=-\mathrm{i}m\hbar\sum_{t=0}^{l-1}\hat{q}^t\hat{p}^{m-1}\hat{q}^{l-t-1}$$

把上面结果代入式 (4.6), 求 $\lim\limits_{\hbar\to 0}\dfrac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\hat{A},\hat{B}\right]$, 并注意当 $\hbar\to 0$ 时, $\hat{q}\to q$ 与 $\hat{p}\to p$ 成为可对易的量, 这样

$$\lim_{\hbar\to 0}\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\hat{A},\hat{B}\right]=\lim_{\hbar\to 0}\sum_{k,l}A_{kl}\sum_{m,n}B_{mn}\left\{kn\hat{q}^m\hat{q}^{k-1}\hat{p}^{n-1}\hat{p}^l-lm\hat{q}^k\hat{p}^{l-1}\hat{q}^{m-1}\hat{p}^n\right\}$$

$$=\sum_{k,l}A_{kl}kq^{k-1}p^l\sum_{m,n}B_{mn}q^m np^{n-1}-\sum_{k,l}A_{kl}q^k lp^{l-1}\sum_{m,n}B_{mn}mq^{m-1}p^n$$

$$=\frac{\partial A}{\partial q}\frac{\partial B}{\partial p}-\frac{\partial A}{\partial p}\frac{\partial B}{\partial q}=\{A,B\}_{\mathrm{P.B.}}$$

这样我们证明[①]了

$$\lim_{\hbar\to 0}\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\hat{A},\hat{B}\right]=\{A,B\}_{\mathrm{P.B.}}$$

① 还有一种证法见: 张永德. 量子力学 [M]. 北京: 科学出版社, 2002, p42~43.

4.8 证明当 $x \to \pm\infty$ 时若 $\dfrac{\partial^n}{\partial x^n}\psi$ 并不趋于 0, 则 $\left(\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\partial}{\partial x}\right)^{n+1}$ 不一定是厄米算符.

证明 厄米算符 H 的定义是其厄米共轭等于本身, 要求对体系任意的状态 ψ、φ 均满足

$$(\varphi, H\psi) = (H\varphi, \psi)$$

现若有体系的 Hilbert 态空间存在某个态函数 ψ, $x \to \pm\infty$ 时 $\dfrac{\partial^n}{\partial x^n}\psi$ 并不趋于 0. 不妨设 $x \to \pm\infty$ 时, $\dfrac{\partial^k}{\partial x^k}\psi \to 0 (0 \leqslant k < n)$, 任取另外一个态函数 φ, 令 $\left(\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\partial}{\partial x}\right)^{n+1} = p^{n+1}$, 则

$$\begin{aligned}
(\varphi, p^{n+1}\psi) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^* \left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}\right)^{n+1} \psi = -\int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}\varphi^*\right] \left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}\right)^{n} \psi + \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\varphi^* \left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}\right)^{n} \psi \Bigg|_{-\infty}^{+\infty} \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}\varphi\right]^* \left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}\right)^{n} \psi + \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\varphi^* \left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}\right)^{n} \psi \Bigg|_{-\infty}^{+\infty} = \cdots \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}\right)^{n+1} \varphi\right]^* \psi + \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\varphi^* \left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}\right)^{n} \psi \Bigg|_{-\infty}^{+\infty} = (p^{n+1}\varphi, \psi) + \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\varphi^* \left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x}\right)^{n} \psi \Bigg|_{-\infty}^{+\infty}
\end{aligned}$$

上面的 $\cdots$ 表示 n 次分部积分. 按题设, 对于 $x \to \pm\infty$ 时不趋于零的态函数 φ(如散射态) 上面最后一个等号右边第二项可能不为零, 则此时

$$(\varphi, p^{n+1}\psi) \neq (p^{n+1}\varphi, \psi)$$

因此 $p^{n+1} = \left(\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\partial}{\partial x}\right)^{n+1}$ 不一定是厄米算符.

4.9 设力学量算符 $\hat{A}$ 满足的最简单的代数方程为

$$f(\hat{A}) = \hat{A}^n + C_1\hat{A}^{n-1} + C_2\hat{A}^{n-2} + \cdots + C_n = 0 \tag{4.7}$$

$C_1, C_2, \cdots, C_n$ 是常系数. 证明 $\hat{A}$ 有 n 个本征值, 它们都是 $f(x) = 0$ 的根.

参阅 P.A.M. Dirac, The Principles of Quantum Mechanics, 4th ed., Oxford University Press, 1958, §9.

证明 将式 (4.7) 作用于体系任意状态的波函数 ψ 上, 均应有

$$f(\hat{A})\psi = 0 \tag{4.8}$$

现取 ψ 为 $\hat{A}$ 的本征函数 ψ_a, 本征值为 a, 即有 $\hat{A}\psi_a = a\psi_a$, 代入式 (4.8), $f(A)\psi_a = f(a)\psi_a$, 也就是

$$f(a)\psi_a = \left(a^n + C_1a^{n-1} + C_2a^{n-2} + \cdots + C_n\right)\psi_a = 0 \tag{4.9}$$

$f(a)$ 是一个数, ψ_a 非零态, 因此上式给出

$$f(a) = a^n + C_1a^{n-1} + C_2a^{n-2} + \cdots + C_n = 0 \tag{4.10}$$

设 $\{\psi_{a_1}, \psi_{a_2}, \cdots, \psi_{a_m}\}$ 是 A 的所有本征态, 相应的本征值 $a_1, a_2, \cdots, a_m$. 根据式 (4.10), 这些本征值都是 $f(a) = 0$ 的根 (实根). 由代数学基本定理, $m \leqslant n$, 且

$$f(a) = \prod_{k=1}^{m} (a - a_k) \cdot g(a)$$

因而

$$f(A)=\prod_{k=1}^{m}(A-a_k)\cdot g(A)=\hat{A}^n+C_1\hat{A}^{n-1}+C_2\hat{A}^{n-2}+\cdots+C_n$$

题给, 式 (4.7) 中的 $f(A)$ 是 $\hat{A}$ 满足的最简单的代数方程, 上式中只能是 $g(A)=1$, 由此知 $m=n$. 故式 (4.10) 应有 n 个根, 它们都是 $\hat{A}$ 的本征值.

反之, 如已知力学量算符 $\hat{A}$ 的 n 个本征值 $a_1, a_2, \cdots, a_n$, 则 $\hat{A}$ 的任何一个本征函数显然满足方程

$$\left(\hat{A}-a_1\right)\left(\hat{A}-a_2\right)\cdots\left(\hat{A}-a_n\right)\psi_a=0 \tag{4.11}$$

力学量算符 $\hat{A}$ 的所有本征态具有完备性, 或者说任何波函数都可以表示为 $\hat{A}$ 的所有本征态波函数的线性叠加, 所以式 (4.11) 对任意波函数都成立, 因此

$$\left(\hat{A}-a_1\right)\left(\hat{A}-a_2\right)\cdots\left(\hat{A}-a_n\right)=0 \tag{4.12}$$

上式应该和式 (4.7) 等价.

讨论 本题可见力学量算符 $\hat{A}$ 满足的最简单的代数方程阶数是 n 与 $\hat{A}$ 有 n 个本征值等价. 而从式 (4.7) 看出, 若 $\hat{A}$ 有 n 个本征值, 则 $\hat{A}$ 的任何非负幂次 (从而任意 $\hat{A}$ 的整函数) 都可以用 $\hat{A}^{n-1}, \hat{A}^{n-2}, \cdots, \hat{A}, \hat{I}$ 的线性叠加表示, 其中 $\hat{I}$ 为单位算符.

例如轨道角动量算符 $\hat{\boldsymbol{l}}$ 的三个直角坐标分量为 $\hat{l}_i(i=x,y,z)$, 对于 $l=1$, $\hat{l}_i$ 的本征值有 3 个, 为 $1, 0, -1$(取 $\hbar=1$), 因此 $\left(\hat{l}_i-1\right)\hat{l}_i\left(\hat{l}_i+1\right)=0$, 这样

$$\hat{l}_i^3=\hat{l}_i,\quad \hat{l}_i^4=\hat{l}_i^2,\quad \hat{l}_i^5=\hat{l}_i^3=\hat{l}_i,\cdots,\quad \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi\hat{l}_i}=\left(\hat{I}-\hat{l}_i^2\right)-\hat{l}_i\sin\varphi+\hat{l}_i^2\cos\varphi$$

对于 $l=2$, $\hat{l}_i$ 的本征值为 $2,1,0,-1,-2$(取 $\hbar=1$), 因而 $\left(\hat{l}_i-2\right)\left(\hat{l}_i-1\right)\hat{l}_i\left(\hat{l}_i+1\right)\left(\hat{l}_i+2\right)=0$, 这样

$$\hat{l}_i^5=5\hat{l}_i^3-4\hat{l}_i,\quad \hat{l}_i^6=5\hat{l}_i^4-4\hat{l}_i^2,\quad \hat{l}_i^7=5\hat{l}_i^5-4\hat{l}_i^3=21\hat{l}_i^3-20\hat{l}_i,\cdots$$

4.10 定义反对易式 $\{A,B\}=AB+BA$, 证明

$$\begin{aligned}&[AB,C]=A\{B,C\}-\{A,C\}B,\quad [A,BC]=\{A,B\}C-B\{A,C\},\\&[AB,C]=A\,[B,C]+[A,C]\,B,\quad\ [A,BC]=[A,B]\,C+B\,[A,C]\end{aligned}$$

证明 利用对易式的定义作直接演算

$$\begin{aligned}&[AB,C]=ABC-CAB=ABC+ACB-ACB-CAB=A\{B,C\}-\{A,C\}B\\&[A,BC]=-\,[BC,A]=-B\{C,A\}+\{B,A\}C=\{A,B\}C-B\{A,C\}\\&[AB,C]=ABC-CAB=ABC-ACB+ACB-CAB=A\,[B,C]+[A,C]\,B\\&[A,BC]=-\,[BC,A]=-B\,[C,A]-[B,A]\,C=[A,B]\,C+B\,[A,C]\end{aligned}$$

即已得所证结果.

4.11 设 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}, \boldsymbol{C}$ 为矢量算符. $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 的标积和矢量积定义为

$$\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}=\sum_{\alpha}A_\alpha B_\alpha,\qquad (\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})_\gamma=\sum_{\alpha\beta}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\alpha B_\beta$$

其中 $\alpha,\beta,\gamma=x,y,z$, $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$ 为 Levi-Civita 符号. 试验证

$$\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})=(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\cdot\boldsymbol{C}=\sum_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\alpha B_\beta C_\gamma$$

$$[\boldsymbol{A}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})]_\alpha=\boldsymbol{A}\cdot(B_\alpha\boldsymbol{C})-(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})C_\alpha$$

$$[(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\times\boldsymbol{C}]_\alpha=\boldsymbol{A}\cdot(B_\alpha\boldsymbol{C})-A_\alpha(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{C})$$

解 采用 Einstein 重复指标求和约定

$$\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}=\sum_\alpha A_\alpha B_\alpha=A_\alpha B_\alpha,\quad(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})_\gamma=\sum_{\alpha\beta}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\alpha B_\beta=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\alpha B_\beta$$

这样对标量三重积

$$\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})=A_\alpha(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})_\alpha=A_\alpha\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}B_\beta C_\gamma=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\alpha B_\beta C_\gamma$$

$$(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\cdot\boldsymbol{C}=(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})_\gamma C_\gamma=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\alpha B_\beta C_\gamma=\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})$$

对矢量三重积, 若是 3 个 c 数矢量 $\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$ 与 $\boldsymbol{c}$, 则有

$$\boldsymbol{a}\times(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})=(\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{a})\boldsymbol{b}-(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})\boldsymbol{c}=(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{c})\boldsymbol{b}-(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{a})\boldsymbol{c}=\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{c}\boldsymbol{b})-\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\boldsymbol{c})$$

但是对 q 数一定要注意一条, 乘积不能随便交换位置. 我们有

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{A}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})]_\alpha&=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\beta(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})_\gamma=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\beta\varepsilon_{\gamma\mu\nu}B_\mu C_\nu\\&=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\mu\nu\gamma}A_\beta B_\mu C_\nu=(\delta_{\alpha\mu}\delta_{\beta\nu}-\delta_{\alpha\nu}\delta_{\beta\mu})A_\beta B_\mu C_\nu\\&=A_\beta B_\alpha C_\beta-A_\beta B_\beta C_\alpha=\boldsymbol{A}\cdot(B_\alpha\boldsymbol{C})-(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})C_\alpha\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}[(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\times\boldsymbol{C}]_\alpha&=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})_\beta C_\gamma=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\beta\mu\nu}A_\mu B_\nu C_\gamma\\&=-\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\mu\beta\nu}A_\mu B_\nu C_\gamma=(-\delta_{\alpha\mu}\delta_{\gamma\nu}+\delta_{\alpha\nu}\delta_{\gamma\mu})A_\mu B_\nu C_\gamma\\&=A_\gamma B_\alpha C_\gamma-A_\alpha B_\gamma C_\gamma=\boldsymbol{A}\cdot(B_\alpha\boldsymbol{C})-A_\alpha(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{C})\end{aligned}$$

4.12 设 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$ 为矢量算符, F 为标量算符. 证明

$$\begin{aligned}[F,\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}]&=[F,\overset{\boldsymbol{r}}{\boldsymbol{A}}]\cdot\boldsymbol{B}+\boldsymbol{A}\cdot[F,\boldsymbol{B}]\\[F,\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}]&=[F,\boldsymbol{A}]\times\boldsymbol{B}+\boldsymbol{A}\times[F,\boldsymbol{B}]\end{aligned}$$

证明 直接利用对易运算的关系式 (见题 4.10) 进行演算

$$\begin{aligned}[F,\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}]&=[F,A_\alpha B_\alpha]=A_\alpha[F,B_\alpha]+[F,A_\alpha]B_\alpha\\&=A_\alpha[F,\boldsymbol{B}]_\alpha+[F,\boldsymbol{A}]_\alpha B_\alpha=\boldsymbol{A}\cdot[F,\boldsymbol{B}]+[F,\boldsymbol{A}]\cdot\boldsymbol{B}\\[F,\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}]_\alpha&=[F,(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})_\alpha]=[F,\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\beta B_\gamma]\\&=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\beta[F,B_\gamma]+\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}[F,A_\beta]B_\gamma\\&=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\beta[F,\boldsymbol{B}]_\gamma+\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}[F,\boldsymbol{A}]_\beta B_\gamma\\&=\{[F,\boldsymbol{A}]\times\boldsymbol{B}+\boldsymbol{A}\times[F,\boldsymbol{B}]\}_\alpha\end{aligned}$$

4.13 设 F 是由 $\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{p}$ 构成的标量算符, 证明

$$[\boldsymbol{l},F]=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial F}{\partial\boldsymbol{p}}\times\boldsymbol{p}-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}\times\frac{\partial F}{\partial\boldsymbol{r}}$$

证明　利用角动量算符的定义式 $\boldsymbol{l}=\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{p}$, 即得

$$[\boldsymbol{l},F]=[\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{p},F]=-[F,\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{p}]$$

利用题 4.12 结果得

$$[\boldsymbol{l},F]=[\boldsymbol{x},F]\times\boldsymbol{p}+\boldsymbol{x}\times[\boldsymbol{p},F]$$

再由题 4.6 结果得

$$[\boldsymbol{l},F]=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial F}{\partial\boldsymbol{p}}\times\boldsymbol{p}-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}\times\frac{\partial F}{\partial\boldsymbol{r}}$$

得证.

4.14　证明

$$\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}+\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p},\quad \mathrm{i}\hbar(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}-\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=[\boldsymbol{l}^2,\boldsymbol{p}]$$

证明　对第一式, 直将角动量算符的定义式 $l_i=\varepsilon_{ijk}x_jp_k$ 代入

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}+\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p}]_\alpha&=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}(p_\beta l_\gamma+l_\beta p_\gamma)=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}(p_\beta l_\gamma-l_\gamma p_\beta)\\&=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\gamma\mu\nu}(p_\beta x_\mu p_\nu-x_\mu p_\nu p_\beta)=(\delta_{\alpha\mu}\delta_{\beta\nu}-\delta_{\alpha\nu}\delta_{\beta\mu})(p_\beta x_\mu p_\nu-x_\mu p_\nu p_\beta)\\&=p_\beta x_\alpha p_\beta-x_\alpha p_\beta p_\beta-p_\beta x_\beta p_\alpha+x_\beta p_\alpha p_\beta=[p_\beta,x_\alpha]p_\beta-[p_\beta,x_\beta]p_\alpha\\&=-\mathrm{i}\hbar\delta_{\alpha\beta}p_\beta+3\mathrm{i}\hbar p_\alpha=2\mathrm{i}\hbar p_\alpha\end{aligned}$$

即得 $\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}+\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}$. 为证第二式, 可利用角动量与动量的对易关系式

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{l}^2,\boldsymbol{p}]_\alpha&=[\boldsymbol{l}^2,p_\alpha]=[l_\beta l_\beta,p_\alpha]=l_\beta[l_\beta,p_\alpha]+[l_\beta,p_\alpha]l_\beta=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\beta\alpha\gamma}l_\beta p_\gamma+\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\beta\alpha\gamma}p_\gamma l_\beta\\&=-\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}l_\beta p_\gamma+\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\gamma\beta}p_\gamma l_\beta=\mathrm{i}\hbar(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}-\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})_\alpha\end{aligned}$$

这样上面已证明

$$\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}+\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p},\quad \mathrm{i}\hbar(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}-\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=[\boldsymbol{l}^2,\boldsymbol{p}]$$

4.15　证明

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{l}=\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{r}=0, && \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{l}=\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{p}=0\\&(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{p}=0, && \boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})=0\\&(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})\cdot\boldsymbol{p}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}^2, && \boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}^2\\&(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})\cdot\boldsymbol{l}=0, && \boldsymbol{l}\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=0\\&(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{l}=0, && \boldsymbol{l}\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})=0\\&\boldsymbol{p}\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=-(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times\boldsymbol{p}=\boldsymbol{l}\boldsymbol{p}^2\end{aligned}$$

证明　利用 ε_{ijk} 的全反对称性质, 根据 $\boldsymbol{l}$ 的定义 $l_i=\varepsilon_{ijk}x_jp_k$ 得

$$\begin{aligned}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{l}&=x_il_i=x_i\varepsilon_{ijk}x_jp_k=\varepsilon_{ijk}x_ix_jp_k=\varepsilon_{ijk}x_jx_ip_k=-\varepsilon_{ijk}x_ix_jp_k=0\\\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{r}&=l_ix_i=\varepsilon_{ijk}x_jp_kx_i=\varepsilon_{ijk}x_jx_ip_k=0\end{aligned}$$

类似可证 $\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{l}=\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{p}=0$, $(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{p}=0$, $\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})=0$, $(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})\cdot\boldsymbol{l}=0$ 以及 $\boldsymbol{l}\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=0$. 它们有个共同特点, 在分量乘积求和式中, 相邻同一个力学量的分量指标 (当然是交换对称的) 与全反对称张量 2 个指标缩并求和, 必然给出 0 结果.

利用上题结果 $\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}+\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}$, 这样

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})\cdot\boldsymbol{p}&=(2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}-\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{p}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}^2\\\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})&=\boldsymbol{p}\cdot(2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})=\boldsymbol{p}\cdot2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}^2\\(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{l}&=(2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})\cdot\boldsymbol{l}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{l}=0\\\boldsymbol{l}\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})&=\boldsymbol{l}\cdot(2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}-\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=\boldsymbol{l}\cdot2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}=0\end{aligned}$$

最后

$$\begin{aligned}
[\boldsymbol{p}\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})]_i &= \varepsilon_{ijk}p_j\,(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})_k = \varepsilon_{ijk}p_j\varepsilon_{kmn}p_jl_mp_n = (\delta_{im}\delta_{jn}-\delta_{in}\delta_{jm})\,p_jl_mp_n\\
&= p_jl_ip_j - p_ml_mp_i = [p_j,l_i]\,p_j + l_ip_jp_j + 0 = \mathrm{i}\varepsilon_{jik}p_kp_j + l_i\boldsymbol{p}^2 = l_i\boldsymbol{p}^2\\
[(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times\boldsymbol{p}]_i &= \varepsilon_{ijk}\,(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})_j\,p_k = \varepsilon_{ijk}\varepsilon_{jmn}l_mp_np_k\\
&= (\delta_{in}\delta_{km}-\delta_{im}\delta_{kn})\,l_mp_np_k = l_kp_ip_k - l_ip_np_n = -l_i\boldsymbol{p}^2
\end{aligned}$$

也就有

$$\boldsymbol{p}\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p}) = -\,(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times\boldsymbol{p} = \boldsymbol{l}\boldsymbol{p}^2$$

4.16 证明

$$\begin{aligned}
&\left[\boldsymbol{p},\frac{1}{r}\right] = \mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}, && \left[\boldsymbol{p},r^2\right] = -2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}\\
&\left[\boldsymbol{p}^2,\frac{1}{r}\right] = 4\pi\hbar^2\delta(\boldsymbol{r}) + 2\hbar^2\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}, && \left[\boldsymbol{p}^2,r^2\right] = -4\hbar^2r\frac{\partial}{\partial r} - 6\hbar^2\\
&\left[\boldsymbol{p}^2,\boldsymbol{r}\right] = -2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}, && \left[\boldsymbol{p}^2,\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right] = 2\hbar^2\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r^3} + \frac{\boldsymbol{r}}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r}\nabla\right)
\end{aligned}$$

证明 对于 $\boldsymbol{r}$ 的可微函数 $F(\boldsymbol{r})$, 有下式成立①

$$[\boldsymbol{p},F(\boldsymbol{r})] = -\mathrm{i}\hbar\nabla F \tag{4.13}$$

同样对于 $\boldsymbol{p}$ 的可微函数 $G(\boldsymbol{p})$, 有下式成立

$$[\boldsymbol{r},G(\boldsymbol{p})] = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial G}{\partial\boldsymbol{p}} \tag{4.14}$$

这样

$$\left[\boldsymbol{p},\frac{1}{r}\right] = -\mathrm{i}\nabla\frac{1}{r} = \mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{r}}{r^3},\quad \left[\boldsymbol{p},r^2\right] = -\mathrm{i}\nabla(x^2+y^2+z^2)^2 = -2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}$$

利用公式 (见题 4.12)

$$[F,\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}] = [F,\boldsymbol{A}]\cdot\boldsymbol{B} + \boldsymbol{A}\cdot[F,\boldsymbol{B}]$$

可得

$$\begin{aligned}
\left[\boldsymbol{p}^2,\frac{1}{r}\right] &= \boldsymbol{p}\cdot\left[\boldsymbol{p},\frac{1}{r}\right] + \left[\boldsymbol{p},\frac{1}{r}\right]\cdot\boldsymbol{p} = \mathrm{i}\hbar\left(\boldsymbol{p}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r^3} + \frac{\boldsymbol{r}}{r^3}\cdot\boldsymbol{p}\right)\\
&= -\hbar^2\nabla\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r^3} + 2\mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}\cdot\boldsymbol{p} = 4\pi\hbar^2\delta(\boldsymbol{r}) + 2\hbar^2\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} \qquad (4.15)\\
\left[\boldsymbol{p}^2,r^2\right] &= \boldsymbol{p}\cdot\left[\boldsymbol{p},r^2\right] + \left[\boldsymbol{p},r^2\right]\cdot\boldsymbol{p} = -2\mathrm{i}\hbar\,(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p} + \boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})\\
&= -4\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p} - 2\hbar^2\nabla\cdot\boldsymbol{r} = -4\hbar^2r\frac{\partial}{\partial r} - 6\hbar^2 \qquad (4.16)
\end{aligned}$$

利用式 (4.14), 即得

$$\left[\boldsymbol{p}^2,\boldsymbol{r}\right] = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial p^2}{\partial\boldsymbol{p}} = -2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p} \tag{4.17}$$

---

① 若 F 是整函数, 则可对 F 的幂级数利用 $\boldsymbol{r}$, $\boldsymbol{p}$ 的基本对易关系证明. 否则在坐标表象, $\boldsymbol{p} = -\mathrm{i}\hbar\nabla$. 因而对任意的态函数 ψ, 都有

$$[\boldsymbol{p},F(\boldsymbol{r})]\,\psi = -\mathrm{i}\hbar\nabla F\psi + F\mathrm{i}\hbar\nabla\psi = (-\mathrm{i}\hbar\nabla F)\,\psi$$

因而 $[\boldsymbol{p},F(\boldsymbol{r})] = -\mathrm{i}\hbar\nabla F$.

故利用式 (4.15) 得

$$\begin{aligned}\left[\boldsymbol{p}^2,\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right]&=\left[\boldsymbol{p}^2,\boldsymbol{r}\right]\frac{1}{r}+\boldsymbol{r}\left[\boldsymbol{p}^2,\frac{1}{r}\right]=-2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}\frac{1}{r}+4\pi\hbar^2\boldsymbol{r}\delta(\boldsymbol{r})+2\hbar^2\boldsymbol{r}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\\&=-2\hbar\nabla\frac{1}{r}+2\hbar^2\boldsymbol{r}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}=-2\hbar\left(\nabla\frac{1}{r}\right)-2\hbar\frac{1}{r}\nabla+2\hbar^2\boldsymbol{r}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\\&=2\hbar^2\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}+\frac{\boldsymbol{r}}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{1}{r}\nabla\right)\end{aligned}\tag{4.18}$$

4.17 定义径向动量算符 $p_r=\dfrac{1}{2}\left(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}\dfrac{1}{r}+\dfrac{1}{r}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}\right)$, 证明 (4.19)

(a) $p_r^\dagger=p_r$; (b) $p_r=-\mathrm{i}\hbar\left(\dfrac{\partial}{\partial r}+\dfrac{1}{r}\right)$; (c) $[r,p_r]=\mathrm{i}\hbar$; (d) $p_r^2=-\hbar^2\left(\dfrac{\partial^2}{\partial r^2}+\dfrac{2}{r}\dfrac{\partial}{\partial r}\right)=-\hbar^2\dfrac{1}{r}\dfrac{\partial^2}{\partial r^2}r=-\hbar^2\dfrac{1}{r^2}\dfrac{\partial}{\partial r}r^2\dfrac{\partial}{\partial r}$

证明 令 $\boldsymbol{e}_r=\dfrac{1}{r}\boldsymbol{r}$, 则 $p_r=\dfrac{1}{2}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{e}_r+\boldsymbol{e}_r\cdot\boldsymbol{p})$.

(a) 由 $\boldsymbol{e}_r=\boldsymbol{e}_r^\dagger$, $\boldsymbol{p}^\dagger=\boldsymbol{p}$, 知

$$\begin{aligned}p_r^\dagger&=\left[\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{e}_r+\boldsymbol{e}_r\cdot\boldsymbol{p}\right)\right]^\dagger=\frac{1}{2}\left[(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{e}_r)^\dagger+(\boldsymbol{e}_r\cdot\boldsymbol{p})^\dagger\right]\\&=\frac{1}{2}\left[(\boldsymbol{e}_r)^\dagger\cdot(\boldsymbol{p})^\dagger+(\boldsymbol{p})^\dagger\cdot(\boldsymbol{e}_r)^\dagger\right]=\frac{1}{2}\left[\boldsymbol{e}_r\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{e}_r\right]=p_r\end{aligned}$$

(b) 我们先计算径向单位矢量 $\boldsymbol{e}_r$ 的散度

$$\nabla\cdot\boldsymbol{e}_r=\nabla\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}=\frac{1}{r}\nabla\cdot\boldsymbol{r}+\boldsymbol{r}\cdot\nabla\frac{1}{r}=\frac{3}{r}+\boldsymbol{r}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}=\frac{2}{r}$$

即有

$$\nabla\cdot\boldsymbol{e}_r=\frac{2}{r}\tag{4.20}$$

根据 p_r 定义式

$$p_r=-\mathrm{i}\hbar\left(\nabla\cdot\boldsymbol{e}_r+\boldsymbol{e}_r\cdot\nabla\right)/2=-\mathrm{i}\hbar\left[(\nabla\cdot\boldsymbol{e}_r)+2\boldsymbol{e}_r\cdot\nabla\right]/2=-\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)$$

也就是

$$p_r=-\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)\tag{4.21}$$

(c) 由式 (4.21) 立得 $[r,p_r]=\mathrm{i}\hbar$;

(d) 由式 (4.21) 得

$$\begin{aligned}p_r^2&=-\hbar^2\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)^2=-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{\partial}{\partial r}\frac{1}{r}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\right)\\&=-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)=-\hbar^2\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r=-\hbar^2\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}\end{aligned}$$

证毕.

4.18 证明

$$\begin{aligned}\boldsymbol{l}^2&=r^2p^2-(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})^2+\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}\\\boldsymbol{p}^2&=\frac{1}{r^2}\boldsymbol{l}^2+p_r^2=\frac{1}{r^2}\boldsymbol{l}^2-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)\end{aligned}$$

证明　利用角动量算符的定义式 $l_i=\varepsilon_{ijk}x_jp_k$ 直接演算

$$\begin{aligned}\boldsymbol{l}^2=&l_il_i=\varepsilon_{ijk}x_jp_k\cdot\varepsilon_{ij'k'}x_{j'}p_{k'}\\=&\left(\delta_{jj'}\delta_{kk'}-\delta_{jk'}\delta_{kj'}\right)x_jp_kx_{j'}p_{k'}=x_jp_kx_jp_k-x_jp_kx_kp_j\\=&x_j\{x_jp_k+[p_k,x_j]\}p_k-x_j\{x_kp_k+[p_k,x_k]\}p_j\\=&x_jx_jp_kp_k-\mathrm{i}\hbar\delta_{kj}x_jp_k+3\mathrm{i}\hbar x_jp_j-x_k\{p_kx_j+[x_j,p_k]\}p_j\\=&x_jx_jp_kp_k-\mathrm{i}\hbar x_jp_j+3\mathrm{i}\hbar x_jp_j-(x_jp_j)x_kp_k-\mathrm{i}\delta_{kj}\hbar x_kp_j\\=&r^2p^2-(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})^2+\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}\end{aligned}$$

在坐标表象 $p=-\mathrm{i}\hbar\nabla$, 因而

$$\begin{aligned}\boldsymbol{p}^2=&-\hbar^2\nabla^2=-\hbar^2\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}\\=&-\hbar^2\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\boldsymbol{l}^2}{r^2}=p_r^2+\frac{\boldsymbol{l}^2}{r^2}\end{aligned}$$

说明 1　直接利用题 4.11 的结果, 可得题中第一式的另一种证法

$$\begin{aligned}\boldsymbol{l}^2=&(\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{p})\cdot(\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{p})=[(\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{p})\times\boldsymbol{x}]\cdot\boldsymbol{p}=-[(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{x})\times\boldsymbol{x}]\cdot\boldsymbol{p}\\=&-[(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x})\boldsymbol{x}-\boldsymbol{p}(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x})]\cdot\boldsymbol{p}=-\{(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}-3\mathrm{i}\hbar)\boldsymbol{x}-[(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x})\boldsymbol{p}-2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{x}]\}\cdot\boldsymbol{p}\\=&r^2p^2-(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})^2+\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}\end{aligned}$$

说明 2　关于第二个等式也可如下证明, 由于

$$\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}=\boldsymbol{r}\cdot(-\mathrm{i}\hbar)\nabla=-\mathrm{i}\hbar r\frac{\partial}{\partial r},\quad(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})^2=-\hbar^2\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)^2$$

这样利用第一个等式

$$\begin{aligned}\boldsymbol{l}^2=&\boldsymbol{r}^2\boldsymbol{p}^2-(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})^2+\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}=\boldsymbol{r}^2\boldsymbol{p}^2+\hbar^2\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)^2+\hbar^2r\frac{\partial}{\partial r}\\=&r^2\boldsymbol{p}^2+\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)=r^2\boldsymbol{p}^2-r^2p_r^2\end{aligned}$$

或者 $\boldsymbol{l}^2=r^2\boldsymbol{p}^2-r^2p_r^2$, 此式两边左乘 r^{-2}, 即得 $\boldsymbol{p}^2=p_r^2+r^{-2}\boldsymbol{l}^2$.

4.19　证明

$$(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}=-\frac{\boldsymbol{l}^2}{r}\tag{4.22}$$

$$\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=-\frac{\boldsymbol{l}^2}{r}+2\hbar\frac{\partial}{\partial r}\tag{4.23}$$

$$\frac{\boldsymbol{r}}{r}\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})+(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times\frac{\boldsymbol{r}}{r}=2\mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{l}}{r}\tag{4.24}$$

证法一　我们首先注意角动量算符

$$\boldsymbol{l}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}=-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}\times\nabla=-\mathrm{i}\hbar\left(\boldsymbol{\varphi}_0\frac{\partial}{\partial\theta}-\boldsymbol{\theta}_0\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

只作用于角度变量. 利用[①] $(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\cdot\boldsymbol{C}=\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})$ 得

$$(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}=(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{r}\frac{1}{r}=\boldsymbol{l}\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{r})\frac{1}{r}=-\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{l}\frac{1}{r}=-\boldsymbol{l}^2\frac{1}{r}=-\frac{1}{r}\boldsymbol{l}^2=-\frac{\boldsymbol{l}^2}{r}$$

这给出式 (4.22). 由题 4.14 的结果

$$\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}+\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p} \tag{4.25}$$

可得

$$\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot(-\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}+2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p})=-\frac{1}{r}(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{l}+2\hbar\frac{\partial}{\partial r}=-\frac{\boldsymbol{l}^2}{r}+2\hbar\frac{\partial}{\partial r}$$

这给出式 (4.23). 再由题 4.11

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{A}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})]_\alpha&=\boldsymbol{A}\cdot(B_\alpha\boldsymbol{C})-(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})C_\alpha\\ [(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\times\boldsymbol{C}]_\alpha&=\boldsymbol{A}\cdot(B_\alpha\boldsymbol{C})-A_\alpha(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{C})\end{aligned} \tag{4.26}$$

直接演算

$$\begin{aligned}\left[\frac{\boldsymbol{r}}{r}\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})+(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right]_k&=\frac{1}{r}\left[\boldsymbol{r}\cdot(l_k\boldsymbol{p})-(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{l})\,p_k\right]+\left[\boldsymbol{l}\cdot(p_k\boldsymbol{r})-l_k\,(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})\right]\frac{1}{r}\\ &=\frac{1}{r}x_jl_kp_j-l_kp_j\frac{1}{r}x_j+\left[\boldsymbol{l}\cdot(p_k\boldsymbol{r})-(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{p})\,x_k\right]\frac{1}{r}\\ &=\left[\frac{1}{r}x_j,l_kp_j\right]+\left[\boldsymbol{l}\times(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{r})\right]_k\frac{1}{r}\ ,\\ &=\left[\frac{1}{r}x_j,l_kp_j\right]-(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{l})_k\frac{1}{r}=\left[\frac{1}{r}x_j,l_kp_j\right]-\mathrm{i}\hbar l_k\frac{1}{r}\end{aligned} \tag{4.27}$$

上面用了 $\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{l}=\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{l}=0$ 等, 式中采用 Einstein 求和约定. 而

$$\begin{aligned}\left[\frac{1}{r}x_j,l_kp_j\right]&=\frac{1}{r}\left[x_j,l_kp_j\right]+\left[\frac{1}{r},l_kp_j\right]x_j=\frac{1}{r}l_k\left[x_j,p_j\right]+\frac{1}{r}\left[x_j,l_k\right]p_j+l_k\left[\frac{1}{r},p_j\right]x_j\\ &=\frac{3\mathrm{i}\hbar}{r}l_k+\frac{\mathrm{i}\hbar}{r}\varepsilon_{jki}x_ip_j-\mathrm{i}\hbar\frac{l_k}{r}=\frac{3\mathrm{i}\hbar}{r}l_k\end{aligned}$$

代入式 (4.27) 即得

$$\left[\frac{\boldsymbol{r}}{r}\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})+(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right]_k=\frac{2\mathrm{i}\hbar}{r}l_k$$

这给出式 (4.24).

证法二 下面各式采用 Einstein 求和约定.

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}&=(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})_i\frac{x_i}{r}=\varepsilon_{ijk}l_jp_k\frac{x_i}{r}=l_j\varepsilon_{ijk}x_ip_k\frac{1}{r}=-l_j\varepsilon_{jik}x_ip_k\frac{1}{r}\\ &=-l_jl_j\frac{1}{r}=-\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{l}\frac{1}{r}=-\boldsymbol{l}^2\frac{1}{r}=-\frac{1}{r}\boldsymbol{l}^2=-\frac{\boldsymbol{l}^2}{r}\end{aligned}$$

这给出式 (4.22). 而

$$\begin{aligned}\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})&=\frac{x_i}{r}(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})_i=\frac{x_i}{r}\varepsilon_{ijk}l_jp_k=\frac{1}{r}\varepsilon_{ijk}x_i\left\{p_kl_j+[l_j,p_k]\right\}=\frac{1}{r}\varepsilon_{ijk}x_ip_kl_j+\frac{1}{r}\varepsilon_{ijk}x_i\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{jkl}p_l\\ &=-\frac{1}{r}\varepsilon_{jik}x_ip_kl_j+\frac{1}{r}\varepsilon_{ijk}x_i\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ljk}p_l=-\frac{1}{r}\boldsymbol{l}^2+2\delta_{il}x_ip_l=-\frac{\boldsymbol{l}^2}{r}+2\hbar\frac{\partial}{\partial r}\end{aligned}$$

① 也可利用 $(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{r}=\varepsilon_{ijk}l_jp_kx_i$ 直接验证.

这给出式 (4.23). 最后

$$\begin{aligned}\left[\frac{\boldsymbol{r}}{r}\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})+(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right]_k&=\varepsilon_{ijk}\frac{x_i}{r}(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})_j+\varepsilon_{ijk}(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})_i\frac{x_j}{r}\\&=\varepsilon_{ijk}\frac{x_i}{r}\varepsilon_{jlm}l_lp_m+\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{ilm}l_lp_m\frac{x_j}{r}\\&=(\delta_{im}\delta_{kl}-\delta_{il}\delta_{km})\frac{x_i}{r}l_lp_m+(\delta_{jl}\delta_{km}-\delta_{jm}\delta_{kl})l_lp_m\frac{x_j}{r}\\&=\frac{x_i}{r}l_kp_i-\frac{x_i}{r}l_ip_k+l_jp_k\frac{x_j}{r}-l_kp_j\frac{x_j}{r}\\&=\frac{x_i}{r}p_il_k+\frac{x_i}{r}[l_k,p_i]-0+[l_j,p_k]\frac{x_j}{r}+p_kl_j\frac{x_j}{r}-l_kp_j\frac{x_j}{r}\\&=l_k\left(\frac{x_i}{r}p_i-p_i\frac{x_i}{r}\right)+\frac{x_i}{r}\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{kij}p_j-0+\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{jki}p_i\frac{x_j}{r}+0\\&=2\mathrm{i}\hbar\frac{l_k}{r}\end{aligned}$$

其中利用了 $[\boldsymbol{l},\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}]=0$ 以及题 4.17 的式 (4.20) 所给 $\nabla\cdot\dfrac{\boldsymbol{r}}{r}=\dfrac{2}{r}$. 由上式即可得到式 (4.24).

证法三 [关于式 (4.24)] 利用式 (4.25), 即得

$$\boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{l}-\boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}) \tag{4.28}$$

再由式 (4.26), 即得

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})]_k&=\boldsymbol{r}p_k\cdot\boldsymbol{l}-(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})l_k=\{p_k\boldsymbol{r}+[\boldsymbol{r},p_k]\}\cdot\boldsymbol{l}-(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})l_k\\&=p_k\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{l}+\mathrm{i}\hbar l_k-(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})l_k=(\mathrm{i}\hbar-\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})l_k\end{aligned}$$

也就是

$$\boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})=(\mathrm{i}\hbar-\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})\boldsymbol{l} \tag{4.29}$$

代入式 (4.28), 即得

$$\boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{l}+(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})\boldsymbol{l} \tag{4.30}$$

上式两边左乘 $\dfrac{1}{r}$, 即得

$$\frac{\boldsymbol{r}}{r}\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=\mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{l}}{r}+\frac{1}{r}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})\boldsymbol{l} \tag{4.31}$$

类似的, 由式 (4.25) 得

$$(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times\boldsymbol{r}=-2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{l}-(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})\times\boldsymbol{r} \tag{4.32}$$

上式两边右乘 $\dfrac{1}{r}$, 即得

$$(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times\frac{\boldsymbol{r}}{r}=-2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{l}\frac{1}{r}-(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})\times\frac{\boldsymbol{r}}{r} \tag{4.33}$$

对式 (4.31) 取厄米共轭得

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})\times\frac{\boldsymbol{r}}{r}&=-\mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{l}}{r}+\boldsymbol{l}\left(\boldsymbol{p}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)=-\mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{l}}{r}+\boldsymbol{l}\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p}-2\mathrm{i}\hbar\frac{1}{r}\right)\\&=\boldsymbol{l}\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p}\right)-3\mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{l}}{r}=\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p}\right)\boldsymbol{l}-3\mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{l}}{r}\end{aligned} \tag{4.34}$$

其中利用了题 4.17 的式 (4.20) 所给 $\nabla\cdot\dfrac{\boldsymbol{r}}{r}=\dfrac{2}{r}$, 最后一个等号是由于 $\dfrac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p}=-\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial r}$ 和 $\boldsymbol{l}$ 对易.

把式 (4.34) 代入式 (4.33), 即可得到

$$(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times\frac{\boldsymbol{r}}{r}=-\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p}\right)\boldsymbol{l}+\mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{l}}{r} \tag{4.35}$$

式 (4.31) 加式 (4.35), 即给出所要证的式 (4.24).

4.20 证明

$$(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})^2=(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})^2=-(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})=\boldsymbol{l}^2p^2$$
$$(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=-\boldsymbol{l}^2p^2-4\hbar^2p^2$$
$$(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{l}p^2$$

证明 利用题 4.11 的结果知

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})&=[(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times\boldsymbol{l}]\cdot\boldsymbol{p}=[\boldsymbol{l}\cdot p_i\boldsymbol{l}-l_i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{l})]\,p_i\\&=l_kp_il_kp_i=l_k\left\{l_kp_i+[p_i,l_k]\right\}p_i\\&=\boldsymbol{l}^2p^2-\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{kij}l_kp_jp_i=\boldsymbol{l}^2\boldsymbol{p}^2\\(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})&=[(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})\times\boldsymbol{p}]\cdot\boldsymbol{l}=[\boldsymbol{p}\cdot l_i\boldsymbol{p}-p_i(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{p})]\,l_i\\&=p_kl_ip_kl_i=p_k\left\{p_kl_i+[l_i,p_k]\right\}l_i\\&=\boldsymbol{p}^2\boldsymbol{l}^2-\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{kij}p_kp_jl_i=\boldsymbol{l}^2\boldsymbol{p}^2\end{aligned}$$

再由题 4.14 的结果 $\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}+\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}$, 即有 $(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})=(2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}-\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})=-(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})$. 而

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})&=\varepsilon_{ijk}p_jl_k\cdot\varepsilon_{ij'k'}l_{j'}p_{k'}\\&=[\delta_{jj'}\delta_{kk'}-\delta_{jk'}\delta_{kj'}]p_jl_kl_{j'}p_{k'}=p_jl_kl_jp_k-p_jl_kl_kp_j\\&=p_j\{l_jl_k+[l_k,l_j]\}p_k-\{l_kp_j+[p_j,l_k]\}l_kp_j\\&=0+p_j(\mathrm{i}\hbar)\varepsilon_{ikj}l_ip_k-l_kp_jl_kp_j+\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ikj}p_il_kp_j\\&=-l_k\{l_kp_j+[p_j,l_k]\}p_j+2\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}p_il_jp_k\\&=-l_kl_kp_jp_j-\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}l_kp_ip_j+2\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}\{l_jp_i+[p_i,l_j]\}p_k\\&=-\boldsymbol{l}^2p^2+0+0+2\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}(\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk'}p_{k'})p_k\\&=-\boldsymbol{l}^2p^2-4\delta_{kk'}\hbar^2p_{k'}p_k=-\boldsymbol{l}^2p^2-4\hbar^2p^2\end{aligned}$$

以上推导过程一些地方用了全反对称张量 ε_{ijk} 的性质. 倒数第二个等号用到了 $\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{ijk'}=2\delta_{kk'}$; 倒数第三个等号用到了 ε_{ijk} 的反对称性质, 使得 $\varepsilon_{ijk}l_kp_ip_j=-\varepsilon_{jik}l_kp_ip_j=-\varepsilon_{jik}l_kp_jp_i=-\varepsilon_{ijk}l_kp_ip_j$. 即有 $\varepsilon_{ijk}l_kp_ip_j=-\varepsilon_{ijk}l_kp_ip_j$, 对一个量取负等于其本身, 这个量只能为零, 也就是 $\varepsilon_{ijk}l_kp_ip_j=0$. 我们可注意 $[\boldsymbol{l}^2,p_i]\neq0$, 虽然 $[\boldsymbol{l}^2,l_i]=0$. 现在验证最后一个等式

$$\begin{aligned}[(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})]_i&=l_kp_i(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})_k-l_i\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\\&=\{p_il_k+[l_k,p_i]\}(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})_k-l_i\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}+\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\\&=0+\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{kij}p_j\varepsilon_{ki'j'}l_{i'}p_{j'}-l_i\boldsymbol{p}\cdot(2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p})\\&=\mathrm{i}(\delta_{ii'}\delta_{jj'}-\delta_{ij'}\delta_{ji'})p_jl_{i'}p_{j'}-l_i\boldsymbol{p}\cdot(2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p})\\&=\mathrm{i}\hbar\{p_jl_ip_j-p_jl_jp_i-2\mathrm{i}\hbar l_i\boldsymbol{p}^2=\mathrm{i}\hbar\{l_ip_j+[p_j,l_i]\}p_j-0-2\mathrm{i}\hbar l_i\boldsymbol{p}^2\\&=\mathrm{i}\hbar l_i\boldsymbol{p}^2+\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{kij}p_kp_j-0-2\mathrm{i}\hbar l_i\boldsymbol{p}^2=-\mathrm{i}\hbar l_i\boldsymbol{p}^2\end{aligned}$$

即 $(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{l}p^2$.

4.21 利用不确定度关系估算谐振子的基态能量.

解 谐振子 Hamilton 量为 $H=\dfrac{p^2}{2m}+\dfrac{1}{2}m\omega^2x^2$, 利用题 4.25 束缚定态下动量平均值为零的结果以及对称性知其基态坐标、动量的期望值 $\overline{x}=0,\overline{p}=0$. 因而坐标、动量的涨落

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

这样其基态能量按下式给出

$$\begin{aligned}E&=\frac{\overline{p^2}}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\overline{x^2}=\frac{(\Delta p)^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2(\Delta x)^2\\&\geqslant 2\sqrt{\frac{1}{2m}\frac{1}{2}m\omega^2}\,\Delta p\Delta x=\omega\Delta p\Delta x\end{aligned}$$

按不确定度关系, $\Delta x\Delta p\geqslant\dfrac{1}{2}\hbar$. 因而 $E\geqslant\dfrac{1}{2}\hbar\omega$, 基态能量 $E_0\sim\dfrac{1}{2}\hbar\omega$.

4.22 利用不确定度关系估计类氢原子中电子的基态能量 (设原子核带电 $+Ze$).

解 Hamilton 量为 $H=\dfrac{p^2}{2m}-\dfrac{Ze^2}{r}$. 假设电子云的线度为 λ. 作为估算我们取 $\Delta x\sim\lambda$, 利用不确定度关系 $\Delta x\Delta p_x\sim\dfrac{1}{2}\hbar$, 得 $\Delta p_x\sim\dfrac{\hbar}{2\lambda}$. 同样 $\Delta p_y\sim\dfrac{\hbar}{2\lambda},\Delta p_z\sim\dfrac{\hbar}{2\lambda}$. 另外利用题 4.25 束缚定态下动量平均值为零的结果得 $\overline{p}_x=0,\overline{p}_y=0,\overline{p}_z=0$. 另外 $\left\langle\dfrac{1}{r}\right\rangle\sim\dfrac{1}{\lambda}$, 因而电子的基态能量按下式给出

$$\begin{aligned}E&=\frac{1}{2m}\langle p^2\rangle-Ze^2\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle=\frac{1}{2m}\left[(\Delta p_x)^2+(\Delta p_y)^2+(\Delta p_z)^2\right]-Ze^2\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle\\&=\frac{3\hbar^2}{8m\lambda^2}-Ze^2\frac{1}{\lambda}\end{aligned}$$

现对 E 求极值

$$\frac{\partial E}{\partial\lambda}=-\frac{3\hbar^2}{4m\lambda^3}+Ze^2\frac{1}{\lambda^2}=0$$

解得惟一的极值点为 $\lambda_0=\dfrac{3\hbar^2}{4Zme^2}=\dfrac{3}{4Z}a$, 其中 $a=\dfrac{\hbar^2}{me^2}$ 为 Bohr 半径. λ_0 应为极小值点, 这样得基态能量为

$$E_0=\frac{2mZ^2e^4}{3\hbar^2}-\frac{4mZ^2e^4}{3\hbar^2}=-\frac{2mZ^2e^4}{3\hbar^2}$$

4.23 质量为 m 的粒子在势场 $V(r)=-\lambda/r^{3/2}(\lambda>0)$ 中运动, 试用不确定度关系估算其基态能量.

解 r 与 p_r 满足不确定度关系

$$\Delta r\cdot\Delta p_r\approx\hbar \tag{4.36}$$

对于束缚定态 $\langle p_r\rangle=0$. 基态必为 s 态, 则有

$$\langle\boldsymbol{p}^2\rangle=\langle p_r^2\rangle=(\Delta p_r)^2\approx\hbar^2/(\Delta r)^2 \tag{4.37}$$

作为估算, 取基态的最概然半径 $\sim R$, 取半径不确定度 $\Delta r\sim R$, 因而

$$E=\langle T+V\rangle\approx\frac{\hbar^2}{2mR^2}-\frac{\lambda}{R^{3/2}} \tag{4.38}$$

R 的取值应使 E 为极小. 由极值条件

$$\frac{\partial E}{\partial R}=0$$

可得

$$R=\frac{4}{9}\left(\frac{\hbar^2}{m\lambda}\right)^2 \tag{4.39}$$

代入式 (4.38), 求得基态能量近似值

$$E\approx-\frac{27}{32}\frac{m^3\lambda^4}{\hbar^6}\approx-0.84\frac{m^3\lambda^4}{\hbar^6}$$

说明 本题与题 4.22 同是估算有心势场中的基态能级, 但方法有所不同. 作估算时同一个问题换一种方法结果会有所不同. 估算不必强求结果的准确无误, 能做到量纲正确, 数量级准确就可以了.

4.24 在一维对称势阱中, 粒子至少存在一个束缚态 (见教材 3.2 节). 在给定势阱深度 V_0 情况下, 减小势阱宽度 a, 使 $a^2\ll\hbar^2/mV_0$. 粒子动量不确定度 $\Delta p<\sqrt{mV_0}$, 而位置不确定度 $\Delta x\approx a$. 因此, 下列关系式似乎成立: $\Delta x\cdot\Delta p\approx\sqrt{mV_0}a\ll\hbar$, 这似与不确定度关系有矛盾. 以上论证的错误何在?

解 由于势垒穿透, 粒子可能有较大的概率位于阱外 [见题 3.8 式 (3.85)、式 (3.68)], 从而不能认为 $\Delta x\approx a$. 本题论证的错误在于武断地认为粒子位置的不确定度 Δx 与势阱的线度 a 相当. 其实这只在无限深势阱以及有限深势阱粒子能量远小于势阱高度的情形才正确. 粒子位置的不确定度 Δx 可近似由坐标概率分布函数 $|\psi(x)|^2$ 的 "宽度" 来决定, 上述这 2 种情形下, 这个 "宽度" 与阱宽相当. 当有限深势阱粒子能量接近势阱高度时, 粒子会有相当大的概率位于势阱外, 因而就不能认为粒子位置的不确定度 Δx 与势阱的线度 a 相当了.

有限深势阱的本征能量其实与阱宽有关, 奇宇称与偶宇称态的能级分别见题 3.8 式 (3.53) 以及式 (3.64). 试以偶宇称态为例, 式 (3.64) 给出

$$k\tan\frac{ka}{2}=\beta=\sqrt{k_0^2-k^2}$$

两边取微分

$$\tan\frac{ka}{2}\mathrm{d}k+\frac{k}{2}\sec^2\frac{ka}{2}\left(a\mathrm{d}k+k\mathrm{d}a\right)=\frac{-k\mathrm{d}k}{\beta}$$

即有

$$\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}a}=-\frac{k}{\sin\dfrac{ka}{2}\cos\dfrac{ka}{2}+\dfrac{ka}{2}+\dfrac{k}{\beta}\cos^2\dfrac{ka}{2}}<0$$

因而, 对于某个特定的能级, 阱宽 a 越小, 能量 ($E=k^2/2m$) 越高. 如果 a 小到一定程度, 出现能量与势阱高度相当 $E\approx V_0$, 这时阱外波函数为 [见式 (3.61), 以偶宇称态为例]

$$\psi(x)=C\cos\frac{ka}{2}\mathrm{e}^{-\beta|x|},\quad |x|\geqslant\frac{a}{2}$$

其中 C 为归一化常数. 因 $E\approx V_0$, 阱外波函数指数衰减因子 $\beta\sim0$, 导致粒子位于势阱外的概率相当大, 不可忽略. 如果阱宽 a 再小, 若不是基态这个束缚态可能就会不存在.

对于本题中的 $a^2\ll\hbar^2/mV_0$ 情况, 实际上只存在一个基态为束缚态 (见题 3.7). 而且因为 a 很小, 粒子能量较高, 非常接近势阱高度, 粒子有相当大的概率位于势阱外. 我们不妨计算这种情况下的 $\Delta x\cdot\Delta p$. 根据对称势阱束缚定态性质

$$\langle x\rangle=\langle p\rangle=0$$

再根据粒子束缚定态波函数计算 (先只考虑势阱外部分)

$$\langle x^2\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}x^2\left|\psi\left(x\right)\right|^2\mathrm{d}x>2C^2\cos^2\frac{ka}{2}\int_{a/2}^{\infty}x^2\mathrm{e}^{2\rho\left(\frac{a}{2}-x\right)}\mathrm{d}x\sim\frac{1}{2\rho^2}$$

$$\langle p^2\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\psi\left(x\right)\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^2\psi\left(x\right)\mathrm{d}x=\hbar^2\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\left(\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right)^2>2\hbar^2\int_{a/2}^{\infty}\mathrm{d}x\left(\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right)^2\sim\hbar^2\rho^2$$

因此

$$\Delta x\cdot\Delta p\gtrsim\frac{1}{\sqrt{2}\rho}\cdot\hbar\rho=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}$$

仍然满足不确定度关系 $\Delta x\cdot\Delta p\geqslant\hbar/2$.

4.25 证明在束缚定态下, 动量平均值为 0.

证法一 设 Hamilton 量为 $H=\dfrac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(\boldsymbol{x})$, 它的任意一个束缚定态为 $|\psi_n\rangle$, 相应的本征值为 E_n, 即

$$H|\psi_n\rangle=E_n|\psi_n\rangle \tag{4.40}$$

由于 H 的 Hermite 性, 上式的 Hermite 共轭式为

$$\langle\psi_n|H=E_n\langle\psi_n| \tag{4.41}$$

我们考虑

$$[x,\ H]=\left[x,\ \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(\boldsymbol{x})\right]=\frac{1}{2m}\left[x,\ p_x^2\right]=\frac{\mathrm{i}\hbar}{m}p_x$$

两边对 $|\psi_n\rangle$ 取平均, 得

$$\langle\psi_n|[x,H]|\psi_n\rangle=\frac{\mathrm{i}\hbar}{m}\langle\psi_n|p_x|\psi_n\rangle$$

利用式 (4.40)、式 (4.41), 上式左边为

$$\begin{aligned}\langle\psi_n|xH-Hx|\psi_n\rangle&=\langle\psi_n|xH|\psi_n\rangle-\langle\psi_n|Hx|\psi_n\rangle\\&=E_n\langle\psi_n|x|\psi_n\rangle-E_n\langle\psi_n|x|\psi_n\rangle=0\end{aligned}$$

因此 $\langle\psi_n|p_x|\psi_n\rangle=0$, 即 x 方向动量平均值 $\langle p_x\rangle=0$. 同理, $\langle p_y\rangle=\langle p_z\rangle=0$. 因而 $\langle\boldsymbol{p}\rangle=0$.

证法二 在定态下力学量的期望值不随时间改变, 则在 $|\psi_n\rangle$ 下, $\langle x\rangle=\text{const.}$, 再利用 $\langle p_x\rangle=m\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle x\rangle$①. 因而 $\langle\psi_n|p_x|\psi_n\rangle=0$.

若是在一维的情况下, 则还有下面的证法三.

证法三 在坐标表象 $\hat{p}=-\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$, 因而

$$\overline{p}=\int\psi_n^*(x)\hat{p}\psi_n(x)\mathrm{d}x=-\mathrm{i}\hbar\int\psi_n^*(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_n(x)\mathrm{d}x$$

力学量 $\hat{p}$ 的期望值 $\overline{p}$ 一定为实数, 但由于一维束缚定态波函数总可以取为实函数, 上式右边是一纯虚数, 因此一定有 $\overline{p}=0$.

---

① 例如在 Heisenberg 图像下, 利用 Heisenberg 方程得 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}x=\dfrac{1}{\mathrm{i}\hbar}[x,H]=\dfrac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[x,\dfrac{p_x^2}{2m}\right]=\dfrac{p_x}{m}$. 对于一个特定的 Heisenberg 图像下的态 $|\psi\rangle$, 满足 $\dfrac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle=0$, 这样即有 $\langle p_x\rangle=m\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle x\rangle$.

4.26 证明对于任何两个量子态 ψ 及 φ, 满足下面 Schwarz 不等式:

$$|(\psi,\varphi)| \leqslant \sqrt{(\psi,\psi)(\varphi,\varphi)}$$

证明 由内积的性质, 对任何两个波函数 ψ, φ, 下面不等式成立:

$$0 \leqslant (\psi-\varphi,\psi-\varphi) = (\psi,\psi)+(\varphi,\varphi)-[(\psi,\varphi)+(\varphi,\psi)] \tag{4.42}$$

上式给出 $(\psi,\varphi)+(\varphi,\psi) \leqslant (\psi,\psi)+(\varphi,\varphi)$. 我们可以选 α, $\psi' = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\psi$, 使得 $(\psi',\varphi) = (\varphi,\psi') \geqslant 0$. 对于 ψ', φ, 式 (4.42) 也成立, 即有

$$|(\psi,\varphi)| = (\psi',\varphi) \leqslant \frac{1}{2}[(\psi',\psi')+(\varphi,\varphi)] = \frac{1}{2}[(\psi,\psi)+(\varphi,\varphi)]$$

也就是

$$|(\psi,\varphi)| \leqslant \frac{1}{2}[(\psi,\psi)+(\varphi,\varphi)] \tag{4.43}$$

下面分 ψ 与 φ 是否归一两种情形情况讨论.

(a) 若 $(\psi,\psi)=(\varphi,\varphi)=1$, 则式 (4.43) 给出 $|(\psi,\varphi)| \leqslant 1 = \sqrt{(\psi,\psi)(\varphi,\varphi)}$. 此即 Schwarz 不等式;

(b) 若 $(\psi,\psi),(\varphi,\varphi)$ 不全为 1, 则将 ψ,φ 归一化, 令

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{(\psi,\psi)}}\psi, \quad \varphi_1 = \frac{1}{\sqrt{(\varphi,\varphi)}}\varphi \tag{4.44}$$

可见ψ_1,φ_1满足 (a) 的条件, 故$|(\psi_1,\varphi_1)| \leqslant 1 = \sqrt{(\psi_1,\psi_1)(\varphi_1,\varphi_1)}$, 由此即得$|(\psi,\varphi)| \leqslant \sqrt{(\psi,\psi)(\varphi,\varphi)}$. 此即 Schwarz 不等式.

讨论 1 (Schwarz 不等式等号成立的条件): 若存在 ψ,φ 满足

$$|(\psi,\varphi)| = \sqrt{(\psi,\psi)(\varphi,\varphi)}$$

将 ψ,φ 如式 (4.44) 归一化为 ψ_1,φ_1. 再如前, 选 α, $\psi_1' = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\psi_1$, 使得 $(\psi_1',\varphi_1) = (\varphi_1,\psi_1') \geqslant 0$. 则上面式子给出

$$(\psi_1',\varphi_1) = (\varphi_1,\psi_1') = 1$$

我们可用反证法证明必有 $\psi_1' = \varphi_1$. 假设 $\psi_1' \neq \varphi_1$, 则 $\psi_1'-\varphi_1$ 为一非零态, 其模平方必大于零, 即 $(\psi_1'-\varphi_1,\psi_1'-\varphi_1) > 0$. 但由上

$$\begin{aligned}(\psi_1'-\varphi_1,\psi_1'-\varphi_1) &= (\psi_1',\psi_1')+(\varphi_1,\varphi_1)-(\psi_1',\varphi_1)-(\varphi_1,\psi_1') \\ &= 1+1-1-1=0\end{aligned}$$

这与前面 $(\psi_1'-\varphi_1,\psi_1'-\varphi_1) > 0$ 矛盾. 由矛盾知 $\psi_1' = \varphi_1$.

由 $\psi_1' = \varphi_1$ 以及式 (4.44) 和 $\psi_1' = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\psi_1$ 知, $\varphi = c\psi$. 即 φ 与 ψ 为同一个态.

讨论 2 $\forall\psi,\varphi$, 将 ψ,φ 如式 (4.44) 归一化为 ψ_1,φ_1, 则 ψ 态下处于 φ 态的概率为

$$P_\psi(\varphi) = |(\varphi_1,\psi_1)|^2 = \left|\left(\frac{1}{\sqrt{(\varphi,\varphi)}}\varphi, \frac{1}{\sqrt{(\psi,\psi)}}\psi\right)\right|^2$$

$P_\psi(\varphi) \leqslant 1$, 由此即得 Schwarz 不等式 $|(\psi,\varphi)| \leqslant \sqrt{(\psi,\psi)(\varphi,\varphi)}$. 这表明量子力学测量假设与 Schwarz 不等式一致.

另证一　令 $(\psi,\psi)=a$, $(\varphi,\varphi)=b$, $(\psi,\varphi)=c$, a, b 均是大于零的实数, c 为复数. 构造

$$\chi=\varphi-\frac{c}{a}\psi \tag{4.45}$$

则

$$(\chi,\chi)=\left(\varphi-\frac{c}{a}\psi,\varphi-\frac{c}{a}\psi\right)=(\varphi,\varphi)-\frac{c^*}{a}(\psi,\varphi)-\frac{c}{a}(\varphi,\psi)+\frac{cc^*}{a^2}(\psi,\psi)=b-\frac{cc^*}{a}$$

而 $(\chi,\chi)\geqslant 0$, 故

$$cc^*\leqslant ab \tag{4.46}$$

也就是

$$|(\psi,\varphi)|^2\leqslant(\psi,\psi)(\varphi,\varphi) \tag{4.47}$$

由此即得欲证的不等式.

上面等号当且仅当 $(\chi,\chi)=0$, 即 $\chi=0$ 是零态时成立. 这也就是 $\varphi=\frac{c}{a}\psi$, 因此当且仅当 ψ 与 φ 是同一个状态时 Schwarz 不等式取等号. 这与先前的结论相同.

另证二　由内积的性质, 对下面不等式成立

$$I=(\psi-\lambda\varphi,\psi-\lambda\varphi)=|\psi-\lambda\varphi|^2\geqslant 0 \tag{4.48}$$

其中 λ 为任意复数, 将上式展开得

$$I=(\psi,\psi)-\lambda(\psi,\varphi)-\lambda^*(\varphi,\psi)+\lambda^*\lambda(\varphi,\varphi)$$

式中第一、四项恒正. 我们现在这样来选取 λ, 使 I 的三、四项抵消

$$I=(\psi,\psi)-\lambda(\psi,\varphi)-\lambda^*[(\varphi,\psi)-\lambda(\varphi,\varphi)]\geqslant 0 \tag{4.49}$$

选取 λ 使方括号内项为零, 得 $\lambda=\frac{(\varphi,\psi)}{(\varphi,\varphi)}$, 代入式 (4.49) 得

$$I=(\psi,\psi)-\frac{(\varphi,\psi)}{(\varphi,\varphi)}(\psi,\varphi)\geqslant 0 \tag{4.50}$$

由此式即得欲证的不等式.

我们从上面证明过程可以看出, Schwarz 不等式正是下列不等式的直接结果

$$\left|\psi-\frac{(\varphi,\psi)}{(\varphi,\varphi)}\varphi\right|^2\geqslant 0$$

从式 (4.48) 知, 当且仅当 $\psi-\lambda\varphi=0$ 时, 不等号中的等号成立. 也同样可见 Schwarz 不等式等号成立的条件是 φ 与 ψ 为同一个态.

本题有很多种证法, 也许读者还能给出更好的证法.

4.27　设 H 为正定的厄米算符, u 与 v 为二任意态, 证明

$$|(u,Hv)|^2\leqslant(u,Hu)\,(v,Hv)$$

证法一　若 $Hv=0$, 或者 $Hu=0$, 则所证不等式显然成立. 以下只讨论 Hu 以及 Hv 均不为零的情形. 由于 H 为正定的厄米算符, 必有

$$(u,Hu)>0,\quad (v,Hv)>0 \tag{4.51}$$

对任意的复常数 λ, 令

$$\chi = u - \lambda v \tag{4.52}$$

由于 H 的正定性质, 必有 $(\chi, H\chi) \geqslant 0$, 或者 $(u - \lambda v, H(u - \lambda v)) \geqslant 0$, 也就是

$$(u, Hu) - \lambda (u, Hv) - \lambda^* (v, Hu) + \lambda^* \lambda (v, Hv) \geqslant 0 \tag{4.53}$$

现取

$$\lambda = \frac{(v, Hu)}{(v, Hv)}, \quad \lambda^* = \frac{(u, Hv)}{(v, Hv)} \tag{4.54}$$

代入式 (4.53) 即得

$$|(u, Hv)|^2 \leqslant (u, Hu)(v, Hv)$$

等号当 $(\chi, H\chi) = 0$ 成立. 由于 H 为正定的厄米算符, 而 $\chi = u - \lambda v$, 且 Hu 以及 Hv 均不为零, 只有 χ 是零态才成立, 即有 $u = \lambda v$, 这意味着 u 与 v 为同一个状态.

证法二 (u, Hv) 是一个复数, 可令 $(u, Hv) = \rho \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}$, 即 (u, Hv) 的模长和辐角分别为 ρ, α, 令 $v' = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha} v$, 则 $(u, Hv') = \rho$ 是一个非负实数. 对任意的实数 λ, 令

$$\chi = u - \lambda v' \tag{4.55}$$

由于 H 的正定性质, 必有 $(\chi, H\chi) \geqslant 0$, 或者 $(u - \lambda v', H(u - \lambda v')) \geqslant 0$, 也就是

$$(u, Hu) - 2\lambda (u, Hv') + \lambda^2 (v', Hv') \geqslant 0 \tag{4.56}$$

上述关于 λ 的二次多项式恒正, 要求其判别式小于或者等于零, 即

$$[2(u, Hv')]^2 - 4(u, Hu)(v', Hv') \leqslant 0 \tag{4.57}$$

因 $v' = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha} v$, 故上式给出

$$|(u, Hv)|^2 \leqslant (u, Hu)(v, Hv)$$

说明 本题中令 $H = 1$ 为恒等算符, 由上式即给出题 4.26 的 Schwarz 不等式, 因此 Schwarz 不等式是本题的一个特例. 另一方面, 因为正定的厄米算符 H 总可以表示为 $H = \Lambda^2$, 其中 Λ 是另一个厄米算符. 若从这一事实出发, 则本题所证结论实际上也可视为 Schwarz 不等式的一个推论. 对于非负定的算符, 本题结论同样成立.

4.28 求证力学量 x 与 $F(p_x)$ 的不确定度关系

$$\sqrt{\overline{(\Delta x)^2} \cdot \overline{(\Delta F)^2}} \geqslant \frac{\hbar}{2} \left| \overline{\frac{\partial F}{\partial p_x}} \right|$$

证明 根据不确定度关系的普遍公式, 若 A 和 B 为两个任意的力学量, ΔA 和 ΔB 为在某个态下测量 A 和 B 的结果相对于其期望值的偏差, 则有

$$\sqrt{\overline{(\Delta A)^2} \cdot \overline{(\Delta B)^2}} \geqslant \frac{1}{2} \left| \overline{[A, B]} \right|$$

现取 $A = x$, $B = F(p_x)$, 上式给出

$$\sqrt{\overline{(\Delta x)^2} \cdot \overline{(\Delta F(p_x))^2}} \geqslant \frac{1}{2} \left| \overline{[x, F(p_x)]} \right|$$

根据题 4.6 知 $[x, F(p_x)] = \mathrm{i}\hbar \dfrac{\partial F}{\partial p_x}$, 这样得

$$\sqrt{\overline{(\Delta x)^2} \cdot \overline{(\Delta F)^2}} \geqslant \frac{\hbar}{2} \left| \overline{\frac{\partial F}{\partial p_x}} \right|$$

4.29 求证在 $\widehat{l_z}$ 的本征态下, $\bar{l}_x = \bar{l}_y = 0$.

提示: 利用 $\widehat{l_y}\widehat{l_z} - \widehat{l_z}\widehat{l_y} = \mathrm{i}\hbar\widehat{l_x}$, 两边求平均值.

证明 l_z 的本征态 $|m\rangle$ 满足 $l_z|m\rangle = m\hbar|m\rangle$. 因

$$l_y l_z - l_z l_y = \mathrm{i}\hbar l_x$$

两边对 $|m\rangle$ 求平均值

$$\mathrm{i}\hbar\langle m|l_x|m\rangle = \langle m|l_y l_z - l_z l_y|m\rangle = m\hbar\langle m|l_y|m\rangle - m\hbar\langle m|l_y|m\rangle = 0$$

可见 $\bar{l}_x = 0$. 同理 $\bar{l}_y = 0$.

4.30 设粒子处于 $\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$ 状态下, 求 $\overline{(\Delta l_x)^2}$ 和 $\overline{(\Delta l_y)^2}$.

解 由对称性 $\overline{(\Delta l_x)^2} = \overline{(\Delta l_y)^2}$ (假设坐标轴绕 z 转 $\pi/2$, 则在此变换下 $x \to y, y \to -x, z \to z$, 而 Y_{lm} 态不变). 再由题 4.29, $\bar{l}_x = \bar{l}_y = 0$. 因此

$$\overline{(\Delta l_x)^2} = \overline{(l_x - \bar{l}_x)^2} = \overline{l_x^2},\ \overline{(\Delta l_y)^2} = \overline{(l_y - \bar{l}_y)^2} = \overline{l_y^2}$$

这样

$$\begin{aligned}\overline{(\Delta l_x)^2} = \overline{(\Delta l_y)^2} &= \frac{1}{2}\left[\overline{(\Delta l_x)^2} + \overline{(\Delta l_y)^2}\right] = \frac{1}{2}\overline{l_x^2 + l_y^2} \\ &= \frac{1}{2}\overline{l^2 - l_z^2} = \frac{1}{2}(\overline{l^2} - \overline{l_z^2}) = \frac{1}{2}[l(l+1) - m^2]\hbar^2\end{aligned}$$

说明 关于在 $\boldsymbol{L}^2, L_z$ 本征态下 $\overline{(\Delta l_x)^2} = \overline{(\Delta l_y)^2}$, 也可如下严格证明. 由角动量态的升、降算符的定义式

$$L_+ = L_x + \mathrm{i}L_y, \qquad L_- = L_x - \mathrm{i}L_y = L_+^\dagger$$

可知

$$L_x = \frac{1}{2}(L_+ + L_-), \qquad L_y = \frac{1}{2\mathrm{i}}(L_+ - L_-)$$

因此在 $\boldsymbol{L}^2, L_z$ 本征态 $|lm\rangle$ 下

$$\begin{aligned}\overline{l_x^2} &= \langle lm|\, L_x^2\, |lm\rangle = \frac{1}{4}\langle lm|\, L_+L_+ + L_+L_- + L_-L_+ + L_-L_-\, |lm\rangle \\ &= \frac{1}{4}\langle lm|\, L_+L_- + L_-L_+\, |lm\rangle \\ \overline{l_y^2} &= \langle lm|\, L_y^2\, |lm\rangle = \frac{1}{4}\langle lm|\, -L_+L_+ + L_+L_- + L_-L_+ - L_-L_-\, |lm\rangle \\ &= \frac{1}{4}\langle lm|\, L_+L_- + L_-L_+\, |lm\rangle\end{aligned}$$

可见 $\overline{l_x^2} = \overline{l_y^2}$, 也就有 $\overline{(\Delta l_x)^2} = \overline{(\Delta l_y)^2}$.

4.31 设粒子处于 $\psi = c_1\mathrm{Y}_{11} + c_2\mathrm{Y}_{20}$ 状态 (已归一化, 即 $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$), 试求:

(a) L_z 的可能测值及平均值; (b) $\boldsymbol{L}^2$ 的可能测值及相应的概率; (c) L_x 的可能测值及相应的概率.

解 $\mathrm{Y}_{11}, \mathrm{Y}_{20}$ 均是 $\boldsymbol{L}^2, L_z$ 的共同本征态, 本征方程如下所示

$$\begin{aligned}\boldsymbol{L}^2\mathrm{Y}_{11} &= 2\hbar^2\mathrm{Y}_{11}, \quad L_z\mathrm{Y}_{11} = 1\hbar\mathrm{Y}_{11} \\ \boldsymbol{L}^2\mathrm{Y}_{20} &= 6\hbar^2\mathrm{Y}_{20}, \quad L_z\mathrm{Y}_{20} = 0\end{aligned}$$

$\mathrm{Y}_{11}, \mathrm{Y}_{20}$ 相互正交, 且都已归一化. 题给 $\psi = c_1\mathrm{Y}_{11} + c_2\mathrm{Y}_{20}$ 已归一化, 则 ψ 处于 Y_{11} 与 Y_{20} 的概率分别为 $|c_1|^2$ 与 $|c_2|^2$. 这样在态 ψ 下

(a) 测 L_z 的可能测值为 $\hbar, 0$, 相应的概率分别为 $|c_1|^2, |c_2|^2$. 故平均值为 $|c_1|^2\hbar$;

(b) 测 $\boldsymbol{L}^2$ 的可能测值为 $2\hbar^2, 6\hbar^2$, 相应的概率分别为 $|c_1|^2, |c_2|^2$;

(c) 要求 L_x 的可能测值及相应概率, 我们要将 ψ 按 L_x 的本征态展开. 我们这里暂不用 d 函数或升降算符的矩阵表示, 而采用轮换法. 已知 $\boldsymbol{L}^2$, L_z 的共同本征态, 我们可以如下通过轮换 $x \to y$, $y \to z$, $z \to x$ 得到 $\boldsymbol{L}^2$ 与 L_x 的共同本征态, 即由

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Y}_{1,\pm1} &= \mp\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{8\pi}}\frac{x \pm \mathrm{i}y}{r} \\
\mathrm{Y}_{1,0} &= \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{4\pi}}\frac{z}{r} \\
\mathrm{Y}_{2,\pm2} &= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\frac{(x \pm \mathrm{i}y)^2}{r^2} \\
\mathrm{Y}_{2,\pm1} &= \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\frac{(x \pm \mathrm{i}y)z}{r^2} \\
\mathrm{Y}_{2,0} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\frac{2z^2 - x^2 - y^2}{r^2}
\end{aligned}
$$

通过轮换 $x \to y, y \to z, z \to x$ 得到

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Y}^x_{1,\pm1} &= \mp\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{8\pi}}\frac{y \pm \mathrm{i}z}{r} = \mp\frac{\mathrm{i}}{2}(\mathrm{Y}_{1,1} + \mathrm{Y}_{1,-1}) - \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\mathrm{Y}_{1,0} \\
\mathrm{Y}^x_{1,0} &= \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{4\pi}}\frac{x}{r} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathrm{Y}_{1,-1} - \mathrm{Y}_{1,1}) \\
\mathrm{Y}^x_{2,\pm2} &= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\frac{(y \pm \mathrm{i}z)^2}{r^2} = -\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}\mathrm{Y}_{2,0} \mp \frac{1}{2}(\mathrm{Y}_{2,1} + \mathrm{Y}_{2,-1}) - \frac{1}{4}(\mathrm{Y}_{2,-2} + \mathrm{Y}_{2,2}) \\
\mathrm{Y}^x_{2,\pm1} &= \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\frac{(y \pm \mathrm{i}z)x}{r^2} = \pm\frac{\mathrm{i}}{2}(\mathrm{Y}_{2,2} - \mathrm{Y}_{2,-2}) + \frac{\mathrm{i}}{2}(\mathrm{Y}_{2,1} - \mathrm{Y}_{2,-1}) \\
\mathrm{Y}^x_{2,0} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\frac{2x^2 - y^2 - z^2}{r^2} = -\frac{1}{2}\mathrm{Y}_{2,0} + \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}(\mathrm{Y}_{2,-2} + \mathrm{Y}_{2,2})
\end{aligned}
$$

上式将 Y^x 表示为 Y 的叠加, 这可通过对分子的多项式分解得到; 对 $l = 2$ 只需注意 z^2 仅出现在 $\mathrm{Y}_{2,0}$ 中, 而 z 的一次项仅出现在 $\mathrm{Y}_{2,\pm1}$ 中. 由上面结果

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Y}_{1,1} &= \mathrm{Y}^x_{1,1}(\mathrm{Y}^x_{1,1}, \mathrm{Y}_{1,1}) + \mathrm{Y}^x_{1,0}(\mathrm{Y}^x_{1,0}, \mathrm{Y}_{1,1}) + \mathrm{Y}^x_{1,-1}(\mathrm{Y}^x_{1,-1}, \mathrm{Y}_{1,1}) \\
&= \mathrm{Y}^x_{1,1}(\mathrm{Y}_{1,1}, \mathrm{Y}^x_{1,1})^* + \cdots = \frac{\mathrm{i}}{2}\mathrm{Y}^x_{1,1} - \frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{Y}^x_{1,0} - \frac{\mathrm{i}}{2}\mathrm{Y}^x_{1,-1} \qquad (4.58) \\
\mathrm{Y}_{2,0} &= \sum_{m=-2}^{2}\mathrm{Y}^x_{2,m}(\mathrm{Y}^x_{2,m}, \mathrm{Y}_{2,0}) = \sum_{m=-2}^{2}\mathrm{Y}^x_{2,m}(\mathrm{Y}_{2,0}, \mathrm{Y}^x_{2,m})^* \\
&= -\frac{1}{2}\mathrm{Y}^x_{2,0} - \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}(\mathrm{Y}^x_{2,-2} + \mathrm{Y}^x_{2,2}) \qquad (4.59)
\end{aligned}
$$

上面结果表明在 Y_{11} 下, l_x 的可能测值为 $0, \hbar, -\hbar$, 因各 Y^x 以及 Y 均已归一化, 故相应的概率幅分别为 $-\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{\mathrm{i}}{2}, -\frac{\mathrm{i}}{2}$, 而相应的概率分别为 $\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$. 在 Y_{20} 下, l_x 的可能测值为 $0, \hbar, -\hbar, 2\hbar$ 与 $-2\hbar$, 相应的概率幅分别为 $-\frac{1}{2}, 0, 0, -\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}, -\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}$, 而相应的概率分别为 $\frac{1}{4}, 0, 0, \frac{3}{8}, \frac{3}{8}$.

这样在态 $\psi = c_1\mathrm{Y}_{11} + c_2\mathrm{Y}_{20}$ 下, l_x 的可能测值为 $0, \hbar, -\hbar, 2\hbar$ 与 $-2\hbar$, 其概率依次为 $|c_1|^2/2 + |c_2|^2/4$, $|c_1|^2/4$, $|c_1|^2/4$, $3|c_2|^2/8$ 与 $3|c_2|^2/8$.

本题解答到此完成. 关于第 (c) 小题, 这里再列出 2 种解法.

另解一 在角动量态即 $(\boldsymbol{J}^2, J_z)$ 共同本征态 $|jm\rangle$ 下, J_x 或 J_y 取 $\pm m$ 的概率相等, 严格证明见题 10.2.

在 Y_{11} 态, $l_x(l_y)$ 的可能测值为 $0, \hbar, -\hbar$, 设相应的概率分别为 $P_0^{(11)}$, $P_1^{(11)}$, 则概率归一以及角动量平方的关系给出

$$P_0^{(11)} + 2P_1^{(11)} = 1$$
$$l_x^2 + l_y^2 + l_z^2 = 2\hbar^2$$

也就是

$$P_0^{(11)} + 2P_1^{(11)} = 1$$
$$2\left[2P_1^{(11)} \cdot 1 + P_0^{(11)} \cdot 0\right] + 1 = 2$$

解得

$$P_0^{(11)} = \frac{1}{2}, \quad P_1^{(11)} = \frac{1}{4} \tag{4.60}$$

在 Y_{20} 态, $l_x(l_y)$ 的可能测值为 $0, \pm\hbar, \pm 2\hbar$, 设相应的概率分别为 $P_0^{(20)}$, $P_1^{(20)}$, $P_2^{(20)}$, 则概率归一以及角动量平方的关系给出

$$P_0^{(20)} + 2P_1^{(20)} + 2P_2^{(20)} = 1 \tag{4.61}$$
$$2\left[2P_1^{(20)} \cdot 1 + P_0^{(20)} \cdot 0 + 2P_2^{(20)} \cdot 4\right] = 6 \tag{4.62}$$

三个未知数, 两个方程, 还少一个方程. 考虑 l_x^4 在 Y_{20} 态的期望值. 由 $l_x = \frac{1}{2}(l_+ + l_-)$, 则

$$L_x^4 = \frac{1}{16}(l_+ + l_-)^4$$

上式在 Y_{20} 态下取平均, 右边不为零的项为

$$l_+^2 l_-^2, \quad l_-^2 l_+^2, \quad (l_+ l_-)^2, \quad (l_- l_+)^2, \quad l_+ l_- l_- l_+, \quad l_- l_+ l_+ l_-$$

一般角动量态 $|jm\rangle$(采用 Condon-Shortley 相位约定), 在升降算符作用下的行为如下给出

$$J_\pm |jm\rangle = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}\hbar\, |j, m \pm 1\rangle \tag{4.63}$$

据此我们可以写出

$$l_- l_+ |lm\rangle = [l(l+1) - m(m+1)]\, |lm\rangle, \quad l_+ l_- |lm\rangle = [l(l+1) - m(m-1)]\, |lm\rangle$$
$$l_+^2 |lm\rangle = [l(l+1) - m(m+1)]^{1/2}\, [l(l+1) - (m+1)(m+2)]\, |l, m+2\rangle$$
$$l_-^2 |lm\rangle = [l(l+1) - m(m-1)]^{1/2}\, [l(l+1) - (m-1)(m-2)]\, |l, m-2\rangle$$
$$\left[l_+^2 |lm\rangle\right]^\dagger = \langle lm|\, l_-^2, \quad \left[l_-^2 |lm\rangle\right]^\dagger = \langle lm|\, l_+^2$$

利用上述各式, 取 $l = 2, m = 0$, 求得

$$\langle l_x^4 \rangle = 12\hbar^4$$

即得

$$2\left[2P_1^{(20)} \cdot 1 + P_0^{(20)} \cdot 0 + 2P_2^{(20)} \cdot 16\right] = 12 \tag{4.64}$$

式 (4.61)、式 (4.62) 和式 (4.64) 联立求解得

$$P_0^{(20)} = \frac{1}{4}, \quad P_1^{(20)} = 0, \quad P_2^{(20)} = \frac{3}{8} \tag{4.65}$$

另解二　式 (4.58)、(4.59) 将 Y 表示为 Y^x 的叠加, 这是从球谐函数 Y 的表达式通过轮换 $x \to y, y \to z, z \to x$ 得到的. 下面给出一种不同的做法, 为了书写方便, 采用 Dirac 符号. Y_{11} 态、Y_{20} 态分别记为 $|11\rangle, |20\rangle$. 设 $|11\rangle$ 按照 l_x 本征态 $|1m\rangle_x$ 展开的式子如下:

$$|11\rangle = \sum_m A_m |1m\rangle_x = A_1 |11\rangle_x + A_0 |10\rangle_x + A_{-1} |1,-1\rangle_x \tag{4.66}$$

$\boldsymbol{l}^2, l_z$ 的共同本征态集合中, 升降算符为 $l_\pm = l_x \pm \mathrm{i} l_y$, 我们做轮换 $x \to y, y \to z, z \to x$ 知, $\boldsymbol{l}^2, l_x$ 的共同本征态集合中, 升降算符为 $l'_\pm = l_y \pm \mathrm{i} l_z$, 因而

$$l_z = \frac{1}{2\mathrm{i}} (l'_+ - l'_-) \tag{4.67}$$

将上式作用到式 (4.66), 假设各角动量态都采用 Condon-Shortley 相位约定, 利用式 (4.63) 给出

$$\begin{aligned} 2\mathrm{i}\,|11\rangle &= A_1 (l'_+ - l'_-) |11\rangle_x + A_0 (l'_+ - l'_-) |10\rangle_x + A_{-1} (l'_+ - l'_-) |1,-1\rangle_x \\ &= -\sqrt{2} A_1 |10\rangle_x + \sqrt{2} A_0 |11\rangle_x - \sqrt{2} A_0 |1,-1\rangle_x + \sqrt{2} A_{-1} |10\rangle_x \end{aligned}$$

与式 (4.66) 联立

$$\sqrt{2}\mathrm{i} A_1 |11\rangle_x + \sqrt{2}\mathrm{i} A_0 |10\rangle_x + \sqrt{2}\mathrm{i} A_{-1} |1,-1\rangle_x = A_0 |11\rangle_x + (A_{-1} - A_1) |10\rangle_x - A_0 |1,-1\rangle_x$$

由于各 $|1m\rangle_x$ 的正交归一性得

$$\begin{aligned} &\sqrt{2}\mathrm{i} A_1 = A_0 \\ &\sqrt{2}\mathrm{i} A_0 = (A_{-1} - A_1) \\ &\sqrt{2}\mathrm{i} A_{-1} = -A_0 \\ &|A_1|^2 + |A_0|^2 + |A_{-1}|^2 = 1 \end{aligned}$$

联立求解得

$$A_1 = \frac{1}{2}, \quad A_0 = -\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}, \quad A_{-1} = -\frac{1}{2}$$

由此同样给出式 (4.58). 对于 $|20\rangle$ 态, 设

$$|20\rangle = \sum_k B_k |2k\rangle_x = B_2 |22\rangle_x + B_1 |21\rangle_x + B_0 |20\rangle_x + B_{-1} |2,-1\rangle_x + B_{-2} |2,-2\rangle_x \tag{4.68}$$

将式 (4.67) 作用到上式, 假设各角动量态都采用 Condon-Shortley 相位约定, 利用式 (4.63) 给出

$$\begin{aligned} 0 = &-2B_2 |21\rangle_x + 2B_1 |22\rangle_x - \sqrt{6} B_1 |20\rangle_x + \sqrt{6} B_0 |21\rangle_x - \sqrt{6} B_0 |2,-1\rangle_x \\ &+\sqrt{6} B_{-1} |20\rangle_x - 2B_{-1} |2,-2\rangle_x + 2B_{-2} |2,-1\rangle_x \end{aligned}$$

由于各 $|2m\rangle_x$ 的正交性得

$$\begin{aligned} &2B_1 = 0, \quad \sqrt{6} B_0 - 2B_2 = 0, \quad \sqrt{6} B_{-1} - \sqrt{6} B_1 = 0 \\ &2B_{-2} - \sqrt{6} B_0 = 0, \quad -2B_{-1} = 0 \end{aligned}$$

另有归一化条件

$$|B_2|^2 + |B_1|^2 + |B_0|^2 + |B_{-1}|^2 + |B_{-2}|^2 = 1$$

以上 6 式联立求得

$$B_2 = -\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}, \quad B_1 = 0, \quad B_0 = -\frac{1}{2}, \quad B_{-1} = 0, \quad B_{-2} = -\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}$$

由此同样给出式 (4.59). 余同原解答.

4.32 求证在 $\hat{l}_z$ 的本征态下, 角动量沿与 z 轴成 θ 角的方向上的分量的平均值为 $m\hbar\cos\theta$.

证明 $\hat{l}_z$ 的本征值为 $m\hbar$ 的归一化本征态记为 $|m\rangle$, 即有本征方程

$$\hat{l}_z|m\rangle = m\hbar|m\rangle \tag{4.69}$$

题 4.29 给出 l_z 的本征态下, $\hat{l}_x$, $\hat{l}_y$ 的平均值都为零. 这样

$$\begin{aligned}\left\langle \boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{l}}\right\rangle &= \left\langle m\left|\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{l}}\right|m\right\rangle = \left\langle m\left|n_x\hat{l}_x+n_y\hat{l}_y+n_z\hat{l}_z\right|m\right\rangle \\ &= 0+0+\left\langle m\left|\hat{l}_z\right|m\right\rangle n_z = m\hbar n_z \\ &= m\hbar\cos\theta\end{aligned}$$

4.33 设属于能级 E 有三个简并态 $|\psi_1\rangle$,$|\psi_2\rangle$,$|\psi_3\rangle$, 彼此线性独立, 但不正交. 试利用它们构成一组彼此正交归一化的态矢量.

解 按 Schmidt 正交化程序. (1) 对 $|\psi_1\rangle$ 归一化, 取

$$|\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle\psi_1|\psi_1\rangle}}|\psi_1\rangle$$

并定义投影算符 $P_1 = |\phi_1\rangle\langle\phi_1|$.

(2) 由于 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ 不正交, 可构造不为零的态矢量 $|\psi_2'\rangle = (1-P_1)|\psi_2\rangle$, 利用 $|\psi_2'\rangle$ 与 $|\phi_1\rangle$ 正交, 必有 $\langle\phi_1|\psi_2'\rangle = 0$. 再对 $|\psi_2'\rangle$ 归一化, 取

$$|\phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle\psi_2'|\psi_2'\rangle}}|\psi_2'\rangle$$

定义投影算符 $P_2 = |\phi_2\rangle\langle\phi_2|$.

(3) 类似地, 令 $|\psi_3'\rangle = (1-P_1-P_2)|\psi_3\rangle$, 必有 $\langle\phi_1|\psi_3'\rangle = \langle\phi_2|\psi_3'\rangle = 0$. 再对 $|\psi_3'\rangle$ 归一化, 取

$$|\phi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle\psi_3'|\psi_3'\rangle}}|\psi_3'\rangle$$

4.34 设 λ 是一个小量, 算符 $\hat{A}$ 之逆 $\hat{A}^{-1}$ 存在, 求证

$$\left(\hat{A}-\lambda\hat{B}\right)^{-1} = \hat{A}^{-1}+\lambda\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\lambda^2\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\cdots$$

证法一 根据算符逆运算的法则

$$\left(\hat{A}-\lambda\hat{B}\right)^{-1} = \left[\left(1-\lambda\hat{B}\hat{A}^{-1}\right)\hat{A}\right]^{-1} = \hat{A}^{-1}\left(1-\lambda\hat{B}\hat{A}^{-1}\right)^{-1} \tag{4.70}$$

$$= \hat{A}^{-1}f(\lambda\hat{B}\hat{A}^{-1}) \tag{4.71}$$

其中 $f(\lambda\hat{B}\hat{A}^{-1}) = \left(1-\lambda\hat{B}\hat{A}^{-1}\right)^{-1}$, 也就是函数 $f(x) = \dfrac{1}{1-x}$ 的自变量取为 $x = \lambda\hat{B}\hat{A}^{-1}$. 由于 $f(x)$ 有如下级数展开式 (整函数)

$$f(x) = 1+x+x^2+\cdots+x^n+\cdots$$

$f(\lambda\hat{B}\hat{A}^{-1}) = \left(1-\lambda\hat{B}\hat{A}^{-1}\right)^{-1}$ 也可如下表示为级数形式

$$\begin{aligned}f(\lambda\hat{B}\hat{A}^{-1}) &= \left(1-\lambda\hat{B}\hat{A}^{-1}\right)^{-1} \\ &= 1+\lambda\hat{B}\hat{A}^{-1}+\lambda^2\left(\hat{B}\hat{A}^{-1}\right)^2+\cdots+\lambda^n\left(\hat{B}\hat{A}^{-1}\right)^n+\cdots\end{aligned} \tag{4.72}$$

上式代入式 (4.71), 即得

$$\left(\hat{A}-\lambda\hat{B}\right)^{-1}=\hat{A}^{-1}+\lambda\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\lambda^2\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\cdots \tag{4.73}$$

证法二 (直接验算, 需要考察左逆与右逆两种情形)

$$\begin{aligned}&\left(\hat{A}-\lambda\hat{B}\right)\left(\hat{A}^{-1}+\lambda\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\lambda^2\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\cdots\right)\\=&1+\lambda\hat{B}\hat{A}^{-1}+\lambda^2\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\lambda^3\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\cdots\\&-\lambda\hat{B}\hat{A}^{-1}-\lambda^2\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\lambda^3\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}-\cdots\\=&1\end{aligned} \tag{4.74}$$

$$\begin{aligned}&\left(\hat{A}^{-1}+\lambda\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\lambda^2\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\cdots\right)\left(\hat{A}-\lambda\hat{B}\right)\\=&1+\lambda\hat{A}^{-1}\hat{B}+\lambda^2\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}+\lambda^3\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}+\cdots\\&-\lambda\hat{A}^{-1}\hat{B}-\lambda^2\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}-\lambda^3\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}-\cdots\\=&1\end{aligned} \tag{4.75}$$

根据式 (4.74) 以及式 (4.75), 同样得到式 (4.73). 得证.

4.35 设算符 $\hat{A}(\xi)$ 依赖于一个连续变化的参数 ξ, 它对 ξ 的导数定义为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\hat{A}\left(\xi\right)=\lim_{\varepsilon\to0}\frac{\hat{A}\left(\xi+\varepsilon\right)-\hat{A}\left(\xi\right)}{\varepsilon} \tag{4.76}$$

证明 (1) 设 $\hat{A}(\xi)$ 与 $\hat{B}(\xi)$ 对 ξ 可导, 则

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left(\hat{A}\hat{B}\right)=\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}\xi}\hat{B}+\hat{A}\frac{\mathrm{d}\hat{B}}{\mathrm{d}\xi} \tag{4.77}$$

(2) 设 $\hat{A}(\xi)$ 之逆存在, $\hat{A}(\xi)$ 对 ξ 可导, 则

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\hat{A}^{-1}=-\hat{A}^{-1}\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}\xi}\hat{A}^{-1} \tag{4.78}$$

(3)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\exp\left(\mathrm{i}\hat{O}\xi\right)=\mathrm{i}\hat{O}\exp\left(\mathrm{i}\hat{O}\xi\right) \tag{4.79}$$

证明 (1) 按照题给定义

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left(\hat{A}\hat{B}\right)=&\lim_{\varepsilon\to0}\frac{\hat{A}\left(\xi+\varepsilon\right)\hat{B}\left(\xi+\varepsilon\right)-\hat{A}\left(\xi\right)\hat{B}\left(\xi\right)}{\varepsilon}\\=&\lim_{\varepsilon\to0}\frac{\hat{A}\left(\xi+\varepsilon\right)\hat{B}\left(\xi+\varepsilon\right)-\hat{A}\left(\xi\right)\hat{B}\left(\xi+\varepsilon\right)+\hat{A}\left(\xi\right)\hat{B}\left(\xi+\varepsilon\right)-\hat{A}\left(\xi\right)\hat{B}\left(\xi\right)}{\varepsilon}\\=&\lim_{\varepsilon\to0}\left\{\frac{\hat{A}\left(\xi+\varepsilon\right)-\hat{A}\left(\xi\right)}{\varepsilon}\hat{B}\left(\xi+\varepsilon\right)+\hat{A}\left(\xi\right)\frac{\hat{B}\left(\xi+\varepsilon\right)-\hat{B}\left(\xi\right)}{\varepsilon}\right\}\\=&\lim_{\varepsilon\to0}\frac{\hat{A}\left(\xi+\varepsilon\right)-\hat{A}\left(\xi\right)}{\varepsilon}\lim_{\varepsilon\to0}\hat{B}\left(\xi+\varepsilon\right)+\hat{A}\left(\xi\right)\lim_{\varepsilon\to0}\frac{\hat{B}\left(\xi+\varepsilon\right)-\hat{B}\left(\xi\right)}{\varepsilon}\\=&\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}\xi}\hat{B}+\hat{A}\frac{\mathrm{d}\hat{B}}{\mathrm{d}\xi}\end{aligned}$$

即得所证的式 (4.77). 上面最后一步还用了可微函数的连续性.

(2) 设 $\hat{A}(\xi)$ 之逆 $\hat{A}^{-1}$ 存在, 则

$$AA^{-1} = A^{-1}A = 1$$

此式对 ξ 微分得

$$\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}\xi}A^{-1} + A\frac{\mathrm{d}A^{-1}}{\mathrm{d}\xi} = 0$$

上式两边左乘 A^{-1}, 即得所证的式 (4.78).

(3) 利用题 4.36 结果 $\exp\left[\mathrm{i}\hat{O}(\xi+\varepsilon)\right] = \exp\left(\mathrm{i}\hat{O}\xi\right)\exp\left(\mathrm{i}\hat{O}\varepsilon\right)$, 这样利用题给定义得

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\exp\left(\mathrm{i}\hat{O}\xi\right) &= \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{\exp\left[\mathrm{i}\hat{O}(\xi+\varepsilon)\right] - \exp\left(\mathrm{i}\hat{O}\xi\right)}{\varepsilon} \\
&= \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{\exp\left(\mathrm{i}\hat{O}\xi\right)\exp\left(\mathrm{i}\hat{O}\varepsilon\right) - \exp\left(\mathrm{i}\hat{O}\xi\right)}{\varepsilon} \\
&= \lim_{\varepsilon\to 0}\exp\left(\mathrm{i}\hat{O}\xi\right)\frac{\exp\left(\mathrm{i}\hat{O}\varepsilon\right)-1}{\varepsilon} = \exp\left(\mathrm{i}\hat{O}\xi\right)\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1+\mathrm{i}\hat{O}\varepsilon+O(\varepsilon^2)-1}{\varepsilon} \\
&= \exp\left(\mathrm{i}\hat{O}\xi\right)\mathrm{i}\hat{O} = \mathrm{i}\hat{O}\exp\left(\mathrm{i}\hat{O}\xi\right)
\end{aligned}$$

即得所证的式 (4.79).

4.36 设 $\hat{A}$ 为无量纲算符, ξ 与 η 为参量. 定义

$$\exp(\xi\hat{A}) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\xi^n}{n!}\hat{A}^n$$

证明 (1)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\exp(\xi\hat{A}) = \hat{A}\exp(\xi\hat{A}) = \exp(\xi\hat{A})\hat{A}$$

(2)

$$\exp\left[(\xi+\eta)\hat{A}\right] = \exp\left(\xi\hat{A}\right)\cdot\exp\left(\eta\hat{A}\right)$$

证明 (1) 按照 Leibniz 微商定义

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\exp(\xi\hat{A}) &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\xi^n}{n!}\hat{A}^n = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\xi^n\frac{1}{n!}\hat{A}^n = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{\xi^{n-1}}{(n-1)!}\hat{A}^n \\
&= \hat{A}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\xi^{n-1}}{(n-1)!}\hat{A}^{n-1} = \hat{A}\exp(\xi\hat{A}) = \exp(\xi\hat{A})\hat{A}
\end{aligned}$$

(2) 按题设并利用二项式定理

$$\begin{aligned}
\exp\left[(\xi+\eta)\hat{A}\right] &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(\xi+\eta)^n\hat{A}^n = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{n}\frac{\xi^m\eta^{n-m}}{m!(n-m)!}\hat{A}^n \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{\xi^m\eta^{n-m}}{m!(n-m)!}\hat{A}^n = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\eta^{n-m}}{(n-m)!}\hat{A}^{n-m}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{\xi^m}{m!}\hat{A}^m \\
&= \sum_{n=m}^{\infty}\frac{\eta^{n-m}}{(n-m)!}\hat{A}^{n-m}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{\xi^m}{m!}\hat{A}^m = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\eta^n}{n!}\hat{A}^n\sum_{m=0}^{\infty}\frac{\xi^m}{m!}\hat{A}^m \\
&= \exp\left(\xi\hat{A}\right)\cdot\exp\left(\eta\hat{A}\right)
\end{aligned}$$

以上[①]用到了 $(n)!=\infty$(当 n 为负整数).

另证 (关于第 (2) 小题) 令 $f(\xi)=\exp\left[(\xi+\eta)\,\hat{A}\right]$, $g(\xi)=\exp\left(\xi\hat{A}\right)\cdot\exp\left(\eta\hat{A}\right)$, 按照 Leibniz 微商定义

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\xi}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi+\eta}\exp\left[(\xi+\eta)\,\hat{A}\right]=\hat{A}\exp\left[(\xi+\eta)\,\hat{A}\right]=\hat{A}f$$

$$\frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}\xi}=\hat{A}\exp\left(\xi\hat{A}\right)\cdot\exp\left(\eta\hat{A}\right)=\hat{A}g$$

可见 f, g 满足同样的一阶微分方程. 又在 $\xi=0$ 处 $f(0)=\exp\left(\eta\hat{A}\right)=g(0)$, 可见 $f(\xi)=g(\xi)$, 即得所证结论.

4.37 给定算符 $\hat{A}$、$\hat{B}$, 令 $\hat{C}_0=\hat{B},\hat{C}_1=\left[\hat{A},\hat{B}\right],\hat{C}_2=\left[\hat{A},\hat{C}_1\right]=\left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right],\cdots$, 证明

$$\mathrm{e}^{\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{-\hat{A}}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\hat{C}_n$$

提示 令

$$f(\lambda)=\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}}$$

按 λ 幂级数展开, 然后令 $\lambda=1$.

证明 设 $f(\alpha)=\mathrm{e}^{\alpha A}B\mathrm{e}^{-\alpha A}$, 其中 α 为参数. $f(\alpha)$ 的 Taylor 展开式为

$$f(\alpha)=f(0)+f'(0)\alpha+f''(0)\frac{\alpha^2}{2!}+\cdots+f^{(n)}(0)\frac{\alpha^n}{n!}+\cdots \tag{4.80}$$

式中 $f(0)=B$. $f(\alpha)$ 对 α 依次求各阶导数得

$$\begin{aligned}
f'(\alpha)&=\mathrm{e}^{\alpha A}\left[AB-BA\right]\mathrm{e}^{-\alpha A},\quad f'(0)=\left[AB-BA\right],\\
f''(\alpha)&=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\alpha}f'(\alpha)=\mathrm{e}^{\alpha A}\left[A,\left[AB-BA\right]\right]\mathrm{e}^{-\alpha A},\quad f''(0)=\left[A,\left[AB-BA\right]\right],\\
&\cdots\\
f^{(n)}(\alpha)&=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\alpha}f^{(n-1)}(\alpha)=\mathrm{e}^{\alpha A}\underbrace{\left[A,\left[A,\cdots,\left[A,\right.\right.\right.}\left.\left.\left[AB-BA\right]\right]\cdots\right]\mathrm{e}^{-\alpha A},\\
f^{(n)}(0)&=\underbrace{\left[A,\left[A,\cdots,\left[A,\right.\right.\right.}\left.\left.\left[AB-BA\right]\right]\cdots\right],\\
&\cdots
\end{aligned}$$

把上面各式代入式 (4.80) 即得

$$\mathrm{e}^{\alpha A}B\mathrm{e}^{-\alpha A}=B+\alpha\left[A,B\right]+\frac{\alpha^2}{2!}\left[A,\left[A,B\right]\right]+\cdots$$

上式中取 $\alpha=1$ 即得

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

4.38 设 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 不对易, 令 $\hat{C}=[\hat{A},\hat{B}]$, 设 $\hat{C}$ 与 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 都对易, 即 $\left[\hat{A},\hat{C}\right]=0$, $\left[\hat{B},\hat{C}\right]=0$. 证明

$$\left[\hat{A},\hat{B}^n\right]=n\hat{C}\hat{B}^{n-1},\quad\left[\hat{A},f(\hat{B})\right]=\hat{C}f'(\hat{B})$$

$f(x)$ 是可以表示成 x 正幂级数展开的函数. 特例

$$\left[\hat{A},\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\right]=\lambda\hat{C}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}},\quad\left[\hat{A},\mathrm{e}^{\hat{B}}\right]=\hat{C}\mathrm{e}^{\hat{B}}$$

λ 为参数.

① 这里采用从左到右的证明. 也可从右边开始, 两个关于 $\hat{A}$ 的级数相乘, 把 $\hat{A}$ 各个同次幂的项归总求和, 即可发现与左边相等.

证明 关于 $[\hat{A},\hat{B}^n]=n\hat{C}\hat{B}^{n-1}$ 可见题 4.4 式 (4.4) 的证明. 题给 $f(x)$ 是可以表示成 x 正幂级数展开的函数, 则设

$$f(\hat{B})=\sum_{n=0}^{\infty}f_n\hat{B}^n$$

这样

$$\begin{aligned}\left[\hat{A},f(\hat{B})\right]&=\left[\hat{A},\sum_{n=0}^{\infty}f_n\hat{B}^n\right]=\sum_{n=0}^{\infty}f_n\left[\hat{A},\hat{B}^n\right]\\&=\sum_{n=0}^{\infty}f_n n\hat{C}\hat{B}^{n-1}=\hat{C}\sum_{n=0}^{\infty}f_n n\hat{B}^{n-1}=\hat{C}f'(\hat{B})\end{aligned}$$

取 $f(\hat{B})=\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}$($\lambda$ 为参数) 即得

$$\left[\hat{A},\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\right]=\lambda\hat{C}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}$$

再取 $\lambda=1$ 给出

$$\left[\hat{A},\mathrm{e}^{\hat{B}}\right]=\hat{C}\mathrm{e}^{\hat{B}}$$

4.39 同上题. 证明公式

$$\mathrm{e}^{\hat{A}+\hat{B}}=\mathrm{e}^{\hat{A}}\mathrm{e}^{\hat{B}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}C}=\mathrm{e}^{\hat{B}}\mathrm{e}^{\hat{A}}\mathrm{e}^{\frac{1}{2}C}$$

更一般形式

$$\mathrm{e}^{\lambda\left(\hat{A}+\hat{B}\right)}=\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\mathrm{e}^{-\frac{\lambda^2}{2}C}=\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\frac{\lambda^2}{2}C}$$

证法一 设 $f(\lambda)=\mathrm{e}^{\lambda A}\mathrm{e}^{\lambda B}$, 对 λ 求导得

$$\begin{aligned}f'(\lambda)&=A\mathrm{e}^{\lambda A}\mathrm{e}^{\lambda B}+\mathrm{e}^{\lambda A}B\mathrm{e}^{\lambda B}=\left[A+\mathrm{e}^{\lambda A}B\mathrm{e}^{-\lambda A}\right]\mathrm{e}^{\lambda A}\mathrm{e}^{\lambda B}\\&=\left[A+\mathrm{e}^{\lambda A}B\mathrm{e}^{-\lambda A}\right]f(\lambda)=\left[A+g(\lambda)\right]f(\lambda)\end{aligned}\tag{4.81}$$

其中令 $g(\lambda)=\mathrm{e}^{\lambda A}B\mathrm{e}^{-\lambda A}$, 对 λ 求导得

$$g'(\lambda)=\mathrm{e}^{\lambda A}(AB-BA)\mathrm{e}^{-\lambda A}=\mathrm{e}^{\lambda A}C\mathrm{e}^{-\lambda A}=C\tag{4.82}$$

由 $\lambda=0$ 初始条件 $g(0)=B$, 根据上式解得

$$g(\lambda)=B+C\lambda\tag{4.83}$$

上式代入到式 (4.81) 得 $f'(\lambda)=(A+B+C\lambda)f(\lambda)$. 同理可证 $f'(\lambda)=f(\lambda)(A+B+C\lambda)$. 也就有

$$f'(\lambda)=f(\lambda)(A+B+C\lambda)=(A+B+C\lambda)f(\lambda)$$

由此知 $(A+B+C\lambda)$ 与 $f(\lambda)$ 对易. 这样关于 $f(\lambda)$ 的微分方程为

$$\frac{f'(\lambda)}{f(\lambda)}=A+B+C\lambda\tag{4.84}$$

由 $\lambda=0$ 初始条件 $f(0)=1$, 根据上式解得

$$f(\lambda)=\mathrm{e}^{\lambda A+\lambda B+\frac{1}{2}\lambda^2C}\tag{4.85}$$

现取 $\lambda=1$, 即得

$$\mathrm{e}^{A}\mathrm{e}^{B}=\mathrm{e}^{A+B+\frac{1}{2}C}=\mathrm{e}^{A+B}\mathrm{e}^{\frac{1}{2}C}$$

即有

$$\mathrm{e}^{A+B}=\mathrm{e}^{A}\mathrm{e}^{B}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}C} \tag{4.86}$$

式 (4.86) 中 $A\leftrightarrow B$, 即得 $\mathrm{e}^{A+B}=\mathrm{e}^{B}\mathrm{e}^{A}\mathrm{e}^{\frac{1}{2}C}$, 这样

$$\mathrm{e}^{A+B}=\mathrm{e}^{A}\mathrm{e}^{B}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}C}=\mathrm{e}^{B}\mathrm{e}^{A}\mathrm{e}^{\frac{1}{2}C} \tag{4.87}$$

此式称 Baker-Hausdorff 公式. 对于 A 与 B 对易情况, 即 $C=0$, 显然 $\mathrm{e}^{A+B}=\mathrm{e}^{A}\mathrm{e}^{B}=\mathrm{e}^{B}\mathrm{e}^{A}$.

证法二 设 $f(\lambda)=\mathrm{e}^{-\lambda(A+B)}\mathrm{e}^{\lambda A}\mathrm{e}^{\lambda B}$, 对 λ 求导得

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\lambda}=&-\mathrm{e}^{-\lambda(A+B)}(A+B)\mathrm{e}^{\lambda A}\mathrm{e}^{\lambda B}+\mathrm{e}^{-\lambda(A+B)}A\mathrm{e}^{\lambda A}\mathrm{e}^{\lambda B}+\mathrm{e}^{-\lambda(A+B)}\mathrm{e}^{\lambda A}B\mathrm{e}^{\lambda B}\\ =&\mathrm{e}^{-\lambda(A+B)}\left(\mathrm{e}^{\lambda A}B-B\mathrm{e}^{\lambda A}\right)\mathrm{e}^{\lambda B}=-\mathrm{e}^{-\lambda(A+B)}\lambda[B,A]\mathrm{e}^{\lambda A}\mathrm{e}^{\lambda B}\\ =&\lambda[A,B]\mathrm{e}^{-\lambda(A+B)}\mathrm{e}^{\lambda A}\mathrm{e}^{\lambda B}=\lambda Cf\end{aligned}$$

其中 $C=[A,B]$ 与 A, B 都对易. 也就是

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\lambda}=\lambda Cf,\quad \frac{\mathrm{d}\ln f}{\mathrm{d}\lambda}=\lambda C \tag{4.88}$$

积分得

$$f=\mathrm{e}^{\frac{1}{2}\lambda^{2}C}$$

也就是

$$f(\lambda)=\mathrm{e}^{-\lambda(A+B)}\mathrm{e}^{\lambda A}\mathrm{e}^{\lambda B}=\mathrm{e}^{\frac{1}{2}\lambda^{2}C} \tag{4.89}$$

由上式即给出

$$\mathrm{e}^{\lambda(A+B)}=\mathrm{e}^{\lambda A}\mathrm{e}^{\lambda B}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\lambda^{2}C} \tag{4.90}$$

取 $\lambda=1$, 即得

$$\mathrm{e}^{A+B}=\mathrm{e}^{A}\mathrm{e}^{B}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}C}$$

与式 (4.86) 同. 再作互换 $A\leftrightarrow B$, 即得另一式.

4.40 设 U 为幺正算符, 证明

(1) U 可以分解为

$$\begin{aligned}&U=A+\mathrm{i}B,\quad A=\frac{1}{2}\left(U^{\dagger}+U\right),\quad B=\frac{\mathrm{i}}{2}\left(U^{\dagger}-U\right)\\ &A^{2}+B^{2}=1,\quad \text{而且}\,[A,B]=0\end{aligned}$$

(2) 进一步证明 U 可以表示为 $U=\exp(\mathrm{i}H)$, H 为厄米算符.

提示 由于 $[A,B]=0$, 可以找它们的共同本征函数.

证明 令

$$A=\frac{1}{2}(U+U^{\dagger}),\quad B=\frac{1}{2\mathrm{i}}(U-U^{\dagger}) \tag{4.91}$$

上式的反解式为

$$U=A+\mathrm{i}B,\quad U^{\dagger}=A-\mathrm{i}B \tag{4.92}$$

则 $A^{\dagger}=A$, $B^{\dagger}=B$, 因此 A, B 均为 Hermite 算符. 而 $U=A+\mathrm{i}B$ 显然成立.

题给 U 为幺正算符, 则

$$UU^{\dagger}=U^{\dagger}U=1 \tag{4.93}$$

将式 (4.92) 代入得

$$\begin{aligned}UU^{\dagger}&=(A+\mathrm{i}B)(A-\mathrm{i}B)=A^2+B^2-\mathrm{i}[A,B]=1\\U^{\dagger}U&=(A-\mathrm{i}B)(A+\mathrm{i}B)=A^2+B^2+\mathrm{i}[A,B]=1\end{aligned}$$

上面两式联立, 即得

$$A^2+B^2=1,\quad \text{而且}\,[A,B]=0 \tag{4.94}$$

第 (1) 小题证毕.

(2) 由于 A、B 是对易的 Hermite 算符, 故存在完备的共同本征态, 记为 $\{|n\rangle\}$, 满足本征方程

$$A|n\rangle=A_n|n\rangle,\quad B|n\rangle=B_n|n\rangle, \tag{4.95}$$

由于 $A^2+B^2=1$, 故有

$$|n\rangle=\left(A^2+B^2\right)|n\rangle=\left(A_n^2+B_n^2\right)|n\rangle$$

由上式可知, 数 $A_n^2+B_n^2$ 满足

$$A_n^2+B_n^2=1 \tag{4.96}$$

因此, 对于每组本征值 (A_n,B_n), 在 $(0,\pi)$ 区间必然存在实数 H_n, 使得

$$A_n=\cos H_n,\quad B_n=\sin H_n \tag{4.97}$$

从而

$$U|n\rangle=(A+\mathrm{i}B)|n\rangle=\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_n}|n\rangle \tag{4.98}$$

$\{|n\rangle\}$ 具有完备性, 不妨设各 $|n\rangle$ 均已归一化, 令

$$H=\sum_n H_n|n\rangle\langle n| \tag{4.99}$$

则式 (4.99) 两边乘以 $\langle n|$, 并对所有 n 求和, 利用 $\{|n\rangle\}$ 的完备性得

$$U=\sum_n \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_n}|n\rangle\langle n|=\mathrm{e}^{\mathrm{i}H}\sum_n|n\rangle\langle n|=\mathrm{e}^{\mathrm{i}H} \tag{4.100}$$

证毕.

第 5 章　力学量随时间的演化与对称性

5.1　证明力学量 A (不显含 t) 的平均值对时间的二次微商为

$$-\hbar^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\overline{A}=\overline{[[A,H],H]}\quad(\text{H 是 Hamilton 量})\tag{5.1}$$

证法一　在 Heisenberg 图像中, 力学量 A 随时间的变化满足 Heisenberg 方程, 而态不随时间变化

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}A=[A,H]$$

由此

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\cdot\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}A=\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}[A,H]=[[A,H],H]$$

或者

$$-\hbar^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}A=[[A,H],H]$$

上式对给定态取平均, 即得所证的式 (5.1), 该式对任意态都成立.

证法二　在 Schrödinger 图像中, 态随时间演化满足 Schrödinger 方程, 而力学量不随时间变化, 力学量 A 在任意 $|\psi\rangle$ 态的平均值 $\overline{A}=\langle\psi|A|\psi\rangle$ 随时间变化的方程为

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{A}&=\left\langle\frac{\partial\psi}{\partial t}|A|\psi\right\rangle+\left\langle\psi|A|\frac{\partial\psi}{\partial t}\right\rangle+\left\langle\psi|\frac{\partial A}{\partial t}|\psi\right\rangle\\&=-\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\psi|HA|\psi\rangle+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\psi|AH|\psi\rangle=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\psi|[A,H]|\psi\rangle\end{aligned}$$

同理得 $\overline{A}$ 的时间 2 阶微商为

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\overline{A}=-\frac{1}{\hbar^2}\langle\psi|[[A,H],H]|\psi\rangle=-\frac{1}{\hbar^2}\overline{[[A,H],H]}$$

即得所证的式 (5.1).

5.2　证明在束缚定态下, 不显含 t 的物理量 (算符) 对 t 的导数的平均值为 0.

证明　体系的束缚定态是能量本征态. 任取该体系 (记其 Hamilton 量为 H) 的一个束缚定态 $|\psi_E\rangle$, 设其相应本征值为 E, 即有

$$H|\psi_E\rangle=E|\psi_E\rangle$$

由于 H 的 Hermite 性, 其 Hermite 共轭式为

$$\langle\psi_E|H=E\langle\psi_E|$$

设有任意的不显含 t 力学量 A. 不妨设 $|\psi_E\rangle$ 已归一化, 则利用前述 $|\psi_E\rangle$ 的本征方程及其 Hermite 共轭式, A 的平均值对 t 的导数有

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{A}&=\left\langle\frac{\partial\psi_E}{\partial t}|A|\psi_E\right\rangle+\left\langle\psi_E|A|\frac{\partial\psi_E}{\partial t}\right\rangle+\left\langle\psi_E|\frac{\partial A}{\partial t}|\psi_E\right\rangle\\&=-\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\psi_E|HA|\psi_E\rangle+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\psi_E|AH|\psi_E\rangle\\&=-\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}E\langle\psi_E|A|\psi_E\rangle+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}E\langle\psi_E|A|\psi_E\rangle=0\end{aligned}$$

也就是 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{A}=0$. 因此, 在不连续的能量本征态 (束缚定态) 下, 不显含 t 的物理量 (算符) 对 t 的导数的平均值为 0.

说明 对一般束缚态, 本题结论不一定成立. 请读者考虑为什么?

5.3 证明对于波包 (一维), 有

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

证明 在 Heisenberg 图像中, 态不随时间变化, 而力学量随时间的变化满足 Heisenberg 方程. 根据力学量 x^2 满足的 Heisenberg 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}x^2=\left[x^2,H\right]=\left[x^2,\frac{p^2}{2m}\right]=\frac{1}{2m}\left\{x\left[x,p^2\right]+\left[x,p^2\right]x\right\}=\frac{\mathrm{i}\hbar}{m}\left(xp+px\right)$$

或者

$$\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}x^2=\frac{1}{m}\left(xp+px\right)\tag{5.2}$$

上式两边对给定态取平均, 即有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{x^2}=\frac{1}{m}\overline{(xp+px)}=\frac{1}{m}(\overline{xp}+\overline{px})\tag{5.3}$$

此式对任意态都成立.

说明 本题还可在 Schrödinger 图像中证明, 请读者自行考虑完成.

5.4 对于一维运动粒子, 设 $H=p^2/2m+V(x)$.

(1) 利用 $[x,p]=\mathrm{i}\hbar$, 证明

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{x^2}=\frac{1}{m}\overline{(xp+px)},\quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{p^2}=-\overline{\left(p\frac{\partial V}{\partial x}+\frac{\partial V}{\partial x}p\right)}\tag{5.4}$$

(2) 定义

$$\delta x=x-\overline{x},\quad (\Delta x)^2\equiv\overline{(\delta x)^2}=\overline{(x-\overline{x})^2}=\overline{x^2}-\overline{x}^2\tag{5.5a}$$

$$\delta p=p-\overline{p},\quad (\Delta p)^2\equiv\overline{(\delta p)^2}=\overline{(p-\overline{p})^2}=\overline{p^2}-\overline{p}^2\tag{5.5b}$$

证明

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\Delta x)^2=\frac{1}{m}\left[\overline{(xp+px)}-2\overline{x}\overline{p}\right]\tag{5.6}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\Delta p)^2=\left[\overline{(p\dot{p}+\dot{p}p)}-2\overline{p}\overline{\dot{p}}\right]\tag{5.7}$$

式中 $\dot{p}=\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}p=m\ddot{x}$.

(3) 定义 $\delta\dot{x}=\dot{x}-\overline{\dot{x}},\delta\dot{p}=\dot{p}-\overline{\dot{p}}$, 证明

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\Delta x)^2=\overline{(\delta x\delta\dot{x}+\delta\dot{x}\delta x)},\quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\Delta p)^2=\overline{(\delta p\delta\dot{p}+\delta\dot{p}\delta p)}\tag{5.8}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\Delta(xp)\equiv\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{(\delta x\delta p+\delta p\delta x)}=(\overline{\delta\dot{x}\delta p+\delta x\delta\dot{p}+\delta\dot{p}\delta x+\delta p\delta\dot{x}})\tag{5.9}$$

参阅 C. W. Wong, Am. J. Phys., **64**(1996),792.

证明 我们在 Heisenberg 图像中证明. 式 (5.4) 的第一式同式 (5.3), 见题 5.3 所证. 为证第二式, 计算

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}p^2=\left[p^2,H\right]=\left[p^2,V(x)\right]=p\left[p,V(x)\right]+\left[p,V(x)\right]p=-\mathrm{i}\hbar\left(p\frac{\partial V}{\partial x}+\frac{\partial V}{\partial x}p\right)$$

这样 Heisenberg 方程给出

$$-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}p^2=p\frac{\partial V}{\partial x}+\frac{\partial V}{\partial x}p \tag{5.10}$$

上式两边对给定态 (在 Heisenberg 图像, 态不随时间变化) 取平均, 即得式 (5.4) 的第二式.

关于 x, p 的 Heisenberg 方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}x=[x,H]=\frac{1}{2m}\left[x,p^2\right]=\frac{p}{2m}\left[x,p\right]+\left[x,p\right]\frac{p}{2m}=\mathrm{i}\hbar\frac{p}{m}$$
$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}p=[p,V(x)]=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial V}{\partial x}$$

也就是

$$\dot{x}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}x=\frac{p}{m} \tag{5.11}$$
$$\dot{p}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}p=-\frac{\partial V}{\partial x} \tag{5.12}$$

对关于 x 的 Heisenberg 方程在给定态下取平均得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{x}=\frac{1}{m}\overline{p} \tag{5.13}$$

或者

$$\overline{p}=m\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{x} \tag{5.14}$$

这样

$$\overline{\dot{p}}=m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\overline{x}=m\overline{\ddot{x}} \tag{5.15}$$

这里用到了在 Heisenberg 图像, 态不随时间变化的特点. 这样

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\Delta x)^2=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\overline{x^2}-\overline{x}^2\right)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{x^2}+2\overline{x}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{x}=\frac{1}{m}\left[\overline{(xp+px)}-2\overline{x}\overline{p}\right]$$

即为所证的式 (5.6). 而

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\Delta p)^2&=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\overline{p^2}-\overline{p}^2\right)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{p^2}+2\overline{p}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{p}\\&=-\overline{\left(p\frac{\partial V}{\partial x}+\frac{\partial V}{\partial x}p\right)}-2\overline{p}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{p}=\overline{(p\dot{p}+\dot{p}p)}-2\overline{p}\overline{\dot{p}}\end{aligned}$$

即为所证的式 (5.7).

为证式 (5.8), 利用定义式 (5.5), Heisenberg 方程为

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\delta x)^2&=\left[(\delta x)^2,H\right]=\left[(x-\overline{x})^2,\frac{p^2}{2m}\right]\\&=(x-\overline{x})\left[(x-\overline{x}),\frac{p^2}{2m}\right]+\left[(x-\overline{x}),\frac{p^2}{2m}\right](x-\overline{x})\\&=\delta x\left[x,\frac{p^2}{2m}\right]+\left[x,\frac{p^2}{2m}\right]\delta x=\frac{\mathrm{i}\hbar}{m}\delta xp+\frac{\mathrm{i}\hbar}{m}p\delta x\end{aligned} \tag{5.16}$$

利用式 (5.11), 即得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\delta x)^2 = \delta x\dot{x} + \dot{x}\delta x = \delta x\delta\dot{x} + \delta\dot{x}\delta x + 2\bar{\dot{x}}\delta x$$

上式两边对于给定态求平均, 因 $\overline{\delta x} = \overline{x} - \overline{x} = 0$, 得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\Delta x)^2 = \overline{(\delta x\delta\dot{x} + \delta\dot{x}\delta x)}$$

此为式 (5.8) 的第一式. 类似的

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\delta p)^2 &= \left[(\delta p)^2, H\right] = \left[(p-\overline{p})^2, V(x)\right] \\ &= (p-\overline{p})\left[(p-\overline{p}), V(x)\right] + \left[(p-\overline{p}), V(x)\right](p-\overline{p}) \\ &= \delta p\left[p, V(x)\right] + \left[p, V(x)\right]\delta p = -\mathrm{i}\hbar\delta p\frac{\partial V}{\partial x} - \mathrm{i}\hbar\frac{\partial V}{\partial x}\delta p\end{aligned} \tag{5.17}$$

利用式 (5.12), 即得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\delta p)^2 = \delta p\dot{p} + \dot{p}\delta p = \delta p\delta\dot{p} + \delta\dot{p}\delta p + 2\bar{\dot{p}}\delta p$$

上式两边对于给定态求平均, 因 $\overline{\delta p} = \overline{p} - \overline{p} = 0$, 得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\Delta p)^2 = \overline{(\delta p\delta\dot{p} + \delta\dot{p}\delta p)}$$

此为式 (5.8) 的第二式. 最后

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\delta x\delta p + \delta p\delta x) &= \delta x\left[\delta p, H\right] = \delta x\left[\delta p, H\right] + \left[\delta x, H\right]\delta p + \delta p\left[\delta x, H\right] + \left[\delta p, H\right]\delta x \\ &= \delta x\left[p, V(x)\right] + \left[x, \frac{p^2}{2m}\right]\delta p + \delta p\left[x, \frac{p^2}{2m}\right] + \left[p, V(x)\right]\delta x \\ &= -\mathrm{i}\hbar\delta x\frac{\partial V}{\partial x} + \mathrm{i}\hbar\frac{p}{m}\delta p + \mathrm{i}\hbar\delta p\frac{p}{m} - \mathrm{i}\hbar\frac{\partial V}{\partial x}\delta x\end{aligned} \tag{5.18}$$

再利用关于 x, p 的 Heisenberg 方程 (5.11)、式 (5.12) 得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\delta x\delta p + \delta p\delta x) = \delta x\dot{p} + \dot{p}\delta x + \dot{x}\delta p + \delta p\dot{x} = \delta x\delta\dot{p} + \delta\dot{p}\delta x + \delta\dot{x}\delta p + \delta p\delta\dot{x} + 2\bar{\dot{p}}\delta x + 2\bar{\dot{x}}\delta p$$

上式两边对于给定态求平均, 因 $\overline{\delta x} = \overline{x} - \overline{x} = 0$ 以及 $\overline{\delta p} = \overline{p} - \overline{p} = 0$, 得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\Delta(xp) \equiv \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{(\delta x\delta p + \delta p\delta x)} = \overline{(\delta\dot{x}\delta p + \delta x\delta\dot{p} + \delta\dot{p}\delta x + \delta p\delta\dot{x})}$$

此即式 (5.9). 证毕.

说明 Heisenberg 图像中算符的时间导数与该算符 Leibniz 意义的时间导数并不完全相同, 例如读者可考虑 c 数 (包括随时间变化的 c 数) 与任意算符的对易子都为零的例子. 读者还可考虑在 Schrödinger 图像中证明本题.

5.5 多粒子系, 如不受外力, Hamilton 量表示成

$$H = \sum_i \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_i} + \sum_{i<j} V\left(|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|\right)$$

证明总动量 $\boldsymbol{P} = \sum_i \boldsymbol{p}_i$ 守恒.

证明　我们可以直接通过 Heisenberg 方程证明本题结论. 这里我们用另一种办法, 考虑 Hamilton 量 H 的变换 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{a}/\hbar}H\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{a}/\hbar}$, 其中 $\boldsymbol{P}=\sum_i \boldsymbol{p}_i$ 为总动量, 应有

$$\begin{aligned}
\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{a}/\hbar}H\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{a}/\hbar}&=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{a}/\hbar}\left\{\sum_i\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_i}+\sum_{i<j}V\left(|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j|\right)\right\}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{a}/\hbar}\\
&=\sum_i\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_i}+\sum_{i<j}V\left(\left|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{a}/\hbar}\boldsymbol{r}_i\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{a}/\hbar}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{a}/\hbar}\boldsymbol{r}_j\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{a}/\hbar}\right|\right)\\
&=\sum_i\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_i}+\sum_{i<j}V\left(\left|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}_i\cdot\boldsymbol{a}/\hbar}\boldsymbol{r}_i\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}_i\cdot\boldsymbol{a}/\hbar}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}_j\cdot\boldsymbol{a}/\hbar}\boldsymbol{r}_j\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}_j\cdot\boldsymbol{a}/\hbar}\right|\right)\\
&=\sum_i\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_i}+\sum_{i<j}V\left(|\boldsymbol{r}_i+\boldsymbol{a}-\boldsymbol{r}_j-\boldsymbol{a}|\right)\\
&=\sum_i\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_i}+\sum_{i<j}V\left(|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j|\right)=H
\end{aligned}$$

也就是

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{a}/\hbar}H\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{a}/\hbar}=H$$

上式两边作偏导数 $\dfrac{\partial}{\partial\boldsymbol{a}}$ 得

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{a}/\hbar}[\boldsymbol{P},H]\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{a}/\hbar}=0$$

再对上式取 $\boldsymbol{a}=0$ 即得 $[\boldsymbol{P},H]=0$. $\boldsymbol{P}$ 不显含时间, 因此 $\boldsymbol{P}$ 是守恒量.

5.6　多粒子系, 如所受外力矩为 0, 则总角动量 $\boldsymbol{L}=\sum_i\boldsymbol{l}_i$ 守恒.

证明　多粒子系 Hamilton 量的一般形式为

$$H=\sum_i\left(\frac{\boldsymbol{p}_i^2}{2m_i}+V(\boldsymbol{r}_i)\right)+\sum_{i<j}V_{ij}(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)\tag{5.19}$$

考察总角动量 $\boldsymbol{L}$ 与 Hamilton 量的对易关系

$$\begin{aligned}
[\boldsymbol{L},H]&=\left[\sum_k\boldsymbol{l}_k,\sum_i\left(\frac{\boldsymbol{p}_i^2}{2m_i}+V(\boldsymbol{r}_i)\right)+\sum_{i<j}V(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)\right]\\
&=\left[\sum_k\boldsymbol{l}_k,\sum_i V(\boldsymbol{r}_i)+\sum_{i<j}V_{ij}(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)\right]
\end{aligned}$$

其中 $\boldsymbol{l}_k=\boldsymbol{r}_k\times\boldsymbol{p}_k$, $\boldsymbol{r}_k$ 与关于坐标的函数 f 对易, 而 $[\boldsymbol{p}_k,f]=-\mathrm{i}\hbar\nabla_{\boldsymbol{r}_k}f$, 这样

$$\begin{aligned}
[\boldsymbol{L},H]&=\sum_k\boldsymbol{r}_k\times(-\mathrm{i})\hbar\nabla_{\boldsymbol{r}_k}V(\boldsymbol{r}_k)+\sum_{k,i<j}\boldsymbol{r}_k\times(-\mathrm{i})\hbar\nabla_{\boldsymbol{r}_k}V_{ij}\frac{\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j}{|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j|}(\delta_{ik}-\delta_{jk})\\
&=-\mathrm{i}\hbar\sum_k\boldsymbol{r}_k\times\boldsymbol{F}-\mathrm{i}\hbar\sum_{i<j}(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)\times\nabla_{\boldsymbol{r}_k}V_{ij}\frac{\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j}{|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j|}=-\mathrm{i}\hbar\sum_k m_\kappa+0
\end{aligned}$$

上式可见体系的总内力矩之和为零. 若合外力矩 $\sum_k m_k$ 为零, 则 $[\boldsymbol{L},H]=0$, 加上 $\boldsymbol{L}$ 不含时, 故 $\boldsymbol{L}$ 为守恒量.

5.7 证明对于经典力学体系, 若 A 与 B 为守恒量, 则 $\{A,B\}$(Poisson 括号) 也是守恒量 (但不一定是新的守恒量). 对于量子力学体系, 若 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 为守恒量, 则 $[\hat{A},\hat{B}]$ 也是守恒量 (不一定是新的守恒量).

证明 经典力学体系的守恒量也就是全导数等于零的量, 又称运动积分. 若 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 为守恒量, 即有

$$\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial A}{\partial t}+\{H,A\}=0,\quad \frac{\mathrm{d}B}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial B}{\partial t}+\{H,B\}=0 \tag{5.20}$$

其中 H 为体系的 Hamilton 量, 而

$$\{H,A\}=\sum_k\left(\frac{\partial H}{\partial p_k}\frac{\partial A}{\partial q_k}-\frac{\partial H}{\partial q_k}\frac{\partial A}{\partial p_k}\right) \tag{5.21}$$

等为 Poisson 括号. 这样利用 Poisson 括号的运算性质

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\{A,B\}&=\frac{\partial}{\partial t}\{A,B\}+\{H,\{A,B\}\}\\&=\left\{\frac{\partial A}{\partial t},B\right\}+\left\{A,\frac{\partial B}{\partial t}\right\}-\{A,\{B,H\}\}-\{B,\{H,A\}\}\\&=\left\{\frac{\partial A}{\partial t}+\{H,A\},B\right\}+\left\{A,\frac{\partial B}{\partial t}+\{H,B\}\right\}=\left\{\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t},B\right\}+\left\{A,\frac{\mathrm{d}B}{\mathrm{d}t}\right\}\end{aligned}$$

再利用式 (5.20) 即得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\{A,B\}=0$$

于是 $\{A,B\}$ 也是运动积分.

量子力学体系的守恒量要求不显含时间, 并且与体系的 Hamilton 量对易. 若 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 为守恒量, 则

$$\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}=0,[\hat{H},\hat{A}]=0,\quad \frac{\partial\hat{B}}{\partial t}=0,[\hat{H},\hat{B}]=0 \tag{5.22}$$

其中 $\hat{H}$ 为体系的 Hamilton 量. 由对易括号的运算性质,

$$\frac{\partial}{\partial t}[\hat{A},\hat{B}]=\left[\frac{\partial}{\partial t}\hat{A},\hat{B}\right]+\left[\hat{A},\frac{\partial}{\partial t}\hat{B}\right]=0$$

即 $[\hat{A},\hat{B}]$ 不显含时间, 而且

$$[\hat{H},[\hat{A},\hat{B}]]=-[\hat{A},[\hat{B},\hat{H}]]-[\hat{B},[\hat{H},\hat{A}]]=0$$

可见 $[\hat{A},\hat{B}]$ 又与体系的 Hamilton 量对易. 因此 $[\hat{A},\hat{B}]$ 为守恒量.

5.8 现有算符

$$D_x(a)=\exp\left\{-a\frac{\partial}{\partial x}\right\}=\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}a\hat{p}_x\right\}$$

其作用为使体系沿 x 方向的平移距离 a, 设 $f(x)$ 与 $D_x(a)$ 对易, 求 $f(x)$ 的一般形式.

解 题给 $f(x)$ 与 $D_x(a)$ 对易, 也就是

$$D_x(a)f(x)=f(x)D_x(a)$$

$D_x(a)=\mathrm{e}^{-a\frac{\partial}{\partial x}}=\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}a\hat{p}_x}$ 的逆为 $D_x^{-1}(a)=\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}a\hat{p}_x}=D_x(-a)$, 这样

$$\begin{aligned}f(x)&=D_x(a)f(x)D_x^{-1}(a)=\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}a\hat{p}_x}f(x)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}a\hat{p}_x}\\&=D_x(a)f(x)D_x^{-1}(a)=f\left(\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}a\hat{p}_x}x\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}a\hat{p}_x}\right)=f(x-a)\end{aligned}$$

可见 $f(x)$ 作平移 a 不变, 或者说 $f(x)$ 是周期为 a 的周期函数.

5.9 试证明周期场中的 Bloch 波函数 (见教材 3.8 节)

$$\psi(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\phi_k(x),\quad \phi_k(x+a)=\phi_k(x)$$

是 $D_x(a)$ 的本征态, 相应本征值为

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}$$

证明 将题 5.8 中定义的平移算符 $D_x(a)$ 在 $a=0$ 附近展开并作用到 $\psi(x)$ 上, 即

$$\begin{aligned}D_x(a)\psi(x)&=\exp\left\{-a\frac{\partial}{\partial x}\right\}\psi(x)\\&=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(-a)^n\frac{\partial^n}{\partial x^n}\psi(x)=\psi(x-a)\\&=\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x-a)}\phi_k(x-a)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\phi_k(x)\end{aligned}$$

即 $D_x(a)\psi(x)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}\psi(x)$.

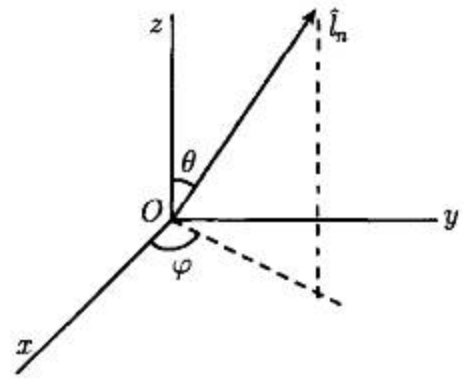

图 5.1 角动量 $\boldsymbol{l}$ 沿空间 (θ,φ) 方向的分量

5.10 设 $\psi_m^{(0)}$ 是 $\hat{l}_z$ 本征态 (本征值为 $m\hbar$), $\boldsymbol{n}$ 为空间 (θ,φ) 方向的单位矢量

$$\boldsymbol{n}=\boldsymbol{e}_x\sin\theta\cos\varphi+\boldsymbol{e}_y\sin\theta\sin\varphi+\boldsymbol{e}_z\cos\theta$$

试证明

$$\psi_m=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{l}_z\varphi/\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{l}_y\theta/\hbar}\psi_m^{(0)}$$

是角动量 $\boldsymbol{l}$ 沿 $\boldsymbol{n}$ 方向的分量

$$\hat{l}_n=\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{l}}=\hat{l}_x\sin\theta\cos\varphi+\hat{l}_y\sin\theta\sin\varphi+\hat{l}_z\cos\theta$$

的本征态.

证法一 利用公式① $\mathrm{e}^{\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{-\hat{A}}=\hat{B}+[\hat{A},\hat{B}]+\dfrac{1}{2!}[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]+\dfrac{1}{3!}[\hat{A},[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]]+\cdots$ 得

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{l}_y\theta/\hbar}\hat{l}_z\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{l}_y\theta/\hbar}&=\hat{l}_z-\frac{\mathrm{i}\theta}{\hbar}[\hat{l}_y,\hat{l}_z]+\frac{1}{2!}\left(\frac{-\mathrm{i}\theta}{\hbar}\right)^2[\hat{l}_y,[\hat{l}_y,\hat{l}_z]]+\cdots\\&=\hat{l}_z+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-\mathrm{i}\theta)^{2n}}{(2n)!}\hat{l}_z+\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\mathrm{i}\theta)^{2n+1}}{(2n+1)!}\mathrm{i}\hat{l}_x\\&=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\mathrm{i}\theta)^{2n}}{(2n)!}\hat{l}_z+\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-\mathrm{i}\theta)^{2n+1}}{(2n+1)!}\mathrm{i}\hat{l}_x=\cos\theta\hat{l}_z+\sin\theta\hat{l}_x\end{aligned}$$

这样我们得到② $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{l}_y\theta/\hbar}\hat{l}_z\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{l}_y\theta/\hbar}=\cos\theta\hat{l}_z+\sin\theta\hat{l}_x$. 做轮换 $x\to y, y\to z, z\to x$, 则得到 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{l}_z\theta/\hbar}\hat{l}_x\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{l}_z\theta/\hbar}=\cos\theta\hat{l}_x+\sin\theta\hat{l}_y$. 这样我们有

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{l}_z\varphi/\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{l}_y\theta/\hbar}\hat{l}_z\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{l}_y\theta/\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{l}_z\varphi/\hbar}=\hat{l}_x\sin\theta\cos\varphi+\hat{l}_y\sin\theta\sin\varphi+\hat{l}_z\cos\theta$$

是角动量 $\boldsymbol{l}$ 沿空间 (θ,φ) 方向的分量. 因此

$$\begin{aligned}&\left(\hat{l}_x\sin\theta\cos\varphi+\hat{l}_y\sin\theta\sin\varphi+\hat{l}_z\cos\theta\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{l}_z\varphi/\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{l}_y\theta/\hbar}\psi_m^{(0)}\\=&\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{l}_z\varphi/\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{l}_y\theta/\hbar}\hat{l}_z\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{l}_y\theta/\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{l}_z\varphi/\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{l}_z\varphi/\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{l}_y\theta/\hbar}\psi_m^{(0)}\\=&\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{l}_z\varphi/\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{l}_y\theta/\hbar}\hat{l}_z\psi_m^{(0)}=m\hbar\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{l}_z\varphi/\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{l}_y\theta/\hbar}\psi_m^{(0)}\end{aligned}$$

① 作 $f(\lambda)=\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}}$, 求 $f(\lambda)$ 的各阶导数, 将 $f(\lambda)$ 在 $\lambda=0$ 附近作 Talor 展开即得.

② 令 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{l}_y\theta/\hbar}\hat{l}_z\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{l}_y\theta/\hbar}=L(\theta)$, 然后对 θ 求两次导数, 得到一个二阶常微分方程, 解之即可得到一样的结果.

这表示 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{l}_z\varphi/\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{l}_y\theta/\hbar}\psi_m^{(0)}$ 是 $\hat{l}_x\sin\theta\cos\varphi+\hat{l}_y\sin\theta\sin\varphi+\hat{l}_z\cos\theta$ 的本征态, 本征值为 $m\hbar$.

证法二 算符 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{l}_y\theta/\hbar}$ 的作用使得作用对象 (矢量算符、态等) 绕 y 轴转 θ 角, 算符 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{l}_z\varphi/\hbar}$ 的作用则使得作用对象绕 z 轴转 φ 角. 经过绕 y 轴转 θ 角以及绕 z 轴转 φ 角两次转动, 固定于体系的坐标系 (即随体系一起转动的坐标系) 的 z' 轴 (开始时和实验室 z 轴重合) 已转到实验室坐标系的 (θ,φ) 方向, 即 $\boldsymbol{n}$ 方向. $\psi_m^{(0)}$ 原来是 l_z 的本征态, 本征值为 $m\hbar$. 在上述两次转动以后, $\hat{l}_z$ 变成 $\hat{l}_n=\hat{l}_x\sin\theta\cos\varphi+\hat{l}_y\sin\theta\sin\varphi+\hat{l}_z\cos\theta$, 而 $\psi_m^{(0)}$ 变成了 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{l}_z\varphi/\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{l}_y\theta/\hbar}\psi_m^{(0)}$, 即变成了 $\hat{l}_n$ 的本征态. 由于本征值是状态的物理属性, 不受坐标变换的影响, 故仍为 $m\hbar$.

5.11 采用 Heisenberg 图像, 对于一维谐振子, 计算

$$[x(t_1),x(t_2)]\,,\ [p(t_1),p(t_2)]\,,\ [x(t_1),p(t_2)]$$

解 简谐振子的 Hamilton 量

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

如下定义升、降算符

$$a=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha x+\frac{\mathrm{i}}{\alpha\hbar}p\right),\quad a^\dagger=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha x-\frac{\mathrm{i}}{\alpha\hbar}p\right)\tag{5.23}$$

其中 $\alpha=\sqrt{m\omega/\hbar}$. 其反解式为

$$x=\frac{1}{\sqrt{2}\alpha}\left(a+a^\dagger\right),\quad p=\frac{\alpha\hbar}{\sqrt{2}\mathrm{i}}\left(a-a^\dagger\right)\tag{5.24}$$

则 Hamilton 量写为 $H=\left(a^\dagger a+1/2\right)\hbar\omega$. 根据基本对易关系 $[x,p]=\mathrm{i}\hbar$ 以及式 (5.23) 升、降算符定义, 我们可验算下列对易关系

$$\left[a,a^\dagger\right]=1$$

进而得关于 a 的 Heisenberg 方程

$$\dot{a}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[a,H]=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[a,\left(a^\dagger a+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\right]=-\mathrm{i}\omega a$$

同样关于 $a^\dagger$ 的方程为

$$\dot{a^\dagger}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[a,H]=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[a^\dagger,\left(a^\dagger a+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\right]=\mathrm{i}\omega a^\dagger$$

由上面方程解得

$$a(t)=a(0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t},\quad a^\dagger(t)=a^\dagger(0)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\tag{5.25}$$

由式 (5.24) 得

$$x(t)=\frac{1}{\sqrt{2}\alpha}\left[a(0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}+a^\dagger(0)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\right],\quad p(t)=\frac{\alpha\hbar}{\sqrt{2}\mathrm{i}}\left[a(0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}-a^\dagger(0)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\right]\tag{5.26}$$

或者代题给升、降算符定义得

$$x(t)=x(0)\cos\omega t+\frac{1}{\alpha^2\hbar}p(0)\sin\omega t,\quad p(t)=-\alpha^2\hbar x(0)\sin\omega t+p(0)\cos\omega t\tag{5.27}$$

利用式 (5.26) 即得

$$
\begin{aligned}
[x(t_1),x(t_2)] &= \frac{1}{2\alpha^2}\left[a(0),a^\dagger(0)\right]\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega(t_2-t_1)}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t_2-t_1)}\right] \\
&= \frac{\mathrm{i}}{\alpha^2}\sin\omega(t_2-t_1) = \frac{\mathrm{i}\hbar}{m\omega}\sin\omega(t_2-t_1) \\
[p(t_1),p(t_2)] &= -\frac{\alpha^2\hbar^2}{2}\left[a(0),a^\dagger(0)\right]\left[-\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega(t_2-t_1)}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t_2-t_1)}\right] \\
&= \mathrm{i}\alpha^2\hbar^2\sin\omega(t_2-t_1) = \mathrm{i}\hbar m\omega\sin\omega(t_2-t_1) \\
[x(t_1),p(t_2)] &= \frac{\hbar}{2\mathrm{i}}\left[a(0),a^\dagger(0)\right]\left[-\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega(t_2-t_1)}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t_2-t_1)}\right] \\
&= \mathrm{i}\hbar\cos\omega(t_2-t_1)
\end{aligned}
$$

也就是

$$
\begin{aligned}
[x(t_1),x(t_2)] &= \frac{\mathrm{i}\hbar}{m\omega}\sin\omega(t_2-t_1) \\
[p(t_1),p(t_2)] &= \mathrm{i}\hbar m\omega\sin\omega(t_2-t_1) \\
[x(t_1),p(t_2)] &= \mathrm{i}\hbar\cos\omega(t_2-t_1)
\end{aligned}
$$

取 $t_1=t_2=t$, 则上式给出等时对易关系

$$
[x(t),x(t)]=0,\quad [p(t),p(t)]=0,\quad [x(t),p(t)]=\mathrm{i}\hbar
$$

此即基本对易关系.

5.12 设 Hamilton 算符表示为

$$
H=\frac{l_x^2}{2J_1}+\frac{l_y^2}{2J_2}+\frac{l_z^2}{2J_3}-(a_1x+a_2y+a_3z)
$$

(1) 写出 $\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{l}$(角动量) 的 Heisenberg 方程.

(2) 若 $J_1=J_2, a_1=a_2=0$, 列出主要的守恒量.

解 (1) 关于 $\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{l}$(角动量) 的 Heisenberg 方程为

$$
\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{r},H] \tag{5.28}
$$

$$
\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{l}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{l},H] \tag{5.29}
$$

其中 $\boldsymbol{r}=x\boldsymbol{e}_x+y\boldsymbol{e}_y+z\boldsymbol{e}_z$, 而

$$
\begin{aligned}
[x,H] &= \left[x,\frac{l_x^2}{2J_1}+\frac{l_y^2}{2J_2}+\frac{l_z^2}{2J_3}-(a_1x+a_2y+a_3z)\right]=\left[x,\frac{l_y^2}{2J_2}+\frac{l_z^2}{2J_3}\right] \\
&= \frac{1}{2J_2}\left[x,l_y^2\right]+\frac{1}{2J_3}\left[x,l_z^2\right]=\frac{1}{2J_2}\left\{l_y\left[x,l_y\right]+\left[x,l_y\right]l_y\right\}+\frac{1}{2J_3}\left\{l_z\left[x,l_z\right]+\left[x,l_z\right]l_z\right\} \\
&= \frac{\mathrm{i}\hbar}{2J_2}(l_yz+zl_y)-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2J_3}(l_zy+yl_z)
\end{aligned}
$$

通过 (x,y,z) 轮换可以写出另外 2 个式子, 这样式 (5.28) 的分量式为

$$
\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}=\frac{l_yz+zl_y}{2J_2}-\frac{l_zy+yl_z}{2J_3} \tag{5.30}
$$

$$
\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t}=\frac{l_zx+xl_z}{2J_3}-\frac{l_xz+zl_x}{2J_1} \tag{5.31}
$$

$$
\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}t}=\frac{l_xy+yl_x}{2J_1}-\frac{l_yx+xl_y}{2J_2} \tag{5.32}
$$

式 (5.29) 中, $\boldsymbol{l}=l_x\boldsymbol{e}_x+l_y\boldsymbol{e}_y+l_z\boldsymbol{e}_z$, 而

$$\begin{aligned}[l_x,H]&=\left[l_x,\frac{l_x^2}{2J_1}+\frac{l_y^2}{2J_2}+\frac{l_z^2}{2J_3}-(a_1x+a_2y+a_3z)\right]=\left[l_x,\frac{l_y^2}{2J_2}+\frac{l_z^2}{2J_3}-(a_2y+a_3z)\right]\\&=\frac{1}{2J_2}\left[l_x,l_y^2\right]+\frac{1}{2J_3}\left[l_x,l_z^2\right]-\mathrm{i}\hbar a_2z+\mathrm{i}\hbar a_3y\\&=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2J_2}\left(l_yl_z+l_zl_y\right)-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2J_3}\left(l_zl_y+l_yl_z\right)-\mathrm{i}\hbar a_2z+\mathrm{i}\hbar a_3y\\&=\mathrm{i}\hbar\left(\frac{1}{2J_2}-\frac{1}{2J_3}\right)\left(l_yl_z+l_zl_y\right)-\mathrm{i}\hbar a_2z+\mathrm{i}\hbar a_3y\end{aligned}$$

通过 (x,y,z) 轮换可以写出另外 2 个式子, 这样式 (5.29) 的分量式为

$$\frac{\mathrm{d}l_x}{\mathrm{d}t}=\left(\frac{1}{2J_2}-\frac{1}{2J_3}\right)\left(l_yl_z+l_zl_y\right)-a_2z+a_3y \tag{5.33}$$

$$\frac{\mathrm{d}l_y}{\mathrm{d}t}=\left(\frac{1}{2J_3}-\frac{1}{2J_1}\right)\left(l_zl_x+l_xl_z\right)-a_3x+a_1z \tag{5.34}$$

$$\frac{\mathrm{d}l_z}{\mathrm{d}t}=\left(\frac{1}{2J_1}-\frac{1}{2J_2}\right)\left(l_xl_y+l_yl_x\right)-a_1y+a_2x \tag{5.35}$$

(2) 若 $J_1=J_2,a_1=a_2=0$, 由式 (5.35) 知, l_z 为守恒量. 体系的守恒量有 H, l_z.

5.13 设某一体系的 Hamilton 量为 $H=\dfrac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2+\omega L_z$, 其中 m 为质量, ω 为频率.

(1) 请问 H, p_x, p_y, p_z, $\boldsymbol{p}^2$, L_x, L_y, L_z 与 $\boldsymbol{L}^2$ 这些力学量中哪些是守恒量?

(2) 试给出关于 $\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{p}$ 的 Heisenberg 方程, 并求它们随时间变化的规律.

解 (1) H, p_x, p_y, p_z, $\boldsymbol{p}^2$, L_x, L_y, L_z 及 $\boldsymbol{L}^2$ 诸力学量皆与时间无关, 我们可以演算其中 H, p_z, $\boldsymbol{p}^2$, L_z 及 $\boldsymbol{L}^2$ 与 H 的对易关系式皆为零, 即

$$[H,H]=[H,p_z]=\left[H,\boldsymbol{p}^2\right]=[H,L_z]=\left[H,\boldsymbol{L}^2\right]=0.$$

这样 H, p_z, $\boldsymbol{p}^2$, L_z 与 $\boldsymbol{L}^2$ 皆为守恒量. 而 p_x, p_y, L_x 和 L_y 与 H 对易关系如下给出:

$$[p_x,H]=\left[p_x,\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2+\omega L_z\right]=\omega\left[p_x,L_z\right]=-\mathrm{i}\omega\hbar p_y$$

$$[p_y,H]=\left[p_y,\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2+\omega L_z\right]=\omega\left[p_y,L_z\right]=\mathrm{i}\omega\hbar p_x$$

$$[L_x,H]=\left[L_x,\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2+\omega L_z\right]=\omega\left[L_x,L_z\right]=-\mathrm{i}\omega\hbar L_y$$

$$[L_y,H]=\left[L_y,\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2+\omega L_z\right]=\omega\left[L_y,L_z\right]=\mathrm{i}\omega\hbar L_x$$

均不为零. 因此 p_x, p_y, L_x 和 L_y 都不是守恒量.

(2) 对于力学量 A 的 Heisenberg 方程为 $\dfrac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}=\dfrac{\partial A}{\partial t}+\dfrac{1}{\mathrm{i}\hbar}[A,H]$, 结合上面第 (1) 小题中的结果得

$$\frac{\mathrm{d}p_z}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}L_z}{\mathrm{d}t}=0,\quad\frac{\mathrm{d}p_x}{\mathrm{d}t}=-\omega p_y,\quad\frac{\mathrm{d}p_y}{\mathrm{d}t}=\omega p_x,$$

$$\frac{\mathrm{d}L_x}{\mathrm{d}t}=-\omega L_y,\quad\frac{\mathrm{d}L_y}{\mathrm{d}t}=\omega L_x$$

从上式可看出 $\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{p}$ 均以角速度 ω 绕 z 轴转动, 可以写出其各分量随时间的变化关系为 $p_z(t)=p_z(0)$, $L_z(t)=L_z(0)$(z 轴分量不变), 以及

$$p_x(t)=p_x(0)\cos\omega t-p_y(0)\sin\omega t,\quad p_y(t)=p_y(0)\cos\omega t+p_x(0)\sin\omega t$$
$$L_x(t)=L_x(0)\cos\omega t-L_y(0)\sin\omega t,\quad L_y(t)=L_y(0)\cos\omega t+L_x(0)\sin\omega t$$

其中 "0" 表示 $t=0$ 时刻的量.

5.14 (1) 设 $U(t)$ 为幺正算符, 对 t 可微, 证明 $\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t}$ 可以表示成

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t}=HU$$

其中 H 为厄米算符.

(2) 设 $\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t}=HU$ 成立, H 为厄米算符, 证明 $UU^\dagger$ 满足方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}UU^\dagger=\left[H,UU^\dagger\right]$$

进而再证明, 如 $t=t_0$ 时 $U(t_0)$ 为幺正算符, 则 $U(t)$ 总是幺正算符.

证明 (1) $U(t)$ 为幺正算符, 满足 $UU^\dagger=U^\dagger U=1$. 两边对 $UU^\dagger=1$ 求时间导数, 得 $\dfrac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t}U^\dagger+U\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U^\dagger=0$, 或者 $\dfrac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t}U^\dagger=-U\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U^\dagger$. 由此即得 $\left[\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t}U^\dagger\right]^\dagger=\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t}U^\dagger$, 意味着 $\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t}U^\dagger$ 为一厄米算符, 令其等于 H, 即

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t}U^\dagger=H$$

上式两边右乘 U 即得

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t}=HU \tag{5.36}$$

(2) 式 (5.36) 中 H 为厄米算符, 该式的厄米共轭式为

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}U^\dagger}{\mathrm{d}t}=U^\dagger H^\dagger=U^\dagger H \tag{5.37}$$

这样

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}UU^\dagger=\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t}U^\dagger+\mathrm{i}\hbar U\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U^\dagger=HUU^\dagger-UU^\dagger H=\left[H,UU^\dagger\right]$$

也就是

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}UU^\dagger=\left[H,UU^\dagger\right] \tag{5.38}$$

由此关于 $UU^\dagger$ 的一阶微分方程式及其厄米共轭可得如 $t=t_0$ 时 $U(t_0)$ 为幺正算符, 则任意 t 时刻 $U(t)$ 总是幺正算符. 论证如下.

将 t_0 到 t 的时间均分为 N 段, 每段间隔为 Δt, 满足 $N\Delta t=t-t_0$(若 $t\geqslant t_0$), 则 $\Delta t\geqslant 0$ (否则 $\Delta t<0$). 取 N 足够大, 使得 Δt 可以任意小. 这样 t_0 到 t 的时间均分为 t_0, $t_0+\Delta t$, $t_0+2\Delta t$, $\cdots$, $t-\Delta t$, t. $t=t_0$ 时 $U(t_0)$ 为幺正算符, 满足 $UU^\dagger\big|_{t=t_0}=U^\dagger U\big|_{t=t_0}=1$, 由式 (5.38) 得, $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}UU^\dagger\Big|_{t=t_0}=0$. 因而 $t_0+\Delta t$ 时刻 $UU^\dagger\big|_{t=t_0+\Delta t}=1$, 进而 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}UU^\dagger\Big|_{t=t_0+\Delta t}=0$. 如此可一直递推下去, 可知 t 时刻 $U(t)U^\dagger(t)=1$. 从式 (5.38) 的厄米共轭式出发, 同理可证 t 时刻 $U^\dagger(t)U(t)=1$. 因此 $U(t)$ 是幺正算符.

说明 1　利用时间演化算符 $\mathrm{T}\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t}H(t')\mathrm{d}t'\right\}$(记为 $u(t)$, 也是幺正算符. T 表示编时乘积), 式 (5.38) 的解可表示为

$$UU^{\dagger}(t)=u(t)UU^{\dagger}(t_0)u^{\dagger}(t)$$

因此若 $UU^{\dagger}(t_0)=1$, 则 $UU^{\dagger}(t)=u(t)UU^{\dagger}(t_0)u^{\dagger}(t)=u(t)u^{\dagger}(t)=1$. 同理可证 $U^{\dagger}(t)U(t)=1$.

说明 2　若不用式 (5.38), 则 U 的幺正性可如下证明. 利用

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U^{-1}=-U^{-1}\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t}U^{-1}$$

可得

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U^{-1}=\mathrm{i}\hbar U^{-1}\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t}U^{-1}=U^{-1}HUU^{-1}=U^{-1}H$$

上式与式 (5.37) 比较, 可见 U^{-1} 与 $U^{\dagger}$ 满足同样的一阶微分方程. 再按题设 $t=t_0$ 时 $U(t_0)$ 为幺正算符, 即 $U^{-1}(t_0)=U^{\dagger}(t_0)$, 可见 U^{-1} 与 $U^{\dagger}$ 在 $t=t_0$ 时相等. 综上可知 $U^{-1}(t)=U^{\dagger}(t)$, 即 $U(t)$ 是幺正算符.

这种证明需要用到 $U(t)$ 存在逆, 这里给予补充说明. 不妨设 $t>t_0$. 按题设 $U(t_0)$ 是幺正算符, $|\det U(t_0)|=1$, 因 U 满足微分方程 (5.36), U 从而 $\det U$ 是时间的连续函数, 故必存在 $\tau_1>0$, 使得 t_0 到 $t_0+\tau_1$ 之间, $\det U\neq 0$, 即在 t_0 到 $t_0+\tau_1$ 的范围内 U 存在逆, 从而按前所证, 在此范围内 U 均是幺正算符. 再利用 $U(t_0+\tau_1)$ 是幺正算符以及 U 的连续性, 可知必存在 $\tau_2>\tau_1$, 使得 t_0 到 $t_0+\tau_2$ 的范围内 U 均是幺正算符. 如此递推, 逐渐逼近并到达 t, 使得在 t_0 到 t 之间 U 均是幺正算符.

5.15　验证积分方程

$$\hat{B}\,(t)=\hat{B}_0+\mathrm{i}\left[\hat{A},\int_0^t\hat{B}(\tau)\mathrm{d}\tau\right]\tag{5.39}$$

有下列解:

$$\hat{B}\,(t)=\exp(\mathrm{i}\hat{A}t)\hat{B}_0\exp(-\mathrm{i}\hat{A}t)\tag{5.40}$$

其中 $\hat{A}$ 与时间无关.

证法一　不妨先记

$$\hat{B}_1\,(t)=\exp(\mathrm{i}\hat{A}t)\hat{B}_0\exp(-\mathrm{i}\hat{A}t)\tag{5.41}$$

积分方程两边对时间 t 求导数得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{B}\,(t)=\mathrm{i}\left[\hat{A},\hat{B}(t)\right]\tag{5.42}$$

另一方面, 对式 (5.41) 两边对时间 t 求导数

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{B}_1\,(t)=\mathrm{i}\hat{A}\exp(\mathrm{i}\hat{A}t)\hat{B}_0\exp(-\mathrm{i}\hat{A}t)-\mathrm{i}\exp(\mathrm{i}\hat{A}t)\hat{B}_0\exp(-\mathrm{i}\hat{A}t)\hat{A}=\mathrm{i}\left[\hat{A},\hat{B}_1(t)\right]\tag{5.43}$$

可见式 (5.39, 5.41) 所定义的 $\hat{B}\,(t)$、$\hat{B}_1\,(t)$ 满足同样的一阶微分方程.

$t=0$ 时, 式 (5.39) 给出

$$\hat{B}\,(t)\Big|_{t=0}=\hat{B}\,(0)$$

式 (5.41) 给出

$$\hat{B}_1\,(t)\Big|_{t=0}=\hat{B}\,(0)$$

可见 $t=0$ 时刻 $\hat{B}(t)$、$\hat{B}_1(t)$ 的初始值也相等. 因此 $\hat{B}(t)=\hat{B}_1(t)$. 或者说式 (5.40) 是积分方程 (5.39) 的解.

证法二 对式 (5.40) 两边对时间 t 求导数

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{B}(t)=\mathrm{i}\hat{A}\exp(\mathrm{i}\hat{A}t)\hat{B}_0\exp(-\mathrm{i}\hat{A}t)-\mathrm{i}\exp(\mathrm{i}\hat{A}t)\hat{B}_0\exp(-\mathrm{i}\hat{A}t)\hat{A}=\mathrm{i}\left[\hat{A},\hat{B}(t)\right]$$

也就是

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{B}(t)=\mathrm{i}\left[\hat{A},\hat{B}(t)\right] \tag{5.44}$$

上式两边对时间 t 积分即得式 (5.39).

说明 根据上面结论

$$\hat{B}(t)=\hat{B}_0+\mathrm{i}\left[\hat{A},\int_0^t\hat{B}(\tau)\mathrm{d}\tau\right]=\exp(\mathrm{i}\hat{A}t)\hat{B}_0\exp(-\mathrm{i}\hat{A}t)$$

令上式中 $\mathrm{i}\hat{A}\to\hat{B},\hat{B}\to\hat{A},t\to\beta,\tau\to\lambda$ 可得

$$\left[\hat{A},\mathrm{e}^{-\beta\hat{B}}\right]=-\mathrm{e}^{-\beta\hat{B}}\int_0^\beta\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\left[\hat{A},\hat{B}\right]\mathrm{e}^{-\lambda\hat{B}}\mathrm{d}\lambda \tag{5.45}$$

此式在文献里称为 Kubo 恒等式.

5.16 证明在 Galileo 变换下, Schrödinger 方程具有不变性, 即设惯性坐标系 K' 以速度 v 相对于惯性系 K(沿正 x 轴方向) 运动 (见图 5.2), 空间任何一点在两个坐标系中的坐标满足

$$\begin{cases}x=x'+vt', & y=y', \quad z=z'\\ t'=t\end{cases}$$

势能在 K'、K 两坐标系中的表示式有下列关系:

$$V'(x',t')=V'(x-vt,t)=V(x,t)$$

证明在 K' 中 Schrödinger 方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t'}\psi'=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x'^2}+V'\right)\psi'$$

则在 K 中

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

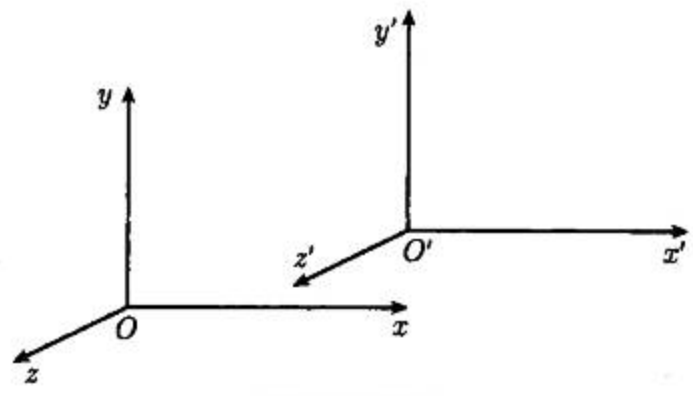

图 5.2 惯性系 K 与 K'

其中

$$\psi(x,t)=\exp\left[\mathrm{i}\left(\frac{mv}{\hbar}x-\frac{mv^2}{2\hbar}t\right)\right]\psi'(x-vt,t)$$

证明 K' 参照系中 Schrödinger 方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t'}\psi'(x',t')=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x'^2}+V'(x',t')\right]\psi'(x',t')$$

根据 Galileo 变换

$$x'=x-vt,\quad t'=t,\quad \frac{\partial}{\partial x'}=\frac{\partial}{\partial x},\quad \frac{\partial}{\partial t'}=\frac{\partial}{\partial t}+v\frac{\partial}{\partial x}$$

这样

$$\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t}+v\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi'(x-vt,t)=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V'(x-vt,t)\right]\psi'(x-vt,t)$$

也就是

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi'(x-vt,t)=\left[\frac{1}{2m}\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}+mv\right)^2-\frac{1}{2}mv^2+V'(x-vt,t)\right]\psi'(x-vt,t)$$

在上式两边左乘 $U_1=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{mv}{\hbar}x+\mathrm{i}\frac{mv^2}{2\hbar}t}$ 得

$$\begin{aligned}&\mathrm{i}\hbar\left[\frac{\partial}{\partial t}U_1\psi'(x-vt,t)-\left(\frac{\partial U_1}{\partial t}U_1^\dagger\right)U_1\psi'(x-vt,t)\right]\\&=U_1\left[\frac{1}{2m}\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}+mv\right)^2-\frac{1}{2}mv^2+V'(x-vt,t)\right]U_1^\dagger U_1\psi'(x-vt,t)\end{aligned}$$

由于 $U_1pU_1^\dagger=p-mv,\quad \mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial U_1}{\partial t}U_1^\dagger=\dfrac{1}{2}mv^2$, 由上式得

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}U_1\psi'(x-vt,t)=\left[\frac{1}{2m}\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2+V'(x-vt,t)\right]U_1\psi'(x-vt,t)$$

令 K 系波函数与势能函数分别为

$$\psi(x,t)=U_1\psi'(x-vt,t)=U_1\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{vt}{\hbar}p}\psi'(x,t),\quad V(x,t)=V'(x-vt,t)$$

则有

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

5.17 设包含 Hamilton 量 H 在内的一组对易的力学量完全集的共同本征态和本征值分别为 $|n\rangle$ 和 E_n, 其中 n 表示一组完备好量子数. 证明, 力学量 (算符, 不显含时间)F 随时间的变化, 在此能量表象中表示为

$$\left(\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t}\right)_{nn'}=\mathrm{i}\omega_{nn'}F_{nn'}$$

其中 $\omega_{nn'}=\left(E_n-E_{n'}\right)/\hbar$.

证明 (Heisenberg picture) 态不随时间变化, 不显含时间力学量 F 随时间的变化满足如下 Heisenberg 方程:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t}=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial F}{\partial t}+[F,H]=[F,H]$$

上式两边对题给的基矢 $\{|n\rangle\}$ 求矩阵元,

$$\mathrm{i}\hbar\left\langle n\left|\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t}\right|n'\right\rangle=\langle n|[F,H]|n'\rangle=\left(E_{n'}-E_n\right)\langle n|F|n'\rangle$$

即有

$$\left(\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t}\right)_{nn'}=\mathrm{i}\omega_{nn'}F_{nn'},\quad \omega_{nn'}=\left(E_n-E_{n'}\right)/\hbar$$

说明 本题还可在 Schrödinger 图像中证明, 请读者自行考虑完成.

5.18 设 $H=\dfrac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}+V(\boldsymbol{r})$, 试用纯矩阵的运算, 证明下列求和规则:

$$\sum_n (E_n-E_m)|x_{nm}|^2=\frac{\hbar^2}{2\mu} \tag{5.46}$$

其中 x 是 $\boldsymbol{r}$ 的一个 Cartesian 分量, $\sum\limits_n$ 是对一切束缚定态求和, E_n 是相应于 n 态的能量.

提示 计算 $[[H,x],x]$, 求 $\langle m|[[H,x],x]|m\rangle$.

证明 先演算 $[[H,x],x]$.

$$[H,x]=\left[\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}+V(\boldsymbol{r}),x\right]=\left[\frac{1}{2\mu}\boldsymbol{p}^2,x\right]=\frac{1}{2\mu}\{p_x[p_x,x]+[p_x,x]p_x\}=\frac{-\mathrm{i}\hbar}{\mu}p_x \tag{5.47}$$

$$[[H,x],x]=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu}[p_x,x]=-\frac{\hbar^2}{\mu} \tag{5.48}$$

现在求 $[[H,x],x]$ 在设 Hamiton 量 H 的束缚定态 $|m\rangle$ 下的期望值, 不妨假设各束缚定态 $|k\rangle$ 均已归一化 $\langle k|k\rangle=1$, 并设全部束缚定态完备性关系 (系统只有束缚态) 成立, 因而有 $\sum\limits_k|k\rangle\langle k|=1$. 这样

$$\begin{aligned}
&\langle m|[[H,x],x]|m\rangle=\langle m|[H,x]x|m\rangle-\langle m|x[H,x]|m\rangle\\
=&\sum_k\{\langle m|[H,x]|k\rangle\langle k|x|m\rangle-\langle m|x|k\rangle\langle k|[H,x]|m\rangle\}\\
=&\sum_k\{(E_m-E_k)\langle m|x|k\rangle\langle k|x|m\rangle-(E_k-E_m)\langle m|x|k\rangle\langle k|x|m\rangle\}\\
=&2\sum_k(E_m-E_k)\langle m|x|k\rangle\langle k|x|m\rangle=2\sum_k(E_m-E_k)|x_{km}|^2
\end{aligned} \tag{5.49}$$

式中利用了 H 的本征方程 $H|n\rangle=E_n|n\rangle$ 以及其 Hermite 共轭式 $\langle n|H=E_n\langle n|$. 由式 (5.48)、式 (5.49) 即得式 (5.46), 得证.

证法二 (直接验算) $|m\rangle$ 与 $|n\rangle$ 均为 Hamilton 量的本征态, 即

$$H|m\rangle=E_m|m\rangle,\quad H|n\rangle=E_n|n\rangle$$

这样

$$\begin{aligned}
\sum_n(E_n-E_m)|x_{nm}|^2=&\sum_n\{E_n\langle m|x|n\rangle\langle n|x|m\rangle-E_m\langle m|x|n\rangle\langle n|x|m\rangle\}\\
=&\sum_n\{\langle m|xE_n|n\rangle\langle n|x|m\rangle-\langle m|E_mx|n\rangle\langle n|x|m\rangle\}\\
=&\sum_n\{\langle m|xH|n\rangle\langle n|x|m\rangle-\langle m|Hx|n\rangle\langle n|x|m\rangle\}\\
=&\{\langle m|xHx|m\rangle-\langle m|Hx^2|m\rangle\}
\end{aligned}$$

上面用到了完备性关系 $\sum\limits_n|n\rangle\langle n|=1$. 再将 x, H 的对易式 (5.47) 代入得

$$\begin{aligned}
\sum_n(E_n-E_m)|x_{nm}|^2=&\langle m|[x,H]x|m\rangle=\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu}\langle m|px|m\rangle\\
=&\frac{\mathrm{i}\hbar}{2\mu}\langle m|[p,x]|m\rangle+\frac{\mathrm{i}\hbar}{2\mu}\langle m|px+xp|m\rangle=\frac{\hbar^2}{2\mu}\langle m|m\rangle+\frac{\mathrm{i}\hbar}{2\mu}\langle m|px+xp|m\rangle
\end{aligned}$$

也就有

$$\sum_n (E_n - E_m)|x_{nm}|^2 = \frac{\hbar^2}{2\mu} + \frac{\mathrm{i}\hbar}{2\mu}\langle m|\, px + xp\,|m\rangle \tag{5.50}$$

由于 $(px + xp)$ 为一个 Hermite 算符, 它在 $|m\rangle$ 下的期望值一定是实数, 对上式两边取复数共轭得

$$\sum_n (E_n - E_m)|x_{nm}|^2 = \frac{\hbar^2}{2\mu} - \frac{\mathrm{i}\hbar}{2\mu}\langle m|\, px + xp\,|m\rangle \tag{5.50'}$$

式 (5.50) 与式 (5.50′) 相加即得式 (5.46), 得证.

说明 下面几道题, 也都可类似的用上面这 2 种办法证明. 为行文简单, 我们只列出一种证法.

5.19 设 $F(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$ 为体系的一个可观测量 (Hermite 算符), H 为体系的 Hamilton 量, 证明在能量表象中的求和规则

$$\sum_n (E_n - E_k)|F_{nk}|^2 = \frac{1}{2}\langle k|[F,[H,F]]|k\rangle$$

证明 已知 F 为 Hermite 算符, 则

$$\begin{aligned}
\langle k|[F,[H,F]]|k\rangle &= \langle k|F[H,F] - [H,F]F|k\rangle \\
&= \sum_n \{\langle k|F|n\rangle\langle n|[H,F]|k\rangle - \langle k|[H,F]|n\rangle\langle n|F|k\rangle\} \\
&= \sum_n \{(E_n - E_k)\langle k|F|n\rangle\langle n|F|k\rangle - (E_k - E_n)\langle k|F|n\rangle\langle n|F|k\rangle\} \\
&= 2\sum (E_n - E_k)\langle n|F^\dagger|k\rangle^*\langle n|F|k\rangle = 2\sum (E_n - E_k)\langle n|F|k\rangle^*\langle n|F|k\rangle \\
&= 2\sum_n (E_n - E_k)|F_{nk}|^2
\end{aligned}$$

即有 $\sum_n (E_n - E_k)|F_{nk}|^2 = \frac{1}{2}\langle k|[F,[H,F]]|k\rangle$.

5.20 对任意算符 $F(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$ 及其厄米共轭 $F(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})^\dagger$, 证明在能量表象中的求和规则

$$\sum_n (E_n - E_k)\left(|F_{nk}|^2 + |F_{kn}|^2\right) = \langle k|\left[F^\dagger,[H,F]\right]|k\rangle$$

证明 与题 5.19 同样, 从右边开始证

$$\begin{aligned}
\langle k|\left[F^\dagger,[H,F]\right]|k\rangle &= \langle k|F^\dagger[H,F] - [H,F]F^\dagger|k\rangle \\
&= \sum_n \left\{\langle k|F^\dagger|n\rangle\langle n|[H,F]|k\rangle - \langle k|[H,F]|n\rangle\langle n|F^\dagger|k\rangle\right\} \\
&= \sum_n \left\{(E_n - E_k)\langle k|F^\dagger|n\rangle\langle n|F|k\rangle - (E_k - E_n)\langle k|F|n\rangle\langle n|F^\dagger|k\rangle\right\} \\
&= \sum_n (E_n - E_k)\left\{\langle n|F|k\rangle^*\langle n|F|k\rangle + \langle k|F|n\rangle\langle k|F|n\rangle^*\right\} \\
&= \sum_n (E_n - E_k)\left(|F_{nk}|^2 + |F_{kn}|^2\right)
\end{aligned}$$

即有 $\sum_n (E_n - E_k)\left(|F_{nk}|^2 + |F_{kn}|^2\right) = \langle k|\left[F^\dagger,[H,F]\right]|k\rangle$.

说明 如 F 不是 Hermite 算符, 即 $F \neq F^\dagger$, 则 $F_{nk} = (F^\dagger)_{kn}$ 与 F_{kn} 并无简单关系. 例如角动量态 $|lm\rangle$ 下的升算符矩阵元 $\langle m+1|l_+|lm\rangle = \sqrt{l(l+1)-m(m+1)}$, 但 $\langle m|l_+|lm+1\rangle = 0$. 若 F 是 Hermite 算符, 则 $F_{nk} = F_{kn}^*$, 这时 $|F_{nk}| = |F_{kn}|$, 题 5.19 是本题特殊情况.

5.21 对于一维运动粒子, 设 $H = \dfrac{p^2}{2\mu} + V(x)$, 设 $F(x)$ 为 x 的可微函数, 证明

$$\sum_n (E_n - E_k)|F_{nk}|^2 = \frac{\hbar^2}{2\mu}\langle k|\,|F'|^2\,|k\rangle \tag{5.51}$$

其中 $F_{nk} = \langle n|F|k\rangle$, 而 $|n\rangle$, $|k\rangle$ 为任意的束缚定态. 考虑特例, 令 $F(x) = x$ 则

$$\sum_n (E_n - E_k)|x_{nk}|^2 = \frac{\hbar^2}{2\mu}$$

推广到三维运动粒子, $H = \dfrac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu} + V(\boldsymbol{r})$, 设 $F(\boldsymbol{r})$ 为 $\boldsymbol{r}$ 的可微函数, 则

$$\sum_n (E_n - E_k)\left(|F_{nk}|^2 + |F_{kn}|^2\right) = \frac{\hbar^2}{\mu}\langle k|\,|\nabla F|^2\,|k\rangle \tag{5.52}$$

证明 对于 x 的可微函数 $F(x)$, 有下式成立①

$$[p, F(x)] = -\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}x} \tag{5.53}$$

这样

$$\begin{aligned}[H, F(x)] &= \left[\frac{p^2}{2\mu} + V(x), F(x)\right] = \frac{1}{2\mu}\left[p^2, F(x)\right] \\ &= \frac{1}{2\mu}\left\{p\left[p, F(x)\right] + \left[p, F(x)\right]p\right\} = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2\mu}\left(pF' + F'p\right)\end{aligned} \tag{5.54}$$

进而

$$\left[F^\dagger, [H, F]\right] = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2\mu}\left\{[F^\dagger, p]F' + F'[F^\dagger, p]\right\} = \frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\mathrm{d}F^\dagger}{\mathrm{d}x}F' + F'\frac{\mathrm{d}F^\dagger}{\mathrm{d}x}\right) = \frac{\hbar^2}{\mu}|F'|^2 \tag{5.55}$$

利用题 5.20 结果, 即得

$$\sum_n (E_n - E_k)\left(|F_{nk}|^2 + |F_{kn}|^2\right) = \frac{\hbar^2}{\mu}\langle k|\,|F'|^2\,|k\rangle \tag{5.56}$$

由于一维束缚定态波函数可以取为实函数, 所以

$$F_{kn} = \int \psi_k(x)F(x)\psi_n(x)\mathrm{d}x = \int \psi_n F\psi_k \mathrm{d}x = F_{nk}$$

代入式 (5.56), 即得式 (5.51).

---

① 若 F 是整函数, 则可对 F 的幂级数利用 x, p 的基本对易关系证明. 否则在坐标表象, $p = -\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$. 因而对任意可微函数 ψ, 都有

$$[p, F(x)]\psi = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}F\psi + F\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi = \left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}x}\right)\psi$$

因而 $[p, F(x)] = -\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}x}$.

如取 $F=x$, 则 $F'=1$, 式 (5.51) 成为

$$\sum_n (E_n-E_m)|x_{nm}|^2=\frac{\hbar^2}{2\mu} \tag{5.57}$$

这是题 5.18 已经证明的结论.

对于三维运动粒子, Hamilton 量 $H=\dfrac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}+V(\boldsymbol{r})$, 设 $F(\boldsymbol{r})$ 为 $\boldsymbol{r}$ 的可微函数, 则有下式成立

$$[\boldsymbol{p},F(\boldsymbol{r})]=-\mathrm{i}\hbar\nabla F$$

这样

$$\begin{aligned}[H,F(\boldsymbol{r})]&=\left[\frac{p^2}{2\mu}+V(\boldsymbol{r}),F(x)\right]=\frac{1}{2\mu}[\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p},F(x)]\\&=\frac{1}{2\mu}\{\boldsymbol{p}\cdot[\boldsymbol{p},F(x)]+[\boldsymbol{p},F(x)]\cdot\boldsymbol{p}\}=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2\mu}(\boldsymbol{p}\cdot\nabla F+\nabla F\cdot\boldsymbol{p})\end{aligned} \tag{5.58}$$

进而

$$\begin{aligned}\left[F^\dagger(\boldsymbol{r}),[H,F(\boldsymbol{r})]\right]&=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2\mu}\left[F^\dagger(\boldsymbol{r}),\boldsymbol{p}\cdot\nabla F+\nabla F\cdot\boldsymbol{p}\right]\\&=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2\mu}\left\{\left[F^\dagger(\boldsymbol{r}),\boldsymbol{p}\right]\cdot\nabla F+\nabla F\cdot\left[F^\dagger(\boldsymbol{r}),\boldsymbol{p}\right]\right\}\\&=\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\nabla F^\dagger\cdot\nabla F+\nabla F\cdot\nabla F^\dagger\right)=\frac{\hbar^2}{\mu}\nabla F^\dagger\cdot\nabla F\end{aligned} \tag{5.59}$$

代入式 (5.56), 即得式 (5.52).

说明 注意如 F 不是 Hermite 算符, 即 $F\neq F^\dagger$, 则 $F_{nk}=(F^\dagger)_{kn}$ 与 F_{kn} 并无简单关系, 参见题 5.20 题末的说明. 若 F 是 Hermite 算符, 则 $F_{nk}=F_{kn}^*$, 这时 $|F_{nk}|=|F_{kn}|$, 则式 (5.52) 可表示为

$$\sum_n (E_n-E_k)|F_{nk}|^2=\frac{\hbar^2}{2\mu}\langle k|\,|\nabla F|^2\,|k\rangle,\quad (F=F^\dagger) \tag{5.60}$$

5.22 一维运动粒子, $H=\dfrac{p^2}{2\mu}+V(x)$, 设 λ 为实参数, 证明在能量表象中

$$\sum_n (E_n-E_k)\,|\langle n|\exp(\mathrm{i}\lambda x)|k\rangle|^2=\frac{\hbar^2\lambda^2}{2\mu} \tag{5.61}$$

证明 在题 5.21 式 (5.51) 中取

$$F(x)=\exp(\mathrm{i}\lambda x) \tag{5.62}$$

则

$$F'=\mathrm{i}\lambda\exp(\mathrm{i}\lambda x),\quad |F'|^2=\lambda^2 \tag{5.63}$$

代入式 (5.51) 即得式 (5.61).

5.23 设 $F(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$ 任意算符, $F(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})^\dagger$ 为其 Hermite 共轭, 证明在能量表象中的求和规则

$$\sum_n (E_n-E_k)^2\left(|F_{nk}|^2+|F_{kn}|^2\right)=\langle k|\,[H,F]\,[H,F]^\dagger\,|k\rangle \tag{5.64}$$

其中已设能量表象基矢均已归一化. 如 $F(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$ 为 Hermite 算符, 则

$$\sum_n (E_n-E_k)^2\,|F_{nk}|^2=-\langle k|\,[H,F]^2\,|k\rangle \tag{5.65}$$

证法一 (Heisenberg 表象) Heisenberg 运动方程

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[F,H]=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[H,F] \tag{5.66}$$

题 5.17 给出

$$\left(\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t}\right)_{kn}=\mathrm{i}\omega_{kn}F_{kn}=\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E_k-E_n)F_{kn} \tag{5.67}$$

由此式并利用式 (5.66) 得

$$(E_k-E_n)^2\left|F_{kn}\right|^2=\left|\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t}\right)_{kn}\right|^2=\left|\langle k|[H,F]|n\rangle\right|^2=\langle k|[H,F]|n\rangle\langle n|[H,F]^\dagger|k\rangle \tag{5.68}$$

按题意, 能量表象基矢均已归一化, 则其完备性关系可表示为

$$\sum_n|n\rangle\langle n|=1 \tag{5.69}$$

现对式 (5.68) 求和, 并利用上式即得式 (5.64).

如 F 为 Hermite 算符, 则

$$[H,F]^\dagger=[F,H]=[H,F] \tag{5.70}$$

则式 (5.64) 又可以写成式 (5.65).

证法二 (直接演算) 利用完备性关系 (5.69)

$$\begin{aligned}\langle k|[H,F][H,F]^\dagger|k\rangle&=\sum_n\langle k|[H,F]|n\rangle\langle n|[H,F]^\dagger|k\rangle\\&=\sum(E_k-E_n)\langle k|F|n\rangle(E_k-E_n)\langle n|F^\dagger|k\rangle\\&=-\sum_n(E_k-E_n)^2\left|\langle k|F|n\rangle\right|^2=-\sum_n(E_k-E_n)^2\left|\langle n|F^\dagger|k\rangle\right|^2\end{aligned}$$

上式即给出式 (5.64). 同样当 F 为 Hermite 算符, 则式 (5.64) 又可以写成式 (5.65).

5.24 对于一维粒子, $H=\dfrac{p^2}{2\mu}+V(x)$, 证明求和规则

$$\sum_n(E_n-E_k)^2|x_{nk}|^2=-2\hbar^2\frac{\partial E_k}{\partial\mu} \tag{5.71}$$

证明 在题 5.23 中, 取 $F=x$, 则

$$[H,x]=\frac{1}{2\mu}[p^2,x]=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu}p \tag{5.72}$$

$$-[H,x]^2=\frac{\hbar^2}{\mu^2}p^2 \tag{5.73}$$

这样式 (5.65) 给出

$$\sum_n(E_k-E_n)^2|x_{kn}|^2=\frac{\hbar^2}{\mu^2}\langle p^2\rangle_k \tag{5.74}$$

将 H 中粒子质量 μ 视为参量 ($H=H(\mu)$), Hellmann-Feynman 定理 (H-F 定理)[①] 给出

$$\frac{\partial E_k}{\partial\mu}=\left\langle\frac{\partial H}{\partial\mu}\right\rangle_k=-\frac{1}{2\mu^2}\langle p^2\rangle_k \tag{5.75}$$

① 曾谨言, 量子力学 (第四版卷 I)[M], 北京: 科学出版社, 2007, p.218~225.

把上式代入式 (5.74) 即给出式 (5.71).

说明 本题还可利用 Virial 定理证明, 请读者自行考虑.

5.25 对于中心力场中粒子的 s 态 ($l=0$) 和 p 态 ($l=1$), 证明

$$\sum_n (E_{n's}-E_{np})^2 |z_{n's,np}|^2 = \frac{\hbar^2}{2\mu}\left\langle \frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}\right\rangle_{n's} \tag{5.76}$$

如中心力场 $V(r)\propto r^\nu$, 利用位力 (Virial) 定理, 进一步证明

$$\sum_n (E_{n's}-E_{np})^2 |z_{n's,np}|^2 = \frac{2\nu}{3(2+\nu)}\frac{\hbar^2}{\mu}E_{n's} \tag{5.77}$$

证明 $\psi_{n's}$ 即 $\psi_{n'lm}=\psi_{n'00}$, 能使 $z_{n's,nlm}\neq 0$ 即

$$\int \psi^*_{n'00} z \psi_{nlm} \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \int R_{n'0} r^3 R_{nl}\mathrm{d}r \int \cos\theta \mathrm{Y}_{lm}\mathrm{d}\Omega \neq 0$$

的 (nlm) 必须是 $(n10)$. 这样式 (5.76) 左端

$$\sum_n (E_{n's}-E_{np})^2 |z_{n's,np}|^2 = \sum_{nlm} (E_{n's}-E_{np})^2 \left|z_{n's,nlm}\right|^2 \tag{5.78}$$

根据

$$H=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}+V(r)$$

可知

$$[H,z]=\frac{1}{2\mu}\left[\boldsymbol{p}^2,z\right]=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu}p_z \tag{5.79}$$

$$[H,z]^2=\left(-\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu}p_z\right)^2=-\frac{\hbar^2}{\mu^2}p_z^2 \tag{5.80}$$

这样式 (5.65) 给出

$$\sum_{nlm} (E_{n's}-E_{np})^2 \left|z_{n's,nlm}\right|^2 = \frac{\hbar^2}{\mu^2}\left\langle p_z^2\right\rangle_{n's} \tag{5.81}$$

根据 $\psi_{n's}$ 的球对称性, 可得

$$\left\langle p_x^2\right\rangle = \left\langle p_y^2\right\rangle = \left\langle p_z^2\right\rangle = \frac{1}{3}\left\langle \boldsymbol{p}^2\right\rangle$$

代入式 (5.81) 得

$$\sum_{nlm} (E_{n's}-E_{np})^2 \left|z_{n's,nlm}\right|^2 = \frac{\hbar^2}{3\mu^2}\left\langle \boldsymbol{p}^2\right\rangle_{n's} \tag{5.82}$$

将式 (5.82) 代入式 (5.78), 即得式 (5.76).

对于束缚定态, Virial 定理给出

$$2\left\langle T\right\rangle = \left\langle \boldsymbol{r}\cdot\nabla V\right\rangle$$

题给 $V=V(r)\propto r^\nu$ 为 $\boldsymbol{r}$ 的 ν 次齐次函数, 即满足 $V(\lambda\boldsymbol{r})=\lambda^\nu V(\boldsymbol{r})$, 则 $\boldsymbol{r}\cdot\nabla V=\nu V$, 因而 $2\left\langle T\right\rangle=\nu\left\langle V\right\rangle$. 与 $\left\langle T\right\rangle+\left\langle V\right\rangle=E$ 联立即得

$$\left\langle T\right\rangle=\frac{\nu}{\nu+2}E,\quad \left\langle V\right\rangle=\frac{2}{n+2}E \tag{5.83}$$

将上面 $\left\langle T\right\rangle$ 的表达式代入式 (5.76), 即得式 (5.77).

5.26 对于一维谐振子, 试利用能级公式, 位力 (virial) 定理及求和规则, 计算矩阵元 x_{nk}.

解 一维谐振子 Hamilton 量

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \tag{5.84}$$

其中 m 为质量, ω 为频率. 谐振子的位势具有反射对称性, 再因一维束缚定态非简并, 故一维束缚定态必具有确定的宇称. 从而对谐振子任意的束缚定态 $|n\rangle$, 必有

$$\langle n|x|n\rangle = 0 \tag{5.85}$$

按 Virial 定理[①], 在势场 $V(\boldsymbol{r})$ 中运动的粒子, 在定态下动能期望值满足 $2\langle T\rangle = \langle \boldsymbol{r}\cdot\nabla V\rangle$. 谐振子的位势是为 x 的 2 次齐次函数, 即满足 $V(\lambda x) = \lambda^2 V(x)$, 则 $x\dfrac{\partial V}{\partial x} = 2V$, 因而 Virial 定理给出 $2\langle T\rangle = 2\langle V\rangle$. 与 $\langle T\rangle + \langle V\rangle = E_n$ 联立即得

$$\langle T\rangle = \frac{1}{2}E_n, \quad \langle V\rangle = \frac{1}{2}E_n \tag{5.86}$$

谐振子束缚定态 $|n\rangle$ 的能量为

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{5.87}$$

由上式并由 V 的表达式得

$$\langle n|x^2|n\rangle = \frac{\hbar}{m\omega}\left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{5.88}$$

题给能量本征态均已归一化, 则完备性关系表示为

$$\sum_n^{\infty} |n\rangle\langle n| = 1 \tag{5.89}$$

由此式 (5.88) 又可表示为

$$\sum_n \langle k|x|n\rangle\langle n|x|k\rangle = \frac{\hbar}{m\omega}\left(k + \frac{1}{2}\right)$$

或者

$$\sum_n |x_{nk}|^2 = \frac{\hbar}{m\omega}\left(k + \frac{1}{2}\right) \tag{5.90}$$

在题 5.64 的式 (5.65) 中取 $F = x$, 则

$$[H, x] = \frac{1}{2m}\left[p^2, x\right] = \mathrm{i}\hbar\frac{p}{m}, \quad [H, x]^2 = -\hbar^2\frac{p^2}{m^2}$$

式 (5.65) 给出

$$\sum_n (E_n - E_k)^2 |x_{nk}|^2 = -\langle k|\,[H, x]^2\,|k\rangle = \frac{\hbar^2}{m^2}\langle k|p^2|k\rangle = \frac{\hbar^3\omega}{m}\left(k + \frac{1}{2}\right) \tag{5.91}$$

代入谐振子能级公式 (5.87), 上式给出

$$\sum_n (n - k)^2 |x_{nk}|^2 = \frac{\hbar}{m\omega}\left(k + \frac{1}{2}\right) \tag{5.92}$$

---

① 曾谨言, 量子力学 (第四版卷 I)[M], 北京: 科学出版社, 2007, p.156.

式 (5.88) 与式 (5.90) 相减, 利用式 (5.85)($x_{nn}=0$) 得

$$\sum_n \left[(n-k)^2-1\right]|x_{nk}|^2=0 \tag{5.93}$$

由于 $|x_{nk}|^2$ 为非负实数, 上面求和式中只有当

$$\left[(n-k)^2-1\right]=0, \quad \text{即 } n=k+1, \text{ 或者 } n=k-1 \tag{5.94}$$

时 $x_{nk}\neq 0$, 故可设

$$x_{nk}=A_k\delta_{n,k+1}+B_k\delta_{n,k-1} \tag{5.95}$$

代入式 (5.90) 即得

$$\sum_n |x_{nk}|^2=|A_k|^2+|B_k|^2=\frac{\hbar}{m\omega}\left(k+\frac{1}{2}\right) \tag{5.96}$$

再利用求和规则式 (5.46)

$$\sum_n (E_n-E_m)|x_{nm}|^2=\frac{\hbar^2}{2\mu} \tag{5.97}$$

代入谐振子能级公式 (5.87), 上式给出

$$\sum_n (n-k)|x_{nk}|^2=\frac{\hbar}{2\mu\omega} \tag{5.98}$$

式 (5.95) 代入得

$$|A_k|^2-|B_k|^2=\frac{\hbar}{2m\omega} \tag{5.99}$$

式 (5.99) 与式 (5.96) 联立解得

$$|A_k|^2=\frac{\hbar}{4m\omega}(k+1), \quad |B_k|^2=\frac{\hbar}{4m\omega}k \tag{5.100}$$

一维谐振子束缚定态的波函数可取为实函数, 进一步可选取其相邻能级波函数的相对相位 (0 或者 π), 可使得 $x_{nk}\geqslant 0$, 从而 $A\geqslant 0$, $B\geqslant 0$, 这样式 (5.100) 给出

$$A_k=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\sqrt{k+1}, \quad B_k=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\sqrt{k} \tag{5.101}$$

因而代入式 (5.95) 得

$$x_{nk}=\sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}\left(\frac{n+1}{2}\delta_{k,n+1}+\frac{n}{2}\delta_{k,n-1}\right) \tag{5.102}$$

说明 本题还可以用 Hermite 多项式的递推公式或者借助 a, $a^\dagger$ 计算.

第 6 章　中 心 力 场

6.1　质量为 μ 的粒子在中心力场

$$V(r)=-\frac{\alpha}{r^s},\quad \alpha>0 \tag{6.1}$$

中运动, 证明, 存在束缚态的条件为 $0<s<2$, 再进一步证明在 $E\sim 0^-$ 附近存在无限多条束缚态能级.

提示　*利用位力定理或不确定度关系.*

证法一　按 Virial 定理, 对于束缚定态有平均值关系 $2\langle T\rangle=\langle \boldsymbol{r}\cdot\nabla V\rangle$, 代入题给势函数则有

$$2\langle T\rangle=-s\langle V\rangle \tag{6.2}$$

所以在该态下能量 E 满足

$$E=\langle T+V\rangle=\left(1-\frac{2}{s}\right)\langle T\rangle \tag{6.3}$$

由于 $\langle T\rangle>0$, 而束缚态 $E<0$, 上式要求 $1-2/s<0$. 因此得到存在束缚态的条件为

$$0<s<2 \tag{6.4}$$

在满足式 (6.4) 条件下, 式 (6.3) 还可以写成

$$E=\langle T+V\rangle=\left(1-\frac{2}{s}\right)\langle V\rangle=-\alpha\left(1-\frac{s}{2}\right)\left\langle\frac{1}{r^s}\right\rangle \tag{6.5}$$

假设构造一个波包, 其径向分布概率集中在 r_0 附近的 Δr 范围内, 而且 $\Delta r\ll r_0$, 则

$$E=-\alpha\left(1-\frac{s}{2}\right)\left\langle\frac{1}{r^s}\right\rangle=-\alpha\left(1-\frac{s}{2}\right)\frac{1}{r_0^s} \tag{6.6}$$

只要 r_0 足够大, $|E|$ 就可以小于任意小的正数, 这样就得到无限多个密集在 $E\sim 0^-$ 附近的能级.

证法二[①]　r 与 p_r 满足不确定度关系

$$\Delta r\cdot\Delta p_r\approx\hbar \tag{6.7}$$

对于束缚定态 $\langle p_r\rangle=0$[②]. 考虑 s 态, 则有

$$\left\langle \boldsymbol{p}^2\right\rangle=\left\langle p_r^2\right\rangle=(\Delta p_r)^2\approx\hbar^2/(\Delta r)^2 \tag{6.8}$$

---

① 读者可参看 L.D.Landau, E.M.Lifshitz.Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory, Volume 3(原版影印本), Third Edition; 北京: 世界图书出版公司, 1999, §18; 中译本: 量子力学–非相对论理论 (第 6 版). 北京: 高等教育出版社, 2008, §18.

② 如对于 $(H,\boldsymbol{l}^2,l_z)$ 的共同本征函数 $\psi_{nlm}=\frac{1}{r}\chi(r)\mathrm{Y}_{lm}$, 其中 $\chi(r)$ 可取为实函数, 这样

$$\langle p_r\rangle=\int\psi^*\left(-\mathrm{i}\hbar\right)\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)\psi\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}=-\mathrm{i}\hbar\int\chi(r)\frac{\partial}{\partial r}\chi(r)\mathrm{d}r$$

由于 $\chi(r)$ 为实函数, 则积分结果为一纯虚的量, 但 p_r 是 Hermite 算符, $\langle p_r\rangle$ 应该为实数量. 这只能是 $\langle p_r\rangle=0$.

若考虑局限于原点附近的波包, r_0 较小, $\Delta r \sim r_0$, 则

$$E = \langle T + V \rangle \approx \frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2} - \frac{\alpha}{r_0^s} \tag{6.9}$$

假若 $s > 2$, 可见若 $r_0 \to 0$, 则上式第二项占主导, 使得 $E < 0$ 可以取任意小的负数, 这种情况相当于粒子向原点坠落. 换句话说, $s > 2$ 情况下粒子能量不存在下界, 因而不存在稳定的定态. 只有当 $0 < s < 2$ 时, $E < 0$ 不会取任意小的负数, 由于不确定度关系阻止粒子向原点坠落, 因而可能会存在一些分立能级, 这就是定态.

再考虑一个径向分布概率集中在 r_0 附近的 Δr 范围内的波包, r_0 足够大, 而 $\Delta r \ll r_0$. 此时处于该波包态粒子的能量期望值为

$$E = \langle T + V \rangle \approx \frac{\hbar^2}{2\mu(\Delta r)^2} - \frac{\alpha}{r_0^s} \tag{6.10}$$

若 $0 < s < 2$, 我们设想让 r_0 与 Δr 按同一比例增大, 则对于足够大的 r_0, 式 (6.10) 中第二项起主要作用, 将给出 $E < 0$, 且当 $r_0 \to \infty$, $E \to 0^-$. 这意味着在 $E \sim 0^-$ 附近存在无限多密集的负能量的束缚定态.

6.2 质量为 μ 的粒子在球方势阱

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

中运动. 设 V_0 逐渐从小到大变化. (1) 求出现一个新的束缚能级 (即 $E_{n_r l} \approx V_0 - 0^+$) 的条件. (2) 求出现第一个束缚态对 $V_0 a^2$ 的限制. (3) 若 V_0 很大, 估算束缚态总数 N.

解 (1) 粒子在球对称势场中运动, 选 CSCO 为 $(H, \boldsymbol{l}^2, l_z)$, 而束缚定态为其共同本征态, 波函数可以写为

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R(r) \mathrm{Y}_{lm}(\theta, \varphi) \tag{6.11}$$

其中径向波函数 $R(r)$ 满足的方程为

$$R'' + \frac{2}{r} R' + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2}(E - V) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0 \tag{6.12}$$

当 V_0 由小到大逐渐变化, 出现新束缚态时 $E \approx V_0 - 0^+$, 上式成为

$$R'' + \frac{2}{r} R' + \left[\frac{2\mu V_0}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0, \qquad r < a(\text{阱内}) \tag{6.13a}$$

$$R'' + \frac{2}{r} R' - \frac{l(l+1)}{r^2} R = 0, \qquad r \geqslant a(\text{阱外}) \tag{6.13b}$$

不妨令

$$k_0 = \sqrt{2\mu V_0}/\hbar \tag{6.14}$$

阱内方程 (6.13a) 正是球 Bessel 方程, $r \to 0$ 处满足自然边界条件 $\lim\limits_{r \to 0} r R_l(r) = 0$ 的解为球 Bessel 函数

$$R(r) = \mathrm{j}_l(k_0 r) \tag{6.15}$$

另一解球 Neuman 函数 $\mathrm{n}_l(k_0 r)$ 不满足自然边界条件, 故舍去.

阱外方程 (6.13b) 的解为

$$R(r) = \frac{C}{r^{l+1}} \tag{6.16}$$

另一解 r^l 不满足 $r\to\infty$ 处 $R(r)\to 0$ 的束缚态边界条件, 舍去. 阱外波函数 (6.16) 显然满足

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left[r^{l+1}R(r)\right]=0,\quad r\geqslant a \tag{6.17}$$

$r=a$ 处 $V(r)$ 为有限跳跃, R 及 R' 均应连续, 因此对于阱内波函数 (6.15), 当 $r\to a$ 也应满足条件 (6.17), 即

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left[r^{l+1}\mathrm{j}_l(k_0r)\right]_{r=a}=0 \tag{6.18}$$

利用球 Bessel 函数的递推关系

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[x^{l+1}\mathrm{j}_l(x)\right]=x^{l+1}\mathrm{j}_{l-1}(x)$$

式 (6.18) 可以化为

$$\mathrm{j}_{l-1}(k_0a)=0 \tag{6.19}$$

这就是所求的出现一个新束缚态 (角量子数 l, 能级 $E_{n_rl}\approx V_0-0^+$) 的条件.

(2) 由 H-F 定理[①]知 $\dfrac{\partial E_{nl}}{\partial l}>0$, 则第一个束缚态必是 s 态 ($l=0$). 由式 (6.19) 即知出现 s 态束缚态的条件为

$$\mathrm{j}_{-1}(k_0a)=0 \tag{6.20}$$

由于

$$\mathrm{j}_{-1}(k_0a)=\frac{\cos k_0a}{k_0a}$$

故出现一条 s 态新能级 ($E\approx V_0-0^+$) 的条件为

$$\cos k_0a=0,\quad \text{即}\quad k_0a=\frac{\pi}{2},\frac{3\pi}{2},\frac{5\pi}{2},\cdots \tag{6.21}$$

出现第一个束缚态时, $k_0a=\pi/2$, 即

$$V_0a^2=\frac{\pi^2\hbar^2}{8} \tag{6.22}$$

(3) V_0 很大时, 可按 "相空间中每 h^3 的体积内有一个束缚态" 来估算束缚态总数. 处于束缚定态的粒子, 在阱内的最大动量为

$$p_0=\hbar k_0=\sqrt{2\mu V_0} \tag{6.23}$$

因此, 束缚态所占相空间总体积为

$$\frac{4\pi}{3}a^3\cdot\frac{4\pi}{3}p_0^3=\frac{16}{9}\pi^2\left(a\hbar k_0\right)^3=\Omega \tag{6.24}$$

束缚态总数为

$$\begin{aligned}N&\approx\Omega/(2\pi\hbar)^3=\frac{2\pi^2}{9}\left(\frac{ak_0}{\pi}\right)^3\\&=\frac{2\pi^2}{9}\left(\frac{a}{\pi\hbar}\right)^3(2\mu V_0)^{3/2}\end{aligned} \tag{6.25}$$

说明 1 上面给出了束缚态总数的估算. 如果要知道其确切的束缚态总数, 需要知道 $E<V_0$ 的有哪些束缚态 (所有能量不同, 角动量不同的态), 需要一个个数. 设想 V_0 逐渐增大, 每当满足

① 曾谨言, 量子力学 (第四版卷 I)[M], 北京: 科学出版社, 2007, p.218~225.

式 (6.19) 就出现一条新能级 ($E_{n_r l} \approx V_0 - 0^+$). 根据球 Bessel 函数 $\mathrm{j}_l(x) = 0$ 的正根数值, 可以确定各能级的出现次序[①]为

$$1\mathrm{s},\ 1\mathrm{p},\ 1\mathrm{d},\ 2\mathrm{s},\ 1\mathrm{f},\ 2\mathrm{p},\ 1\mathrm{g},\ 2\mathrm{d},\ 3\mathrm{s},\ 1\mathrm{h},\ 2\mathrm{f},\ 1\mathrm{i},\ 3\mathrm{p},\ 2\mathrm{g},\ 1\mathrm{k},\ 3\mathrm{d},\ 4\mathrm{s},\cdots$$

各光谱符号与 l 值的对应为

光谱符号	s	p	d	f	g	h	i	j	k	$\cdots$
l	0	1	2	3	4	5	6	7	8	$\cdots$

例如, 当 $ak_0 = 7\pi/2$, 最高能级为 4s, 由能级序列具体数出由 1s 至 4s 的全部状态数为

$$N = 1+3+5+1+7+3+9+3+1+11+7+13+3+9+17+5+1 = 99$$

而由式 (6.25) 作估算则得 $N = 94$, 与准确值很接近.

说明 2 (关于求解刚出现一个新束缚态条件的另一种方法) 束缚定态能量 $E < V_0$, 设

$$k = \frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar}, \quad \kappa = \frac{\sqrt{2\mu(V_0 - E)}}{\hbar} \tag{6.26}$$

分区求解, 各自满足的方程

$$R'' + \frac{2}{r}R' + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] R = 0, \qquad r < a(\text{阱内}) \tag{6.27a}$$

$$R'' + \frac{2}{r}R' - \left[\kappa^2 + \frac{l(l+1)}{r^2}\right] R = 0, \qquad r \geqslant a(\text{阱外}) \tag{6.27b}$$

类似式 (6.13b) 阱内球 Bessel 方程 (6.27a) 满足自然边界条件的解

$$R_l(r) = A_l \mathrm{j}_l(kr) \tag{6.28}$$

阱外方程 (6.27b) 的解为如下虚宗量的第一类球 Hankel 函数

$$R_l(r) = B_l \mathrm{h}_l^{(1)}(\mathrm{i}\kappa r) \tag{6.29}$$

另一解 $\mathrm{h}_l^{(2)}(\mathrm{i}\kappa r)$ 不满足 $r \to \infty$ 处 $R(r) \to 0$ 的束缚态边界条件, 舍去. $r = a$ 处 $V(r)$ 为有限跳跃, R 及 ∇R 均应连续. 这一连接条件也可表示为

$$\left.\frac{\mathrm{d}\ln rR_l}{\mathrm{d}r}\right|_{r=a-0^+} = \left.\frac{\mathrm{d}\ln rR_l}{\mathrm{d}r}\right|_{r=a+0^+}$$

也就是

$$\left.\frac{[r\mathrm{j}_l(kr)]'}{r\mathrm{j}_l(kr)}\right|_{r=a-0^+} = \left.\frac{\left[r\mathrm{h}_l^{(1)}(\mathrm{i}\kappa r)\right]'}{r\mathrm{h}_l^{(1)}(\mathrm{i}\kappa r)}\right|_{r=a+0^+} \tag{6.30}$$

对于特定的 V_0 这其实是确定能级 $E_{n_r l}$ 的超越方程.

刚出现一个新束缚态 ($E_{n_r l} \approx V_0 - 0^+$), 按照式 (6.26), 此时

$$k \to k_0, \quad \kappa \to 0$$

---

① 参看 L. D. Landau, E. M. Lifshitz.Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory, Volume 3(原版影印本), Third Edition; 北京: 世界图书出版公司, 1999, §33; 中译本: 量子力学–非相对论理论 (第 6 版). 北京: 高等教育出版社, 2008, §33.

故 $\mathrm{h}_l^{(1)}(\mathrm{i}\kappa r)$ 的宗量趋于零, 利用渐近式

$$\mathrm{h}_l^{(1)}(x) \sim -\frac{\mathrm{i}(2l-1)!!}{x^{l+1}}, \quad x \to 0$$

将此式代入式 (6.30) 右端得

$$\left.\frac{\left[r\mathrm{h}_l^{(1)}(\mathrm{i}\kappa r)\right]'}{r\mathrm{h}_l^{(1)}(\mathrm{i}\kappa r)}\right|_{r=a+0^+} \sim -\frac{l}{a}, \quad \kappa \to 0 \tag{6.31}$$

因而

$$\left.\frac{[r\mathrm{j}_l(k_0 r)]'}{r\mathrm{j}_l(k_0 r)}\right|_{r=a-0^+} = -\frac{l}{a} \tag{6.32}$$

由此得出式 (6.18), 与前一致. 同样导致刚出现一个新束缚态 ($E_{n_r l} \approx V_0 - 0^+$) 的条件式 (6.19).

6.3 质量为 μ 的粒子在球壳势阱

$$V(r) = -\gamma\delta(r-a), \quad \gamma, a > 0$$

中运动, 求存在束缚态的条件.

解 由 H-F 定理[①] 知 $\dfrac{\partial E_{n_r l}}{\partial l} > 0$. 设想 γ 逐渐增加, 则第一个束缚态必是 s 态 ($l=0$). 基态为 s 态 ($l=0$) 波函数可以写成

$$\psi(r) = \frac{u(r)}{r} \tag{6.33}$$

$u(r)$ 满足径向方程

$$u'' + \frac{2\mu E}{\hbar^2}u + \frac{2\mu\gamma}{\hbar^2}\delta(r-a)u = 0 \tag{6.34}$$

由于 $r \to \infty$ 处 $V(r) \to 0$, 所以束缚态能量 $E < 0$.

现令

$$\kappa = \frac{\sqrt{-2\mu E}}{\hbar}, \quad b = \frac{\hbar^2}{\mu\gamma} \tag{6.35}$$

式 (6.34) 可以改写成

$$u'' - \kappa^2 u + \frac{2}{b}\delta(r-a)u = 0 \tag{6.36}$$

在 $r=a$ 附近对式 (6.36) 积分, 可得 u 的跃变条件

$$u'(a+0^+) - u'(a-0^+) = -\frac{2}{b}\hbar^2 u(a) \tag{6.37}$$

在 $r=a$ 处, u' 是有限跳跃, 因而 u 连续.

在 $r \neq a$ 处, 式 (6.36) 即

$$u'' - \kappa^2 u = 0 \tag{6.38}$$

满足自然边界条件 ($u(0)=0$) 以及束缚态条件 (在 $r \to \pm\infty$ 处 $u=0$) 的解为

$$u(r) = \begin{cases} \sinh kx = \dfrac{1}{2}(\mathrm{e}^{\kappa x} - \mathrm{e}^{-\kappa x}), & 0 \leqslant r \leqslant a \\ A\mathrm{e}^{-\kappa x}, & r > a \end{cases} \tag{6.39}$$

---

① 曾谨言, 量子力学 (第四版卷 I)[M], 北京: 科学出版社, 2007, p.218~225.

$r=a$ 处 u 的连续条件以及 u' 的跃变条件 (6.37) 给出

$$\sinh \kappa a = A\mathrm{e}^{-\kappa a} \tag{6.40}$$

$$\kappa \cosh \kappa a + A\kappa \mathrm{e}^{-\kappa a} = \frac{2}{b}\sinh \kappa a \tag{6.41}$$

上面两式消去 A, 即得[①]

$$(2-\kappa b)\sinh \kappa a = \kappa b \cosh \kappa a$$

或者

$$\kappa b = 1-\mathrm{e}^{-2\kappa a} \tag{6.42}$$

按题 3.24 同样讨论, 定义无量纲量 $\varepsilon = \kappa b$, 则上式又可表示为

$$\varepsilon = 1-\mathrm{e}^{-\frac{2a}{b}\varepsilon} \tag{6.43}$$

构造函数 $f(\varepsilon)=\varepsilon-1+\mathrm{e}^{-\frac{2a}{b}\varepsilon}$, 问题转化为求 $f(\varepsilon)$ 的正根. 即求解

$$f(\varepsilon)=\varepsilon-1+\mathrm{e}^{-\frac{2a}{b}\varepsilon}=0 \tag{6.44}$$

上面构造的函数 $f(\varepsilon)$ 满足 $f(0)=0$[②], $f(+\infty)=+\infty$. $f'(\varepsilon)=1-\dfrac{2a}{b}\mathrm{e}^{-\frac{2a}{b}\varepsilon}$, 当 $\varepsilon>0$ 时 $f'(\varepsilon)>f'(0)=1-\dfrac{2a}{b}$. 故当 $b\geqslant 2a$ 时, $f'(\varepsilon)$ 在 $(0,+\infty)$ 上恒正, 由此知 $f(\varepsilon)$ 在此区间上是增函数. 再结合 $f(0)=0$ 知在 $(0,+\infty)$ 上 $f(\varepsilon)>0$, 故当 $b\geqslant 2a$ 时 $f(\varepsilon)$ 没有正根, 因而此时不存在束缚态. 由上述分析可知存在束缚态的必要条件是 $b<2a$. 类似于对题 3.24 奇宇称束缚态的分析, 当 $b<2a$, 必存在一个唯一的 s 态束缚态. 因此 $b<2a$ 也是存在束缚态的充要条件. 根据式 (6.35), 这也就是

$$\gamma > \frac{\hbar^2}{2\mu a}$$

γ 从较小的值逐渐增加到 $\dfrac{\hbar^2}{2\mu a}+0^+$, 就开始出现束缚态, 而其能量 $E=0^-$.

6.4 对于中心力场 $V(r)$ 中的任何一个束缚定态, 证明

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right\rangle - \left\langle \frac{\boldsymbol{l}^2}{\mu r^3}\right\rangle = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu}|\psi_E(0)|^2 \tag{6.45}$$

并解释其经典力学含义.

解 Hamilton 算符为

$$H=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(r)=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{2\mu r^2}\boldsymbol{l}^2+V(r) \tag{6.46}$$

先计算算符 $\dfrac{\partial}{\partial r}$ 与 H 的对易式. 我们知道在球坐标下, 角动量算符 $\boldsymbol{l}$ 只含有角度变量, 因此

$$\left[\frac{\partial}{\partial r}, H\right]=\frac{\hbar^2}{\mu r^2}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\boldsymbol{l}^2}{\mu r^3}+\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \tag{6.47}$$

---

① 这里所得结果与题 3.24 的奇宇称态结果相同, 这不奇怪. 原因在于求解 u 的方程以及在 0 到 $+\infty$ 的边界条件与题 3.24 的奇宇称态完全相同.

② 即 $\varepsilon=0$ 为 $f(\varepsilon)$ 的根, 这相应于 $\kappa=0\,(E=0)$, 不是束缚态能量.

设粒子处在某一个任意选取的束缚定态 ψ_E(能量确定), 上面式 (6.47) 两边对该态取平均值. 则由能量本征方程及其厄米共轭式知左边贡献为 0, 所以

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right\rangle - \left\langle \frac{\boldsymbol{l}^2}{\mu r^3} \right\rangle = -\frac{\hbar^2}{\mu} \left\langle \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \right\rangle = -\frac{\hbar^2}{\mu} \int \psi_E^* \frac{1}{r^2} \frac{\partial \psi_E}{\partial r} r^2 \mathrm{d}r\mathrm{d}\Omega$$
$$= -\frac{\hbar^2}{\mu} \int \mathrm{d}\Omega \int_0^\infty \psi_E^* \frac{\partial \psi_E}{\partial r} \mathrm{d}r \tag{6.48}$$

上式左端之平均值为实数量, 则右端也应当为实数量, 因此

$$\int_0^\infty \psi_E^* \frac{\partial \psi_E}{\partial r} \mathrm{d}r = \int_0^\infty \psi_E \frac{\partial \psi_E^*}{\partial r} \mathrm{d}r = \frac{1}{2} \int_0^\infty \frac{\partial}{\partial r} \left(\psi_E^* \psi_E\right) \mathrm{d}r$$
$$= \frac{1}{2} \psi_E^* \psi_E \Big|_{r=0}^\infty = -\frac{1}{2} |\psi_E(0)|^2 \tag{6.49}$$

将式 (6.49) 代入式 (6.48), 并计及 $\int \mathrm{d}\Omega = 4\pi$, 即得式 (6.45), 即为所证.

现考虑束缚定态波函数 ψ_E 是 $(H, \boldsymbol{l}^2, l_z)$ 的共同本征函数, 即

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) \mathrm{Y}_{lm}(\theta, \varphi) \tag{6.50}$$

这时式 (6.45) 中 $\boldsymbol{l}^2$ 可以用本征值 $l(l+1)\hbar^2$ 代替. 由于只有 s 态 $(l=0)\psi_E(0)$ 才不等于 0, 因此式 (6.45) 等价于

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right\rangle = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu} |\psi_E(0)|^2, \quad l = 0 \,(\text{s 态}) \tag{6.51a}$$

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right\rangle = \left\langle \frac{\boldsymbol{l}^2}{\mu r^3} \right\rangle = l(l+1) \frac{\hbar^2}{\mu} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle, \quad l \neq 0 \tag{6.51b}$$

接下来我们尝试对上述结果的物理意义作一讨论. 式 (6.51a) 显含 $\hbar$, 所以是量子效应, 没有经典对应. 下面讨论式 (6.51b) 可能的经典对应. 经典力学中, 粒子在中心力场中运动时, 能量 E、角动量 $\boldsymbol{l}$ 均守恒. 对于任何周期性轨道, 均有

$$E = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu} + V(r) = \frac{\mu}{2} \left(\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\right)^2 + \frac{\boldsymbol{l}^2}{2\mu r^2} + V(r) \tag{6.52}$$

由于能量 E、角动量 $\boldsymbol{l}$ 守恒, 上式对 r 求导, 得到

$$\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} - \frac{\boldsymbol{l}^2}{\mu r^3} = -\frac{\mu}{2} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} \cdot \left(\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\right)^2 = -\mu \frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} \left(\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\right) = -\mu \frac{\mathrm{d}^2 r}{\mathrm{d}t^2}$$

或者

$$-\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} + \frac{\boldsymbol{l}^2}{\mu r^3} = \mu \frac{\mathrm{d}^2 r}{\mathrm{d}t^2}$$

此式即粒子在有心力场中运动的径向方程① 其中 $-\dfrac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}$ 为粒子所受有心力 (沿径向), 而 $\dfrac{\boldsymbol{l}^2}{\mu r^3}$ 为离心力. 对于圆轨道 $r = \text{const.}$, 则有 $\dfrac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} = \dfrac{\boldsymbol{l}^2}{\mu r^3}$, 也就是粒子所受有心力与离心力平衡. 对于周期运动, 则对上式两边求周期平均值, 即得

$$\left(\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right)_{\text{平均}} - \frac{\boldsymbol{l}^2}{\mu} \left(\frac{1}{r^3}\right)_{\text{平均}} = -\frac{\mu}{\oint \mathrm{d}t} \oint \mathrm{d}t \frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} \left(\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\right) = -\mu \oint \mathrm{d}\left(\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\right) / \oint \mathrm{d}t = 0$$

---

① 例如参见文献 Goldstein H., Poole C., Safko J., 经典力学 (影印版)(第 3 版)(Classical Mechanics(3rd Edition)), 高等教育出版社, 2005, p72~76.

或者

$$\left(\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right)_{\text{平均}} = \frac{\boldsymbol{l}^2}{\mu}\left(\frac{1}{r^3}\right)_{\text{平均}} \tag{6.53}$$

可见粒子所受有心力与离心力的周期平均值相等. 对于非周期运动, 如在平方反比力场中沿抛物线或者双曲线轨道运动, 此时不存在式 (6.53) 这样的式子. 经典粒子在有心力场中做周期运动, 粒子局限在有限区域中运动, 且能量守恒, 这是一种束缚定态. 我们可以说, 式 (6.51b) 或者式 (6.45) 是式 (6.53) 的量子力学推广.

本题解答到此已经完整. 下面关于式 (6.45) 我们再提出 2 种新的证法. 并附上对一般束缚态式 (6.45) 是否成立的讨论.

证法二 定态 Schrödinger 方程可写为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{1}{2\mu r^2}\boldsymbol{l}^2 + V(r)\right]\psi_E = E\psi_E \tag{6.54}$$

令 $\chi = r\psi_E$, 则

$$\left[\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{2\mu r^2}\boldsymbol{l}^2 + E - V(r)\right]\chi = 0 \tag{6.55}$$

上式两边对 r 求导得

$$\left[\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{2\mu r^2}\boldsymbol{l}^2 + E - V(r)\right]\frac{\partial}{\partial r}\chi = \left(\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} - \frac{1}{\mu r^3}\boldsymbol{l}^2\right)\chi \tag{6.56}$$

上式两边左乘以 χ^*, 并对全空间积分 $\int \mathrm{d}\Omega\mathrm{d}r$, 因 $\chi = r\psi_E$ (不妨设 ψ_E 已归一化), 则等号右边给出 $\left\langle\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right\rangle - \left\langle\frac{\boldsymbol{l}^2}{\mu r^3}\right\rangle$, 即式 (6.45) 的左边. 左边作全空间积分时, 我们采用分部积分的办法, 使得作用到 χ 上面的微分算符 $\frac{\partial^2}{\partial r^2}$ 与 $\boldsymbol{l}^2$ 全部改为作用到 χ^* 上, 并利用式 (6.55) 的复数共轭式, 给出零的结果. $\boldsymbol{l}$ 是 Hermite 算符, 朝前作用与朝后作用相同. $-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial r}$ 不是 Hermite 算符, 朝前作用与朝后作用结果则不相同. 因此对积分变量 r 作分部积分时, 我们须小心地保留边界项. 这样式 (6.56) 左边全空间积分后的结果是

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\int \mathrm{d}\Omega\left(\chi^*\frac{\partial}{\partial r}\frac{\partial}{\partial r}\chi\Big|_{r=0}^{\infty} - \frac{\partial}{\partial r}\chi^*\cdot\frac{\partial}{\partial r}\chi\Big|_{r=0}^{\infty}\right) = \frac{\hbar^2}{2\mu}\int \mathrm{d}\Omega\left|\frac{\partial}{\partial r}\chi(0)\right|^2 = 4\pi\frac{\hbar^2}{2\mu}\left|\frac{\partial}{\partial r}\chi(0)\right|^2 \tag{6.57}$$

由 $\chi = r\psi_E$ 知 $\frac{\partial}{\partial r}\chi(0) = \psi_E(0)$. 从而上式结果即式 (6.45) 的右边. 这样我们完成了式 (6.45) 的证明.

证法三 在球坐标下, 角动量算符 $\boldsymbol{l}$ 只含有角度变量, 故知 $\left[\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}, \boldsymbol{l}\right] = 0$ 以及 $\left[\frac{\boldsymbol{l}^2}{\mu r^3}, \boldsymbol{l}\right] = 0$, 并有 $\left[\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}, \boldsymbol{l}^2\right] = 0$ 以及 $\left[\frac{\boldsymbol{l}^2}{\mu r^3}, \boldsymbol{l}^2\right] = 0$. 考虑 $\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}l_z$ 在不同角动量态下的矩阵元

$$\left\langle lm\left|\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}l_z\right|l'm'\right\rangle = m\left\langle lm\left|\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right|l'm'\right\rangle = m'\left\langle lm\left|\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right|l'm'\right\rangle$$

若 $m \neq m'$, 则必有 $\left\langle lm\left|\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right|l'm'\right\rangle = 0$, 同理 $\left\langle lm\left|\frac{\boldsymbol{l}^2}{\mu r^3}\right|l'm'\right\rangle = 0$. 考虑 $\left\langle lm\left|\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\boldsymbol{l}^2\right|l'm'\right\rangle$, 则

可证若 $l \neq l'$, 则必有 $\left\langle lm \left| \dfrac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right| l'm' \right\rangle = 0$, 同理 $\left\langle lm \left| \dfrac{\boldsymbol{l}^2}{\mu r^3} \right| l'm' \right\rangle = 0$.

归一化束缚定态 ψ_E 总可以用 $(H, \boldsymbol{l}^2, l_z)$ 的共同本征函数 ψ_{nlm} 展开, 即

$$\psi_E = \sum_{lm} c_{lm} \psi_{nlm}$$

按上面结论得到

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} - \frac{\boldsymbol{l}^2}{\mu r^3} \right\rangle_E = \sum_{lm} |c_{lm}|^2 \left\langle \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} - \frac{\boldsymbol{l}^2}{\mu r^3} \right\rangle_{nlm} \tag{6.58}$$

上式平均值下标 E 表示对态 ψ_E 求平均, 而下标 nlm 表示态 ψ_{nlm} 求平均. 在右边的求和中, 不同角动量态的交叉项 ($l \neq l', m \neq m'$ 的项) 不出现. 再考虑到式 (6.45) 右边唯一非零的情形 s 态非简并, 从上式知欲对束缚定态 ψ_E 式 (6.45) 成立, 只需证明对每一个 ψ_{nlm} 式 (6.45) 成立即可.

现对态 ψ_{nlm} 证明式 (6.45) 成立. 这时算符 $\boldsymbol{l}^2$ 取本征值 $l(l+1)\hbar^2$, 而波函数可以写成

$$\psi_{nlm} = \frac{1}{r} u(r) \mathrm{Y}_{lm} \tag{6.59}$$

其中 $u(r)$ 可取为实函数, 即满足 $u(r)^* = u(r)$. $u(r)$ 满足方程

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} u + \left[\frac{2m\,(E-V)}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u = 0$$

或者

$$\frac{2\mu\,(V-E)}{\hbar^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} = \frac{u''}{u}$$

此式两边再对 r 求导得

$$\frac{2\mu}{\hbar^2} \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} - \frac{2l(l+1)}{r^3} = \left(\frac{u''}{u} \right)'$$

上面方程两边对 ψ_{nlm} 态取平均得

$$\begin{aligned} \frac{2\mu}{\hbar^2} \left\langle \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right\rangle - 2l(l+1) \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle &= \int_0^\infty \mathrm{d}r u^2 \frac{2\mu}{\hbar^2} \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} = \int_0^\infty u^2 \left(u''/u \right)' \mathrm{d}r \\ &= -2 \int_0^\infty u'' u' \mathrm{d}r = \left[u'(0) \right]^2 \end{aligned} \tag{6.60}$$

式中用了束缚态所应满足的边界条件 $u|_{r\to\infty} = 0$.

由式 (6.59), $\psi + r \dfrac{\partial}{\partial r} \psi = u' \mathrm{Y}_{lm}$, 故 $r = 0$ 处, $u'(0) \mathrm{Y}_{lm} = \psi_{nlm}(0)$. 对于 $l = 0$, 因 $\mathrm{Y}_{00} = 1/\sqrt{4\pi}$, 故 $u'(0) = \sqrt{4\pi} \psi_{n00}(0)$; 对于 $l \neq 0$, $\psi_{nlm}(0) = 0$, 故 $u'(0) = 0$. 将 $u'(0)$ 的结果代入式 (6.60), 即得 ψ_{nlm} 满足式 (6.45). 综上我们完成了式 (6.45) 的证明①.

讨论 以上的证明用了束缚定态的条件. 若是一般束缚态, 而不是束缚定态, 我们来讨论式 (6.45) 是否成立. 若令

$$\Lambda = \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} - \frac{\boldsymbol{l}^2}{\mu r^3} \tag{6.61}$$

① 对于态 ψ_{nlm} 满足式 (6.45), 另外还有一种证法, 可见张永德、柳盛典、吴强等人编著, 物理大题典 —— 量子力学, 北京: 科学出版社, 2005 年 9 月, p.173~174.

一般 $[\Lambda, H] \neq 0$, 故 Λ 不是守恒量. 兹举氢原子的例子, 其 Hamilton 量为 $H = \dfrac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu} - \dfrac{e^2}{r}$, 因而

$$\Lambda = \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} - \frac{\boldsymbol{l}^2}{\mu r^3} = \frac{e^2}{r^2} - \frac{\boldsymbol{l}^2}{\mu r^3} \tag{6.62}$$

这样

$$[\Lambda, H] = \left[\Lambda, \frac{p_r^2}{2\mu} + \frac{1}{2\mu r^2}\boldsymbol{l}^2 + V(r)\right] = \left[\frac{e^2}{r^2} - \frac{\boldsymbol{l}^2}{\mu r^3}, \frac{p_r^2}{2\mu}\right] = \frac{e^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}, p_r^2\right] - \frac{\boldsymbol{l}^2}{2\mu^2}\left[\frac{1}{r^3}, p_r^2\right] \tag{6.63}$$

在坐标表象 $p_r = \mathrm{i}\hbar\left(\dfrac{\partial}{\partial r} + \dfrac{1}{r}\right)$, 因而

$$\begin{aligned}
\left[\frac{1}{r^2}, p_r^2\right] &= \left[\frac{1}{r^2}, p_r\right] p_r + p_r \left[\frac{1}{r^2}, p_r\right] = -2\mathrm{i}\hbar\left(p_r \frac{1}{r^3} + \frac{1}{r^3} p_r\right) \\
&= -2\mathrm{i}\hbar\left\{\left[p_r, \frac{1}{r^3}\right] + \frac{2}{r^3} p_r\right\} = -2\mathrm{i}\hbar\left\{\frac{3\mathrm{i}\hbar}{r^4} + \frac{2\mathrm{i}\hbar}{r^3}\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)\right\} \\
&= 4\hbar^2 \frac{1}{r^3}\frac{\partial}{\partial r} + 10\hbar^2 \frac{1}{r^4} \\
\left[\frac{1}{r^3}, p_r^2\right] &= \left[\frac{1}{r^3}, p_r\right] p_r + p_r \left[\frac{1}{r^3}, p_r\right] = -3\mathrm{i}\hbar\left(p_r \frac{1}{r^4} + \frac{1}{r^4} p_r\right) \\
&= -3\mathrm{i}\hbar\left\{\left[p_r, \frac{1}{r^4}\right] + \frac{2}{r^4} p_r\right\} = -3\mathrm{i}\hbar\left\{\frac{4\mathrm{i}\hbar}{r^5} + \frac{2\mathrm{i}\hbar}{r^4}\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)\right\} \\
&= 6\hbar^2 \frac{1}{r^4}\frac{\partial}{\partial r} + 12\hbar^2 \frac{1}{r^5}
\end{aligned}$$

把上面结果代入式 (6.63) 得

$$[\Lambda, H] = \frac{e^2\hbar^2}{\mu}\left[\frac{2}{r^3}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{5}{r^4}\right] - \frac{3e^2 a l^2}{\mu}\left[\frac{1}{r^4}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{2}{r^5}\right] \neq 0$$

可见 Λ 不是守恒量. 既然如此, 它在体系非定态的时间演化态下的期望值一般随时间变化. 而式 (6.45) 对于 $l \neq 0$ 则意味着 Λ 的期望值总是零, 这与 Λ 不是守恒量不一致. 因此我们预想式 (6.45) 对于非定态情形不一定成立.

不妨举一非定态的例子作具体计算. 设 $t = 0$ 时, 氢原子中的电子初态处于

$$\psi(\boldsymbol{x}, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{210} + \psi_{310}) \tag{6.64}$$

我们对此初态计算, 则式 (6.45) 右边为

$$\frac{2\pi\hbar^2}{\mu}|\psi(\boldsymbol{0}, 0)|^2 = 0 \tag{6.65}$$

现计算左边. 对于束缚定态 ψ_{210} 以及 ψ_{310}, 式 (6.45) 成立, 这样在式 (6.64) 的态下

$$\begin{aligned}
\left\langle \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right\rangle - \left\langle \frac{\boldsymbol{l}^2}{\mu r^3} \right\rangle &= \frac{1}{2}\left(\left\langle 210 + 310 \left| \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right| 210 + 310 \right\rangle - \left\langle 210 + 310 \left| \frac{\boldsymbol{l}^2}{\mu r^3} \right| 210 + 310 \right\rangle\right) \\
&= \frac{1}{2}\left(\left\langle 210 \left| \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right| 310 \right\rangle - \left\langle 210 \left| \frac{\boldsymbol{l}^2}{\mu r^3} \right| 310 \right\rangle + c.c.\right)
\end{aligned} \tag{6.66}$$

式中 $\dfrac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} = \dfrac{e^2}{r^2}$, 在 ψ_{210} 与 ψ_{310} 态下, $\boldsymbol{l}^2 = 2\hbar^2$, 这样 $\dfrac{\boldsymbol{l}^2}{\mu r^3} = \dfrac{2\hbar^2}{\mu r^3} = \dfrac{2e^2 a}{r^3}$. $\psi_{210} = R_{21}\mathrm{Y}_{10}$,

$\psi_{310}=R_{31}\mathrm{Y}_{10}$, 而 R_{21} 与 R_{31} 如下给出[①]:

$$R_{21}=\frac{1}{2\sqrt{6}a^{3/2}}\frac{r}{a}\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a}},\quad R_{31}=\frac{8}{27\sqrt{6}a^{3/2}}\frac{r}{a}\left(1-\frac{r}{6a}\right)\mathrm{e}^{-\frac{r}{3a}} \tag{6.67}$$

因而

$$\begin{aligned}\left\langle 210\left|\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right|310\right\rangle &=\int\mathrm{d}\Omega\int_0^\infty\mathrm{d}r r^2R_{21}\mathrm{Y}_{10}^*\frac{e^2}{r^2}R_{31}\mathrm{Y}_{10}=e^2\int_0^\infty R_{21}R_{31}\mathrm{d}r\\ &=e^2\int_0^\infty\frac{8}{2\sqrt{6}\times27\sqrt{6}a^3}\frac{r}{a}\cdot\frac{r}{a}\left(1-\frac{r}{6a}\right)\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a}-\frac{r}{3a}}\mathrm{d}r\\ &=\frac{2e^2}{81a^2}\int_0^\infty\left(x^2-\frac{1}{6}x^3\right)\mathrm{e}^{-\frac{5}{6}x}\mathrm{d}x=\frac{2e^2}{81a^2}\left[2\cdot\left(\frac{6}{5}\right)^3-\frac{1}{6}\cdot6\cdot\left(\frac{6}{5}\right)^4\right]\\ &=\frac{64e^2}{1875a^2}\end{aligned} \tag{6.68}$$

上面用了积分公式 (A.9), 同样

$$\begin{aligned}\left\langle 210\left|\frac{\boldsymbol{l}^2}{\mu r^3}\right|310\right\rangle &=\int\mathrm{d}\Omega\int_0^\infty\mathrm{d}r r^2R_{21}\mathrm{Y}_{10}^*\frac{2e^2a}{r^3}R_{31}\mathrm{Y}_{10}=e^2\int_0^\infty R_{21}R_{31}\mathrm{d}r\\ &=2e^2a\int_0^\infty\frac{8}{2\sqrt{6}\times27\sqrt{6}a^3}\frac{1}{a}\cdot\frac{r}{a}\left(1-\frac{r}{6a}\right)\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a}-\frac{r}{3a}}\mathrm{d}r\\ &=\frac{4e^2}{81a^2}\int_0^\infty\left(x-\frac{1}{6}x^2\right)\mathrm{e}^{-\frac{5}{6}x}\mathrm{d}x=\frac{4e^2}{81a^2}\left[\left(\frac{6}{5}\right)^2-\frac{1}{6}\cdot2\cdot\left(\frac{6}{5}\right)^3\right]\\ &=\frac{16e^2}{375a^2}\end{aligned} \tag{6.69}$$

这样

$$\left\langle 210\left|\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right|310\right\rangle-\left\langle 210\left|\frac{\boldsymbol{l}^2}{\mu r^3}\right|310\right\rangle=-\frac{16e^2}{1875a^2} \tag{6.70}$$

结果是一个实数量, 代入式 (6.66) 即得

$$\left\langle\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right\rangle-\left\langle\frac{\boldsymbol{l}^2}{\mu r^3}\right\rangle=-\frac{16e^2}{1875a^2}\neq0 \tag{6.71}$$

这是式 (6.45) 的左边, 它不等于零; 但我们在式 (6.65) 给出式 (6.45) 的右边等于零. 可见对于我们构造的束缚定态的迭加态 $\psi(\boldsymbol{0},0)=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{210}+\psi_{310})$, 式 (6.45) 并不成立.

相应于式 (6.64) 初态的时间演化态为

$$\psi(\boldsymbol{x},t)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{210}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_2t/\hbar}+\psi_{310}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_3t/\hbar}\right) \tag{6.72}$$

其中 $E_2=-\frac{e^2}{8a}$、$E_3=-\frac{e^2}{18a}$. 我们对此演化态计算, 则只需将式 (6.68, 6.69) 的结果乘以因子 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_3-E_2)t/\hbar}$, 代入式 (6.66) 即得

$$\left\langle\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right\rangle_t-\left\langle\frac{\boldsymbol{l}^2}{\mu r^3}\right\rangle_t=-\frac{16e^2}{1875a^2}\cos\omega_{23}t \tag{6.73}$$

其中 $\omega_{23}=(E_3-E_2)/\hbar$. 结果表现为随时间振荡的行为, 这与我们预想的一致.

① 曾谨言, 量子力学 (第四版卷 I)[M], 北京: 科学出版社, 2007, p.213.

粒子束缚态定义为粒子出现概率集中在有限区域 (离开该有限区域足够远的区域内粒子出现总概率足够小) 的态, 因此束缚态的迭加态仍是束缚态. 定态则是确定能量的态, 因此不同能量定态的迭加就不再是定态. 我们上面举的例子中, 式 (6.64) 或者式 (6.72) 为束缚定态的迭加态, 它仍是束缚态, 但不再是定态; 在该态下, 本题所讨论的关系式并不成立. 由此可知对本题所讨论的关系式, 束缚定态是成立的必要条件.

6.5 对于氢原子基态, 求 Δx、Δp_x, 验证不确定度关系.

解法一 在坐标表象中氢原子归一化的基态波函数为

$$\psi(r,\theta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{\pi}a^{3/2}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a}} \tag{6.74}$$

其中 $a\equiv\dfrac{\hbar^2}{\mu e^2}$ 是 Bohr 半径. 现用波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$ 计算坐标的平均值.

$$\overline{x}=\iiint|\psi(\boldsymbol{r})|^2\,x\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\frac{1}{\pi a^3}\iiint\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a}}(r\sin\theta\cos\varphi)\cdot r^2\sin\theta\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi \tag{6.75}$$

做关于 φ 的积分即知上式为零, 即有 $\overline{x}=0$. 而

$$\begin{aligned}\overline{x^2}&=\iiint|\psi(\boldsymbol{r})|^2\,x^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\frac{1}{\pi a^3}\iiint\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a}}(r\sin\theta\cos\varphi)^2\cdot r^2\sin\theta\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi\\&=\frac{1}{\pi a^3}\int\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a}}r^4\mathrm{d}r\int_0^{\pi}\sin^3\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\cos^2\varphi\mathrm{d}\varphi\\&=\frac{1}{\pi a^3}\int\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a}}r^4\mathrm{d}r\cdot\int_0^{\pi}\left(\frac{3}{4}\sin\theta-\frac{1}{4}\sin3\theta\right)\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\cos2\varphi\right)\mathrm{d}\varphi\\&=\frac{1}{\pi a^3}\cdot\frac{4!}{(2/a)^5}\cdot\frac{8}{6}\cdot\pi=a^2\end{aligned} \tag{6.76}$$

式 (6.75)、式 (6.76) 给出

$$(\Delta x)^2=\overline{(x-\overline{x})^2}=\overline{x^2}-\overline{x}^2=a^2-0=a^2 \tag{6.77}$$

因此氢原子中电子的 x 坐标不确定度为

$$\Delta x=a \tag{6.78}$$

接下来用题 6.7 式 (6.94) 所给的动量波函数 $\varphi(\boldsymbol{p})$ 来计算动量有关平均值. 动量 $\boldsymbol{p}$ 是积分变量, 对其采用球坐标, 用 p, θ', φ' 表示. 动量直角坐标分量 p_x, p_y, p_z 表示 $p_x=p\sin\theta'\cos\varphi'$, $p_y=p\sin\theta'\sin\varphi'$, $p_z=p\cos\theta'$, 这样

$$\begin{aligned}\overline{p}_x&=\iiint|\varphi(\boldsymbol{p})|^2p_x\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}\\&=\frac{(2a)^3\hbar^5}{\pi^2}\iiint\frac{p}{(a^2p^2+\hbar^2)^4}\sin\theta'\cos\varphi'\cdot p^2\mathrm{d}p\sin\theta'\mathrm{d}\theta'\mathrm{d}\varphi'\\&=\frac{(2a)^3\hbar^5}{\pi^2}\int_0^{\infty}\frac{p^3\mathrm{d}p}{(a^2p^2+\hbar^2)^4}\int_0^{\pi}\sin^2\theta'\mathrm{d}\theta'\int_0^{2\pi}\cos\varphi'\mathrm{d}\varphi'=0\end{aligned} \tag{6.79}$$

而 p_x^2 的期望值为

$$\begin{aligned}\overline{p_x^2}&=\iiint|\varphi(\boldsymbol{p})|^2\,p_x^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}\\&=\frac{8a^3\hbar^5}{\pi^2}\iiint\frac{p^2}{(a^2p^2+\hbar^2)^4}\sin^2\theta'\cos^2\varphi'\cdot p^2\mathrm{d}p\sin\theta'\mathrm{d}\theta'\mathrm{d}\varphi'\\&=\frac{8a^3\hbar^5}{\pi^2}\int_0^{\infty}\frac{p^4\mathrm{d}p}{(a^2p^2+\hbar^2)^4}\int_0^{\pi}\sin^3\theta'\mathrm{d}\theta'\int_0^{2\pi}\cos^2\varphi'\mathrm{d}\varphi'\end{aligned} \tag{6.80}$$

式 (6.80) 中关于 p 的积分可做变量代换 $ap=\hbar\tan\xi$ 得

$$\int_0^\infty \frac{p^4}{(a^2p^2+\hbar^2)^4}\mathrm{d}p=\frac{1}{a^5\hbar^3}\int_0^{\frac{\pi}{2}}\sin^4\xi\cos^2\xi\mathrm{d}\xi$$
$$=\frac{1}{16a^5\hbar^3}\int_0^{\frac{\pi}{2}}\left(1-\frac{\cos 2\xi}{2}-\cos 4\xi+\frac{\cos 6\xi}{2}\right)\mathrm{d}\xi=\frac{\pi}{32}\frac{1}{a^5\hbar^3}$$

代入式 (6.80) 得

$$\overline{p_x^2}=\frac{8^3\hbar^5}{\pi^2}\cdot\frac{\pi}{32}\frac{1}{a^5\hbar^3}\cdot\int_0^\pi\left(\frac{3}{4}\sin\theta'-\frac{1}{4}\sin 3\theta'\right)\mathrm{d}\theta'\frac{1}{2}\int_0^{2\pi}(1+\cos 2\varphi')\,d\varphi'$$
$$=\frac{\hbar^2}{32a^2\pi}\cdot\left[-3\cos\theta'+\frac{1}{3}\cos 3\theta'\right]\Bigg|_0^\pi\cdot 2\pi=\frac{\hbar^2}{3a^2}\tag{6.81}$$

式 (6.75)、式 (6.76) 给出

$$(\Delta p_x)^2=\overline{(p_x-\overline{p}_x)^2}=\overline{p_x^2}-\overline{p}_x^2=\frac{\hbar^2}{3a^2}-0=\frac{\hbar^2}{3a^2}\tag{6.82}$$

因此 x 方向动量不确定度为

$$\Delta p_x=\frac{\hbar}{\sqrt{3}a}\tag{6.83}$$

这样由式 (6.78) 与式 (6.83) 得

$$\Delta x\Delta p_x=a\frac{\hbar}{\sqrt{3}a}=\frac{\hbar}{\sqrt{3}}>\frac{\hbar}{2}$$

可见 $\Delta x\Delta p_x$ 满足不确定度关系.

解法二 $\overline{x}$, $\overline{x^2}$ 的计算与解法一相同. 对 $\overline{p}_x$, $\overline{p_x^2}$ 若直接在坐标表象计算更为简单

$$\overline{p}_x=\iiint\psi(\boldsymbol{r})^*\left(-\mathrm{i}\hbar\right)\frac{\partial}{\partial x}\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\frac{-\mathrm{i}\hbar}{\pi a^3}\iiint\mathrm{e}^{-\frac{r}{a}}\frac{\partial}{\partial x}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a}}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$
$$=\frac{\mathrm{i}\hbar}{\pi a^3}\iiint\frac{x}{ar}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a}}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z=0$$

以及

$$\overline{p_x^2}=\iiint\psi(\boldsymbol{r})^*p_x^2\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\iiint\left[p_x\psi(\boldsymbol{r})\right]^*p_x\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$
$$=\iiint\left|p_x\psi(\boldsymbol{r})\right|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\hbar^2\iiint\left|\frac{\partial}{\partial x}\psi(\boldsymbol{r})\right|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$
$$=\frac{\hbar^2}{\pi a^3}\iiint\left|\frac{\partial}{\partial x}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a}}\right|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\frac{\hbar^2}{\pi a^5}\iiint\frac{x^2}{r^2}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a}}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$
$$=\frac{\hbar^2}{\pi a^5}\iiint\frac{1}{3r^2}\left(x^2+y^2+z^2\right)\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a}}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\frac{\hbar^2}{3\pi a^5}\iiint\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a}}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$
$$=\frac{\hbar^2}{3a^2}\iiint\left|\psi(\boldsymbol{r})\right|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\frac{\hbar^2}{3a^2}$$

最后一个等式用了波函数的归一化条件, 下面答题与解法一同, 略去. 与解法一比较, 可见求解某个力学量在某个态下的期望值, 不一定是在该力学量的表象下求解最方便.

解法三 氢原子归一化的基态波函数为 $\langle\boldsymbol{r}|100\rangle=\psi(r,\theta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{\pi}a^{3/2}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a}}$, 可见具有空间反

射与空间旋转的不变性. 这样

$$\langle \boldsymbol{r} \rangle = \langle 100|\boldsymbol{r}|100\rangle = \langle 100|\Pi^{-1}\Pi\boldsymbol{r}\Pi^{-1}\Pi|100\rangle = -\langle 100|\boldsymbol{r}|100\rangle = 0$$

其中 Π 为宇称算符, 而 Π^{-1} 为其逆算符. 同理得 $\langle \boldsymbol{p} \rangle = 0$. 因而 $\overline{x} = \overline{p}_x = 0$. 由于波函数的旋转不变性得

$$\overline{x^2} = \overline{y^2} = \overline{z^2} = \frac{1}{3}\overline{(x^2+y^2+z^2)} = \frac{1}{3}\overline{r^2}, \quad \overline{p_x^2} = \overline{p_y^2} = \overline{p_z^2} = \frac{1}{3}\overline{(p_x^2+p_y^2+p_z^2)} = \frac{1}{3}\overline{p^2}$$

而 r^2 与 p^2 的期望值如下计算

$$\begin{aligned}
\overline{r^2} &= \int \psi_{100}^* r^2 \psi_{100} \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \frac{1}{\pi a^3}\int \mathrm{e}^{-\frac{2r}{a}} r^4 \mathrm{d}r\mathrm{d}^2\Omega \\
&= \frac{4\pi}{\pi a^3}\int \mathrm{e}^{-\frac{2r}{a}} r^4 \mathrm{d}r = \frac{4}{a^3}\left(\frac{a}{2}\right)^5 \int \mathrm{e}^{-x} x^4 \mathrm{d}x = \frac{4}{a^3}\left(\frac{a}{2}\right)^5 4! = 3a^2
\end{aligned} \tag{6.84}$$

$$\begin{aligned}
\overline{p^2} &= \int |\boldsymbol{p}\psi_{100}|^2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \hbar^2 \int |\nabla\psi_{100}|^2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \hbar^2 \int \left|\frac{\partial}{\partial r}\psi_{100}\right|^2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \\
&= \hbar^2 \frac{1}{\pi a^5}\int \mathrm{e}^{-\frac{2r}{a}} r^2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \frac{\hbar^2}{a^2}\iiint |\psi(\boldsymbol{r})|^2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \frac{\hbar^2}{a^2}
\end{aligned} \tag{6.85}$$

下面答题与解法一同, 略去.

解法四 (关于 $\overline{p}_x$、$\overline{p_x^2}$ 的计算) 由题 4.25, 束缚定态下动量平均值为零, 故 $\overline{p}_x = 0$. 氢原子问题势函数 $V = -e^2/r$, 利用 Virial 定理得

$$2\overline{T} = \overline{\boldsymbol{r}\cdot\nabla V} = -\overline{V}$$

而 $\overline{T} + \overline{V} = E$, 因而 $\overline{T} = -E$. 由此得 $\overline{p_x^2} = \frac{1}{3}\overline{p^2} = \frac{\hbar^2}{3a^2}$.

6.6 对于氢原子的各 s 态 ($nlm = n00$), 计算 Δx, Δp_x, 讨论 $n \gg 1$ 情况.

解 s 态各向同性, 所以 $\langle x \rangle = 0$, $\langle p_x \rangle = 0$, 并且有

$$\langle x^2 \rangle = \langle y^2 \rangle = \langle z^2 \rangle = \frac{1}{3}\langle \boldsymbol{r}^2 \rangle, \quad \langle p_x^2 \rangle = \langle p_y^2 \rangle = \langle p_z^2 \rangle = \frac{1}{3}\langle \boldsymbol{p}^2 \rangle \tag{6.86}$$

而 $\langle \boldsymbol{r}^2 \rangle$ 的计算在题 6.12 给出, 在式 (6.117) 中取 $Z = 1, l = 0$, 给出

$$\langle r^2 \rangle = \frac{n^2}{2}\left(1 + 5n^2\right) a_0^2 \tag{6.87}$$

其中 $a_0 = \hbar^2/\mu e^2$ 为 Bohr 半径. 因此利用 s 态各向同性

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle} = \sqrt{\langle r^2 \rangle}/\sqrt{3} = \frac{n}{\sqrt{6}}\sqrt{1+5n^2}a_0 \tag{6.88}$$

当 $n \gg 1$ 时

$$\Delta x \approx \sqrt{\frac{5}{6}} n^2 a_0 \tag{6.89}$$

根据 Virial 定理和氢原子能级公式

$$\frac{1}{2\mu}\langle \boldsymbol{p}^2 \rangle_{n00} = |E_n| = \frac{e^2}{2n^2 a_0} \tag{6.90}$$

因而

$$\langle \boldsymbol{p}^2 \rangle_{n00} = \frac{\mu e^2}{n^2 a_0} = \frac{\hbar^2}{n^2 a_0^2} \tag{6.91}$$

因此利用 s 态各向同性

$$\Delta p_x = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle} = \sqrt{\langle \boldsymbol{p}^2 \rangle}/\sqrt{3} = \hbar/\sqrt{3}na_0 \tag{6.92}$$

从而

$$\Delta x \Delta p_x = \sqrt{\frac{1+5n^2}{18}}\hbar$$

$n \gg 1$ 时, $\Delta x \Delta p_x \approx \sqrt{\dfrac{5}{18}}n\hbar = 0.527n\hbar > \dfrac{n\hbar}{2}$.

6.7 求出氢原子基态波函数在动量表象中的表示式.

解 我们将式 (6.74) 作 Fourier 变换得动量波函数

$$\varphi(\boldsymbol{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \iiint \psi(\boldsymbol{r}) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar} \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{6.93}$$

式中 $\boldsymbol{r}$ 是积分变量, 我们不妨选其 z 轴沿动量 $\boldsymbol{p}$ 方向, 这样 $\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} = pr\cos\theta$. 将式 (6.74) 代入式 (6.93), 进行积分, 求得动量表象氢原子基态波函数

$$\begin{aligned}
\varphi(\boldsymbol{p}) &= \frac{1}{\pi^2(2\hbar a)^{3/2}} \iiint \mathrm{e}^{-\frac{r}{a}-\mathrm{i}pr\cos\theta/\hbar} r^2 \sin\theta \mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi \\
&= \frac{2}{\pi(2\hbar a)^{3/2}} \iint \mathrm{e}^{-\frac{r}{a}-\mathrm{i}pr\cos\theta/\hbar} \sin\theta \mathrm{d}\theta r^2\mathrm{d}r = \frac{2}{\pi(2\hbar a)^{3/2}} \int_0^\infty \frac{\hbar}{\mathrm{i}pr} \mathrm{e}^{-\frac{r}{a}-\mathrm{i}pr\cos\theta/\hbar}\Big|_{\theta=0}^{\pi} r^2\mathrm{d}r \\
&= \frac{2}{\pi(2\hbar a)^{3/2}} \frac{\hbar}{\mathrm{i}p} \int_0^\infty \left(\mathrm{e}^{-\frac{r}{a}+\frac{\mathrm{i}pr}{\hbar}} - \mathrm{e}^{-\frac{r}{a}-\frac{\mathrm{i}pr}{\hbar}} \right) r\mathrm{d}r \\
&= \frac{2}{\pi(2\hbar a)^{3/2}} \cdot \frac{\hbar}{\mathrm{i}p} \left\{ \frac{1}{(1/a - \mathrm{i}p/\hbar)^2} - \frac{1}{(1/a + \mathrm{i}p/\hbar)^2} \right\} = \frac{(2a\hbar)^{3/2}\hbar}{\pi(a^2p^2+\hbar^2)^2}
\end{aligned} \tag{6.94}$$

6.8 在动量表象中写出氢原子的能量本征方程.

解 我们可以从三维坐标表象定态 Schrödinger 方程通过 Fourier 变换得到动量表象方程, 如式 (2.52) 所给

$$\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}\varphi(\boldsymbol{p}) + \iiint \mathrm{d}\boldsymbol{p}' V_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'}\varphi(\boldsymbol{p}') = E\varphi(\boldsymbol{p}) \tag{6.95}$$

其中

$$V_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \iiint \mathrm{d}\boldsymbol{x} V(\boldsymbol{x}) \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\cdot\boldsymbol{x}} \tag{6.96}$$

代入氢原子的势函数 $V(\boldsymbol{x}) = -e^2/r$, 注意到 $\nabla^2\dfrac{1}{r} = -4\pi\delta(\boldsymbol{x})$, 得到

$$\begin{aligned}
V_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'} &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \iiint \mathrm{d}\boldsymbol{x} - \frac{e^2}{r} \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\cdot\boldsymbol{x}} \\
&= \frac{-e^2}{(2\pi\hbar)^3 \left[-\dfrac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\right]^2} \iiint \mathrm{d}\boldsymbol{x} \frac{1}{r} \left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\right]^2 \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\cdot\boldsymbol{x}} \\
&= \frac{e^2}{(2\pi)^3\hbar|\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}'|^2} \iiint \mathrm{d}\boldsymbol{x} \frac{1}{r} \nabla^2 \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\cdot\boldsymbol{x}}
\end{aligned}$$

作分部积分, 即得

$$\begin{aligned}
V_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'} &= \frac{e^2}{(2\pi)^3\hbar|\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}'|^2} \iiint \mathrm{d}\boldsymbol{x} \left(-\nabla^2\frac{1}{r}\right) \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\cdot\boldsymbol{x}} \\
&= \frac{e^2}{(2\pi)^3\hbar|\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}'|^2} \iiint \mathrm{d}\boldsymbol{x} 4\pi\delta(\boldsymbol{x}) \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\cdot\boldsymbol{x}} = \frac{e^2}{2\pi^2\hbar|\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}'|^2}
\end{aligned}$$

代入到式 (6.95), 得动量表象中氢原子的能量本征方程可写为

$$\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}\varphi(\boldsymbol{p})+\frac{e^2}{2\pi^2\hbar}\iiint \mathrm{d}\boldsymbol{p}'\frac{1}{|\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}'|^2}\varphi(\boldsymbol{p}')=E\varphi(\boldsymbol{p}) \tag{6.97}$$

6.9 设氢原子处于基态, 求电子处于经典力学禁区 $(E-V=T<0)$ 的概率.

解 在经典力学中, 当总能量一定时, 轨道半径 r 受到限制. 设 Bohr 半径 a, 则总能量

$$E=-\frac{e^2}{2a}$$

粒子的势能则随着到核的距离 r 而变, 表示为 $-\dfrac{e^2}{r}$, 而动能是二者的差 (从理论上讲, 距离 r 可以扩展到无限远处)

$$T(r)=-\frac{e^2}{2a}+\frac{e^2}{r} \tag{6.98}$$

若使 $T(r)>0$, 要求 $r<2a$. 在量子力学中, 电子可以在离核任何距离 r 处出现, 它在经典力学中不允许范围中出现的概率是

$$\begin{aligned}
P=&\iiint|\psi_{100}|^2\,\mathrm{d}\tau=\frac{1}{\pi a^3}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_{2a}^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a}}r^2\mathrm{d}r\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi\\
=&\frac{4\pi}{\pi a^3}\int_{2a}^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a}}r^2\mathrm{d}r=\frac{4}{a^3}\int_{2a}^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a}}r^2\mathrm{d}r=\frac{4}{a^3}\left(-\frac{a}{2}\right)\int_{2a}^{\infty}r^2\mathrm{d}(\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a}})\\
=&-\frac{2}{a^2}\left(r^2\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a}}\Big|_{2a}^{\infty}-\int_{2a}^{\infty}2r\mathrm{e}^{\frac{2r}{a}}\mathrm{d}r\right)=8\mathrm{e}^{-4}+\frac{4}{a^2}\left(-\frac{e}{2}\right)r\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a}}\Big|_{2a}^{\infty}+\frac{2}{a}\int_{2a}^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a}}\mathrm{d}r\\
=&(8+4+1)\mathrm{e}^{-4}=13\mathrm{e}^{-4}
\end{aligned}$$

6.10 利用氢原子能级公式, 讨论下列各体系的能谱:

(a) 电子偶素 (positronium, 指 $\mathrm{e}^+\mathrm{e}^-$ 束缚体系). 参阅 C. Kittel, et al., Berkeley Physics Course, Vol.1, Mechanics, p.292, 1971;

(b) μ 原子 (muonic atom). 参阅 C. S. Wu, L. Wiletz, Ann. Rev. Nucl. Sci., **19**(1969), 527;

(c) μ 子偶素 (muonium, 指 $\mu^+\mu^-$ 束缚体系). 参阅 V. W. Hughes, Ann. Rev. Nucl. Sci. **16**(1966), 445;

(d) μ 子素是正电 μ 子与电子结合成的束缚体系 ($\mu^+\mathrm{e}^-$ 束缚态).

解 按类氢原子二体问题的结论, 其能级出现的质量为折合质量. 本题列出几种类氢原子体系, 电荷均相同, 所不同为折合质量. 对于氢原子, 设质子质量为 M 电子质量为 m, 则折合质量为

$$\mu=\frac{mM}{m+M}$$

代入质子以及电子的质量 $m=0.511\mathrm{MeV}/c^2, M=938.3\mathrm{MeV}/c^2$ 得 $\mu=0.9995m$, 因而能量本征值为

$$E_n=-\frac{\mu e^4}{2\hbar^2n^2}=-13.6\mathrm{eV}\times\frac{1}{n^2},\quad n=1,2,3,\cdots$$

(a) 电子偶素 (positronium) 即正负电子对构成的束缚体系. 在电子偶素情形, 正电子代替氢核的质子, 折合质量为

$$\mu'=\frac{m^2}{m+m}=\frac{m}{2}\doteq\frac{\mu}{2}$$

因而电子偶素能级是

$$E'_n = -\frac{\mu' e^4}{2\hbar^2 n^2} = 0.5E_n = -6.8\text{eV} \times \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \cdots$$

(b) μ 原子是 μ 子被氢核俘获构成的原子, 这种原子的折合质量是

$$\mu'' = \frac{m_\mu M}{m_\mu + M}$$

而 $m_\mu = 105.7\text{MeV}/c^2$, 故 $\mu'' = 0.899 m_\mu = 207\mu$. 这样 μ 子的能级是

$$E''_n = -\frac{\mu'' e^4}{2\hbar^2 n^2} = 207E_n = -2.82\text{keV} \times \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \cdots$$

(c) μ 子偶素 (muonium) 指 $\mu^+\mu^-$ 束缚体系, 其折合质量是

$$\mu''' = \frac{m_\mu^2}{m_\mu + m_\mu} = \frac{m_\mu}{2} = 103.5m$$

这样 μ 子偶素能级是

$$E''' = -\frac{\mu''' e^4}{2\hbar^2 n^2} = 103.5E_n = -1.41\text{keV} \times \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \cdots$$

(d) μ 子素是正电 μ 子与电子结合成的体系 (μ^+e^- 束缚态), 代入 μ 子以及电子的质量得折合质量是

$$\mu'''' = \frac{m m_\mu}{m + m_\mu} = \frac{m}{1 + m/m_\mu} = \frac{m}{1 + 1/207} = 0.995\mu$$

这样 μ 子素能级是

$$E'''' = -\frac{\mu'''' e^4}{2\hbar^2 n^2} = 0.995E_n = -13.5\text{eV} \times \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \cdots$$

6.11 对于类氢原子 (核电荷 Ze), 计算处于束缚态 ψ_{nlm} 下的电子的 $\langle r^\lambda \rangle$, $\lambda = -1, -2, -3$.

解 对于该类氢原子, 令 $a_z = a_0/Z$, a_0 为 Bohr 半径. 按 Virial 定理

$$2\langle T \rangle = \langle \boldsymbol{r} \cdot \nabla V \rangle = \left\langle \boldsymbol{r} \cdot \nabla \frac{Ze}{r} \right\rangle = -\left\langle \boldsymbol{r} \cdot \frac{Ze\boldsymbol{r}}{r^3} \right\rangle = -\left\langle \frac{Ze}{r} \right\rangle = -\langle V \rangle$$

这样 $\langle V \rangle + \langle T \rangle = \frac{1}{2}\langle V \rangle$, 束缚态 ψ_{nlm} 下 $\langle V \rangle = 2E_n$, 此式即

$$\langle r^{-1} \rangle = \frac{1}{n^2 a_z} = \frac{Z}{n^2 a_0} \tag{6.99}$$

对于类氢原子, $H_l = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} - \frac{Ze}{r} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}$, 能量本征值为 $E_{nlm} = E_n = -Ze^2/2n^2 a_z$, $n = n_r + l + 1$. 用 Hellmann-Feynman 定理 $\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} = \langle \psi_{nlm} \left| \frac{\partial H}{\partial \lambda} \right| \psi_{nlm} \rangle$, 取 $\lambda = l$, $\frac{\partial E_n}{\partial l} = \frac{\partial E_n}{\partial n} = \frac{Ze^2}{n^3 a_z}$, $\frac{\partial H}{\partial l} = \frac{(2l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}$, 这样给出

$$\langle r^{-2} \rangle = \frac{1}{(l + 1/2)n^3 a_z^2} = \frac{Z^2}{(l + 1/2)n^3 a_0^2} \tag{6.100}$$

最后, 计算 $\langle r^{-3}\rangle$. 对于 s 态 ($l=0$), $r\to 0$ 处, $\psi\to C$(常数量), 所以

$$\langle r^{-3}\rangle_{n00}\to\infty \tag{6.101}$$

当 $l\neq 0$, 利用题 6.4 的式 (6.45), 即得

$$\left\langle -\frac{\hbar^2}{\mu}\frac{l(l+1)}{r^3}+\frac{\partial}{\partial r}V\right\rangle=0$$

因此

$$\begin{aligned}\langle r^{-3}\rangle&=\frac{\mu}{\hbar^2 l(l+1)}\left\langle\frac{\partial}{\partial r}V\right\rangle=\frac{\mu}{\hbar^2 l(l+1)}\left\langle\frac{Ze^2}{r^2}\right\rangle\\&=\frac{1}{l(l+1)\,(2l+1)}\frac{2}{n^3a_z^3}=\frac{1}{l(l+1)\,(2l+1)}\frac{2Z^3}{n^3a_0^3}\end{aligned} \tag{6.102}$$

当 $l\to 0$, 上式右端 $\to\infty$, 所以上式实际上适用于所有 l 值 (包括 $l=0$).

讨论 由于总能量算符及径向方程均与磁量子数 m 无关, 所以诸 $\langle r^\lambda\rangle$ 都与 m 无关. 而 $\langle r^{-1}\rangle$ 和能级一样, 与角量子数 l 也无关, 仅取决于主量子数 n. $\langle r^{-2}\rangle$ 与 $\langle r^{-3}\rangle$ 则与 n,l 均有关, 亦即对于能级相同但 "轨道形状" 不同 (l 不同) 的各状态, $\langle r^{-2}\rangle$ 与 $\langle r^{-3}\rangle$ 具有不同的数值.

利用式 (6.100), 易得 ψ_{nlm} 态下离心势能的平均值为

$$\left\langle\frac{l^2}{2\mu r^2}\right\rangle_{nlm}=\frac{l(l+1)Z^2e^2}{(2l+1)n^3a_0}=-\frac{l(l+1)}{(l+1/2)\,n}E_n \tag{6.103}$$

由于 $(-E_n)$ 为动能平均值, 所以在动能中离心势能所占比例为 $l(l+1)/[(l+1/2)\,n]$, 当 n 确定后, l 越大, 这个比例越大. 当 l 取最大值 ($l=n-1$), 这个比例为 $(n-1)/(n-1/2)$, 这时径向动能仅占动能的 $1/(2n-1)$. 所以, 如 $n\gg 1$, $(n,n-1,m)$ 态中径向动能就很小, 这种状态相当于 Bohr 量子论中的圆形轨道.

6.12 对于类氢原子的 (H,l^2,l_z) 的共同本征态 ψ_{nlm}, 试从径向方程证明 $\langle r^\lambda\rangle$ 之间的下列递推关系:

$$\frac{\lambda+1}{n^2}\langle r^\lambda\rangle-(2\lambda+1)\frac{a}{Z}\langle r^{\lambda-1}\rangle+\frac{\lambda}{4}\left[(2l+1)^2-\lambda^2\right]\frac{a^2}{Z^2}\langle r^{\lambda-2}\rangle=0 \tag{6.104}$$

给出此关系式成立的条件. 并计算 $\langle r^\lambda\rangle$, $\lambda=2,1,-1,-3,-4$.

参阅 H. A. Kramers, Quantum Mechanics, (North Holland, 1957), §59.

解 (H,l^2,l_z) 的共同本征态 ψ_{nlm} 的球坐标表示式为

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)=R_{nl}(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{1}{r}\chi_{nl}(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) \tag{6.105}$$

其中 $\chi_{nl}(r)$ 可取为实函数. 这样在该态下 r^λ 的平均值为

$$\langle r^\lambda\rangle_{nlm}=\int r^\lambda\left|\psi_{nlm}\right|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}=\int_0^\infty r^\lambda\left|\chi_{nl}\right|^2\mathrm{d}r \tag{6.106}$$

$\chi_{nl}(r)$ 满足径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\chi''+\left[l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}-\frac{Ze^2}{r}\right]\chi=E_n\chi \tag{6.107}$$

其中类氢原子能级

$$E_n=-\frac{Z^2e^2}{2n^2a_0} \tag{6.108}$$

而 $a_0=\dfrac{\hbar^2}{\mu e^2}$ 为 Bohr 半径. 式 (6.107) 可以写成

$$\chi''+\left[\frac{2Z}{a_0 r}-l(l+1)\frac{1}{r^2}-\left(\frac{Z}{na_0}\right)^2\right]\chi=0 \tag{6.109}$$

式 (6.109) 两边乘以 $r^\lambda\chi$, 并对 r 从 0 到 $+\infty$ 积分, 与式 (6.106) 对照, 式 (6.109) 的 $[\cdots]$ 中的三项分别给出 $r^{\lambda-1}$, $r^{\lambda-2}$ 与 r^λ 的平均值, 这样有

$$\int_0^\infty r^\lambda\chi\chi''\mathrm{d}r+\frac{2Z}{a_0}\left\langle r^{\lambda-1}\right\rangle-l(l+1)\left\langle r^{\lambda-2}\right\rangle-\left(\frac{Z}{na_0}\right)^2\left\langle r^\lambda\right\rangle=0 \tag{6.110}$$

上式左边第一项可化为

$$\begin{aligned}\int_0^\infty r^\lambda\chi\chi''\mathrm{d}r&=r^\lambda\chi\chi'\big|_0^\infty-\int_0^\infty\left(r^\lambda\chi'+\lambda r^{\lambda-1}\chi\right)\chi'\mathrm{d}r\\&=\left(r^\lambda\chi\chi'-\frac{\lambda}{2}r^{\lambda-1}\chi^2\right)\Big|_0^\infty+\frac{\lambda(\lambda-1)}{2}\left\langle r^{\lambda-2}\right\rangle-\int_0^\infty r^\lambda(\chi')^2\mathrm{d}r\end{aligned} \tag{6.111}$$

这样式 (6.110) 给出

$$\begin{aligned}&\left[\frac{\lambda(\lambda-1)}{2}-l(l+1)\right]\left\langle r^{\lambda-2}\right\rangle+\frac{2Ze^2}{a_0}\left\langle r^{\lambda-1}\right\rangle-\left(\frac{Z}{na_0}\right)^2\left\langle r^\lambda\right\rangle\\=&\int_0^\infty r^\lambda(\chi')^2\mathrm{d}r+\left(\frac{\lambda}{2}r^{\lambda-1}\chi^2-r^\lambda\chi\chi'\right)\Big|_0^\infty\end{aligned} \tag{6.112}$$

式 (6.109) 两边乘以 $2r^{\lambda+1}\chi'$, 并对 r 从 0 到 $+\infty$ 积分, 可依次得到

$$\begin{aligned}&\int_0^\infty 2r^{\lambda+1}\chi'\chi''\mathrm{d}r=r^{\lambda+1}(\chi')^2\big|_0^\infty-(\lambda+1)\int_0^\infty r^\lambda\chi'^2\mathrm{d}r\\&\int_0^\infty 2r^{\lambda+1}\chi'\chi\mathrm{d}r=r^{\lambda+1}\chi^2\big|_0^\infty-(\lambda+1)\left\langle r^\lambda\right\rangle\\&\int_0^\infty 2r^{\lambda+1}\chi'\frac{\chi}{r}\mathrm{d}r=r^\lambda\chi^2\big|_0^\infty-\lambda\left\langle r^{\lambda-1}\right\rangle\\&\int_0^\infty 2r^{\lambda+1}\chi'\frac{\chi}{r^2}\mathrm{d}r=r^{\lambda-1}\chi^2\big|_0^\infty-(\lambda-1)\left\langle r^{\lambda-2}\right\rangle\end{aligned}$$

这样得到

$$(\lambda-1)l(l+1)\left\langle r^{\lambda-2}\right\rangle-2\lambda\frac{Z}{a_0}\left\langle r^{\lambda-1}\right\rangle+(\lambda+1)\left(\frac{Z}{na_0}\right)^2\left\langle r^\lambda\right\rangle=(\lambda+1)\int_0^\infty r^\lambda(\chi')^2\mathrm{d}r+\mathrm{Res} \tag{6.113}$$

其中余项 Res 如下给出

$$\mathrm{Res}=\left[-l(l+1)r^{\lambda-1}\chi^2+\frac{2Z}{a_0}r^\lambda\chi^2-\left(\frac{Z}{na_0}\right)^2r^{\lambda+1}\chi^2+r^{\lambda+1}(\chi')^2\right]\Big|_0^\infty$$

式 (6.112)、式 (6.113) 中除了式 (6.104) 所含的 $\left\langle r^{\lambda-2}\right\rangle$、$\left\langle r^{\lambda-1}\right\rangle$、$\left\langle r^\lambda\right\rangle$ 以及相同的积分项外, 还有上式所给的余项 Res, 这实际上是若干项分部积分的边界项. 后者依赖于波函数在 $r=0$ 和 $r\to\infty$ 处的值. 波函数渐近条件如下:

$$\begin{aligned}&r\to0\quad&&\chi\sim r^{l+1}\\&r\to\infty\quad&&\chi\sim r\mathrm{e}^{-Zr/na_0}\end{aligned} \tag{6.114}$$

可见分部积分的各边界项在 $r\to\infty$ 处全等于零, 而在 $r=0$ 处 r 的幂次最低的三项为

$$r^{\lambda}\chi\chi',\quad \frac{\lambda}{2}r^{\lambda-1}\chi^2,\quad r^{\lambda+1}(\chi')^2$$

$r\to 0$ 处它们的渐近行为都是 $\sim r^{\lambda+2l+1}$. 由此知, 当

$$\lambda>-(2l+1) \tag{6.115}$$

时, 分部积分的各边界项在 $r=0$ 处均等于零. 此时式 (6.112)、式 (6.113) 中消去右边的积分项即得到式 (6.104), 即为所证.

由上面证明过程知, 式 (6.104) 成立条件为式 (6.115), 即 $\lambda>-(2l+1)$. 这也是使式 (6.104) 中的 $\langle r^{\lambda-2}\rangle$ 的值有限所要求的.

下面应用式 (6.104) 计算 $\langle r^{\lambda}\rangle$. 令 $\lambda=0$, 并注意到 $\langle r^0\rangle=1$(单位算符在任意态下的期望值都等于 1), 立即得到

$$\langle r^{-1}\rangle=Z/n^2a_0$$

这与题 6.11 用 Virial 定理所得结果 [式 (6.99)] 相同. 再令 $\lambda=1,2$, 可依次求得

$$\langle r\rangle=\frac{1}{2}\left[3n^2-l(l+1)\right]\frac{a_0}{Z} \tag{6.116}$$

$$\langle r^2\rangle=\frac{n^2}{2}\left[1+5n^2-3l(l+1)\right]\frac{a_0^2}{Z^2} \tag{6.117}$$

利用题 6.11 式 (6.100), 式 (6.104) 中令 $\lambda=-1$, 可得 $\langle r^{-3}\rangle$, 与题 6.11 式 (6.102) 结果相同.

再令 $\lambda=-2(l\geqslant 1)$, 利用已知的 $\langle r^{-2}\rangle$ 和 $\langle r^{-3}\rangle$[见题 6.11 式 (6.100)、式 (6.102)] 得

$$\langle r^{-4}\rangle=\frac{Z^4}{2n^5(l-1/2)l(l+1/2)(l+1)(l+3/2)}\frac{1}{a_0^4} \tag{6.118}$$

6.13 电荷为 Ze 的原子核突然发生 β^- 衰变, 核电荷变成 $(Z+1)e$. 求衰变前原子 Z 中一个 K 电子 (1s 轨道上电子) 在衰变后仍然保持在新原子的 K 轨道的概率.

解 类氢原子 K 轨道 (基态) 波函数

$$\psi_{100}(r,\theta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{\pi}a_z^{3/2}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_z}} \tag{6.119}$$

其中 $a_z=a_0/Z$, a_0 为 Bohr 半径. 电子在 Ze 与 $(Z+1)e$ 的原子核势场中的 K 轨道波函数分别为

$$\psi_i(r,\theta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{\pi}a_z^{3/2}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_z}},\quad \psi_f(r,\theta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{\pi}a_{z+1}^{3/2}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_{z+1}}} \tag{6.120}$$

ψ_i 在 ψ_f 中的概率振幅为

$$\begin{aligned}\langle\psi_f|\psi_i\rangle&=\iiint\psi_i^*(r,\theta,\varphi)\psi_f(r,\theta,\varphi)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=4\pi\int_0^{\infty}\frac{1}{\pi a_z^{3/2}a_{z+1}^{3/2}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_z}-\frac{r}{a_{z+1}}}r^2\mathrm{d}r\\&=4\left[Z(Z+1)\right]^{3/2}\int_0^{\infty}\mathrm{e}^{-(2Z+1)\xi}\xi^2\mathrm{d}\xi=4\frac{\left[Z(Z+1)\right]^{3/2}}{(2Z+1)^3}\int_0^{\infty}\mathrm{e}^{-\lambda}\lambda^2\mathrm{d}\lambda\\&=\frac{8\left[Z(Z+1)\right]^{3/2}}{(2Z+1)^3}=\frac{\left[Z(Z+1)\right]^{3/2}}{(Z+1/2)^3}\end{aligned} \tag{6.121}$$

这样所求的概率为

$$|\langle\psi_f|\psi_i\rangle|^2=\frac{\left[Z(Z+1)\right]^3}{(Z+1/2)^6} \tag{6.122}$$

6.14 对于类氢原子 (核电荷为 Ze) 的 $l=n-1\,(n_r=0)$ 轨道, 计算 (a) 最概然半径; (b) 平均半径; (c) 涨落 $\Delta r=\left[\langle r^2\rangle-\langle r\rangle^2\right]^{1/2}$.

解 类氢原子径向波函数为

$$R_{nl}=N_{nl}\mathrm{e}^{-\xi/2}\xi^l\mathrm{F}(-n_r,2l+2,\xi)$$

其中 $\xi=\dfrac{2r}{na}$, $N_{nl}=\dfrac{2}{a^{3/2}n^2(2l+1)!}\sqrt{\dfrac{(n+l)!}{(n-l-1)!}}$ 为归一化常数, 而 $a=a_0/Z$, Z 为核电荷数, a_0 为 Bohr 半径. "圆轨道" 对应于 $n_r=0$, 则 $\mathrm{F}=1$, $l=n-1$. 这样

$$R_{nl}=N_{nl}\mathrm{e}^{-\xi/2}\xi^{n-1},\quad N_{nl}=\frac{2}{a^{3/2}n^2\sqrt{(2n-1)!}} \tag{6.123}$$

电子在 $r\sim r+\mathrm{d}r$ 处出现的概率为

$$p(r)\mathrm{d}r=R_{nl}^*R_{nl}r^2\mathrm{d}r=N_{nl}^2\mathrm{e}^{-\xi}\xi^{2n}\frac{n^2a^2}{4}\mathrm{d}r \tag{6.124}$$

对 $p(r)$ 求极值, 由 $\mathrm{d}p(r)/\mathrm{d}r=0$ 得

$$\mathrm{e}^{-\xi}\left(-\xi^{2n}+2n\xi^{2n-1}\right)=0 \tag{6.125}$$

即 $\xi=2n$, 即得最概然半径 $r=n^2a_0/Z$. 平均半径如下给出:

$$\begin{aligned}\langle r\rangle=&\int_0^\infty rp(r)\mathrm{d}r=\frac{n^2a^2}{4}\int_0^\infty N_{nl}^2\mathrm{e}^{-\xi}\xi^{2n}r\mathrm{d}r=\frac{n^4a^4}{16}\frac{4}{a^3n^4(2n-1)!}\int_0^\infty\mathrm{e}^{-\xi}\xi^{2n+1}\mathrm{d}\xi\\=&a\frac{2n(2n+1)}{4}=\left(n^2+\frac{n}{2}\right)a\end{aligned} \tag{6.126}$$

半径平方的平均如下给出:

$$\begin{aligned}\langle r^2\rangle=&\int_0^\infty r^2p(r)\mathrm{d}r=\frac{n^2a^2}{4}\int_0^\infty N_{nl}^2\mathrm{e}^{-\xi}\xi^{2n}r^2\mathrm{d}r=\frac{n^5a^5}{32}\frac{4}{a^3n^4(2n-1)!}\int_0^\infty\mathrm{e}^{-\xi}\xi^{2n+2}\mathrm{d}\xi\\=&a^2\frac{2n^2(2n+1)(2n+2)}{8}=\left(n^4+\frac{3}{2}n^3+\frac{1}{2}n^2\right)a^2\end{aligned} \tag{6.127}$$

由式 (6.126)、式 (6.127) 得径向位置的涨落为

$$\Delta r=\left[\langle r^2\rangle-\langle r\rangle^2\right]^{\frac{1}{2}}=\frac{n}{2}\sqrt{2n+1}a$$

其中 $a=a_0/Z$, a_0 为 Bohr 半径. 上式可见 $\Delta r/\langle r\rangle=1/\sqrt{2n+1}$.

6.15 对于氢原子中的 "圆轨道", 即 $(n,n-1,m)$ 态, 求电子在经典禁区 $(V>E)$ 中的概率.

解 氢原子的 "圆轨道"$(n,n-1,m)$ 态, 其径向波函数节点数 $n_r=0$, 波函数为

$$\psi_{n,n-1,m}=Cr^{n-1}\mathrm{e}^{-r/na_0}\mathrm{Y}_{n-1,m}(\theta,\varphi) \tag{6.128}$$

其中 C 为归一化常数. 容易求得

$$C^2=\frac{1}{(2n)!}\left(\frac{2}{na_0}\right)^{2n+1} \tag{6.129}$$

经典禁区就是 $V>E$ 的区域. 对于定态, 能量 $E=E_n$ 是确定的. 经典允许区和禁区以球面 r_n 为分界, 球外为禁区. r_n 由 $V=E_n$ 决定, 即

$$V(r_n)=-\frac{e^2}{r_n}=E_n=\frac{-e^2}{2n^2a_0} \tag{6.130}$$

求得 $r_n = 2n^2a_0$, 这是最概然半径的 2 倍. 可见经典禁区相当于 $r > r_n = 2n^2a$. 根据式 (6.128) 计算, 电子在经典禁区 $(r > r_n)$ 出现的概率为

$$\begin{aligned} P_n &= \int_{r_n}^{\infty} \int \mathrm{d}\Omega \, |\psi_{n,n-1,m}| \, r^2 \mathrm{d}r = \int_{r_n}^{\infty} (R_{n,n-1})^2 r^2 \mathrm{d}r \\ &= C^2 \left(\frac{na_0}{2}\right)^{2n+1} \int_{4n}^{\infty} x^{2n} \mathrm{e}^{-x} \mathrm{d}x \end{aligned} \tag{6.131}$$

采用分部积分法完成上述积分, 结果为

$$P_n = \left[1 + 4n + \frac{(4n)^2}{2!} + \frac{(4n)^3}{3!} + \cdots + \frac{(4n)^{2n}}{(2n)!}\right] \exp(-4n)$$

例如

$$\begin{aligned} &n = 1(\text{基态}) \quad P_1 = 13 \times \mathrm{e}^{-4} = 0.2381 \\ &n = 2 \qquad\quad P_2 = 297 \times \mathrm{e}^{-8} = 0.0996 \\ &n = 3 \qquad\quad P_3 = 7457.8 \times \mathrm{e}^{-12} = 0.0458 \\ &n = 4 \qquad\quad P_4 = 195381 \times \mathrm{e}^{-16} = 0.0220 \\ &n = 5 \qquad\quad P_5 = 5244270 \times \mathrm{e}^{-20} = 0.0108 \\ &n = 10 \qquad\quad P_{10} = 8.669 \times 10^{13} \times \mathrm{e}^{-40} = 0.000368 \\ &\qquad\qquad\quad \cdots\cdots \end{aligned}$$

6.16 设碱金属原子中的价电子所受原子实 (原子核 + 满壳电子) 的作用近似表示为

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} - \lambda \frac{e^2 a}{r^2}, \quad 0 < \lambda \ll 1$$

$a = \hbar^2/(\mu e^2)$ 为 Bohr 半径, 试求价电子的能级, 并与氢原子能级作比较.

提示 令 $l(l+1) - 2\lambda = l'(l'+1)$, 解出

$$l' = -\frac{1}{2} + \left(l + \frac{1}{2}\right)\left[1 - \frac{8\lambda}{(2l+1)^2}\right]^{1/2}$$

解 有心力场的径向波函数 R 满足径向 Schrödinger 方程式

$$\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2 \frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\right) + \left\{\frac{2\mu}{\hbar^2}[E - V(r)] - \frac{l(l+1)}{r^2}\right\} R = 0 \tag{6.132}$$

将势函数 $V(r)$ 代入

$$\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2 \frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\right) + \left\{\frac{2\mu E}{\hbar^2} + \frac{2}{ar} - [l(l+1) - 2\lambda]\frac{1}{r^2}\right\} R = 0 \tag{6.133}$$

令 $R(r) = \chi(r)/r$ 代入式 (6.133) 得

$$\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}r^2} + \left\{\frac{2\mu E}{\hbar^2} + \frac{2}{ar} - [l(l+1) - 2\lambda]\frac{1}{r^2}\right\} \chi = 0 \tag{6.134}$$

上式可写为

$$\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}r^2} + \left\{\frac{2\mu E}{\hbar^2} + \frac{2}{ar} - \frac{l'(l'+1)}{r^2}\right\} \chi = 0 \tag{6.135}$$

其中 l' 满足 $l(l+1) - 2\lambda = l'(l'+1)$. 从中解出 l' 得 $l' = \pm\sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - 2\lambda} - \frac{1}{2}$, 这里 l' 应取正

值, 使得满足当 $\lambda \to 0$ 时, $l' \to l$. 也就是

$$l' = \sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2 - 2\lambda} - \frac{1}{2} \tag{6.136}$$

式 (6.135) 除了 l' 值不同, 与解氢原子束缚态的径向方程完全相同. 这样利用氢原子束缚态的结果得到碱金属原子中的价电子能级为

$$E_n = -\frac{e^2}{2a}\cdot\frac{1}{n'^2} = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}\cdot\frac{1}{n'^2} \tag{6.137}$$

式中的 n' 是主量子数, 如下给出

$$n' = n_r + l' + 1, \quad n_r = 0, 1, 2, \cdots$$

n' 一般不是整数. 相应的径向波函数

$$R_{n'l'}(r) = N'_{n'l'}\mathrm{e}^{-\frac{\xi}{2}}\xi^l \mathrm{F}(-n+l'+1, 2l'+2, \xi)$$

其中 F 为合流超几何函数, $N'_{n'l'}$ 为归一化系数, l' 由式 (6.136) 给出, 取正值. 价电子总的波函数为 $R_{n'l'}(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$.

式 (6.136) 中 $0 < \lambda \ll 1$, 可令 $l' = l + \Delta l$, 得 $\Delta l \approx -\lambda/(l+1/2) \ll 1$. 式 (6.137) 的能级可近似表示成

$$E_{nl} \approx -\frac{e^2}{2a}\frac{1}{(n+\Delta l)^2}, \quad n = 1, 2, 3, \cdots$$

与氢原子能级作比较, 差别在于分母上的 Δl, 它随 l 增大而减小.

6.17 证明一个球方势阱 (半径 a, 深度 V_0) 恰好具有一条 $l \neq 0$ 的能级的条件是: V_0 与 a 满足

$$\mathrm{j}_{l-1}\left(\sqrt{\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}}a\right) = 0$$

证明 见题 6.2 第 (1) 小题.

6.18 采用平面极坐标系, 求出二维各向同性谐振子势中粒子的能量本征值及本征函数. 讨论能级的简并度.

解 设粒子质量为 μ, 谐振子的频率为 ω, 二维各向同性谐振子 Hamilton 量为

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2\boldsymbol{r}^2 \tag{6.138}$$

采用平面极坐标系, $\boldsymbol{r}$ 用 (ρ,θ) 表示, 定态 Schrödinger 方程 $H\psi = E\psi$ 写为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho} + \rho^2\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right) + \frac{1}{2}\mu\omega^2\rho^2\right]\psi = E\psi \tag{6.139}$$

显然 $l_z = -\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial\varphi}$ 是守恒量. 取 ψ 为 CSCO(H, l_z) 的共同本征态, 即令

$$\psi(\rho,\varphi) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}R(\rho) \tag{6.140}$$

其中 $m = 0, \pm1, \pm2, \cdots$. 将式 (6.140) 代入式 (6.139) 得径向波函数满足的方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{\mathrm{d}^2R}{\mathrm{d}\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}\rho} - \frac{m^2}{\rho^2}R\right] + \frac{1}{2}\mu\omega^2\rho^2R = ER$$

整理后写成

$$\frac{\mathrm{d}^2R}{\mathrm{d}\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}\rho}+\left[\eta^2-\alpha^4\rho^2-\frac{m^2}{\rho^2}\right]R=0 \tag{6.141}$$

其中 $\alpha=\sqrt{\mu\omega/\hbar},\eta=\sqrt{2\mu E/\hbar^2}$. 可见 $\rho=0,\infty$ 为方程的奇点. 下面的求解类似三维各向同性谐振子的球坐标系中径向方程求解.

在 $\rho\to 0$ 时, 方程式 (6.141) 渐近行为

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}-\frac{m^2}{\rho^2}\right)R(\rho)=0 \tag{6.142}$$

对于 $m\neq 0$, 令 $R\propto\rho^s$ 代入式 (6.142), 得 $s^2-m^2=0$, 解得 $s=\pm|m|$. 可见 $\rho\to 0$ 时渐近行为是 $R\propto\rho^{\pm|m|}$. 但是 $\rho\to 0$ 时 $R\propto\rho^{-|m|}$ 的解在 $\rho=0^+$ 附近不可积, 按照波函数概率解释, 该解不是物理解, 应予舍弃. 故当 $\rho\to 0$ 时渐近行为是 $R\propto\rho^{|m|}$. 对于 $m=0$, 式 (6.142) 为 Euler 方程, 其解为 $\ln\rho$ 或常数. 但是 $\psi_0=R_0=\ln\rho$ 的解并不满足 Schrödinger 方程, 原因是

$$\nabla^2\ln\rho=-2\pi\delta(\boldsymbol{\rho})$$

$\boldsymbol{\rho}$ 为 2 维平面的原点为起点的位置矢量. 因而 $(H-E)\psi_0=\dfrac{2\pi\hbar^2}{\mu}\delta(\boldsymbol{\rho})$. 这样 $\ln\rho$ 的解也舍弃. 故 $m=0$ 时的解应取 R 为常数. 这样对 $m=0$ 与 $m\neq 0$ 两种情况, $\rho\to 0$ 时渐近行为可合写为 $R\propto\rho^{|m|}$.

当 $\rho\to\infty$ 时, 方程 (6.141) 渐近行为

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}-\alpha^4\rho^2\right)R(\rho)=0 \tag{6.143}$$

可以验证, 当 $\rho\to\infty$ 时, 满足上式的 $R(\rho)$ 渐近行为是 $R(\rho)\propto\exp\left(\pm\alpha^2\rho^2/2\right)$. 但 $\exp\left(+\alpha^2\rho^2/2\right)$ 不满足束缚态边条件, 弃之. 所以当 $\rho\to\infty$ 时, $R(\rho)\propto\exp\left(-\alpha^2\rho^2/2\right)$.

通过以上分析, $R(\rho)$ 在 $\rho\to 0$、∞ 的渐近行为分别是 $R\propto\rho^{|m|}$ 与 $R(\rho)\propto\exp\left(-\alpha^2\rho^2/2\right)$, 这样可设

$$R(\rho)=\rho^{|m|}\mathrm{e}^{-\alpha^2\rho^2/2}u(\rho) \tag{6.144}$$

式 (6.144) 代入式 (6.141) 得

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\rho^2}+\left(2|m|+1-2\alpha^2\rho^2\right)\frac{1}{\rho}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\rho}+\left[\eta^2-(2|m|+2)\,\alpha^2\right]u=0 \tag{6.145}$$

再令 $\xi=\alpha^2\rho^2$, 上式即可化为

$$\xi\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\xi^2}+(|m|+1-\xi)\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\xi}+\left[\frac{\eta^2}{\alpha^2}-(2|m|+2)\right]u=0 \tag{6.146}$$

此式为合流超几何方程①, 其形式为

$$\xi\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\xi^2}+(\gamma-\xi)\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\xi}-\beta u=0 \tag{6.146'}$$

① 曾谨言, 量子力学 (第四版卷 I)[M], 北京: 科学出版社, 2007, 附录五, p.552~553; 王竹溪, 郭敦仁. 特殊函数概论, 北京: 北京大学出版社, 2000, 第六章.

其中 $\gamma=|m|+1$, $\beta=-\left[\eta^2/\alpha^2-(2|m|+2)\right]/4$. 在 $\xi=0$ 的邻域中式 (6.146′) 的解析解表示为合流超几何函数 $\mathrm{F}(\beta,\gamma,\xi)$, 要得到满足束缚态条件的解, $\mathrm{F}(\beta,\gamma,\xi)$ 须中断为一个多项式. 这要求 β 是一个小于或者等于 0 的整数, 即

$$\beta=-n_\rho,\quad n_\rho=0,1,2,\cdots$$

因此有

$$\beta=-\frac{1}{4}\left[\frac{\eta^2}{\alpha^2}-(2|m|+2)\right]=-n_\rho$$

其中 α、η 见式 (6.141) 的定义. 这样解得能量 E 本征值为

$$E_{n_\rho,m}=(2n_\rho+|m|+1)\,\hbar\omega \tag{6.147}$$

这里 $m=0,\pm1,\pm2,\cdots$ 为磁量子数, $n_\rho=0,1,2,\cdots$ 为径向量子数 (表示径向波函数节点个数). 相应的径向波函数为

$$R_{n_\rho m}=A\rho^{|m|}\mathrm{F}(-n_\rho,|m|+1,\alpha^2\rho^2)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2\rho^2} \tag{6.148}$$

其中 A 为归一化常数. 而总的定态波函数为

$$\psi(\rho,\varphi)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}R(\rho)=A\rho^{|m|}\mathrm{F}(-n_\rho,|m|+1,\alpha^2\rho^2)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2\rho^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}$$

对式 (6.147), 定义主量子数

$$N=2n_r+|m| \tag{6.149}$$

这样式 (6.147) 表示为

$$E_N=(N+1)\,\hbar\omega \tag{6.150}$$

由于 $m=0,\pm1,\pm2,\cdots$, $n_\rho=0,1,2,\cdots$, 故主量子数可取 $N=0,1,2,\cdots$.

对于主量子数为 N 的能级, 按式 (6.149), $|m|=N-2n_r$, n_r 可取 $0,1,2,\cdots$, 所以 $|m|=N,N-2,\cdots,1$ (N 奇) 或 0 (N 偶). 除了 $m=0$ 情况只有一个态以外, 一个 $|m|$ 对应 $\pm m$ 情况的两个态. 也就是当 N 为奇数, m 可以取 $m=\pm N,\pm(N-2),\cdots,\pm1$, 共有 $2\times\left(\dfrac{N-1}{2}+1\right)=N+1$ 个 m. 当 N 为偶数, m 可以取 $m=\pm N,\pm(N-2),\cdots,\pm2,0$, 共有 $2\times\dfrac{N}{2}+1=N+1$ 个 m. 因此, 无论 N 奇数或者偶数, 主量子数为 N 的能级简并度为 $(N+1)$.

6.19 设粒子在无限长的圆筒中运动, 筒半径为 a, 求粒子能量.

解 以圆筒轴线为 z 轴建立柱坐标系, 坐标用 (ρ,φ,z) 表示. Schrödinger 方程为 $H\psi=E\psi$, 其中 Hamiltom 量如下给出:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\right)+\frac{l_z^2}{2\mu\rho^2}+\frac{p_z^2}{2\mu}\right] \tag{6.151}$$

圆筒壁边界条件以及圆筒轴线上自然边界条件分别写为

$$\psi|_{\rho=a}=0,\quad \rho\psi|_{\rho\to0}\to0 \tag{6.152}$$

选 CSCO 为 (H,l_z,p_z). l_z 的本征态为

$$\Phi_m(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\varphi},\quad m=0,\pm1,\pm2,\cdots \tag{6.153}$$

相应的本征值为 $m\hbar$.

p_z 的本征态为平面波

$$Z_k(z)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kz} \tag{6.154}$$

相应的本征值为 $\hbar k$, 而 k 为连续取值的实数量.

取束缚定态 ψ 为 (H,l_z,p_z) 的共同本征态

$$\psi=R(\rho)\Phi_m(\varphi)Z_k(z) \tag{6.155}$$

代入 Schrödinger 方程得径向波函数 $R(\rho)$ 满足的方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\right)+\frac{m^2\hbar^2}{2\mu\rho^2}+\frac{\hbar^2k^2}{2\mu}\right]R(\rho)=ER(\rho) \tag{6.156}$$

边界条件式 (6.152) 用 R 表示, 则为

$$R(a)=0,\quad \rho R(\rho)|_{\rho\to0}\to0 \tag{6.152'}$$

现令

$$\kappa=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}-k^2} \tag{6.157}$$

式 (6.156) 可以化为

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\right)R(\rho)+\left(\kappa^2-\frac{m^2}{\rho^2}\right)R(\rho)=0 \tag{6.158}$$

这是一个 Bessel 方程, 解得此式在圆筒轴线上 $(\rho=0)$ 满足自然边界条件的解为

$$R(\rho)=A\mathrm{J}_{|m|}(\kappa\rho) \tag{6.159}$$

另一解 $\mathrm{N}_{|m|}(\kappa\rho)$ 因不满足自然边界条件舍去. R 还需要满足圆筒壁 $(\rho=a)$ 边界条件 $R(a)=0$, 这给出 $\mathrm{J}_{|m|}(\kappa a)=0$. 令 $\lambda_{|m|\nu}$ 是 $\mathrm{J}_{|m|}(\lambda)=0$ 的第 ν 个根, $\nu=1,2,\cdots$. 则有

$$\kappa_1=\frac{\lambda_{|m|1}}{a},\quad \kappa_2=\frac{\lambda_{|m|2}}{a},\quad \kappa_3=\frac{\lambda_{|m|3}}{a},\cdots \tag{6.160}$$

由此确定粒子的能量

$$E_{k|m|\nu}=\frac{\hbar^2}{2m}\left(k^2+\kappa_\nu^2\right)=\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(k^2+\frac{\lambda_{|m|\nu}^2}{a^2}\right) \tag{6.161}$$

$m=0,\pm1,\pm2,\cdots$, k 为任意实数, 故能谱是连续的. 当给定 E 值后, 要求 $k^2\leqslant 2\mu E/\hbar^2$. 束缚定态径向波函数为

$$R(\rho)=\mathrm{J}_{|m|}(\kappa_\nu\rho) \tag{6.162}$$

而总的波函数如式 (6.155) 所给.

6.20 粒子在半径为 a, 高为 h 的圆筒中运动. 粒子在筒内是自由的. 在筒壁及筒外势能为无限大. 求粒子的能量本征值.

解 以圆筒轴线为 z 轴、圆筒底部取为 $z=0$ 建立柱坐标系. Schrödinger 方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\right)+\frac{l_z^2}{2\mu\rho^2}+\frac{p_z^2}{2\mu}\right]\psi=E\psi \tag{6.163}$$

圆筒壁边界条件以及圆筒轴线上自然边界条件分别写为

$$\psi|_{\rho=a} = \psi|_{z=0,h} = 0, \quad \rho\psi|_{\rho\to 0} \to 0 \tag{6.164}$$

设形式为

$$\psi = R(\rho)\Phi(\varphi)Z(z) \tag{6.165}$$

的解代入上式, 并通过分离变量得到

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\right)+\frac{m^2\hbar^2}{2\mu\rho^2}+\frac{\hbar^2k^2}{2\mu}\right]R(\rho) = ER(\rho) \tag{6.166}$$

$$(l_z^2 - m^2\hbar^2)\Phi(\varphi) = 0 \tag{6.167}$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2}+k^2\right)Z(z) = 0 \tag{6.168}$$

式 (6.167) 的解为

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\varphi}, \quad m = 0, \pm1, \pm2, \cdots \tag{6.169}$$

这是 l_z 的本征函数, 相应的本征值为 $m\hbar$.

式 (6.168) 的解为

$$Z_k(z) = \sin kz \tag{6.170}$$

考虑到圆筒壁边界条件 $Z_k(0) = Z_k(a) = 0$, 另一解 $\cos kz$ 舍去, 而且还要求 $\sin ka = 0$, 这给出

$$k = \frac{n\pi}{a} \tag{6.171}$$

其中 $n = 1, 2, 3, \cdots$. 这样 z 方向的波函数为

$$Z_n(z) = \sin\frac{n\pi}{a}z \tag{6.170'}$$

现令

$$\kappa = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2} - k^2} \tag{6.172}$$

径向方程 (6.166) 可化为

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\right)R(\rho)+\left(\kappa^2-\frac{m^2}{\rho^2}\right)R(\rho) = 0 \tag{6.173}$$

这是 Bessel 方程, 可解得此式在圆筒轴线上 ($\rho = 0$) 满足自然边界条件的解为

$$R(\rho) = A\mathrm{J}_{|m|}(\kappa\rho) \tag{6.174}$$

另一解 $\mathrm{N}_{|m|}(\kappa\rho)$ 因不满足自然边界条件舍去.

考虑到圆筒壁 ($\rho = a$) 边界条件 $R(a) = 0$, 式 (6.174) 给出 $\mathrm{J}_{|m|}(\kappa a) = 0$. 令 $\lambda_{|m|\nu}$ 是 $\mathrm{J}_{|m|}(\lambda) = 0$ 的第 ν 个根, $\nu = 1, 2, \cdots$, 则有

$$\kappa_1 = \frac{\lambda_{|m|1}}{a}, \quad \kappa_2 = \frac{\lambda_{|m|2}}{a}, \quad \kappa_3 = \frac{\lambda_{|m|3}}{a}, \cdots \tag{6.175}$$

由此确定粒子的能量

$$E_{n|m|\nu} = \frac{\hbar^2}{2\mu}\left(k^2+\kappa_\nu^2\right) = \frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{n^2\pi^2}{\hbar^2}+\frac{\lambda_{|m|\nu}^2}{a^2}\right) \tag{6.176}$$

其中 $n=1,2,3,\cdots$, $m=0,\pm1,\pm2,\cdots$, $\lambda_{|m|\nu}$ 是 $\mathrm{J}_{|m|}(\lambda)=0$ 的第 ν 个根, $\nu=1,2,\cdots$. 束缚定态径向波函数为

$$R_{|m|\nu}(\rho)=\mathrm{J}_{|m|}(\kappa_\nu\rho) \tag{6.177}$$

而总的定态波函数为 $\psi=\Phi_m(\varphi)Z_n(z)R_{|m|\nu}$, 而 Φ_m, Z_n, $R_{|m|\nu}$ 分别如式 (6.169)、式 (6.170′) 和式 (6.177) 所给.

说明 题 6.19 选 CSCO 为 (H,l_z,p_z). 本题若令 $H_z=\dfrac{1}{2\mu}p_z^2$, 则可选 CSCO 为 (H,l_z,H_z).

6.21 设 $V(r)=-V_0\exp(-r/a)(V_0>0)$, 求基态 $(l=0)$ 的波函数.

提示 作变量替换 $\xi=\exp(-r/2a)$

解 设粒子质量为 μ. 根据势场球对称性的特点, 粒子的束缚定态波函数表示为

$$\psi(r,\theta,\varphi)=R_l(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) \tag{6.178}$$

由 H-F 定理[①] 知 $\dfrac{\partial E_{n_r l}}{\partial l}>0$, 故基态必是 s 态 $(l=0)$. s 态径向波函数 R 满足径向 Schrödinger 方程

$$\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}rR+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E-V(r)\right]R=0 \tag{6.179}$$

令 $R(r)=\chi(r)/r$, 并将势函数 $V(r)$ 代入得

$$\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}r^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E+V_0\mathrm{e}^{-r/a}\right]\chi=0 \tag{6.180}$$

作变量代换

$$\xi=\lambda\mathrm{e}^{-\beta r} \tag{6.181}$$

其中 λ, β 为待定参数, 则 $\mathrm{d}\xi=-\lambda\beta\mathrm{e}^{-\beta r}\mathrm{d}r=-\beta\xi\mathrm{d}r$, 因而

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}=\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}=-\beta\xi\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi},\quad \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}=\beta\xi\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\beta\xi\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}=\beta^2\xi^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}+\beta^2\xi\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}$$

代入式 (6.180) 得

$$\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}\xi^2}+\frac{1}{\xi}\frac{\mathrm{d}\chi}{\mathrm{d}\xi}+\left[\frac{2\mu V_0}{\hbar^2\beta^2}\left(\frac{\xi}{\lambda}\right)^{\frac{1}{a\beta}}\frac{1}{\xi^2}+\frac{2\mu E}{\hbar^2\beta^2}\cdot\frac{1}{\xi^2}\right]\chi=0 \tag{6.182}$$

下面令

$$\beta=\frac{1}{2a},\quad \lambda=2a\sqrt{2\mu V_0}/\hbar \tag{6.183}$$

因 $r\to\infty$, $V(r)\to0$, 对于束缚态解必有 $E<0$, 记

$$\nu=\frac{\sqrt{-8\mu Ea^2}}{\hbar} \tag{6.184}$$

则径向 Schrödinger 方程化成 ν 阶 Bessel 方程

$$\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}\xi^2}+\frac{1}{\xi}\frac{\mathrm{d}\chi}{\mathrm{d}\xi}+\left(1-\frac{\nu^2}{\xi^2}\right)\chi=0 \tag{6.185}$$

对于束缚态, 要求 $r\to\infty$ 时, $R\to0$. 此条件也就是 $\xi\to0$, $\chi\to0$, 满足此条件的解为

$$\chi=A\mathrm{J}_\nu(\xi) \tag{6.186}$$

① 曾谨言, 量子力学 (第四版卷 I)[M], 北京: 科学出版社, 2007, p.218~225.

另一解 $\mathrm{N}_\nu(\xi)$ 不满足束缚态条件, 故舍去.

另一方面, $r \to 0$ 处自然边界条件 $\chi \to 0$ 给出

$$\mathrm{J}_\nu(\lambda) = 0 \tag{6.187}$$

取满足此式的最小 ν 值, 按式 (6.184) 给出基态能量

$$E_\nu = -\frac{\nu^2\hbar^2}{8\mu a^2} \tag{6.188}$$

按照上面 $R(r) = \chi(r)/r$, 以及式 (6.178)、式 (6.181) 和式 (6.186), 相应的基态波函数为

$$\psi = \frac{A}{r}\mathrm{J}_\nu\left(\lambda \mathrm{e}^{-r/2a}\right) \tag{6.189}$$

其中 A 为归一化常数.

6.22 设 $V(r) = -\dfrac{a}{r} + \dfrac{A}{r^2}(a, A > 0)$, 粒子质量为 μ. 试求粒子的能量本征值和本征函数.

解 根据势场球对称性的特点, 取粒子的束缚定态波函数为

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R_l(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta, \varphi) \tag{6.190}$$

这相当于选体系的 CSCO 为 $(H, \boldsymbol{L}^2, L_z)$. 上式中 Y_{lm} 为球谐函数, 而径向波函数 $R_l(r)$ 满足如下径向 Schrödinger 方程

$$\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}r^2\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r} + \left\{\frac{2\mu}{\hbar^2}[E - V(r)] - \frac{l(l+1)}{r^2}\right\}R = 0 \tag{6.191}$$

将势函数 $V(r)$ 代入得

$$\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}r^2\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r} + \left\{\frac{2\mu E}{\hbar^2} + \frac{2\mu a}{\hbar^2 r} - \left[l(l+1) + \frac{2\mu A}{\hbar^2}\right]\frac{1}{r^2}\right\}R = 0 \tag{6.192}$$

令 $R(r) = \chi(r)/r$ 代入式 (6.192) 得

$$\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}r^2} + \left\{\frac{2\mu E}{\hbar^2} + \frac{2\mu a}{\hbar^2 r} - \left[l(l+1) + \frac{2\mu A}{\hbar^2}\right]\frac{1}{r^2}\right\}\chi = 0 \tag{6.193}$$

上式可写为

$$\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}r^2} + \left\{\frac{2\mu E}{\hbar^2} + \frac{2\mu a}{\hbar^2 r} - \frac{l'(l'+1)}{r^2}\right\}\chi = 0 \tag{6.194}$$

其中 l' 满足 $\dfrac{2\mu A}{\hbar^2} + l(l+1) = l'(l'+1)$, 从中解出 l' 得

$$l' = \pm\sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + \frac{2\mu A}{\hbar^2}} - \frac{1}{2}$$

这里 l' 应取正值, 使得满足当 $\lambda \to 0$ 时, $l' \to l$. 因而

$$l' = \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 + \frac{2\mu A}{\hbar^2}} - \frac{1}{2} \tag{6.195}$$

式 (6.194) 除了 l' 值不同, 与解氢原子束缚态的径向方程完全相同. 这样利用氢原子束缚态的求解办法, 定义主量子数

$$n = n_r + l' + 1 \tag{6.196}$$

其中 $n_r=0,1,2,\cdots$ 为径向波函数的节点个数, 而 l' 由式 (6.195) 给出, 故 n 一般不是整数. 粒子的能量本征值

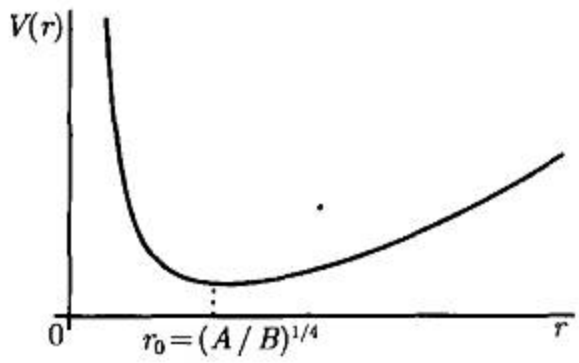

图 6.1　中心势 $V(r)=Br^2+A/r^2$

$$E_n=-\frac{\mu a^2}{2\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2}$$
$$=-\frac{2\mu a^2}{\hbar^2}\left[2n_r+1+\sqrt{(2l+1)^2+8\mu A/\hbar^2}\right]^{-2} \tag{6.197}$$

相应的径向波函数

$$R_{n\,l'}(r)=N'_{nl'}\mathrm{e}^{-\frac{\xi}{2}}\xi^{l}\mathrm{F}(-n+l'+1,2l'+2,\xi) \tag{6.198}$$

其中 F 为合流超几何函数, $N'_{nl'}$ 为归一化系数. 将此径向波函数代入式 (6.190) 即为粒子总的波函数.

6.23　设 $V(r)=Br^2+A/r^2$ (其中$A>0$、$B>0$ 为常数量, 见图 6.1), 粒子质量为 μ. 求粒子的能量本征值.

解　根据势场球对称性的特点, 可用分离变量法在球坐标系下进行求解. 令粒子的束缚定态波函数为

$$\psi(r,\theta,\varphi)=R_l(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) \tag{6.199}$$

代入定态 Schrödinger 方程即得径向波函数 $R_l(r)$ 满足的方程为

$$\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}r^2\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}+\left\{\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E-Br^2\right)-\left[l(l+1)+\frac{2\mu A}{\hbar^2}\right]\frac{1}{r^2}\right\}R=0 \tag{6.200}$$

上式可写为

$$\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}r^2\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}+\left[\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E-Br^2\right)-\frac{l'(l'+1)}{r^2}\right]R=0 \tag{6.201}$$

其中 l' 与 l 的关系与题 6.22 相同, l' 由式 (6.195) 给出, 即

$$l'=\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2+\frac{2\mu A}{\hbar^2}}-\frac{1}{2} \tag{6.202}$$

式 (6.201) 与三维各向同性谐振子的径向方程相同. 这里的频率 ω 由 $\frac{1}{2}\mu\omega^2=B$ 确定, 即

$$\omega=\sqrt{\frac{2B}{\mu}} \tag{6.203}$$

定义主量子数

$$N=2n_r+l' \tag{6.204}$$

其中 $n_r=0,1,2,\cdots$ 为径向波函数的节点个数, 而 l' 由式 (6.202) 给出. 这样利用三维各向同性谐振子的结果即得粒子的能级为

$$E_{n_rl}=\hbar\sqrt{\frac{B}{2\mu}}\left[4n_r+2+\sqrt{(2l+1)^2+\frac{8\mu A}{\hbar^2}}\right] \tag{6.205}$$

6.24　在原子核 (荷电 Ze) 周围运动的 Z 电子体系, Hamilton 量 (忽略自旋与相对论效应) 表示为

$$H=T+V$$

其中

$$T=\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{2\mu}\boldsymbol{p}_i^2 \quad \text{(动能算符)}$$

$$V=-Ze^2\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{r_i}+e^2\sum_{i<j}^{N}\frac{1}{|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j|}$$

对于体系的任一束缚态, 证明 Virial 定理表示为

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

证法一 令 $(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N)=x_\alpha$, $(\boldsymbol{p}_1,\boldsymbol{p}_2,\cdots,\boldsymbol{p}_N)=p_\alpha$, 其中 $\alpha=1,2,3,\cdots,3N$, 这样 Hamilton 量中的动能项可以表示为

$$T=\frac{1}{2\mu}\sum_\alpha p_\alpha^2=\frac{1}{2\mu}\sum_\alpha\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x_\alpha}\right)^2 \tag{6.206}$$

作标度变换 $x_\alpha\to\lambda x_\alpha$, λ 为正实数, 则从 V 的表达式显知 V 的变换为

$$V(\lambda x_\alpha)=\frac{1}{\lambda}V(x_\alpha) \tag{6.207}$$

即 V 为各 x_α 的 $\nu=-1$ 次齐次函数. 也就有

$$\sum_{\alpha=1}^{3N}x_\alpha\frac{\partial V}{\partial x_\alpha}=-V \tag{6.208}$$

算符 $F=x_\alpha p_\alpha$ 在束缚定态下的平均值有如下公式:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle x_\alpha p_\alpha\rangle=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle[x_\alpha p_\alpha,H]\rangle \tag{6.209}$$

而其中 $F=x_\alpha p_\alpha$ 与 Hamilton 量 H 的对易关系如下:

$$\begin{aligned}[x_\alpha p_\alpha,H]&=[x_\alpha p_\alpha,T+V]=\left[x_\alpha p_\alpha,\frac{p_\beta p_\beta}{2\mu}+V(r)\right]\\&=\frac{1}{2\mu}[x_\alpha p_\alpha,p_\beta p_\beta]+[x_\alpha p_\alpha,V(r)]=\frac{1}{2\mu}[x_\alpha p_\alpha,p_\beta p_\beta]+x_\alpha[p_\alpha,V(r)]\\&=\frac{1}{2\mu}\{p_\beta[x_\alpha,p_\beta]+[x_\alpha,p_\beta]p_\beta\}p_\alpha+x_{\mathrm{i}}[p_\alpha,V(r)]\\&=\frac{1}{2\mu}\{p_\beta\mathrm{i}\hbar\delta_{i\beta}+\mathrm{i}\hbar\delta_{\alpha\beta}p_\beta\}p_\alpha+x_\alpha(-\mathrm{i}\hbar)\frac{\partial}{\partial x_i}V(r)\\&=\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu}p_\alpha p_\alpha-\mathrm{i}\hbar x_\alpha\frac{\partial}{\partial x_\alpha}V(r)\end{aligned} \tag{6.210}$$

上面重复指标表示求和. 将式 (6.210) 代入式 (6.209) 即得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle x_\alpha p_\alpha\rangle=\langle p_\alpha p_\alpha/\mu\rangle-\left\langle x_\alpha\frac{\partial}{\partial x_\alpha}V\right\rangle \tag{6.211}$$

对于定态, 题 5.2 给出 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle x_\alpha p_\alpha\rangle=0$, 上式变为

$$\langle p_\alpha p_\alpha/\mu\rangle=\left\langle x_\alpha\frac{\dot{\partial}}{\partial x_\alpha}V\right\rangle,\quad \text{即 } 2\langle T\rangle=\left\langle x_\alpha\frac{\partial}{\partial x_\alpha}V\right\rangle \tag{6.211$'$}$$

即 Virial 定理. 式 (6.208) 代入上式即得

$$2\langle T\rangle = -\langle V\rangle \tag{6.212}$$

由于 $\langle T+V\rangle = E$, 所以

$$\langle T\rangle = -\frac{1}{2}\langle V\rangle = -E \tag{6.213}$$

得证.

证法二 设某个束缚定态的归一化波函数为

$$\psi(x_\alpha) = \psi(x_1, x_2, \cdots, x_{3N}) \tag{6.214}$$

作标度变换 $x_\alpha \to \xi_\alpha = \lambda x_\alpha$, 归一化的试探波函数为

$$\psi(\lambda, x_\alpha) = \lambda^{3N/2}\psi(\lambda x_1, \lambda x_2, \cdots, \lambda x_{3N}) = \lambda^{3N/2}\psi(\lambda x_\alpha) \tag{6.215}$$

以 $\langle\ \rangle_\lambda$ 表示 $\psi(\lambda, x_\alpha)$ 态下平均值, $\langle\ \rangle$ 表示 $\psi(x_\alpha)$ 态下平均值, 容易求出

$$\begin{aligned}\langle T\rangle_\lambda &= \frac{\lambda^{3N}}{2\mu}\int \psi^*(\lambda x_\alpha)\sum_\alpha\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x_\alpha}\right)^2\psi(\lambda x_\alpha)\mathrm{d}x_1\cdots\mathrm{d}x_{3N}\\ &= \frac{\lambda^2}{2\mu}\int \psi^*(\xi_\alpha)\sum_\alpha\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial \xi_\alpha}\right)^2\psi(\xi_\alpha)\mathrm{d}\xi_1\cdots\mathrm{d}\xi_{3N} = \lambda^2\langle T\rangle\end{aligned} \tag{6.216}$$

其中 $\xi_\alpha = \lambda x_\alpha$. 类似地可得

$$\langle V\rangle_\lambda = \lambda\langle V\rangle \tag{6.217}$$

因此

$$E(\lambda) = \langle T+V\rangle_\lambda = \lambda^2\langle T\rangle + \lambda\langle V\rangle \tag{6.218}$$

可见作标度变换 $x_\alpha \to \xi_\alpha = \lambda x_\alpha$ 后, E 为参变量 λ 的函数.

按照变分原理, 束缚态能量应该取变分极小值, 满足条件

$$\frac{\partial E(\lambda)}{\partial\lambda} = 0$$

由此得到

$$2\lambda\langle T\rangle + \langle V\rangle = 0 \tag{6.219}$$

而真正的束缚态波函数 $\lambda = 1$. 上式中取 $\lambda = 1$, 即得

$$\langle T\rangle = -\frac{1}{2}\langle V\rangle = -E \tag{6.220}$$

证毕.

说明 还可仿教材证明单个粒子 Virial 定理的作法[①], 利用 Hellmann-Feynman 定理证明.

6.25 粒子在 Hulthen 势场

$$V(r) = -\frac{V_0}{\exp(r/a)-1},\quad V_0, a > 0$$

中运动, 证明其束缚态能级 E_n 满足不等式

$$E_n > -\frac{\mu V_0^2 a^2}{2n^2\hbar^2},\quad n = 1, 2, 3, \cdots$$

① 曾谨言, 量子力学 (第四版卷 I)[M], 北京: 科学出版社, 2007, p.220~221.

提示　与下面 Coulomb 势场中能级比较

$$V_c(r) = -V_0 a/r$$

证明　将题给 Hulthen 势场分母里指数函数按幂级数展开

$$V(r) = -V_0 \Big/ \left[\frac{r}{a} + \frac{1}{2!}\left(\frac{r}{a}\right)^2 + \cdots\right] = V_c(r) \Big/ \left[1 + \frac{1}{2!}\left(\frac{r}{a}\right) + \frac{1}{3!}\left(\frac{r}{a}\right)^2 + \cdots\right] \tag{6.221}$$

上式分母恒大于 1, 因此[①]

$$|V(r)| < |V_c(r)|, \quad V(r) > V_c(r) \tag{6.222}$$

和类氢离子能级公式比较, 可以看出所证不等式

$$E_n > -\frac{\mu V_0^2 a^2}{2n^2\hbar^2}, \quad n = 1, 2, 3, \cdots$$

的右边正好是 Coulomb 势场中 $V_c(r) = -V_0 a/r$ 的束缚定态能级, 其中

$$n = n_r + l + 1 \tag{6.223}$$

其中 $n_r = 0, 1, 2, \cdots$ 为径向波函数的节点个数, 而 $l = 0, 1, 2, \cdots$ 为角量子数.

由于 $V(r) > V_c(r)$, 根据 H-F 定理[②] 可以证明, (n_r, l) 相同的束缚态中, Hulthen 势场的能级高于 Coulomb 势场的能级. 因此所证不等式成立.

说明　Coulomb 势场存在偶然简并, $n_r + l + 1 = n$ 的所有束缚态能量相等. 本题的结论是对于所有满足 $n_r + l + 1 = n$ 的 (n_r, l) 对应的束缚态能量均高于 $-\dfrac{\mu V_0^2 a^2}{2n^2\hbar^2}$.

6.26　荷电 q 的一维谐振子处于均匀电场 $\mathcal{E}$ 中, Hamilton 量为

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

利用 HF 定理, 求其束缚能级 E_n.

提示　利用 Heisenberg 方程, 计算 $\langle x\rangle_n$, 然后取 $\mathcal{E}$ 为参数, 利用 HF 定理.

解　关于 p 的 Heisenberg 方程

$$\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[p, H] = -m\omega^2 x + q\mathcal{E} \tag{6.224}$$

一维定态问题的能级非简并. 上式两边对束缚能级 E_n 对应的本征态 (必可归一) 求平均得

$$-m\omega^2 \langle x\rangle_n + q\mathcal{E} = 0, \quad \langle x\rangle_n = \frac{q\mathcal{E}}{m\omega^2} \tag{6.225}$$

再利用 HF 定理得

$$\frac{\partial E_n}{\partial \mathcal{E}} = -q\langle x\rangle_n = -\frac{q^2\mathcal{E}}{m\omega^2} \tag{6.226}$$

上式对 $\mathcal{E}$ 积分, 利用已知的谐振子能级, 即得

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

---

① 也可以构造函数 $f(x) = \mathrm{e}^x - 1 - x$. 考察其导数可知该函数在 0 到 $+\infty$ 范围内是增函数, 又 $f(0) = 0$, 从而对于 $x > 0$, $f(x) = \mathrm{e}^x - 1 - x > 0$, 或者 $\mathrm{e}^x - 1 > x$. 由此一样得到 $|V(r)| < |V_c(r)|$.

② 曾谨言, 量子力学 (第四版卷 I)[M], 北京: 科学出版社, 2007, p.218~225.

6.27 质量为 μ 的粒子在中心力场中运动, $V(r)=\lambda r^{\nu}(\nu>-2,\lambda/\nu>0)$. 试利用 HF 定理及 Virial 定理分析能级构造式对于 λ, μ, $\hbar$ 的依赖关系.

解 按 Virial 定理, 对于束缚定态有平均值关系 $2\langle T\rangle=\langle \boldsymbol{r}\cdot\nabla V\rangle$, 代入题给势函数则有

$$2\langle T\rangle=\nu\langle V\rangle,\quad \langle V\rangle=\frac{2}{\nu}\langle T\rangle \tag{6.227}$$

所以

$$E=\langle T+V\rangle=\frac{2+\nu}{\nu}\langle T\rangle \tag{6.228}$$

由式 (6.227)、式 (6.228) 得

$$\langle T\rangle=\frac{\nu}{2+\nu}E,\quad \langle V\rangle=\frac{2}{2+\nu}E \tag{6.229}$$

在本题中, 对取定的 ν, 有关的参数为 λ, μ, $\hbar$. 由 HF 定理, 在束缚定态下

$$\frac{\partial E}{\partial\lambda}=\left\langle\frac{\partial H}{\partial\lambda}\right\rangle=\langle r^{\nu}\rangle=\frac{1}{\lambda}\langle V\rangle=\frac{2}{2+\nu}\frac{1}{\lambda}E \tag{6.230}$$

$$\frac{\partial E}{\partial\mu}=\left\langle\frac{\partial H}{\partial\mu}\right\rangle=-\frac{1}{\nu}\langle T\rangle=-\frac{\nu}{2+\nu}\frac{1}{\mu}E \tag{6.231}$$

$$\frac{\partial E}{\partial\hbar}=\left\langle\frac{\partial H}{\partial\hbar}\right\rangle=\frac{2}{\hbar}\langle T\rangle=\frac{\nu}{2+\nu}\frac{2}{\hbar}E \tag{6.232}$$

或者

$$\frac{\partial\ln E}{\partial\lambda}=\frac{2}{2+\nu}\frac{1}{\lambda},\quad \frac{\partial\ln E}{\partial\mu}=-\frac{\nu}{2+\nu}\frac{1}{\mu},\quad \frac{\partial\ln E}{\partial\hbar}=\frac{\nu}{2+\nu}\frac{2}{\hbar}$$

也就有

$$\mathrm{d}\ln E=\frac{2}{2+\nu}\frac{1}{\lambda}\mathrm{d}\lambda-\frac{\nu}{2+\nu}\frac{1}{\mu}\mathrm{d}\mu+\frac{\nu}{2+\nu}\frac{2}{\hbar}\mathrm{d}\hbar$$

对上式积分, 即得

$$E=C\lambda^{\frac{2}{2+\nu}}\left(\frac{\hbar^2}{2\mu}\right)^{\frac{\nu}{2+\nu}}$$

其中 C 为积分常数, 与 λ, μ, $\hbar$ 无关.

说明 读者可以就 Coulomb 势以及谐振子势情形验证上面能级构造式的正确性.

6.28 一维粒子在势场 $V(x)=V_0\left|\frac{x}{a}\right|^{\nu}$ $(V_0,a>0)$ 中运动, 讨论 $\nu\to\infty$ 时能级对各参数的依赖关系.

解 按题设 Hamilton 量为

$$H=T+V=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V_0\left|\frac{x}{a}\right|^{\nu} \tag{6.233}$$

设 x_0 表示体系的特征长度, $x_0>0$. 令 $y=x/x_0$, 则 Hamilton 量又可通过无量纲变量 y 表示为

$$H=T+V=-\frac{\hbar^2}{2\mu x_0^2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2}+V_0\left(\frac{x_0}{a}\right)^{\nu}|y|^{\nu} \tag{6.234}$$

在某个特定的束缚定态下

$$\langle T\rangle=\frac{\hbar^2}{2\mu x_0^2}c_1,\quad \langle V\rangle=V_0\left(\frac{x_0}{a}\right)^{\nu}c_2 \tag{6.235}$$

c_1, c_2 为无量纲常数. 对题给的幂律势, 按照 Virial 定理, $\langle T\rangle$ 与 $\langle V\rangle$ 之间有一确定的比例关系, 也就是

$$2\langle T\rangle=\nu\langle V\rangle \tag{6.236}$$

这样

$$\frac{\hbar^2}{2\mu x_0^2} = V_0 \left(\frac{x_0}{a}\right)^{\nu} \frac{\nu c_2}{2c_1}$$

由此式解得特征长度

$$x_0 = f_1 \left(\frac{\hbar^2 a^{\nu}}{\mu V_0}\right)^{\frac{1}{\nu+2}} \tag{6.237}$$

其中 f_1 为无量纲常数.

按照 Virial 定理, $E = \langle T \rangle + \langle V \rangle = \dfrac{\nu+2}{\nu} \langle T \rangle$, 再根据式 (6.235), 可知体系的特征能量

$$\epsilon = f_2 \left(\frac{\hbar^2}{\mu}\right)^{\frac{\nu}{\nu+2}} V_0^{\frac{2}{\nu+2}} a^{-\frac{2\nu}{\nu+2}} \tag{6.238}$$

其中 f_2 为无量纲常数.

当 $\nu \to \infty$, 由式 (6.237)、式 (6.238) 得

$$x_0 = f_1' a, \quad \epsilon = f_2' \frac{\hbar^2}{\mu a^2} \tag{6.239}$$

其中 f_1', f_2' 为无量纲常数, 可见当 $\nu \to \infty$ 时特征长度和能量都将与 V_0 无关. 事实上, 由题给位势不难看出

$$\nu \to \infty, \quad V(x) \to \begin{cases} 0, & |x| < 0 \\ \infty, & |x| > a \end{cases}$$

这正是宽为 $2a$ 的无限深方势阱, 能级为

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8\mu a^2}, \quad n = 1, 2, 3, \cdots$$

这也与式 (6.239) 一致.

说明 对本题一维定态问题, 同样也可用题 6.27 的方法得到能级构造式.

第 7 章　粒子在电磁场中的运动

7.1　证明在磁场 $\boldsymbol{B}$ 中, 质量为 μ 的带电粒子的速度算符的各分量, 满足下述的对易关系:

$$[v_x, v_y] = \frac{\mathrm{i}\hbar q}{\mu^2 c} B_z, \quad [v_y, v_z] = \frac{\mathrm{i}\hbar q}{\mu^2 c} B_x, \quad [v_z, v_x] = \frac{\mathrm{i}\hbar q}{\mu^2 c} B_y \tag{7.1}$$

即 $\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{v} = \dfrac{\mathrm{i}\hbar q}{\mu^2 c} \boldsymbol{B}$. 再证明

$$\left[\boldsymbol{v}, \boldsymbol{v}^2\right] = \frac{\mathrm{i}\hbar q}{\mu^2 c} (\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B} - \boldsymbol{B} \times \boldsymbol{v}) \tag{7.2}$$

在只有静磁场的情况下, 可把 Hamilton 量写成 $H = \dfrac{\mu}{2} \boldsymbol{v}^2$, 由此证明

$$\mu \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \boldsymbol{v} = \frac{q}{2c} (\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B} - \boldsymbol{B} \times \boldsymbol{v}) \tag{7.3}$$

解释其物理意义.

证明　带电粒子在磁场 $\boldsymbol{B}$ 中运动的 Hamilton 量为 $H = \dfrac{1}{2\mu} \left(\boldsymbol{p} - \dfrac{q}{c} \boldsymbol{A}\right)^2$, 其中 $\boldsymbol{p}(p_x, p_y, p_z)$ 是正则动量, 而 $\boldsymbol{A}$ 为相应于磁感应强度 $\boldsymbol{B}$ 的磁矢势. 根据正则方程 $v_x = \dot{x} = \dfrac{\partial H}{\partial p_x}$ 得粒子 x 方向速度算符如下给出:

$$v_x = \frac{1}{\mu} \left(p_x - \frac{q}{c} A_x\right)$$

同理可以得到

$$v_y = \frac{1}{\mu} \left(p_y - \frac{q}{c} A_y\right), \quad v_z = \frac{1}{\mu} \left(p_z - \frac{q}{c} A_z\right)$$

这样计算 v_x 与 v_y 的对易式

$$[v_x, v_y] = \frac{1}{\mu^2} \left[p_x - \frac{q}{c} A_x, p_y - \frac{q}{c} A_y\right] = \frac{1}{\mu^2} [p_x, p_y] - \frac{q}{\mu^2 c} [p_x, A_y] - \frac{q}{\mu^2 c} [A_x, p_y] + \frac{q^2}{\mu^2 c} [A_x, A_y]$$

正则动量分量 p_x 与 p_y 相互对易, 又 $\boldsymbol{A}$ 仅是坐标的函数, 而坐标相互对易, 故 $[A_x, A_y] = 0$, 这样

$$[v_x, v_y] = -\frac{q}{\mu^2 c} \left[\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial}{\partial x}, A_y\right] - \frac{q}{\mu^2 c} \left[A_x, \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial}{\partial y}\right] = \frac{q}{\mu^2 c} \cdot \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}\right) = \frac{\mathrm{i}q\hbar}{\mu^2 c} B_z$$

上面利用了 $\boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A}$. 这样我们证明了 $[v_x, v_y] = \dfrac{\mathrm{i}\hbar q}{\mu^2 c} B_z$. 此即式 (7.1) 的第一式, 通过 x, y, z 轮换写出另外 2 式, 这样我们证明了式 (7.1). 该式又可以统一写为

$$[v_i, v_j] = \frac{\mathrm{i}\hbar q}{\mu^2 c} \varepsilon_{ijk} B_k \tag{7.4}$$

上述对易关系式也可以写为

$$\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{v} = \frac{\mathrm{i}\hbar q}{\mu^2 c} \boldsymbol{B} \tag{7.4'}$$

由式 (7.4) 得

$$\begin{aligned} \left[v_i, \boldsymbol{v}^2\right] &= [v_i, v_j v_j] = v_j [v_i, v_j] + [v_i, v_j] v_j = v_j \frac{\mathrm{i}\hbar q}{\mu^2 c} \varepsilon_{ijk} B_k + \frac{\mathrm{i}\hbar q}{\mu^2 c} \varepsilon_{ijk} B_k v_j \\ &= \frac{\mathrm{i}\hbar q}{\mu^2 c} (\varepsilon_{ijk} v_j B_k + \varepsilon_{ijk} B_k v_j) = \frac{\mathrm{i}\hbar q}{\mu^2 c} (\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B} - \boldsymbol{B} \times \boldsymbol{v})_i \end{aligned}$$

即有 $[\boldsymbol{v},\boldsymbol{v}^2]=\dfrac{\mathrm{i}\hbar q}{\mu^2 c}(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}-\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v})$, 此即式 (7.2).

在只有磁场的情况下, 可把 Hamilton 量写成 $H=\dfrac{\mu}{2}\boldsymbol{v}^2$, 由式 (7.2) 得

$$\mu\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}=\frac{\mu}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{v},H]=\frac{\mu^2}{2\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{v},\boldsymbol{v}^2]=\frac{q}{2c}(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}-\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v})$$

此即式 (7.3), 这是带电粒子在磁场中运动受磁场力作用的量子力学方程.

7.2 荷电 q 质量为 μ 的粒子在均匀恒定外磁场 $\boldsymbol{B}$ 中运动, Hamilton 量为

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

速度算符 $\hat{\boldsymbol{v}}$ 的三个分量满足的对易式, 见上题. 假设 $\boldsymbol{B}$ 沿 z 轴方向, 只考虑粒子在 xy 平面中的运动, 则有

$$[v_x,v_y]=\frac{\mathrm{i}\hbar q}{\mu^2 c}B_z$$

设 $q>0$, 令

$$\hat{Q}=\sqrt{\frac{\mu^2 c}{\hbar qB}}\hat{v}_x,\quad \hat{P}=\sqrt{\frac{\mu^2 c}{\hbar qB}}\hat{v}_y$$

则

$$\left[\hat{Q},\hat{P}\right]=\mathrm{i}$$

而

$$H=\frac{\mu}{2}\left(\hat{v}_x^2+\hat{v}_y^2\right)=\frac{1}{2}\hbar\omega_c\left(\hat{Q}^2+\hat{P}^2\right)$$

式中 $\omega_c=|q|B/\mu c$ 为回旋角频率. 上式与谐振子的 Hamilton 量相似, 由此求出其能量本征值 Landau 能级.

$$E_n=(n+1/2)\hbar\omega_c$$

解 设磁场沿 z 轴方向, $B_x=0,B_y=0,B_z=B$. 矢势 $\boldsymbol{A}$ 可取为 $A_x=-By/2$, $A_y=Bx/2$, $A_z=0$. 这样粒子 Hamilton 量是

$$\hat{H}=\frac{1}{2\mu}\left\{\left(p_x+\frac{qB}{2c}y\right)^2+\left(p_y-\frac{qB}{2c}x\right)^2+p_z^2\right\} \tag{7.5}$$

$$=\frac{\mu}{2}\left\{v_x^2+v_y^2+v_z^2\right\} \tag{7.6}$$

由于磁场沿 z 轴方向, $B_x=0,B_y=0,B_z=B$, 根据题 7.1 的式 (7.1), 速度算符间的对易式是

$$[v_x,v_y]=\frac{\mathrm{i}\hbar q}{\mu^2 c}B,\quad [v_y,v_z]=0,\quad [v_z,v_x]=0 \tag{7.7}$$

不妨设 $q>0$, 令

$$Q=\left(\frac{\mu^2 c}{\hbar|q|B}\right)^{\frac{1}{2}}v_x,\quad P=\left(\frac{\mu^2 c}{\hbar|q|B}\right)^{\frac{1}{2}}v_y \tag{7.8}$$

如果 $q<0$, 则 Q,P 的定义互换.

根据式 (7.7) 即有

$$[Q,P]=\mathrm{i} \tag{7.9}$$

而 Hamilton 量可写为

$$H=\frac{\hbar|q|B}{2\mu c}\left(Q^2+P^2\right)+\frac{1}{2\mu}p_z^2=\frac{1}{2}\hbar\omega\left(Q^2+P^2\right)+\frac{1}{2\mu}p_z^2$$

其中 $\omega=|q|B/(\mu c)$, 称为粒子回旋 (cyclotron) 频率 (2 倍 Larmor 频率). 根据式 (7.7,7.8), z 方向动量 $p_z(\mu v_z)$ 分别和 Q、P 对易. Hamilton 量第一项 (与第二项对易) 以及对易式与一维谐振子完全类似, 这样写出其本征值为

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\quad n=0,1,2,3,\cdots \tag{7.10}$$

称为 Landau 能级. 而 p_z 的本征值可取 $-\infty,+\infty$ 间的任何值, 因此总的能量本征值为

$$E=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega+\frac{1}{2\mu}p_z^2 \tag{7.11}$$

其中 $\omega=|q|B/(\mu c)$, $n=0,1,2,3,\cdots$, $-\infty<p_z<+\infty$.

磁场使得粒子获得能量为 $(2n+1)B\,|q|\,\hbar/2\mu$, 这意味着该粒子具有磁矩 $-(2n+1)\,|q|\,\hbar/2\mu$; 无论电荷是正还是负, 这磁矩方向与外磁场方向相反, 具有抗磁性.

讨论 1 (能量本征函数, 磁矢势取对称规范). 定态 Schrödinger 方程为

$$\hat{H}\Psi(x,y,z)=E\Psi(x,y,z) \tag{7.12}$$

由式 (7.6) 得, Hamilton 量可写为

$$\begin{aligned}\hat{H}&=\frac{\mu}{2}\left(v_x^2+v_y^2+v_z^2\right)=\frac{1}{2\mu}\left\{\left(p_x+\frac{qB}{2c}y\right)^2+\left(p_y-\frac{qB}{2c}x\right)^2+p_z^2\right\}\\&=\frac{1}{2\mu}\left(\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2\right)+\omega\left(\hat{p}_x\hat{y}-\hat{p}_y\hat{x}\right)+\frac{\mu}{2}\omega^2\left(x^2+y^2\right)+\frac{1}{2\mu}\hat{p}_z^2\\&=\frac{1}{2\mu}\left(\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2\right)+\omega L_z+\frac{\mu}{2}\omega^2\left(x^2+y^2\right)+\frac{1}{2\mu}\hat{p}_z^2\end{aligned} \tag{7.13}$$

可取对易的力学量完全集 (CSCO) 为 $\hat{H}$、p_z 与 L_z. 而 $\Psi(x,y,z)$ 取为 $\hat{H}$、p_z 与 L_z 的共同本征态, 取下列分离变量的形式

$$\Psi(x,y,z)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_z z}R(\rho) \tag{7.14}$$

其中 $m=0,\pm1,\pm2,\cdots$, $-\infty<p_z<+\infty$. 将上式代入式 (7.12) 得

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{\partial^2R}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial R}{\partial\rho}-\frac{m^2}{\rho^2}R\right]+\frac{\mu}{2}\omega^2\rho^2=\left(E-m\hbar\omega-\frac{1}{2\mu}p_z^2\right)R \tag{7.15}$$

整理后写成

$$\frac{\mathrm{d}^2R}{\mathrm{d}\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}\rho}+\left[\eta^2-\alpha^4\rho^2-\frac{m^2}{\rho^2}\right]R=0 \tag{7.16}$$

其中 $\alpha=\sqrt{\mu\omega/\hbar},\eta=\sqrt{2\mu E/\hbar^2-2m\mu\omega_L/\hbar}$.

式 (7.16) 与题 6.18 的式 (6.141) 相同, 根据那里的分析 $R(\rho)$ 在 $\rho\to0$、∞ 的渐近行为分别是 $R\propto\rho^{|m|}$ 与 $R(\rho)\propto\exp\left(-\alpha^2\rho^2/2\right)$, 这样可设

$$R(\rho)=\rho^{|m|}\mathrm{e}^{-\alpha^2\rho^2/2}u(\rho) \tag{7.17}$$

式 (7.17) 代入式 (7.16) 得

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\rho^2}+\left(2|m|+1-2\alpha^2\rho^2\right)\frac{1}{\rho}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\rho}+\left[\eta^2-\left(2|m|+2\right)\alpha^2\right]u=0 \tag{7.18}$$

令 $\xi=\alpha^2\rho^2$, 得

$$\xi\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\xi^2}+\left(|m|+1-\xi\right)\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\xi}+\left[\frac{\eta^2}{\alpha^2}-\left(2|m|+2\right)\right]u=0 \tag{7.19}$$

此式为合流超几何方程[①], 其形式为

$$\xi\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\xi^2}+\left(\gamma-\xi\right)\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\xi}-\beta u=0 \tag{7.19'}$$

其中 $\gamma=|m|+1$, $\beta=-\left[\eta^2/\alpha^2-(2|m|+2)\right]/4$. 在 $\xi=0$ 的邻域中式 (7.19′) 的解析解表示为合流超几何函数 $\mathrm{F}(\beta,\gamma,\xi)$, 要得到满足束缚态条件的解, $\mathrm{F}(\beta,\gamma,\xi)$ 须中断为一个多项式. 这要求 β 是一个小于或这等于 0 的整数, 即

$$\beta=-n_\rho,\quad n_\rho=0,1,2,\cdots$$

因此有

$$\beta=-\frac{1}{4}\left[\frac{\eta^2}{\alpha^2}-\left(2|m|+2\right)\right]=-n_\rho$$

其中 α、η 见式 (7.16) 的定义. 这样得可能量 E 本征值为

$$E_{n_\rho,m,p_z}=\left(2n_\rho+|m|+m\right)\hbar\omega+\frac{1}{2\mu}p_z^2=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega+\frac{1}{2\mu}p_z^2 \tag{7.20}$$

这里 $m=0,\pm1,\pm2,\cdots$ 为磁量子数, $n_\rho=0,1,\cdots$ 为径向量子数, 而 $n=n_\rho+(|m|+m)/2$. 相应的径向部分能量本征函数用合流超几何函数 F 表示为

$$R_{n_\rho m}=A\rho^{|m|}\mathrm{F}(-n_\rho,|m|+1,\alpha^2\rho^2)\mathrm{e}^{-\alpha^2\rho^2/2} \tag{7.21}$$

其中 $\alpha=\sqrt{\dfrac{\mu\omega}{\hbar}}=\sqrt{\dfrac{eB}{2\hbar c}}$, A 为归一化常数. 而本征函数为

$$\Psi_{n_\rho m p_z}(x,y,z)=A\rho^{|m|}\mathrm{F}(-n_\rho,|m|+1,\alpha^2\rho^2)\mathrm{e}^{-\alpha^2\rho^2/2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_z z}$$

其中 n_ρ =0, 1, 2, $\cdots$, $m=0,\pm1,\pm2,\cdots$, $-\infty<p_z<+\infty$. 从能级公式 (7.20) 可看出, 对于所有 $m\leqslant$ 的态对应的能量都相等, 因而能级简并度为 ∞.

讨论 2 (能量本征函数, 磁矢势取 Landau 规范). 取磁矢势为

$$\boldsymbol{A}=-yB\boldsymbol{e}_x,\quad A_x=-yB,A_y=A_z=0 \tag{7.22}$$

Hamilton 量

$$H=\frac{1}{2\mu}\left[\left(p_x+qyB\right)^2+p_y^2+p_z^2\right] \tag{7.23}$$

因 $[H,p_x]=[H,p_z]=[p_x,p_z]=0$, 可选 CSCO 为 (H,p_x,p_z), 其共同本征态为

$$\psi_{np_xp_z}(x,y,z)=\frac{1}{2\pi\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_xx+k_zz)}\eta_n(y) \tag{7.24}$$

---

① 曾谨言, 量子力学 (第四版卷 I)[M], 北京: 科学出版社, 2007, 附录五, p.522~523; 王竹溪, 郭敦仁. 特殊函数概论, 北京: 北京大学出版社, 2000, 第六章.

代入定态 Schrödinger 方程可得

$$\left[\frac{1}{2\mu}p_y^2+\frac{1}{2\mu}(p_x+qyB)^2\right]\eta_n(y)=\varepsilon_n\eta_n(y) \tag{7.25}$$

其中 $\varepsilon_n=E_n-\dfrac{p_z^2}{2\mu}$, 令 $s=y+\dfrac{1}{qB}p_x$, $\omega_c=\dfrac{|q|\,B}{\mu}$ 称为回转频率, 为 Lamor 频率 2 倍. 这样上式化为

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}s^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2s^2\right)\eta_n(s)=\varepsilon_n\eta_n(s) \tag{7.26}$$

此为一维简谐振子定态方程, 直接写出如下解:

$$\eta_n(s)=\left(\frac{\alpha}{2^nn!\sqrt{\pi}}\right)^{1/2}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2s^2}\mathrm{H}_n(\alpha s) \tag{7.27}$$

其中 $\alpha=(\mu\omega/\hbar)^{1/2}$. 相应的能量 $\varepsilon_n=(n+1/2)\,\hbar\omega$. 于是粒子的能级和相应的本征函数为

$$E_{np_xp_z}=\frac{p_z^2}{2\mu}+\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\frac{|q|\,B}{\mu} \tag{7.28}$$

$$\psi_{np_xp_z}=\frac{1}{2\pi\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_xx+p_zz)/\hbar}\eta_n\left(y-\frac{p_x}{qB}\right) \tag{7.29}$$

其中 $n=0,1,2,\cdots$, $-\infty<p_x,p_z<+\infty$. 从能量本征值公式 (7.28) 可看出, 粒子能量本征值不依赖于 p_x, 而 p_x 的取值为 $-\infty<p_x<+\infty$, 因而能级简并度为 ∞.

从粒子能量本征函数 (7.29) 可看出, 由于 p_x 可取值 $p_x\to\pm\infty$, 粒子可以出现在 $y\to\pm\infty$ 的无穷远处, 因而此时 $\psi_{np_xp_z}$ 为非束缚态, 而其能级却是分立的. 束缚定态的能级一定是分立的, 从本例却看到, 分立能级对应的本征态未必是束缚态.

7.3 设带电粒子在相互垂直的恒定均匀电场 $\boldsymbol{E}$ 和均匀磁场 $\boldsymbol{B}$ 中运动, 求其能谱及波函数 (取磁场方向为 z 轴, 电场方向为 x 轴方向).

解 选择矢势 $\boldsymbol{A}$使 $A_x=0,A_y=Bx,A_z=0$, 满足 $\nabla\times\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}$. 设电场 $\boldsymbol{E}$ 沿着 x 轴, 而其大小是 $\mathcal{E}$. 我们可取标势 $V(\boldsymbol{x})=-\mathcal{E}x$, 它满足 $-\dfrac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}=\mathcal{E}$. 设粒子质量为 μ, 这样粒子 Hamilton 量为

$$H=\frac{1}{2\mu}\left\{p_x^2+\left(p_y-\frac{q}{c}Bx\right)^2+p_z^2\right\}-\mathcal{E}qx=\frac{1}{2\mu}\left\{p_x^2+p_y^2-\frac{2qB}{c}p_yx+\left(\frac{q}{c}B\right)^2x^2+p_z^2\right\}-\mathcal{E}qx \tag{7.30}$$

H 中不出现 y 和 z, 因此

$$[H,p_y]=0,\quad [H,p_z]=0$$

这样可选 CSCO 为 (H,p_y,p_z), 而取分离变量形式的能量本征函数为

$$\psi(x,y,z)=\frac{1}{2\pi\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_yy+p_zz)/\hbar}X(x) \tag{7.31}$$

代入能量本征方程得

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}-\frac{2\mathrm{i}qB}{c\hbar}\frac{\partial}{\partial y}x\psi+\left[\frac{2\mu q\mathcal{E}}{\hbar^2}x-\left(\frac{qB}{c\hbar}\right)^2x^2\right]\psi=-\frac{2\mu E}{\hbar^2}\psi$$

整理, 并约去因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_yy+p_zz)/\hbar}$ 后, 得到关于 $X(x)$ 的本征方程

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2\mu}\left[\frac{q^2B^2}{c^2}x^2-2\left(\frac{qBp_y}{c}+\mu\mathcal{E}q\right)x+p_y^2+p_z^2\right]\right\}X(x)=EX(x)$$

令 $\omega \equiv \dfrac{qB}{c\mu}, x_0 = \dfrac{cp_y}{Bq} + \dfrac{\mu q\mathcal{E}}{qB^2}$, 而 $E_0 = \dfrac{p_y^2 + p_z^2}{2\mu} - \dfrac{1}{2\mu}\left(p_y + \dfrac{\mu\mathcal{E}c}{B}\right)^2$. 上式可以化为

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\mu}{2}\omega^2\left(x - x_0\right)^2\right\} X(x) = E_1 X(x) \tag{7.32}$$

其中 $E_1 = E - E_0$. 式 (7.32) 是一维谐振子的定态方程, 振子频率是 ω, 振动原点在 $x = x_0$. 令 $\alpha = \sqrt{\mu\omega/\hbar}$, 由一维谐振子结果直接写下

$$E_1 = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \left(n + \frac{1}{2}\right)\frac{\hbar qB}{\mu c} \tag{7.33}$$

以及相应本征函数

$$X(x) = N_n \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2(x-x_0)^2} \mathrm{H}_n\left[\alpha\left(x - x_0\right)\right] \tag{7.34}$$

其中 H_n 为 Hermite 多项式, 归一化系数 $N_n = \sqrt{\alpha/\sqrt{\pi}2^n n!}$. 带电粒子的总能量 $E = E_0 + E_1$ 是

$$E_{n,p_y,p_z} = \frac{p_y^2 + p_z^2}{2\mu} - \frac{1}{2\mu}\left(p_y + \frac{\mu\mathcal{E}c}{B}\right)^2 + \left(n + \frac{1}{2}\right)\frac{\hbar qB}{\mu c} \tag{7.35}$$

其中 $-\infty < p_y, p_z < +\infty$ 可连续取值, 而 $n = 0, 1, 2, \cdots$. 相应的波函数为

$$\psi_{n,p_y,p_z}(x, y, z) = \frac{1}{2\pi h}\sqrt{\frac{2}{\sqrt{\pi}2^n n!}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_y y + p_z z)/\hbar} \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\frac{\mu\omega}{\hbar}(x-x_0)^2} \mathrm{H}_n\left[\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\left(x - x_0\right)\right]$$

第 8 章　表象变换与量子力学的矩阵形式

8.1　设矩阵 A、B、C 满足 $A^2=B^2=C^2=1$, $BC-CB=\mathrm{i}A$. (a) 求证 $AB+BA=AC+CA=0$. (b) 在 A 表象中, 求出 B、C 的矩阵 (设无简并).

解　(a) 由 $BC-CB=\mathrm{i}A$ 得 $A=\mathrm{i}CB-\mathrm{i}BC$, 再由 $A^2=B^2=C^2=1$ 得

$$AB+BA=\mathrm{i}C-\mathrm{i}BCB+\mathrm{i}BCB-\mathrm{i}C=0$$

$$AC+CA=\mathrm{i}CBC-\mathrm{i}B+\mathrm{i}B-\mathrm{i}CBC=0$$

即得 $AB+BA=AC+CA=0$.

(b) $A^2=1$, 即 $(A-1)(A+1)=0$, 由矩阵的 Hamilton 原理, 知 A 的本征值只有 1 和 -1. A 表象只有 2 个基矢, 而 A 的矩阵表示为

$$A=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$$

现在设 $B=\begin{pmatrix}a&b\\c&d\end{pmatrix}$, 则 $AB+BA=0$ 给出

$$\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a&b\\c&d\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}a&b\\c&d\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2a&0\\0&2d\end{pmatrix}=0$$

上式给出 $a=d=0$. 再 $B^2=1$ 给出

$$\begin{pmatrix}0&b\\c&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&b\\c&0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}bc&0\\0&bc\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$$

上式给出 $bc=1$. 所以 b,c 都不为零, 可取 $c=b^{-1}$. 这样

$$B=\begin{pmatrix}0&b\\b^{-1}&0\end{pmatrix}$$

同理由 $AC+CA=0, C^2=1$ 得

$$C=\begin{pmatrix}0&c\\c^{-1}&0\end{pmatrix}$$

上面 b、c 都是不为零的复数. 最后由 $BC-CB=\mathrm{i}A$ 得

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}&=\begin{pmatrix}0&b\\b^{-1}&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&c\\c^{-1}&0\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}0&c\\c^{-1}&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&b\\b^{-1}&0\end{pmatrix}\\&=\begin{pmatrix}bc^{-1}-b^{-1}c&0\\0&b^{-1}c-bc^{-1}\end{pmatrix}\end{aligned}$$

上式给出 $bc^{-1}-b^{-1}c=\mathrm{i}$, 即 $b^2-c^2=\mathrm{i}bc$, 这是参数 b 与 c 必须满足的条件.

8.2 设矩阵 A 和 B 满足 $A^2=0$, $AA^\dagger+A^\dagger A=1$, $B=AA^\dagger$. (1) 证明 $B^2=B$. (2) 在 B 表象中求出 A、B 的矩阵表示式.

解 (1) [证明] 由 $B=AA^\dagger$ 和 $A^2=0$, $AA^\dagger+A^\dagger A=1$ 得

$$B^2=AA^\dagger AA^\dagger=A\left(A^\dagger A\right)A^\dagger=A\left(A^\dagger A+AA^\dagger\right)A^\dagger=AA^\dagger=B$$

即得 $B^2=B$;

(2) 由于 $B^2=B$, 即 $B(B-1)=0$, 由矩阵的 Hamilton 原理, 知 B 的本征值只有 0 和 1. 这样在 B 表象中 B 的矩阵表示为

$$B=\begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix}$$

设 $A=\begin{pmatrix}a&b\\c&d\end{pmatrix}$, 则 $A^\dagger=\begin{pmatrix}a^*&c^*\\b^*&d^*\end{pmatrix}$, $AA^\dagger=B$ 给出

$$\begin{pmatrix}a&b\\c&d\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a^*&c^*\\b^*&d^*\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}|a|^2+|b|^2&ac^*+bd^*\\ca^*+db^*&|c|^2+|d|^2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix}$$

由 $|c|^2+|d|^2=0$ 知 $c=d=0$. 这样 $A=\begin{pmatrix}a&b\\0&0\end{pmatrix}$, A 满足 $A^2=0$. $AA^\dagger+A^\dagger A=1$ 给出

$$\begin{pmatrix}a&b\\0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a^*&0\\b^*&0\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}a^*&0\\b^*&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a&b\\0&0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2|a|^2+|b|^2&a^*b\\ab^*&|b|^2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$$

由上式得 $2|a|^2+|b|^2=|b|^2=1$, 可见 $|a|^2=0$, 故 $a=0$. $|b|^2=1$, 可取 $b=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}$, α 为实数. 最后结果为

$$B=\begin{pmatrix}1&0\\0&0\end{pmatrix},\quad A=\begin{pmatrix}0&\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\\0&0\end{pmatrix}$$

8.3 厄米算符 A 与 B, 满足 $A^2=B^2=1$, $AB+BA=0$. 求: (1) 在 A 表象中 A 与 B 的矩阵表示式, 并求 B 的本征函数表示式. (2) 在 B 表象中 A 与 B 的矩阵表示式, 并求 A 的本征函数表示式. (3)A 表象到 B 表象的幺正变换矩阵 S.

解 (1) 题给 $AB+BA=0$, 所以 A、B 都不可能是单位矩阵. 设 A 与 B 均无简并. $A^2=1$, 即 $(A-1)(A+1)=0$, 由矩阵的 Hamilton 原理, 知 A 的本征值只有 1 和 -1. A 表象只有 2 个基矢, 而 A 的矩阵表示为

$$A=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\tag{8.1}$$

现在设 $B=\begin{pmatrix}a&b\\c&d\end{pmatrix}$, 则 $AB+BA=0$ 给出

$$\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a&b\\c&d\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}a&b\\c&d\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2a&0\\0&2d\end{pmatrix}=0$$

上式给出 $a=d=0$. 再 $B^2=1$ 给出

$$\begin{pmatrix}0&b\\c&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&b\\c&0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}bc&0\\0&bc\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$$

上式给出 $bc=1$. 再 B 为厄米算符, $B^\dagger=B$, 因而 $c=b^*$. 这样 $b=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}$, $c=b^*=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta}$, 故

$$B=\begin{pmatrix}0 & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta}\\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta} & 0\end{pmatrix} \tag{8.2}$$

其中 δ 为任意实数. 由于 $B^2=1$, B 的本征值也为 ±1. 相应于矩阵形式 (8.1), A 的本征态记为

$$|1\rangle_a=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\quad |-1\rangle_a=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \tag{8.3}$$

通过矩阵形式 (8.2), 求解 $B|\lambda\rangle_b=\lambda|\lambda\rangle_b$ 得 B 的归一化本征态

$$|1\rangle_b=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta}\end{pmatrix},\quad |-1\rangle_b=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta}\end{pmatrix} \tag{8.4}$$

相应的本征值分别为 1, -1.

(2) 同第 (1) 小题, 只需将 A 与 B 的地位相互交换一下即可.

(3) 第 (1) 小题求得了 A 与 B 的归一化本征态, 从而 A 表象到 B 表象的幺正变换矩阵元为 ${}_a\langle\lambda'|\lambda\rangle_b$, 从而写出这一幺正变换矩阵如下:

$$S=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta} & -\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta}\end{pmatrix} \tag{8.5}$$

8.4 设 $K=LM, LM-ML=1$, φ 为 K 的本征矢, 即 $K\varphi=\lambda\varphi$, λ 为本征值. 证明 $u\equiv L\varphi$ 与 $v\equiv M\varphi$ 也是 K 的本征函数, 相应的本征值分别为 $\lambda-1$ 与 $\lambda+1$.

证明 根据题设

$$[K,L]=[LM,L]=L\,[M,L]=-L \tag{8.6}$$

$$[K,M]=[LM,M]=[L,M]\,M=M \tag{8.7}$$

若有 $K\varphi=\lambda\varphi$, 则

$$KL\varphi=\{[K,L]+LK\}\,\varphi=(-L+LK)\,\varphi=(\lambda-1)\,L\varphi$$

也就是

$$Ku=(\lambda-1)\,u \tag{8.8}$$

可见 $u\equiv L\varphi$ 也是 K 的本征函数, 相应的本征值为 $\lambda-1$. 同样

$$KM\varphi=\{[K,M]+MK\}\,\varphi=(M+MK)\,\varphi=(\lambda+1)\,L\varphi$$

也就是

$$Kv=(\lambda-1)\,v \tag{8.9}$$

可见 $v\equiv M\varphi$ 也是 K 的本征函数, 相应的本征值为 $\lambda+1$. 证毕.

8.5 设任何一个厄米矩阵能用一个幺正变换对角化. 由此证明, 两个厄米矩阵能用同一个幺正变换对角化的充要条件是它们彼此对易.

证明　设有两个厄米矩阵 A 与 B, 即 $A^\dagger = A$, $B^\dagger = B$. 设矩阵的维数为 n.

先证必要条件. 设存在一个幺正变换 $U(UU^\dagger = U^\dagger U)$, 使得 A 与 B 同时对角化, 记为

$$\begin{aligned} UAU^\dagger &= \mathrm{diag}\,(a_1, a_2, \cdots, a_n) = A_d \\ UBU^\dagger &= \mathrm{diag}\,(b_1, b_2, \cdots, b_n) = B_d \end{aligned} \tag{8.10}$$

对角矩阵相互间彼此对易, 也就是 $A_dB_d - B_dA_d = 0$, 即

$$UAU^\dagger UBU^\dagger - UBU^\dagger UAU^\dagger = 0$$

或者

$$UABU^\dagger - UBAU^\dagger = U\,[A, B]\,U^\dagger = 0$$

由于 U 是幺正变换, 由上式即得

$$[A, B] = 0$$

再证充分条件. 任意的 Hermite 矩阵 M 必存在完备的本征态, 对于 $n \times n$ 的 Hermite 矩阵就是存在 n 个线性无关的本征态矢量, 即

$$M\xi^{(k)} = \lambda^{(k)}\xi^{(k)}, \quad k = 1, 2, \cdots, n \tag{8.11}$$

其中 $\lambda^{(k)}$ 为本征值, 必为实数量. 根据 Hermite 矩阵的性质, 对应于不同本征值的本征态必定相互正交, 而对于同一本征值的不同简并的本征态, 可采用 Schmidt 正交程序, 使之相互正交. 因此总归可以使得上述 n 个线性无关的本征态矢量相互之间两两正交. 进一步可以将这些本征态归一化, 即

$$\xi^{(k)\dagger}\xi^{(k')} = \delta_{kk'} \tag{8.12}$$

上式可写成如下矩阵形式

$$M\left(\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \cdots, \xi^{(n)}\right) = \left(\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \cdots, \xi^{(n)}\right) \begin{pmatrix} \lambda^{(1)} & & & \\ & \lambda^{(2)} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda^{(n)} \end{pmatrix} \tag{8.13}$$

记

$$U = \left(\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \cdots, \xi^{(n)}\right) = (S)_{n\times n} \tag{8.14}$$

由于式 (8.12) 即 $\xi^{(k)}$ $(k = 1, 2, \cdots, n)$ 的正交归一性, 可知

$$U^\dagger U = UU^\dagger = 1$$

即 U 为幺正矩阵. 再由式 (8.13)

$$MU = U\mathrm{diag}\,(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$$

由 U 的幺正性

$$U^\dagger MU = \mathrm{diag}\,(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n) \tag{8.15}$$

也就是说, 任何厄米矩阵 M, 可通过其完备的本征态构造幺正矩阵 U, U 即可使 M 对角化.

厄米矩阵 A 与 B 相互对易, 则 A 与 B 存在完备 (对于 n 维空间就是存在 n 个线性无关) 的共同本征态 $\xi^{(1)},\xi^{(2)},\cdots,\xi^{(n)}$, 按前论述这 n 共同本征态可以进行正交归一化, 并可按式 (8.14) 构造幺正矩阵 U, 而且使得

$$\begin{aligned} U^{\dagger}AU &= \mathrm{diag}\,(a_1,a_2,\cdots,a_n) = A_d \\ U^{\dagger}BU &= \mathrm{diag}\,(b_1,b_2,\cdots,b_n) = B_d \end{aligned} \tag{8.16}$$

也就是说相互对易的厄米矩阵 A 与 B, 可通过其完备的共同本征态构造幺正矩阵 U, 在作幺正变换 U 后, 即可使 A 与 B 同时对角化.

8.6 证明 (1) 若一个 N 阶矩阵与所有 N 阶对角矩阵对易, 则必为对角矩阵. (2) 若它与所有 N 阶矩阵对易, 则必为常数矩阵.

证明 (1) 为方便不妨采用 Dirac 符号. 矩阵 $A=(A)_{N\times N}$ 表示为

$$A = A_{mn}|m\rangle\langle n|$$

这里采用重复指标求和约定, 而所有 $|m\rangle$ 构成完备的正交归一态矢量. A 与所有 N 阶对角矩阵对易, 则 A 与所有 N 个 $|k\rangle\langle k|$ 对易, 即

$$A|k\rangle\langle k| = |k\rangle\langle k|A$$

或者

$$A|k\rangle = |k\rangle\langle k|A|k\rangle \tag{8.17}$$

因此每一个 $|k\rangle$ 都是 A 的本征态. 进而

$$A = \sum_{k=1}^{N} |k\rangle\langle k|\langle k|A|k\rangle \tag{8.18}$$

上式显式表明 A 为对角矩阵. 而且根据式 (8.17), 其对角元就是本征值.

(2) 根据代数学基本定理可以论证, 任意的 N 阶矩阵 A 的本征方程

$$A\xi = \lambda\xi$$

至少有一个非零的解 ξ. 因而对于和任意矩阵 B 都对易的 N 阶矩阵 A, 我们可任取它的一个本征态 ξ. 将 B 作用到本征方程 $A\xi=\lambda\xi$ 两边得

$$BA\xi = AB\xi = \lambda B\xi$$

上式表明, $B\xi$ 也是 A 的同一本征值 λ 的本征态. 由于 B 任意, 这意味着该 N 维空间任意的矢量都是 A 的同一本征值 λ 的本征态. 或者说, A 作用到该空间任意矢量上, 结果都是 λ 乘该矢量. 由于乘法作用下, 使得任意的态都等于零的算符为零算符, 以及使得任意的态都不变的算符为恒等算符, 则可知 A 为常数矩阵.

说明 上面得到该 N 维空间任意的矢量都是 A 的同一本征值 λ 的本征态, 根据第 (1) 小题结果, A 一定可以对角化, 对角元均是本征值 λ. 因而 $A=\lambda I$, 即 A 为常数矩阵.

8.7 (复习线性代数) 设有有限阶矩阵 A,B,C,S 等, 证明

$$\begin{aligned} &\det(AB) = \det A\cdot\det B, \qquad \det(S^{-1}AS) = \det A \\ &\mathrm{tr}(AB) = \mathrm{tr}(BA), \qquad \mathrm{tr}(S^{-1}AS) = \mathrm{tr}A \\ &\mathrm{tr}(ABC) = \mathrm{tr}(CAB) = \mathrm{tr}(BCA) \end{aligned}$$

证明　设矩阵为 $n\times n$ 方阵, $A=(A)_{n\times n}=(a_{ij})_{n\times n}$, $B=(B)_{n\times n}=(b_{ij})_{n\times n}$. 欲证 $\det(AB)=\det A\cdot\det B$, 如下构造 $2n\times 2n$ 矩阵

$$D=\begin{pmatrix} A & 0\\ -I & B\end{pmatrix}$$

显然 $\det D=\det A\cdot\det B$, 下证 $\det D=\det(AB)$.

$$D=\begin{pmatrix} A & 0\\ -I & B\end{pmatrix}=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & & & & \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & & & & \\ \vdots & & & \vdots & & & & \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & & & & \\ -1 & & & & b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1n}\\ & -1 & & & b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2n}\\ & & \ddots & & \vdots & & & \vdots\\ & & & -1 & b_{n1} & b_{n2} & \cdots & b_{nn}\end{pmatrix}$$

$$\to\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1n}\\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2n}\\ \vdots & & & \vdots & \vdots & & & \vdots\\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & c_{n1} & c_{n2} & \cdots & c_{nn}\\ -1 & & & & 0 & 0 & \cdots & 0\\ & -1 & & & 0 & 0 & \cdots & 0\\ & & \ddots & & \vdots & & & \vdots\\ & & & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix} A & C\\ -I & 0\end{pmatrix}=D'$$

上面通过将第 1 列元素乘 $b_{1k}+$ 第 2 列元素乘 $b_{2k}+\cdots+$ 第 n 列元素乘 b_{nk} 的和加到第 $n+k$ 列得到. 故

$$(C)_{kl}=\sum_m(A)_{km}(B)_{ml}=(AB)_{kl}$$

这样有

$$\begin{aligned}\det D=\det D'&=\det\begin{pmatrix} A & C\\ -I & 0\end{pmatrix}=(-1)^n\det\begin{pmatrix} -I & 0\\ A & C\end{pmatrix}\\ &=(-1)^n\det(-I)\cdot\det C=(-1)^n(-1)^n\cdot\det(AB)=\det(AB)\end{aligned}$$

综合上面结果, 即有

$$\det(AB)=\det A\cdot\det B\tag{8.19}$$

按照 tr 的定义得

$$\mathrm{tr}(AB)=\sum_n(AB)_{n,n}=\sum_n\sum_k a_{nk}b_{kn}=\sum_k\sum_n b_{kn}a_{nk}=\sum_k(BA)_{k,k}=\mathrm{tr}(BA)$$

如此有

$$\mathrm{tr}(AB)=\mathrm{tr}(BA)\tag{8.20}$$

根据式 (8.19)、式 (8.20), 可以有下述推论

$$\det(S^{-1}AS)=\det(ASS^{-1})=\det A,$$
$$\mathrm{tr}(S^{-1}AS)=\mathrm{tr}(ASS^{-1})=\mathrm{tr}A,$$
$$\mathrm{tr}(ABC)=\mathrm{tr}(BCA)=\mathrm{tr}(CAB)$$

关于 $\det(AB)=\det A\cdot\det B$ 还有下面的证法二.

证法二 矩阵 A 的行列式可如下给出

$$\det A=\sum_{p\in S}\delta_p a_{i_1,1}a_{i_2,2}\cdots a_{i_n,n}$$

其中$p=\begin{pmatrix}12\cdots n\\ i_1i_2\cdots i_n\end{pmatrix}$ 为排列 $(12\cdots n)$ 变到 $(i_1i_2\cdots i_n)$ 的置换, 而 S 为所有 n 阶置换的全体 (置换群), δ_p 定义为对偶排列 p 取 $+1$, 对奇排列 p 取 -1. 这样

$$\begin{aligned}\det(AB)&=\sum_{p\in S}\delta_p(AB)_{i_1,1}(AB)_{i_2,2}\cdots(AB)_{i_n,n}\\&=\sum_{p\in S}\sum_{j_1,j_2,\cdots,j_n=1}^{n}\delta_p a_{i_1,j_1}b_{j_1,1}a_{i_2,j_2}b_{j_2,2}\cdots a_{i_n,j_n}b_{j_n,n}\\&=\sum_{j_1,j_2,\cdots,j_n=1}^{n}b_{j_1,1}b_{j_2,2}\cdots b_{j_n,n}\sum_{p\in S}\delta_p a_{i_1,j_1}a_{i_2,j_2}\cdots a_{i_n,j_n}\\&=\sum_{j_1,j_2,\cdots,j_n=1}^{n}b_{j_1,1}b_{j_2,2}\cdots b_{j_n,n}\sum_{p\in S}\delta_{p'}\delta_p a_{i_1,1}a_{i_2,2}\cdots a_{i_n,n}\end{aligned}$$

其中排列 $p'=\begin{pmatrix}12\cdots n\\ j_1j_2\cdots j_n\end{pmatrix}$, 因而

$$\begin{aligned}\det(AB)&=\sum_{j_1,j_2,\cdots,j_n=1}^{n}\delta_{p'}b_{j_1,1}b_{j_2,2}\cdots b_{j_n,n}\sum_{p\in S}\delta_p a_{i_1,1}a_{i_2,2}\cdots a_{i_n,n}\\&=\sum_{p'\in S}\delta_{p'}b_{j_1,1}b_{j_2,2}\cdots b_{j_n,n}\sum_{p\in S}\delta_p a_{i_1,1}a_{i_2,2}\cdots a_{i_n,n}=\det A\cdot\det B\end{aligned}$$

说明 1 注意一般 $\mathrm{tr}(ABC)\neq\mathrm{tr}(BAC)$, 读者可以自行举例.

说明 2 根据 Schur 定理, 任意矩阵 A 可通过幺正变换化为上或者下三角矩阵. 本题结论是矩阵的行列式、迹在幺正变换下不变. 据此可得题 8.8 所证的矩阵 A 的行列式的一个常用关系式 (8.21).

说明 3 本题结果只适用于有限阶矩阵, 正如题中已指明的. 理由如下:

关于无限矩阵 $\det(AB)=\det(BA)$ 不一定成立, 我们可举如下例子. 考虑 Fock 空间中的算符 Ω: $|n\rangle\to|n+1\rangle$, $n=0,1,2,\cdots$. Ω 可表示为 $\Omega=\sum_{n=0}^{\infty}|n+1\rangle\langle n|$. 可以验算 $\Omega^\dagger\Omega=\boldsymbol{I}$, 但 $\Omega\Omega^\dagger=\boldsymbol{I}-|0\rangle\langle 0|$. 这样, $\det(\Omega^\dagger\Omega)=\det(\boldsymbol{I})=1$, 但 $\det(\Omega\Omega^\dagger)=\det(\boldsymbol{I}-|0\rangle\langle 0|)=0$, 可见 $\det(\Omega\Omega^\dagger)\neq\det(\Omega^\dagger\Omega)$.

关于无限矩阵迹的关系, 我们考虑 $xp-px=\mathrm{i}\hbar$. 假如 $\mathrm{tr}(AB)=\mathrm{tr}(BA)$ 对无限阶矩阵仍成立, 则对此式两边取 tr 得左边 $=0$, 右边 $=\mathrm{i}\hbar\mathrm{tr}1=\mathrm{i}\hbar\infty$. 由矛盾知, $\mathrm{tr}(AB)=\mathrm{tr}(BA)$ 对无限阶矩阵不一定成立.

这提醒我们注意有限维的结论在无限维情形不一定成立.

8.8 设 A 为厄米或幺正矩阵 (因而均可以对角化), 证明: 在任何表象中

$$\det A = \mathrm{e}^{\mathrm{tr}(\ln A)} \tag{8.21}$$

证明 根据题设 A 为厄米或幺正矩阵, 因而存在幺正矩阵 U, 使得

$$UAU^{\dagger} = \mathrm{diag}\,(a_1, a_2, \cdots, a_n) = A_d$$

如上式所示, A_d 为对角阵. 根据题 8.7 结论, 幺正变换对于有限维矩阵的行列式和求迹运算结果不影响行列式和求迹运算, 或者说行列式和求迹运算与表象无关. 因而

$$\det A = \det UAU^{\dagger} = \det A_d = \prod_k \lambda_k \tag{8.22}$$

另一方面

$$\mathrm{e}^{\mathrm{tr}(\ln A)} = \mathrm{e}^{\sum\limits_k \langle k|\ln A|k\rangle} = \mathrm{e}^{\sum\limits_k \ln \lambda_k} = \prod_k \lambda_k \tag{8.23}$$

上面 $|k\rangle$ 为使得 A 对角化的表象中的正交归一基矢量. 比较式 (8.22,8.23) 即得所证的式 (8.21).

说明 根据 Schur 定理, 任意矩阵 A 可通过幺正变换化为上或者下三角矩阵. 故存在幺正矩阵 U, 使得 $UAU^{\dagger} = A_D$, A_D 为上或者下三角矩阵. 设 A 的本征值为 λ_k $(k = 1, 2, \cdots)$, 则

$$\det A = \det UAU^{\dagger} = \prod_k \lambda_k \tag{8.24}$$

另一方面

$$\mathrm{e}^{\mathrm{tr}(\ln A)} = \mathrm{e}^{\sum\limits_k \langle k|\ln A|k\rangle} = \mathrm{e}^{\sum\limits_k \ln \lambda_k} = \prod_k \lambda_k \tag{8.25}$$

比较式 (8.24)、式 (8.25) 即得所证的式 (8.21).

可见, 本题结论实际上对于任意的有限矩阵都成立.

第9章 自　　旋

9.1 (1) 在 σ_z 表象下, 求 σ_x 的本征态; (2) 求 σ_z 表象 $\to \sigma_x$ 表象的变换矩阵 S; (3) 请验证

$$S\sigma_x S^{-1} = S\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} S^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

注意　$\mathrm{tr}\sigma_x = 0$ 不因表象变换而异.

解　(1) 设 Pauli 算符 σ^2、σ_z 的共同本征态是

$$\chi_{\frac{1}{2}}(s_z), \quad \chi_{-\frac{1}{2}}(s_z) \tag{9.1}$$

或记作 α 和 β, 它们构成 1/2 自旋态空间的完备基矢, 具有完备性, 即可以展开任意的 1/2 自旋态. α 和 β 并不是 σ_x 的本征态, 但根据其完备性, σ_x 的本征态可表示为

$$\chi = c_1\alpha + c_2\beta \tag{9.2}$$

其中 c_1, c_2 是待定常数, 又设 σ_x 的本征值 λ, 则 σ_x 的本征方程是

$$\sigma_x\chi = \lambda\chi \tag{9.3}$$

将式 (9.2) 代入式 (9.3) 得

$$\sigma_x(c_1\alpha + c_2\beta) = \lambda(c_1\alpha + c_2\beta) \tag{9.4}$$

σ_x 对 σ_z 表象基矢的运算法则是

$$\sigma_x\alpha = \beta, \quad \sigma_x\beta = \alpha \tag{9.5}$$

此外又假设 σ_x 的本征矢 (9.2) 是归一化的, 将式 (9.5) 代入式 (9.4) 得

$$c_1\beta + c_2\alpha = \lambda c_1\alpha + \lambda c_2\beta$$

比较 α、β 的系数 (这二者线性无关), 有

$$c_1 = \lambda c_2 \tag{9.6}$$

$$c_2 = \lambda c_1 \tag{9.7}$$

另还有归一化条件

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1 \tag{9.8}$$

由式 (9.6)、式 (9.7) 得 $\lambda^2 = 1$, 即 $\lambda = 1$, 或 $\lambda = -1$. 当 $\lambda = 1$ 时, 代入式 (9.6) 得 $c_1 = c_2$, 再代入式 (9.8), 得

$$c_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}, \quad c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}$$

其中 δ 是任意的实数, 在最后所得到的本征态中以整体相位的形式出现. 当 $\lambda = -1$ 时, 代入式 (9.6) 得 $c_1 = -c_2$, 再结合归一化条件 (9.8) 得

$$c_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta'}, \quad c_2 = -\frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta'}$$

同样 δ' 是任意的实数. 最后得 σ_x 的本征态

$$\chi_1 = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}}{\sqrt{2}}(\alpha+\beta), \quad \text{对应本征值1}$$

$$\chi_2 = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta'}}{\sqrt{2}}(\alpha-\beta), \quad \text{对应本征值}-1$$

(2) 求 σ_z 表象 $\to$ σ_x 表象的变换矩阵 $S_{ij}=\langle\chi_i|j\rangle=\langle j|\chi_i\rangle^*$, 其中 $\langle j|$ 为 σ_z 表象的基左矢, 这样直接写出

$$S=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta} & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta} \\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta'} & -\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta'} \end{pmatrix}$$

满足幺正条件 $S^\dagger=S^{-1}$.

(3) 直接验算得

$$S\sigma_x S^{-1}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta} & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta} \\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta'} & -\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta'} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta} & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta'} \\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta} & -\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta'} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

另解 (关于第 (a) 小题) 用矩阵表示算符和本征矢

$$\alpha=\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \beta=\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \chi=\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \tag{9.9}$$

已知 σ_x 的矩阵

$$\sigma_x=\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

因此 σ_x 的矩阵式本征方程式是

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \tag{9.10}$$

其余步骤与上面方法相同, 求得 σ_x 本征矢为

$$\chi_1=\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \chi_2=\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta'}}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

9.2 在 σ_z 表象中, 求 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$ 的本征态, $\boldsymbol{n}=(\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$ 是 (θ,φ) 方向的单位矢量.

解法一 方法类似前题, 设 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$ 算符的本征矢是

$$\xi=c_1\alpha+c_2\beta \tag{9.11}$$

相应的本征值是 λ. 题给的算符即

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}=\sin\theta\cos\varphi\sigma_x+\sin\theta\sin\varphi\sigma_y+\cos\theta\sigma_z \tag{9.12}$$

它的本征方程如下:

$$(\sin\theta\cos\varphi\sigma_x+\sin\theta\sin\varphi\sigma_y+\cos\theta\sigma_z)(c_1\alpha+c_2\beta)=\lambda(c_1\alpha+c_2\beta) \tag{9.13}$$

按 Pauli 矩阵表式, σ_x, σ_y 对 σ^2, σ_z 的共同本征态 α、β 的作用如下:

$$\begin{aligned} &\sigma_x\alpha=\beta, \quad \sigma_x\beta=\alpha, \quad \sigma_y\alpha=\mathrm{i}\beta \\ &\sigma_y\beta=-\mathrm{i}\alpha, \quad \sigma_z\alpha=\alpha, \quad \sigma_z\beta=-\beta \end{aligned} \tag{9.14}$$

(9.14) 式代入式 (9.13), 比较此式两边 α, β 的系数

$$\begin{aligned}\cos\theta c_1 + (\sin\theta\cos\varphi - \mathrm{i}\sin\theta\sin\varphi)c_2 &= \lambda c_1\\ (\sin\theta\cos\varphi + \mathrm{i}\sin\theta\sin\varphi)c_1 - \cos\theta c_2 &= \lambda c_2\end{aligned} \tag{9.15}$$

也就是

$$\begin{aligned}(\cos\theta - \lambda)c_1 + \sin\theta\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\cdot c_2 &= 0\\ \sin\theta\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\cdot c_1 - (\cos\theta + \lambda)c_2 &= 0\end{aligned} \tag{9.16}$$

式 (9.16) 为关于 c_1, c_2 的二阶线性方程组, 它有非平凡解 (也就是 c_1 与 c_2 不全为零) 的条件是其系数行列式为零, 即得下列久期方程式

$$\begin{vmatrix}\cos\theta - \lambda & \sin\theta\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\\ \sin\theta\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} & -\cos\theta - \lambda\end{vmatrix} = 0 \tag{9.17}$$

它的解为 $\lambda = \pm 1$. $\lambda = 1$ 时, 代入式 (9.16) 得

$$c_2 = \tan\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}c_1 \tag{9.18}$$

式 (9.11) 的归一化条件是

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1 \tag{9.19}$$

将式 (9.18) 代入式 (9.19), 求得

$$c_1 = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}\cos\frac{\theta}{2}, \quad c_2 = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\delta+\varphi)}\sin\frac{\theta}{2}$$

其中 δ 为任意实数, 即不定相位. 由此得归一化本征态是

$$\chi_1 = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}\left\{\cos\frac{\theta}{2}\alpha + \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\beta\right\} \tag{9.20}$$

$\lambda = -1$ 时, c_1 与 c_2 之间满足 $c_2 = -\cot\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}c_1$. 同样解得归一化本征态是

$$\chi_2 = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta'}\left\{-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\sin\frac{\theta}{2}\alpha + \cos\frac{\theta}{2}\beta\right\} \tag{9.21}$$

解法二 (矩阵方法) 根据 Pauli 矩阵表达式 (见教材 p287), 我们写出 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n} = \sin\theta\cos\varphi\sigma_x + \sin\theta\sin\varphi\sigma_y + \cos\theta\sigma_z$ 的如下矩阵:

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n} = \begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\\ \sin\theta\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} & -\cos\theta\end{pmatrix} \tag{9.22}$$

这样 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$ 的本征方程写为

$$\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\\ \sin\theta\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} & -\cos\theta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1\\ c_2\end{pmatrix} = \lambda\begin{pmatrix}c_1\\ c_2\end{pmatrix} \tag{9.23}$$

其余步骤与上面方法相同, 求得 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$ 的归一化本征态如下:

$$\chi_1 = \begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\delta+\varphi)}\end{pmatrix}, \quad \chi_2 = \begin{pmatrix}\sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\delta'-\varphi)}\\ -\cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta'}\end{pmatrix} \tag{9.24}$$

与前面结果相同.

说明 1 归一化态可以差一个整体相位, 故式 (9.24) 中可以取 $\delta=\delta'=0$, 而将其表示为

$$\chi_1=\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\end{pmatrix},\qquad \chi_2=\begin{pmatrix}\sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\\ -\cos\dfrac{\theta}{2}\end{pmatrix} \tag{9.25}$$

还有一种等价的对称表示

$$\chi_1=\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}}\end{pmatrix},\qquad \chi_2=\begin{pmatrix}-\sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}}\\ \cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}}\end{pmatrix} \tag{9.26}$$

而 $\chi_1=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi\sigma_z/2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\sigma_y/2}\chi_{1/2}(s_z)$, $\chi_2=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi\sigma_z/2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\sigma_y/2}\chi_{-1/2}(s_z)$. 方位角 (θ,φ) 的取值范围为 $0\leqslant\theta\leqslant\pi$, $0\leqslant\varphi<2\pi$, 在该范围内 χ_1、χ_2 均是 (θ,φ) 的单值函数.

说明 2 自旋为 $\hbar/2$ 粒子的任意归一化自旋态

$$\chi=\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix} \tag{9.27}$$

满足 $|a|^2+|b|^2=1$. 故 a, b 的可能值为

$$a=\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi_1},\quad b=\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi_2}$$

归一化态可以差一个整体相位, 故式 (9.27) 的态可表示为

$$\chi=\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}}\end{pmatrix}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi\sigma_z/2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\sigma_y/2}\chi_{1/2}(s_z)$$

其中 $\varphi=\varphi_2-\varphi_1$. 对于 a、b 的任意取值, 上述表达式中参变量 (θ,φ) 的取值范围为 $0\leqslant\theta\leqslant\pi$, $0\leqslant\varphi<4\pi$, 在该范围内 χ 是 (θ,φ) 的单值函数. 这里 (θ,φ) 的取值范围比方位角的取值范围扩大了一倍. $2\pi\leqslant\varphi<4\pi$ 的自旋态与 $0\leqslant\varphi<2\pi$ 的自旋态相比, 仅差一个负号 (相差 π), 如果忽略这个整体相位差[①], 则参变量 (θ,φ) 的取值范围可取为 $0\leqslant\theta\leqslant\pi$, $0\leqslant\varphi<2\pi$, 也就是上面的方位角的取值范围. 这样与式 (9.26) 比较, 可知任意 $\hbar/2$ 自旋态必可唯一表示为 $\boldsymbol{\sigma}$ 在 (θ,φ) 方向的投影 σ_n 的本征态 (本征值为 1), 或者说自旋沿 (θ,φ) 方向的本征态. 若设该方向的单位矢量为 $\boldsymbol{n}$, 则按照后面题 9.7 式 (9.65), 在该态下的极化矢量 $\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle=\boldsymbol{n}$.

说明 3 有时 $\boldsymbol{n}$ 用直角分量来表示 $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{e}_xn_x+\boldsymbol{e}_yn_y+\boldsymbol{e}_zn_z$, 则

$$\sigma_n=\sigma_xn_x+\sigma_yn_y+\sigma_zn_z=\begin{pmatrix}n_z & n_x-\mathrm{i}n_y\\ n_x+\mathrm{i}n_y & -n_z\end{pmatrix} \tag{9.28}$$

此时可求得 [可以直接利用式 (9.25) 或式 (9.26) 所给波函数的 2 分量比值化简]

$$\chi_1=\frac{1}{\sqrt{2(1+n_z)}}\begin{pmatrix}1+n_z\\ n_x+\mathrm{i}n_y\end{pmatrix},\quad \chi_2=\frac{1}{\sqrt{2(1+n_z)}}\begin{pmatrix}n_x-\mathrm{i}n_y\\ -1-n_z\end{pmatrix} \tag{9.29}$$

① 在拓扑相位有关一些场合, 这个相差不能忽略!

或者

$$\chi_1=\frac{1}{\sqrt{2(1-n_z)}}\begin{pmatrix}n_x-\mathrm{i}n_y\\1-n_z\end{pmatrix},\quad \chi_2=\frac{1}{\sqrt{2(1-n_z)}}\begin{pmatrix}-1+n_z\\n_x+\mathrm{i}n_y\end{pmatrix}\tag{9.30}$$

如果 $n_z\neq\pm1$, 则式 (9.29) 与式 (9.30) 等价 (仅差一个整体相因子). 如 $\boldsymbol{n}=(0,0,1)$ 用式 (9.29); 如 $\boldsymbol{n}=(0,0,-1)$ 则应用式 (9.30).

9.3 在自旋态下 $\chi_{\frac{1}{2}}(s_z)=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$, 求 $\overline{\Delta s_x^2}$ 和 $\overline{\Delta s_y^2}$.

解法一 $\overline{\Delta s_x^2}$ 和 $\overline{\Delta s_y^2}$ 是 s_x^2 和 s_y^2 的均方偏差

$$\overline{\Delta s_x^2}=\overline{s_x^2}-(\overline{s_x})^2,\quad \overline{\Delta s_y^2}=\overline{s_y^2}-(\overline{s_y})^2$$

由于 $s_x=\frac{\hbar}{2}\sigma_x$, $\sigma_x^2=1$, 故 $s_x^2=\frac{\hbar^2}{4}$. 而

$$\overline{s_x}=\chi^+_{\frac{1}{2}}(s_z)s_x\chi_{\frac{1}{2}}(s_z)=\chi^+_{\frac{1}{2}}(s_z)\frac{\hbar}{2}\chi_{-\frac{1}{2}}(s_z)=\frac{\hbar}{2}\chi^+_{\frac{1}{2}}(s_z)\chi_{-\frac{1}{2}}(s_z)=0$$

因此 $\overline{\Delta s_x^2}=\frac{\hbar^2}{4}$, 又因为在 $\chi_{\frac{1}{2}}(s_z)$ 态下, s_x,s_y 对称, 故

$$\overline{\Delta s_y^2}=\overline{\Delta s_x^2}=\frac{\hbar^2}{4}$$

解法二 由于 $s_x=\frac{\hbar}{2}\sigma_x$, $\sigma_x^2=1$. 故 $s_x^2=\frac{\hbar^2}{4}$. 由于 $s_ys_z-s_zs_y=\mathrm{i}\hbar s_x$, 此式两边对 $\chi_{\frac{1}{2}}(s_z)$ 态取平均即得 $\overline{s_x}=0$. 这样

$$\overline{\Delta s_x^2}=\overline{s_x^2}-(\overline{s_x})^2=\frac{\hbar^2}{4}$$

同样可求 $\overline{\Delta s_y^2}=\frac{\hbar^2}{4}$.

解法三 类似题 4.30 解答, 由对称性 $\overline{(\Delta s_x)^2}=\overline{(\Delta s_y)^2}$. 再由于 $\overline{s}_x=\overline{s}_y=0$ 得

$$\overline{(\Delta s_x)^2}=\overline{(s_x-\overline{s}_x)^2}=\overline{s_x^2},\ \overline{(\Delta s_y)^2}=\overline{(s_y-\overline{s}_y)^2}=\overline{s_y^2}$$

这样

$$\begin{aligned}\overline{(\Delta s_x)^2}=\overline{(\Delta s_y)^2}&=\frac{1}{2}\left[\overline{(\Delta s_x)^2}+\overline{(\Delta s_y)^2}\right]=\frac{1}{2}\overline{s_x^2+s_y^2}\\&=\frac{1}{2}\overline{\boldsymbol{s}^2-s_z^2}=\frac{1}{2}(\overline{\boldsymbol{s}^2}-\overline{s_z^2})=\frac{1}{2}\left[\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)-\left(\frac{1}{2}\right)^2\right]\hbar^2=\frac{1}{4}\hbar^2\end{aligned}$$

9.4 具有两个电子的原子处于自旋单态 ($S=0$), 证明自旋 – 轨道耦合作用 $\xi(r)\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}$ 对能量无贡献.

证明 双电子的原子自旋单态记为 $|\psi;00\rangle$, 其中 ψ 标志空间状态. 自旋单态是自旋算符 S_x, S_y 以及 S_z 的零本征值本征态, 即

$$\boldsymbol{S}|\psi;00\rangle=\boldsymbol{0}$$

因而

$$\xi(r)\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}|\psi;00\rangle=\xi(r)\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}|\psi;00\rangle=0$$

上式表明自旋 – 轨道耦合作用 $\xi(r)\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}$ 对能量无贡献.

9.5 设两个自旋为 1/2 的粒子的相互作用为

$$V(r) = V_c(r) + V_T(r)S_{12}$$

第一项为中心势, 第二项为张量势. 而 $S_{12} = 3(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{n})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \boldsymbol{n}) - \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2$, 这里 $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{r}/r$, $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2$ 为从第 2 个粒子到第一个粒子的相对矢径. 证明 (a) 宇称 Π、总自旋平方 $\boldsymbol{S}^2$, 总角动量 $\boldsymbol{J}^2$ 以及 J_z 均为守恒量, 但 $\boldsymbol{L}^2$ 与 $\boldsymbol{S}$ 不是守恒量. (b) 在自旋单态下, 张量力为零.

证明 (a) 为方便, 取 $\hbar = 1$. 总自旋算符和其平方表示为

$$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{s}_1 + \boldsymbol{s}_2 = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2) \tag{9.31}$$

$$\boldsymbol{S}^2 = \frac{3}{2} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 \tag{9.32}$$

总自旋算符沿 $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{r}/r$ 的投影为

$$S_n = \boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{n} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2) \cdot \boldsymbol{n} = \frac{1}{2}(\sigma_{1n} + \sigma_{2n}) \tag{9.33}$$

Pauli 算符 $\boldsymbol{\sigma}$ 沿任何方向的投影 σ_n 都只有 ± 1 两个值, 因而 $\sigma_{1n}^2 = \sigma_{2n}^2 = 1$. 这样

$$S_n^2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sigma_{1n} \cdot \sigma_{2n} \tag{9.34}$$

根据上面式 (9.32)、式 (9.34), 题给 S_{12} 可表示为

$$S_{12} = 3\sigma_{1n} \cdot \sigma_{2n} - \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 = 6S_n^2 - 2\boldsymbol{S}^2 \tag{9.35}$$

题给的 2 粒子系统的 Hamilton 量为

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu} + V_c(r) + V_T(r)S_{12} \tag{9.36}$$

宇称 Π、总自旋平方 $\boldsymbol{S}^2$、总角动量 $\boldsymbol{J}^2$ 、J_z、$\boldsymbol{L}^2$ 以及 $\boldsymbol{S}$ 这 6 个力学量均不含时, 而且它们均与上面 Hamilton 量中$\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}$、$V_c(r)$ 以及 $V_T(r)$ 对易, 因而要知道它们是否守恒量, 只需考察它们与 S_{12} 是否对易. 下面依次考察相关力学量与 S_{12} 的对易关系.

$\boldsymbol{S}$ 为偶宇称算符, $\boldsymbol{r}$ 则是奇性的, 它们在宇称算符 Π 的作用下, $\Pi\boldsymbol{S}\Pi^{-1} = \boldsymbol{S}$, $\Pi\boldsymbol{r}\Pi^{-1} = -\boldsymbol{r}$, 因而 $\Pi S_n \Pi^{-1} = \Pi\boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{n}\Pi^{-1} = -S_n$, 这样根据式 (9.35)

$$\Pi S_{12}\Pi^{-1} = \Pi\left(6S_n^2 - 2\boldsymbol{S}^2\right)\Pi^{-1} = 6S_n^2 - 2\boldsymbol{S}^2 = S_{12}$$

即 $\Pi S_{12}\Pi^{-1} = S_{12}$, 这就是

$$[\Pi, S_{12}] = 0 \tag{9.37}$$

根据总自旋算符对易关系 $[S_\alpha, S_\beta] = \mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}S_\gamma$

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{S}, S_n] &= [\boldsymbol{S}, \boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{n}] = [S_\alpha \boldsymbol{e}_\alpha, S_\beta n_\beta] = [S_\alpha \boldsymbol{e}_\alpha, S_\beta]\, n_\beta = [S_\alpha, S_\beta]\, \boldsymbol{e}_\alpha n_\beta \\ &= \mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}S_\gamma \boldsymbol{e}_\alpha n_\beta = (\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}n_\beta S_\gamma)\boldsymbol{e}_\alpha = \mathrm{i}\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{S}\end{aligned}$$

也就是[①]

$$[\boldsymbol{S}, S_n] = \mathrm{i}\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{S} \tag{9.38}$$

① 另一种作法是由

$$[\boldsymbol{S}, \boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{n}] = \boldsymbol{S}(\boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{n}) - (\boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{n})\boldsymbol{S} = \boldsymbol{n} \times (\boldsymbol{S} \times \boldsymbol{S})$$

利用自旋算符对易关系 $\boldsymbol{S} \times \boldsymbol{S} = \mathrm{i}\boldsymbol{S}$, 直接给出式 (9.38).

由于 $[L_\alpha, x_\beta] = \mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}x_\gamma$, 而 $S_n = \boldsymbol{S}\cdot\dfrac{\boldsymbol{r}}{r} = \dfrac{1}{r}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{r}$, 同样可证

$$[\boldsymbol{L}, S_n] = -\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{S} \tag{9.39}$$

因为 $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}$, 式 (9.38)、式 (9.39) 给出

$$[\boldsymbol{J}, S_n] = 0 \tag{9.40}$$

根据式 (9.35)

$$[\boldsymbol{J}, S_{12}] = 6\left[\boldsymbol{J}, S_n^2\right] - 2\left[\boldsymbol{J}, \boldsymbol{S}^2\right] = 6S_n\left[\boldsymbol{J}, S_n\right] + 6\left[\boldsymbol{J}, S_n\right]S_n - 2\left[\boldsymbol{L}, \boldsymbol{S}^2\right] - 2\left[\boldsymbol{S}, \boldsymbol{S}^2\right] = 0$$

也就是

$$[\boldsymbol{J}, S_{12}] = 0 \tag{9.41}$$

从而

$$\left[\boldsymbol{J}^2, S_{12}\right] = \boldsymbol{J}\cdot[\boldsymbol{J}, S_{12}] + [\boldsymbol{J}, S_{12}]\cdot\boldsymbol{J} = 0 \tag{9.42}$$

因为

$$\left[\boldsymbol{S}^2, S_n\right] = \left[\boldsymbol{S}^2, \boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{n}\right] = \left[\boldsymbol{S}^2, \boldsymbol{S}\right]\cdot\boldsymbol{n} = 0 \tag{9.43}$$

根据式 (9.35)、式 (9.38) 得

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{S}, S_{12}] &= 6\left[\boldsymbol{S}, S_n^2\right] - 2\left[\boldsymbol{S}, \boldsymbol{S}^2\right] = 6S_n\left[\boldsymbol{S}, S_n\right] + 6\left[\boldsymbol{S}, S_n\right]S_n \\ &= 6\mathrm{i}S_n\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{S} + 6\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{S}S_n\end{aligned}$$

因而

$$[\boldsymbol{S}, S_{12}] \neq 0 \tag{9.44}$$

再根据式 (9.35) 得

$$\left[\boldsymbol{S}^2, S_{12}\right] = 6\left[\boldsymbol{S}^2, S_n^2\right] - 2\left[\boldsymbol{S}^2, \boldsymbol{S}^2\right] = 0 \tag{9.45}$$

根据式 (9.35)、式 (9.39) 得

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{L}, S_{12}] &= 6\left[\boldsymbol{L}, S_n^2\right] - 2\left[\boldsymbol{L}, \boldsymbol{S}^2\right] = 6S_n\left[\boldsymbol{L}, S_n\right] + 6\left[\boldsymbol{L}, S_n\right]S_n \\ &= -6\mathrm{i}S_n\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{S} - 6\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{S}S_n \neq 0\end{aligned} \tag{9.46}$$

因而

$$\begin{aligned}\left[\boldsymbol{L}^2, S_{12}\right] &= \boldsymbol{L}\cdot[\boldsymbol{L}, S_{12}] + [\boldsymbol{L}, S_{12}]\cdot\boldsymbol{L} \\ &= -6\mathrm{i}\boldsymbol{L}\cdot S_n\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{S} - 6\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{S}S_n\cdot\boldsymbol{L} \neq 0\end{aligned} \tag{9.47}$$

上面式 (9.46)、式 (9.47) 最后的不等号可以取 $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{e}_z$ 的特例验证. 此时两式分别给出

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{L}, S_{12}] &= 6\mathrm{i}\boldsymbol{e}_x\left(S_zS_y + S_yS_z\right) - 6\mathrm{i}\boldsymbol{e}_y\left(S_zS_x + S_xS_z\right) \neq 0 \\ \left[\boldsymbol{L}^2, S_{12}\right] &= 6\mathrm{i}L_x\left(S_zS_y + S_yS_z\right) - 6\mathrm{i}L_y\left(S_zS_x + S_xS_z\right) \neq 0\end{aligned}$$

综上, 根据 Hamilton 量的形式 (9.36), 以及上述式 (9.37)、式 (9.41)、式 (9.42)、式 (9.45) 可知宇称 Π、总自旋平方 $\boldsymbol{S}^2$, 总角动量 $\boldsymbol{J}^2$ 以及 J_z 均为守恒量, 根据式 (9.44)、式 (9.47) 可知 $\boldsymbol{L}^2$ 与 $\boldsymbol{S}$ 不是守恒量.

(b) 根据题给的张量势, 张量力如下给出

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{f}_T &= -\nabla V_T(r) S_{12} = -\left(\nabla V_T(r)\right) S_{12} - V_T(r) \nabla S_{12} = -\left[\nabla V_T(r)\right] S_{12} - 6 V_T(r) \nabla S_n^2 \\
&= -\left[\nabla V_T(r)\right] S_{12} - 6 V_T(r) \left[\left(\nabla S_n\right) S_n + S_n \nabla S_n\right] \\
&= -\left[\nabla V_T(r)\right] \left(6 S_n^2 - 2\boldsymbol{S}^2\right) - 6 V_T(r) \left[\frac{r^2 \boldsymbol{S} - r\boldsymbol{r} S_n}{r^3} S_n + S_n \frac{r^2 \boldsymbol{S} - r\boldsymbol{r} S_n}{r^3}\right] \\
&= -\left[\nabla V_T(r)\right] \left(6 S_n^2 - 2\boldsymbol{S}^2\right) - \frac{12}{r^2} V_T(r) \left[r \boldsymbol{S} S_n - \boldsymbol{r} S_n^2\right]
\end{aligned} \tag{9.48}
$$

双粒子自旋单态记为 $|\psi;00\rangle$, 其中 ψ 标志空间状态. 自旋单态是自旋算符 S_x、S_y 以及 S_z 的零本征值本征态, 即

$$
\boldsymbol{S}|\psi;00\rangle = \boldsymbol{0}
$$

这样式 (9.48) 作用到 $|\psi;00\rangle$ 即得

$$
\boldsymbol{f}_T|\psi;00\rangle = \boldsymbol{0}
$$

也就是在自旋单态下, 张量力为零.

9.6 自旋为 s 的两个粒子, 对称的与反对称的自旋波函数各有几个? $s=1/2$ 与 $s=3/2$ 情况下, 对称与反对称自旋态各有几个?

解 设两个粒子自旋算符分别为 $\boldsymbol{s}_1$, $\boldsymbol{s}_2$. 不妨分别取 s_{1z} 与 s_{2z} 表象, 两个单粒子自旋态为

$$
\chi_{m_1}(1), \quad \chi_{m_2}(2), \quad m_1, m_2 = -s, -s+1, \cdots, s-1, s \tag{9.49}
$$

均有 $(2s+1)$ 个态, 这样两粒子态个数共有 $(2s+1)^2$. 其中交换对称自旋态如下构造

$$
\chi_m(1)\chi_m(2), \quad (m = -s, -s+1, \cdots, s-1, s) \tag{9.50a}
$$

$$
\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\chi_m(1)\chi_{m'}(2) + \chi_{m'}(1)\chi_m(2)\right], \quad m, m' = -s, -s+1, \cdots, s-1, s,\ m \neq m' \tag{9.50b}
$$

形如式 (9.50a) 为两个单粒子处于相同状态构成的对称自旋态, 共 $(2s+1)$ 个. 形如式 (9.50b) 为两个单粒子处于不同状态构成的对称自旋态, 个数为组合数 $C_{2s+1}^2 = \dfrac{2s(2s+1)}{2} = s(2s+1)$. 这样对称自旋态的个数共有 $(2s+1) + s(2s+1) = (s+1)(2s+1)$.

满足交换反对称的自旋态为两个处于不同单粒子状态的态按如下方式构成

$$
\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\chi_m(1)\chi_{m'}(2) - \chi_{m'}(1)\chi_m(2)\right], \quad m, m' = -s, -s+1, \cdots, s-1, s,\ m \neq m' \tag{9.51}
$$

其个数也为组合数 $C_{2s+1}^2 = \dfrac{2s(2s+1)}{2} = s(2s+1)$.

这样对称自旋态、反对称自旋态的总数为 $(s+1)(2s+1) + s(2s+1) = (2s+1)^2$.

说明 粒子如果只有轨道运动与自旋运动, 则 2 个全同粒子总的对称波函数可以是轨道波函数对称、自旋波函数对称, 也可以是轨道波函数反对称、自旋波函数反对称. 而总的反对称波函数可以是轨道波函数反对称、自旋波函数对称, 也可以是轨道波函数对称、自旋波函数反对称.

9.7 (1) 在 s_z 本征态 $\chi_{1/2}$ 下, 求 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$ 的可能测值及相应的概率, $\boldsymbol{n} = (n_x, n_y, n_z)$ 是单位矢量. (2) 若电子处于 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n} = +1$ 的自旋态下, 求 $\boldsymbol{\sigma}$ 的各分量的可能测值及相应的概率以及 $\boldsymbol{\sigma}$ 的平均值.

解法一 (1) 题 9.2 求得 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$ 的本征矢是

$$
\chi_1 = \begin{pmatrix} \cos\dfrac{\theta}{2} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} \\ \sin\dfrac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad \chi_2 = \begin{pmatrix} \sin\dfrac{\theta}{2} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} \\ -\cos\dfrac{\theta}{2} \end{pmatrix} \tag{9.52}
$$

它们分别为 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$ 的本征值为 ±1 的本征矢. 而

$$\langle\chi_1|\chi_{\frac{1}{2}}\rangle=\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}\end{pmatrix}^{\dagger}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\left(\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi},\sin\frac{\theta}{2}\right)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}$$

$$\langle\chi_2|\chi_{\frac{1}{2}}\rangle=\begin{pmatrix}\sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\\ -\cos\dfrac{\theta}{2}\end{pmatrix}^{\dagger}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\left(\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi},-\cos\frac{\theta}{2}\right)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}$$

由此得

$$\begin{aligned}|\langle\chi_1|\chi_{\frac{1}{2}}\rangle|^2&=\cos^2\frac{\theta}{2}=\frac{1}{2}(1+\cos\theta)=\frac{1}{2}(1+n_z)\\ |\langle\chi_2|\chi_{\frac{1}{2}}\rangle|^2&=\sin^2\frac{\theta}{2}=\frac{1}{2}(1-\cos\theta)=\frac{1}{2}(1-n_z)\end{aligned}\tag{9.53}$$

这样 $\chi_{\frac{1}{2}}$ 下 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$ 的可能测值为 $+1$, -1, 而相应的概率分别为 $\frac{1}{2}(1+n_z)$ 和 $\frac{1}{2}(1-n_z)$.

(2) $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$ 取本征值 1 的自旋态为式 (9.52) 列出的 χ_1. σ_z 的本征态已知为

$$\alpha=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\quad\beta=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\tag{9.54}$$

分别相应于 σ_z 的 $+1$, -1 两个本征值. 而

$$\langle\alpha|\chi_1\rangle=\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi},\quad\langle\beta|\chi_1\rangle=\sin\frac{\theta}{2}$$

因此

$$\begin{aligned}|\langle\alpha|\chi_1\rangle|^2&=\cos^2\frac{\theta}{2}=\frac{1}{2}(1+\cos\theta)=\frac{1}{2}(1+n_z)\\ |\langle\beta|\chi_1\rangle|^2&=\sin^2\frac{\theta}{2}=\frac{1}{2}(1-\cos\theta)=\frac{1}{2}(1-n_z)\end{aligned}\tag{9.55}$$

分别为测 σ_z 为 $+1$, -1 的概率. 故 σ_z 的平均值为

$$\langle\sigma_z\rangle=\frac{1}{2}(1+n_z)-\frac{1}{2}(1-n_z)=n_z\tag{9.56}$$

而 σ_x 的本征态由题 9.1 给出, 可取为

$$\chi_{\frac{1}{2}}(x)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix},\quad\chi_{-\frac{1}{2}}(x)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$$

本征值分别为 $+1$, -1. 由

$$\begin{aligned}\langle\chi_{\frac{1}{2}}(x)|\chi_1\rangle&=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}+\sin\frac{\theta}{2}\right)\\ \langle\chi_{-\frac{1}{2}}(x)|\chi_1\rangle&=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}-\sin\frac{\theta}{2}\right)\end{aligned}$$

得相应的概率为

$$\begin{aligned}|\langle\chi_{\frac{1}{2}}(x)|\chi_1\rangle|^2&=\frac{1}{2}(1+\sin\theta\cos\varphi)=\frac{1}{2}(1+n_x)\\ |\langle\chi_{-\frac{1}{2}}(x)|\chi_1\rangle|^2&=\frac{1}{2}(1-\sin\theta\cos\varphi)=\frac{1}{2}(1-n_x)\end{aligned}\tag{9.57}$$

故 σ_x 的平均值为

$$\langle\sigma_x\rangle=\frac{1}{2}(1+n_x)-\frac{1}{2}(1-n_x)=n_x \tag{9.58}$$

在式 (9.52) 中取 $\theta=\varphi=\dfrac{\pi}{2}$ 得 σ_y 的本征态为

$$\chi_{\frac{1}{2}}(y)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}-\mathrm{i}\\1\end{pmatrix},\quad \chi_{-\frac{1}{2}}(y)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}-\mathrm{i}\\-1\end{pmatrix}$$

本征值分别为 $+1$, -1. 由

$$\langle\chi_{\frac{1}{2}}(y)|\chi_1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\mathrm{i}\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}+\sin\frac{\theta}{2}\right),$$

$$\langle\chi_{-\frac{1}{2}}(y)|\chi_1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\mathrm{i}\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}-\sin\frac{\theta}{2}\right)$$

得相应的概率为

$$\begin{aligned}|\langle\chi_{\frac{1}{2}}(y)|\chi_1\rangle|^2&=\frac{1}{2}(1+\sin\theta\sin\varphi)=\frac{1}{2}(1+n_y)\\|\langle\chi_{-\frac{1}{2}}(y)|\chi_1\rangle|^2&=\frac{1}{2}(1-\sin\theta\sin\varphi)=\frac{1}{2}(1-n_y)\end{aligned} \tag{9.59}$$

故 σ_y 的平均值为

$$\langle\sigma_y\rangle=\frac{1}{2}(1+n_y)-\frac{1}{2}(1-n_y)=n_y \tag{9.60}$$

如前面式 (9.55)$\sim$ 式 (9.60) 所给, 在 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}=+1$ 的自旋态下, $\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle=\boldsymbol{n}$; 对于 $\alpha=x,y,z$, 该态下 σ_α 取值为 ±1 的概率分别为 $\dfrac{1}{2}(1\pm n_\alpha)$.

解法二 (1) 在 $\sigma_z=1$ 的自旋态 $\chi_{\frac{1}{2}}$, σ_n 的可能测值为本征值 ±1; 设相应概率为 P_+ 及 P_-, 则

$$\langle\sigma_n\rangle=1\cdot P_++(-1)\cdot P_-=P_+-P_- \tag{9.61}$$

另一方面, 在 σ_z 本征态 $\chi_{\frac{1}{2}}$ 下, σ_x 与 σ_y 的平均值为零, 因而在该态下

$$\langle\sigma_n\rangle=\langle\sigma_xn_x+\sigma_yn_y+\sigma_zn_z\rangle=\langle\sigma_z\rangle n_z=n_z=\cos\theta \tag{9.62}$$

式 (9.61)、式 (9.62) 给出

$$P_+-P_-=n_z=\cos\theta \tag{9.63}$$

上式与归一化条件 $P_++P_-=1$ 联立求解得

$$P_+=\frac{1}{2}(1+n_z),\quad P_-=\frac{1}{2}(1-n_z) \tag{9.64}$$

上式与解法一的式 (9.53) 一致.

(2) 在式 (9.62) 中, θ 是 z 轴和 $\boldsymbol{n}$ 的夹角. z 轴和 $\boldsymbol{n}$ 的选取是任意的, 我们也可将它们互换, 使得原来的 z 轴作为新的 $\boldsymbol{n}$, 原来的 $\boldsymbol{n}$ 取作新的 z 轴, 二者夹角当然没有变. 由此可知, 在 $\sigma_n=1$ 的自旋态, σ_z 的平均值也为 $\cos\theta$, 即 n_z. 我们将 x, y, z 轮换, 即得在 $\sigma_n=1$ 的自旋态 χ_1 下 Pauli 算符的期望值为

$$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle=\boldsymbol{n} \tag{9.65}$$

这与解法一的式 (9.56)、式 (9.58) 和式 (9.60) 一致. 在 χ_1 态, $\boldsymbol{\sigma}$ 各分量的取值当然也为 ±1, 仿照 (a) 中计算, 可得

$$\begin{aligned}
&\sigma_x = \pm1\text{的概率分别为}\frac{1}{2}(1 \pm n_x)\\
&\sigma_y = \pm1\text{的概率分别为}\frac{1}{2}(1 \pm n_y)\\
&\sigma_z = \pm1\text{的概率分别为}\frac{1}{2}(1 \pm n_z)
\end{aligned} \tag{9.66}$$

这与解法一的式 (9.55)、式 (9.57) 和式 (9.59) 一致.

9.8 满足 $U^\dagger U = UU^\dagger = 1$(幺正), $\det U = 1$(幺模) 的 n 维矩阵称为 SU_n 矩阵. 求 SU_2 的一般形式.

解 设

$$U = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \quad U^\dagger = \begin{pmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{pmatrix} \tag{9.67}$$

条件 $U^\dagger U = 1$ 给出

$$aa^* + cc^* = bb^* + dd^* = 1 \tag{9.68a}$$

$$a^*b + c^*d = ab^* + cd^* = 0 \tag{9.68b}$$

条件 $UU^\dagger = 1$ 给出

$$aa^* + bb^* = cc^* + dd^* = 1 \tag{9.69a}$$

$$ac^* + bd^* = a^*c + b^*d = 0 \tag{9.69b}$$

条件 $\det U = 1$ 给出

$$ad - bc = 1 \tag{9.70}$$

由式 (9.68a) 以及式 (9.69a) 易得

$$bb^* = cc^*, \quad aa^* = dd^*$$

上式综合式 (9.68)~ 式 (9.70), 可以令

$$\begin{aligned}
a &= \cos\omega \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}, \quad b = \sin\omega \mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta}\\
d &= \cos\omega \mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma}, \quad c = \sin\omega \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}
\end{aligned} \tag{9.71}$$

上面 α, β, γ, δ 和 ω 为实参量. 将式 (9.71) 代入式 (9.70) 得

$$\cos^2\omega \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\alpha+\gamma)} - \sin^2\omega \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\beta+\delta)} = 1 \tag{9.72}$$

式 (9.72) 左边最大值为 1, 这只有当

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\alpha+\gamma)} = 1, \quad \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\beta+\delta)} = -1$$

时取到, 或者

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}, \quad \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta} = -\mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta}$$

代入式 (9.71), 进而得

$$U = \begin{pmatrix} \cos\omega \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha} & \sin\omega \mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta} \\ -\sin\omega \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta} & \cos\omega \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha} \end{pmatrix}$$

α, β, ω 为三个实参量. 这是所求 SU_2 的一般形式.

说明 2×2 的幺正、幺模矩阵一般表达式的另一种表示法为

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\theta}} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}}$$

其意义是将自旋态绕 $\boldsymbol{n}$ 方向旋转 -2θ, 它有 3 个独立参数.

9.9 讨论下列算符是否存在. 如存在, 将它表示成 σ_x, σ_y, σ_z 和 1 的线性叠加.

(1) $(1+\sigma_x)^{1/2}$; (2) $(1+\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y)^{1/2}$; (3) $(1+\sigma_x)^{-1}$

解法一 (1) 记 σ_x, σ_y, σ_z 和 1 为 σ_1, σ_2, σ_3 和 σ_0, 它们构成 2×2 复矩阵的完备基. σ_i 的乘法满足如下代数关系

$$\sigma_i\sigma_j=\delta_{ij}+\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_k,\quad i,j,k=1,2,3 \tag{9.73}$$

$1+\sigma_x$ 为一非负定的 Hermite 算符, 作开方运算结果仍为一 Hermite 算符. 由于 $\sigma_\alpha(\alpha=0,1,2,3)$ 的完备性, 可设

$$(1+\sigma_x)^{1/2}=\sum_\alpha C_\alpha\sigma_\alpha \tag{9.74}$$

两边平方, 利用式 (9.73) 得

$$1+\sigma_1=\sum_{\alpha=0}^{3}C_\alpha^2+2C_0\sum_{i=1}^{3}C_i\sigma_i+0$$

比较两边相同项的系数, 得

$$\sum_{\alpha=0}^{3}C_\alpha^2=1,\quad 2C_0C_1=1,\quad 2C_0C_2=2C_0C_3=0$$

解得

$$C_0=C_1=\frac{1}{\sqrt{2}},\quad C_2=C_3=0$$

另一解 $C_0=C_1=-\dfrac{1}{\sqrt{2}}, C_2=C_3=0$ 舍去. 这样

$$(1+\sigma_x)^{1/2}=\frac{1}{\sqrt{2}}(1+\sigma_x)$$

(2) 我们设

$$(1+\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y)^{1/2}=(1+\sigma_1+\mathrm{i}\sigma_2)^{1/2}=\sum_\alpha C_\alpha\sigma_\alpha \tag{9.75}$$

两边平方, 利用式 (9.73) 得

$$1+\sigma_1+\mathrm{i}\sigma_2=\sum_{\alpha=0}^{3}C_\alpha^2+2C_0\sum_{i=1}^{3}C_i\sigma_i+0$$

比较两边相同项的系数, 得

$$\sum_{\alpha=0}^{3}C_\alpha^2=1,\quad 2C_0C_1=1,\quad 2C_0C_2=\mathrm{i},\quad 2C_0C_3=0$$

上式有 2 组解, 取 $C_0>0$ 的解得

$$C_0=1,\quad C_1=\frac{1}{2},\quad C_2=\frac{\mathrm{i}}{2},\quad C_3=0$$

这样

$$(1+\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y)^{1/2}=1+\frac{1}{2}(\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y)$$

(3) 在 σ_x 表象易知 $\det(1+\sigma_x)=0$, 故 $(1+\sigma_x)$ 无逆矩阵, 即 $(1+\sigma_x)^{-1}$ 不存在.

解法二[①] (1) 利用本题附录, 可设

$$(1+\sigma_x)^{1/2}=C_0I+C_1\sigma_x$$

① 参考吴强, 柳盛典, 量子力学习题精解 [M], 科学出版社, 2003, p.94~96.

上式分别作用到 σ_x 的 2 个本征态上给出

$$\sqrt{2} = C_0 + C_1, \quad C_0 - C_1 = 0$$

解得

$$C_0 = C_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad C_2 = C_3 = 0$$

这样

$$(1+\sigma_x)^{1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1+\sigma_x)$$

(2) 令 $A = \sigma_x + \mathrm{i}\sigma_y$, A 的本征值为 0(二重根), 且 A 不能通过相似变换对角化. 令

$$(1+A)^{1/2} = C_0 + C_1 A$$

上式的导数

$$\frac{1}{2}(1+A)^{-1/2} = C_1$$

将以上两式作用于 A 的本征态 (本征值为 0) 上有

$$C_0 = 1, \quad C_1 = \frac{1}{2}$$

因而

$$(1+\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y)^{1/2} = 1 + \frac{1}{2}(\sigma_x + \mathrm{i}\sigma_y)$$

与前面解答一致.

附录 (有限维算符 (矩阵) 整函数展开的一种简单方法) 设 A 为 n 维方阵, 由线性代数中的 Hamilton-Cayley 定理, 构造关于 λ 的 n 次多项式 $\varphi(\lambda) = \det(A - \lambda I)$, 必有 $\varphi(A) = 0$. 由于 $\varphi(\lambda)$ 为 λ 的 n 次多项式, 故

$$\sum_{i=0}^{n-1} C_i A^i + A^n = 0$$

即 A^n(从而任意的 A^k, $k \geqslant n$) 可由 $I, A, \cdots, A^{n-1}$ 线性表示, 因此对于任意的整函数 $f(x) = \sum_{i=0} C_i x^i$, 有

$$f(A) = \sum_{i=0}^{n-1} b_i A^i \tag{9.76}$$

若 A 的本征值 $\lambda_i (i = 1, 2, 3, \cdots, n)$ 皆为单根, 可将式 (9.76) 作用于 A 的相互独立的 n 个本征态 $|\lambda_i\rangle$ 上有

$$f(\lambda_i) = \sum_{l=0}^{n-1} b_l \lambda_i^l, \quad i = 1, 2, 3, \cdots, n \tag{9.77}$$

这是关于 b_l 的 n 个独立方程, 可将 $f(A)$ 中 n 个系数 b_l $(l = 0, 1, 2, \cdots, n-1)$ 解出.

若 λ_i 中有重根, 不妨假设 λ_j 为 f_j 重根. 方程组 (9.77) 中 n 个方程不独立. 但我们可将式 (9.76) 及其 1 至 $(f_j - 1)$ 阶导数, 作用到 f_j 重根 λ_j 对应的本征态 $|\lambda_j\rangle$ 上, 这样仍可有 n 个独立方程以确定 b_l $(l = 0, 1, 2, \cdots, n-1)$. 对于 λ_i 中有重根, 但 A 是可对角化的 (相似变换), 这时式 (9.76) 可简化. 设 A 的所有互异的本征值为 λ_i $(i = 1, 2, 3, \cdots, m < n)$, 可证 A 的最简单多项式为

$$m_A(\lambda) = \prod_{i=1}^{m} (\lambda - \lambda_i)$$

即有

$$m_A(A)=0$$

这时 $f(A)$ 的展开式为

$$f(A)=\sum_{l=0}^{n-1}C_lA^l$$

9.10 化简 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_\alpha\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}$, $\alpha=x,y$, λ 为常数.

解法一 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}$ 仍是 2×2 矩阵, 故可令

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}=C_0+C_1\sigma_x+C_2\sigma_y+C_3\sigma_z \tag{9.78}$$

将式 (9.78) 作用于 σ_z 的本征态 $\chi_{1/2}$, 利用

$$\begin{aligned}&\sigma_z\chi_{1/2}=\chi_{1/2},\quad \sigma_x\chi_{1/2}=\chi_{-1/2},\quad \sigma_y\chi_{1/2}=\mathrm{i}\chi_{-1/2}\\&\sigma_z\chi_{-1/2}=-\chi_{1/2},\quad \sigma_x\chi_{-1/2}=\chi_{1/2},\quad \sigma_y\chi_{-1/2}=-\mathrm{i}\chi_{1/2}\end{aligned} \tag{9.79}$$

即得

$$\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\lambda}\chi_{-1/2}=(C_0+C_3)\chi_{1/2}+(C_1+\mathrm{i}C_2)\chi_{-1/2}$$

比较上式两端关于 $\chi_{\pm1/2}$ 的系数, 有

$$C_0+C_3=0 \tag{9.80}$$

$$C_1+\mathrm{i}C_2=\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\lambda} \tag{9.81}$$

再将式 (9.78) 作用于 σ_z 的本征态 $\chi_{-1/2}$, 利用式 (9.79), 即得

$$\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\lambda}\chi_{1/2}=(C_1-\mathrm{i}C_2)\chi_{1/2}+(C_0-C_3)\chi_{-1/2}$$

比较上式两端关于 $\chi_{\pm1/2}$ 的系数, 有

$$C_0-C_3=0 \tag{9.82}$$

$$C_1-\mathrm{i}C_2=\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\lambda} \tag{9.83}$$

式 (9.80)~ 式 (9.83) 联立求解得

$$C_0=C_3=0,\quad C_1=\cos2\lambda,\quad C_2=-\sin2\lambda$$

故代入式 (9.78), 即有 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}=\sigma_x\cos2\lambda-\sigma_y\sin2\lambda$.

类似的, 令

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_y\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}=D_0+D_1\sigma_x+D_2\sigma_y+D_3\sigma_z \tag{9.84}$$

分别作用到 χ_+、χ_-, 利用式 (9.79) 得到

$$\mathrm{i}\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\lambda}\chi_{-1/2}=(D_0+D_3)\chi_{1/2}+(D_1+\mathrm{i}D_2)\chi_{-1/2}$$

$$-\mathrm{i}\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\lambda}\chi_{1/2}=(D_1-\mathrm{i}D_2)\chi_{1/2}+(D_0-D_3)\chi_{-1/2}$$

比较上式两端关于 $\chi_{\pm1/2}$ 的系数, 有

$$D_0+D_3=0$$

$$D_1+\mathrm{i}D_2=\mathrm{i}\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\lambda}$$

$$D_1-\mathrm{i}D_2=-\mathrm{i}\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\lambda}$$

$$D_0-D_3=0$$

上面四式联立求解, 即得

$$D_0 = D_3 = 0, \quad D_1 = \sin 2\lambda, \quad D_2 = \cos 2\lambda$$

故代入式 (9.84), 即有 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_y\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z} = \sigma_y\cos 2\lambda + \sigma_x \sin 2\lambda$.

下面再列出 3 种不同解法 (以计算 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}$ 为例), 并附上 3 个讨论.

解法二 利用公式 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z} = \cos\lambda + \mathrm{i}\sigma_z\sin\lambda$(见教材 P286), 则有

$$\begin{aligned}
\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z} &= (\cos\lambda + \mathrm{i}\sigma_z\sin\lambda)\,\sigma_x\,(\cos\lambda - \mathrm{i}\sigma_z\sin\lambda) \\
&= (\sigma_x\cos\lambda + \mathrm{i}\sigma_z\sigma_x\sin\lambda)\,(\cos\lambda - \mathrm{i}\sigma_z\sin\lambda) \\
&= (\sigma_x\cos\lambda - \sigma_y\sin\lambda)\,(\cos\lambda - \mathrm{i}\sigma_z\sin\lambda) \\
&= \sigma_x\cos^2\lambda - \sigma_y\sin\lambda\cos\lambda - \mathrm{i}\sigma_x\sigma_z\sin\lambda\cos\lambda + \mathrm{i}\sigma_y\sigma_z\sin^2\lambda \\
&= \sigma_x\cos^2\lambda - \sigma_y\sin\lambda\cos\lambda - \sigma_y\sin\lambda\cos\lambda - \sigma_x\sin^2\lambda \\
&= \sigma_x\cos 2\lambda - \sigma_y\sin 2\lambda
\end{aligned}$$

解法三 题 4.37 给出

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

取 $A = \mathrm{i}\lambda\sigma_z$, $B = \sigma_x$, 再利用 $[\sigma_i, \sigma_j] = 2\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_k$, 得

$$\begin{aligned}
\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z} &= \sigma_x + [\mathrm{i}\lambda\sigma_z, \sigma_x] + [\mathrm{i}\lambda\sigma_z, [\mathrm{i}\lambda\sigma_z, \sigma_x]] + \cdots \\
&= \sigma_x\left(1 - \frac{(2\lambda)^2}{2!} + \cdots + (-1)^k\frac{(2\lambda)^{2k}}{(2k)!} + \cdots\right) \\
&\quad -\sigma_y\left(2\lambda - \frac{(2\lambda)^3}{3!} + \cdots + (-1)^k\frac{(2\lambda)^{2k+1}}{(2k+1)!} + \cdots\right) \\
&= \sigma_x\cos 2\lambda - \sigma_y\sin 2\lambda
\end{aligned}$$

解法四 设 $f(\lambda) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}$, 对 $f(\lambda)$ 求微商得

$$\begin{aligned}
f' = \frac{\partial f}{\partial\lambda} &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}(\mathrm{i}\sigma_z\sigma_x - \mathrm{i}\sigma_x\sigma_z)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z} = \mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}[\sigma_z, \sigma_x]\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z} \\
&= -2\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_y\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}; \\
f^{(2)} = \frac{\partial^2 f}{\partial\lambda^2} &= \frac{\partial f'}{\partial\lambda} = -2\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}(\mathrm{i}\sigma_z\sigma_y - \mathrm{i}\sigma_y\sigma_z)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z} \\
&= -2\mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}[\sigma_z, \sigma_y]\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z} = -4\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z} = -4f
\end{aligned}$$

这样得 f 关于 λ 的微分方程

$$\frac{\partial^2 f}{\partial\lambda^2} + 4f = 0$$

解方程得

$$f(\lambda) = C_1\cos 2\lambda + C_2\sin 2\lambda$$

由 $\lambda = 0$ 处 $f(\lambda)$、$f'(\lambda)$ 的值即得

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z} = f(\lambda) = \sigma_x\cos 2\lambda - \sigma_y\sin 2\lambda$$

讨论 1 上面计算了 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}$、$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_y\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}$, 通过 x, y, z 的轮换又可写出另外四个关系式, 当然还有 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_k}\sigma_k\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_k} = \sigma_k (k = 1, 2, 3)$. 这 9 个式子可以统一写为

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_k}\boldsymbol{\sigma}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_k} = \boldsymbol{e}_k\sigma_k + \boldsymbol{e}_k\times\boldsymbol{\sigma}\sin 2\lambda + (\boldsymbol{e}_k\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{e}_k\cos 2\lambda$$

其中 $k=1,2$ 或 3. 上述结果意味着 σ_1, σ_2 以及 σ_3 分别是使得算符 (当然也是自旋态) 绕 x, y 及 z 旋转的变换生成元.

讨论 2 由于绕 k 轴的转动为 $U(k)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_k}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda e_k\cdot\boldsymbol{\sigma}}$, $k=1,2$ 或 3. 我们可写出绕空间 $\boldsymbol{n}$ 方向的转动算符为 $U(\boldsymbol{n})=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}$, 且可对照讨论 1 直接写出

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{\sigma}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}=\boldsymbol{n}\left(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\right)+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin 2\lambda+\left(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\right)\times\boldsymbol{n}\cos 2\lambda$$

参见题 9.12 的证明和讨论.

讨论 3 本题的四种证法中, 第一种与第二种要用到 1/2 自旋的特殊性质. 但第三种与第四种只用到对易关系, 据此我们通过第三种或第四种的证明过程可知, 我们可以直接写出

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}n\cdot\boldsymbol{L}}\boldsymbol{A}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\cdot\boldsymbol{L}}\ (A=x,p,L,\cdots),\quad \mathrm{e}^{\mathrm{i}n\cdot\boldsymbol{J}}\boldsymbol{B}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\cdot\boldsymbol{J}}\ (B=x,p,L,\sigma,J,\cdots),\quad \cdots$$

的结果. 有时直接通过对易关系计算较麻烦甚至不可能, 此时可考虑计算 1/2 自旋的特殊情形, 然后根据对易关系相同, 可直接写出结果. 这也是一种非常有用的计算技巧.

9.11 设 $f(\sigma_z)$ 是可以展开成 σ_z 幂级数的任意函数. 证明

$$f(\sigma_z)\sigma_\pm=\sigma_\pm f(\sigma_z\pm 2)$$

特例

$$\mathrm{e}^{\xi\sigma_z}\sigma_\pm=\sigma_\pm\mathrm{e}^{\xi\sigma_z}\mathrm{e}^{\pm 2\xi}$$

定义

$$\sigma_\pm=\sigma_x\pm\mathrm{i}\sigma_y$$

(1) 计算对易关系 $[\sigma_+,\ \sigma_-]$ 和 $[\sigma_z,\ \sigma_\pm]$; (2) 计算 σ_+^2, σ_-^2; (3) 证明 $\mathrm{e}^{\xi\sigma_z}\sigma_\pm\mathrm{e}^{-\xi\sigma_z}=\sigma_\pm\mathrm{e}^{\pm 2\xi}$, 其中 ξ 为常数.

解 (1) 利用 Pauli 算符的代数关系 $\sigma_i\sigma_j=\delta_{ij}+\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_k$, 得

$$\sigma_+\sigma_-=\left(\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y\right)\left(\sigma_x-\mathrm{i}\sigma_y\right)=\sigma_x^2+\sigma_y^2-\mathrm{i}\left[\sigma_\mathrm{x},\sigma_\mathrm{y}\right]=2\left(1+\sigma_\mathrm{z}\right)$$
$$\sigma_-\sigma_+=\left(\sigma_x-\mathrm{i}\sigma_y\right)\left(\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y\right)=\sigma_x^2+\sigma_y^2+\mathrm{i}\left[\sigma_\mathrm{x},\sigma_\mathrm{y}\right]=2\left(1-\sigma_\mathrm{z}\right)$$

这样

$$[\sigma_+,\sigma_-]=4\sigma_z \tag{9.85}$$

并有

$$[\sigma_z,\sigma_+]=[\sigma_z,\sigma_x]+\mathrm{i}\left[\sigma_z,\sigma_y\right]=2\mathrm{i}\sigma_y+2\sigma_x=2\sigma_+ \tag{9.86}$$

此式的 Hermite 共轭为

$$[\sigma_z,\sigma_-]=-2\sigma_- \tag{9.87}$$

(2) 接下来

$$\sigma_+^2=\left(\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y\right)^2=\sigma_x^2-\sigma_y^2+\mathrm{i}\left(\sigma_x\sigma_y+\sigma_y\sigma_x\right)=0$$

即 $\sigma_+^2=0$, 再对此式取 Hermite 共轭得 $\sigma_-^2=0$.

(3) 式 (9.86)、式 (9.87) 可改写为

$$\sigma_z\sigma_\pm=\sigma_\pm\left(\sigma_z\pm 2\right) \tag{9.88}$$

这样对于正整数 n

$$\sigma_z^n\sigma_\pm=\sigma_z^{n-1}\sigma_\pm\left(\sigma_z\pm 2\right)=\cdots=\sigma_\pm\left(\sigma_z\pm 2\right)^n \tag{9.89}$$

式 (9.89) 对于 $n=0$ 也成立. 对于可以写成对 σ_z 的幂级数形式的 $f(\sigma_z)$, 利用式 (9.89) 结果 $f(\sigma_z)\sigma_\pm=\sigma_\pm f(\sigma_z\pm 2)$. 因而对于 $f(\sigma_z)=\mathrm{e}^{\xi\sigma_z}$ 有

$$\mathrm{e}^{\xi\sigma_z}\sigma_\pm=\sigma_\pm\mathrm{e}^{\xi\sigma_z}\mathrm{e}^{\pm 2\xi}$$

或者

$$\mathrm{e}^{\xi\sigma_z}\sigma_\pm\mathrm{e}^{-\xi\sigma_z}=\sigma_\pm\mathrm{e}^{\pm 2\xi} \tag{9.90}$$

说明 在式 (9.90) 中取 $\xi=\mathrm{i}\lambda$(其中 λ 为实数) 则为

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}=\sigma_+\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\lambda},\quad \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}=\sigma_-\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\lambda}$$

此两式相加和相减, 即为题 9.10 的又一种解法.

9.12 设 λ 为常数, $\boldsymbol{n}$ 为任意方向的单位矢量, 证明

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{\sigma}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}=\boldsymbol{n}\sigma_n+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin 2\lambda+(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n}\cos 2\lambda \tag{9.91}$$

式中 $\sigma_n=\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}$.

证法一 利用公式 (例如见教材 p286)

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_n}=\cos\lambda+\mathrm{i}\sigma_n\sin\lambda \tag{9.92}$$

可得

$$\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}},\boldsymbol{\sigma}\right]=\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_n},\boldsymbol{\sigma}\right]=\mathrm{i}\sin\lambda\left[\sigma_n,\boldsymbol{\sigma}\right]=\mathrm{i}\sin\lambda\left(-2\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\right)=2\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin\lambda \tag{9.93}$$

其中利用了 $[6\cdot\boldsymbol{n},6]=-2\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times 6$, 因此

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{\sigma}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}&=\left(\boldsymbol{\sigma}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}+2\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin\lambda\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}\\&=\boldsymbol{\sigma}+2\left(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\right)\sin\lambda\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}=\boldsymbol{\sigma}+2\left(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\right)\left(\cos\lambda-\mathrm{i}\sigma_n\sin\lambda\right)\sin\lambda\end{aligned}$$

也就是

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{\sigma}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}=\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin 2\lambda-2\mathrm{i}\left(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\right)\sigma_n\sin^2\lambda \tag{9.94}$$

式 (9.94) 取共轭, 由于 $\boldsymbol{\sigma}$、σ_n 均为厄米算符, 可得

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{\sigma}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}=\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin 2\lambda+2\mathrm{i}\sigma_n\left(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\right)\sin^2\lambda \tag{9.95}$$

式 (9.94)、式 (9.95) 两式相加除以 2, 即得

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{\sigma}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}&=\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin 2\lambda+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\left[\sigma_n,\boldsymbol{\sigma}\right]\sin^2\lambda\\&=\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin 2\lambda+2\boldsymbol{n}\times\left(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\right)\sin^2\lambda\\&=\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin 2\lambda+\left(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\right)\times\boldsymbol{n}\left(\cos 2\lambda-1\right)\end{aligned} \tag{9.96}$$

再利用 $(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n}=\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{n}\sigma_n$, 即得式 (9.91).

证法二 视 λ 为参变量, $\boldsymbol{n}$ 则固定不变, 令

$$U(\lambda)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}},\quad U^\dagger(\lambda)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}} \tag{9.97}$$

$$\boldsymbol{f}(\lambda)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{\sigma}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}=U^\dagger(\lambda)\boldsymbol{\sigma}U(\lambda) \tag{9.98}$$

初始条件

$$\boldsymbol{f}(0)=\boldsymbol{\sigma} \tag{9.99}$$

式 (9.98) 两边对参变量 λ 求导, 可得

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{f}}{\mathrm{d}\lambda}&=\mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}\left[\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\sigma}\right]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}\\&=\mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}\left(-2\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}=2\boldsymbol{n}\times\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{\sigma}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}\end{aligned}$$

也就是

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{f}}{\mathrm{d}\lambda}=2\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}\tag{9.100}$$

由式 (9.98)

$$\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{f}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}=\sigma_n\tag{9.101}$$

用 $\boldsymbol{n}$ 从左边对式 (9.100) 作叉乘得到

$$\boldsymbol{n}\times\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{f}}{\mathrm{d}\lambda}=2\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f})=2\boldsymbol{n}\left(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{f}\right)-2\boldsymbol{f}=2\boldsymbol{n}\sigma_n-2\boldsymbol{f}\tag{9.102}$$

式 (9.100)+i× 式 (9.102) 即得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\left(\boldsymbol{f}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}\right)=-2\mathrm{i}\left(\boldsymbol{f}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}-\boldsymbol{n}\sigma_n\right)$$

因 $\boldsymbol{n}$ 为常矢量, 上式也即

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\left(\boldsymbol{f}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}-\boldsymbol{n}\sigma_n\right)=-2\mathrm{i}\left(\boldsymbol{f}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}-\boldsymbol{n}\sigma_n\right)\tag{9.103}$$

式 (9.103) 作为 λ 的一阶微分方程, 积分即得

$$\begin{aligned}\boldsymbol{f}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}-\boldsymbol{n}\sigma_n&=\left[\boldsymbol{f}(0)+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(0)-\boldsymbol{n}\sigma_n\right]\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\lambda}\\&=\left(\boldsymbol{\sigma}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{n}\sigma_n\right)\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\lambda}\end{aligned}\tag{9.104}$$

式 (9.104) 取共轭, 由于 σ_n、$\boldsymbol{f}(\lambda)$ 以及 $\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(\lambda)$ 均为厄米算符, 可得

$$\boldsymbol{f}-\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}-\boldsymbol{n}\sigma_n=\left(\boldsymbol{\sigma}-\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{n}\sigma_n\right)\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\lambda}\tag{9.105}$$

式 (9.104)、式 (9.105) 两式相加并除以 2, 即得

$$\boldsymbol{f}(\lambda)=\boldsymbol{\sigma}\cos 2\lambda+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin 2\lambda+\boldsymbol{n}\sigma_n(1-\cos 2\lambda)\tag{9.106}$$

由于 $(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n}=\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{n}\sigma_n$, 式 (9.106) 又可以化为

$$\boldsymbol{f}(\lambda)=\boldsymbol{n}\sigma_n+(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n}\cos 2\lambda+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin 2\lambda\tag{9.107}$$

此即所要证明的式 (9.91).

讨论 如取 $\boldsymbol{n}$ 沿 z 轴, 即取 $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{e}_z$, 则 $\sigma_n=\sigma_z$, $\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}=\boldsymbol{e}_y\sigma_x-\boldsymbol{e}_x\sigma_y$, $(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n}=\boldsymbol{e}_x\sigma_x+\boldsymbol{e}_y\sigma_y$, 此时式 (9.91) 为

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\boldsymbol{\sigma}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}=\boldsymbol{e}_z\sigma_z+\boldsymbol{e}_x(\sigma_x\cos 2\lambda-\sigma_y\sin 2\lambda)+\boldsymbol{e}_y(\sigma_x\sin 2\lambda+\sigma_y\cos 2\lambda)$$

此式等价于

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}&=\sigma_x\cos 2\lambda-\sigma_y\sin 2\lambda\\\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_y\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}&=\sigma_y\cos 2\lambda+\sigma_x\sin 2\lambda\end{aligned}$$

与题 9.10 的结果相同.

说明 本题第一种证法用到了 1/2 自旋的特殊性质, 但第二种只用到对易关系. 所以本题结果可以推广到一般的角动量算符. 与题 9.10 的解法 (题 9.24 又给出题 9.10 的一种新解法) 相比, 这里的第一种证法与题 9.10 的第二种算法类似, 其余几种作法两题不重复, 但都可以互用.

9.13 自旋为 $\hbar/2$, 内禀磁矩为 μ_0 的粒子, 在空间分布均匀但随时间改变的磁场 $\boldsymbol{B}(t)$ 中运动, 证明粒子的波函数可以表示成空间函数与自旋函数之积, 而且空间函数与自旋函数分别满足各自的波动方程.

证明 考虑自旋自由度, 内禀磁矩导致 Hamilton 量的附加项, 因而总 Hamilton 量

$$H = H_{\mathrm{o}} + H_{\mathrm{s}} \tag{9.108}$$

H_{o} 与自旋无关, 不妨称轨道运动 Hamilton 量; H_{s} 与空间坐标无关, 不妨称自旋运动 Hamilton 量. 而 H_{o} 与 H_{s} 分别如下给出

$$H_{\mathrm{o}} = \frac{1}{2\mu}\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + q\varphi, \quad H_{\mathrm{s}} = -\mu_0 \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}(t) \tag{9.109}$$

Schrödinger 方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,y,z,s_z,t) = H\Psi(x,y,z,s_z,t) \tag{9.110}$$

取如下轨道、自旋变量分离形式的波函数

$$\Psi(x,y,z,s_z,t) = \psi(x,y,z,t)\chi(s_z,t) \tag{9.111}$$

其中

$$\chi(s_z,t) = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} \tag{9.112}$$

代入 Schrödinger 方程 (9.110) 得

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}\chi + \mathrm{i}\hbar\psi\frac{\partial\chi}{\partial t} = (H_{\mathrm{o}}\psi)\,\chi + \psi H_{\mathrm{s}}\chi$$

或者

$$\frac{1}{\psi}\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} - H_{\mathrm{o}}\psi\right)\chi = -\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\chi}{\partial t} - H_{\mathrm{s}}\chi\right)$$

上面方程右边不含有空间变量, 这要求

$$\frac{1}{\psi}\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} - H_{\mathrm{o}}\psi\right) = C$$

C 是常数 (可能是时间的函数). 由此得

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = (H_{\mathrm{o}} + C)\,\psi$$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\chi(s_z,t) = (H_{\mathrm{s}} - C)\,\chi(s_z,t)$$

对轨道、自旋波函数同时作相位变换

$$\psi = \psi_1 \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t} C(t')\mathrm{d}t'}, \quad \chi = \chi_1 \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t} C(t')\mathrm{d}t'}$$

代入上式, 可知新的轨道、自旋波函数满足的方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_1 = H_{\mathrm{o}}\psi_1 \tag{9.113}$$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\chi_1(s_z,t) = H_{\mathrm{s}}\chi_1(s_z,t) \tag{9.114}$$

因为 $\psi_1\chi_1 = \psi\chi$, 式 (9.110) 中的 Ψ 可写为 $\Psi = \psi_1\chi_1$, 即可以写成空间函数与自旋函数之积, 而二者分别满足上面的方程, 其演化分别由 H_{o} 与 H_{s} 决定.

说明 体系一般的态为式 (9.110) 空间函数与自旋函数之积形式的态的叠加, 故一般形式的态不一定可写为空间函数与自旋函数之积也就是空间、自旋分离的形式.

9.14 同上题, 设磁场 $\boldsymbol{B}$ 沿 z 轴方向, 在 $t=0$ 时, 自旋波函数为

$$\begin{pmatrix} a(0) \\ b(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}\sin\delta \\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\cos\delta \end{pmatrix}$$

求 $\begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}$, 它是自旋沿什么方向分量的本征态? 在这个态下求自旋的三个分量的平均值 $\langle s_x\rangle$, $\langle s_y\rangle$, $\langle s_z\rangle$.

解 按照上题式 (9.114), 自旋态满足的方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\chi(s_z,t) = H_{\mathrm{s}}\chi(s_z,t) \tag{9.115}$$

其中 χ 如上题式 (9.112) 所给. 按题设, 上式中 $H_{\mathrm{s}} = -\mu_0\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}(t) = -\mu_0 B(t)\sigma_z$. 这样在 σ_z 表象中, 式 (9.115) 可表示为

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} = \mathrm{i}\frac{\mu_0 B(t)}{\hbar}\begin{pmatrix} a(t) \\ -b(t) \end{pmatrix} \tag{9.116}$$

上式为关于 $a(t)$, $b(t)$ 的两个独立的一阶微分方程, 积分并代以题给的 $t=0$ 时的初始条件 $a(0)$, $b(0)$, 解得 $a(t)$, $b(t)$, 这样得

$$\begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\delta\exp\left(\mathrm{i}\dfrac{\mu_0}{\hbar}\displaystyle\int_0^t B\mathrm{d}t - \mathrm{i}\alpha\right) \\ \sin\delta\exp\left(-\mathrm{i}\dfrac{\mu_0}{\hbar}\displaystyle\int_0^t B\mathrm{d}t + \mathrm{i}\alpha\right) \end{pmatrix}$$

与题 9.2 式 (9.26) 比较, 上式可如下表示为自旋沿 (θ,φ) 方向的归一化本征态

$$\begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}} \\ \sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}} \end{pmatrix} \tag{9.117}$$

其中 $\theta = 2\delta$, $\varphi = 2\left(\alpha - \dfrac{\mu_0}{\hbar}\displaystyle\int_0^t B\mathrm{d}t\right)$. 再根据题 9.7 结果得该态下 $\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle = \boldsymbol{n}$, 而 $\boldsymbol{n}$ 为沿 (θ,φ) 方向的单位矢量. 因而自旋三个分量 $\left(s_i = \dfrac{\hbar}{2}\sigma_i\right)$ 的平均值为 $\langle s_i\rangle = \dfrac{\hbar}{2}\langle\sigma_i\rangle = \dfrac{\hbar}{2}n_i$, 即

$$\langle s_x\rangle = \frac{\hbar}{2}\sin\theta\cos\varphi, \langle s_y\rangle = \frac{\hbar}{2}\sin\theta\sin\varphi, \langle s_z\rangle = \frac{\hbar}{2}\cos\theta$$

9.15 与上两题类似, 设磁场大小不变, 但磁场在 xy 平面中以下列规律变化:

$$B_x = B\cos\omega t, B_y = B\sin\omega t, B_z = 0$$

求粒子的自旋波函数.

解 按照题 9.13 式 (9.114), 自旋态满足的方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\chi(s_z,t) = H_{\mathrm{s}}\chi(s_z,t) \tag{9.118}$$

其中 χ 如题 9.14 式 (9.112) 所给. 设粒子内禀磁矩为 μ_0, 则式 (9.118) 中

$$H_{\mathrm{s}} = -\mu_0\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}(t) = -\mu_0 B\left(\cos\omega t\sigma_x + \sin\omega t\sigma_y\right)$$

这样式 (9.118) 可表示为

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} = \mathrm{i}\frac{\mu_0 B}{\hbar}\begin{pmatrix} & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} & \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} \tag{9.119}$$

令 $\omega_0 = \dfrac{\mu_0 B}{\hbar}$, 式 (9.119) 可表示成微分方程组的形式

$$\dot{a} = \mathrm{i}\omega_0 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} b \tag{9.120a}$$

$$\dot{b} = \mathrm{i}\omega_0 \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} a \tag{9.120b}$$

式 (9.120a)、式 (9.120b) 消去 b 得

$$\ddot{a} + \mathrm{i}\omega\dot{a} + \omega_0^2 a = 0 \tag{9.121}$$

这是一常系数二阶常微分方程, 设其解为 $a = \mathrm{e}^{\lambda t}$ 代入得

$$\lambda^2 + \mathrm{i}\omega\lambda + \omega_0^2 = 0$$

解得

$$\lambda = \frac{\mathrm{i}}{2}\left(-\omega \pm \sqrt{\omega^2 + 4\omega_0^2}\right) = \frac{\mathrm{i}}{2}(-\omega \pm \Omega)$$

其中 $\Omega = \sqrt{\omega^2 + 4\omega_0^2}$, 则

$$a(t) = [c_1 \exp(\mathrm{i}\Omega t/2) + c_2 \exp(-\mathrm{i}\Omega t/2)] \exp(-\mathrm{i}\omega t/2) \tag{9.122}$$

再由式 (9.120a) 得

$$b(t) = \frac{1}{2\omega_0}[c_1(\Omega - \omega)\exp(\mathrm{i}\Omega t/2) - c_2(\Omega + \omega)\exp(-\mathrm{i}\Omega t/2)]\exp(+\mathrm{i}\omega t/2) \tag{9.123}$$

这样代入题 9.14 式 (9.112), 得所求的自旋波函数为

$$\chi(s_z, t) = \begin{pmatrix} [c_1 \exp(\mathrm{i}\Omega t/2) + c_2 \exp(-\mathrm{i}\Omega t/2)]\exp(-\mathrm{i}\omega t/2) \\ \dfrac{1}{2\omega_0}[c_1(\Omega - \omega)\exp(\mathrm{i}\Omega t/2) - c_2(\Omega + \omega)\exp(-\mathrm{i}\Omega t/2)]\exp(+\mathrm{i}\omega t/2) \end{pmatrix} \tag{9.124}$$

上面常数 c_1, c_2 由初条件确定.

若在 $t = 0$ 时, 自旋波函数为

$$\begin{pmatrix} a(0) \\ b(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}\sin\delta \\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\cos\delta \end{pmatrix}$$

则与式 (9.124) 比较, 可确定

$$c_1 = \frac{\Omega + \omega_0}{\Omega}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}\sin\delta + \frac{\omega_0}{\Omega}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\cos\delta$$

$$c_2 = \frac{\Omega + \omega_0}{\Omega}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}\sin\delta - \frac{\omega_0}{\Omega}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\cos\delta$$

9.16 设自旋为 1/2 的粒子在磁场 $\boldsymbol{B}(t)$ 中运动, 求证在 Heisenberg 图像中自旋随时间的变化为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{s} = \frac{g_s e}{2mc}\boldsymbol{s} \times \boldsymbol{B}(t)$$

式中 m 为粒子质量, e 为电荷, g_s 为自旋 g 因子 (对于电子 $g_s = -2$). 设 $\boldsymbol{B} = B\boldsymbol{e}_z$ 是沿 z 轴方向的常磁场, 求解 $\boldsymbol{s}(t)$.

解 考虑自旋自由度, 内禀磁矩导致 Hamilton 量的附加项, 因而总 Hamilton 量

$$H = H_{\mathrm{o}} + H_{\mathrm{s}} \tag{9.125}$$

H_{o} 为粒子轨道运动 Hamilton 量与自旋无关, H_{s} 为粒子自旋运动 Hamilton 量与空间坐标无关, 它们分别如下给出

$$H_{\mathrm{o}} = \frac{1}{2\mu}\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + q\varphi, \quad H_{\mathrm{s}} = -\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}(t) = -\frac{g_s e}{2mc}\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{B}(t) \tag{9.126}$$

Heisenberg 图像中, 关于自旋算符的 Heisenberg 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{s}=[\boldsymbol{s},H]=[\boldsymbol{s},H_{\mathrm{o}}+H_{\mathrm{s}}]=[\boldsymbol{s},H_{\mathrm{s}}] \tag{9.127}$$

上面看到, 由于 $[\boldsymbol{s},H_{\mathrm{o}}]=0$, 所以自旋运动仅由内禀磁矩导致 Hamilton 量的附加项 H_{s} 决定, 这一结论与磁场是否均匀无关.

从式 (9.127) 出发, 按分量式计算

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}s_i&=[s_i,H_{\mathrm{s}}]=\left[s_i,-\frac{g_s e}{2mc}s_jB_j(t)\right]\\&=-\frac{g_s e}{2mc}B_j(t)\,[s_i,s_j]=-\mathrm{i}\hbar\frac{g_s e}{2mc}B_j(t)\varepsilon_{ijk}s_k\end{aligned}$$

也就是

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}s_i=\frac{g_s e}{2mc}\varepsilon_{ijk}s_jB_k(t)=\frac{g_s e}{2mc}\left[\boldsymbol{s}\times\boldsymbol{B}(t)\right]_i.$$

因此

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{s}=\frac{g_s e}{2mc}\boldsymbol{s}\times\boldsymbol{B}(t) \tag{9.128}$$

此式表明, 自旋 $\boldsymbol{s}$ 每个瞬时都在绕沿 $\boldsymbol{B}(t)$ 方向的瞬时轴转动, 瞬时角速度为 $\dfrac{g_s eB(t)}{2mc}$.

设 $\boldsymbol{B}=B\boldsymbol{e}_z$ 是沿 z 轴方向的常磁场, 则自旋 $\boldsymbol{s}$ 将绕沿 z 方向做匀速转动, 其角速度为

$$\omega=g_s\frac{eB_0}{2\mu c}=g_s\omega_L \tag{9.129}$$

ω_L 为 Lamor 频率, 这里设 $e>0$. 试根据式 (9.128) 计算, $\boldsymbol{B}=B\boldsymbol{e}_z$ 常磁场情况下相应的方程

$$\dot{s}_x=\omega s_y \tag{9.130a}$$

$$\dot{s}_y=-\omega s_x \tag{9.130b}$$

$$\dot{s}_z=0 \tag{9.130c}$$

式 (9.130c) 可见 s_z 不随时间改变. 式 (9.130a)、式 (9.130a) 联立消去 s_y 得简谐振动方程 $\ddot{s}_x+\omega^2 s_x=0$. 由此解得 $s_x(t)=c_1\cos\omega t+c_2\sin\omega t$, 再由式 (9.130a) 得到 $s_y(t)=-c_1\sin\omega t+c_2\cos\omega t$, 结合初始条件即可确定 $c_1=s_x(0)$, $c_2=s_y(0)$. 因此

$$\begin{aligned}s_x(t)&=s_x(0)\cos\omega t+s_y(0)\sin\omega t\\s_y(t)&=-s_x(0)\sin\omega t+s_y(0)\cos\omega t\\s_z(t)&=s_z(0)\end{aligned}$$

其中 ω 见式 (9.129).

9.17 有一个定域电子 (作为近似模型, 不考虑轨道运动), 受到沿 x 方向的均匀磁场 B 的作用, Hamilton 量表示为

$$H=\frac{eB}{mc}s_x=\frac{eB\hbar}{2mc}\sigma_x$$

设 $t=0$ 时电子自旋"向上" ($s_z=\hbar/2$), 试求 $t>0$ 时 $\boldsymbol{s}$ 的平均值.

解 根据题 9.1, σ_z 表象下 σ_x 的本征态可表示为

$$|\chi_1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle+|\downarrow\rangle),\quad |\chi_2\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle-|\downarrow\rangle)$$

分别对应于 $\sigma_x=+1,-1$, 对应于电子两个能级

$$E_1 = \frac{eB\hbar}{2mc} = \hbar\omega, \quad E_2 = -\frac{eB\hbar}{2mc} = -\hbar\omega$$

其中 $\omega = \dfrac{eB}{2mc}$(Lamor 频率). 已知初始时刻（t=0）体系状态为

$$|t=0\rangle = |\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\chi_1\rangle + |\chi_2\rangle) \tag{9.131}$$

从而时刻 $t(t>0)$ 时体系状态为

$$\begin{aligned}|t\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}|\chi_1\rangle + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}|\chi_2\rangle\right) = \frac{1}{2}\left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)\right] \\ &= \frac{1}{2}\left[\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\right)|\uparrow\rangle + \left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} - \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\right)|\downarrow\rangle\right] = \cos\omega t|\uparrow\rangle - \mathrm{i}\sin\omega t|\downarrow\rangle\end{aligned}$$

由此得

$$\begin{aligned}s_x|t\rangle &= \frac{\hbar}{2}(\cos\omega t|\downarrow\rangle - \mathrm{i}\sin\omega t|\uparrow\rangle) \\ s_y|t\rangle &= \frac{\hbar}{2}(\mathrm{i}\cos\omega t|\downarrow\rangle - \sin\omega t|\uparrow\rangle) \\ s_z|t\rangle &= \frac{\hbar}{2}(\cos\omega t|\uparrow\rangle + \mathrm{i}\sin\omega t|\downarrow\rangle)\end{aligned}$$

而 $\langle t| = \cos\omega t\langle\uparrow| + \mathrm{i}\sin\omega t\langle\downarrow|$. 这样求 $\langle t|\cdot|t\rangle$ 即态 $|t\rangle$ 下各力学量的期望值得

$$\langle s_x\rangle = 0, \quad \langle s_y\rangle = -\frac{\hbar}{2}\sin 2\omega t, \quad \langle s_z\rangle = \frac{\hbar}{2}\cos 2\omega t$$

9.18 设有一个自旋为 $\hbar/2$ 的粒子, 磁矩 $\boldsymbol{\mu} = \mu_0\boldsymbol{\sigma}$, 置于均匀磁场 $\boldsymbol{B}$ 中, $\boldsymbol{B}$ 方向为 $\boldsymbol{n} = (n_x, n_y, n_z)$. 设 $t=0$ 时粒子沿正 z 轴方向极化 [$\sigma_z = 1$, 即 $\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle = \boldsymbol{e}_z$]. 求 $t>0$ 时粒子的极化矢量 $\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_t$.

解法一 按照题 9.13 式 (9.114), 自旋态满足的方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\chi(s_z,t) = H_{\mathrm{s}}\chi(s_z,t) \tag{9.132}$$

其中自旋 2 分量波函数 χ 如下给出:

$$\chi(t) = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix} \tag{9.133}$$

设粒子内禀磁矩为 μ_0, 则式 (9.132) 中 Hamilton 量为

$$H_{\mathrm{s}} = -\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B} = -\mu_0 B\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n} = -\mu_0 B\sigma_n \tag{9.134}$$

与时间无关.

按题设 $\boldsymbol{n} = n_x\boldsymbol{e}_x + n_y\boldsymbol{e}_y + n_z\boldsymbol{e}_z$, 题 9.2 式 (9.29) 给出 σ_n 的本征态为

$$\begin{aligned}\phi_1 &= \frac{1}{\sqrt{2(1+n_z)}}\begin{pmatrix} 1+n_z \\ n_x + \mathrm{i}n_y \end{pmatrix} \\ \phi_2 &= \frac{1}{\sqrt{2(1+n_z)}}\begin{pmatrix} n_x - \mathrm{i}n_y \\ -1-n_z \end{pmatrix}\end{aligned} \tag{9.135}$$

分别对应于 $\sigma_n = +1$、-1, 相应的两个粒子能级

$$E = \mp\mu_0 B = \mp\hbar\omega, \quad \omega = \mu_0 B/\hbar \tag{9.136}$$

粒子 $t=0$ 时的自旋态 $\chi(0)$ 为 $\sigma_z=1$ 的本征态, 即

$$\chi(0)=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \tag{9.137}$$

将 $\chi(0)$ 按照式 (9.135) 所给 σ_n/H_{s} 的本征态展开

$$\chi(0)=c_1\phi_1+c_2\phi_2 \tag{9.138}$$

根据 ϕ_1, ϕ_2 的正交归一性, 上面展开系数如下给出:

$$c_1=\phi_1^{\dagger}\chi(0)=\sqrt{\frac{1+n_z}{2}},\quad c_2=\phi_2^{\dagger}\chi(0)=\frac{n_x+\mathrm{i}n_y}{\sqrt{2(1+n_z)}} \tag{9.139}$$

这样粒子 $t\geqslant 0$ 时的自旋态 $\chi(t)$ 为

$$\chi(0)=c_1\phi_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}+c_2\phi_2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \tag{9.140}$$

将式 (9.135)、式 (9.139) 代入得

$$\chi(t)=\frac{1}{\sqrt{2(1+n_z)}}\begin{pmatrix}(1+n_z)c_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}+(n_x-\mathrm{i}n_y)c_2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\\(n_x+\mathrm{i}n_y)c_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}-(1+n_z)c_2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\omega t+\mathrm{i}n_z\sin\omega t\\(\mathrm{i}n_x-n_y)\sin\omega t\end{pmatrix} \tag{9.141}$$

因 $\chi(0)$ 是归一化态, $\chi(t)$ 必是归一化的. 因而在 $\chi(t)$ 态下, $\boldsymbol{\sigma}$ 的平均值为

$$\langle\sigma_x\rangle=\chi^{\dagger}\sigma_x\chi=(a^*,b^*)\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=a^*b+b^*a=n_xn_z(1-\cos 2\omega t)-n_y\sin 2\omega t$$

$$\langle\sigma_y\rangle=\chi^{\dagger}\sigma_y\chi=\mathrm{i}\,(b^*a-a^*b)=n_yn_z(1-\cos 2\omega t)+n_x\sin 2\omega t$$

$$\langle\sigma_z\rangle=\chi^{\dagger}\sigma_z\chi=aa-b^*b=n_z^2+(1-n_z^2)\cos 2\omega t$$

其中 $\omega=\mu_0B/\hbar$.

解法二 根据体系的 Hamilton 量 (9.134), 我们写下 $t=0$ 初态为 $\chi(0)$ 时间演化态

$$\chi(t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_{\mathrm{s}}t/\hbar}\chi(0)=U(t)\chi(0) \tag{9.142}$$

其中 $U(t)$ 称为时间演化算符. 按照式 (9.134), 令 $\mu_0B=\hbar\omega$, 这样

$$U(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t\sigma_n}=\cos\omega t+\sigma_n\sin\omega t \tag{9.143}$$

题给 $\boldsymbol{n}=n_x\boldsymbol{e}_x+n_y\boldsymbol{e}_y+n_z\boldsymbol{e}_z$, 因而在 σ_z 表象中, σ_n 的矩阵表示为

$$\sigma_n=\sigma_xn_x+\sigma_yn_y+\sigma_zn_z=\begin{pmatrix}n_z&n_x-\mathrm{i}n_y\\n_x+\mathrm{i}n_y&-n_z\end{pmatrix} \tag{9.144}$$

根据式 (9.142)~ 式 (9.144) 得 $\chi(t)$, 与式 (9.141) 同. 余同解法一.

解法三 在 Heisenberg 图像中, 态矢量不随时间变化, 力学量随时间的演化满足 Heisenberg 方程, 因而

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{\sigma}=[\boldsymbol{\sigma},H_{\mathrm{s}}] \tag{9.145}$$

Hamilton 量 H_{s} 如式 (9.134) 所给, 不显含时间, 故

$$\boldsymbol{\sigma}(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}H_{\mathrm{s}}t/\hbar}\boldsymbol{\sigma}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_{\mathrm{s}}t/\hbar}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t\sigma_n}\boldsymbol{\sigma}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t\sigma_n} \tag{9.146}$$

根据题 9.12 结果

$$\boldsymbol{\sigma}(t)=\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin 2\omega t+(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n}\cos 2\omega t \tag{9.147}$$

$t\geqslant 0$ 时粒子的极化矢量

$$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_t=\chi^\dagger(0)\boldsymbol{\sigma}(t)\chi(0)$$

注意到 $\chi(0)$ 为 σ_z 本征态, $\chi^\dagger(0)\sigma_x\chi(0)=\chi^\dagger(0)\sigma_y\chi(0)=0$, $\chi^\dagger(0)\sigma_z\chi(0)=1$, 即给出

$$\begin{aligned}\langle\sigma_x\rangle&=n_xn_z(1-\cos 2\omega t)-n_y\sin 2\omega t,\\ \langle\sigma_y\rangle&=n_yn_z(1-\cos 2\omega t)+n_x\sin 2\omega t,\\ \langle\sigma_z\rangle&=n_z^2+(1-n_z^2)\cos 2\omega t\end{aligned}$$

也与解法一所得结果一致.

说明 题 9.17 实际上可看成本题的特例 [相当于本题取 $\boldsymbol{n}=(1,0,0)$], 当然题 9.17 也可以用这里所述的几种方法求解.

9.19 自旋为 $\hbar/2$ 的粒子, 磁矩 $\boldsymbol{\mu}=\mu_0\boldsymbol{\sigma}$, 处于沿 z 轴正方向的均匀磁场 $\boldsymbol{B}_0$ 中, 设 $t\geqslant 0$ 时, 再加上一个旋转磁场 $\boldsymbol{B}_1(t)$, 方向垂直于 z 轴, $\boldsymbol{B}_1(t)=B_1\cos 2\omega_0t\boldsymbol{e}_x-B_1\sin 2\omega_0t\boldsymbol{e}_y(\omega_0=\mu_0B_0/\hbar)$, 设初始时 $(t=0)$ 体系处于 $s_z=\hbar/2$ 的本征态 $\chi_{1/2}$, 求 $t>0$ 时体系的自旋波函数以及自旋反向所需的时间.

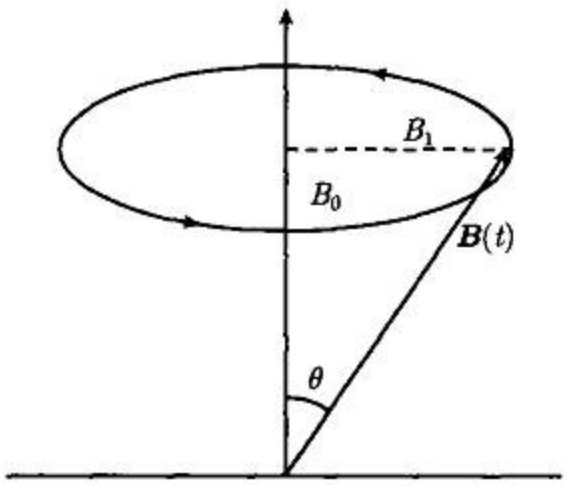

图 9.1 转动磁场

解 该粒子自旋自由度 Hamilton 量表示为

$$\begin{aligned}H(t)&=-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}(t)=-\mu\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{B}_0+\boldsymbol{B}_1)\\ &=-\mu\left(B_0\sigma_z+B_1\cos 2\omega_0t\sigma_x-B_1\sin 2\omega_0t\sigma_y\right)\end{aligned} \tag{9.148}$$

令 $\omega_0=\mu_0B_0/\hbar$, $\omega_1=\mu_0B_1/\hbar$, 则在 σ_z 表象该粒子 Hamilton 量表示为

$$H(t)=-\hbar\begin{pmatrix}\omega_0 & \omega_1\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\omega_0t}\\ \omega_1\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\omega_0t} & -\omega_0\end{pmatrix} \tag{9.149}$$

Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\chi=H\chi \tag{9.150}$$

$\chi(t)$ 一般解可表示成

$$\chi(t)=\begin{pmatrix}a(t)\\ b(t)\end{pmatrix} \tag{9.151}$$

代入式 (9.150) 得

$$\begin{pmatrix}\mathrm{i}\dot{a}\\ \mathrm{i}\dot{b}\end{pmatrix}=-\begin{pmatrix}\omega_0 & \omega_1\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\omega_0t}\\ \omega_1\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\omega_0t} & -\omega_0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}$$

即得如下微分方程组

$$\mathrm{i}\dot{a}+\omega_0a=-\omega_1\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\omega_0t}b \tag{9.152a}$$

$$\mathrm{i}\dot{b}-\omega_0b=-\omega_1\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\omega_0t}a \tag{9.152b}$$

为求解上式, 令

$$a=\tilde{a}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0t},\ b=\tilde{b}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0t} \tag{9.153}$$

式 (9.153) 化为

$$\dot{\tilde{a}} = \mathrm{i}\omega_1 \tilde{b} \tag{9.154a}$$

$$\dot{\tilde{b}} = \mathrm{i}\omega_1 \tilde{a} \tag{9.154b}$$

初始条件为

$$\chi(0) = \begin{pmatrix} a(0) \\ b(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \chi_{\frac{1}{2}}, \text{即} \begin{cases} \tilde{a}(0) = 1 \\ \tilde{b}(0) = 0 \end{cases} \tag{9.155}$$

式 (9.154) 中两式分别进行相加、减, 可得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\tilde{a} + \tilde{b}\right) = \mathrm{i}\omega_1 \left(\tilde{a} + \tilde{b}\right) \tag{9.156a}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\tilde{a} - \tilde{b}\right) = -\mathrm{i}\omega_1 \left(\tilde{a} - \tilde{b}\right) \tag{9.156b}$$

其解为

$$\tilde{a} + \tilde{b} = \left(\tilde{a}(0) + \tilde{b}(0)\right) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_1 t} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_1 t} \tag{9.157a}$$

$$\tilde{a} - \tilde{b} = \left(\tilde{a}(0) - \tilde{b}(0)\right) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_1 t} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_1 t} \tag{9.157b}$$

两式相加、减, 即得

$$\tilde{a} = \cos\omega_1 t, \quad \tilde{b} = \mathrm{i}\sin\omega_1 t \tag{9.158}$$

从而代入式 (9.153) 得

$$a = \cos\omega_1 t \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t}, \quad b = \mathrm{i}\sin\omega_1 t \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t} \tag{9.159}$$

这样代入式 (9.151), 即得

$$\chi(t) = \begin{pmatrix} \cos\omega_1 t \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t} \\ \mathrm{i}\sin\omega_1 t \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t} \end{pmatrix}$$

由题 9.7 式 (9.65) 并将上式与题 9.2 结果比较, 知极化矢量 $\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle = \boldsymbol{n}$, 而方向矢量 $\boldsymbol{n}$ 的方位角为 $(2\omega_1 t, \dfrac{\pi}{2} - 2\omega_0 t)$, 可见极化矢量随时间而变化. 容易看出

$$t = 0, \quad \chi = \chi_{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \langle\boldsymbol{\sigma}\rangle = \boldsymbol{e}_z$$

$$t = \frac{\pi}{2\omega_1}, \quad \chi = \mathrm{i}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}\chi_{-\frac{1}{2}} = \mathrm{i}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \langle\boldsymbol{\sigma}\rangle = -\boldsymbol{e}_z$$

$$t = \frac{\pi}{\omega_1}, \quad \chi = -\mathrm{i}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}\chi_{-\frac{1}{2}} = -\mathrm{i}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \langle\boldsymbol{\sigma}\rangle = \boldsymbol{e}_z$$

$$\cdots$$

可见每经过$\Delta t = \dfrac{\pi}{2\omega_1} = \dfrac{\pi\hbar}{2\mu_0 B}$, 体系的自旋指向就改变一次方向. 体系的自旋态则在 $\chi_{\frac{1}{2}}$ 与 $\chi_{-\frac{1}{2}}$ 间作周期性振荡, 变化周期 $T = \pi\hbar/\mu_0 B_1$.

说明 本题内容即磁共振的基本原理.

关于本题初值问题求解, 我们推荐读者阅读尹鸿钧主编的《高等物理精编》(中国科学技术大学出版社, 1990 年) 第 4 分卷 (朱栋培、张永德、徐克尊等编著) 的 p33~41, 那里列出了 6 种解法. 我们这里讲的相当于那里的第一种解法, 是最“笨”的解法.

9.20 自旋为 $\hbar/2$ 的粒子, 极化矢量 $\boldsymbol{P}$ 定义为 $\boldsymbol{P}=\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle$. (1) 设 $t=0$ 时, 自旋态为

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

其中 δ,α 为非负实数, $\delta\leqslant\pi/2,\alpha\leqslant\pi$, 求 $\boldsymbol{P}$ 的空间方位角 (θ_0,φ_0). (2) 设粒子受到 z 方向均匀磁场 $B(t)$ 作用, $H=-\mu_0\sigma_z B(t)$, 求 $\boldsymbol{P}$ 随时间变化的规律.

解法一 (1) 根据题 9.2 的讨论, 如果忽略整体相因子, 自旋为 $\hbar/2$ 的粒子任何自旋态都可唯一表示为自旋算符 $\boldsymbol{\sigma}$ 在某个方向 $\boldsymbol{n}(\theta,\varphi)$ 投影 σ_n 的本征态 (本征值为 1), 其形式为

$$\chi=\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}}\end{pmatrix}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi\sigma_z/2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\sigma_y/2}\chi_{1/2}(s_z)\tag{9.160}$$

按照题 9.7 式 (9.65), 在该态下的极化矢量 $\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle=\boldsymbol{n}$. 把题给的自旋态与此相比, 即知 $t=0$ 初始时刻极化矢量 $\boldsymbol{P}(0)=\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_{t=0}=\boldsymbol{n}(0)$, 其空间方位角为

$$\theta_0=2\delta,\varphi_0=2\alpha$$

(2) 自旋波函数 χ 满足 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\chi(t)=H\chi(t)\tag{9.161}$$

题给 $H=-\mu_0\sigma_z B(t)$. 设自旋波函数为

$$\chi(t)=\begin{pmatrix}a(t)\\ b(t)\end{pmatrix}\tag{9.162}$$

代入式 (9.161) 得

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}=-\mu_0B(t)\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-\mu_0B(t)a\\ \mu_0B(t)b\end{pmatrix}$$

也就是

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}a=\mathrm{i}\frac{\mu_0B(t)}{\hbar}a,\quad\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}b=-\mathrm{i}\frac{\mu_0B(t)}{\hbar}b$$

其解为

$$a(t)=a(0)\exp\left[\mathrm{i}\frac{\mu_0}{\hbar}\int_0^t B(\tau)\mathrm{d}\tau\right]\tag{9.163a}$$

$$b(t)=b(0)\exp\left[-\mathrm{i}\frac{\mu_0}{\hbar}\int_0^t B(\tau)\mathrm{d}\tau\right]\tag{9.163b}$$

按题设初始条件为

$$a(0)=\cos\delta\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha},\quad b(0)=\sin\delta\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}$$

现令

$$\varphi=2\alpha-\frac{2\mu_0}{\hbar}\int_0^t B(\tau)\mathrm{d}\tau\tag{9.164}$$

从式 (9.162)、式 (9.163) 写出 t 时刻自旋态

$$\chi(t)=\begin{pmatrix}a(t)\\ b(t)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\delta\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi}\\ \sin\delta\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi}\end{pmatrix}\tag{9.165}$$

式 (9.165) 与式 (9.160) 比较, 可知极化矢量为

$$\boldsymbol{P}=\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_t=(\sin 2\delta\cos\varphi,\sin 2\delta\sin\varphi,\cos 2\delta) \tag{9.166}$$

其中 φ 见式 (9.164). 即 $\boldsymbol{P}$ 和 z 轴 (磁场方向) 夹角 (2δ) 保持不变, 但绕 z 轴旋转, 角速度

$$\omega=\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t}=-\frac{2\mu_0}{\hbar}B(t)$$

我们看到 $\langle\sigma_z\rangle_t\equiv\cos 2\delta$ 不随时间变化, 其原因在于 σ_z 是守恒量.

解法二 在 Heisenberg 图像中, 按照 Heisenberg 运动方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sigma_z=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\sigma_z,H]=0$$

所以

$$\langle\sigma_z\rangle_t=\langle\sigma_z\rangle_{t=0}=\cos 2\delta \tag{9.167}$$

另外

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sigma_x=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\sigma_x,H]=-\frac{\mu_0}{\mathrm{i}\hbar}B(t)[\sigma_x,\sigma_z]=\frac{2\mu_0}{\hbar}B(t)\sigma_y \tag{9.168a}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sigma_y=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\sigma_y,H]=-\frac{\mu_0}{\mathrm{i}\hbar}B(t)[\sigma_y,\sigma_z]=-\frac{2\mu_0}{\hbar}B(t)\sigma_x \tag{9.168b}$$

由上面两式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y)=-\mathrm{i}\frac{2\mu_0}{\hbar}B(t)(\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y) \tag{9.169}$$

式 (9.169) 对题给的态 (在 Heisenberg 图像中, 态不随时间改变) 取平均, 并对时间积分得

$$\langle\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y\rangle_t=\langle\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y\rangle_{t=0}\exp\left[-\mathrm{i}\frac{2\mu_0}{\hbar}\int_0^t B(\tau)\mathrm{d}\tau\right]$$

$\langle\sigma_x\rangle$ 与 $\langle\sigma_y\rangle$ 均为实数, 上式中分开实部、虚部, 即得

$$\langle\sigma_x\rangle_t=\langle\sigma_x\rangle_{t=0}\cos\left[\frac{2\mu_0}{\hbar}\int_0^t B(\tau)\mathrm{d}\tau\right]+\langle\sigma_y\rangle_{t=0}\sin\left[\frac{2\mu_0}{\hbar}\int_0^t B(\tau)\mathrm{d}\tau\right] \tag{9.170a}$$

$$\langle\sigma_y\rangle_t=\langle\sigma_y\rangle_{t=0}\cos\left[\frac{2\mu_0}{\hbar}\int_0^t B(\tau)\mathrm{d}\tau\right]-\langle\sigma_x\rangle_{t=0}\sin\left[\frac{2\mu_0}{\hbar}\int_0^t B(\tau)\mathrm{d}\tau\right] \tag{9.170b}$$

根据题设初始条件为

$$\langle\sigma_x\rangle_{t=0}=\sin 2\delta\cos 2\alpha,\quad \langle\sigma_y\rangle_{t=0}=\sin 2\delta\sin 2\alpha$$

代入式 (9.170), 并按式 (9.164) 定义, 即得

$$\langle\sigma_x\rangle_t=\sin 2\delta\cos\varphi,\quad \langle\sigma_y\rangle_t=\sin 2\delta\sin\varphi \tag{9.171}$$

式 (9.167)、式 (9.171) 确定了 t 时刻的极化矢量, 与解法一的结果式 (9.166) 一致.

9.21 自旋为 $\hbar/2$ 的粒子, (l^2,j^2,j_z) 的共同本征函数记为 ϕ_{ljm_j}, 在 l 取确定值的态空间中定义 (取 $\hbar=1$)

$$\Lambda_l^+=\frac{l+1+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}}{2l+1},\quad \Lambda_l^-=\frac{l-\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}}{2l+1} \tag{9.172}$$

证明 (1) $\Lambda_l^++\Lambda_l^-=1$; (2) $(\Lambda_l^+)^2=\Lambda_l^+$, $(\Lambda_l^-)^2=\Lambda_l^-$, $\Lambda_l^+\Lambda_l^-=\Lambda_l^-\Lambda_l^+=0$; (3) $\Lambda_l^+\phi_{l,l+1/2,m_j}=\phi_{l,l+1/2,m_j}$, $\Lambda_l^+\phi_{l,l-1/2,m_j}=0$, $\Lambda_l^-\phi_{l,l-1/2,m_j}=\phi_{l,l-1/2,m_j}$, $\Lambda_l^-\phi_{l,l+1/2,m_j}=0$ 说明 $\Lambda_l^\pm$ 的物理意义.

证明 (1) 由定义式 (9.172) 直接计算, 立得

$$\Lambda_l^+ + \Lambda_l^- = 1$$

(2) 利用 Pauli 算符的代数关系 $\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij} + \mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_k$, 得

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l})^2 &= (\sigma_i l_i)(\sigma_j l_j) = (\sigma_i\sigma_j)l_i l_j = (\delta_{ij} + \mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_k)l_i l_j = l_i l_i + \mathrm{i}\varepsilon_{ijk}l_i l_j\sigma_k \\ &= \boldsymbol{l}^2 + \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{l}) = \boldsymbol{l}^2 - \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}\end{aligned} \tag{9.173}$$

上面取 $\hbar = 1$, 因而在 l 取确定值的态空间中

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l})^2 = l(l+1) - \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}, \quad \text{或}\,(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l} - l)\,(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l} + l + 1) = 0 \tag{9.174}$$

因而

$$\begin{aligned}\left(\Lambda_l^+\right)^2 &= \frac{(l+1)^2 + 2(l+1)\,(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}) + (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l})^2}{(2l+1)^2} \\ &= \frac{(l+1)^2 + 2(l+1)\,(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}) + l(l+1) - \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}}{(2l+1)^2} = \frac{l+1+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}}{2l+1} = \Lambda_l^+\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\left(\Lambda_l^-\right)^2 &= \frac{l^2 - 2l\,(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}) + (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l})^2}{(2l+1)^2} \\ &= \frac{l^2 - 2l\,(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}) + l(l+1) - \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}}{(2l+1)^2} = \frac{l-\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}}{2l+1} = \Lambda_l^-\end{aligned}$$

$$\Lambda_l^+\Lambda_l^- = \Lambda_l^-\Lambda_l^+ = 0$$

也就是

$$\left(\Lambda_l^+\right)^2 = \Lambda_l^+, \quad \left(\Lambda_l^-\right)^2 = \Lambda_l^-, \quad \Lambda_l^+\Lambda_l^- = \Lambda_l^-\Lambda_l^+ = 0 \tag{9.175}$$

(3) ϕ_{ljm_j} 通过 L-S 耦合得到, 该态也是 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}$ 的本征态, 因

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l} = 2\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{l} = \boldsymbol{j}^2 - \boldsymbol{s}^2 - \boldsymbol{l}^2 = \boldsymbol{j}^2 - \boldsymbol{l}^2 - \frac{3}{4}$$

这样

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}\phi_{l,l+1/2,m_j} = \left[(l+1/2)(l+3/2) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right]\phi_{l,l+1/2,m_j} = l\phi_{l,l+1/2,m_j}$$

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}\phi_{l,l-1/2,m_j} = \left[(l-1/2)(l+1/2) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right]\phi_{l,l+1/2,m_j} = -(l+1)\phi_{l,l-1/2,m_j}$$

应该说, 本题 $\Lambda_l^\pm$ 正是根据上式构造的. 由此可得

$$\Lambda_l^+\phi_{l,l+1/2,m_j} = \frac{l+1+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}}{2l+1}\phi_{l,l+1/2,m_j} = \frac{l+1+l}{2l+1}\phi_{l,l+1/2,m_j} = \phi_{l,l+1/2,m_j}$$

$$\Lambda_l^+\phi_{l,l-1/2,m_j} = \frac{l+1+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}}{2l+1}\phi_{l,l-1/2,m_j} = \frac{l+1-l-1}{2l+1}\phi_{l,l-1/2,m_j} = 0$$

$$\Lambda_l^-\phi_{l,l+1/2,m_j} = \frac{l-\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}}{2l+1}\phi_{l,l+1/2,m_j} = \frac{l-l}{2l+1}\phi_{l,l+1/2,m_j} = 0$$

$$\Lambda_l^-\phi_{l,l-1/2,m_j} = \frac{l-\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}}{2l+1}\phi_{l,l-1/2,m_j} = \frac{l+l+1}{2l+1}\phi_{l,l-1/2,m_j} = \phi_{l,l-1/2,m_j}$$

由上可知, Λ_l^+ 是 $j = l + \dfrac{1}{2}$ 态的投影算符, Λ_l^- 是 $j = l - \dfrac{1}{2}$ 态的投影算符.

9.22 给定 j、m_j 后, $(\boldsymbol{l}^2,\boldsymbol{j}^2,j_z)$ 的共同本征函数记为 ϕ_{ljm_j} 有两种, 相应于 $l=j\pm1/2$, 在 (θ,φ,s_z) 表象中可表示成

$$\phi^A_{jm_j}=\frac{1}{\sqrt{2l+1}}\begin{pmatrix}\sqrt{l+m+1}\,\mathrm{Y}_{lm}\\ \sqrt{l-m}\,\mathrm{Y}_{l,m+1}\end{pmatrix},\quad l=j-1/2,m_j=m+1/2$$

$$\phi^B_{jm_j}=\frac{1}{\sqrt{2l'+1}}\begin{pmatrix}-\sqrt{l'-m}\,\mathrm{Y}_{l'm}\\ \sqrt{l'+m+1}\,\mathrm{Y}_{l',m+1}\end{pmatrix},\quad l'=j+1/2,l'\neq0,m_j=m+1/2$$

分别相应于两种不同宇称, 定义

$$\sigma_r=\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}/r$$

证明取适当相角后

$$\sigma_r\phi^A_{jm_j}=-\phi^B_{jm_j},\quad \sigma_r\phi^B_{jm_j}=-\phi^A_{jm_j}$$

提示 σ_r 为奇宇称算符 (赝标量)

$$[\boldsymbol{\sigma},\sigma_r]=2\mathrm{i}\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\sigma},\quad [\boldsymbol{l},\sigma_r]=-\mathrm{i}\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\sigma},\quad [\boldsymbol{j},\sigma_r]=0$$

证明 设 $\boldsymbol{A}$ 为任意与 $\boldsymbol{\sigma}$ 对易的矢量则有

$$[\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}]=2\mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma}\tag{9.176}$$

这是题 9.23 式 (9.189) 的一个直接结果①. 上式中取 $\boldsymbol{A}=\frac{1}{r}\boldsymbol{r}$, 即给出

$$[\boldsymbol{\sigma},\sigma_r]=2\mathrm{i}\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\sigma}\tag{9.177}$$

另外

$$[\boldsymbol{l},\sigma_r]=\frac{1}{r}[\boldsymbol{e}_il_i,\sigma_jx_j]=\frac{1}{r}\boldsymbol{e}_i\sigma_j[l_i,x_j]=\frac{1}{r}\boldsymbol{e}_i\sigma_j\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}x_j$$

$$=\mathrm{i}\frac{1}{r}\boldsymbol{e}_i(\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{r})_i=-\mathrm{i}\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\sigma}\tag{9.178}$$

由式 (9.177)、式 (9.178) 即得

$$[\boldsymbol{j},\sigma_r]=\left[\boldsymbol{l}+\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma},\sigma_r\right]=0\tag{9.179}$$

因此 σ_r 与 $\boldsymbol{j}$ 对易, 从而也与 $\boldsymbol{j}^2$ 对易. 因而 σ_r 作用到 ϕ_{ljm_j} 上, 量子数 j 和 m_j 均不变.

如题所给, 对于给定的 j、m_j, $(\boldsymbol{l}^2,\boldsymbol{j}^2,j_z)$ 的共同本征函数记为 ϕ_{ljm_j} 有两种, 相应于 $l=j\pm1/2$, 在 (θ,φ,s_z) 表象中可表示成

$$\phi^A_{jm_j}=\frac{1}{\sqrt{2l+1}}\begin{pmatrix}\sqrt{l+m+1}\,\mathrm{Y}_{lm}\\ \sqrt{l-m}\,\mathrm{Y}_{l,m+1}\end{pmatrix},\quad l=j-1/2,m_j=m+1/2\tag{9.180a}$$

$$\phi^B_{jm_j}=\frac{1}{\sqrt{2l'+1}}\begin{pmatrix}-\sqrt{l'-m}\,\mathrm{Y}_{l'm}\\ \sqrt{l'+m+1}\,\mathrm{Y}_{l',m+1}\end{pmatrix},\quad l'=j+1/2,l'\neq0,m_j=m+1/2\tag{9.180b}$$

对于同一个 j 值, 上式中 $l'=l+1$, 因为 Y_{lm} 的宇称为 $(-1)^l$, 所以式 (9.180) 中两种波函数的宇称相反.

① 利用 Pauli 算符代数关系按照分量形式计算也非常直接.

$\sigma_r = \boldsymbol{\sigma}\cdot\dfrac{\boldsymbol{r}}{r}$ 是奇宇称算符, 受它作用后, 波函数的宇称要改变. $\dfrac{\boldsymbol{r}}{r}$ 与轨道波函数乘, 考虑角动量耦合, l 可能改变 0、±1. σ_r 作用后波函数的宇称要改变, 所以 l 的改变只有 ±1. 对于 $\phi^A_{jm_j}$ 态, $j=l+1/2$, σ_r 作用以后, l 不能减 1, 否则无法保证 j 不变, 这样 l 只能是加 1, 结果只能是 $\phi^B_{jm_j}$ 态. 同样分析知 σ_r 作用到 $\phi^B_{jm_j}$, 结果只能是 $\phi^A_{jm_j}$ 态. 这样可令

$$\sigma_r\phi^A_{jm_j} = C\phi^B_{jm_j},\quad \sigma_r\phi^B_{jm_j} = C'\phi^A_{jm_j} \tag{9.181}$$

其中, C, C' 为常数, 由于 $\sigma_r^2=1$, 则

$$\phi^A_{jm_j} = (\sigma_r)^2\phi^A_{jm_j} = \sigma_r C\phi^B_{jm_j} = CC'\phi^A_{jm_j} \tag{9.182}$$

因此

$$CC' = 1 \tag{9.183}$$

由于 σ_r 是厄米算符, 式 (9.180) 中两个波函数又都是归一化的

$$C' = \left\langle \phi^A_{jm_j}\middle|\,\sigma_r\,\middle|\phi^B_{jm_j}\right\rangle = C^*\left\langle \phi^B_{jm_j}\,\middle|\,\phi^B_{jm_j}\right\rangle = C^* \tag{9.184}$$

因此

$$CC^* = C'C'^* = 1 \tag{9.185}$$

若在 $\phi^A_{jm_j}$ 与 $\phi^B_{jm_j}$ 间选取适当的相位差, 使得 $C=-1$, 则 $C'=C^*=-1$, 因而有

$$\sigma_r\phi^A_{jm_j} = -\phi^B_{jm_j},\quad \sigma_r\phi^B_{jm_j} = -\phi^A_{jm_j} \tag{9.186}$$

讨论 为了考察对题给的 (l^2, j^2, j_z) 的共同本征函数作什么样的调整, 才能满足式 (9.186). 我们从式 (9.181) 出发, 做具体计算. 在 σ_z 表象

$$\sigma_r = \frac{1}{r}(x\sigma_x + y\sigma_y + z\sigma_z) = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} \\ \sin\theta\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix} \tag{9.187}$$

式 (9.181) 的第一式是两分量方程, 为了确定 C 我们只要关心第一个分量, 这给出

$$-C\frac{\sqrt{l'-m}}{\sqrt{2l'+1}}\mathrm{Y}_{l'm} = \frac{\sqrt{l+m+1}}{\sqrt{2l+1}}\cos\theta\mathrm{Y}_{lm} + \frac{\sqrt{l-m}}{\sqrt{2l+1}}\sin\theta\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\mathrm{Y}_{l,m+1} \tag{9.188}$$

式中 $l'=l+1$. 设球谐函数的相位约定按照教材附录四[①]定义 (与 Condon-Shortley 约定一致, 使得升降算符矩阵元全是非负实数), 则有递推公式

$$\cos\theta\mathrm{Y}_{lm} = \sqrt{\frac{(l+1)^2-m^2}{(2l+1)(2l+3)}}\mathrm{Y}_{l+1,m} + \sqrt{\frac{l^2-m^2}{(2l-1)(2l+1)}}\mathrm{Y}_{l-1,m}$$

$$\sin\theta\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\mathrm{Y}_{l,m+1} = -\sqrt{\frac{(l+m+1)(l+m+2)}{(2l-1)(2l+1)}}\mathrm{Y}_{l-1,m} + \sqrt{\frac{(l-m)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}\mathrm{Y}_{l+1,m}$$

我们只要关注式 (9.188) 中 $\mathrm{Y}_{l+1,m}$ 项系数 (全是实数) 的正负号即得出 $C=-1$, 从而由式 (9.184) 知 $C'=-1$. 这样结合式 (9.181) 即给出式 (9.186). 可见若球谐函数的相位选取作如上所述的约定, 则本题所给的共同本征函数 $\phi^A_{jm_j}$ 与 $\phi^B_{jm_j}$ 的相位选取已经使得它们满足式 (9.186).

说明 本题还有一种证法, 即将式 (9.187) 作用到 $\phi^A_{jm_j}$ 与 $\phi^B_{jm_j}$ 上, 利用球谐函数的递推公式直接验算.

① 曾谨言, 量子力学 (第四版卷 I)[M], 北京: 科学出版社, 2007, p 520.

9.23 自旋为 $\hbar/2$ 的粒子, 处于 $(\boldsymbol{l}^2, \boldsymbol{j}^2, j_z)$ 的共同本征态 ϕ_{ljm_j} 下, 证明

$$\hbar\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle = \langle\boldsymbol{j}\rangle \frac{j(j+1) - l(l+1) + 3/4}{j(j+1)}$$

提示 ϕ_{jm_j} 也是 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}$ 的本征态, 并利用

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}) + (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l})\boldsymbol{\sigma} = 2\boldsymbol{l}, \quad (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l})^2 + \hbar(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}) - \boldsymbol{l}^2 = 0$$

证明 为方便采用 Dirac 符号, 题给 $(\boldsymbol{l}^2, \boldsymbol{j}^2, j_z)$ 的共同本征态记为 $|l, 1/2, j, m_j\rangle$. 设 $\boldsymbol{A}$ 为任意与 $\boldsymbol{\sigma}$ 对易的矢量, 利用 Pauli 算符的代数关系 $\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij} + \mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_k$,

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}) - \boldsymbol{A} &= \boldsymbol{e}_i\sigma_i\sigma_j A_j - \boldsymbol{A} = \boldsymbol{e}_i A_j\left(\delta_{ij} + \mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_k\right) - \boldsymbol{A} \\ &= \boldsymbol{e}_i A_i + \mathrm{i}\boldsymbol{e}_i\left(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma}\right)_i - \boldsymbol{A} = \mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma}\end{aligned}$$

也就是

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}) - \boldsymbol{A} = \mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma}$$

对上式取 Hermite 共轭给出

$$\boldsymbol{A} - (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\boldsymbol{\sigma} = \mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma}$$

因而

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}) - \boldsymbol{A} = \boldsymbol{A} - (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\boldsymbol{\sigma} = \mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma} \tag{9.189}$$

取 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{l}$, 即有

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}) + (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l})\boldsymbol{\sigma} = 2\boldsymbol{l} \tag{9.190}$$

而 $\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l} = \left(\boldsymbol{l} + \dfrac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}\right)^2 - \boldsymbol{l}^2 - \dfrac{\hbar^2}{4}\boldsymbol{\sigma}^2 = \boldsymbol{j}^2 - \boldsymbol{l}^2 - \boldsymbol{s}^2$. 可见 $|l, 1/2, j, m_j\rangle$ 也是 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}$ 的本征态.

现在式 (9.190) 两边对 $|l, 1/2, j, m_j\rangle$ 求平均值, 因为

$$\begin{aligned}\langle l, \frac{1}{2}, j, m_j|\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l})|l, \frac{1}{2}, j, m_j\rangle &= \langle l, \frac{1}{2}, j, m_j|(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l})\boldsymbol{\sigma}||l, \frac{1}{2}, j, m_j\rangle \\ &= \hbar\left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right]\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle\end{aligned}$$

则有

$$\langle\boldsymbol{l}\rangle = \langle\boldsymbol{\sigma}\rangle(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l})_{\mathrm{eigv}} \tag{9.191}$$

式中下标“eigv”表示本征值. 进而

$$\langle\boldsymbol{j}\rangle = \langle\boldsymbol{l} + \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}\rangle = \langle\boldsymbol{\sigma}\rangle\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l} + \frac{\hbar}{2}\right)_{\mathrm{eigv}} \tag{9.192}$$

利用 Pauli 算符的代数关系得

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l})^2 &= (\sigma_i l_i)(\sigma_j l_j) = (\sigma_i\sigma_j)l_i l_j = (\delta_{ij} + \mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_k)l_i l_j = l_i l_i + \mathrm{i}\varepsilon_{ijk}l_i l_j\sigma_k \\ &= \boldsymbol{l}^2 + \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{l}) = \boldsymbol{l}^2 - \hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}\end{aligned}$$

也就是

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l})^2 + \hbar(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}) - \boldsymbol{l}^2 = 0 \tag{9.193}$$

可得

$$\boldsymbol{j}^2 = \boldsymbol{l}^2 + \hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l} + \frac{3}{4}\hbar^2 = (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l})^2 + 2\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l} + \frac{3}{4}\hbar^2 = \left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l} + \frac{\hbar}{2}\right)\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l} + \frac{3\hbar}{2}\right) \tag{9.194}$$

因此, 式 (9.192) 两边乘以 $\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}+\frac{3}{2}\hbar\right)_{\text{eigv}}$, 得

$$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle\left(\boldsymbol{j}^2\right)_{\text{eigv}}=\langle\boldsymbol{j}\rangle\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}+\frac{3}{2}\hbar\right)_{\text{eigv}}=\frac{1}{\hbar}\langle\boldsymbol{j}\rangle\left(\boldsymbol{j}^2-\boldsymbol{l}^2+\frac{3}{4}\hbar^2\right)_{\text{eigv}}\tag{9.195}$$

由此即有

$$\hbar\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle=\langle\boldsymbol{j}\rangle\frac{j(j+1)-l(l+1)+\frac{3}{4}}{j(j+1)}\tag{9.196}$$

说明 还有一种证法是分自旋 - 轨道“平行”与“反平行”两种情况, 利用总角动量态 $|l,1/2,j,m_j\rangle$ 的具体形式进行直接计算, 参考题 9.24 的解法二.

9.24 电子的磁矩算符可表为 $\boldsymbol{\mu}=-\frac{e}{2mc}(\boldsymbol{l}+2\boldsymbol{s})$. 磁矩的观测值定义为

$$\mu=\langle ljm_j|\mu_z|ljm_j\rangle\big|_{m_j=j}=\langle ljj|\mu_z|ljj\rangle$$

而 $|ljm_j\rangle$ 是 $(\boldsymbol{l}^2,\boldsymbol{s}^2,j_z)$ 的共同本征态, 计算 μ.

解法一 由 $\boldsymbol{\mu}=-\frac{e}{2mc}(\boldsymbol{l}+2\boldsymbol{s})=-\frac{e}{2mc}(\boldsymbol{j}+\boldsymbol{s})$, 得

$$\mu=\langle ljj|\mu_z|ljj\rangle=-\frac{e}{2mc}\langle ljj|j_z+s_z|ljj\rangle=-\frac{ej}{2mc}-\frac{e}{2mc}\langle ljj|s_z|ljj\rangle\tag{9.197}$$

根据题 9.23 的式 (9.195)

$$\langle\boldsymbol{s}\rangle=\langle\boldsymbol{j}\rangle\frac{j(j+1)-l(l+1)+\frac{3}{4}}{2j(j+1)}\tag{9.198}$$

结合式 (9.197)、式 (9.198), 得 $\mu=-gj\mu_B$, 其中 $\mu_B=\frac{e\hbar}{2mc}$ 为 Bohr 磁子, 而 g 为 Landè因子, 如下给出:

$$g=1+\frac{j(j+1)-l(l+1)+\frac{3}{4}}{2j(j+1)}$$

即有

$$\mu=\begin{cases}-(j+1/2)\mu_B, & j=l+\dfrac{1}{2}\\ -j(2j+1)\mu_B/(2j+2), & j=l-\dfrac{1}{2}(l\neq 0)\end{cases}$$

解法二 总角动量态 $|l,1/2,j,m_j\rangle$ 按非耦合表象基矢展开式为

$$\left|l,\frac{1}{2},j,m_j\right\rangle=\sqrt{\frac{j+m_j}{2j}}\left|j-\frac{1}{2},m_j-\frac{1}{2}\right\rangle|\uparrow\rangle+\sqrt{\frac{j-m_j}{2j}}\left|j-\frac{1}{2},m_j+\frac{1}{2}\right\rangle|\downarrow\rangle$$

$$\left(j=l+\frac{1}{2},\quad m_j=m+\frac{1}{2}\right),\tag{9.199}$$

$$\left|l,\frac{1}{2},j,m_j\right\rangle=-\sqrt{\frac{j-m_j+1}{2j+2}}\left|j+\frac{1}{2},m_j-\frac{1}{2}\right\rangle|\uparrow\rangle+\sqrt{\frac{j+m_j+1}{2j+2}}\left|j+\frac{1}{2},m_j+\frac{1}{2}\right\rangle|\downarrow\rangle$$

$$\left(j=l-\frac{1}{2},\quad m_j=m+\frac{1}{2},l\neq 0\right)\tag{9.200}$$

由式 (9.199)、式 (9.200) 得

$$\langle ljj|s_z|ljj\rangle=\frac{\hbar}{2},\qquad\left(j=l+\frac{1}{2}\right)$$

$$\langle ljj|s_z|ljj\rangle=\frac{\hbar}{2}\left(\frac{1}{2j+2}-\frac{2j+1}{2j+2}\right)=-\frac{j\hbar}{2j+2},\qquad\left(j=l-\frac{1}{2}\right)$$

再结合式 (9.197) 即得

$$\mu=\begin{cases}-(j+1/2)\mu_B, & j=l+1/2\\ -j(2j+1)\mu_B/(2j+2), & j=l-1/2, l\neq 0\end{cases}$$

与解法一得到的结果一致.

9.25 两个电子自旋 $\hbar/2$ 粒子组成的体系, 定义

$$S_{12}=\frac{3\left(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{r}\right)\left(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{r}\right)}{r^2}-\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$$

其中 $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2$ 为两粒子的相对坐标. 试证明 $\left[S_{12},\boldsymbol{S}^2\right]=0,[S_{12},\boldsymbol{J}]=0$, 其中 $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2$ 为总自旋, $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{S}+\boldsymbol{l}$, $\boldsymbol{l}$ 为体系的轨道角动量, 在质心坐标系中 $\boldsymbol{l}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$.

证明 本题所要求的证明已包括在题 9.5 的解答中, 见该题得到式 (9.41)、式 (9.45) 的过程.

9.26 由两个非全同粒子 (自旋都是 1/2) 组成的体系, 已知粒子 1 处于 $s_{1z}=\hbar/2$ 的本征态, 粒子 2 处于 $s_{2x}=\hbar/2$ 的本征态, 求体系总自旋 $\boldsymbol{S}^2$ 的可能测值及相应的概率.

解法一 粒子 $i(i=1,2)$ 自旋态基矢可选为 $s_{iz}=\pm\hbar/2$ 的本征态 $\alpha(i),\beta(i)$, 矩阵表示

$$\alpha(i)=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_i,\quad \beta(i)=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_i \tag{9.201}$$

$s_{2x}=\hbar/2$ 的本征态为

$$\phi(2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}_2=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\alpha(2)+\beta(2)\right] \tag{9.202}$$

题给体系所处的自旋态可表示为

$$\chi(1,2)=\alpha(1)\phi(2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\alpha(1)\alpha(2)+\alpha(1)\beta(2)\right] \tag{9.203}$$

两个自旋 1/2 粒子的自旋态, 总自旋 $\boldsymbol{S}^2$ 共有两个本征值: 0 和 $2\hbar^2$. $\boldsymbol{S}^2=0$ 的的本征态为

$$\chi_{00}(1,2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)\right]$$

根据式 (9.201) 所给 $\alpha(i)$、$\beta(i)$ 的正交归一性, 容易求得

$$\langle\chi_{00}|\,\chi\rangle=\frac{1}{2}$$

因而测得 $\boldsymbol{S}^2=0$ 的概率为

$$w(0)=\left|\langle\chi_{00}|\,\chi\rangle\right|^2=\frac{1}{4}$$

从而测得 $\boldsymbol{S}^2=2\hbar^2$ 的概率为

$$w(2)=1-w(0)=1-\frac{1}{4}=\frac{3}{4}$$

解法二 题给体系所处的自旋态 $\chi(1,2)$ 如式 (9.203) 所给, 在该态下计算 $\langle\boldsymbol{S}^2\rangle$, 而

$$\boldsymbol{S}^2=(\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2)^2=\frac{3}{2}+2(s_{1x}s_{2x}+s_{1y}s_{2y}+s_{1z}s_{2z}) \tag{9.204}$$

式 (9.203) 中关于粒子 1、2 的变量是分离的 (可分离态). 这样

$$\langle\chi|\, s_{1x}s_{2x}\,|\chi\rangle = \langle\alpha(1)|\, s_{1x}\,|\alpha(1)\rangle\,\langle\phi(2)|\, s_{2x}\,|\phi(2)\rangle = 0\times\frac{1}{2} = 0$$

即有 $\langle\chi|\, s_{1x}s_{2x}\,|\chi\rangle = 0$. 类似地, 可得 $\langle\chi|\, s_{1y}s_{2y}\,|\chi\rangle = 0$, $\langle\chi|\, s_{1z}s_{2z}\,|\chi\rangle = 0$. 因此

$$\langle \boldsymbol{S}^2\rangle = \frac{3}{2} \tag{9.205}$$

设题给态下, 测得 $\boldsymbol{S}^2 = 0, 2$ 的概率分别为 $w(0)$、$w(2)$, 则

$$\begin{aligned}&\langle \boldsymbol{S}^2\rangle = 0\times w(0) + 2\times w(2) = \frac{3}{2}\\ &w(0) + w(2) = 1\end{aligned}$$

上面两式联立求解即得

$$w(0) = \frac{1}{4},\quad w(2) = \frac{3}{4}$$

9.27 有两个非全同粒子 (自旋均为 $\hbar/2$) 组成的体系, 设粒子间相互作用表为 $H = A\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2$(只与自旋有关). 假设初始时刻 ($t=0$) 粒子 1 的自旋方向"向上" (即 $s_{1z} = \hbar/2$), 粒子 2 自旋"向下" ($s_{2z} = -\hbar/2$). 求时刻 $t(t>0)$ 时, (a) 粒子 1 自旋向上的概率; (b) 粒子 1 和 2 的自旋均向上的概率; (c) 总自旋 S=0 和 1 的概率; (d) 求 $\boldsymbol{s}_1$ 和 $\boldsymbol{s}_2$ 的平均值.

解 粒子间相互作用 Hamilton 量为

$$H = A\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2 = \frac{A}{2}\left[(\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2)^2 - \boldsymbol{s}_1^2 - \boldsymbol{s}_2^2\right] = \frac{A}{2}\left(\boldsymbol{s}^2 - \frac{3\hbar^2}{2}\right) \tag{9.206}$$

只与体系的总自旋有关. 总自旋为 0 或 1, 因此体系只有如下两个能级:

$$E_1 = \frac{A\hbar^2}{4},\quad E_2 = -\frac{3A\hbar^2}{4}$$

令 $A\hbar = \omega$, 则 $E_1 = \dfrac{\hbar\omega}{4}$, $E_2 = -\dfrac{3\hbar\omega}{4}$. 已知初始时刻 ($t=0$) 体系所处的状态为

$$|t=0\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1,0\rangle + |0,0\rangle\right) \tag{9.207}$$

正是 Hamilton 量两个本征态的迭加, 因而时刻 $t(t>0)$ 时体系状态为

$$|t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\omega t}{4}}|1,0\rangle + \mathrm{e}^{\frac{3\mathrm{i}\omega t}{4}}|0,0\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\omega t}{4}}\left(|1,0\rangle + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}|0,0\rangle\right) \tag{9.208}$$

由式 (9.208) 得

$$\begin{aligned}|t\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\omega t}{4}}\left(|1,0\rangle + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}|0,0\rangle\right) = \frac{1}{2}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\omega t}{4}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}|\uparrow\downarrow\rangle - \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}|\downarrow\uparrow\rangle\right)\\ &= \frac{1}{2}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\omega t}{4}}\left(1+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\right)|\uparrow\downarrow\rangle + \frac{1}{2}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\omega t}{4}}\left(1-\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\right)|\downarrow\uparrow\rangle = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\omega t}{4}}\cos\frac{\omega t}{2}|\uparrow\downarrow\rangle - \mathrm{i}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\omega t}{4}}\sin\frac{\omega t}{2}|\downarrow\uparrow\rangle\end{aligned} \tag{9.209}$$

由式 (9.209) 可见, 时刻 $t(t>0)$ 时粒子 1 自旋向上的概率为 $\cos^2\dfrac{\omega t}{2}$, 粒子 1 和 2 的自旋均向上的概率为 0. 由式 (9.208) 可见, 时刻 $t(t>0)$ 时体系总自旋 $S=0$ 和 1 的概率均为 $\dfrac{1}{2}$.

再由式 (9.209) 可得

$$s_{1x}|t\rangle = \frac{\hbar}{2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\omega t}{4}}\cos\frac{\omega t}{2}|\downarrow\downarrow\rangle - \frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\omega t}{4}}\sin\frac{\omega t}{2}|\uparrow\uparrow\rangle$$
$$s_{1y}|t\rangle = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\omega t}{4}}\cos\frac{\omega t}{2}|\downarrow\downarrow\rangle - \frac{\hbar}{2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\omega t}{4}}\sin\frac{\omega t}{2}|\uparrow\uparrow\rangle$$
$$s_{1z}|t\rangle = \frac{\hbar}{2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\omega t}{4}}\cos\frac{\omega t}{2}|\uparrow\downarrow\rangle + \frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\omega t}{4}}\sin\frac{\omega t}{2}|\downarrow\uparrow\rangle$$

这样对 t 时刻状态 $|t\rangle$ 求有关量的期望值, 即求 $\langle t|\cdot|t\rangle$ 得

$$\langle s_{1x}\rangle = \langle s_{1y}\rangle = 0, \quad \langle s_{1z}\rangle = \frac{\hbar}{2}\cos\omega t$$

同理可求

$$\langle s_{2x}\rangle = \langle s_{2y}\rangle = 0, \quad \langle s_{2z}\rangle = -\frac{\hbar}{2}\cos\omega t$$

说明 本题还可以在 Heisenberg 图像中求解, 见曾谨言, 钱伯初, 量子力学习题精选与剖析 [M]. 3 版. 北京: 科学出版社,2008,p284~287.

9.28 两个自旋为 1/2 粒子组成的体系, 置于均匀外磁场中, 取磁场方向为 z 轴方向, 则体系 Hamilton 量可表示成 (忽略轨道运动)$H = a\sigma_{1z} + b\sigma_{2z} + c\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$, a、b、c 为常数量, H 中第一、二项表示粒子内禀磁矩与外磁场的相互作用, 第三项表示两个粒子之间自旋 – 自旋相互作用. 求 H 的本征值.

解 本题可在自旋态空间中, 用矩阵方法求解. 基矢可以取为 $(\sigma_{1z},\sigma_{2z})$ 的共同本征态 (非耦合表象)

$$\alpha(1)\alpha(2),\ \alpha(1)\beta(2),\ \beta(1)\alpha(2),\ \beta(1)\beta(2) \tag{9.210}$$

也可以取为总自旋算符 $(\boldsymbol{S}^2,\boldsymbol{S}_z)$ 的共同本征态 χ_{SM_S}(即两自旋耦合表象). 对于本题而言, 考虑到 Hamilton 量 H 中的 $\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$ 项, 为便于 H 对角化, 采用 χ_{SM_S} 作为基矢较为方便. 为叙述方便, 4 个基矢的编号顺序如下

$$\begin{aligned}
&\chi_1 = \chi_{11} = \alpha(1)\alpha(2)\\
&\chi_2 = \chi_{1,-1} = \beta(1)\beta(2)\\
&\chi_3 = \chi_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)+\beta(1)\alpha(2)]\\
&\chi_4 = \chi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)]
\end{aligned} \tag{9.211}$$

将题给 Hamilton 量改写成

$$H = c\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2 + c_1(\sigma_{1z}+\sigma_{2z}) + c_2(\sigma_{1x}-\sigma_{2z}) \tag{9.212}$$

其中$c_1 = \frac{1}{2}(a+b), c_2 = \frac{1}{2}(a-b)$. 四个基矢都是 $(\boldsymbol{S}^2,\boldsymbol{S}_z)$ 的共同本征态, 即都是 $\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$ 和 $(\sigma_{1z}+\sigma_{2z})$ 的共同本征态. 容易看出 χ_1 和 χ_2 也是 $(\sigma_{1z}-\sigma_{2z})$ 的本征态 (本征值为 0), 因而 χ_1 和 χ_2 已经是 H 的本征态

$$H\chi_1 = (c+2c_1)\chi_1 = (c+a+b)\chi_1 \tag{9.213}$$
$$H\chi_2 = (c-2c_1)\chi_2 = (c-a-b)\chi_2 \tag{9.214}$$

这样, 我们就得到了体系的两个能级 $E = c\pm 2c_1$.

χ_3 和 χ_4 不是 $(\sigma_{1z}-\sigma_{2z})$ 的本征态. $(\sigma_{1z}-\sigma_{2z})$ 对于 χ_3 和 χ_4 的作用如下给出:

$$(\sigma_{1z}-\sigma_{2z})\chi_3=2\chi_4,(\sigma_{1z}-\sigma_{2z})\chi_4=2\chi_3 \tag{9.215}$$

由此写出在 $\{\chi_3,\chi_4\}$ 子空间中 $(\sigma_{1z}-\sigma_{2z})$ 的矩阵元

$$(\sigma_{1z}-\sigma_{2z})_{33}=(\sigma_{1z}-\sigma_{2z})_{44}=0$$
$$(\sigma_{1z}-\sigma_{2z})_{34}=(\sigma_{1z}-\sigma_{2z})_{43}=2$$

χ_3 和 χ_4 都是 $(\sigma_{1z}+\sigma_{2z})$ 的零本征值本征态, 故 $(\sigma_{1z}+\sigma_{2z})$ 矩阵元全部为 0. 这样基矢 $\{\chi_3,\chi_4\}$ 张成的子空间中 H 的矩阵表示为

$$H=\begin{pmatrix} c & 2c_2 \\ 2c_2 & -3c \end{pmatrix} \tag{9.216}$$

设能量本征态为

$$\chi=f_3\chi_3+f_4\chi_4$$

代入能量本征方程 $H\chi=E\chi$ 得

$$\begin{pmatrix} c-E & 2c_2 \\ 2c_2 & -3c-E \end{pmatrix}\begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix}=0$$

能级 E 由下式决定:

$$\det(H-E)=0$$

根据在基矢 $\{\chi_3,\chi_4\}$ 张成的子空间中 H 的矩阵表示 (9.216), 上式即

$$\begin{vmatrix} c-E & 2c_2 \\ 2c_2 & -3c-E \end{vmatrix}=(E-c)(E+3c)-4c_2^2=0$$

解得

$$E=-c\pm 2\sqrt{c^2+c_2^2}$$

综上, 本题共有四个能级 (不考虑偶然简并), 它们是

$$E=c\pm 2c_1,\ -c\pm 2\sqrt{c^2+c_2^2}$$

其中 $c_1=\frac{1}{2}(a+b),c_2=\frac{1}{2}(a-b)$. 前两个能级的能量本征态分别为 $\chi_1=\chi_{11}$ 和 $\chi_2=\chi_{1-1}$, 后两个能级的能量本征态为 $\chi_3=\chi_{00}$ 和 $\chi_4=\chi_{10}$ 的线性叠加.

说明 若采用式 (9.210) 的非耦合表象, 则因为 $\alpha(1)\alpha(2)$ 与 $\beta(1)\alpha(2)$ 已经是 H 的本征态. 接下来需要在基矢 $\{\alpha(1)\beta(2),\beta(1)\alpha(2)\}$ 张成的子空间中将 H 对角化, 该空间与基矢 $\{\chi_3,\chi_4\}$ 张成的子空间其实是一个空间.

9.29 自旋为 1/2 的三个非全同粒子组成的体系, Hamilton 量为 $H=A\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2+B(\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2)\cdot\boldsymbol{s}_3$, ($A$, B 为实常数量), 试找出体系的守恒量, 求出体系的能级和简并度.

解 粒子 1、2 自旋之和记为 $\boldsymbol{S}_{12}$, 粒子 1、2、3 自旋之和记为 $\boldsymbol{S}_{123}$, 即

$$\boldsymbol{S}_{12}=\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2,\quad \boldsymbol{S}_{123}=\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2+\boldsymbol{s}_3=\boldsymbol{S}_{12}+\boldsymbol{s}_3 \tag{9.217}$$

由角动量耦合, $\boldsymbol{S}_{12},\boldsymbol{S}_{123}$ 仍是角动量, 具有角动量的性质, 满足如下对易关系:

$$\boldsymbol{S}_{12}\times\boldsymbol{S}_{12}=\mathrm{i}\boldsymbol{S}_{12},\quad [\boldsymbol{S}_{12}^2,\boldsymbol{S}_{12}]=0, \tag{9.218}$$
$$\boldsymbol{S}_{123}\times\boldsymbol{S}_{123}=\mathrm{i}\boldsymbol{S}_{123},\quad [\boldsymbol{S}_{123}^2,\boldsymbol{S}_{123}]=0 \tag{9.219}$$

$\boldsymbol{s}_1, \boldsymbol{s}_2, \boldsymbol{s}_3$ 两两相互对易, 而且 $\boldsymbol{s}_1^2 = \boldsymbol{s}_2^2 = \boldsymbol{s}_3^2 = \dfrac{3}{4}$, 因此

$$\boldsymbol{S}_{12}^2 = \boldsymbol{s}_1^2 + \boldsymbol{s}_2^2 + 2\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2 = \frac{3}{2} + 2\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2 \tag{9.220}$$

$$\boldsymbol{S}_{123}^2 = \frac{9}{4} + 2\left(\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2 + \boldsymbol{s}_2 \cdot \boldsymbol{s}_3 + \boldsymbol{s}_3 \cdot \boldsymbol{s}_1\right) \tag{9.221}$$

这样 Hamilton 量可写为

$$\begin{aligned} H &= (A - B)\,\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2 + B\left(\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2 + \boldsymbol{s}_2 \cdot \boldsymbol{s}_3 + \boldsymbol{s}_3 \cdot \boldsymbol{s}_1\right) \\ &= \frac{1}{2}(A - B)\,\boldsymbol{S}_{12}^2 + \frac{B}{2}\boldsymbol{S}_{123}^2 - \frac{3}{8}(2A + B) \end{aligned} \tag{9.222}$$

由于 $\boldsymbol{S}_{12}^2$ 和 $\boldsymbol{S}_{12}$ 对易, $\boldsymbol{S}_{12}$ 又和 $\boldsymbol{s}_3$ 对易, 所以 $\boldsymbol{S}_{12}^2$ 和 $\boldsymbol{S}_{123}$ 对易. 再由式 (9.222) 容易看出, $\boldsymbol{S}_{12}^2$, $\boldsymbol{S}_{123}$, $\boldsymbol{S}_{123}^2$ 都与 H 对易. 这样系统的 CSCO 可取 $\left\{\boldsymbol{S}_{12}^2, \boldsymbol{S}_{123}^2, (\boldsymbol{S}_{123})_z\right\}$, 前二者的本征值为

$$\boldsymbol{S}_{12}^2 = S'(S'+1), \quad S' = 0, 1 \tag{9.223}$$

$$\boldsymbol{S}_{123}^2 = S(S+1), \quad S = \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2} \tag{9.224}$$

代入式 (9.222), 就可得到能级的大小, 可记为 $E_{SS'}$. 由于 $[H, \boldsymbol{S}_{123}] = 0$, 体系能量与 $(\boldsymbol{S}_{123})_z$ 即总自旋 z 分量无关, 故能级 $E_{SS'}$ 简并度为 $(2S+1)$. 根据 (S, S') 组合, 体系的能级和简并度列表如下:

S'	1	1	0
S	3/2	1/2	1/2
$E_{SS'}$	$A/4 + B/2$	$A/4 - B$	$-3A/4$
$f_{SS'} = 2S+1$	4	2	2

如不出现偶然简并, 一般情况下体系将有 3 条能级, 其能量分别为 $\left(\dfrac{A}{4} + \dfrac{B}{2}\right)$、$\left(\dfrac{A}{4} - B\right)$ 与 $-\dfrac{3A}{4}$.

9.30 同上题, 但 $A = B$, 即 Hamilton 量为

$$H = A\left(\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2 + \boldsymbol{s}_2 \cdot \boldsymbol{s}_3 + \boldsymbol{s}_3 \cdot \boldsymbol{s}_1\right)$$

A 为实常量. (1) 求体系的能级和简并度. (2) 找一组守恒量完全集, 求出其共同本征态.

解 采用上一题的算符以及量子数记号, Hamilton 量可以写为

$$H = \frac{A}{2}\left(\boldsymbol{S}_{123}^2 - \frac{9}{4}\right) \tag{9.225}$$

因此, 能级为 (取 $\hbar = 1$)

$$E_S = \frac{A}{2}\left[S(S+1) - \frac{9}{4}\right] \tag{9.226}$$

同上题, 系统的 CSCO 可取 $\left\{\boldsymbol{S}_{12}^2, \boldsymbol{S}_{123}^2, (\boldsymbol{S}_{123})_z\right\}$, 相应的本征值为

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{S}_{12}^2 = S'(S'+1), \quad S' = 1, 0 \\ &\boldsymbol{S}_{123}^2 = S(S+1), \quad S = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \\ &(S_{123})_z = M, \qquad M = S, S-1, \cdots, (-S) \end{aligned} \tag{9.227}$$

根据 $\boldsymbol{S}_{12}$ 与 $\boldsymbol{s}_3$ 耦合, 量子数 S, S' 的可能组合为 $S = S' \pm \frac{1}{2}$, 即

$$S = 3/2,\ S' = 1$$
$$S = 1/2,\ S' = 1, 0$$

对于给定的 (S, S'), 状态由 $(\boldsymbol{S}_{123})_z = M$ 区分, 故能级简并度为 $(2S+1)$, 所以

$$\begin{aligned} E_{3/2} &= \frac{3}{4}A, \quad S = \frac{3}{2}, S' = 1, \quad \text{简并度 } =4 \\ E_{1/2} &= -\frac{3}{4}A, \quad S = \frac{1}{2}, S' = 1, 0, \quad \text{简并度 } =4 \end{aligned} \tag{9.228}$$

下面确定 CSCO$\{\boldsymbol{S}_{12}^2, \boldsymbol{S}_{123}^2, (\boldsymbol{S}_{123})_z\}$ 的共同本征态, 它们由 3 个粒子自旋耦合而成. 可以先由粒子 1、2 的自旋耦合, 再由 1、2 的总自旋与粒子 3 的自旋耦合. 粒子 $i(i = 1, 2, 3)$ 相对于 z 轴自旋"向上"和"向下"态记为 $\alpha(i), \beta(i)$, 相应的本征值 $s_{iz} = \pm\hbar/2$. 根据两个 1/2 自旋耦合的结果, 粒子 1、2 的耦合表象自旋态 [$(\boldsymbol{S}_{12}^2, (\boldsymbol{S}_{12})_z)$ 的共同本征态] 为

$$\begin{aligned} \chi_{11}(1,2) &= \alpha(1)\alpha(2), && S' = 1,\ (S_{12})_z = 1 \\ \chi_{10}(1,2) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)\right], && S' = 1,\ (S_{12})_z = 0 \\ \chi_{1,-1}(1,2) &= \beta(1)\beta(2), && S' = 1,\ (S_{12})_z = -1 \\ \chi_{00}(1,2) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)\right], && S' = 0,\ (S_{12})_z = 0 \end{aligned} \tag{9.229}$$

$\{\boldsymbol{S}_{12}^2, \boldsymbol{S}_{123}^2, (\boldsymbol{S}_{123})_z\}$ 的共同本征态记为 $\chi_{S'SM}(1,2,3)$. $s_{iz}(i = 1, 2, 3)$ 的本征值均取最大值时, 本征态显然是

$$\chi_{1\frac{3}{2}\frac{3}{2}} = \chi_{11}(1,2)\alpha(3) = \alpha(1)\alpha(2)\alpha(3)$$

$S = 3/2$ 时, M 共有 4 种取值, 与 $M = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}$ 相应的本征态可以用降算符 $[(S_{123})_x - \mathrm{i}(S_{123})_y]$ 重复作用于 $\chi_{1\frac{3}{2}\frac{3}{2}}$ 而求出. 由于降算符以及 $\chi_{1\frac{3}{2}\frac{3}{2}}$ 对于粒子间的交换是对称的, 因此, 由此而得到的各 $\chi_{1\frac{3}{2}M}$ 都是全对称态. 根据这个判断, 再考虑到 M 的取值, 立即可以写出这几个态的唯一可能的构造式

$$\chi_{1\frac{3}{2}\frac{3}{2}} = \chi_{11}(1,2)\alpha(3) = \alpha(1)\alpha(2)\alpha(3) \tag{9.230a}$$

$$\chi_{1\frac{3}{2}\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{3}}\left[\alpha(1)\alpha(2)\beta(3) + \beta(1)\alpha(2)\alpha(3) + \alpha(1)\beta(2)\alpha(3)\right] \tag{9.230b}$$

$$\chi_{1\frac{3}{2},-\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{3}}\left[\alpha(1)\beta(2)\beta(3) + \beta(1)\alpha(2)\beta(3) + \beta(1)\beta(2)\alpha(3)\right] \tag{9.230c}$$

$$\chi_{1\frac{3}{2},-\frac{3}{2}} = \beta(1)\beta(2)\beta(3) \tag{9.230d}$$

$S' = 0$ 的 1、2 粒子自旋态只能是 $\chi_{00}(1,2)$, 再考虑到 M 的取值, 可以写下:

$$\chi_{0\frac{1}{2}\frac{1}{2}} = \chi_{00}(1,2)\alpha(3) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\alpha(1)\beta(2)\alpha(3) - \beta(1)\alpha(2)\alpha(3)\right] \tag{9.231a}$$

$$\chi_{0\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} = \chi_{00}(1,2)\beta(3) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\alpha(1)\beta(2)\beta(3) - \beta(1)\alpha(2)\beta(3)\right] \tag{9.231b}$$

现在只剩 $\chi_{1\frac{1}{2}\frac{1}{2}}$ 和 $\chi_{1\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}$ 有待确定. $\chi_{1\frac{1}{2}\frac{1}{2}}$ 的构造式中, 每一项应包含两个 α 态, 一个 β 态, 它应该是 $\chi_{11}(1,2)\beta(3)$ 和 $\chi_{10}(1,2)\alpha(3)$ 的线性叠加, 它和 $\chi_{1\frac{3}{2}\frac{1}{2}}$ 的 S 值不同, 所以应该互相正交. $\chi_{1\frac{3}{2}\frac{1}{2}}$ 由式 (9.230b) 给出, 它可以表示成

$$\chi_{1\frac{3}{2}\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{3}}\left[\chi_{11}(1,2)\beta(3)+\sqrt{2}\chi_{10}(1,2)\alpha(3)\right]$$

因此, $\chi_{1\frac{1}{2}\frac{1}{2}}$ 的构造式只能是

$$\begin{aligned}\chi_{1\frac{1}{2}\frac{1}{2}}&=\frac{1}{\sqrt{3}}\left[\sqrt{2}\chi_{11}(1,2)\beta(3)-\chi_{10}(1,2)\alpha(3)\right]\\&=\frac{1}{\sqrt{6}}\left[2\alpha(1)\alpha(2)\beta(3)-\alpha(1)\beta(2)\alpha(3)-\beta(1)\alpha(2)\beta(3)\right]\end{aligned}\tag{9.232}$$

类似地, 式 (9.230c) 可以表示成

$$\chi_{1\frac{3}{2},-\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{3}}\left[\sqrt{2}\chi_{10}(1,2)\beta(3)+\chi_{1,-1}(1,2)\alpha(3)\right]$$

$\chi_{1\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}$ 应该用同样的项叠加而成, 但和上式正交, 所以

$$\begin{aligned}\chi_{1\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}&=\frac{1}{\sqrt{3}}\left[\chi_{10}(1,2)\beta(3)-\sqrt{2}\chi_{1-1}(1,2)\alpha(3)\right]\\&=\frac{1}{\sqrt{6}}\left[\alpha(1)\beta(2)\beta(3)+\beta(1)\alpha(2)\beta(3)-2\beta(1)\beta(2)\alpha(3)\right]\end{aligned}\tag{9.233}$$

以上式 (9.230)~ 式 (9.233) 就是的全部共同本征函数. 容易验证它们的确互相正交. 它们总个数为 8, 与非耦合表象独立自旋态数 $2\times2\times2=8$ 相等, 因此式 (9.230)~ 式 (9.233) 正是所求的一组正交完备的能量本征态.

说明 按照角动量耦合的理论, 利用 C.G. 系数表, 也可得到同样的结果. 这里只需要查角动量 1 与角动量 $\frac{1}{2}$ 耦合的 C.G. 系数. 事实上, 一般角动量理论中, C.G. 系数的计算也是大体按照上述步骤进行的.

上题与本题选取的 CSCO 相同, 都为 $\left\{\boldsymbol{S}_{12}^2,\boldsymbol{S}_{123}^2,(\boldsymbol{S}_{123})_z\right\}$. 因此, 这里构造的共同本征态也可用于上题.

第 10 章　力学量本征值问题的代数解法

10.1　设算符 F 与角动量算符 $\boldsymbol{J}$ 对易, 证明: (1) 在 $(\boldsymbol{J}^2, J_z)$ 共同本征态 $|jm\rangle$ 下, F 平均值与磁量子数 m 无关. (2) 在给定 j 的态所张开的 $(2j+1)$ 维子空间中, F 可表示成常数矩阵.

证明　(1) 在 $(\boldsymbol{J}^2, J_z)$ 的正交归一共同本征态 $|jm\rangle$ 下, 不妨对 $|jm\rangle$ 采用 Condon-Shortley 相因子约定 (为通常所采用), 则有

$$\begin{aligned} J_+|jm\rangle &= \sqrt{(j+m+1)(j-m)}|j,m+1\rangle \\ &= \sqrt{j(j+1)-m(m+1)}|j,m+1\rangle \\ J_-|jm\rangle &= \sqrt{(j-m+1)(j+m)}|j,m-1\rangle \\ &= \sqrt{j(j+1)-m(m-1)}|j,m-1\rangle \end{aligned} \tag{10.1}$$

其中 $J_+ = J_x + \mathrm{i}J_y, J_- = J_x - \mathrm{i}J_y = J_+^\dagger$. 这样

$$\begin{aligned} \langle jm+1|F|jm+1\rangle &= \frac{1}{n}j(j+1)-m(m+1)\langle jm|J_-FJ_+|jm\rangle \\ &= \frac{1}{j(j+1)-m(m+1)}\langle jm|FJ_-J_+|jm\rangle \\ &= \frac{1}{j(j+1)-m(m+1)}\langle jm|F\left(\boldsymbol{J}^2-J_z^2-J_z\right)|jm\rangle \\ &= \langle jm|F|jm\rangle \end{aligned}$$

即有 $\langle jm|F|jm\rangle = \langle jm+1|F|jm+1\rangle$. 依此类推, 对于属于同一个 j 的 m 与 m', 总有

$$\langle jm'|F|jm'\rangle = \langle jm|F|jm\rangle$$

因此 $\langle jm|F|jm\rangle$ 与 m 无关, 仅是 j 的函数, 可以记为

$$\langle jm|F|jm\rangle = \langle F\rangle_j \tag{10.2}$$

(2) 按题设 $[F, J_z] = 0$, 因而

$$0 = \langle jm'|\,[F,J_z]\,|jm\rangle = (m-m')\,\langle jm'|F|jm\rangle$$

可见, 只有当 $m = m'$ 时, $\langle jm'|F|jm\rangle$ 才不为零. 这样

$$\langle jm'|F|jm\rangle = \langle F\rangle_j\delta_{mm'} \tag{10.3}$$

即在属于同一个 j 的 $\{|jm\rangle\}$ 子空间中, F 等价于常数量 $\langle F\rangle_j$. 也就是说, F 的矩阵表示为

$$F = \langle F\rangle_j I$$

(I 为单位矩阵) 为一常数矩阵.

说明　我们记得, 群论中有一条 Schur 定理. 本题算符 F 与角动量算符 $\boldsymbol{J}$ 对易, 则在属于同一个 j 的 $\{|jm\rangle\}$ 子空间中, F 等价于一个常数量. 也可以说, 这是 Schur 定理的结果.

10.2　在 $(\boldsymbol{J}^2, J_z)$ 归一化共同本征态 $|jm\rangle$ 下, 证明: (1)J_x 和 J_y 的任何奇幂次式的平均值为 0. (2) 在 $|jm\rangle$ 态下, 测量 J_x 或 J_y 的可能取值为 $m' = j, j-1, \cdots, -j+1, -j$, 证明 J_x 或 J_y 取 $\pm m'$ 的概率相等.

证明 (1) J_x 和 J_y 可以如下用升降算符表示

$$J_x = \frac{1}{2}\left(J_+ + J_-\right), J_y = \frac{1}{2\mathrm{i}}\left(J_+ - J_-\right) \tag{10.4}$$

因此 J_x 和 J_y 的任何奇幂次式 (如 J_x, J_x^3, $J_xJ_y^2$, J_y^3 等等) 均可表示成 J_+ 和 J_- 的奇幂次式, 因而它们作用于 $|jm\rangle$, 将得到各种 $|jm'\rangle$, 而 $m'-m$ 为奇数, 因此各 $|jm'\rangle$ 的 $m' \neq m$. 由此可见

$$\langle jm|\,(J_x\text{和}J_y)\text{的奇幂次式}\,|jm\rangle = \sum_{m'\neq m} C_{m'}\langle jm|\,jm'\rangle = 0$$

可见 J_x 和 J_y 的任何奇幂次式的平均值为 0.

(2) 设在 $|jm\rangle$ 态中测得 $J_x = m'$ 的概率为 $P(m')$, 测得 $J_x = -m'$ 的概率为 $P(-m')$, 需证明 $P(m') = P(-m')$.

$j = 0$ 的情况无需证明. 如 j 为正整数, 作 J_x 的奇幂次 $(2j-1$ 次) 式

$$f(J_x) = J_x\left(J_x^2 - 1^2\right)\left(J_x^2 - 2^2\right)\cdots\left(J_x^2 - j^2\right) \tag{10.5}$$

其中不含因子 $\left(J_x^2 - m'^2\right)$, 则

$$f(m') = -f(-m') \neq 0$$
$$f(m'') = 0, m'' \neq \pm m'$$

根据第 (1) 小题中证明的结果, 在 $|jm\rangle$ 态下 $f(J_x)$ 平均值应等于 0, 因此

$$\langle f(J_x)\rangle = \sum_{m''} f\left(m''\right) P\left(m''\right) = f(m')\left[P(m') - P(-m')\right] = 0$$

所以 $P(m') = P(-m')$.

如 j 为半奇数, 作 J_x 的奇幂次 $(2j$ 次) 式

$$f(J_x) = J_x\left[J_x^2 - \left(\frac{1}{2}\right)^2\right]\left[J_x^2 - \left(\frac{3}{2}\right)^2\right]\cdots\left[J_x^2 - j^2\right] \tag{10.6}$$

其中不含因子 $\left(J_x^2 - m'^2\right)$. 由此同样证明 $P(m') = P(-m')$.

利用第 (1) 小题中证明的结果, 同样可以证明对 J_y 取 $\pm m'$ 的概率相等.

讨论 可证明在 $|jm\rangle$ 态测得 $J_x = m'$ 的概率与测得 $J_y = m'$ 的概率相等. 更一般的, 在 $|jm\rangle$ 态, 测得任何垂直于 z 轴的方向角动量投影 $J_n = m'$ 的概率都相等. 其证明如下.

对于任何垂直于 z 轴的方向 $\boldsymbol{n}$(方位角为 $\theta_0 = \pi/2, \varphi_0$ 任意), $J_n = \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}$ 取本征值 m' 的本征态[①]为

$$|J_n = m'\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi_0 J_z}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{2}J_y}\,|jm'\rangle$$

因此, 在 $|jm\rangle$ 态下测得 $J_n = m'$ 的概率为

$$P(J_n = m') = \left|\langle jm|\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi_0 J_z}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{2}J_y}\,|jm'\rangle\right|^2$$

由于

$$\langle jm|\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi_0 J_z} = \langle jm|\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\varphi_0}$$

因而

$$P(J_n = m') = \left|\langle jm|\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{2}J_y}\,|jm'\rangle\right|^2$$

可见概率 $P(J_n = m')$ 与 φ_0 无关, 因此在 $|jm\rangle$ 态, 测得沿任何垂直于 z 轴方向的角动量投影 $J_n = m'$ 的概率都相等.

① 可参考题 5.10.

10.3 $\boldsymbol{J}$ 为角动量算符, $\boldsymbol{n}$ 与 $\boldsymbol{J}$ 对易, 证明 $[\boldsymbol{J}, \boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}] = \mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J}$ (取 $\hbar = 1$).

证法一 记 $\boldsymbol{J} = (J_x, J_y, J_z) = (J_1, J_2, J_3)$, $\boldsymbol{n} = (n_x, n_y, n_z) = (n_1, n_2, n_3)$.

$$\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n} = \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J} = n_j J_j$$

利用角动量对易关系

$$[J_i, J_j] = \mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}J_k$$

按分量式计算

$$[J_i, \boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}] = [J_i, n_j J_j] = n_j\,[J_i, J_j] = \mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}n_j J_k = \mathrm{i}\hbar\,(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J})_i$$

也就是

$$[\boldsymbol{J}, \boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}] = \mathrm{i}\hbar\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J} \tag{10.7}$$

证法二 利用矢量算符三重积公式①

$$[\boldsymbol{A}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})]_\alpha = \boldsymbol{A}\cdot(B_\alpha\boldsymbol{C}) - (\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})\,C_\alpha$$

可见当 $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{B}$ 对易的时候

$$\boldsymbol{A}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C}) = \boldsymbol{B}\,(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{C}) - (\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})\,\boldsymbol{C}$$

由上式即得

$$[\boldsymbol{J}, \boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}] = \boldsymbol{J}\,(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}) - (\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n})\,\boldsymbol{J} = \boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J})$$

再利用角动量对易关系 $\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J} = \mathrm{i}\hbar\boldsymbol{J}$, 同样给出式 (10.7).

10.4 设 $\boldsymbol{J}$ 为角动量算符, $\boldsymbol{A}$ 为矢量算符, 则有关系

$$[J_\alpha, A_\beta] = \mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\gamma, \quad \alpha,\beta,\gamma = 1,2,3, \hbar = 1 \tag{10.8}$$

(1) 试计算 $\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J} + \boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A}$; (2) 试计算 $[\boldsymbol{J}, \boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}]$, $[\boldsymbol{J}^2, \boldsymbol{A}]$; (3) 试证明

$$\boldsymbol{J}\times(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A}) = (\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A})\boldsymbol{J} - \boldsymbol{J}^2\boldsymbol{A} + \mathrm{i}\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A}, (\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J})\times\boldsymbol{J} = \boldsymbol{J}(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{J}) - \boldsymbol{A}\boldsymbol{J}^2 + \mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J}$$

(4) 试证明 $\left[\boldsymbol{J}^2, [\boldsymbol{J}^2, \boldsymbol{A}]\right] = 2(\boldsymbol{J}^2\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}\boldsymbol{J}^2) - 4\boldsymbol{J}(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{J})$.

解 (1) 根据题给式 (10.8), 得

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J} + \boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A})_\alpha &= \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\,(A_\beta J_\gamma + J_\beta A_\gamma) = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\,(-A_\gamma J_\beta + J_\beta A_\gamma)\\ &= \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\,[J_\beta, A_\gamma] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\mathrm{i}\varepsilon_{\beta\gamma\gamma'}A_{\gamma'} = 2\mathrm{i}\delta_{\alpha\gamma'}A_{\gamma'} = 2\mathrm{i}A_\alpha\end{aligned}$$

也就是

$$\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J} + \boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A} = 2\mathrm{i}\boldsymbol{A} \tag{10.9}$$

(2) 根据式 (10.8), 得

$$\begin{aligned}[J_\alpha, \boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}] &= [J_\alpha, J_\beta A_\beta] = J_\beta\,[J_\alpha, A_\beta] + [J_\alpha, J_\beta]\,A_\beta = \mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}J_\beta A_\gamma + \mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}J_\gamma A_\beta\\ &= \mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\,(J_\gamma A_\beta + J_\beta A_\gamma) = \mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\,(J_\gamma A_\beta - J_\gamma A_\beta) = 0\end{aligned}$$

也就是

$$[\boldsymbol{J}, \boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}] = 0 \tag{10.10}$$

① 见题 4.11.

可见 $\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}$ 转动不变, 是标量算符. 其次

$$\begin{aligned}\left[\boldsymbol{J}^2, A_\alpha\right] &= \left[J_\beta J_\beta, A_\alpha\right] = J_\beta\left[J_\beta, A_\alpha\right] + \left[J_\beta, A_\alpha\right] J_\beta = \mathrm{i}\varepsilon_{\beta\alpha\gamma}\left(J_\beta A_\gamma + A_\gamma J_\beta\right) \\ &= -\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\left(J_\beta A_\gamma + A_\gamma J_\beta\right) = -\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\left(J_\beta A_\gamma - A_\beta J_\gamma\right) = \mathrm{i}\left(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J} - \boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A}\right)_\alpha\end{aligned}$$

也就是

$$\left[\boldsymbol{J}^2, \boldsymbol{A}\right] = \mathrm{i}\left(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J} - \boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A}\right) \tag{10.11}$$

(3) 用 $\boldsymbol{J}$ 对式 (10.9) 两端分别从左边与右边作点乘, 即得[①]

$$(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A})\cdot\boldsymbol{J} = \boldsymbol{J}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J}) = \mathrm{i}\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A} \tag{10.12}$$

利用题 4.11 所给的算符公式 $[\boldsymbol{A}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})]_\alpha = \boldsymbol{A}\cdot(B_\alpha\boldsymbol{C}) - (\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})C_\alpha$ 可得

$$\begin{aligned}\left[\boldsymbol{J}\times(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A})\right]_\alpha &= \boldsymbol{J}\cdot(J_\alpha\boldsymbol{A}) - \boldsymbol{J}^2 A_\alpha \\ &= J_\beta J_\alpha A_\beta - \boldsymbol{J}^2 A_\alpha = J_\alpha J_\beta A_\beta + \left[J_\beta, J_\alpha\right] A_\beta - \boldsymbol{J}^2 A_\alpha \\ &= J_\alpha\left(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}\right) + \mathrm{i}\varepsilon_{\beta\alpha\gamma} J_\gamma A_\beta - \boldsymbol{J}^2 A_\alpha = J_\alpha\left(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}\right) + \mathrm{i}\left(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A}\right)_\alpha - \boldsymbol{J}^2 A_\alpha\end{aligned}$$

即有

$$\boldsymbol{J}\times(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A}) = \mathrm{i}\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A} + \boldsymbol{J}\left(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}\right) - \boldsymbol{J}^2\boldsymbol{A} \tag{10.13}$$

类似地, 利用题 4.11 所给的算符公式 $[(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\times\boldsymbol{C}]_\alpha = \boldsymbol{A}\cdot(B_\alpha\boldsymbol{C}) - A_\alpha(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{C})$, 可证[②]

$$(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A})\times\boldsymbol{J} = \mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J} + \boldsymbol{J}\left(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}\right) - \boldsymbol{A}\boldsymbol{J}^2 \tag{10.14}$$

(4) 利用式 (10.11) 以及 $\boldsymbol{J}^2$ 和 $\boldsymbol{J}$ 的对易性, 可得

$$\begin{aligned}\left[\boldsymbol{J}^2, \left[\boldsymbol{J}^2, \boldsymbol{A}\right]\right] &= \mathrm{i}\left[\boldsymbol{J}^2, \boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J}\right] - \mathrm{i}\left[\boldsymbol{J}^2, \boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A}\right] = \mathrm{i}\left[\boldsymbol{J}^2, \boldsymbol{A}\right]\times\boldsymbol{J} - \mathrm{i}\boldsymbol{J}\times\left[\boldsymbol{J}^2, \boldsymbol{A}\right] \\ &= -\left(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J} - \boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A}\right)\times\boldsymbol{J} + \boldsymbol{J}\times\left(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J} - \boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A}\right)\end{aligned}$$

再利用式 (10.9)、式 (10.13) 与 (10.14), 上式可简化为

$$\left[\boldsymbol{J}^2, \left[\boldsymbol{J}^2, \boldsymbol{A}\right]\right] = 2(\boldsymbol{J}^2\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}\boldsymbol{J}^2) - 4\boldsymbol{J}(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{J}) \tag{10.15}$$

即为所证.

10.5 设 $\boldsymbol{J}$ 为角动量算符, $\boldsymbol{A}$ 为矢量算符, 满足 $[J_\alpha, A_\beta] = \mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\gamma(\alpha,\beta,\gamma = 1,2,3,\hbar = 1)$. 证明: (1) 在 $(\boldsymbol{J}^2, J_z)$ 共同本征态 $|jm\rangle$ 下, $\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{J}$ 的平均值与磁量子数 m 无关. (2)

$$\langle jm'|\boldsymbol{A}|jm\rangle = \langle jm'|\boldsymbol{J}|jm\rangle\frac{\langle\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{J}\rangle_j}{j(j+1)}$$

证明 (1) 题 10.4 式 (10.10) 表明, $\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}$ 是标量算符. 从而根据题 10.1 结论, 在属于同一个 j 的 $\{|jm\rangle\}$ 子空间中, $\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{J}$ 等价于常数量 $\langle\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{J}\rangle_j$. 因而在 $(\boldsymbol{J}^2, J_z)$ 共同本征态 $|jm\rangle$ 下, $\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{J}$ 的平均值与磁量子数 m 无关.

---

① 由于式 (10.8), $\boldsymbol{J}$ 与 $\boldsymbol{A}$ 的相同分量对易, 故有 $\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{J}$.

② 如果 $\boldsymbol{A}$ 为 Hermite 算符, 对式 (10.13) 取 Hermite 共轭, 并将该 Hermite 共轭式中的 A^+ 全部换为 A 一样给出 (10.14) 式.

(2) 题 10.4 式 (10.15) 可写为

$$\boldsymbol{J}^4\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\boldsymbol{J}^4-2\boldsymbol{J}^2\boldsymbol{A}\boldsymbol{J}^2=2(\boldsymbol{J}^2\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\boldsymbol{J}^2)-4\boldsymbol{J}(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{J}) \tag{10.16}$$

此式两边取矩阵元 $\langle jm'|\cdots|jm\rangle$, 则 $\boldsymbol{J}^2\to j(j+1)$, $\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{J}\to\langle\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{J}\rangle_j$. 上式左边取矩阵元为零, 这样得到

$$\langle jm'|\boldsymbol{A}|jm\rangle=\langle jm'|\boldsymbol{J}|jm\rangle\frac{\langle\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{J}\rangle_j}{j(j+1)} \tag{10.17}$$

如取 $m=m'$, 即得平均值公式

$$\langle\boldsymbol{A}\rangle_{jm}=\langle\boldsymbol{J}\rangle_{jm}\frac{\langle\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{J}\rangle_j}{j(j+1)} \tag{10.18}$$

10.6 证明 (取 $\hbar=1$)

(1) $J_z^nJ_\pm=J_\pm(J_z\pm1)^n$, $n=0,1,2,\cdots$

(2) $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda J_z}J_x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_z}=J_x\cos\lambda-J_y\sin\lambda$, $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda J_z}J_y\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_z}=J_x\sin\lambda+J_y\cos\lambda$

证明 (1) 升降算符定义

$$J_\pm=J_x\pm\mathrm{i}J_y \tag{10.19}$$

其反解式

$$J_x=\frac{1}{2}\left(J_++J_-\right),J_y=\frac{1}{2\mathrm{i}}\left(J_+-J_-\right) \tag{10.20}$$

利用角动量对易关系 $\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J}=\mathrm{i}\boldsymbol{J}$, 易得

$$[J_z,J_\pm]=\pm J_\pm \tag{10.21}$$

也就是

$$J_zJ_\pm=J_\pm(J_z\pm1) \tag{10.22}$$

反复应用此式, 可证明

$$J_z^nJ_\pm=J_\pm(J_z\pm1)^n,\quad n=0,1,2,\cdots \tag{10.23}$$

(2) 利用式 (10.23) 可知, 对于任何可以展开成关于 J_z 的 Taylor 级数的函数 (整函数)$f(J_z)$, 有

$$f(J_z)J_\pm=J_\pm f(J_z\pm1) \tag{10.24}$$

现取 $f(J_z)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda J_z}$, 即得

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda J_z}J_\pm=J_\pm\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda J_z}\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\lambda J_z} \tag{10.25}$$

对上式两边右乘 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_z}$(其中 λ 为常数), 即得

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda J_z}J_+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_z}&=J_+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda J_z}\\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda J_z}J_-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_z}&=J_-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_z}\end{aligned} \tag{10.26}$$

根据式 (10.20), 即得

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda J_z}J_x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_z}&=J_x\cos\lambda-J_y\sin\lambda,\\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda J_z}J_y\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_z}&=J_x\sin\lambda+J_y\cos\lambda\end{aligned} \tag{10.27}$$

证毕.

另证 [关于式 (10.26)] 令

$$f(\lambda)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda J_z}J_+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_z}$$

当 $\lambda=0$ 时, $f(0)=J_+$. 上式对参变量 λ 求导得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}f(\lambda)=\mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda J_z}\left[J_z,J_+\right]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_z}=\mathrm{i}f(\lambda)$$

根据初条件, 该一阶微分方程的解为

$$f(\lambda) = f(0)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda} = J_+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda}$$

此即式 (10.26) 的第一式. 上式取 Hermite 共轭, 并将 λ^* 换为 λ, 即得式 (10.26) 的第二式.

说明 式 (10.27) 中 x, y, z 轮换, 即可以得到

$$\begin{aligned} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda J_x} J_y \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_x} &= J_y\cos\lambda - J_z\sin\lambda, \\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda J_x} J_z \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_x} &= J_y\sin\lambda + J_z\cos\lambda \end{aligned} \tag{10.28}$$

以及

$$\begin{aligned} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda J_y} J_z \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_z} &= J_z\cos\lambda - J_x\sin\lambda, \\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda J_y} J_x \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_y} &= J_z\sin\lambda + J_x\cos\lambda \end{aligned} \tag{10.29}$$

10.7 设 $\boldsymbol{n}$ 为任意方向的单位矢量, $J_n = \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}$, 证明 (取 $\hbar = 1$)

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}} \boldsymbol{J} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}} = \boldsymbol{n}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}) + \boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J}\sin 2\lambda + (\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J})\times\boldsymbol{n}\cos 2\lambda \tag{10.30}$$

证明 视 λ 为参变量, $\boldsymbol{n}$ 则固定不变, 令

$$U(\lambda) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}}, \quad U^\dagger(\lambda) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}} \tag{10.31}$$

$$\boldsymbol{f}(\lambda) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}} \boldsymbol{J} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}} = U^\dagger(\lambda)\boldsymbol{J}U(\lambda) \tag{10.32}$$

初始条件

$$\boldsymbol{f}(0) = \boldsymbol{J} \tag{10.33}$$

式 (10.32) 两边对参变量 λ 求导, 并利用公式[①]

$$[\boldsymbol{J}, J_n] = \mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J} \tag{10.34}$$

可得

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{f}}{\mathrm{d}\lambda} &= \mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}} [\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}, \boldsymbol{J}] \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}} \\ &= \mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}} (-\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J}) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}} = \boldsymbol{n}\times \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}} \boldsymbol{J} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}} \end{aligned}$$

也就是

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{f}}{\mathrm{d}\lambda} = \boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f} \tag{10.35}$$

用单位矢量 $\boldsymbol{n}$ 对式 (10.32) 两边作点乘得

$$\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{f} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}} \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}} = J_n \tag{10.36}$$

用 $\boldsymbol{n}$ 从左边对式 (10.35) 作叉乘得到

$$\boldsymbol{n}\times\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{f}}{\mathrm{d}\lambda} = \boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}) = \boldsymbol{n}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{f}) - \boldsymbol{f} = J_n - \boldsymbol{f} \tag{10.37}$$

式 (10.35)$\pm$i$\times$ 式 (10.37) 即得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}(\boldsymbol{f} \pm \mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}) = \mp\mathrm{i}(\boldsymbol{f} \pm \mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f} - \boldsymbol{n}J_n)$$

其中 $\boldsymbol{n}$ 为常矢量, 上式也即

① 即式 (10.7).

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}(\boldsymbol{f}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}-\boldsymbol{n}J_n)=-\mathrm{i}(\boldsymbol{f}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}-\boldsymbol{n}J_n) \tag{10.38a}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}(\boldsymbol{f}-\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}-\boldsymbol{n}J_n)=\mathrm{i}(\boldsymbol{f}-\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}-\boldsymbol{n}J_n) \tag{10.38b}$$

式 (10.38a) 与式 (10.38b) 互为 Hermite 共轭. 它们都是关于 λ 的一阶微分方程, 积分即得

$$\begin{aligned}\boldsymbol{f}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}-\boldsymbol{n}J_n&=[\boldsymbol{f}(0)+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(0)-\boldsymbol{n}J_n]\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda}\\&=(\boldsymbol{J}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J}-\boldsymbol{n}J_n)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda}\end{aligned} \tag{10.39}$$

$$\boldsymbol{f}-\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}-\boldsymbol{n}J_n=(\boldsymbol{J}-\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J}-\boldsymbol{n}J_n)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda} \tag{10.40}$$

式 (10.39)、式 (10.40) 两式相加, 即得

$$\boldsymbol{f}(\lambda)=\boldsymbol{J}\cos\lambda+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J}\sin\lambda+\boldsymbol{n}J_n(1-\cos\lambda) \tag{10.41}$$

由于 $(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J})\times\boldsymbol{n}=\boldsymbol{J}-\boldsymbol{n}J_n$, 上式又可以化为

$$\boldsymbol{f}(\lambda)=\boldsymbol{n}J_n+(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J})\times\boldsymbol{n}\cos\lambda+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J}\sin\lambda \tag{10.42}$$

此即所要证明的式 (10.30).

讨论 如取 $\boldsymbol{n}$ 沿 z 轴, 即取 $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{e}_z$, 则 $J_n=J_z$, $\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J}=\boldsymbol{e}_yJ_x-\boldsymbol{e}_xJ_y$, $(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J})\times\boldsymbol{n}=\boldsymbol{e}_xJ_x+\boldsymbol{e}_yJ_y$, 此时式 (10.30) 为

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda J_z}\boldsymbol{J}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda J_z}=\boldsymbol{e}_zJ_z+\boldsymbol{e}_x(J_x\cos\lambda-J_y\sin\lambda)+\boldsymbol{e}_y(J_x\sin\lambda+J_y\cos\lambda)$$

此式与题 10.6 相应结果等价.

说明 这里取 $J=1/2$ 就得到在第 9 章关于 1/2 自旋算符的相应结果, 见题 9.12. 那里指出, 可以有多种解法. 那些解法中凡是没有用到 1/2 自旋特殊性质的, 都可以直接用于本题的证明.

10.8 大小相等的两个角动量耦合成角动量为零的态, ψ_{jj00}. 证明 $j_{1z}=-j_{2z}=j$, $j-1,\cdots,-j$ 的概率都相等, 即 $1/(2j+1)$.

提示 利用 $\langle jmj-m|00\rangle=(-1)^{j-m}/\sqrt{2j+1}$.

证明 大小相等的两个角动量耦合成角动量为零的态 $|00\rangle$, $|00\rangle$ 按非耦合表象的基矢展开为

$$|00\rangle=\sum_{m_1m_2}\langle jm_1jm_2|00\rangle|jm_1,jm_2\rangle=\sum_m\langle jmj-m|00\rangle|jm,j-m\rangle \tag{10.43}$$

按 CG 系数性质

$$\langle jmj-m|00\rangle=(-1)^{j-m}/\sqrt{2j+1}\langle jm00|jm\rangle=(-1)^{j-m}/\sqrt{2j+1}$$

这样式 (10.43) 写为

$$|00\rangle=\sum_{m=-j}^{j}\frac{(-1)^{j-m}}{\sqrt{2j+1}}|jm,j-m\rangle \tag{10.44}$$

$|00\rangle$ 按 $|jm,j-m\rangle$ 的展开, 其振幅为 $\dfrac{(-1)^{j-m}}{\sqrt{2j+1}}$, 而概率为即 $1/(2j+1)$.

10.9 设角动量 $\boldsymbol{j}_1$ 与 $\boldsymbol{j}_2$ 耦合, $\boldsymbol{j}_1+\boldsymbol{j}_2=\boldsymbol{J}$, 在 $|j_1j_2jm\rangle$ 态下, 计算 $\boldsymbol{j}_1$ 与 $\boldsymbol{j}_2$ 的平均值.

解 利用题 10.4 的式 (10.18), 其中取 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{j}_1$, 即得

$$\langle\boldsymbol{j}_1\rangle=\langle\boldsymbol{j}\rangle\frac{\langle\boldsymbol{j}_1\cdot\boldsymbol{j}\rangle_j}{j(j+1)} \tag{10.45}$$

由于

$$\boldsymbol{j}_1\cdot\boldsymbol{j}=\boldsymbol{j}_1^2+\boldsymbol{j}_1\cdot\boldsymbol{j}_2=\boldsymbol{j}_1^2+\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{j}^2-\boldsymbol{j}_1^2-\boldsymbol{j}_2^2\right)=\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{j}^2+\boldsymbol{j}_1^2-\boldsymbol{j}_2^2\right) \tag{10.46}$$

式 (10.45) 又写为

$$\langle\boldsymbol{j}_1\rangle=\langle\boldsymbol{j}\rangle\frac{\langle\boldsymbol{j}^2+\boldsymbol{j}_1^2-\boldsymbol{j}_2^2\rangle_j}{2j(j+1)}=\langle\boldsymbol{j}\rangle\frac{\langle j(j+1)+j_1(j_1+1)-j_2(j_2+1)\rangle_j}{2j(j+1)} \tag{10.47}$$

由于在 $|j_1j_2jm\rangle$ 态下, $\langle j_x\rangle=\langle j_y\rangle=0$, 由上式立得 $\langle j_{1x}\rangle=\langle j_{1y}\rangle=0$. 同理 $\langle j_{2x}\rangle=\langle j_{2y}\rangle=0$. 在 $|j_1j_2jm\rangle$ 态下, $\langle j_z\rangle=m=\langle j_{1z}\rangle+\langle j_{2z}\rangle$, 这样

$$\begin{aligned}\langle j_{1z}\rangle&=m\frac{j(j+1)+j_1(j_1+1)-j_2(j_2+1)}{2j(j+1)}\\ \langle j_{2z}\rangle&=m\frac{j(j+1)+j_2(j_2+1)-j_1(j_1+1)}{2j(j+1)}=m-\langle j_{1z}\rangle\end{aligned}$$

10.10 同上题, 求 $\langle j_1j_2J'M'|\,\boldsymbol{j}_1\,|j_1j_2JM\rangle\neq0$ 条件对量子数 JM 的限制, 即 $\Delta J=J'-J$, $\Delta M=M'-M$ 的允许值.

解 $\boldsymbol{j}_1$ 和 $\boldsymbol{j}_2$ 属于不同的自由度, 彼此对易. 定义升降算符

$$\begin{aligned}&j_{1\pm}=j_{1x}\pm\mathrm{i}j_{1y},\quad j_{2\pm}=j_{2x}\pm\mathrm{i}j_{2y}\\ &J_\pm=J_x\pm\mathrm{i}J_y=(j_{1x}+j_{2x})\pm\mathrm{i}\,(j_{1y}+j_{2y})=j_{1\pm}+j_{2\pm}\end{aligned} \tag{10.48}$$

作为角动量算符 $\boldsymbol{j}_1$ 和 $\boldsymbol{j}_2$ 满足对易式

$$\boldsymbol{j}_1\times\boldsymbol{j}_1=\mathrm{i}\boldsymbol{j}_1,\quad\boldsymbol{j}_2\times\boldsymbol{j}_2=\mathrm{i}\boldsymbol{j}_2 \tag{10.49}$$

易证

$$[J_z,j_{1z}]=0,\quad[J_z,j_{1\pm}]=\pm j_{1\pm} \tag{10.50}$$

$\boldsymbol{j}_1^2$ 和 $\boldsymbol{j}_2^2$ 的本征值为

$$\boldsymbol{j}_1^2=j_1(j_1+1),\quad\boldsymbol{j}_2^2=j_2(j_2+1) \tag{10.51}$$

当 j_1 和 j_2 给定以后, $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 的可能取值为

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{J}^2=j(j+1),\quad j=j_1+j_2,j_1+j_2-1,\cdots,|j_1-j_2|\\ &J_z=m,\qquad\qquad m=j,j-1,j-2,\cdots,(-j)\end{aligned} \tag{10.52}$$

在 j_1 和 j_2 取定的情况下, 为方便将耦合态 $|j_1j_2JM\rangle$ 简记为 $|JM\rangle$. 对式 (10.50) 中两式的两边取矩阵元 $\langle J'M'|\cdots|JM\rangle$, 得

$$\begin{aligned}&(M'-M)\,\langle J'M'|\,j_{1z}\,|JM\rangle=0\\ &(M'-M\mp1)\,\langle J'M'|\,j_{1\pm}\,|JM\rangle=0\end{aligned} \tag{10.53}$$

从上式易见 M 的选择定则为

$$\begin{aligned}&\langle J'M'|\,j_{1z}\,|JM\rangle\neq0,\qquad&&\Delta M=M'-M=0\\ &\langle J'M'|\,j_{1x}\pm\mathrm{i}j_{1y}\,|JM\rangle\neq0,\quad&&\Delta M=M'-M=\pm1\end{aligned} \tag{10.54}$$

可见 $\boldsymbol{j}_1$ 有任何一个分量的矩阵元不为 0 的条件是 $\Delta M=M'-M=0,\pm1$. 这一条件仅是必要条件, 因为当 M 满足 $\Delta M=M'-M=0,\pm1$ 时, $\boldsymbol{j}_1$ 分量的上述矩阵元还不一定不为零, 还取决于 J' 的值.

对于 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{j}_1+\boldsymbol{j}_2$, 根据

$$J_z\left|JM\right\rangle=M\left|JM\right\rangle, J_\pm\left|JM\right\rangle\to\left|J,M\pm1\right\rangle$$

得选择定则为

$$\begin{aligned}&\left\langle J'M'\right|J_z\left|JM\right\rangle\neq0, &&\Delta J=J'-J=0,\Delta M=M'-M=0\\&\left\langle J'M'\right|J_x\pm\mathrm{i}J_y\left|JM\right\rangle\neq0, &&\Delta J=J'-J=0,\Delta M=M'-M=\pm1\end{aligned}\tag{10.55}$$

在题 10.4 式 (10.15) 中, 取 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{j}_1$ 得

$$\boldsymbol{J}^4\boldsymbol{j}_1+\boldsymbol{j}_1\boldsymbol{J}^4-2\boldsymbol{J}^2\boldsymbol{j}_1\boldsymbol{J}^2=2(\boldsymbol{J}^2\boldsymbol{j}_1+\boldsymbol{j}_1\boldsymbol{J}^2)-4\boldsymbol{J}(\boldsymbol{j}_1\cdot\boldsymbol{J})$$

由于 $2\boldsymbol{j}_1\cdot\boldsymbol{J}=2\boldsymbol{j}_1^2+2\boldsymbol{j}_1\cdot\boldsymbol{j}_2=\boldsymbol{J}^2+\boldsymbol{j}_1^2-\boldsymbol{j}_2^2$, 上式又可写为

$$\boldsymbol{J}^4\boldsymbol{j}_1+\boldsymbol{j}_1\boldsymbol{J}^4-2\boldsymbol{J}^2\boldsymbol{j}_1\boldsymbol{J}^2-2\boldsymbol{J}^2\boldsymbol{j}_1-2\boldsymbol{j}_1\boldsymbol{J}^2=-2\boldsymbol{J}\left(\boldsymbol{J}^2+\boldsymbol{j}_1^2-\boldsymbol{j}_2^2\right)\tag{10.56}$$

式 (10.56) 两边取矩阵元 $\langle JM'|\cdots|JM\rangle$, 则 $\boldsymbol{J}^2\to J(J+1)$, $\boldsymbol{j}_1^2\to j_1(j_1+1)$, $\boldsymbol{j}_2^2\to j_2(j_2+1)$, 这样给出

$$2J(J+1)\left\langle JM'\right|\boldsymbol{j}_1\left|JM\right\rangle=\left[J(J+1)+j_1(j_1+1)-j_2(j_2+1)\right]\left\langle JM'\right|\boldsymbol{J}\left|JM\right\rangle\tag{10.57}$$

上式可见 $\langle JM'|\boldsymbol{j}_1|JM\rangle\neq0$ 和 $\langle JM'|\boldsymbol{J}|JM\rangle\neq0$ 的选择定则相同, 为

$$\begin{aligned}&\left\langle JM'\right|j_{1z}\left|JM\right\rangle\neq0, &&\Delta M=M'-M=0\\&\left\langle JM'\right|j_{1x}\pm\mathrm{i}j_{1y}\left|JM\right\rangle\neq0, &&\Delta M=M'-M=\pm1\end{aligned}\tag{10.58}$$

式 (10.58) 是在 $J'=J$ 的条件下得出的, 它和式 (10.54) 的差别还有, 式 (10.54) 仅是必要条件, 而式 (10.58) 则是充分必要条件.

式 (10.56) 两边取矩阵元 $\langle J'M'|\cdots|JM\rangle(J'\neq J)$, 因 $J'\neq J$ 右端结果为零, 由此得

$$\left[J'^2(J'+1)^2+J^2(J+1)^2-2JJ'(J+1)(J'+1)-2J'(J'+1)-2J(J+1)\right]\left\langle J'M'\right|\boldsymbol{j}_1\left|JM\right\rangle=0$$

因此, 如 $\langle J'M'|\boldsymbol{j}_1|JM\rangle\neq0$, 除了量子数 M 必须满足式 (10.54) 外, 还必须

$$J'^2(J'+1)^2+J^2(J+1)^2-2JJ'(J+1)(J'+1)-2J'(J'+1)-2J(J+1)=0\tag{10.59}$$

上式可以化成

$$\left[(J'+J+1)^2-1\right]\left[(J'-J)^2-1\right]=0$$

由于 $J'+J+1>1$, 上式的解为

$$\Delta J=J'-J=\pm1\tag{10.60}$$

综合式 (10.58)、式 (10.60), 可知所求选择定则为 $\Delta J=J'-J=0,\pm1$; $\Delta M=M'-M=0,\pm1$.

因为在角动量 $\boldsymbol{j}_1$ 与 $\boldsymbol{j}_2$ 的耦合中, $\boldsymbol{j}_1$ 与 $\boldsymbol{j}_2$ 的地位是对等的, 所以对于 $\boldsymbol{j}_2$ 的矩阵元也有上述同样的选择定则.

10.11 设体系处于 $(\boldsymbol{J}^2,J_z)$ 共同本征态 $|j,m=j\rangle=|jj\rangle$ 下, 设 z' 轴与 z 轴夹角为 θ, 求在 $|jj\rangle$ 态下测得 $J_{z'}=j$ 的概率 $P(\theta)$, 取 $\hbar=1$. 先讨论 $j=1/2$ 的情况, 然后讨论一般情况.

解 设 z' 轴是 z 轴绕 y 轴旋转 θ 角而成, 则 $J_{z'}=j$ 的本征态可表示为[①]

$$|j, J_{z'}=j\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta J_y}|jj\rangle \tag{10.61}$$

设 $|j,m=j\rangle=|jj\rangle$ 已归一化, 则在 $|jj\rangle$ 态下测得 $J_{z'}=j$ 的概率为

$$P(\theta)=|\langle j, J_{z'}=j\,|jj\rangle|^2=\left|\langle jj|\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta J_y}\,|jj\rangle\right|^2 \tag{10.62}$$

对于 $j=1/2$ 的情况, $\boldsymbol{j}=\dfrac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$, $\boldsymbol{\sigma}$ 为 Pauli 算符, 而

$$|jj\rangle=\left|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle=|\uparrow\rangle$$

为 $\sigma_z=1$ 的本征态. 利用公式

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\theta}{2}\sigma_y}=\cos\frac{\theta}{2}+\mathrm{i}\sigma_y\sin\frac{\theta}{2} \tag{10.63}$$

即得

$$P(\theta)=\left|\langle\uparrow|\cos\frac{\theta}{2}+\mathrm{i}\sigma_y\sin\frac{\theta}{2}\,|\uparrow\rangle\right|^2=\left|\langle\uparrow|\cos\frac{\theta}{2}\,|\uparrow\rangle\right|^2=\cos^2\frac{\theta}{2} \tag{10.64}$$

计算中利用了 $\langle\uparrow|\,\sigma_y\,|\uparrow\rangle=0$.

对于一般的角动量 j, $|jj\rangle$ 态相当于 $2j$ 个自旋 1/2 粒子的体系处于全体粒子自旋"向上"的状态, 即 $|jj\rangle$ 可以等价地表示为

$$|jj\rangle=|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2\cdots|\uparrow\rangle_{2j} \tag{10.65}$$

而角动量算符可表示为

$$\boldsymbol{J}=\frac{1}{2}\sum_{k=1}^{2j}\boldsymbol{\sigma}_k$$

对于 $k\neq k'$, $\boldsymbol{\sigma}_k$ 与 $\boldsymbol{\sigma}_{k'}$ 对易, 因此

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta J_y}=\prod_{k=1}^{2j}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\theta}{2}(\sigma_k)_y}=\prod_{k=1}^{2j}\left[\cos\frac{\theta}{2}+\mathrm{i}(\boldsymbol{\sigma}_k)_y\sin\frac{\theta}{2}\right] \tag{10.66}$$

代入式 (10.62), 即得

$$P(\theta)=\left|\langle jj|\prod_{k=1}^{2j}\left[\cos\frac{\theta}{2}-\mathrm{i}(\boldsymbol{\sigma}_k)_y\sin\frac{\theta}{2}\right]|jj\rangle\right|^2 .$$

其中 $(\boldsymbol{\sigma}_k)_y$ 作用于 $|\uparrow\rangle_k$ 变成 $|\downarrow\rangle_k$, 对 $P(\theta)$ 无贡献, 因此

$$P(\theta)=\left(\cos\frac{\theta}{2}\right)^{4j} \tag{10.67}$$

10.12 设粒子处于 $(\boldsymbol{l}^2, l_z)$ 共同本征态 Y_{20}, 求 l_x 的可能测值及相应的概率.

解 本题解答已在题 4.31 中涵盖, 那里给出了两种解法. 答案是 l_x 的可能测值为 $2,0,-2$, 相应的概率为 $3/8,1/4,3/8$.

10.13 在 $(\boldsymbol{L}^2, L_z)$ 表象 (即取 $|lm\rangle$ 为基矢) 中, $l=1$ 的子空间是几维? 试求 L_x 在此子空间中的矩阵表示. 再利用矩阵方法求出 L_x 的本征值和本征态, 并将矩阵 L_x 对角化.

① 参考题 5.10.

解 $l=1$ 的三个基矢量张成维数为 3 的子空间.

对正交归一的角动量态 $|jm\rangle$ 采用 Condon-Shortley 相因子约定, 则有

$$\begin{aligned} J_+|jm\rangle &= \sqrt{(j+m+1)(j-m)}|j,m+1\rangle \\ &= \sqrt{j(j+1)-m(m+1)}|j,m+1\rangle \\ J_-|jm\rangle &= \sqrt{(j-m+1)(j+m)}|j,m-1\rangle \\ &= \sqrt{j(j+1)-m(m-1)}|j,m-1\rangle \end{aligned} \tag{10.68}$$

其中 $J_+=J_x+\mathrm{i}J_y, J_-=J_x-\mathrm{i}J_y$, 加上 $J_z|jm\rangle=m\hbar|jm\rangle$. 据此对 $l=1$ 写出 L_x 和 L_y 的矩阵分别为

$$L_x=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix},\quad L_y=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}&0\\\mathrm{i}&0&-\mathrm{i}\\0&\mathrm{i}&0\end{pmatrix},\quad L_z=\hbar\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix} \tag{10.69}$$

现设 $\psi=(a_1,a_2,a_3)^T$ 为 $\boldsymbol{L}^2$ 和 L_z 表象中 L_x 的本征态, 相应的本征值为 λ. 我们如下写出本征方程

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

上式非零解条件给出如下关于 L_x 本征方程的久期方程

$$\begin{vmatrix}-\lambda&\frac{\hbar}{\sqrt{2}}&0\\\frac{\hbar}{\sqrt{2}}&-\lambda&\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\\0&\frac{\hbar}{\sqrt{2}}&-\lambda\end{vmatrix}=0$$

即 $-\lambda^3+\hbar^2\lambda=0$, 得其根为 $\lambda_1=\hbar,\lambda_2=0,\lambda_3=-\hbar$, 即得 L_x 的 3 个本征值. 当 $\lambda_1=\hbar$ 时, L_x 的本征方程为

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

也就是

$$\begin{pmatrix}a_2\\a_1+a_3\\a_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\sqrt{2}a_1\\\sqrt{2}a_2\\\sqrt{2}a_3\end{pmatrix}$$

可得 $a_2=\sqrt{2}a_1, a_2=\sqrt{2}a_3, a_3=a_1$, 这样我们得到 L_x 的本征值为 $\hbar$ 的本征态为 $\psi_{+1}=(a_1,\sqrt{2}a_1,a_1)^T$, 再由归一化条件

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

可取 $a_1 = 1/2$, 这样归一化的本征态为

$$\psi_{+1} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}$$

当 $\lambda_2 = 0$ 时 L_x 的本征方程为

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

也就是

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

由此得 $a_2 = 0, a_1 = -a_3$, 故 $\psi_0 = (a_1, 0, -a_1)^T$. 由归一化条件

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

故可取 $a_1 = 1/\sqrt{2}$, 这样得 L_x 的归一化本征态为

$$\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

对应于 L_x 的本征值 0. 当 $\lambda_3 = -\hbar$ 时, L_x 的本征方程为

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

也就是

$$\begin{pmatrix} a_2 \\ a_1 + a_3 \\ a_2 \end{pmatrix} = \sqrt{2}\begin{pmatrix} -a_1 \\ -a_2 \\ -a_3 \end{pmatrix}$$

解得 $a_2 = -\sqrt{2}a_1, a_2 = -\sqrt{2}a_3, a_3 = a_1$, 给出本征态 $\psi_{-1} = \left(a_1, -\sqrt{2}a_1, a_1\right)^T$, 由归一化条件

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

可以取 $a_1 = 1/2$, 这样得 L_x 的归一化本征态为

$$\psi_{-1} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}$$

对应于 L_x 的本征值 $-\hbar$. 由以上结果可知, 从 $(\boldsymbol{L}^2, L_z)$ 表象到 L_x 表象的变换矩阵为

$$S=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & \sqrt{2} & 1\\ \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2}\\ 1 & -\sqrt{2} & 1\end{pmatrix}$$

对角化的矩阵为 $L'_x=S^{\dagger}L_xS$, 它等于

$$\begin{aligned}L'_x&=\frac{\hbar}{4\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & \sqrt{2} & 1\\ \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2}\\ 1 & -\sqrt{2} & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & \sqrt{2} & 1\\ \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2}\\ 1 & -\sqrt{2} & 1\end{pmatrix}\\ &=\frac{\hbar}{4\sqrt{2}}\begin{pmatrix}\sqrt{2} & 2 & \sqrt{2}\\ 0 & 0 & 0\\ -\sqrt{2} & 2 & -\sqrt{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & \sqrt{2} & 1\\ \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2}\\ 1 & -\sqrt{2} & 1\end{pmatrix}\\ &=\frac{\hbar}{4\sqrt{2}}\begin{pmatrix}4\sqrt{2} & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -4\sqrt{2}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\hbar & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -\hbar\end{pmatrix}\end{aligned}$$

说明 按照与上同样的方法可得 L_y 的本征值为 $\hbar$、0、$-\hbar$, 归一化的本征态为

$$\phi_{+1}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\ \mathrm{i}\sqrt{2}\\ -1\end{pmatrix},\quad \phi_0=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ 0\\ 1\end{pmatrix},\quad \phi_{-1}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\ -\mathrm{i}\sqrt{2}\\ -1\end{pmatrix}$$

从 $(\boldsymbol{L}^2, L_z)$ 表象到 L_y 表象的变换矩阵为

$$S'=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & \sqrt{2} & 1\\ \mathrm{i}\sqrt{2} & 0 & -\mathrm{i}\sqrt{2}\\ -1 & \sqrt{2} & -1\end{pmatrix}\Rightarrow S'^{\dagger}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & -\mathrm{i}\sqrt{2} & -1\\ \sqrt{2} & 0 & \sqrt{2}\\ 1 & \mathrm{i}\sqrt{2} & -1\end{pmatrix}$$

利用 S' 可使 L_y 对角化, 得到

$$L'_y=S'^{\dagger}L_yS'=\begin{pmatrix}\hbar & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -\hbar\end{pmatrix}$$

第 11 章　束缚定态微扰论

11.1　设非简谐振子的 Hamilton 量为

$$H=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega_0^2x^2+\beta x^3\quad(\beta\text{为实常数})$$

取

$$H_0=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega_0^2x^2,\quad H'=\beta x^3$$

试用微扰论计算其能量本征值及能量本征函数.

解法一　题给 H_0 是简谐振子的 Hamilton 量, 已知它的第 k 个能量本征态波函数如下:

$$\psi_k^{(0)}=N_k\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}\mathrm{H}_k(\alpha x)\tag{11.1}$$

其中 $\alpha=\sqrt{\mu\omega_0/\hbar}$ 具有长度倒数的量纲, 归一化系数 $N_k=\left(\alpha/\sqrt{\pi}2^kk!\right)^{1/2}$, 而 H_k 为 Hermite 多项式, 如下给出:

$$\mathrm{H}_k\left(x\right)=(-1)^n\,\mathrm{e}^{x^2}\frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}x^k}\mathrm{e}^{-x^2}$$

即 $\mathrm{H}_0\left(x\right)=1$, $\mathrm{H}_1\left(x\right)=2x$ 等. 式 (11.1) 为零级波函数, 相应的零级能量本征值为

$$E_k^{(0)}=\hbar\omega\left(k+\frac{1}{2}\right)\tag{11.2}$$

每个能级均非简并. 按照非简并微扰公式, k 能级一级修正为

$$E_k^{(1)}=H'_{kk}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_k^{(0)*}\left(\beta x^3\right)\psi_k^{(0)}\mathrm{d}x\tag{11.3}$$

一维谐振子能量本征态具有确定宇称. 相应波函数或奇或偶具有确定宇称, 因而式 (11.3) 中被积函数一定是奇函数, 因此能量一级修正

$$E_k^{(1)}=H'_{kk}=0\tag{11.4}$$

根据定态微扰论, 准到一级近似的能量本征函数

$$\psi_k=\psi_k^{(0)}+\psi_k^{(1)}=\psi_k^{(0)}+\sum_n{}'\frac{H'_{nk}}{E_k^{(0)}-E_n^{(0)}}\psi_n^{(0)}\tag{11.5}$$

其中 $E_k^{(0)}$ 如 (11.2) 所给. 为求微扰矩阵元 H'_{nk}, 可利用关于 $\psi_k^{(0)}$ 的如下递推关系:

$$x\psi_n^{(0)}=\frac{1}{\alpha}\left(\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}^{(0)}+\sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}^{(0)}\right)\tag{11.6}$$

$$x^2\psi_n^{(0)}=\frac{1}{\alpha^2}\left\{\sqrt{\frac{n(n-1)}{4}}\psi_{n-2}^{(0)}+\left(n+\frac{1}{2}\right)\psi_n^{(0)}+\sqrt{\frac{(n+1)(n+2)}{4}}\psi_{n+2}^{(0)}\right\}\tag{11.7}$$

式 (11.7) 两边乘 x, 再应用式 (11.6) 得

$$\begin{aligned} x^3\psi_n^{(0)} &= \frac{1}{\alpha^2}\left\{\sqrt{\frac{n(n-1)}{4}}x\psi_{n-2}^{(0)} + (n+\frac{1}{2})x\psi_n^{(0)} + \sqrt{\frac{(n+1)(n+2)}{4}}x\psi_{n+2}^{(0)}\right\} \\ &= \frac{1}{\alpha^3\sqrt{8}}\left\{\sqrt{n(n-1)(n-2)}\psi_{n-3}^{(0)} + 3n\sqrt{n}\psi_{n-1}^{(0)} + 3(n+1)\sqrt{n+1}\psi_{n+1}^{(0)}\right. \\ &\quad \left. + \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}\psi_{n+3}^{(0)}\right\} \end{aligned} \tag{11.8}$$

现在即可利用式 (11.8) 计算微扰矩阵元 H'_{nk}

$$H'_{nk} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\beta x^3\psi_k \mathrm{d}x$$

注意 $\psi_n^{(0)}$ 的正交归一性, 即 $\int \psi_n^{(0)*}(x)\psi_k^{(0)}(x)\mathrm{d}x = \delta_{nk}$, 可得

$$\begin{aligned} H'_{nk} &= \frac{\beta}{\sqrt{8}\alpha^3}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^{(0)}\left\{\sqrt{k(k-1)(k-2)}\psi_{k-3}^{(0)} + 3k\sqrt{k}\psi_{k-1}^{(0)}\right. \\ &\quad \left. +3(k+1)\sqrt{k+1}\psi_{k+1}^{(0)} + \sqrt{(k+1)(k+2)(k+3)}\psi_{k+3}^{(0)}\right\}\mathrm{d}x \\ &= \frac{\beta}{\sqrt{8}\alpha^3}\left\{\sqrt{k(k-1)(k-2)}\delta_{n,k-3} + 3k\sqrt{k}\delta_{n,k-1}\right. \\ &\quad \left. +3(k+1)\sqrt{k+1}\delta_{n,k+1} + \sqrt{(k+1)(k+2)(k+3)}\delta_{n,k+3}\right\} \end{aligned} \tag{11.9}$$

k 是固定指标, 故 H'_{nk} 只有当 n 取下述四值时不为零, 即

$$n = k-3\,,\quad k-1\,,\quad k+1\,,\quad k+3 \tag{11.10}$$

n 取定后 H'_{nk} 的非零值是式 (11.9) 中某个 δ 的系数. 故知式 (11.5) 的求和式只有四项, 而其分母为

$$E_k^{(0)} - E_n^{(0)} = \left(k+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega = (k-n)\hbar\omega \tag{11.11}$$

对式 (11.10) 几种情况为

$$\begin{aligned} E_k^{(0)} - E_{k-3}^{(0)} &= 3\hbar\omega, & E_k^{(0)} - E_{k-1}^{(0)} &= \hbar\omega, \\ E_k^{(0)} - E_{k+1}^{(0)} &= -\hbar\omega, & E_k^{(0)} - E_{k+3}^{(0)} &= -3\hbar\omega \end{aligned} \tag{11.12}$$

将式 (11.9)、式 (11.12) 代入式 (11.5) 可得

$$\begin{aligned} \psi_k &= \psi_k^{(0)} + \sum_n{}' \frac{H'_{nk}}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}}\psi_n^{(0)} \\ &= \psi_k^{(0)} + \frac{\beta}{\sqrt{8}a^3\hbar\omega}\left\{\frac{1}{3}\sqrt{k(k-1)(k-2)}\psi_{k-3}^{(0)} + 3k\sqrt{k}\psi_{k-1}^{(0)}\right. \\ &\quad \left. -3(k+1)\sqrt{k+1}\psi_{k+1}^{(0)} - \frac{1}{3}\sqrt{(k+1)(k+2)(k+3)}\psi_{k+3}^{(0)}\right\} \end{aligned} \tag{11.13}$$

其中 $\psi_n^{(0)}$ 由式 (11.1) 给出. 根据定态微扰论, 准确到二级近似的第 k 能级能量本征值为

$$E_k = E_k^{(0)} + E_k^{(1)} + E_k^{(2)} = E_k^{(0)} + H'_{kk} + \sum_n{}' \frac{|H'_{nk}|^2}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}}$$

代入式 (11.4)、式 (11.9) 与 (11.12) 的结果, 求得

$$\begin{aligned}E_k &= \left(k+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \frac{H'^2_{k-3,k}}{E_k^{(0)}-E_{k-3}^{(0)}} + \frac{H'^2_{k-1,k}}{E_k^{(0)}-E_{k-1}^{(0)}} + \frac{H'^2_{k+1,k}}{E_k^{(0)}-E_{k+1}^{(0)}} + \frac{H'^2_{k+3,k}}{E_k^{(0)}-E_{k+3}^{(0)}} \\ &= \left(k+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \frac{\beta^2}{8\alpha^6\hbar\omega}\left\{\frac{1}{3}k(k-1)(k-2)+9k^3-9(k+1)^3-\frac{1}{3}(k+1)(k+2)(k+3)\right\} \\ &= \left(k+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{\beta^2}{8\alpha^6\hbar\omega}(30k^2+30k+11) \end{aligned} \tag{11.14}$$

解法二 (关于微扰 $H_1=\beta x^3$ 的矩阵元计算)记 H_0 的第 n 个归一化的能量本征态为 $|n\rangle$. 利用 $x=\dfrac{1}{\sqrt{2}\alpha}(a+a^\dagger)(\alpha=\sqrt{m\omega/\hbar})$, 假设 $|n\rangle$ 相位选取恰当使得

$$a^\dagger|n\rangle=\sqrt{n+1}|n+1\rangle,\quad a|n\rangle=\sqrt{n}|n-1\rangle$$

易得 $\langle n|x|n+1\rangle=\dfrac{1}{\alpha}\sqrt{\dfrac{n+1}{2}}$, $\langle n|x|n-1\rangle=\dfrac{1}{\alpha}\sqrt{\dfrac{n}{2}}$, 其他矩阵元为零, 或者

$$\langle n|x|k\rangle=\frac{1}{\alpha}\sqrt{\frac{n+1}{2}}\delta_{k,n+1}+\frac{1}{\alpha}\sqrt{\frac{n}{2}}\delta_{k,n-1}$$

这样

$$\begin{aligned}\langle n|x^3|k\rangle &= \sum_{k_1,k_2}\langle n|x|k_1\rangle\langle k_1|x|k_2\rangle\langle k_2|x|k\rangle \\ &= \sum_{k_1,k_2}\frac{1}{\alpha}\left(\sqrt{\frac{n+1}{2}}\delta_{k_1,n+1}+\sqrt{\frac{n}{2}}\delta_{k_1,n-1}\right)\langle k_1|x|k_2\rangle\langle k_2|x|k\rangle \\ &= \frac{1}{\alpha}\sum_{k_2}\left(\sqrt{\frac{n+1}{2}}\langle n+1|x|k_2\rangle\langle k_2|x|k\rangle+\sqrt{\frac{n}{2}}\langle n-1|x|k_2\rangle\langle k_2|x|k\rangle\right) \\ &= \frac{1}{2\alpha^2}\left[\sqrt{(n+1)(n+2)}\langle n+2|x|k\rangle+(2n+1)\langle n|x|k\rangle+\sqrt{n(n-1)}\langle n-2|x|k\rangle\right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{8}\alpha^3}\left[\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}\delta_{k,n+3}+3(n+1)\sqrt{n+1}\delta_{k,n+1}\right. \\ &\quad \left.+3n\sqrt{n}\delta_{k,n-1}+\sqrt{n(n-1)(n-2)}\delta_{k,n-3}\right]\end{aligned}$$

这与式 (11.9) 结果一致.

11.2 一维谐振子 Hamilton 量表示为

$$H_0=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2$$

设加上一个微扰

$$H'=\frac{\lambda}{2}\mu\omega^2x^2\quad(\lambda\ll1)$$

试用微扰论求能级的修正 (到三级近似), 并和精确解比较.

解 谐振子 H_0 的能量本征值为

$$E_n^{(0)}=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\quad n=0,1,2,\cdots \tag{11.15}$$

相应的归一化本征函数记为 $\psi_n^{(0)}$, 如式 (11.1) 所给. 利用

$$x=\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}\left[a^{\dagger}+a\right]=\frac{1}{\sqrt{2}\alpha}\left[a^{\dagger}+a\right]$$

(其中 $\alpha=\sqrt{\mu\omega/\hbar}$) 以及

$$a^{\dagger}\psi_n^{(0)}=\sqrt{n+1}\psi_{n+1}^{(0)},\quad a\psi_n^{(0)}=\sqrt{n}\psi_{n-1}^{(0)}$$

可知在 H_0 表象 (由基矢 $\left\{\psi_n^{(0)}\right\}$ 所张成) 中, x 不等于 0 的矩阵元为

$$x_{k+1,k}=x_{k,k+1}=\left(\frac{k+1}{2}\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2} \tag{11.16}$$

因此, 微扰 $H'=\dfrac{\lambda}{2}\mu\omega^2x^2$ 不等于 0 的矩阵元有

$$H'_{nn}=\frac{\lambda}{2}m\omega^2\sum_k x_{nk}x_{kn}=\frac{\lambda}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega=\frac{\lambda}{2}E_n^{(0)} \tag{11.17}$$

$$\begin{aligned}H'_{n,n+2}&=H'_{n+2,n}=\frac{\lambda}{2}m\omega^2x_{n,n+1}x_{n+1,n+2}\\&=\frac{\lambda}{4}\sqrt{(n+1)(n+2)}\hbar\omega\end{aligned} \tag{11.18}$$

这样根据微扰论

$$E_n^{(1)}=\langle n|H'|n\rangle=\frac{\lambda}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{11.19}$$

$$\begin{aligned}E_n^{(2)}&=\sum_k{}'\frac{|H'_{kn}|^2}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}=\frac{\lambda^2(n+1)(n+2)\hbar^2\omega^2}{-16\times2\hbar\omega}+\frac{\lambda^2n(n-1)\hbar^2\omega^2}{16\times2\hbar\omega}\\&=-\frac{1}{8}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\end{aligned} \tag{11.20}$$

对于能量的 3 阶修正, 可以直接用一级近似波函数进行计算

$$\begin{aligned}E_n^{(3)}&=\langle\psi_n^{(1)}|H'-E_n^{(1)}|\psi_n^{(1)}\rangle\\&=\sum_{k,l}{}'\frac{H'^{*}_{kn}}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}\frac{H'_{ln}}{E_n^{(0)}-E_l^{(0)}}\langle\psi_k^{(0)}|H'-E_n^{(1)}|\psi_l^{(0)}\rangle\\&=\frac{1}{(2\hbar\omega)^2}\left[H'_{n+2,n}H'_{n+2,n}\left(E_{n+2}^{(1)}-E_n^{(1)}\right)+H'_{n-2,n}H'_{n-2,n}\left(E_{n-2}^{(1)}-E_n^{(1)}\right)\right]\end{aligned}$$

上面求和中, k, l 只能取 $n+2$, $n-2$, 而 $k=n+2$, $l=n-2$ 以及 $k=n-2$, $l=n+2$ 的项等于零, 这样只能是 $k=n+2$, $l=n+2$ 或者 $k=n-2$, $l=n-2$. 再代入式 (11.18)、式 (11.19) 的结果即得

$$E_n^{(3)}=\frac{\lambda^3}{16}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{11.21}$$

综合上面式 (11.19)、式 (11.20) 与式 (11.21), 可得精确到三阶微扰的能量为

$$E_n=E_n^{(0)}+E_n^{(1)}+E_n^{(2)}+E_n^{(3)}=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\left(1+\frac{\lambda}{2}-\frac{\lambda^2}{8}+\frac{\lambda^3}{16}\right) \tag{11.22}$$

现对本问题作严格求解. 加了微扰以后, Hamilton 量为

$$H = H_0 + H' = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}(1+\lambda)m\omega^2 x^2 \tag{11.23}$$

仍是谐振子 Hamilton 量, 令

$$\omega' = \omega\sqrt{1+\lambda}$$

H 可以写成

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}m\omega'^2 x^2 \tag{11.24}$$

由此写出 H 的本征值

$$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega' = \left(n+\frac{1}{2}\right)\sqrt{1+\lambda}\hbar\omega \tag{11.25}$$

把上式对小量 λ 按照 Taylor 级数展开即得

$$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega' = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\left(1+\frac{\lambda}{2}-\frac{\lambda^2}{8}+\frac{\lambda^3}{16}+\cdots\right) \tag{11.26}$$

若级数保留到 λ^3, 则和 3 阶微扰结果相同.

11.3 各向同性谐振子势 $V(r) = \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2$ 中的粒子, 受到微扰作用

$$H' = \lambda xyz + \frac{\lambda^2}{\hbar\omega}x^2y^2z^2 \quad (\lambda\text{为小常数})$$

(1) 用微扰论计算基态能级的修正 (准确到 λ^2). (2) 对于一级近似下的基态, 计算 $\langle \boldsymbol{r}\rangle$, 对此结果做物理解释.

解 (1) 3 维各向同性谐振子可以分解为 3 个彼此独立的谐振子, 则微扰前的能量本征态

$$\psi^{(0)}_{n_1n_2n_3} = \psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)\psi_{n_3}(z), \quad \text{记为 } |n_1n_2n_3\rangle^{(0)} \tag{11.27}$$

其中 ψ_n 表示一维谐振子归一化能量本征态. $|n_1n_2n_3\rangle^{(0)}$ 相应的能级为

$$E^{(0)}_{n_1n_2n_3} = \left(n_1+n_2+n_3+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega \tag{11.28}$$

微扰前的基态为

$$\psi^{(0)}_{000} = \psi_0(x)\psi_0(y)\psi_0(z), \quad \text{记为 } |000\rangle \tag{11.29}$$

在该态下

$$\begin{aligned}\langle xyz\rangle_0 &= (\langle 0|x|0\rangle)^3 = 0\\ \langle x^2y^2z^2\rangle_0 &= (\langle 0|x^2|0\rangle)^3 = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^3\end{aligned} \tag{11.30}$$

上面 $\langle 0|x^2|0\rangle$ 的计算可以用 Virial 定理. 因此, 基态能级的一级微扰修正为

$$E^{(1)}_{000} = \langle 000|\,H'\,|000\rangle = \frac{\lambda^2}{8}\frac{\hbar^2}{m^3\omega^4} \tag{11.31}$$

由于 H' 中含有 λxyz 项, 二级微扰修正也能产生 λ^2 量级的修正项. 能产生这种项的唯一微扰矩阵元是

$$\langle 111|\,H'\,|000\rangle = \lambda(\langle 1|x|0\rangle)^3 = \lambda\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2} \tag{11.32}$$

这里用到了题 11.2 的式 (11.16). 因此, 基态能级的二级微扰修正

$$E_{000}^{(2)}=-\frac{|\langle 111|\,H'\,|000\rangle|^2}{3\hbar\omega}=-\frac{\lambda^2}{24}\frac{\hbar^2}{m^3\omega^4}+o(\lambda^2) \tag{11.33}$$

$o(\lambda^2)$ 表示 λ^2 的高阶项.

综上, 准确到 λ^2, 基态能级移动为

$$\Delta E_{000}=\left(\frac{1}{8}-\frac{1}{24}\right)\frac{\hbar^2}{m^3\omega^4}=\frac{\lambda^2}{12}\frac{\hbar^2}{m^3\omega^4} \tag{11.34}$$

(2) 微扰后的基态波函数 (准确到 λ 量级) 为

$$\psi_0=\psi_{000}^{(0)}-\frac{\langle 111|\,H'\,|000\rangle}{3\hbar\omega}\psi_{111}^{(0)}=\psi_{000}^{(0)}+c_1\psi_{111}^{(0)} \tag{11.35}$$

在该态下

$$\begin{aligned}\langle\psi_0|x|\psi_0\rangle&=\langle 000|\,x\,|000\rangle+|c_1|^2\,\langle 111|\,x\,|000\rangle+c_1^*\,\langle 111|\,x\,|000\rangle+c_1\,\langle 000|\,x\,|111\rangle\\&=0+0+c_1^*\langle 1|x|0\rangle_x\langle 1|0\rangle_y\langle 1|0\rangle_z+c_1\langle 0|x|1\rangle_x\langle 0|1\rangle_y\langle 0|1\rangle_z=0\end{aligned}$$

同样 $\langle\psi_0|y|\psi_0\rangle=\langle\psi_0|z|\psi_0\rangle=0$. 也就是

$$\langle\psi_0|\,\boldsymbol{r}\,|\psi_0\rangle=0 \tag{11.36}$$

受微扰作用后, 势函数为

$$V(x,y,z)=\frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2+z^2)+\lambda xyz+\frac{\lambda^2}{\hbar\omega}x^2y^2z^2$$

由极值条件

$$\frac{\partial V}{\partial x}=0,\ \frac{\partial V}{\partial y}=0,\ \frac{\partial V}{\partial z}=0$$

容易求得上述方程组的解为

$$x=y=z=0\quad\text{或}\quad\boldsymbol{r}=0$$

此即 V 取极小值的位置, 为粒子的“平衡位置”, 这与基态下粒子所处位置的期望值 $\langle\psi_0|\,\boldsymbol{r}\,|\psi_0\rangle=0$ 一致.

11.4 自旋为 1/2 的三维各向同性谐振子, 处于基态. 设粒子受到微扰 $H'=\lambda\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}$ 作用, 求能级修正 (二级近似).

解 设该三维各向同性谐振子的质量与频率分别为 μ,ω. 将该三维各向同性谐振子分解为沿 x,y 与 z 三个方向的同频率的相互独立的三个谐振子, 记 ψ_n 表示一维谐振子归一化能量本征态. 考虑粒子的自旋自由度, 微扰前的能量本征态可表示为

$$\Psi_{N\uparrow}^{(0)}=\psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)\psi_{n_3}(z)\alpha,\quad\Psi_{N\downarrow}^{(0)}=\psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)\psi_{n_3}(z)\beta \tag{11.37}$$

其中 $N=n_1+n_2+n_3, n_1,n_2,n_3=0,1,2,3,\cdots$, α,β 分别为自旋沿 z 轴或者沿负 z 轴的归一化自旋本征态. 相应于 $\Psi_{N\uparrow}^{(0)}$ 与 $\Psi_{N\downarrow}^{(0)}$ 的能级均为

$$E_N^{(0)}=\left(N+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega \tag{11.38}$$

微扰前基态波函数为

$$\Psi_{0\uparrow}^{(0)}=\psi_0(x)\psi_0(y)\psi_0(z)\alpha,\quad\Psi_{0\downarrow}^{(0)}=\psi_0(x)\psi_0(y)\psi_0(z)\beta \tag{11.39}$$

二者在宇称反演变化下 $(\boldsymbol{r} \to -\boldsymbol{r})$, 均不变, 也就是说它们均为偶宇称态. 题给的微扰算符又可以表示成

$$H' = \lambda \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{r} = \lambda r \sigma_r = \lambda(\sigma_x x + \sigma_y y + \sigma_x z) \tag{11.40}$$

在宇称反演变化下 $(\boldsymbol{r} \to -\boldsymbol{r})$, H' 反号, 因此为奇宇称算符. 这样在两个基态波函数之间, H' 的矩阵元 (包括平均值) 全部为 0. 因此基态能级的一级微扰修正等于 0, 即

$$E_0^{(1)} = 0 \tag{11.41}$$

H' 与总角动量算符

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{l} + \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma} \tag{11.42}$$

对易①, 因此 H' 作用的结果不会改变量子数 j 和 m_j 的值. 两个基态波函数 $\Psi_{0\uparrow}^{(0)}$ 与 $\Psi_{0\downarrow}^{(0)}$ 的 j 和 m_j 量子数

$$j = \frac{1}{2}, m_j = \pm\frac{1}{2}$$

因 m_j 不同, $\Psi_{0\uparrow}^{(0)}$ 与 $\Psi_{0\downarrow}^{(0)}$ 在任何级微扰近似中不可能因 H' 的作用而混合. 因此, 本题可以按非简并态微扰论处理. 从问题的对称性可知, 基态的两种自旋方向 (↑"向上"; ↓"向下") 应给出同样的能量修正值.

H' 为 $\boldsymbol{r}$ 的线性齐次函数, 它作用于基态的结果, 量子数 N 将由 0 变成 1, 即变成第一激发态, 能量差为

$$E_0^{(0)} - E_1^{(0)} = -\hbar\omega \tag{11.43}$$

按照微扰论公式, 基态能级的二级微扰修正为

$$E_0^{(2)} = \sum_{\{N\}}{}' \frac{1}{E_0^{(0)} - E_N^{(0)}} \left|\langle N| H' |0\rangle\right|^2 \tag{11.44}$$

上述求和中 $\{N\}$ 表示对于所有主量子数为 N 的简并态求和 (除了基态 0 以外, $N = 1, 2, \cdots$). 由于 $N \neq 1$ 时, $\langle N| H' |0\rangle = 0$, 所以上式可以写成

$$E_0^{(2)} = \frac{1}{\hbar\omega}\sum_{\{N\}}{}' \left|\langle 0| H' |N\rangle\right|^2 = \frac{1}{\hbar\omega}\sum_{\{N\}} \langle 0| H' |N\rangle \langle N| H' |0\rangle \tag{11.45}$$

利用完备性关系

$$\sum_{\{N\}} |N\rangle \langle N| = 1 \tag{11.46}$$

由式 (11.45) 即得

$$E_0^{(2)} = -\frac{1}{\hbar\omega}\langle 0| H'^2 |0\rangle = -\frac{\lambda^2}{\hbar\omega}\langle 0| (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})^2 |0\rangle = -\frac{\lambda^2}{\hbar\omega}\langle 0| r^2 |0\rangle = -\frac{3\lambda^2}{2\mu\omega} \tag{11.47}$$

计算中利用了 $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})^2 = r^2$ 以及 Virial 定理的结果

$$\frac{1}{2}\mu\omega^2\langle 0| r^2 |0\rangle = \frac{1}{2}E_0^{(0)} = \frac{3}{4}\hbar\omega \tag{11.48}$$

综合式 (11.41)、式 (11.47), 基态能级准确到二级近似的微扰修正为

$$\Delta E = E_0^{(2)} = -\frac{3\lambda^2}{2\mu\omega} \tag{11.49}$$

---

①见式 (9.179).

说明

$$\Psi_{0\alpha}^{(0)} = |000\alpha\rangle \tag{11.50}$$

利用谐振子基态、第一激发态归一化波函数

$$\psi_0(x) = \left(\frac{\lambda}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\lambda^2 x^2}, \quad \psi_1(x) = \left(\frac{\lambda}{2\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\lambda^2 x^2} 2\lambda x, \quad \left(\lambda = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\right)$$

以及

$$\sigma_x\alpha = \beta,\ \sigma_y\alpha = \mathrm{i}\beta,\ \sigma_z\alpha = \alpha$$

式 (11.44) 中不等于 0 的矩阵元共有三个

$$\langle 001\alpha| H' |000\alpha\rangle = \langle 100\beta| H' |000\alpha\rangle = \lambda\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

$$\langle 010\beta| H' |000\alpha\rangle = \mathrm{i}\lambda\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

这三个矩阵元复数模平方之和等于 $\dfrac{3\lambda^2\hbar}{2m\omega}$, 代入式 (11.44), 一样得到

$$E_0^{(2)} = -\frac{3\lambda^2}{2\mu\omega} \tag{11.51}$$

11.5 自旋为 0 的两个全同粒子 1、2 在谐振子势中运动. 若粒子 1、2 的坐标记为 x_1 和 x_2, 则体系的 Hamilton 量可表示为

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2(x_1^2 + x_2^2) \tag{11.52}$$

再设粒子之间有相互作用

$$H' = V_0 \exp[-\beta^2(x_1 - x_2)^2] \tag{11.53}$$

试用微扰论求体系的基态能级修正 (一级近似).

解法一 不计微扰, 体系基态归一化波函数为

$$\Psi_0^{(0)}(x_1, x_2) = \psi_0(x_1)\psi_0(x_2) \tag{11.54}$$

其中 $\psi_0(x)$ 为一维谐振子基态归一化波函数, 即

$$\psi_0(x) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}, \quad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \tag{11.55}$$

基态不简并, 其能级为

$$E_0^{(0)} = 2 \times \frac{1}{2}\hbar\omega = \hbar\omega \tag{11.56}$$

根据微扰论, 基态能量一级修正为

$$E_0^{(1)} = \left\langle \Psi_0^{(0)} \middle| H' \middle| \Psi_0^{(0)} \right\rangle \tag{11.57}$$

将式 (11.53)~ 式 (11.55) 代入式 (11.57), 得到

$$E_0^{(1)} = V_0\frac{\alpha^2}{\pi}\iint \mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2 \mathrm{e}^{-\alpha^2\left(x_1^2+x_2^2\right)}\mathrm{e}^{-\beta^2(x_1-x_2)^2} = V_0\frac{\alpha^2}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x_2\mathrm{e}^{-(\alpha^2+\beta^2)x_2^2} I(x_2) \tag{11.58}$$

其中

$$I(x_2)=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x_1\mathrm{e}^{-(\alpha^2+\beta^2)x_1^2+2\beta^2x_2x_1}=\left(\frac{\pi}{\alpha^2+\beta^2}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{\frac{\beta^4x_2^2}{\alpha^2+\beta^2}x_2^2} \tag{11.59}$$

其中用了广义 Gauss 积分公式 (A.5). 把 $I(x_2)$ 代入式 (11.58), 利用 Gauss 积分公式 (A.1) 即得准确到一阶近似的基态能级修正

$$E_0^{(1)}=\frac{V_0\alpha}{\sqrt{\alpha^2+2\beta^2}} \tag{11.60}$$

解法二 对于该全同 2 粒子体系定义质心坐标 X 和相对坐标 x, 即

$$X=\frac{1}{2}(x_1+x_2),\ x=x_1-x_2 \tag{11.61}$$

质心质量 $M=2m$, 折合质量为 $\mu=m/2$. 式 (11.61) 的反解式为

$$x_1=X+\frac{1}{2}x,\quad x_1=X-\frac{1}{2}x \tag{11.62}$$

利用质心坐标 X 和相对坐标 x, 体系的零级 Hamilton 量 H_0 以及微扰 H' 分别化为

$$H_0=\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial X^2}+\frac{1}{2}M\omega^2X^2\right)+\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2\right) \tag{11.63}$$

$$H'=V_0\mathrm{e}^{-\beta^2x^2} \tag{11.64}$$

上面意味着可见体系运动可以分解为质心运动与相对运动两部分.

若不计微扰, 质心运动与相对运动为频率相同但质量不同的 2 个彼此独立的谐振子运动, 此时能量本征态

$$\Psi_0^{(0)}(X,x)=\psi_0(X)\psi_0(x) \tag{11.65}$$

其中 $\psi_0(X)$、$\psi_0(x)$ 为一维谐振子基态归一化波函数

$$\psi_0(X)=\left(\frac{2\alpha^2}{\pi}\right)^{1/4}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2X^2},\quad \psi_0(x)=\left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{1/4}\mathrm{e}^{-\frac{1}{4}\alpha^2x^2},\quad \alpha=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

基态能级为 $E_0^{(0)}=2\times\frac{1}{2}\hbar\omega=\hbar\omega$, 与式 (11.56) 相同. 基态不简并.

根据微扰论, 其能量一级修正为

$$E_0^{(1)}=\left\langle\Psi_0^{(0)}\right|H'\left|\Psi_0^{(0)}\right\rangle=\langle\psi_0(x)|\,H'\,|\psi_0(x)\rangle \tag{11.66}$$

其中利用了 H'[式 (11.64)] 与质心坐标 X 无关. 这样利用 Gauss 积分公式 (A.1) 即得

$$E_0^{(1)}=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{1/2}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}V_0\mathrm{e}^{-\beta^2x^2}=\frac{V_0\alpha}{\sqrt{\alpha^2+2\beta^2}}$$

上式与解法一结果相同.

11.6 设有自由粒子在一维区域中运动, 波函数满足周期性边条件 (周期长为 L)

$$\psi(-L/2)=\psi(L/2)$$

如粒子限制在圆周上自由运动即此种情况. 粒子定态波函数形式可取为

$$\psi_+^{(0)}=\sqrt{\frac{2}{L}}\cos kx,\quad \psi_-^{(0)}=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin kx$$

设粒子还受到一个“陷阱”的作用

$$H'(x) = -V_0 \exp(-x^2/a^2), \quad a \ll L$$

试用简并微扰论计算能量一级修正.

解 题给自由粒子能量本征函数

$$\psi_+^{(0)} = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos kx, \quad \psi_-^{(0)} = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin kx \tag{11.67}$$

下标“+”、“−”用以标志波函数的宇称. 考虑上式满足周期性边条件

$$\psi(-L/2) = \psi(L/2)$$

可求得

$$k = k_n = \frac{2\pi n}{L}, \quad n = 0, 1, 2, \cdots \tag{11.68}$$

因而粒子能量本征函数

$$\psi_{n+}^{(0)} = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos \frac{2n\pi x}{L}, \quad \psi_{n-}^{(0)} = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{2n\pi x}{L} \tag{11.67'}$$

相应能级为

$$E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{(2\pi n\hbar)^2}{2mL^2} \tag{11.69}$$

对于基态 $(n = 0)$, $k = 0$, 式 (11.67′) 中奇宇称波函数为零, 或者说不存在, 因而基态不简并. 除了基态以外, 其他能级都是二重简并.

现用微扰论计算能量一级修正. 微扰 H' 为偶宇称, 因此

$$H'_{n+,n-} = \left\langle \psi_{n+}^{(0)} \middle| H' \middle| \psi_{n-}^{(0)} \right\rangle = 0 \tag{11.70}$$

亦即 $\psi_{n+}^{(0)}$ 和 $\psi_{n-}^{(0)}$ 都已经是合适的零级波函数. 能级的一级微扰修正等于 H' 的期望值, 偶宇称态的能量一级修正为

$$\begin{aligned} E_{n+}^{(1)} &= \left\langle \psi_{n+}^{(0)} \middle| H' \middle| \psi_{n+}^{(0)} \right\rangle = -\frac{2V_0}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \mathrm{d}x \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{a^2}} \cos^2 k_n x \\ &= -\frac{V_0}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \mathrm{d}x \left(1 + \cos 2k_n x\right) \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{a^2}} \approx -\frac{V_0}{L} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \left(1 + \cos 2k_n x\right) \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{a^2}} \\ &= -\frac{V_0}{L} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \left(\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{a^2}} + \frac{1}{2} \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{a^2} + 2\mathrm{i}k_n x} + \frac{1}{2} \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{a^2} - 2\mathrm{i}k_n x} \right) = -\frac{\sqrt{\pi} V_0 a}{L} \left(1 + \mathrm{e}^{-k_n^2 a^2}\right) \end{aligned} \tag{11.71}$$

上面用到了广义 Gauss 积分公式 (A.5). 同样奇宇称态的能量一级修正为

$$\begin{aligned} E_{n-}^{(1)} &= \left\langle \psi_{n-}^{(0)} \middle| H' \middle| \psi_{n-}^{(0)} \right\rangle = -\frac{2V_0}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \mathrm{d}x \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{a^2}} \sin^2 k_n x = -\frac{V_0}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \mathrm{d}x \left(1 - \cos 2k_n x\right) \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{a^2}} \\ &\approx -\frac{V_0}{L} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \left(1 - \cos 2k_n x\right) \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{a^2}} = -\frac{\sqrt{\pi} V_0 a}{L} \left(1 - \mathrm{e}^{-k_n^2 a^2}\right) \end{aligned} \tag{11.72}$$

以上结果表明, 在“陷阱”作用下, 能级下降, 并分裂为二. 奇宇称态 $\psi_{n-}^{(0)}$ 受陷阱影响较小, 能级下降小. 偶宇称态 $\psi_{n+}^{(0)}$ 受陷阱影响大, 能级下降大. 裂距为

$$\Delta E_n = E_{n-}^{(1)} - E_{n+}^{(1)} = \frac{2\sqrt{\pi} V_0 a}{L} \mathrm{e}^{-k_n^2 a^2} \tag{11.73}$$

n 越小, 裂距越大. 最大裂距为

$$\Delta E_1 = \frac{2\sqrt{\pi}V_0 a}{L}\mathrm{e}^{-k_1^2 a^2} = 2\sqrt{\pi}\frac{V_0 a}{L}\mathrm{e}^{-4\pi^2 a^2/L^2} \approx 2\sqrt{\pi}\frac{V_0 a}{L} \tag{11.74}$$

基态 $(n=0, k=0)$ 能级无简并, 零级波函数为

$$\psi_0^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{L}}$$

在"陷阱"作用下, 能量一级修正为

$$E_0^{(1)} = \left\langle \psi_{n-}^{(0)} \middle| H' \middle| \psi_{n-}^{(0)} \right\rangle = -\frac{2V_0}{L}\int_{-L/2}^{L/2} \mathrm{d}x \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{a^2}} \approx -\frac{2\sqrt{\pi}V_0 a}{L} \tag{11.75}$$

上式也可以由式 (11.71) 取 $n=0$ 得到.

11.7 一维无限深势阱 $(0<x<a)$ 中的粒子, 受到微扰

$$H'(x) = \begin{cases} 2\lambda\dfrac{x}{a}, & 0 < x < \dfrac{a}{2} \\ 2\lambda\left(1-\dfrac{x}{a}\right), & \dfrac{a}{2} < x < a \end{cases}$$

的作用, 求基态能量的一级修正.

解 这是非简并微扰问题. 未受微扰时的能量本征函数在势阱内部 $(0<x<a$ 区间) 为

$$\psi_k^{(0)} = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{k\pi\omega}{a} \tag{11.76}$$

其中 $k=1,2,\cdots$, 对基态 $k=1$; 在势阱外部 $(x\leqslant 0, x\geqslant a$ 区间), 波函数恒为零. 相应地, 零级能量本征值分别为

$$E_k^{(0)} = \frac{k^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2} \tag{11.77}$$

计算能量的一级修正量时, 因微扰 H' 是分段连续的, 因而要求两个积分式的和

$$\begin{aligned} E_1^{(1)} &= \int_0^{\frac{a}{2}} \psi_1^{(0)*} H' \psi_1^{(0)} \mathrm{d}x + \int_{\frac{a}{2}}^{a} \psi_1^{(0)*} H' \psi_1^{(0)} \mathrm{d}x \\ &= \frac{2}{a}\int_0^{\frac{a}{2}} \sin^2\frac{\pi x}{a}\left(\frac{2\lambda x}{a}\right)\mathrm{d}x + \frac{2}{a}\int_{\frac{a}{2}}^{a}\sin^2\frac{\pi x}{a}\left(2\lambda - \frac{2\lambda x}{a}\right)\mathrm{d}x \\ &= \frac{2\lambda}{a^2}\left\{\int_0^{\frac{a}{2}}\left(1-\cos\frac{2\pi x}{a}\right)x\mathrm{d}x + \int_{\frac{a}{2}}^{a}\left(1-\cos\frac{2\pi x}{a}\right)(a-x)\,\mathrm{d}x\right\} \end{aligned}$$

利用积分公式 (A.10) 即得[①]

$$E_1^{(1)} = \lambda\left(\frac{1}{2} + \frac{2}{\pi^2}\right)$$

11.8 在一维无限深势阱

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

---

① 对于本题激发态能量的一级修正计算, 可以用同样步骤得到. 第 k 个激发态的一级修正为

$$E_k^{(1)} = \frac{2\lambda}{a^2}\left\{\int_0^{\frac{a}{2}}\left(1-\cos\frac{2k\pi x}{a}\right)x\mathrm{d}x + \int_{\frac{a}{2}}^{a}\left(1-\cos\frac{2k\pi x}{a}\right)(a-x)\,\mathrm{d}x\right\} = \lambda\left\{\frac{1}{2} + \frac{1-(-1)^k}{k^2\pi^2}\right\}.$$

中运动的粒子, 受到微扰 H' 的作用

$$H'(x)=\begin{cases}-b, & 0<x<a/2\\ +b, & a/2<x<a\end{cases}$$

讨论粒子在空间位置概率分布的改变.

参阅 D.Rapp, Quantum Mechanics (1971), P.259.

解 不考虑微扰时, 粒子零级能量为

$$E_n^{(0)}=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2} \tag{11.78}$$

其中 $n=1,2,\cdots$, 相应的零级波函数在势阱内部 ($0<x<a$ 区间) 为

$$\psi_n^{(0)}=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a} \tag{11.79}$$

在势阱外部 ($x\leqslant 0, x\geqslant a$ 区间), 波函数恒为零. 考虑微扰 H' 对波函数的影响, 根据定态微扰论, 先计算微扰距阵元

$$\begin{aligned}H'_{nk}&=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^{(0)*}H'\psi_k^{(0)}\mathrm{d}x=\int_0^{a/2}\psi_n^{(0)*}(-b)\psi_k^{(0)}\mathrm{d}x+\int_{a/2}^{a}\psi_n^{(0)*}(b)\psi_k^{(0)}\mathrm{d}x\\
&=-\frac{2b}{a}\int_0^{a/2}\sin\frac{k\pi x}{a}\sin\frac{n\pi x}{a}\mathrm{d}x+\frac{2b}{a}\int_{a/2}^{a}\sin\frac{k\pi x}{a}\sin\frac{n\pi x}{a}\mathrm{d}x\\
&=\frac{b}{a}\left(\int_0^{a/2}-\int_{a/2}^{a}\right)\left\{\cos\frac{(k+n)\pi x}{a}-\cos\frac{(k-n)\pi x}{a}\right\}\mathrm{d}x\\
&=\frac{b}{\pi}\left|\frac{\sin\dfrac{(k+n)\pi x}{a}}{k+n}-\frac{\sin\dfrac{(k-n)\pi x}{a}}{k-n}\right|_0^{a/2}+\frac{b}{\pi}\left|\frac{\sin\dfrac{(k-n)\pi x}{a}}{k-n}-\frac{\sin\dfrac{(k+n)\pi x}{a}}{k+n}\right|_{a/2}^{a}\\
&=\frac{2b}{\pi}\left\{\frac{\sin\dfrac{1}{2}(k+n)\pi}{k+n}-\frac{\sin\dfrac{1}{2}(k-n)\pi}{k-n}\right\}\end{aligned}$$

上式可见, 若 $k+n=$ 偶数 (从而 $k-n$ 也为偶数), 显然有 $H'_{nk}=0$. 若 $k+n=$ 奇数 (从而 $k-n$ 也为奇数), 则

$$H'_{nk}=\frac{2b}{\pi}\left[\frac{1}{k+n}(-1)^{\frac{k+n-1}{2}}-\frac{1}{k-n}(-1)^{\frac{k-n-1}{2}}\right]=\frac{2b}{\pi}\left[\frac{(-1)^n}{k+n}-\frac{1}{k-n}\right](-1)^{\frac{k-n-1}{2}}$$

也就是

$$H'_{nk}=0, \qquad k+n=\text{偶数} \tag{11.80a}$$

$$H'_{nk}=-\frac{4bn}{\pi(k^2-n^2)}(-1)^{\frac{k-n-1}{2}}, \qquad n=\text{偶数}, k=\text{奇数} \tag{11.80b}$$

$$H'_{nk}=-\frac{4bk}{\pi(k^2-n^2)}(-1)^{\frac{k-n-1}{2}}, \qquad n=\text{奇数}, k=\text{偶数} \tag{11.80c}$$

按非简并微扰论, 波函数一级修正量是

$$\psi_k^{(1)}=\sum_{n=k}{}'\frac{H'_{nk}}{E_k^{(0)}-E_n^{(0)}}\psi_n^{(0)} \tag{11.81}$$

利用上式以及式 (11.80a)、式 (11.80b) 和式 (11.78), 即得波函数的一级近似解为

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}-\sum_{k(\text{奇数})}\frac{8b\mu n(-1)^{(k-n-1)/2}}{\hbar^2\pi^3(n^2-k^2)^2}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{k\pi x}{a},\qquad n=\text{偶数}\tag{11.82a}$$

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}-\sum_{k(\text{偶数})}\frac{8b\mu k(-1)^{(k-n-1)/2}}{\hbar^2\pi^3(n^2-k^2)^2}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{k\pi x}{a},\qquad n=\text{奇数}\tag{11.82b}$$

11.9 一个粒子在二维无限深势阱

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

中运动, 设加上微扰

$$H'=\lambda xy,\quad 0\leqslant x,y\leqslant a$$

求基态及第一激发态的能量修正.

解 不考虑微扰, 由分离变量法并结合边界条件可得①题给二维无限深势阱粒子束缚定态能量本征值和相应波函数阱内部分为

$$E^{(0)}_{n_1,n_2}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\left(n_1^2+n_2^2\right)\tag{11.83}$$

$$\psi^{(0)}_{n_1,n_2}(x,y)=\frac{2}{a}\sin\frac{n_1\pi}{a}x\sin\frac{n_2\pi}{a}y\tag{11.84}$$

可见基态非简并, 能级为 $E^{(0)}_{11}=\dfrac{\pi^2\hbar^2}{ma^2}$, 相应波函数为 $\psi^{(0)}_{11}$. 第一激发态二重简并, 能级为 $E^{(0)}_{12}=\dfrac{5\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$, 相应波函数为 $\psi^{(0)}_{12}$ 与 $\psi^{(0)}_{21}$.

现按微扰论计算微扰 H' 对基态及第一激发态的能量修正. 基态非简并, 故其能级的一级修正为 H' 在 $\psi^{(0)}_{11}$ 下的期望值

$$\begin{aligned}E^{(1)}_{11}&=\left\langle\psi^{(0)}_{11}\middle|H'\middle|\psi^{(0)}_{11}\right\rangle=\frac{4\lambda}{a^2}\int_0^a\int_0^a xy\sin^2\frac{\pi x}{a}\sin^2\frac{\pi y}{a}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\\&=\frac{\lambda}{a^2}\int_0^a x\left(1-\cos\frac{2\pi x}{a}\right)\mathrm{d}x\int_0^a y\left(1-\cos\frac{2\pi y}{a}\right)\mathrm{d}y\\&=\frac{\lambda}{a^2}\left[\left|\frac{x^2}{2}-\frac{ax}{2\pi}\sin\frac{2\pi x}{a}-\frac{a^2}{4\pi^2}\cos\frac{2\pi x}{a}\right|_0^a\right]^2=\frac{\lambda}{4}a^2\end{aligned}$$

上面用到了积分公式 (A.10). 上面的计算给出 H' 对基态能级的一级修正为

$$E^{(1)}_{11}=\frac{\lambda}{4}a^2\tag{11.85}$$

第一激发态二重简并, 我们将该简并子空间的 2 个态 $\psi^{(0)}_{12}$ 与 $\psi^{(0)}_{21}$ 分别记为 ψ_α 与 ψ_β. 需计算简并子空间 H' 的 4 个矩阵元. 按与得到式 (11.85) 同样计算得对角矩阵元

$$H'_{\alpha\alpha}=H'_{\beta\beta}=\frac{\lambda}{4}a^2\tag{11.86}$$

① 可参见例如张鹏飞, 阮图南, 朱栋培, 吴强, 量子力学学习指导 [M], 合肥: 中国科学技术大学出版社,2008: 51~52.

而非对角矩阵元

$$H'_{\alpha\beta}=\langle\psi_\alpha|\,H'\,|\psi_\beta\rangle=\frac{4\lambda}{a^2}\int_0^a\sin\frac{2\pi x}{a}\sin\frac{\pi x}{a}x\mathrm{d}x\int_0^a\sin\frac{\pi y}{a}\sin\frac{2\pi y}{a}y\mathrm{d}y$$
$$=\frac{4\lambda}{a^2}\left[\int_0^a\sin\frac{2\pi x}{a}\sin\frac{\pi x}{a}x\mathrm{d}x\right]^2=\frac{\lambda}{a^2}\left[\int_0^a\left(x\cos\frac{\pi x}{a}-x\cos\frac{3\pi x}{a}\right)\mathrm{d}x\right]^2$$
$$=\frac{\lambda}{a^2}\left[\left|\frac{ax}{\pi}\sin\frac{\pi x}{a}+\frac{a^2}{\pi^2}\cos\frac{\pi x}{a}-\frac{ax}{3\pi}\sin\frac{3\pi x}{a}-\frac{a^2}{9\pi^2}\cos\frac{3\pi x}{a}\right|_0^a\right]^2=\frac{256}{81\pi^2}$$

也就是

$$H'_{\alpha\beta}=\frac{256}{81\pi^2}\tag{11.87}$$

同样 $H'_{\beta\alpha}=\dfrac{256}{81\pi^2}$. 这样在第一激发态简并子空间

$$H'=\begin{pmatrix}H'_{\alpha\alpha}&H'_{\alpha\beta}\\H'_{\beta\alpha}&H'_{\beta\beta}\end{pmatrix}=\frac{\lambda}{4}a^2\begin{pmatrix}1&\dfrac{1024}{81\pi^4}\\\dfrac{1024}{81\pi^4}&1\end{pmatrix}\tag{11.88}$$

能量一阶修正 $E_1^{(1)}$ 满足如下久期方程

$$\begin{vmatrix}H'_{\alpha\alpha}-E_1^{(1)}&H'_{\alpha\beta}\\H'_{\beta\alpha}&H'_{\beta\beta}-E_1^{(1)}\end{vmatrix}=0$$

由上式解得

$$E_1^{(1)}=\frac{\lambda a^2}{4}\left(1\pm\frac{1024}{81\pi^2}\right)\approx\frac{\lambda a^2}{4}(1\pm0.13)$$

可见微扰 H' 使得第一激发能级升高 $\dfrac{\lambda a^2}{4}$ 的同时发生分裂, 裂距为 $0.065(\lambda a^2)$.

11.10 实际原子核不是一个点电荷, 它具有一定大小, 可近似视为半径为 R 的均匀分布球体. 测量表明, 电荷分布半径

$$R=r_{0p}Z^{\frac{1}{3}},\quad r_{0p}\doteq1.635\times10^{-15}\mathrm{m}=1.635\mathrm{fm}$$

试用微扰论估计这种 (非点电荷) 效应对原子的 1s 能级的修正 (设 1s 电子波函数近似取为类氢原子的 1s 态波函数).

解 先求均匀带电球的电势. 根据对称性确定空间电场从而求得空间电势如下:

$$\phi(r)=\begin{cases}\dfrac{Ze}{2}\left(\dfrac{3}{R}-\dfrac{r^2}{R^3}\right), & r\leqslant R\\[2ex]\dfrac{Ze}{r}, & r>R\end{cases}\tag{11.89}$$

上式中取 Gauss 单位. 假定全部电荷 Ze 集中在一个几何点 $(r=0)$ 所算得的基态能量是零级近似, 这时电势表示为 $\phi_0(r)=Ze/r$. 这样取非点电荷效应导致的微扰项为

$$H'=\begin{cases}-\dfrac{Ze^2}{2}\left(\dfrac{3}{R}-\dfrac{r^2}{R^3}\right)-\left(-\dfrac{Ze^2}{r}\right), & r\leqslant R\\[2ex]0, & r>R\end{cases}\tag{11.90}$$

现根据这个微扰来计算基态 1s 原子的一级能量修正, 未受微扰前的波函数和能级[①]是

$$\psi_{100}^{(0)}=\sqrt{\frac{Z^3}{\pi a_0^3}}\mathrm{e}^{-\frac{Zr}{a_0}},\quad E_0^{(0)}=-\frac{Ze^2}{2a_0} \tag{11.91}$$

其中 $a_0=0.529\times10^{-10}\mathrm{m}$ 为 Bohr 半径. 基态 1s 无简并, 按非简并态微扰论

$$\begin{aligned}E_0^1&=\iiint\psi_{100}^{(0)*}H'\psi_{100}^{(0)}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\frac{Z^3}{\pi a_0^3}\iiint\mathrm{e}^{-\frac{2Zr}{a_0}}\frac{Ze^2}{r}\left(1-\frac{3}{2}\frac{r}{R}+\frac{1}{2}\frac{r^3}{R^3}\right)r^2\mathrm{d}r\mathrm{d}\Omega\\&=\frac{Z^4e^2}{\pi a_0^3}\int_0^R\mathrm{e}^{-\frac{2Zr}{a_0}}\left[1-\frac{3}{2}\frac{r}{R}+\frac{1}{2}\frac{r^3}{R^3}\right]r\mathrm{d}r\cdot\iint\mathrm{d}\Omega\end{aligned} \tag{11.92}$$

根据题意原子核的尺度是 $10^{-15}\mathrm{m}$=fm 的数量级, 与 Bohr 半径相比相差 10^5 倍, 因而当 $r<R$ 时, r/a_0 是个极小的数量, 在式 (11.92) 的积分式可取近似 $\mathrm{e}^{-\frac{2Zr}{a_0}}\approx1$. 于是完成式 (11.92) 积分, 并代入题给条件得 1s 能级一级能量修正为

$$\begin{aligned}E_0^1&=\frac{Z^4e^2}{\pi a_0^3}\int_0^R\mathrm{e}^{-\frac{2Zr}{a_0}}\left[1-\frac{3}{2}\frac{r}{R}+\frac{1}{2}\frac{r^3}{R^3}\right]r\mathrm{d}r\cdot4\pi\\&=\frac{4Z^4e^2}{a_0^3}\left|\frac{r^2}{2}-\frac{1}{2}\frac{r^3}{R}+\frac{1}{10}\frac{r^5}{R^3}\right|_0^R=\frac{2}{5}\frac{Z^4e^2R^2}{a_0^3}=-\frac{4}{5}\frac{Z^{14/3}r_{0p}^2}{a_0^2}E_1\end{aligned} \tag{11.93}$$

其中 $E_1=-13.6\mathrm{eV}$ 为氢原子基态束缚能级. 由 $E_0^1>0$ 可见非点电荷效应导致能级升高, 其量级为 $E_0^1\sim Z^{14/3}10^{-8}\mathrm{eV}$. 由于 $Z^{14/3}$ 因子, 对于重核素, 能级修正是可观的.

11.11 同上题, 若视核电荷 Ze 为球壳分布 (半径 R), 则

$$\phi(r)=\begin{cases}\dfrac{Ze}{R}, & r\leqslant R\\[2ex]\dfrac{Ze}{r}, & r>R\end{cases}$$

因而

$$H'=\begin{cases}Ze^2\left(\dfrac{1}{r}-\dfrac{1}{R}\right), & r\leqslant R\\[2ex]0, & r>R\end{cases}$$

求 1s 能级的微扰论一级修正.

解 利用题 11.10 式 (11.91) 所给基态零级波函数计算, 1s 能级一级修正

$$\begin{aligned}E_0^{(1)}&=\iiint\psi_{100}^{(0)*}H'\psi_{100}^{(0)}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\frac{Z^4e^2}{\pi a_0^3}\int_0^R\mathrm{e}^{-\frac{2Zr}{a_0}}\left[r-\frac{r^2}{R}\right]\mathrm{d}r\cdot\iint\mathrm{d}\Omega\\&=4\pi\frac{Z^4e^2}{\pi a_0^3}\int_0^R\left[r-\frac{r^2}{R}\right]\mathrm{d}r=4\frac{Z^4e^2}{a_0^3}\left[\frac{1}{2}r^2-\frac{r^3}{3R}\right]\Big|_0^R=\frac{2Z^4e^2}{3a_0^3}R^2=-\frac{4}{3}\frac{Z^{14/3}r_{0p}^2}{a_0^2}E_1\end{aligned} \tag{11.94}$$

与题 11.10 类似, 上面取了近似 $\mathrm{e}^{-\frac{2Zr}{a_0}}\approx1$. 而式中 $E_1=-13.6\mathrm{eV}$ 为氢原子基态束缚能级. 由 $E_0^{(1)}>0$ 可见核电荷 Ze 为球壳分布的非点电荷效应同样导致能级升高, 能级修正的量级与题 11.10 相同.

11.12 考虑 μ 原子, 它是一个 μ^- 子取代一个电子而形成的原子, μ^- 子质量为电子质量的 207 倍, 即 $m_\mu=207m_\mathrm{e}$. (1) 计算 μ^- 子的圆轨道 ($l=n-1$) 半径, 与核半径比较, 估算原子序数 Z 多大时, μ^- 子的轨道半径将与核半径相等. (2) 对于轻核 (Z 较小), 估算原子核电荷的有限分布对 μ^- 子 1s 能级的影响.

① 忽略内层电子的屏蔽效应, 把原子视为类氢原子.

解 先把原子核视为点粒子, μ 原子为原子核与 μ^- 子两体相互作用体系, 其相对运动的 Hamilton 量为

$$H_0 = -\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r} \tag{11.95}$$

其中 $\mu = \dfrac{M m_\mu}{M + m_\mu}$ 为折合质量, 由于 μ^- 子 m_μ 与最轻的原子核 (H) 质量相比, 也约只有其 1/5, 作为估算可以取 $\mu = m_\mu$. 上式 Hamilton 量与氢原子 Hamilton 量类似, 因此利用类氢原子有关结果, 得 μ 原子能级为

$$E_n^{(0)} = -\frac{Z^2 e^4 m_\mu}{2n^2\hbar^2} = -\frac{Z^2}{n^2} \times 2.82\text{keV} \tag{11.96}$$

其中 $n = 1, 2, 3, \cdots$.

利用类氢原子有关结果, μ^- 子"圆轨道态" ($l = n - 1$) 半径

$$r_n = \frac{n^2\hbar^2}{m_\mu Z e^2} = n^2 \frac{a_\mu}{Z} \tag{11.97}$$

其中

$$a_\mu = \frac{\hbar^2}{m_\mu Z e^2} = \frac{a_0}{207} = 256\text{fm} \tag{11.98}$$

为该 μ 原子的 μ^- 子"Bohr 半径".

核半径 R 约为几个 fm. 由式 (11.97) 可知, 当 $n = 1$(基态), 原子序数 Z 较大时, 轨道半径 r_1 有可能与核半径相等. 原子核电荷分布半径 $R = 1.635 \times Z^{1/3}\text{fm} = r_{0\text{p}} Z^{1/3}$. 则 r_1 与核半径 R 相等的原子序数 Z_0 值由下式决定:

$$r_1 = \frac{a_\mu}{Z_0} = R = r_{0\text{p}} z_0^{1/3}$$

因而

$$Z_0 = \left(\frac{a_\text{u}}{r_{0\text{p}}}\right)^{3/4} = \left(\frac{256}{1.635}\right)^{2/4} \approx 44$$

当 $Z < Z_0$, μ 原子的基态轨道半径大于核半径. 但实际上, 当 μ 原子的基态轨道半径若不是远大于核半径, 则需要考虑原子核电荷的非点电荷效应, Hamilton 量 H_0 不再适用.

对于轻核 (Z 较小), 可用微扰论一级近似估算 1s 能级修正. 假如 Z 小, 使得 μ^- 子"Bohr 半径"远大于核半径 R, 则利用题 11.10 的结果

$$E_0^{(1)} = \frac{2}{5}\frac{Z^4 e^2 R^2}{a_\mu^3} = -\frac{4}{5}\frac{Z^{14/3} r_{0p}^2}{a_\mu^2} E_1$$

a_μ 约为氢原子"Bohr 半径"的 1/200, 与题 11.10 结果相比, 可知 1s 能级修正 $E_0^1 \sim Z^{14/3} 10^{-1}\text{eV}$.

11.13 均匀带电小球 (半径 r_0) 在外静电场中获得势能

$$U(r) = V(r) + \frac{1}{6} r_0^2 \nabla^2 V(r) + \cdots \tag{11.99}$$

r 为球心所在位置, $V(r)$ 是把小球换为点电荷情况下在静电场中的势能. 氢原子中, 视电子为点电荷, 则它与原子核之间 Coulomb 势能为 $V(r) = -e^2/r$. 如视电子为带电 ($-e$) 的小球, 半径 $r_0 = r_\text{e} = e^2/m_e c^2$(经典电子半径), 则势能应改为 $U(r)$, 如把 r_e^2 项视为微扰, 求 1s 和 2s、2p 能级的微扰修正 (2s、2p 能级的差异相当于 Lamb 移位).

提示 $H' = \dfrac{2\pi}{3} e^2 r_e^2 \delta(\boldsymbol{r})$.

解 根据式 (11.99), 电子为均匀带电小球在原子核 Coulomb 势场中运动的 Hamilton 量为

$$H=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}+U(r)=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}+V(r)+\frac{1}{6}r_e^2\nabla^2V(r) \tag{11.100}$$

记 $H'=\frac{1}{6}r_e^2\nabla^2V(r)$ 为 Hamilton 量微扰项. 将 $V(r)=-e^2/r$ 代入, 由于

$$\nabla^2\frac{1}{r}=-4\pi\delta(\boldsymbol{r})$$

即得

$$H'=\frac{2\pi}{3}e^2r_e^2\delta(\boldsymbol{r}) \tag{11.101}$$

1s 能级为氢原子基态, 若不计自旋, 非简并. 按照定态微扰论, 能级的一级微扰修正等于 H' 的期望值, 即

$$E^{(1)}=\int\psi^*H'\psi\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\frac{2\pi}{3}e^2r_e^2\left|\psi\left(0\right)\right|^2 \tag{11.102}$$

对于 1s 态 (即 $\psi_{1\mathrm{s}}=\psi_{100}$)

$$\left|\psi_{1\mathrm{s}}(0)\right|^2=\frac{1}{\pi a_0^3}=\frac{1}{\pi}\left(\frac{m_ee^2}{\hbar^2}\right)^3$$

因此

$$E_{1\mathrm{s}}^{(1)}=\frac{2}{3}\frac{e^2r_e^2}{a_0^3}=\frac{2}{3}\alpha^6m_ec^2\approx5.1\times10^{-8}\mathrm{eV} \tag{11.103}$$

其中 $\alpha=e^2/\hbar c\approx1/137$ 为精细结构常数.

2s、2p 态为氢原子第一激发态, 若不计自旋, 为 4 重简并. 在由这 4 个简并态

$$\{\psi_{200}=\psi_1,\psi_{2,1,-1}=\psi_2,\psi_{210}=\psi_3,\psi_{211}=\psi_4\}$$

组成的简并子空间中, 微扰矩阵元为

$$H'_{ij}=\int\psi_i^*H'\psi_j\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\frac{2\pi}{3}e^2r_e^2\psi_i^*(0)\psi_j(0) \tag{11.104}$$

因 $\psi_{21m}(0)=0$, 故 $i=j=1$ 除外

$$H'_{ij}\equiv0,i=j=1\text{除外} \tag{11.105}$$

可见在微扰作用下, 2s、2p 态简并能级的 4 个简并态已经是合适的零级波函数, 而且对于 2p 态, 能级一级修正为零. 对于 2s 态, 在式 (11.104) 中取 $i=j=1$, 即有

$$H'_{11}=\frac{2\pi}{3}e^2r_e^2|\psi_{200}(0)|^2 \tag{11.106}$$

对于 2s 态 (即 $\psi_{2\mathrm{s}}=\psi_{200}$)

$$\left|\psi_{200}(0)\right|^2=\frac{1}{8\pi a_0^3}=\frac{1}{8\pi}\left(\frac{m_ee^2}{\hbar^2}\right)^3$$

因此

$$H'_{11}=\frac{1}{12}\frac{e^2r_e^2}{a_0^3}=\frac{1}{12}\alpha^6m_ec^2\approx6.4\times10^{-9}\mathrm{eV} \tag{11.107}$$

因而

$$E_{2\mathrm{s}}^{(1)}\approx6.4\times10^{-9}\mathrm{eV},\quad E_{2\mathrm{p}}^{(1)}=0 \tag{11.108}$$

可见, 在题给微扰作用下, 2s 能级与 2p 能级发生分裂, 2s 能级要高于 2p 能级.

说明 氢原子 Bohr 半径为 $a_0=\hbar^2/(m_e e^2)\approx 0.529\text{Å}$, 电子 Compton 波长为 $\lambda_c=\hbar/(m_e c)\approx 3.861\times 10^{-13}\text{m}$, 电子经典半径为 $r_e=e^2/(m_e c^2)\approx 2.818\text{fm}$, 它们满足等比关系 $a:\lambda_c:r_e=1:\alpha:\alpha^2$, 上面式 (11.103)、式 (11.107) 用到了这一等比关系.

Lamb 移位指的是氢原子 2s 能级与 2p 能级的差异 (若根据 Dirac 相对论量子力学, 这两个能级应重合), 它来源于电子与量子电动力学真空的相互作用. 虽然本题定性结论是正确的, 但根据本题模型所得定量结果与 Lamb 移位的实验结果或者量子电动力学计算结果[①]相比, 量级上差一个精细结构常数 α 倒数, 即量级相差百倍. 原因可以追溯到电子与量子电动力学真空的相互作用所导致的电子位置涨落 $\sqrt{(\delta r)^2}$ 要比经典电子半径 r_e 要大 $1/\sqrt{\alpha}$ 的量级.

11.14 讨论类氢原子的 $n=2$ 能级在下列微扰下的能级分裂

$$H'=xyf(r)$$

其中 $f(r)$ 无奇异性质.

提示 不计及微扰时, $n=2$ 能级为 4 重简并 (不考虑自旋). 选择定则 $\Delta m=\pm 2$.

解 根据氢原子定态结果, 不计及微扰时, 类氢原子 $n=2$ 能级为 4 重简并 (不考虑自旋), 相应状态为

$$\begin{aligned}&\psi_{200}=R_{20}(r)\mathrm{Y}_{00},\quad \psi_{211}=R_{21}(r)\mathrm{Y}_{11}\\&\psi_{210}=R_{21}(r)\mathrm{Y}_{10},\quad \psi_{21-1}=R_{21}(r)\mathrm{Y}_{1-1}\end{aligned}\tag{11.109}$$

其中 R_{20}、R_{21} 为氢原子归一化径向波函数, 各 Y_{lm} 为氢原子归一化径向波函数, 即球谐函数, 如下给出:

$$\mathrm{Y}_{00}=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$\mathrm{Y}_{1,\pm 1}=\mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\varphi}=\mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta(\cos\varphi\pm\mathrm{i}\sin\varphi)=\mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{x\pm\mathrm{i}y}{r}$$

$$\mathrm{Y}_{1,0}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{z}{r}$$

在式 (11.109) 四个简并态构成的子空间中, 由波函数和 H' 的对称性容易看出 (只要检查关于 x, y, z 的积分即可), H' 的所有对角矩阵元全部为零; H' 对于 ψ_{200} 以及其他任何一个 ψ_{2lm} 的矩阵元均为零, H' 对于 ψ_{210} 以及其他任何一个 ψ_{2lm} 的矩阵元也是如此. 因此, 在该子空间中, 不等于零只可能是 H' 对于 ψ_{211} 以及 ψ_{21-1} 的矩阵元

$$\begin{aligned}H'_{211,21-1}&=\int\psi^*_{211}H'\psi_{21-1}\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}=-\int|R_{21}(r)|^2f(r)r^2\frac{3}{8\pi}\frac{xy}{r^2}\frac{1}{r^2}(x-\mathrm{i}y)^2\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\\&=\int|R_{21}(r)|^2f(r)r^2\frac{3\mathrm{i}}{4\pi}\frac{x^2y^2}{r^4}\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\end{aligned}$$

上面最后一个等号利用了被积函数的奇偶性. 若令 $A=\dfrac{1}{5}\displaystyle\int_0^\infty[R_{21}(r)]^2f(r)r^4\mathrm{d}r$, 因 $f(r)$ 无奇异性质, 而且 R_{21} 为束缚定态的径向波函数, A 应为一有限的实数量. 这样

---

①参见: Willis E. Lamb and Robert C. Retherford, Fine Structure of the Hydrogen Atom by a Microwave Method,Phys. Rev., **72**, 241~243 (1947);H. A. Bethe, The Electromapnetic shift of Energy Levels, Phys. Rev., **72**, 339~341 (1947) 等文献, 其中给出 Lamb 移位的结果 $\propto\alpha^5$, 在 μeV 量级 (转换到频率则为 GHz 量级), 而非本题计算所得 $\propto\alpha^6$.

$$
\begin{aligned}
H'_{211,21-1} &= \int_0^\infty |R_{21}(r)|^2 f(r) r^4 \mathrm{d}r \int \frac{3\mathrm{i}}{4\pi} \sin^4\theta \sin^2\varphi \cos^2\varphi \mathrm{d}^2\Omega \\
&= \frac{15\mathrm{i}}{4\pi} A \int_0^\pi \sin^5\theta \mathrm{d}\theta \int_0^{2\pi} \sin^2\varphi \cos^2\varphi \mathrm{d}\varphi = \frac{15\mathrm{i}}{4\pi} A \int_0^{\pi/2} \left(\sin^5\theta + \cos^5\theta\right) \mathrm{d}\theta \times \frac{\pi}{4} \\
&= \frac{15\mathrm{i}}{16} A \times 2 \times \frac{4!!}{5!!} = A\mathrm{i}
\end{aligned}
$$

上面最后一个等号用到了积分公式 (A.14′). 上面计算给出 $H'_{211,21-1} = A\mathrm{i}$, 再利用 H' 的 Hermite 性, 知 $H'_{21-1,211} = H'^*_{211,21-1} = -A\mathrm{i}$. 如上所述, 除了这两个矩阵元不为零以外的, 在 $n=2$ 能级的子空间中, H' 的矩阵元均为零. 因此在该子空间中, 在一级微扰近似下, ψ_{200} 与 ψ_{210} 不和其他态发生耦合, 相应能级也不变.

根据上述计算, 在 $\{\psi_{211}, \psi_{21-1}\}$ 子空间中, H' 的矩阵表示为

$$
H' = \begin{pmatrix} 0 & \mathrm{i}A \\ -\mathrm{i}A & 0 \end{pmatrix} = -A\sigma_y \tag{11.110}
$$

其中 σ_y 为 Pauli 矩阵的 y 分量. 按照简并微扰论, 根据 σ_y 的本征值和本征态的结果, 我们可以直接写下能级修正一级修正为

$$
E_2^{(1)} = A, \quad -A \tag{11.111}
$$

而相应的本征态 (合适的零级波函数) 分别为

$$
\psi^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_{211} - \mathrm{i}\psi_{21-1}\right), \quad \psi^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_{211} + \mathrm{i}\psi_{21-1}\right)
$$

综上, 在微扰一级近似下, 能级 $E_2^{(0)}$ 分裂为三条等距离的能级, 即

$$
E_2^{(0)}, \quad \left(E_2^{(0)} + A\right), \quad \left(E_2^{(0)} - A\right)
$$

$E_2^{(0)}$ 为二重简并, 对应 ψ_{210} 与 ψ_{200}. 而 $\left(E_2^{(0)} + A\right)$ 和 $\left(E_2^{(0)} - A\right)$ 分别对应 $\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_{211} - \mathrm{i}\psi_{21-1}\right)$ 与 $\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_{211} + \mathrm{i}\psi_{21-1}\right)$.

11.15 氢原子的 $n=2$ 能级的精细结构如图 11.1 所示.

$$
\Delta = E(2\mathrm{p}_{3/2}) - E(2\mathrm{p}_{1/2}) = \frac{1}{32}\alpha^4 m_e c^2 = 4.5 \times 10^{-5}\mathrm{eV}
$$

其中 $\alpha = e^2/\hbar c \approx 1/137$ 为精细结构常数. 将氢原子置于“弱”电场中, 求一级微扰下能级的分裂. 此处“弱”的含义是什么?

解 原子中电子自旋轨道的耦合导致精细结构. 氢原子的 $(H, \boldsymbol{l}^2, \boldsymbol{J}^2, J_z)$ 共同本征态

$$
\psi_{nljm_j} = R_{nl}(r)\phi_{ljm_j}(\theta, \varphi, s_z) \tag{11.112}
$$

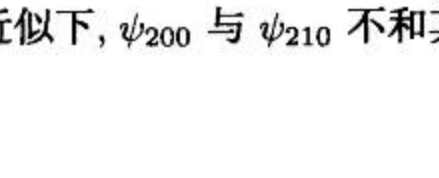

图 11.1 氢原子的 $n=2$ 能级的精细结构

这是氢原子置于“弱”电场后, 不考虑微扰时的零级波函数. 对这些零级波函数而言, $2\mathrm{p}_{3/2}$ 态除了光谱学记号表示的量子数 (主量子数 $n=2$, 角量子数 $l=1$, 总角动量量子数 $j=3/2$) 外, 总角动量量子数第三分量有 $j_z = \pm 3/2, \pm 1/2$ 四个值, 故 $2\mathrm{p}_{3/2}$ 能级有四个态. $2\mathrm{p}_{1/2}$ 态与 $2\mathrm{s}_{1/2}$ 态能量相等, $2\mathrm{p}_{1/2}$ 态除了光谱学记号表示的量子数 $(n=2, l=1, j=1/2)$ 外, j_z 有 $\pm 1/2$ 两个值, 故 $2\mathrm{p}_{1/2}$ 态 2 重简并; 而 $2\mathrm{s}_{1/2}$ 态除了光谱学记号表示的量子数 $(n=2, l=0, j=1/2)$ 外, j_z 有 $\pm 1/2$ 两个值, 故 $2\mathrm{s}_{1/2}$ 态 2 重简并.

设外电场为 $\boldsymbol{\mathcal{E}}$, 以电场 $\boldsymbol{\mathcal{E}}$ 的方向为 z 轴, 电场对电子的作用能为

$$H' = e\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\mathcal{E}} = e\mathcal{E}z = e\mathcal{E}r\cos\theta \tag{11.113}$$

电场 $\boldsymbol{\mathcal{E}}$ 引起的能级变化约为 $\Delta E \sim e\mathcal{E}a_0$($a_0$ 为 Bohr 半径), 如 $\Delta E \ll \Delta$, 即 $\Delta E \sim e\mathcal{E}a_0 \ll 4.5\times10^{-5}\text{eV}$, 就可以认为是“弱”电场的条件为

$$\mathcal{E} \ll \frac{4.5\times10^{-5}\text{eV}}{ea_0} \sim 8.5\times10^{3}\text{V/cm} \tag{11.114}$$

下面计算在“弱”电场作用下能级的分裂. 根据简并微扰论, 需要分别在 2 个简并能级简并态组成的子空间中计算微扰 H' 的矩阵元. 由式 (11.113) 知, 微扰 H' 为奇宇称算符, 因此在任何如式 (11.112) 的 ψ_{nljm_j} 态下 H' 的期望值均为 0. 因为微扰 H' 与 J_z 对易, 可知在 m_j 不同的状态之间, H' 的矩阵元为 0.

$2\text{p}_{3/2}$ 态对应四种状态, 它们的 m_j 值互不相同, 由上一段结论在 $2\text{p}_{3/2}$ 态子空间中, H' 的矩阵元全部为 0, 在一级微扰近似下, H' 对能级没有影响, 这个能级不分裂.

$2\text{p}_{1/2}$ 态和 $2\text{s}_{1/2}$ 态在微扰作用前处于同一能级, 它们各对应两个状态, 故该能级共有四个简并态. 其中 s 态和 p 态各有一个 $m_j = 1/2$ 态, 它们在微扰作用下将发生耦合, 从而导致能级分裂. 对于两个 $m_j = -1/2$ 态, 结果相同. 下面以 $m_j = 1/2$ 为例作具体计算. 有关波函数为

$$\psi_1 = \psi_{20\frac{1}{2}\frac{1}{2}} = R_{20}(r)\text{Y}_{00}\alpha \tag{11.115}$$

$$\psi_2 = \psi_{21\frac{1}{2}\frac{1}{2}} = R_{21}(r)\left[-\frac{1}{\sqrt{3}}\text{Y}_{10}\alpha + \sqrt{\frac{2}{3}}\text{Y}_{11}\beta\right] \tag{11.116}$$

其中 α、β 为 σ_z 的本征态, 本征值分别为 1 和 -1. 氢原子径向波函数 R_{20} 与 R_{21} 如下给出

$$R_{20} = \frac{1}{(2a_0)^{3/2}}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)\text{e}^{-\frac{r}{2a_0}}, \quad R_{21} = \frac{1}{(2a_0)^{3/2}}\frac{r}{\sqrt{3}a_0}\text{e}^{-\frac{r}{2a_0}} \tag{11.117}$$

由此可以计算 H' 在 $2\text{p}_{1/2}$ 态和 $2\text{s}_{1/2}$ 态 $m_j = 1/2$ 的 2 个态之间的矩阵元

$$\begin{aligned} H'_{12} &= \left\langle \psi_{20\frac{1}{2}\frac{1}{2}} \middle| H' \middle| \psi_{21\frac{1}{2}\frac{1}{2}} \right\rangle = -e\mathcal{E}\int \text{Y}_{00}\text{Y}_{10}\frac{1}{\sqrt{3}}\cos\theta\text{d}\Omega\int_0^\infty R_{20}R_{21}r^3\text{d}r \\ &= -e\mathcal{E}\int \text{Y}_{10}\text{Y}_{10}\frac{1}{3}\text{d}\Omega\int_0^\infty \frac{1}{(2a_0)^3}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)\frac{r}{\sqrt{3}a_0}\text{e}^{-\frac{r}{a_0}}r^3\text{d}r \\ &= -e\mathcal{E}a_0\frac{1}{24\sqrt{3}}\int_0^\infty \left(2x^4-x^5\right)\text{e}^{-x}\text{d}x = -e\mathcal{E}a_0\frac{1}{24\sqrt{3}}\left(2\times4!-5!\right) = \sqrt{3}e\mathcal{E}a_0 \end{aligned} \tag{11.118}$$

上面用了积分公式 (A.9), 再根据 H' 的 Hermite 性写出 $H'_{21} = H'^*_{12} = \sqrt{3}e\mathcal{E}a_0$. 因此, 在 $2\text{p}_{1/2}$ 态和 $2\text{s}_{1/2}$ 态 $m_j = 1/2$ 的 2 个态 $\{\psi_1, \psi_2\}$ 子空间中, H' 的矩阵表示为

$$H' = \sqrt{3}e\mathcal{E}a_0\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \sqrt{3}e\mathcal{E}a_0\sigma_x \tag{11.119}$$

根据简并微扰论, 由 Pauli 矩阵 σ_x 的本征值和本征态的结果, 我们由式 (11.119) 可以直接写下能级一级修正

$$E^{(1)} = \pm\sqrt{3}e\mathcal{E}a_0 \tag{11.120}$$

而相应的本征态 (合适的零级波函数) 分别为

$$\psi^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{20\frac{1}{2}\frac{1}{2}} \pm \psi_{21\frac{1}{2}\frac{1}{2}}\right) \tag{11.121}$$

式 (11.120) 与本题开始时对“弱”电场 $\boldsymbol{\mathcal{E}}$ 引起的能级变化量估算一致. 同理, 对两个 $m_j=-1/2$ 态的一级微扰计算, 得到能级的修正相同.

综上, 氢原子的 $n=2$ 能级的精细结构能级在“弱”电场作用下的分裂情况如图 11.2 所示. 也就是, $2\mathrm{p}_{3/2}$ 对应的 4 重简并能级不分裂, 而 $2\mathrm{s}_{1/2}$、$2\mathrm{p}_{1/2}$ 对应的 4 重简并能级分裂为 2 条, 能级修正 $E^{(1)}=\pm\sqrt{3}e\mathcal{E}a$, 从而能级分裂裂距为 $\Delta=2\sqrt{3}e\mathcal{E}a$. 分裂后的 2 条能级均为 2 重简并.

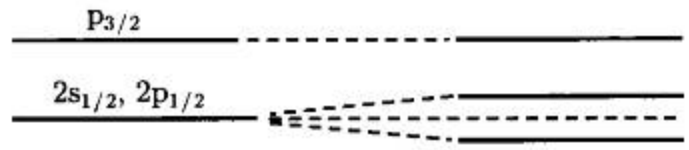

图 11.2 氢原子的 $n=2$ 能级的精细结构能级在“弱”电场作用下的分裂

11.16 单价电子原子处于某种离子点阵中, 周围离子对价电子的作用势可近似表示成

$$H'=V_0\left(x^4+y^4+z^4-\frac{3}{5}r^4\right)$$

可视为微扰. 设价电子处于 3d 态, 它的正交归一波函数取为

$$\psi_1=\frac{1}{2}(y^2-z^2)f(r),\ \psi_2=\frac{1}{2\sqrt{3}}(2x^2-y^2-z^2)f(r)$$
$$\psi_3=yzf(r),\ \psi_4=zxf(r),\ \psi_5=xyf(r)$$

讨论微扰一级近似下, 3d 能级的分裂及分裂后的简并度.

解 如果没有周围离子对价电子的作用 H', 则价电子 3d 态为一简并能级, 简并度为 5. 为考察微扰 H' 导致的能级分裂, 需要如下计算 H' 在简并子空间的矩阵元 H'_{ij}

$$H'_{ij}=\iiint \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\psi_i^*H'\psi_j,\quad i,j=1,2,3,4,5 \tag{11.122}$$

由于 H' 的 Hermite 性, $H'_{ij}=H'^*_{ji}$.

利用式 (11.122), 根据对称性考虑可知

$$\begin{aligned}&H'_{12}=0,H'_{13}=0,H'_{14}=0,H'_{15}=0,H'_{23}=0,\\&H'_{24}=0,H'_{25}=0,H'_{34}=0,H'_{35}=0,H'_{45}=0\end{aligned} \tag{11.123}$$

上式中除了 $H'_{12}=0$ 外, 其余各式由各波函数在直角坐标系中的奇偶性均可容易看出. 而对于

$$H'_{12}=\iiint H'|f(r)|^2\frac{1}{4\sqrt{3}}\left(z^4-y^4+2x^2y^2-2x^2z^2\right)\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}$$

根据对称性可知, 上式积分中 z^4 项和 y^4 项贡献相等, 互相抵消; x^2y^2 项和 x^2z^2 项贡献相等, 互相抵消, 这样给出 $H'_{12}=0$ 的结果. 由式 (11.123) 可知, 在一级微扰作用下, ψ_1, ψ_2, ψ_3, ψ_4 以及 ψ_5 这 5 个简并态不会混合, 即它们均已经是合适的零级波函数. H' 在这 5 个态下的期望值将给出能级的一级微扰修正.

ψ_1 与 ψ_2 态下 H' 的期望值为

$$H'_{11}=\frac{1}{4}\iiint H'|f(r)|^2(y^4+z^4-2y^2z^2)\mathrm{d}^3\boldsymbol{x} \tag{11.124}$$

$$H'_{22}=\frac{1}{12}\iiint H'|f(r)|^2(4x^4+y^4+z^4+2y^2z^2-4x^2y^2-4x^2z^2)\mathrm{d}^3\boldsymbol{x} \tag{11.125}$$

由观察可知题给 H' 对于 x,y,z 交换/轮换不变, 故上面 2 式积分中, x^4 项、y^4 项以及 z^4 项的贡献相等, x^2y^2 项、x^2z^2 项以及 x^2y^2 项的贡献相等, 这样

$$H'_{11}=H'_{22}=\frac{1}{2}\iiint H'|f(r)|^2(x^4-x^2y^2)\mathrm{d}^3\boldsymbol{x} \tag{11.126}$$

因此, 在一级微扰作用下, ψ_1 及 ψ_2 态不变, 相应的能量仍相等.

ψ_3, ψ_4 与 ψ_5 态下 H' 的期望值为

$$H'_{33}=\iiint H'|f(r)|^2y^2z^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{x} \tag{11.127}$$

$$H'_{44}=\iiint H'|f(r)|^2z^2x^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{x} \tag{11.128}$$

$$H'_{55}=\iiint H'|f(r)|^2x^2y^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{x} \tag{11.129}$$

题给 H' 对于 x,y,z 交换/轮换不变, 故上面 3 式积分中, x^2y^2 项、x^2z^2 项以及 x^2y^2 项的贡献相等, 这样

$$H'_{33}=H'_{44}=H'_{55}=\iiint H'|f(r)|^2x^2z^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{x} \tag{11.130}$$

因此, 在一级微扰作用下, ψ_3, ψ_4 以及 ψ_5 态不变, 相应的能量仍相等.

为考察能级的分裂, 还需进一步比较 H'_{11} 与 H'_{33}. 令

$$\Lambda=V_0\int_0^\infty|f(r)|^2r^{10}\mathrm{d}r \tag{11.131}$$

若 $V_0>0$, 则 $\Lambda>0$; 若 $V_0<0$, 则 $\Lambda<0$, 也就是说 Λ 的正负性与 V_0 相同. 这样

$$\begin{aligned}
H'_{33}&=\Lambda\iint\left[\left(\frac{x}{r}\right)^4+\left(\frac{y}{r}\right)^4+\left(\frac{z}{r}\right)^4-\frac{3}{5}\right]\left(\frac{x}{r}\right)^2\left(\frac{z}{r}\right)^2\mathrm{d}^2\Omega\\
&=\Lambda\int_0^\pi\int_0^{2\pi}\left[\sin^6\theta\cos^2\theta\cos^6\varphi+\sin^6\theta\cos^2\theta\cos^2\varphi\sin^4\varphi\right]\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi\\
&\quad+\Lambda\int_0^\pi\int_0^{2\pi}\left[\sin^2\theta\cos^6\theta\cos^2\varphi-\frac{3}{5}\sin^2\theta\cos^2\theta\cos^2\varphi\right]\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi\\
&=\Lambda\int_0^\pi\left[\frac{5\pi}{8}\sin^7\theta\cos^2\theta+\frac{\pi}{8}\sin^7\theta\cos^2\theta+\pi\sin^3\theta\cos^6\theta-\frac{3}{5}\pi\sin^3\theta\cos^2\theta\right]\mathrm{d}\theta\\
&=\Lambda\pi\left[\frac{3}{4}\left(\frac{6!!}{7!!}-\frac{8!!}{9!!}\right)+\frac{2}{7}-\frac{2}{9}-\frac{3}{5}\left(\frac{2!!}{3!!}-\frac{4!!}{5!!}\right)\right]=\frac{4}{1575}\Lambda\pi
\end{aligned} \tag{11.132}$$

上面积分过程中用到了积分公式 (A.14′)、式 (A.14″), 其中 $[0,2\pi]$ 区间以及 $[0,\pi]$ 区间的积分也可以化到 $[0,\pi/2]$ 区间进行. 再利用 $r^4=\left(x^2+y^2+z^2\right)^2=x^4+y^4+z^4+2x^2y^2+2y^2z^2+2z^2x^2$,

$$\begin{aligned}
H'_{11}&=\frac{1}{2}\iiint H'|f(r)|^2\left[\frac{1}{3}\left(x^4+y^4+z^4\right)-x^2z^2\right]\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\\
&=\frac{1}{2}\iiint H'|f(r)|^2\left[\frac{1}{3}\left(r^4-6x^2z^2\right)-x^2z^2\right]\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\\
&=\iiint H'|f(r)|^2\left(\frac{1}{6}r^4-\frac{3}{2}x^2z^2\right)\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\\
&=\frac{1}{6}\iiint H'|f(r)|^2r^4\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}-\frac{3}{2}H'_{33}
\end{aligned} \tag{11.133}$$

其中

$$\begin{aligned}
\iiint H'|f(r)|^2r^4\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}&=\Lambda\iint\left[\left(\frac{x}{r}\right)^4+\left(\frac{y}{r}\right)^4+\left(\frac{z}{r}\right)^4-\frac{3}{5}\right]\mathrm{d}^2\Omega=\Lambda\iint\left[3\left(\frac{z}{r}\right)^4-\frac{3}{5}\right]\mathrm{d}^2\Omega\\
&=6\pi\Lambda\int_0^\pi\cos^4\theta\sin\theta\mathrm{d}\theta-\frac{12}{5}\pi\Lambda=0
\end{aligned}$$

这样

$$H'_{11} = -\frac{3}{2}H'_{33} = -\frac{2}{525}\Lambda\pi \tag{11.134}$$

综上可知, 一级微扰下, 3d 能级分裂为二, 即

$$E_{3\mathrm{d}}(0) \to E_{3\mathrm{d}}(0) + H'_{11}, \quad E_{3\mathrm{d}}(0) + H'_{33} \tag{11.135}$$

前者为二重简并, 对应于 ψ_1 与 ψ_2; 后者为三重简并, 对应于 ψ_3, ψ_4 以及 ψ_5. 能量一级微扰修正的正负性取决于 Λ 也就是 V_0 的正负性. 若 $V_0 > 0$, 则前者一级微扰修正为负, 后者一级微扰修正为正; 反之则相反. 所有这 5 个状态, 在一级微扰下, 彼此不发生混合, 都已经是合适的零级波函数.

11.17 对于氢原子的 s 态 ($l = 0$), 原子核 (质子) 与电子的超精细相互作用表示为 $H' = -\frac{8\pi}{3}\boldsymbol{\mu}_\mathrm{p}\cdot\boldsymbol{\mu}_\mathrm{e}\delta(\boldsymbol{r})$, $\boldsymbol{r}$ 是核和电子的相对距离, $\boldsymbol{\mu}_\mathrm{p} = g_\mathrm{p}\frac{e}{2m_\mathrm{p}c}\boldsymbol{s}_\mathrm{p}$(其中 $g_\mathrm{p} = 5.586$), $\boldsymbol{\mu}_\mathrm{e} = -2\frac{e}{2m_\mathrm{e}c}\boldsymbol{s}_\mathrm{e}$ 分别是质子与电子的磁矩, $\boldsymbol{s}_\mathrm{p}$ 和 $\boldsymbol{s}_\mathrm{e}$ 分别为它们的自旋. 试计算 H' 引起的氢原子基态的超精细分裂 (见图 11.3).

解 核磁矩与电子磁矩的相互作用项导致超精细结构能级分裂. 氢原子为质子与电子的相互作用系统. 氢原子基态轨道波函数为



图 11.3 氢原子基态的超精细分裂

$$\psi(r,\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\mathrm{e}^{-r/a} \tag{11.136}$$

其中 $a_0 = \hbar^2/(\mu e^2)$ 为 Bohr 半径. 考虑质子磁矩与电子磁矩的相互作用, 以 $\chi(\mathrm{e},\mathrm{p})$ 表示质子、电子的总自旋态, 则体系的总基态波函数可以表示成

$$\Psi_0 = \psi_{100}(\boldsymbol{r})\chi(\mathrm{e},\mathrm{p}) \tag{11.137}$$

质子与电子自旋均是 $\hbar/2$, 其自旋采用耦合表象有三重态 χ_{11}, χ_{10} 和 $\chi_{1,-1}$, 以及单态 χ_{00}. 以 F 表示质子电子体系总自旋平方的量子数, 即

$$(\boldsymbol{s}_\mathrm{p} + \boldsymbol{s}_\mathrm{e})^2 = F(F+1)\hbar^2 \tag{11.138}$$

因而

$$\boldsymbol{s}_\mathrm{p}\cdot\boldsymbol{s}_\mathrm{e} = \frac{1}{2}F(F+1)\hbar^2 - \frac{3\hbar^2}{4} \tag{11.139}$$

对于自旋三重态 χ_{11}, χ_{10} 和 $\chi_{1,-1}$, $F = 1$; 对于自旋单态 χ_{00}, $F = 0$. 这 4 种自旋态都是 $\boldsymbol{s}_\mathrm{p}\cdot\boldsymbol{s}_\mathrm{e}$ 的本征态, 对于三重态, $\boldsymbol{s}_\mathrm{p}\cdot\boldsymbol{s}_\mathrm{e} = \hbar^2/4$; 对于单态, $\boldsymbol{s}_\mathrm{p}\cdot\boldsymbol{s}_\mathrm{e} = -3\hbar^2/4$.

式 (11.137) 中质子电子自旋态采用耦合表象基矢, 其特点是微扰 H' 在自旋空间已经对角化. H' 在态 (11.137) 下的期望值就是基态能级的一级微扰修正, 即

$$\begin{aligned} E^{(1)} &= \langle\Psi_0|\,H'\,|\Psi_0\rangle = \frac{8\pi}{3}\frac{g_\mathrm{p}}{2}\frac{m_\mathrm{e}}{m_\mathrm{p}}\left(\frac{e}{m_\mathrm{e}c}\right)^2\langle\chi|\,\boldsymbol{s}_\mathrm{p}\cdot\boldsymbol{s}_\mathrm{e}\,|\chi\rangle\int|\psi_{100}(\boldsymbol{r})|^2\,\delta(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{x} \\ &= \frac{4\pi}{3}g_\mathrm{p}\frac{e^2}{m_\mathrm{e}m_\mathrm{p}c^2}\,|\psi_{100}(0)|^2\left[\frac{1}{2}F(F+1) - \frac{3}{4}\right]\hbar^2 \end{aligned} \tag{11.140}$$

由式 (11.136)

$$|\psi_{100}(0)|^2 = \frac{1}{\pi a_0^3} = \frac{1}{\pi}\left(\frac{\mu e^2}{\hbar^2}\right)^3 = \frac{1}{\pi}\left[\frac{m_\mathrm{e}m_\mathrm{p}e^2}{(m_\mathrm{e}+m_\mathrm{p})\,\hbar^2}\right]^3 \tag{11.141}$$

这样

$$E^{(1)}=\frac{4\pi}{3}g_{\mathrm{p}}\frac{m_{\mathrm{e}}m_{\mathrm{p}}^2}{(m_{\mathrm{e}}+m_{\mathrm{p}})^3}\left[\frac{1}{2}F(F+1)-\frac{3}{4}\right]\alpha^4m_{\mathrm{e}}c^2 \tag{11.142}$$

对于质子电子自旋单态 χ_{00}, $F=0$, 这时

$$E_{F=0}^{(1)}=-g_{\mathrm{p}}\frac{m_{\mathrm{e}}m_{\mathrm{p}}^2}{(m_{\mathrm{e}}+m_{\mathrm{p}})^3}\alpha^4m_{\mathrm{e}}c^2 \tag{11.143}$$

对于质子电子自旋三重态 χ_{11}, χ_{10} 和 $\chi_{1,-1}$, $F=1$, 这时

$$E_{F=1}^{(1)}=\frac{1}{3}g_{\mathrm{p}}\frac{m_{\mathrm{e}}m_{\mathrm{p}}^2}{(m_{\mathrm{e}}+m_{\mathrm{p}})^3}\alpha^4m_{\mathrm{e}}c^2 \tag{11.144}$$

亦即, 由于质子–电子间的“超精细相互作用”, 氢原子的基态能级分裂分为二, $F=1$ 者较高, $F=0$ 者较低, 裂距为

$$\Delta E=E_{F=1}^{(1)}-E_{F=0}^{(1)}=\frac{4}{3}g_{\mathrm{p}}\frac{m_{\mathrm{e}}m_{\mathrm{p}}^2}{(m_{\mathrm{e}}+m_{\mathrm{p}})^3}\alpha^4m_{\mathrm{e}}c^2\approx\frac{4}{3}g_{\mathrm{p}}\frac{m_{\mathrm{e}}}{m_{\mathrm{p}}}\alpha^4m_{\mathrm{e}}c^2=5.88\times10^{-6}\mathrm{eV} \tag{11.145}$$

可见氢原子超精细结构能级分裂的量级为在精细结构能级分裂大小的基础上再乘以因子 $m_{\mathrm{e}}/m_{\mathrm{p}}$, 约为其千分之一.

11.18 处于超精细结构基态 $(1\mathrm{s},F=0)$ 的氢原子, 置于均匀弱磁场 $\boldsymbol{B}$(沿 z 轴方向) 中, 相互作用势的主要部分为 $H'=-\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{e}}+\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{p}})=-B(\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{e}}+\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{p}})_z\approx-B\mu_{\mathrm{e}z}$ (因为 $\mu_{\mathrm{e}}\gg\mu_{\mathrm{p}}$). 计算能级移动 $E(B)$. 定义原子的磁化率 $\alpha_B=-\left(\dfrac{\partial^2E(B)}{\partial B^2}\right)_{B=0}$, 求出 α_B.

解 质子磁矩 μ_{p} 与电子磁矩 μ_{e} 比值为 $m_{\mathrm{e}}/m_{\mathrm{p}}$, 约千分之一, 因此 H' 中可以略去 μ_{p} 项. 这样 H' 可表示为

$$H'\approx-B\mu_{\mathrm{e}z}=B\mu_B\sigma_{\mathrm{e}z} \tag{11.146}$$

其中 $\mu_B=e\hbar/2m_{\mathrm{e}}c$ 是 Bohr 磁子, $\sigma_{\mathrm{e}z}$ 为电子自旋算符的 z 分量.

题 11.17 给出氢原子的超精细结构基态为

$$\Psi_{1\mathrm{s},F=0}=\psi_{100}(\boldsymbol{r})\chi_{00}(\mathrm{e},\mathrm{p}) \tag{11.147}$$

非简并. 能级的一级微扰修正等于 H' 的期望值

$$E_{1\mathrm{s},F=0}^{(1)}=\langle\Psi_{1\mathrm{s},F=0}|\,H'\,|\Psi_{1\mathrm{s},F=0}\rangle=B\mu_B\,\langle\chi_{00}|\,\sigma_{\mathrm{e}z}\,|\chi_{00}\rangle \tag{11.148}$$

式中用到了坐标空间波函数的归一性以及自旋单态的性质. 再由于

$$\sigma_{\mathrm{e}z}\chi_{00}=\sigma_{\mathrm{e}z}\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(\mathrm{e})\beta(\mathrm{p})-\beta(\mathrm{e})\alpha(\mathrm{p})]=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(\mathrm{e})\beta(\mathrm{p})+\beta(\mathrm{e})\alpha(\mathrm{p})]=\chi_{10} \tag{11.149}$$

能级的一级微扰修正

$$E_{1\mathrm{s},F=0}^{(1)}=B\mu_B\,\langle\chi_{00}|\,\sigma_{\mathrm{e}z}\,|\chi_{00}\rangle=B\mu_B\,\langle\chi_{00}|\,\chi_{10}\rangle=0 \tag{11.150}$$

若磁场 $\boldsymbol{B}$ 很弱, 它导致的能级修正远小于氢原子超精细结构能级分裂, 这时根据二级微扰计算考察近邻的另一超精细结构能级 $E_{1\mathrm{s},F=1}$ 导致的能级修正, 其他电子能级相距较远 (几个电子伏), 对二级微扰修正的贡献可以忽略不计.

题 11.17 给出氢原子的超精细结构能级 $E_{1s,F=1}$ 波函数为

$$\Psi_{1s,F=1}=\psi_{100}(\boldsymbol{r})\chi_{1M}(\mathrm{e},\mathrm{p}),\quad M=1,0,-1 \tag{11.151}$$

由于式 (11.149), 式 (11.151) 中, 能使微扰矩阵元 $\langle\Psi_{1s,F=1}|\,H'\,|\Psi_{1s,F=0}\rangle$ 不等于零的只有 $\psi_{100}\chi_{10}$, 该矩阵元为

$$\langle\psi_{100}\chi_{10}|\,H'\,|\Psi_{1s,F=1}\rangle=B\mu_B\,\langle\chi_{10}|\,\sigma_{ez}\,|\chi_{00}\rangle=B\mu_B\,\langle\chi_{10}|\,\chi_{10}\rangle=B\mu_B \tag{11.152}$$

由磁场导致的基态能级二级微扰修正为

$$E^{(2)}_{1s,F=0}=-\frac{(\mu_B B)^2}{E_{1s,F=1}-E_{1s,F=0}}=E(B) \tag{11.153}$$

因而磁化率为

$$\alpha_B=-\left(\frac{\partial^2 E(B)}{\partial B^2}\right)_{B=0}=\frac{2\mu_B^2}{E_{1s,F=1}-E_{1s,F=0}}$$

其中 Bohr 磁子 $\mu_B=5.79\times10^{-9}\mathrm{eV/G}$, 又题 11.17 给出加磁场以前超精细分裂为

$$E_{1s,F=1}-E_{1s,F=0}=5.88\times10^{-6}\mathrm{eV}$$

这样

$$\alpha_B\approx1.14\times10^{-11}\mathrm{eV/Gs^2}$$

说明 由于超精细结构能级分裂为 $5.88\times10^{-6}\mathrm{eV}$, 按非简并微扰适用条件, 上述计算当磁场大小在百 Gs 量级以内时成立.

11.19 在中心力场中的两个粒子, 均处于 s 态 ($l_1=l_2=0$) 粒子 1 自旋为 1, 内禀磁矩 $\boldsymbol{\mu}_1=-\mu\boldsymbol{s}_1$, 粒子 2 自旋为 1/2, 无内禀磁矩. 设两粒子有相互作用 $A\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2$, $A>0$. 此外还受到均匀外磁场 $\boldsymbol{B}$ 作用. 粒子轨道运动不考虑. (1)$\boldsymbol{B}=0$ 时, 求体系能级 (选择适当守恒量完全集!). (2) 磁场很强情况下 (略去 $A\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2$) 求体系能级. (3) 求体系能级的精确解. 并就强磁场和弱磁场情况给出近似公式, 和微扰论结果比较 (参阅钱伯初、曾谨言, 《量子力学习题精选与剖析》, 第二版, 上册, 8.39 题)

解 取 $\hbar=1$, 并取磁场方向为 z 轴. 两个粒子轨道角动量均为 0, 总角动量即总自旋 $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2$. 该两粒子体系的 Hamilton 量为

$$H=A\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2+B\mu s_{1z} \tag{11.154}$$

只与两个粒子的自旋自由度有关.

(1) $\boldsymbol{B}=0$ 时, Hamilton 量变为 $H=A\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2=\dfrac{1}{2}A\left[\boldsymbol{S}^2-\boldsymbol{s}_1^2-\boldsymbol{s}_2^2\right]$, 因而在粒子态空间中

$$\begin{aligned}&\frac{1}{2}A\left[S(S+1)-s_1(s_1+1)-s_2(s_2+1)\right]\\&=\frac{1}{2}A\left[S(S+1)-2-\frac{3}{4}\right]=\frac{1}{2}A\left[S(S+1)-\frac{11}{4}\right]\end{aligned} \tag{11.155}$$

其中 $S=1/2,3/2$ 为总自旋的量子数. 可见能级取决于 S, 而与 S_z 的取值无关. 能量本征态可以取为 $(\boldsymbol{S}^2,S_z)$ 的共同本征态, 记为 $|SS_z\rangle$. $S=1/2,3/2$ 对应体系的两个能级, 分别为

$$E_{1/2}=-A,\quad E_{3/2}=\frac{A}{2} \tag{11.156}$$

$E_{1/2}$ 能级 2 重简并, 2 个简并态分别对应 $S_z=\pm1/2$. $E_{3/2}$ 能级 4 重简并, 4 个简并态分别对应 $S_z=\pm1/2,\ \pm3/2$.

(2) 磁场很强情况下, 略去 $A\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2$, 则 Hamilton 量为

$$H\approx B\mu s_{1z} \tag{11.157}$$

能级取决于 s_{1z} 的本征值, 而与 s_{2z} 无关. 能量本征态可以取为 (s_{1z},s_{2z}) 的共同本征态, 记为 $|s_{1z}s_{2z}\rangle$. $s_{1z}=1,\ 0,\ -1$ 对应体系的三个能级, 分别为

$$E=\mu B,\quad 0,\quad -\mu B \tag{11.158}$$

每条能级都是二重简并, 简并态分别相应于 $s_{2z}=\pm1/2$.

(3) 现对体系能级作精确求解. 体系的能量只与两个粒子的自旋自由度有关, 相应的共有 6 个独立状态, 可以取为 $(\boldsymbol{S}^2,S_z)$ 的共同本征态 $|SS_z\rangle$ 或者 (s_{1z},s_{2z}) 的共同本征态 $|s_{1z}s_{2z}\rangle$. 对于前者, 两粒子体系的 Hamilton 量中的 $A\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2$ 是确定的, 如式 (11.156) 所给; 对于后者, 两粒子体系的 Hamilton 量中的 $B\mu s_{1z}$ 是确定的, 如式 (11.158) 所给. $\{|SS_z\rangle\}$ 与 $\{|s_{1z}s_{2z}\rangle\}$ 两套完备基矢通过 C.G. 系数联系, 即有

$$|s_{1z}s_{2z}\rangle=\sum_{SS_z}\langle SS_z|S_{1z}S_{2z}\rangle|SS_z\rangle=\sum_{SS_z}\langle s_{1z}s_{2z}|\ SS_z\rangle\,|SS_z\rangle \tag{11.159}$$

也就是

$$\begin{aligned}
&\left|1,\frac{1}{2}\right\rangle=\left|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle, && \left|1,-\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle+\sqrt{\frac{2}{3}}\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\\
&\left|0,\frac{1}{2}\right\rangle=\sqrt{\frac{2}{3}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle-\frac{1}{\sqrt{3}}\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle, && \left|0,-\frac{1}{2}\right\rangle=\sqrt{\frac{2}{3}}\left|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle+\frac{1}{\sqrt{3}}\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\\
&\left|-1,\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}\left|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle-\sqrt{\frac{2}{3}}\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle, && \left|-1,-\frac{1}{2}\right\rangle=\left|\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\right\rangle
\end{aligned} \tag{11.160}$$

根据式 (11.154)、式 (11.155) 和式 (11.160) 可以写出以 $\{|s_{1z}s_{2z}\rangle\}$ 为基矢 H 的矩阵元, 例如

$$\begin{aligned}
&\left\langle1,\frac{1}{2}\right|(A\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2+B\mu s_{1z})\left|1,\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{A}{2}+\mu B\\
&\left\langle1,-\frac{1}{2}\right|(A\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2+B\mu s_{1z})\left|1,-\frac{1}{2}\right\rangle=\left\langle1,-\frac{1}{2}\right|A\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2\left|1,-\frac{1}{2}\right\rangle+\mu B\\
&=\left[\frac{1}{\sqrt{3}}\left\langle\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right|+\sqrt{\frac{2}{3}}\left\langle\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right|\right]A\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2\left[\frac{1}{\sqrt{3}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle+\sqrt{\frac{2}{3}}\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\right]+\mu B\\
&=\frac{1}{3}\frac{A}{2}+\frac{2}{3}(-A)+\mu B=\mu B-\frac{A}{2}\\
&\left\langle1,-\frac{1}{2}\right|(A\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2+B\mu s_{1z})\left|0,\frac{1}{2}\right\rangle=\left\langle1,-\frac{1}{2}\right|A\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2\left|0,\frac{1}{2}\right\rangle\\
&=\left[\frac{1}{\sqrt{3}}\left\langle\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right|+\sqrt{\frac{2}{3}}\left\langle\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right|\right]A\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2\left[\sqrt{\frac{2}{3}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle-\frac{1}{\sqrt{3}}\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\right]\\
&=\frac{1}{\sqrt{3}}\sqrt{\frac{2}{3}}\frac{A}{2}-\sqrt{\frac{2}{3}}\frac{1}{\sqrt{3}}(-A)=\frac{A}{\sqrt{2}}
\end{aligned}$$

等. 将这些矩阵元的行与列均依次按照 $|1\rangle=\left|1,\frac{1}{2}\right\rangle$, $|2\rangle=\left|1,-\frac{1}{2}\right\rangle$, $|3\rangle=\left|0,\frac{1}{2}\right\rangle$, $|4\rangle=\left|0,-\frac{1}{2}\right\rangle$, $|5\rangle=\left|-1,\frac{1}{2}\right\rangle$, $|6\rangle=\left|-1,-\frac{1}{2}\right\rangle$ 的顺序排列, 写出 H 的矩阵形式如下:

$$H=\begin{pmatrix} \mu B+\frac{A}{2} & & & & & & & \\ & \mu B-\frac{A}{2} & \frac{A}{\sqrt{2}} & & & & & \\ & \frac{A}{\sqrt{2}} & 0 & & & & & \\ & & & 0 & \frac{A}{\sqrt{2}} & & & \\ & & & \frac{A}{\sqrt{2}} & -\mu B-\frac{A}{2} & & & \\ & & & & & -\mu B+\frac{A}{2} & & \end{pmatrix} \tag{11.161}$$

上式为一分块对角矩阵.

分块对角矩阵 (11.161) 左上角和右下角两个对角元先给出两个能量本征值, 记为

$$E_1=\mu B+\frac{A}{2} \tag{11.162}$$

$$E_6=-\mu B+\frac{A}{2} \tag{11.163}$$

将其余两个二维矩阵分别对角化, 即可得到其他四条能级. 由

$$\begin{vmatrix} \mu B-\frac{A}{2}-E & \frac{A}{\sqrt{2}} \\ \frac{A}{\sqrt{2}} & -E \end{vmatrix}=0$$

解得

$$E_{2,3}=\frac{1}{2}\left[\left(\mu B-\frac{A}{2}\right)\pm\sqrt{\left(\mu B-\frac{A}{2}\right)^2+2A^2}\right] \tag{11.164}$$

再由

$$\begin{vmatrix} -E & \frac{A}{\sqrt{2}} \\ \frac{A}{\sqrt{2}} & -\mu B-\frac{A}{2}-E \end{vmatrix}=0$$

解得

$$E_{4,5}=\frac{1}{2}\left[\left(-\mu B-\frac{A}{2}\right)\pm\sqrt{\left(\mu B+\frac{A}{2}\right)^2+2A^2}\right] \tag{11.165}$$

将上面式 (11.162)~(11.165) 的结果分别取 $B=0$ 和 $A=0$, 则分别给出第 (1) 和第 (2) 小题结果. 下面再讨论强磁场和弱磁场两种情形.

强磁场情形, $\mu B\gg A$, 式 (11.164)、式 (11.165) 按照小量 $A/\mu B$ 作展开, 得到

$$E_2\approx\mu B-\frac{A}{2}+\frac{A^2}{2\mu B} \tag{11.166a}$$

$$E_3\approx-\frac{A^2}{2\mu B} \tag{11.166b}$$

$$E_4\approx\frac{A^2}{2\mu B} \tag{11.166c}$$

$$E_5\approx-\mu B-\frac{A}{2}-\frac{A^2}{2\mu B} \tag{11.166d}$$

可以验证, 这些结果与按照二级微扰计算所得结果一致 (见附录 1).

弱磁场情形, $\mu B \ll A$, 式 (11.164)、式 (11.165) 按照小量 $\mu B/A$ 作展开, 得到

$$E_2 \approx \frac{A}{2} + \frac{1}{3}\mu B \tag{11.167a}$$

$$E_4 \approx \frac{A}{2} - \frac{1}{3}\mu B \tag{11.167b}$$

$$E_3 \approx -A + \frac{2}{3}\mu B \tag{11.167c}$$

$$E_5 \approx -A - \frac{2}{3}\mu B \tag{11.167d}$$

可以验证, 这些结果与简并态微扰论一级近似一致 (见附录 2).

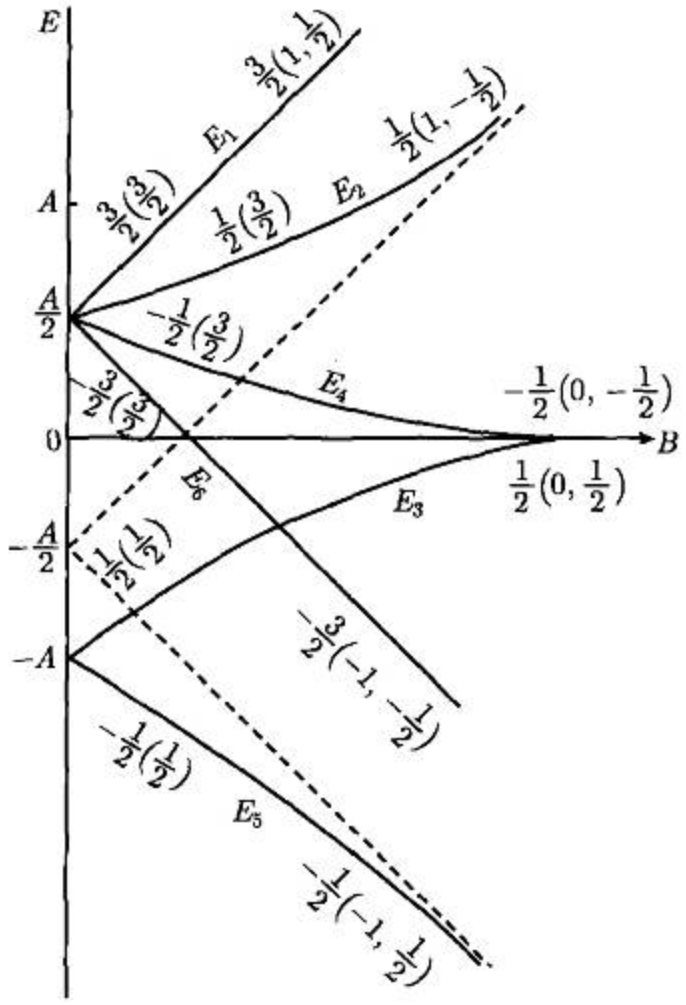

图 11.4 能级随磁场的变化. 在能级曲线的弱磁场区标出了量子数 $S_z(S)$, 在强磁场区标出了量子数 $S_z(s_{1z}, s_{2z})$. 括号外的 S_z 是好量子数, 括号内是近似量子数, 即波函数中占主要成分的项的量子数. E_1 和 E_6 能级曲线为直线, 所有量子数都是好量子数. (本图取自钱伯初、曾谨言, 《量子力学习题精选与剖析》, 第二版, 上册, 8.39 题)

讨论 在弱磁场条件下, 如忽略磁场的作用, 则 $H \to As_1 \cdot s_2$, 总自旋 $\boldsymbol{S}$ 为守恒量, s_1 和 s_2 则不守恒. 如取 $(\boldsymbol{S}^2, S_z)$ 为守恒量完全集, 则能量本征态由量子数 (S, S_z) 刻画, S 决定能级, 此即第 (1) 小题情况. 在强磁场条件下, 如忽略两粒子相互作用, 则 $H \to B\mu s_{1z}$, 这时 s_{1z}, s_{2z}, S_z 均为守恒量, 通常取 s_{1z}, s_{2z} 为守恒量完全集, 用它们的量子数 (本征值) 刻画能量本征态, s_{1z} 决定能级, 此即第 (2) 小题情况. 在一般情况下, 即 H 取式 (11.154) 时, 仅 S_z 为守恒量, s_{1z}, s_{2z} 及 $\boldsymbol{S}^2$ 均不守恒, 故一般来说, S_z 相同而 S(或 (s_{1z}, s_{2z})) 不同的状态有可能发生耦合而形成能量本征态, 此即第 (3) 小题情况. 但是, 当 $S_z = \pm 3/2$, S 必为 $\pm 3/2$, (s_{1z}, s_{2z}) 也只有唯一的取值, 故相应的能量本征态为 $(\boldsymbol{S}^2,\ S_z,\ s_{1z},\ s_{2z})$ 的共同本征态, 虽然 (s_{1z}, s_{2z}) 和 $\boldsymbol{S}^2$ 不对易. 能级 E_1 和 E_6 就是这种情况, 4 个 $(\boldsymbol{S}^2,\ S_z,\ s_{1z},\ s_{2z})$ 的本征值同时都是好量子数. 虽然 S_z 总是守恒量而其本征值为好量子数, 但在强磁场极限和弱磁场 (以至无磁场) 极限, 均出现能级对 S_z 的简并, 如所附的 "Zeeman 图" 11.4 所示.

附录 1 (强磁场情形的微扰计算) 此时 $H_0 = B\mu s_{1z}$, $H' = As_1 \cdot s_2$. 如第 (2) 小题, H_0 有 3 个本征值, 均为 2 重简并. 在 $|1\rangle = |1, 1/2\rangle$, $|2\rangle = |1, -1/2\rangle$ 的简并子空间中, $E_1^{(0)} = \mu B$, 而由式 (11.161), H' 在该简并子空间已经对角化, 因此 $|1\rangle$、$|2\rangle$ 已经是合适的零级波函数, 观察式 (11.161), H 从而 H' 的第一行、第一列的非对角矩阵元均为零, 因此 $|1\rangle$ 态不会有 H_0 其他的本征态混入, 从而 $E_1 = E_1^{(0)} + H'_{11} = \mu B + A/2$. 式 (11.161) 给出

$$H'_{23} = H'_{32} = \frac{A}{\sqrt{2}}$$

精确到二级微扰的能量

$$E_1 = E_1^{(0)} + H'_{22} + \frac{|H'_{32}|^2}{E_2^{(0)} - E_3^{(0)}} = \mu B - \frac{A}{2} + \frac{A^2}{2\mu B}$$

同样可计算 $E_{5,6}^{(0)} = -\mu B$ 的微扰修正, 而得到

$$E_2 \approx -\mu B - \frac{A}{2} - \frac{A^2}{2\mu B}$$

在相应于 $E_{3,4}^{(0)} = 0$ 的由 $|3\rangle = |0, 1/2\rangle$, $|4\rangle = |0, -1/2\rangle$ 的简并子空间中, H_0、H' 均为零矩阵, 因而该能级一级修正为零, 零级波函数尚不能确定. 观察式 (11.161), 可能会有 $|2\rangle$、$|5\rangle$ 的混入导致能级的改变. 设该能级准确到二级近似的能量为

$$E = E_3^{(0)} + E^{(1)} + E^{(2)}, \quad (E^{(1)} = 0) \tag{11.168}$$

H 的相应本征态为

$$|\psi\rangle = \left|\psi^{(0)}\right\rangle + \left|\psi^{(1)}\right\rangle + \left|\psi^{(2)}\right\rangle \tag{11.169}$$

零级波函数

$$\left|\psi^{(0)}\right\rangle = C_3 |3\rangle + C_4 |4\rangle \tag{11.170}$$

由于在简并子空间, H' 为零矩阵, 在作合适的相位约定以后, 波函数一级修正 $\psi^{(1)}$、二级修正 $\psi^{(2)}$ 中只含有 $|2\rangle$、$|5\rangle$ 成分, 按照非简并微扰论写出

$$\begin{aligned}\left|\psi^{(1)}\right\rangle &= \frac{1}{E_3^{(0)} - E_2^{(0)}} \langle 2|H'|\psi^{(0)}\rangle |2\rangle + \frac{1}{E_3^{(0)} - E_5^{(0)}} \langle 5|H'|\psi^{(0)}\rangle |5\rangle \\ &= \frac{H'_{23} C_3}{E_3^{(0)} - E_2^{(0)}} |2\rangle + \frac{H'_{54} C_4}{E_3^{(0)} - E_5^{(0)}} |5\rangle = -\frac{A}{\sqrt{2}\mu B} C_3 |2\rangle + \frac{A}{\sqrt{2}\mu B} C_4 |5\rangle\end{aligned} \tag{11.171}$$

关于 $|\psi\rangle$ 的 Schrödinger 方程的二阶方程给出

$$\left[H_0 - E_3^{(0)}\right] \left|\psi^{(2)}\right\rangle = \left[E^{(1)} - H'\right] \left|\psi^{(1)}\right\rangle + E^{(2)} \left|\psi^{(0)}\right\rangle \tag{11.172}$$

上式分别对于态 $|3\rangle$ 以及 $|4\rangle$ 取内积, 利用他们与 $\left|\psi^{(1)}\right\rangle$、$\left|\psi^{(2)}\right\rangle$ 的正交性以及式 (11.171) 得到

$$\left[-\frac{A^2}{2\mu B} - E^{(2)}\right] C_3 = 0 \tag{11.173a}$$

$$\left[\frac{A^2}{2\mu B} - E^{(2)}\right] C_4 = 0 \tag{11.173b}$$

上述关于 C_3、C_4 的方程组存在非零解的条件为

$$\begin{vmatrix} -\dfrac{A^2}{2\mu B} - E^{(2)} & 0 \\ 0 & \dfrac{A^2}{2\mu B} - E^{(2)} \end{vmatrix} = 0 \tag{11.174}$$

由上式解得

$$E^{(2)} = \pm \frac{A^2}{2\mu B} \tag{11.175}$$

综上可知, 精确到二级微扰, $E_{3,4}^{(0)} = 0$ 的二重简并能级变为

$$E_{3,4} = \pm \frac{A^2}{2\mu B} \tag{11.176}$$

分裂为 2. 以上微扰计算结果与通过精确求解所得结果 (11.166) 一致.

附录 2 (弱磁场情形的微扰计算) 此时 $H_0 = A\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2$, $H' = B\mu s_{1z}$. 如第 (1) 小题, H_0 的本征态为 $|SS_z\rangle$, 相应于 $S = 1/2, 3/2$ 两种取值, H_0 有 2 个本征值. 对于 $S = 1/2$, H_0 为 2 重简并, 2 个态如下给出

$$\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle=\sqrt{\frac{2}{3}}\left|1,-\frac{1}{2}\right\rangle-\frac{1}{\sqrt{3}}\left|0,\frac{1}{2}\right\rangle \tag{11.177a}$$

$$\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}\left|0,-\frac{1}{2}\right\rangle-\sqrt{\frac{2}{3}}\left|-1,\frac{1}{2}\right\rangle \tag{11.177b}$$

在该简并子空间

$$H'=\begin{pmatrix}\frac{2}{3}\mu B & 0\\ 0 & -\frac{2}{3}\mu B\end{pmatrix}$$

H' 已经对角化, 因此 $|1/2,1/2\rangle$、$|1/2,-1/2\rangle$ 都已经是合适的零级波函数, 按微扰论, H' 上述对角元就是能级一级修正. 因而, 准确到一级能级为

$$-A+\frac{2}{3}\mu B,\quad -A-\frac{2}{3}\mu B$$

对于 $S=3/2$, H_0 为 4 重简并, 根据式 (11.161), 其中 $|3/2,3/2\rangle$ 与 $|3/2,-3/2\rangle$ 已经是 H 的本征态, 其余 2 个态如下给出:

$$\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}\left|1,-\frac{1}{2}\right\rangle+\sqrt{\frac{2}{3}}\left|0,\frac{1}{2}\right\rangle \tag{11.178a}$$

$$\left|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle=\sqrt{\frac{2}{3}}\left|0,-\frac{1}{2}\right\rangle+\frac{1}{\sqrt{3}}\left|-1,\frac{1}{2}\right\rangle \tag{11.178b}$$

在该简并子空间

$$H'=\begin{pmatrix}\frac{1}{3}\mu B & 0\\ 0 & -\frac{1}{3}\mu B\end{pmatrix}$$

H' 已经对角化, 因此 $|3/2,1/2\rangle$、$|3/2,-1/2\rangle$ 都已经是合适的零级波函数, 按微扰论, H' 上述对角元就是能级一级修正. 因而, 准确到一级能级为

$$\frac{A}{2}+\frac{1}{3}\mu B,\quad \frac{A}{2}-\frac{1}{3}\mu B$$

以上微扰计算结果与通过精确求解所得结果 (11.167) 一致.

11.20 设在 H_0 表象中, H 的矩阵为

$$H=\begin{pmatrix}E_1^{(0)} & 0 & a\\ 0 & E_2^{(0)} & b\\ a^* & b^* & E_3^{(0)}\end{pmatrix}$$

其中 $E_i^{(0)}(i=1,2,3)$ 为两两不等的实数, 且 $|a|$, $|b|$ 比 $|E_i^{(0)}-E_j^{(0)}|$ $(i\neq j)$ 小得多, 试用微扰论求能量 (要求准确到二级近似).

解 Hamilton 量记为 $H=H_0+H'$, 其中

$$H_0=\begin{pmatrix}E_1^{(0)} & 0 & 0\\ 0 & E_2^{(0)} & 0\\ 0 & 0 & E_3^{(0)}\end{pmatrix},H'=\begin{pmatrix}0 & 0 & a\\ 0 & 0 & b\\ a^* & b^* & 0\end{pmatrix} \tag{11.179}$$

按照非简并微扰论公式

$$E_n=E_n^{(0)}+H'_{nn}+\sum_{m\neq n}\frac{|H'_{mn}|^2}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}},\quad (m,n=1,2,3) \tag{11.180}$$

将式 (11.179) 所给各 H'_{mn} 矩阵元代入式 (11.180) 得

$$E_1 = E_1^{(0)} + H'_{11} + \frac{|H'_{21}|^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} + \frac{|H'_{31}|^2}{E_1^{(0)} - E_3^{(0)}} = E_1^{(0)} + \frac{|a|^2}{E_1^{(0)} - E_3^{(0)}}$$

$$E_2 = E_2^{(0)} + H'_{22} + \frac{|H'_{12}|^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} + \frac{|H'_{32}|^2}{E_2^{(0)} - E_3^{(0)}} = E_2^{(0)} + \frac{|b|^2}{E_2^{(0)} - E_3^{(0)}}$$

$$E_3 = E_3^{(0)} + H'_{33} + \frac{|H'_{13}|^2}{E_3^{(0)} - E_1^{(0)}} + \frac{|H'_{23}|^2}{E_3^{(0)} - E_2^{(0)}} = E_3^{(0)} + \frac{|a|^2}{E_3^{(0)} - E_1^{(0)}} + \frac{|b|^2}{E_3^{(0)} - E_2^{(0)}}$$

若 $E_i^{(0)}(i = 1, 2, 3)$ 中有相等的情况, 则需采用简并微扰的做法.

11.21 设 $H = H_0 + H'$, 其中 H_0 与 H' 在 H_0 表象中的矩阵表示为

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1^{(0)} & 0 \\ 0 & E_2^{(0)} \end{pmatrix}, \quad H' = \begin{pmatrix} a & b \\ b & a \end{pmatrix} \tag{11.181}$$

其中 a, b 为实的常数量. 试用微扰论求能级修正 (准到二级近似), 并与严格解 (把 H 矩阵对角化) 比较.

解 根据非简并微扰论, 一级能量修正量是 H'_{kk}, 即有

$$E_1^{(1)} = E_2^{(1)} = a$$

又二级修正能量公式是

$$E_k^{(2)} = \sum_{n \neq k} \frac{|H'_{nk}|^2}{E_k^{(0)} - E_n^{(0)}}$$

有关矩阵元 H'_{nk} 已经直接由式 (11.181) 中 H' 的矩阵给出. 这样我们可写出两个能级的能量 (正确到二级修正量) 如下:

$$\begin{aligned} E_1 &= E_1^{(0)} + a + \frac{b^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \\ E_2 &= E_2^{(0)} + a + \frac{b^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} = E_2^{(0)} + a - \frac{b^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \end{aligned} \tag{11.182}$$

若 $E_1^{(0)} < E_2^{(0)}$, 则 $E_1^{(2)} < 0 < E_2^{(2)}$, 即二级修正使两能级分得更开.

下面对问题进行严格求解. 设 Hamilton 量 H 具有本征矢 $(C_1, C_2)^T$, 本征值是 E^*, 本征方程为

$$\begin{pmatrix} E_1^{(0)} + a & b \\ b & E_2^{(0)} + a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = E^* \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} \tag{11.183}$$

展开后得如下线性方程组

$$\begin{aligned} (E_1^{(0)} + a)C_1 + bC_2 &= E^* C_1, \\ bC_1 + (E_2^{(0)} + a)C_2 &= E^* C_2 \end{aligned} \tag{11.184}$$

式 (11.184) 为关于 C_1、C_2 的二阶线性方程组, 它有非平凡解的条件是其系数行列式为零, 即得下列久期方程式

$$\begin{vmatrix} E_1^{(0)} + a - E^* & b \\ b & E_2^{(0)} + a - E^* \end{vmatrix} = 0$$

也就是 $(E_1^{(0)} + a - E^*)(E_2^{(0)} + a - E^*) - b^2 = 0$, 解之即得

$$E^* = a + \frac{E_1^{(0)} + E_2^{(0)}}{2} \mp \sqrt{\frac{\left(E_1^{(0)} - E_2^{(0)}\right)^2}{2} + b^2} \tag{11.185a}$$

b 是小量, 式 (11.185a) 可写为

$$E^* = a + \frac{E_1^{(0)} + E_2^{(0)}}{2} \mp \frac{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}}{2} \sqrt{1 + \frac{4b^2}{\left(E_1^{(0)} - E_2^{(0)}\right)^2}} \tag{11.185b}$$

式 (11.185b) 按小量 b 作级数展开, 得到体系能量的两个本征值如下

$$\begin{aligned} E_1^* &= E_1^{(0)} + a + \frac{b^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} - \frac{b^4}{\left(E_1^{(0)} - E_2^{(0)}\right)^3} + \cdots \\ E_2^* &= E_2^{(0)} + a + \frac{b^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} - \frac{b^4}{\left(E_2^{(0)} - E_1^{(0)}\right)^3} + \cdots \end{aligned} \tag{11.186}$$

上面展开式各项至小量 b 的平方项与微扰计算的式 (11.182) 结果都相同. 因而其后面的 b^4 项为微扰计算的误差估计

$$\Delta E_1 = |E_1^* - E_1| \sim \frac{b^4}{\left|E_1^{(0)} - E_2^{(0)}\right|^3}, \quad \Delta E_2 = |E_2^* - E_2| \sim \frac{b^4}{\left|E_1^{(0)} - E_2^{(0)}\right|^3}$$

11.22 一体系在无微扰时有两条能级, 其中一条是二重简并, 在 H_0 表象中

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1^{(0)} & 0 & 0 \\ 0 & E_1^{(0)} & 0 \\ 0 & 0 & E_2^{(0)} \end{pmatrix} \tag{11.187}$$

其中 $E_2^{(0)} > E_1^{(0)}$. 在计及微扰后, Hamilton 量表示为

$$H = \begin{pmatrix} E_1^{(0)} & 0 & a \\ 0 & E_1^{(0)} & b \\ a^* & b^* & E_2^{(0)} \end{pmatrix} \tag{11.188}$$

(1) 用微扰论求 H 本征值, 准到二级近似. (2) 把 H 严格对角化, 求 H 的精确的本征值, 然后进行比较.

解 (1) 根据题设的式 (11.187)、式 (11.188), 写出 Hamilton 量微扰项

$$H' = \begin{pmatrix} 0 & 0 & a \\ 0 & 0 & b \\ a^* & b^* & 0 \end{pmatrix} \tag{11.189}$$

以 $\psi_{1\alpha}^{(0)} \equiv \psi_\alpha$、$\psi_{1\beta}^{(0)} \equiv \psi_\beta$ 以及 $\psi_2^{(0)}$ 表示 H_0 的正交归一化本征函数, 前二者相应于能级 $E_1^{(0)}$, 后者相应于 $E_2^{(0)}$. 根据式 (11.189) 可知微扰矩阵元为

$$\begin{aligned} &H'_{\alpha\alpha} = H'_{\beta\beta} = H'_{\alpha\beta} = 0 \\ &H'_{\alpha 2} = H'^*_{2\alpha} = a, \ H'_{\beta 2} = H'^*_{2\beta} = b \end{aligned} \tag{11.190}$$

能级 $E_2^{(0)}$ 无简并, 可按非简并态微扰论计算, 利用题 11.20 结果直接写出

$$E_2 = E_2^{(0)} + \frac{a^2 + b^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} \tag{11.191}$$

能级 $E_1^{(0)}$ 为 2 重简并. 按简并微扰论, 一般情况下在简并子空间通过将 H' 对角化确定能级一级修正以及确定合适的零级波函数. 根据式 (11.190), 在该简并子空间, H' 为零矩阵, 因而该能级一级修正为零, 零级波函数尚不能确定. 设该能级准确到二级近似的能量为

$$E_1 = E_1^{(0)} + E_1^{(1)} + E_1^{(2)}, \quad (E_1^{(1)} = 0) \tag{11.192}$$

H 的相应本征态为

$$\psi_1 = \psi^{(0)} + \psi^{(1)} + \psi^{(2)} \tag{11.193}$$

零级波函数

$$\psi^{(0)} = C_\alpha \psi_\alpha + C_\beta \psi_\beta \tag{11.194}$$

由于在简并子空间, H' 为零矩阵, 在作合适的相位约定以后, 波函数一级修正 $\psi^{(1)}$、二级修正 $\psi^{(2)}$ 中只含有 $E_2^{(0)}$ 能级的 $\psi_2^{(0)}$ 成分, 按照非简并微扰论写出

$$\psi^{(1)} = \frac{1}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \langle \psi_2^{(0)} | H' | \psi^{(0)} \rangle \psi_2^{(0)} = \frac{H'_{2\alpha} C_\alpha + H'_{2\beta} C_\beta}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \psi_2^{(0)} = \frac{a C_\alpha + b C_\beta}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \psi_2^{(0)} = C_1 \psi_2^{(0)} \tag{11.195}$$

关于 ψ_1 的 Schrödinger 方程的二阶方程给出

$$\left[H_0 - E_1^{(0)} \right] \psi^{(2)} = \left[E_1^{(1)} - H' \right] \psi^{(1)} + E_1^{(2)} \psi^{(0)} \tag{11.196}$$

上式分别对于态 ψ_α 以及 ψ_β 取内积, 利用他们与 $\psi^{(1)}$、$\psi^{(2)}$ 的正交性以及式 (11.195) 得到

$$\left[\frac{|a|^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} - E_1^{(2)} \right] C_\alpha + \frac{a b^*}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} C_\beta = 0 \tag{11.197a}$$

$$\frac{b a^*}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} C_\alpha + \left[\frac{|b|^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} - E_1^{(2)} \right] C_\beta = 0 \tag{11.197b}$$

上述关于 C_α、C_β 的方程组存在非零解的条件为

$$\begin{vmatrix} \dfrac{|a|^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} - E_1^{(2)} & \dfrac{a b^*}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \\ \dfrac{b a^*}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} & \dfrac{|b|^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} - E_1^{(2)} \end{vmatrix} = 0 \tag{11.198}$$

由上式解得

$$E_1^{(2)} = 0, \ \frac{|a|^2 + |b|^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} \tag{11.199}$$

精确到二级微扰, 二重简并能级变为

$$E_1 = E_1^{(0)}, \ E_1^{(0)} + \frac{|a|^2 + |b|^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} \tag{11.200}$$

二重简并能级 $E_1^{(0)}$ 分裂为 2. 若将式 (11.199) 给出的 $E_1^{(2)}$ 代入式 (11.197), 即可以确定 2 个零级波函数 $\psi^{(0)}$. 在本题的情况下, 零级简并能级的零级波函数是和能量二级修正同时确定的, 和一般的简并微扰论不同①.

① 关于 2 重简并能级的微扰修正的一般讨论, 可见钱伯初, 曾谨言, 量子力学习题精选与剖析 [M], 第三版, 科学出版社, 2008 年, p. 290~295.

(2) H 的精确本征值由下式决定

$$\det(H-\lambda)=\begin{vmatrix} E_1^{(0)}-\lambda & 0 & a \\ 0 & E_1^{(0)}-\lambda & b \\ a^* & b^* & E_2^{(0)}-\lambda \end{vmatrix}=0 \tag{11.201}$$

上述行列式按照第一行展开得

$$\left(E_1^{(0)}-\lambda\right)^2\left(E_2^{(0)}-\lambda\right)-\left(|a|^2+|b|^2\right)\left(E_1^{(0)}-\lambda\right)=0$$

也就是

$$\left(\lambda-E_1^{(0)}\right)\left[\lambda^2-\left(E_1^{(0)}+E_2^{(0)}\right)\lambda+E_1^{(0)}E_2^{(0)}-|a|^2-|b|^2\right]=0$$

这样求得 H 的三个本征值分别为

$$\lambda_1=E_1^{(0)},\quad \lambda_\pm=\frac{1}{2}(E_1^{(0)}+E_2^{(0)})\pm\frac{1}{2}(E_1^{(0)}-E_2^{(0)})\left[1+\frac{4(|a|^2+|b|^2)}{(E_1^{(0)}-E_2^{(0)})^2}\right]^{1/2}$$

对于 $\lambda_\pm$ 作展开, 保留到 a、b 的二次项, 即得

$$\lambda_1=E_1^{(0)},\quad \lambda_+=E_1^{(0)}+\frac{|a|^2+|b|^2}{E_2^{(0)}-E_1^{(0)}},\quad \lambda_-=E_2^{(0)}+\frac{|a|^2+|b|^2}{E_2^{(0)}-E_1^{(0)}}$$

上式结果和微扰论相应结果式 (11.191)、式 (11.200) 一致.

11.23 设在 H_0 表象中, H_0 的矩阵表示为

$$H_0=\begin{pmatrix} 2\varepsilon_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 2\varepsilon_2 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 2\varepsilon_3 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

是 $n\times n$ 矩阵, $\varepsilon_i\neq\varepsilon_j$. 又设微扰 H' 为

$$H'=\begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 & \cdots \\ -1 & -1 & -1 & \cdots \\ -1 & -1 & -1 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

即所有矩阵元均为 -1. 求 $H=H_0+H'$ 的本征值与本征函数.

提示 久期方程为

$$\begin{vmatrix} \lambda_1+1 & 1 & 1 & \cdots \\ 1 & \lambda_2+1 & 1 & \cdots \\ 1 & 1 & \lambda_3+1 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix}=0$$

其中 $\lambda_i=E-2\varepsilon_i(i=1,2,\cdots,n)$, 化简后得

$$\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{\lambda_i}+1=0$$

即

$$\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{E-2\varepsilon_i}+1=0$$

用图解法或数字计算求 H 本征值 E 是很方便的.

解 按题设, 加微扰以后, 体系的 Hamilton 量为

$$H=H_0+H'=\begin{pmatrix}2\varepsilon_1-1 & -1 & -1 & \cdots\\ -1 & 2\varepsilon_2-1 & -1 & \cdots\\ -1 & -1 & 2\varepsilon_3-1 & \cdots\\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots\end{pmatrix}$$

H 的本征方程为 $H\psi=E\psi$, 设本征态表示为 $\psi=(c_1,c_2,\cdots,c_n)^T$

$$\begin{pmatrix}2\varepsilon_1-1 & -1 & -1 & \cdots\\ -1 & 2\varepsilon_2-1 & -1 & \cdots\\ -1 & -1 & 2\varepsilon_3-1 & \cdots\\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1\\ c_2\\ c_3\\ \cdots\end{pmatrix}=E\begin{pmatrix}c_1\\ c_2\\ c_3\\ \vdots\end{pmatrix}\tag{11.202}$$

或者

$$\begin{pmatrix}\lambda_1+1 & 1 & 1 & \cdots\\ 1 & \lambda_2+1 & 1 & \cdots\\ 1 & 1 & \lambda_3+1 & \cdots\\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1\\ c_2\\ c_3\\ \vdots\end{pmatrix}=0\tag{11.202'}$$

其中 $\lambda_i=E-2\varepsilon_i$ $(i=1,2,\cdots,n)$. 上式存在非零解条件为

$$\begin{vmatrix}\lambda_1+1 & 1 & 1 & \cdots\\ 1 & \lambda_2+1 & 1 & \cdots\\ 1 & 1 & \lambda_3+1 & \cdots\\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots\end{vmatrix}=0\tag{11.203}$$

此式称为久期方程.

根据本题附录, 式 (11.203) 可以化简成

$$\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{\lambda_i}+1=0\tag{11.204}$$

也就是

$$\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{E-2\varepsilon_i}+1=0\tag{11.204'}$$

式 (11.204') 可化为关于 E 的 n 次常系数代数方程, 当 $n\geqslant 5$, 一般情况下没有代数解 (Abel 定理). 我们先对该式作些定性讨论. 题给各 $\varepsilon_i(i=1,2\cdots,n)$ 两两不等, 不妨设

$$\varepsilon_1<\varepsilon_2<\cdots<\varepsilon_n$$

为方便, 令

$$f(E)=\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{E-2\varepsilon_i}+1\tag{11.205}$$

则 $2\varepsilon_i(i=1,2\cdots,n)$ 是函数 $f(E)$ 的 n 个 ∞ 间断点, 在这些点以外 $f(E)$ 连续. 参考图 11.5, 该图为 $n=5$ 也就是 H_0 有 5 个不相等的本征值即 $\varepsilon_i(i=1,2,3,4,5)$ 的情况, 其中虚线与横轴的交点所在位置即各个 $2\varepsilon_i$.

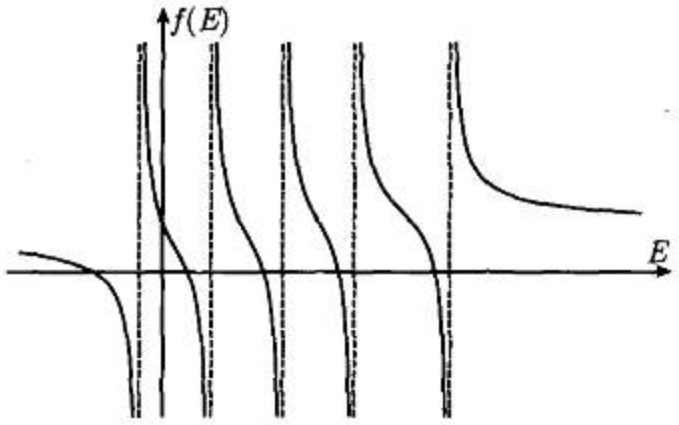

图 11.5 函数 $f(E)$ 的曲线
(有 5 个不相等 ε_i 的情况)

考察函数 $f(E)$. 取 $E=-\infty$, 则 $f=1$; 令 $E=\varepsilon_1-0^+$, 则 $f\to-\infty$, 根据连续函数中值定理, 在 $-\infty<E<2\varepsilon_1$ 区间一定存在一个 E 使得 $f(E)=0$. 取 $1\leqslant i\leqslant(n-1)$, 在 $2\varepsilon_i<E<2\varepsilon_{i+1}$ 区间 $f(E)$ 连续, 而 $f(2\varepsilon_i+0^+)\to\infty$, $f(2\varepsilon_{i+1}-0^+)\to-\infty$, 故根据连续函数中值定理, 在 $2\varepsilon_i<E<2\varepsilon_{i+1}$ 区间一定存在一个 E 使得 $f(E)=0$. $f(E)=0$ 可化为关于 E 的 n 次常系数代数方程, 根据代数学基本定理 $f(E)=0$ 有 n 个复根, 但根据上面分析 $f(E)=0$ 在 $-\infty<E<2\varepsilon_n$ 范围由 $2\varepsilon_i[i=1,2\cdots,(n-1)]$ 分割的 n 个没有交集的开区间上, 每个区间 $f(E)=0$ 均有一个根. 因此 $f(E)=0$ 的根都是实根, 且分别位于前述的 n 个开区间上, 每个区间一个根. 这 n 个根记为 $E_k(k=1,2,\cdots)$, 且有

$$-\infty<E_1<2\varepsilon_1,\quad 2\varepsilon_1<E_2<2\varepsilon_2,\cdots,2\varepsilon_k<E_{k+1}<2\varepsilon_{k+1},\cdots,2\varepsilon_{n-1}<E_n<2\varepsilon_n \tag{11.206}$$

$E_k(k=1,2,\cdots,n)$ 的进一步计算一般需要采用近似办法, 如用图解法或数字计算. 确定各 E_k 以后, 再分别将其代入式 (11.202) 或者式 (11.202′), 得到 n 次线性方程组,

$$\begin{aligned}
(\lambda_1+1)\,c_1+c_2+c_3+\cdots&=0\\
c_1+(\lambda_2+1)\,c_2+c_3+\cdots&=0\\
c_1+c_2+(\lambda_3+1)\,c_3+\cdots&=0\\
&\vdots
\end{aligned}$$

每相邻两式相减得

$$\lambda_1c_1=\lambda_2c_2=\lambda_3c_3=\cdots=\lambda_nc_n$$

上式加上归一化条件 $1=\psi_k^\dagger\psi_k=c_1^*c_1+c_2^*c_2+\cdots+c_n^*c_n$, 即可解得 E_k 对应的本征态为

$$\psi_k=\left[\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{(E_k-2\varepsilon_i)^2}\right]^{-1/2}\begin{pmatrix}\dfrac{1}{E_k-2\varepsilon_1}\\[2ex]\dfrac{1}{E_k-2\varepsilon_2}\\[2ex]\vdots\\[2ex]\dfrac{1}{E_k-2\varepsilon_n}\end{pmatrix}. \tag{11.207}$$

附录 [从式 (11.203) 到式 (11.204) 的推导]将式 11.203) 明显写出, 即

$$\begin{vmatrix}1+x_1 & 1 & 1 & \cdots\\ 1 & 1+x_2 & 1 & \cdots\\ 1 & 1 & 1+x_3 & \cdots\\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots\end{vmatrix}=0 \tag{11.208}$$

令 $\Delta(n)$ 表示形如上式的 n 阶行列式, $\Delta(n-1)$ 表示 $\Delta(n)$ 矩阵的第一个元素对应的 $(n-1)$ 阶子行列式, 即

$$\Delta(n)=\begin{vmatrix} 1+x_1 & 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 1+x_2 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 1 & 1+x_3 & 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & 1 & \cdots & 1+x_n \end{vmatrix} \tag{11.209}$$

$$\Delta(n-1)=\begin{vmatrix} 1+x_2 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 1+x_3 & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & \cdots & 1+x_n \end{vmatrix}$$

根据行列式的性质, $\Delta(n)$ 中第一行减第二行, 然后按照第一行展开, 并将此过程重复进行, 得

$$\Delta(n)=\begin{vmatrix} x_1 & -x_2 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 1+x_2 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 1 & 1+x_3 & 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & 1 & \cdots & 1+x_n \end{vmatrix}$$

$$=x_1\Delta(n-1)+x_2\begin{vmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 1+x_3 & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & \cdots & 1+x_n \end{vmatrix}=x_1\Delta(n-1)+x_2\begin{vmatrix} 0 & -x_3 & \cdots & 0 \\ 1 & 1+x_3 & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & \cdots & 1+x_n \end{vmatrix}$$

$$=x_1\Delta(n-1)+x_2x_3\begin{vmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 1+x_4 & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & \cdots & 1+x_n \end{vmatrix}=\cdots=x_1\Delta(n-1)+x_2x_3\cdots x_n$$

也就是

$$\frac{\Delta(n)}{x_1x_2\cdots x_n}=\frac{\Delta(n-1)}{x_2x_3\cdots x_n}+\frac{1}{x_1}$$

利用上式递推, 可得

$$\frac{\Delta(n)}{x_1x_2\cdots x_n}=\frac{\Delta(n-1)}{x_2x_3\cdots x_n}+\frac{1}{x_1}=\frac{\Delta(n-2)}{x_3x_4\cdots x_n}+\frac{1}{x_1}+\frac{1}{x_2}=\cdots$$
$$=\frac{\Delta(2)}{x_{n-1}x_n}+\frac{1}{x_1}+\frac{1}{x_2}+\cdots+\frac{1}{x_{n-2}}$$

其中

$$\Delta(2)=\begin{vmatrix} 1+x_{n-1} & 1 \\ 1 & 1+x_n \end{vmatrix}=x_{n-1}+x_n+x_{n-1}x_n$$

因而

$$\frac{\Delta(n)}{x_1x_2\cdots x_n}=1+\frac{1}{x_1}+\frac{1}{x_2}+\cdots+\frac{1}{x_n}$$

令 n 包括全部能级编号, 并按照式 (11.208) 令 $\Delta(n)=0$, 由上式即得

$$1+\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{x_i}=0 \tag{11.210}$$

上式 $x\to\lambda$, 即式 (11.204).

11.24 设 H 的矩阵表示式为

$$H=\begin{pmatrix} 2\varepsilon_1-1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 2\varepsilon_2-1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 2\varepsilon_3-1 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & 2\varepsilon_4-1 \end{pmatrix}$$

利用上题结果及微扰论, 计算 H 的本征值.

提示 试选

$$H'=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

试问 $H_0=H-H'=?$

解 按照提示 H 分为 H_0 与 H', 而

$$H_0=\begin{pmatrix} 2\varepsilon_1-1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 2\varepsilon_2-1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 2\varepsilon_3-1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 2\varepsilon_4-1 \end{pmatrix},\quad H'=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{11.211}$$

假设 ε_1, ε_2, ε_3 与 ε_4 两两不等, 根据题 11.23 的结果, 式 (11.211) 中 H_0 的本征值 $E^{(0)}$ 由下式决定

$$\frac{1}{E^{(0)}-2\varepsilon_1}+\frac{1}{E^{(0)}-2\varepsilon_2}+\frac{1}{E^{(0)}-2\varepsilon_3}+\frac{1}{E^{(0)}-2\varepsilon_4}+1=0 \tag{11.212}$$

不妨设

$$\varepsilon_1<\varepsilon_2<\varepsilon_3<\varepsilon_4$$

则根据题 11.23 的讨论, H_0 的 4 个本征值 $E_k^{(0)}(k=1,2,3,4)$ 分别位于

$$-\infty<E_1^{(0)}<2\varepsilon_1,\quad 2\varepsilon_1<E_2^{(0)}<2\varepsilon_2,\quad 2\varepsilon_2<E_3^{(0)}<2\varepsilon_3,\quad 2\varepsilon_3<E_4^{(0)}<2\varepsilon_4 \tag{11.213}$$

对 4 个本征值 $E_k^{(0)}(k=1,2,3,4)$ 的求解可采用 4 次代数方程求根公式, 因其表达式冗长, 这里略去. 根据题 11.23 的结果, 相应于 $E_k^{(0)}(k=1,2,3,4)$ 的本征态为

$$\psi_k^{(0)}=\left[\sum_{i=1}^{4}\frac{1}{\left(E_k^{(0)}-2\varepsilon_i\right)^2}\right]^{-1/2}\begin{pmatrix} \dfrac{1}{E_k^{(0)}-2\varepsilon_1} \\ \dfrac{1}{E_k^{(0)}-2\varepsilon_2} \\ \dfrac{1}{E_k^{(0)}-2\varepsilon_3} \\ \dfrac{1}{E_k^{(0)}-2\varepsilon_4} \end{pmatrix} \tag{11.214}$$

上述 $E_k^{(0)}$、$\psi_k^{(0)}(k=1,2,3,4)$ 分别是 H 的零级能量和零级波函数.

按非简并微扰论, 能量一级修正为

$$E_k^{(1)}=\langle\psi_k^{(0)}|H'|\psi_k^{(0)}\rangle$$

代入式 (11.214) 计算得

$$E_k^{(1)} = \left[\sum_{i=1}^{4} \frac{1}{\left(E_k^{(0)} - 2\varepsilon_i\right)^2}\right]^{-1} \frac{2}{\left(E_k^{(0)} - 2\varepsilon_3\right)\left(E_k^{(0)} - 2\varepsilon_4\right)} \tag{11.215}$$

由于式 (11.213), $E_1^{(1)}$、$E_2^{(1)}$ 及 $E_3^{(1)}$ 为正, $E_4^{(1)}$ 为负, $E_1^{(1)}$ 与 $E_2^{(1)}$ 量级小于 $E_3^{(1)}$ 及 $|E_4^{(1)}|$. 若准确到一阶微扰, 能量本征值取为

$$E_k = E_k^{(0)} + \left[\sum_{i=1}^{4} \frac{1}{\left(E_k^{(0)} - 2\varepsilon_i\right)^2}\right]^{-1} \frac{2}{\left(E_k^{(0)} - 2\varepsilon_3\right)\left(E_k^{(0)} - 2\varepsilon_4\right)} \tag{11.216}$$

第 12 章　量 子 跃 迁

12.1　设体系的能量本征态和本征值分别记为 ψ_n 和 $E_n(n=0,1,2,\cdots)$, 初始时刻 $(t=0)$ 体系处于基态 ψ_0, $t\geqslant 0$ 后, 体系受到微扰 $H'=F(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\frac{t}{\tau}}\theta(t)$ 作用, 试用一级微扰近似计算在足够长时间后 $(t/\tau\gg 1)$ 时体系激发到其某一激发态 ψ_n 态的概率.

解　采用一阶含时微扰论计算, 在 t 时刻跃迁到 ψ_n 的跃迁振幅为

$$C_{0\to n}(t)=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^t\langle\psi_n|\,H'\,|0\rangle\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{n0}t'}\mathrm{d}t' \tag{12.1}$$

其中 $\omega_{n0}=\dfrac{E_n-E_0}{\hbar}$, 代入题给微扰 H' 的表达式

$$\begin{aligned}C_{0\to n}(t)&=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^t\langle\psi_n|\,F\,|0\rangle\,\mathrm{e}^{-\frac{t'}{\tau}}\theta(t')\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{n0}t'}\mathrm{d}t'\\&=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\psi_n|\,F\,|0\rangle\int_0^t\mathrm{e}^{-\frac{t'}{\tau}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{n0}t'}\mathrm{d}t'=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\psi_n|\,F\,|0\rangle\,\frac{1-\mathrm{e}^{-\frac{t}{\tau}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{n0}t}}{\frac{1}{\tau}-\mathrm{i}\omega_{n0}}\end{aligned} \tag{12.2}$$

因而 t 时刻跃迁到 ψ_n 的概率为

$$P_{0\to n}(t)=\frac{|\langle\psi_n|\,F\,|0\rangle|^2}{\hbar^2}\left|\frac{1-\mathrm{e}^{-\frac{t}{\tau}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{n0}t}}{\frac{1}{\tau}-\mathrm{i}\omega_{n0}}\right|^2 \tag{12.3}$$

注意到上式中的指数衰减因子, 取 $t\gg\tau$ 得所求的跃迁概率为

$$P_{0\to n}=\frac{\tau^2}{\hbar^2}\frac{|\langle\psi_n|\,F\,|0\rangle|^2}{(1+\tau^2\omega_{n0}^2)} \tag{12.4}$$

按照含时微扰论, 一级微扰近似成立条件, $P_{0\to n}\ll 1$.

12.2　电荷为 q、质量为 μ 的粒子, 在其平衡位置附近做一维简谐运动 (振动频率为 ω_0), 在光的照射下发生跃迁. 入射光能量密度为 $\rho(\omega)$, 波长较长. (a) 试求跃迁选择定则; (b) 设粒子原来处于基态, 试求它每秒跃迁到第一激发态的概率.

解　非相对论带电粒子受光的照射, 所受的磁场力远小于电场力, 只需要考虑入射光的电场作用, 如果入射光波长远大于该粒子运动范围, 则对于该粒子来说电场可以视为均匀电场. 因而, 入射光对于该粒子的作用可表示为①

$$H'=-q\boldsymbol{\mathcal{E}}_0\cdot\boldsymbol{r}\cos\omega t \tag{12.5}$$

这是周期微扰. 设入射光为非偏振自然光, 由一阶含时微扰论, 该粒子的跃迁速率如下给出

$$\omega_{k'k}=\frac{4\pi^2q^2}{3\hbar^2}|\boldsymbol{r}_{k'k}|^2\,\rho(\omega_{k'k}) \tag{12.6}$$

式中 $|\boldsymbol{r}_{k'k}|^2$ 为粒子坐标矢量算符矩阵元的平方和, 在一维谐振子情形, $|\boldsymbol{r}_{k'k}|^2$ 仅有一项 $|x_{k'k}|^2$, 这样

$$\omega_{k'k}=\frac{4\pi^2q^2}{3\hbar^2}|x_{k'k}|^2\,\rho(\omega_{k'k}) \tag{12.7}$$

① 参见, 曾谨言, 量子力学 (第四版卷 I)[M], 北京: 科学出版社, 2007, p. 398~401.

其中 $\omega_{k'k}$ 满足 $\hbar\omega_{k'k}=E_{k'}-E_k$, 而

$$x_{k'k}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{k'}^{(0)*}x\psi_k^{(0)}\mathrm{d}x \tag{12.8}$$

式中 $\psi_k^{(0)}(x)=\sqrt{\dfrac{\alpha}{\sqrt{\pi}k!2^k}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}\mathrm{H}_k(\alpha x)$ 为未微扰前谐振子的能量本征函数; 而 $\alpha=\sqrt{\mu\omega_0/\hbar}$.

将谐振子定态波函数的递推公式

$$x\psi_k^{(0)}=\frac{1}{\alpha}\left\{\sqrt{\frac{k}{2}}\psi_{k-1}^{(0)}+\sqrt{\frac{k+1}{2}}\psi_{k+1}^{(0)}\right\} \tag{12.9}$$

代入式 (12.8), 并利用波函数的正交归一性 $\int\psi_m^{(0)*}\psi_n^{(0)}\mathrm{d}x=\delta_{mn}$ 得

$$\begin{aligned}x_{k'k}=&\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{k'}^{(0)*}\times\frac{1}{\alpha}\left\{\sqrt{\frac{k}{2}}\psi_{k-1}^{(0)}+\sqrt{\frac{k+1}{2}}\psi_{k+1}^{(0)}\right\}\mathrm{d}x\\=&\frac{1}{\alpha}\sqrt{\frac{k}{2}}\delta_{k',k-1}+\frac{1}{\alpha}\sqrt{\frac{k+1}{2}}\delta_{k',k+1}\end{aligned} \tag{12.10}$$

由此知道, 对指定的初态 k 来说, 要使矢径矩阵元不为零, 末态 k' 和初态 k 的关系必须是下面二者之一:

(a) $k'=k-1$, 这时

$$x_{k'k}=x_{k-1,k}=\frac{1}{\alpha}\sqrt{\frac{k}{2}} \tag{12.11}$$

(b) $k'=k+1$, 这时

$$x_{k'k}=x_{k+1,k}=\frac{1}{\alpha}\sqrt{\frac{k+1}{2}} \tag{12.12}$$

以上给出一维谐振子跃迁的选择定则: 初态末态的量子数相差 1.

由式 (12.7)、式 (12.12) 得到粒子每秒钟从基态 $k=0$ 跃迁到第一激发态的概率为

$$w_{10}=\frac{4\pi^2q^2}{3\hbar^2}\left(\frac{1}{\alpha}\sqrt{\frac{1}{2}}\right)^2\rho(\omega_{10})=\frac{2\pi^2q^2}{3\hbar\mu\omega}\rho(\omega_0)$$

12.3 设一带电 q 的粒子, 质量为 μ, 在宽度为 a 的一维无限深势阱中运动. 在入射光照射下, 发生跃迁. 光波长 $\lambda\gg a$. (1) 求跃迁选择定则. (2) 设粒子原来处于基态, 求跃迁速率公式.

解 与题 12.2 相同, 本题也是一维运动的粒子在入射光照射下, 发生跃迁, 因而采用式 (12.6) 计算, 即粒子从初态 k 向 k' 态的跃迁速率为

$$w_{k'k}=\frac{4\pi^2q^2}{3\hbar^2}\left|x_{k'k}\right|^2\rho(\omega_{k'k}) \tag{12.13}$$

其中 $\rho(\omega)$ 为入射光能量密度, $\omega_{k'k}$ 满足 $\hbar\omega_{k'k}=E_{k'}-E_k$, 而

$$x_{k'k}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{k'}^{(0)*}x\psi_k^{(0)}\mathrm{d}x \tag{12.14}$$

一维无限深势阱中的粒子定态能量为

$$E_n^{(0)}=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2} \tag{12.15}$$

其中 $n=1,2,\cdots$. 若取势阱左端位置为 $x=0$, 则势阱位置在 $(0<x<a)$ 区间, 粒子局限在该区间运动, 相应能级 $E_n^{(0)}$ 的波函数为

$$\psi_n^{(0)}=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a},\quad 0<x<a \tag{12.16}$$

因而粒子从第 k 能态向 k' 能态跃迁矩阵元为

$$\begin{aligned}x_{k'k}&=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{k'}^{(0)*}x\psi_k^{(0)}\mathrm{d}x=\frac{2}{a}\int_0^a\sin\frac{k'\pi x}{a}\cdot x\cdot\sin\frac{k\pi x}{a}\mathrm{d}x\\&=\frac{1}{a}\int_0^a x\left[\cos\frac{(k'-k)\pi x}{a}-\cos\frac{(k'+k)\pi x}{a}\right]\mathrm{d}x\end{aligned}$$

利用积分公式 (A.10), 得

$$\begin{aligned}x_{k'k}=&\frac{1}{a}\left\{\frac{ax}{(k'-k)\pi}\sin\frac{(k'-k)\pi x}{a}+\frac{a^2}{(k'-k)^2\pi^2}\cos\frac{(k'-k)\pi x}{a}-\right.\\&\left.\frac{ax}{(k'+k)\pi}\sin\frac{(k'+k)\pi x}{a}-\frac{a^2}{(k'-k)^2\pi^2}\cos\frac{(k'+k)\pi x}{a}\right\}\Bigg|_0^a\\=&\frac{4k'ka}{\pi^2}\cdot\frac{(-1)^{k'+k}-1}{\left(k'^2-k^2\right)^2}\end{aligned} \tag{12.17}$$

由此可知, 要使矩阵元 $x_{k'k}\neq 0$, 必须有 $(-1)^{k'+k}-1\neq 0$, 这要求 $k'+k=$ 奇数, 也就是 $k'-k=k'+k-2k=$ 奇数. 这给出跃迁的选择定则, 即初态和末态的量子数之和 (或差) 应是个奇数

$$k'-k=2m+1,\quad m=0,\pm1,\pm2,\cdots \tag{12.18}$$

或者说, k 与 k' 二者一个是奇数另一个是偶数.

若粒子原来处于基态, 则按照选择定则, 只可能发生向 $2k(k=1,2,\cdots)$ 能态的跃迁, 按照式 (12.13)、式 (12.17), 基态向 $2k(k=1,2,\cdots)$ 能态的跃迁速率为

$$w_{2k,1}=\frac{4\pi^2q^2}{3\hbar^2}\left|\frac{16a}{\pi^2}\cdot\frac{k}{\left(4k^2-1\right)^2}\right|^2\rho(\omega_{2k,1})=\frac{1024a^2q^2}{3\pi^2\hbar^2}\times\frac{k^2}{(4k^2-1)^4}\rho(\omega_{2k,1}) \tag{12.19}$$

根据能级公式 (12.15), 上式中

$$\omega_{2k,1}=\frac{\pi^2\hbar}{2\mu a^2}(4k^2-1)$$

12.4 有一个二能级体系, Hamilton 量记为 H_0, 能级记为 E_1、$E_2(E_1<E_2)$, 相应本征态记为 ψ_1、ψ_2. 设 $t=0$ 时刻体系处于 ψ_1 态. $t\geqslant 0$ 时受微扰 H' 作用, 设在 H_0 表象中

$$H'=\begin{pmatrix}\alpha&\gamma\\\gamma&\beta\end{pmatrix}$$

试求 $t>0$ 时, 体系处于 ψ_2 态的概率.

解 我们记该二能级体系 H_0 的相应于能量 E_1、E_2 的两个正交归一的本征态分别为 $|\psi_1\rangle$、$|\psi_2\rangle$, 即有

$$H_0|\psi_i\rangle=E_i|\psi_i\rangle,\quad\langle\psi_i|\psi_j\rangle=\delta_{ij},\qquad i,j=1,2$$

题给 $t\geqslant 0$ 时, 体系的 Hamilton 量为 $H=H_0+H'$, 在 H_0 表象表示为

$$H=H_0+H'=\begin{pmatrix}E_1+\alpha&\gamma\\\gamma&E_2+\beta\end{pmatrix} \tag{12.20}$$

设 H 的本征函数为

$$|\phi\rangle = C_1|\psi_1\rangle + C_2|\psi_2\rangle = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} \tag{12.21}$$

代入本征方程

$$H|\phi\rangle = E|\phi\rangle \tag{12.22}$$

也就是

$$\begin{pmatrix} E_1+\alpha & \gamma \\ \gamma & E_2+\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}$$

得到

$$\begin{cases} (E_1+\alpha-E)\,C_1 + \gamma C_2 = 0, \\ \gamma C_1 + (E_2+\beta-E)\,C_2 = 0 \end{cases} \tag{12.23}$$

式 (12.23) 为关于 C_1, C_2 的二阶线性方程组, 它有非平凡解的条件是其系数行列式为零, 即得下列久期方程式

$$\begin{vmatrix} E_1+\alpha-E & \gamma \\ \gamma & E_2+\beta-E \end{vmatrix} = 0$$

即 $(E_1+\alpha-E)(E_2+\beta-E)-\gamma^2=0$, 由此解得

$$E = E_h, E_l = \frac{1}{2}\left[E_1+\alpha+E_2+\beta \pm \sqrt{(E_2+\beta-E_1-\alpha)^2+4\gamma^2}\right] \tag{12.24}$$

若令

$$\omega_1 = \frac{E_1+\alpha}{\hbar}, \quad \omega_2 = \frac{E_2+\beta}{\hbar}, \quad \omega = \omega_2-\omega_1 \tag{12.25}$$

则式 (12.24) 可以写成

$$E_h, E_l = \frac{\hbar}{2}\left[\omega_1+\omega_2 \pm \sqrt{\omega^2+4\gamma^2/\hbar^2}\right] \tag{12.26}$$

当 $E = E_h = \dfrac{\hbar}{2}\left[\omega_1+\omega_2+\sqrt{\omega^2+4\gamma^2/\hbar^2}\right]$ 时, 式 (12.23) 给出

$$C_2 = \frac{\hbar}{2\gamma}\left(\omega+\sqrt{\omega^2+4\gamma^2/\hbar^2}\right) C_1$$

取 $C_1=1$, 写出相应于 E_h 的能量本征函数 (未归一化)

$$|\phi_h\rangle = |\psi_1\rangle + \frac{\hbar}{2\gamma}\left(\omega+\sqrt{\omega^2+4\gamma^2/\hbar^2}\right)|\psi_2\rangle \tag{12.27}$$

当 $E = E_l = \dfrac{\hbar}{2}\left[\omega_1+\omega_2-\sqrt{\omega^2+4\gamma^2/\hbar^2}\right]$ 时, 类似地求得相应于 E_l 的能量本征态

$$|\phi_l\rangle = |\psi_1\rangle + \frac{\hbar}{2\gamma}\left(\omega-\sqrt{\omega^2+4\gamma^2/\hbar^2}\right)|\psi_2\rangle \tag{12.28}$$

$t=0$ 时, 体系的初始状态为

$$|t=0\rangle = |\psi_1\rangle = \frac{\Omega-\omega}{2\Omega}|\phi_h\rangle + \frac{\Omega+\omega}{2\Omega}|\phi_l\rangle \tag{12.29}$$

其中

$$\Omega = \sqrt{\omega^2+4\gamma^2/\hbar^2} \tag{12.30}$$

根据式 (12.29), 当 $t \geqslant 0$ 时体系状态为

$$|t\rangle = \frac{\Omega-\omega}{2\Omega}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_h t/\hbar}|\phi_h\rangle + \frac{\Omega+\omega}{2\Omega}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_l t/\hbar}|\phi_l\rangle \tag{12.31}$$

代入式 (12.26)、式 (12.27) 和式 (12.28) 得

$$|t\rangle = \left(\cos\frac{\Omega t}{2} + \mathrm{i}\frac{\omega}{\Omega}\sin\frac{\Omega t}{2}\right)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}(\omega_1+\omega_2)t}|\psi_1\rangle - \mathrm{i}\frac{2\gamma}{\Omega}\sin\frac{\Omega t}{2}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}(\omega_1+\omega_2)t}|\psi_2\rangle \tag{12.32}$$

如前所设 $|\psi_1\rangle$、$|\psi_2\rangle$ 已取归一, 则以 $|\psi_1\rangle$ 为初态演化的态 $|t\rangle$ 也是归一化态. 这样知体系处于 $|\psi_2\rangle$ 的概率为

$$|\langle\psi_2|t\rangle|^2 = \left(\frac{2\gamma}{\Omega}\right)^2\sin^2\frac{\Omega t}{2}$$

12.5 同上题. 设二能级简并, 令 $E_1 = E_2 = E_0$, 设 $\alpha = \beta = 0$, 设 $t = 0$ 时刻体系处于 ψ_1 态, 试求 $t > 0$ 时, 体系的状态 $\psi(t)$, 并与经典力学中耦合摆的共振现象对比讨论.

解 记该体系 H_0 的两个正交归一的本征态 (能量均为 E_0) 分别为 $|\psi_1\rangle$、$|\psi_2\rangle$. 题给 $t \geqslant 0$ 时, 体系的 Hamilton 量为 $H = H_0 + H'$, 在 H_0 表象表示为

$$H = H_0 + H' = \begin{pmatrix} E_0+\alpha & \gamma \\ \gamma & E_0+\beta \end{pmatrix} \tag{12.33}$$

仿题 12.4 求解, 或者直接利用题 12.4 的结果, 得到 H 的本征值和本征函数为

$$E_h = E_0 + \gamma, \quad E_l = E_0 - \gamma \tag{12.34}$$

并可以求得相应的归一化能量本征态

$$|\phi_h\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle\right), \quad |\phi_l\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\psi_1\rangle - |\psi_2\rangle\right) \tag{12.35}$$

$t = 0$ 时刻体系处于 $|\psi_1\rangle$ 态, 也就是

$$|\psi(t=0)\rangle = |\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\phi_h\rangle + |\phi_l\rangle\right) \tag{12.36}$$

当 $t \geqslant 0$ 时体系状态为

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\phi_h\rangle\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_h t/\hbar} + |\phi_l\rangle\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_l t/\hbar}\right) = \left(\cos\frac{\gamma t}{\hbar}\,|\psi_1\rangle - \mathrm{i}\sin\frac{\gamma t}{\hbar}\,|\psi_2\rangle\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_0 t/\hbar} \tag{12.37}$$

上式表明, 由于微扰 H' 的作用, 体系将在原来的两个简并态 ψ_1 和 ψ_2 之间振荡. $t = 0$ 时, $\psi = \psi_1$, $\tau = \pi\hbar/2\gamma$, $\psi = \psi_2$; 再经过同样的时间 $\tau = \pi\hbar/2\gamma$, 体系又回到 ψ_1 态, 如此周而复始, 循环不已, 振荡的周期为 $T = \pi\hbar/\gamma$. 耦合强度 γ 越大, 振荡越快, 周期 T 越小.

上述量子振荡图像可以和经典耦合摆的振荡对比. 设有两个相同的单摆 1、2, 用一轻弹簧联结, 从而形成耦合摆. 耦合摆有摆 1、2 同相与反相两种模式, 参见图 12.1 的 (a) 与 (b). 同相与反相两种模式称为简正模, 这两种振荡是稳定的. ϕ_h、ϕ_l 都是定态, ϕ_h 相当于耦合摆同相, ϕ_l 相当于耦合摆反相. 图 12.1 的 (c) 所示振荡, 相当于开始时摆 1 有偏离, 而摆 2 静止于平衡位置. 这种振动可以看成是两种简正振动的合成. 由于弹簧的耦合, 两摆不断交换能量, 来回振荡, 这相应于 $\psi(t)$.

12.6 自旋为 1/2 的粒子, 磁矩为 μ, 电荷为 0, 处于沿 z 轴方向的均匀恒定磁场 $\boldsymbol{B}_0$ 中, 初始时刻粒子自旋向下 ($\sigma_z = -1$). $t > 0$ 后, 再加上沿 x 方向的均匀恒定磁场 $\boldsymbol{B}_1 (B_1 \ll B_0)$. 求 $t > 0$ 后粒子的自旋态, 以及测得粒子自旋时刻测得粒子自旋"向上" $\sigma_z = +1$ 的概率.

提示 磁矩算符 $\boldsymbol{\mu} = \mu\boldsymbol{\sigma}$, 与外磁场的作用 $H = -\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B} = -\mu(B_1\sigma_x + B_0\sigma_z)$.

解法一 取加上沿 x 方向磁场时刻为 $t = 0$. $t < 0$ 时, 粒子的 Hamilton 量为 $H_0 = -\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B} = -\mu B_0\sigma_z$, 它的两个本征态分别为 $|\uparrow\rangle$、$|\downarrow\rangle$, 其本征值分别为 $E_\uparrow = -\mu B_0, E_\downarrow = \mu B_0$. 初始时刻粒子处于 $|\uparrow\rangle$.

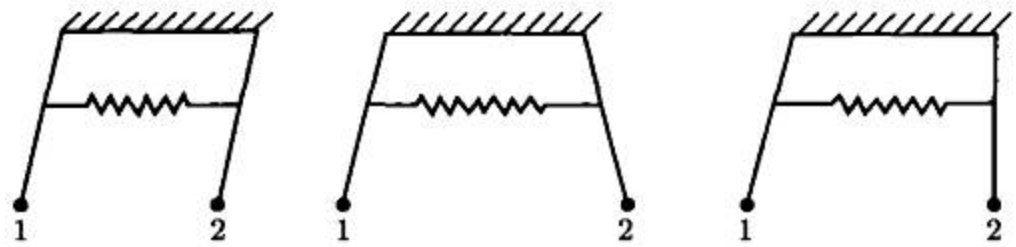

图 12.1　耦合摆

题给 $t \geqslant 0$ 时, 体系的 Hamilton 量为 $H = H_0 + H'$, 其中 $H' = -\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{B}_1 = -\mu B_1 \sigma_x$. 在 H_0 表象表示为

$$H = -\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{B} = \begin{pmatrix} E_\uparrow & -\mu B_1 \\ -\mu B_1 & E_\downarrow \end{pmatrix} = -\mu \begin{pmatrix} B_0 & B_1 \\ B_1 & -B_0 \end{pmatrix} \tag{12.38}$$

可见本题为 12.4 的特例, 故可以直接利用其结果给出解.

这里给出另一种解法. $H = -\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{B} = -\mu B \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n}$, 这里 $\boldsymbol{n}$ 为 $\boldsymbol{B}$ 的方向, 即 $\boldsymbol{n} = (\sin\theta, 0, \cos\theta)$, θ 满足 $\tan\theta = B_1/B_0$. $H = -\mu B \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n}$ 的本征态如下给出[①]:

$$|\chi_\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} \cos\dfrac{\theta}{2} \\ \sin\dfrac{\theta}{2} \end{pmatrix} = \cos\frac{\theta}{2}|\uparrow\rangle + \sin\frac{\theta}{2}|\downarrow\rangle \tag{12.39}$$

$$|\chi_\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} \sin\dfrac{\theta}{2} \\ -\cos\dfrac{\theta}{2} \end{pmatrix} = \sin\frac{\theta}{2}|\uparrow\rangle - \cos\frac{\theta}{2}|\downarrow\rangle \tag{12.40}$$

其能量分别为 $-\mu B$、μB. $t = 0$ 时, 粒子初始状态为

$$|t=0\rangle = |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \sin\frac{\theta}{2}|\chi_\uparrow\rangle - \cos\frac{\theta}{2}|\chi_\downarrow\rangle \tag{12.41}$$

当 $t \geqslant 0$ 时粒子状态为

$$\begin{aligned} |t\rangle &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu Bt/\hbar}\sin\frac{\theta}{2}|\chi_\uparrow\rangle - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu Bt/\hbar}\cos\frac{\theta}{2}|\chi_\downarrow\rangle \\ &= \mathrm{i}\sin\frac{\mu Bt}{\hbar}\sin\theta|\uparrow\rangle + \left(\sin^2\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mu Bt/\hbar} + \cos^2\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu Bt/\hbar}\right)|\downarrow\rangle \end{aligned} \tag{12.42}$$

上面已代入了式 (12.39)、式 (12.40) 的结果. 可见 t 时刻测得粒子自旋向上的概率为

$$|\langle\uparrow|t\rangle|^2 = \sin^2\frac{\mu Bt}{\hbar}\sin^2\theta = \sin^2\frac{\mu Bt}{\hbar}\frac{\tan^2\theta}{1+\tan^2\theta} = \frac{B_1^2}{B_0^2+B_1^2}\sin^2\frac{\mu\sqrt{B_0^2+B_1^2}t}{\hbar} \tag{12.43}$$

解法二　(含时微扰) 根据一阶含时微扰论公式, 粒子从初态自旋向下到 t 时刻跃迁到自旋向上的振幅如下给出

$$C_{\downarrow\to\uparrow}(t) = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^t \langle\uparrow|H'|\downarrow\rangle\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{\uparrow\downarrow}t'}\mathrm{d}t' \tag{12.44}$$

题给 $H' = -\mu B_1 \sigma_x$, 这样

$$\langle\uparrow|H'|\downarrow\rangle = -\mu B_1\langle\uparrow|\sigma_x|\downarrow\rangle = -\mu B_1\langle\uparrow|\uparrow\rangle = -\mu B_1$$

而 $\omega_{\uparrow\downarrow} = (E_\uparrow - E_\downarrow)/\hbar = (-\mu B_0 - \mu B_0)/\hbar = -2\mu B_0/\hbar$. 因此式 (12.44) 的积分结果为

① 见题 9.2.

$$C_{\downarrow\to\uparrow}(t)=-\frac{\mu B_1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^t \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{\uparrow\downarrow}t'}\mathrm{d}t'=-\frac{\mu B_1}{\mathrm{i}\hbar}\frac{1}{\mathrm{i}\omega_{\uparrow\downarrow}}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{\uparrow\downarrow}t}-1\right)=\frac{2\mathrm{i}\mu B_1}{\hbar\omega_{\uparrow\downarrow}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{\uparrow\downarrow}t/2}\sin\frac{\omega_{\uparrow\downarrow}}{2}t$$
$$=-\mathrm{i}\frac{B_1}{B_0}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{\uparrow\downarrow}t/2}\sin\frac{\omega_{\uparrow\downarrow}}{2}t$$

这样粒子从初态自旋向下到 t 时刻跃迁到自旋向上的概率为

$$P_{\downarrow\to\uparrow}(t)=|C_{\downarrow\to\uparrow}(t)|^2=\frac{B_1^2}{B_0^2}\sin^2\frac{\mu B_0 t}{\hbar} \tag{12.45}$$

对于题给 $B_1\ll B_0$ 情形, 上式结果与精确求解得到的结果式 (12.43) 一致.

12.7 设把处于基态的氢原子放在平板电容器中. 取平板法线方向为 z 轴方向, 电场沿 z 轴方向, 可视为均匀场. 设电容器突然充电, 然后放电. 电场随时间变化如下:

$$\mathcal{E}(t)=\begin{cases}0, & t<0\\ \mathcal{E}_0\exp(-t/\tau), & t>0(\tau\text{常数})\end{cases}$$

求时间充分长以后, 氢原子跃迁到 2s 态及 2p 态去的概率.

解 根据氢原子定态结果, 不考虑自旋, 氢原子基态波函数

$$\psi_{100}=\frac{1}{\sqrt{\pi\,a_0^3}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}} \tag{12.46}$$

其中 $a_0=\hbar^2/(\mu e^2)$ 为 Bohr 半径. 而 2s 态及 2p 态波函数

$$\begin{aligned}&\psi_{200}=R_{20}(r)\mathrm{Y}_{00},\quad \psi_{211}=R_{21}(r)\mathrm{Y}_{11}\\ &\psi_{210}=R_{21}(r)\mathrm{Y}_{10},\quad \psi_{21-1}=R_{21}(r)\mathrm{Y}_{1-1}\end{aligned} \tag{12.47}$$

其中 R_{20}、R_{21} 为氢原子归一化径向波函数, 而各 Y_{lm} 为氢原子归一化角向波函数, 即球谐函数. R_{20}、R_{21} 如下给出

$$R_{20}=\frac{1}{\sqrt{2}a_0^{3/2}}\left(1-\frac{r}{2a_0}\right)\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a_0}},\quad R_{21}=\frac{1}{2\sqrt{6}a_0^{3/2}}\frac{r}{a_0}\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a_0}} \tag{12.48}$$

有关的球谐函数 Y_{lm} 如下给出:

$$\mathrm{Y}_{00}=\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \tag{12.49}$$

$$\mathrm{Y}_{1,\pm1}=\mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\varphi}=\mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{x\pm\mathrm{i}y}{r} \tag{12.50}$$

$$\mathrm{Y}_{1,0}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{z}{r} \tag{12.51}$$

由题设, 电场 $\boldsymbol{\mathcal{E}}$ 沿 z 轴方向, 微扰可写为

$$H'=e\mathcal{E}_0 z\mathrm{e}^{-\frac{t}{\tau}}\theta(t)=e\mathcal{E}_0 r\cos\theta\mathrm{e}^{-\frac{t}{\tau}}\theta(t)=F(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\frac{t}{\tau}}\theta(t) \tag{12.52}$$

其中定义了

$$F(\boldsymbol{x})=e\mathcal{E}_0 z=e\mathcal{E}_0 r\cos\theta \tag{12.53}$$

可见, 这里的微扰 H' 正是题 12.1 中 H' 的形式, 故利用该题式 (12.4), 时间充分长以后 ($t\gg\tau$) 氢原子由基态 1s 向用 f 标志的末态的跃迁概率为

$$P_{1\mathrm{s}\to f}=\frac{\tau^2}{\hbar^2}\frac{|\langle\psi_f|\,F\,|1s\rangle|^2}{\left(1+\tau^2\omega_{f1}^2\right)} \tag{12.54}$$

式中 ω_{f1} 由 $\hbar\omega_{f1}=E_f-E_1$ 确定, 上式成立条件为 $P_{1s\to f}\ll 1$. 可见所要求的跃迁概率归结为计算矩阵元 $\langle\psi_f|F|1s\rangle$.

考虑 1s→2s 可能的跃迁, 此时末态 f=2s. 根据式 (12.46)~ 式 (12.48) 与式 (12.49), ψ_{100}、ψ_{200} 都是偶宇称态, 而 z 是奇宇称算符. 由此可见 $\psi_{200}^{*}z\psi_{100}$ 具有奇宇称的性质, 在全空间积分的结果为零. 这给出 $\langle 2s|F|1s\rangle=0$, 故根据式 (12.54), 1s→2s 的跃迁概率为零.

再考虑 1s→2p 可能的跃迁, 此时末态 f = 2p. 2p 有三种不同状态, 它们的波函数分别为 ψ_{211}、ψ_{21-1} 和 ψ_{210}. 根据式 (12.46)~ 式 (12.48) 与式 (12.49)~ 式 (12.51), 对于 z 方向的反演 $(z\to -z)$, ψ_{100} 以及 $\psi_{21,\pm1}$ 都不变, 而 z 反号. 由此可见 $\psi_{21,\pm1}^{*}z\psi_{100}$ 对于 z 方向的反演改变正负性, 从而它对于 z 从 $-\infty$ 到 $+\infty$ 积分的结果为零. 这给出 $\langle 21,\pm1|F|1s\rangle=0$, 故根据式 (12.54), 1s→ $\psi_{21,\pm1}$ 的跃迁概率为零. 利用式 (12.46)~ 式 (12.49) 以及式 (12.53) 的结果, 不为零的矩阵元 $\langle 210|F|1s\rangle$ 的计算如下:

$$\begin{aligned}\langle 210|F|1s\rangle&=\iiint\left[\frac{1}{\sqrt{32\pi a_0^3}}\frac{r}{a_0}\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a_0}}\cos\theta\right][e\mathcal{E}_0 r\cos\theta]\left[\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\right]\cdot r^2\sin\theta\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi\\&=\frac{e\mathcal{E}_0}{\sqrt{32\pi a_0^4}}\int_0^{\infty}r^4\mathrm{e}^{-\frac{3r}{2a_0}}\mathrm{d}\,r\cdot\int_0^{\pi}\cos^2\theta\sin\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\\&=\frac{e\mathcal{E}_0}{\sqrt{32\pi a_0^4}}\cdot 4!\cdot\left(\frac{-2a_0}{3}\right)^5\cdot\left(-\frac{1}{3}\cos^3\theta\right)\Big|_0^{\pi}2\pi=\frac{2^{15/2}}{3^5}e\mathcal{E}_0a_0\end{aligned}$$

也就是

$$\langle 210|F|1s\rangle=\frac{2^{15/2}}{3^5}e\mathcal{E}_0a_0 \tag{12.55}$$

将上式结果代入式 (12.54), 并利用氢原子能级公式 $E_1=-\dfrac{e^2}{2a_0}$, $E_2=-\dfrac{e^2}{8a_0}$, 可知

$$\begin{aligned}P_{(1s\to 2p)}&=\frac{\tau^2}{\hbar^2}\frac{1}{\left(1+\tau^2\omega_{f1}^2\right)}\left[|\langle 210|F|1s\rangle|^2+|\langle 211|F|1s\rangle|^2+|\langle 21-1|F|1s\rangle|^2\right]\\&=\frac{\tau^2}{\left[\hbar^2+\tau^2\left(E_2-E_1\right)^2\right]}\left[|\langle 210|F|1s\rangle|^2+0+0\right]=\frac{2^{15}}{3^{10}}\cdot\frac{e^2\mathcal{E}_0^2a_0^2\tau^2}{\left[1+\left(\dfrac{3e^2\tau}{8a_0\hbar}\right)^2\right]\hbar^2}\end{aligned}$$

通常情况下, $e^2\mathcal{E}_0^2a_0^2\tau^2\ll\hbar^2$, $P_{(1s\to 2p)}\ll 1$, 故以上微扰计算适用.

综上, 所求的氢原子跃迁到 2s 态及 2p 态的概率分别为

$$\begin{aligned}P_{(1s\to 2s)}&=0\\P_{(1s\to 2p)}&=\frac{2^{15}}{3^{10}}\cdot\frac{e^2\mathcal{E}_0^2a_0^2\tau^2}{\left[1+\left(\dfrac{3e^2\tau}{8a_0\hbar}\right)^2\right]\hbar^2}\end{aligned}$$

其中 $a_0=\hbar^2/(\mu e^2)$ 为氢原子 Bohr 半径.

12.8 氢原子处于基态, 加上交变电场 $\boldsymbol{\mathcal{E}}=\boldsymbol{\mathcal{E}}_0\left[\exp(\mathrm{i}\omega t)+\exp(-\mathrm{i}\omega t)\right]$, 交流电场的频率 ω 满足 $\hbar\omega\gg$ 电离能. 用微扰论一级近似计算氢原子的每秒电离的概率.

解 氢原子处在题给交变电场 $\mathcal{E}=\mathcal{E}_0\left[\exp(\mathrm{i}\omega t)+\exp(-\mathrm{i}\omega t)\right]$ 中被电离, 电场的作用视为微扰. 在原子尺度, 电场可视为空间均匀电场, 相应的微扰 Hamilton 量可表示为

$$H'(t)=e\boldsymbol{\mathcal{E}}_0\cdot\boldsymbol{r}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\right)=H'\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\right),\quad H'=e\boldsymbol{\mathcal{E}}_0\cdot\boldsymbol{r} \tag{12.56}$$

这是周期微扰. 对于电离过程电子末态能量高于初态能量, 故这种过程上式中 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$ 项不起作用.

对于式 (12.56) 所给的周期微扰, 由一阶含时微扰论, 可知在较长的时间以后, 电子由初始所处的基态 (1s 态, 用 i 标志) 跃迁到电离态 (用 f 标志) 的跃迁速率为①

$$w_{i\to f}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}P_{i\to f}=\frac{\pi}{2\hbar}\left|H'_{fi}\right|^2\delta\left(E_f-E_i-\hbar\omega\right) \tag{12.57}$$

其中 $H'_{fi}=\langle f|\,H'\,|i\rangle$. 初态 i 为氢原子基态, 能量和归一化波函数分别为

$$E_1=-\frac{e^2}{2a_0},\quad \psi_{100}=\frac{1}{\sqrt{\pi\,a_0^3}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}} \tag{12.58}$$

其中 $a_0=\hbar^2/(\mu e^2)$ 为氢原子 Bohr 半径. 末态 f 电离态, 能量 $E>0$, 波函数可以选为平面波. 设其波矢为 $\boldsymbol{k}$, 为便于有限归一, 我们取箱归一化 [假设氢原子所处空间为一足够大的 $L\times L\times L$ 的正方体], 这样电离态的能量和归一化波函数分别为

$$E_k=\frac{\hbar^2k^2}{2\mu},\quad \psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x})=\frac{1}{\sqrt{L^3}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}=\frac{1}{\sqrt{L^3}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}/\hbar} \tag{12.59}$$

式中 $\boldsymbol{p}=(p_x,p_y,p_z)$, $p_x=\dfrac{2\pi\hbar}{L}n_x, p_y=\dfrac{2\pi\hbar}{L}n_y, p_z=\dfrac{2\pi\hbar}{L}n_z$, 而 n_x, n_y, n_z=0, ±1, ±2, $\cdots$ 如此式 (12.57) 中的跃迁矩阵元为

$$H'_{fi}=\langle f|\,H'\,|i\rangle=\iiint\frac{1}{\sqrt{L^3}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\left[e\boldsymbol{\mathcal{E}}_0\cdot\boldsymbol{r}\right]\frac{1}{\sqrt{\pi\,a_0^3}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}$$

为完成上式的积分, 不妨取 z 轴沿 $\boldsymbol{k}$ 的方向, 再根据对称性考虑

$$\begin{aligned}H'_{fi}&=\iiint\frac{1}{\sqrt{L^3}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kz}\left[e\mathcal{E}_{0x}x+e\mathcal{E}_{0y}y+e\mathcal{E}_{0z}z\right]\frac{1}{\sqrt{\pi\,a_0^3}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\\&=\frac{e\mathcal{E}_{0z}}{\sqrt{\pi L^3a_0^3}}\iiint\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kz}z\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\end{aligned}$$

对上式再采用球坐标计算

$$\begin{aligned}H'_{fi}&=\frac{e\mathcal{E}_{0z}}{\sqrt{\pi L^3a_0^3}}\int_0^\infty r^3\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\int_0^\pi\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr\cos\theta}\cos\theta\sin\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\mathrm{d}r\\&=\frac{2\pi e\mathcal{E}_{0z}}{\sqrt{\pi L^3a_0^3}}\int_0^\infty r^3\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\frac{1}{\mathrm{i}kr}\int_0^\pi\cos\theta\mathrm{d}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr\cos\theta}\mathrm{d}r\\&=\frac{2\pi e\mathcal{E}_{0z}}{\mathrm{i}k\sqrt{\pi L^3a_0^3}}\int_0^\infty r^2\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\left\{\cos\theta\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr\cos\theta}\Big|_0^\pi-\int_0^\pi\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr\cos\theta}\mathrm{d}\cos\theta\right\}\mathrm{d}r\\&=\frac{2\pi e\mathcal{E}_{0z}}{\mathrm{i}k\sqrt{\pi L^3a_0^3}}\int_0^\infty r^2\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\left\{-\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}+\frac{1}{\mathrm{i}kr}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr\cos\theta}\Big|_0^\pi\right\}\mathrm{d}r\\&=\frac{2\pi e\mathcal{E}_{0z}a_0}{\mathrm{i}k\sqrt{\pi L^3a_0^3}}\int_0^\infty\left\{\frac{a_0}{\mathrm{i}k}\left[\mathrm{e}^{-(1-\mathrm{i}ka_0)x}-\mathrm{e}^{-(1+\mathrm{i}ka_0)x}\right]x-a_0^2\left[\mathrm{e}^{-(1-\mathrm{i}ka_0)x}+\mathrm{e}^{-(1+\mathrm{i}ka_0)x}\right]x^2\right\}\mathrm{d}x\end{aligned}$$

最后一步作了变量代换 $x=\dfrac{r}{a_0}$. 再利用积分公式 (A.7, A.8), 即得

$$\begin{aligned}H'_{fi}&=\frac{2\pi e\mathcal{E}_{0z}a_0}{\sqrt{\pi L^3a_0^3}}\left\{-\frac{a_0}{k^2}\left[\frac{1}{\left(1-\mathrm{i}ka_0\right)^2}-\frac{1}{\left(1+\mathrm{i}ka_0\right)^2}\right]-\frac{a_0^2}{\mathrm{i}k}\left[\frac{2}{\left(1-\mathrm{i}ka_0\right)^3}+\frac{2}{\left(1+\mathrm{i}ka_0\right)^3}\right]\right\}\\&=\frac{-32\mathrm{i}\sqrt{\pi}a_0^5e\mathcal{E}_{0z}k}{\sqrt{\pi a_0^3L^3}\left(1+a_0^2k^2\right)^3}\end{aligned}$$

① 参见, 曾谨言, 量子力学 (第四版卷 I)[M], 北京: 科学出版社, 2007, p.392.

至此我们求得了电子电离的跃迁矩阵元, 它与平面波末态波矢 $\boldsymbol{k}$ 方向的电场分量大小 $\mathcal{E}_{0z}$ 成正比. 由于上面计算取 z 轴沿 $\boldsymbol{k}$ 的方向, 结果又可表示为

$$H'_{fi}=\frac{-32\mathrm{i}\sqrt{\pi}a_0^5e\boldsymbol{\mathcal{E}}_0\cdot\boldsymbol{k}}{\sqrt{\pi a_0^3L^3}\left(1+a_0^2k^2\right)^3} \tag{12.60}$$

将上式代入式 (12.57) 得在较长的时间以后, 电子由初始所处的基态跃迁到平面波末态 (波矢为 $\boldsymbol{k}$) 的跃迁速率 (单位时间的跃迁概率) 为

$$w_{i\to\boldsymbol{k}}=\frac{2^9\pi^2a_0^7e^2\left(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\mathcal{E}}_0\right)^2}{\hbar L^3\left(1+a_0^2k^2\right)^6}\delta\left(E_k-E_1-\hbar\omega\right) \tag{12.61}$$

由于末态是电离态, $\boldsymbol{k}$ 不同的各种平面波态都可能会出现, 所以单位时间的跃迁概率需要对各种可能的末态求和, 也就是需要对各种可能的波数 (动量) 求和. 当箱归一化态参量 $L\to\infty$, $\boldsymbol{k}$ 将连续变化, 这时对各种可能的波数 (动量) 求和可表示为①

$$\frac{L^3}{h^3}\iiint\mathrm{d}p_x\mathrm{d}p_y\mathrm{d}p_z \tag{12.62}$$

上式可理解为相空间 h^3 的体积元相当于有一个量子态. 采用球坐标, 动量空间体积元可以表示为

$$\mathrm{d}p_x\mathrm{d}p_y\mathrm{d}p_z=p^2\mathrm{d}p\mathrm{d}^2\Omega=2\mu E_k\mathrm{d}\sqrt{2\mu E_k}\mathrm{d}^2\Omega=\frac{1}{2}\left(2\mu\right)^{3/2}\sqrt{E_k}\mathrm{d}E_k\mathrm{d}^2\Omega \tag{12.63}$$

因此将式 (12.61) 对各种可能的末动量 (波数) 按照式 (12.62) 求和, 并利用式 (12.63), 得氢原子的每秒电离的概率

$$\begin{aligned}w_t=&\frac{L^3}{h^3}\iiint w_{i\to\boldsymbol{k}}\mathrm{d}p_x\mathrm{d}p_y\mathrm{d}p_z=\frac{L^3}{h^3}\iiint w_{i\to\boldsymbol{k}}\mu\sqrt{2\mu}\sqrt{E_k}\mathrm{d}E_k\mathrm{d}^2\Omega\\=&\frac{L^3}{h^3}\iiint\frac{2^9\pi^2a_0^{10}e^2\left(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\mathcal{E}}_0\right)^2}{\hbar a_0^3L^3\left(1+a_0^2k^2\right)^6}\delta\left(E_k-E_1-\hbar\omega\right)\mu\sqrt{2\mu}\sqrt{E_k}\mathrm{d}E_k\mathrm{d}^2\Omega\\=&\int_0^\infty\frac{2^6a_0^7e^2k^2\mathcal{E}_0^2}{\hbar^4\left(1+a_0^2k^2\right)^6}\left(2\mu\right)^{3/2}\delta\left(E_k-E_1-\hbar\omega\right)\sqrt{E_k}\mathrm{d}E_k\int_0^\pi\cos^2\theta\sin\theta\mathrm{d}\theta\\=&\frac{2^8a_0^7e^2\mathcal{E}_0^2\mu k^3}{3\hbar^3\left(1+a_0^2k^2\right)^6}\end{aligned}$$

上面积分过程中, 球坐标的 z 轴选为沿电场 $\boldsymbol{\mathcal{E}}_0$ 方向, 这样 $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\mathcal{E}}_0=k\mathcal{E}_0\cos\theta$. 上面得到了所求的氢原子每秒电离的概率

$$w_t=\frac{2^8a_0^7e^2\mathcal{E}_0^2\mu k^3}{3\hbar^3\left(1+a_0^2k^2\right)^6} \tag{12.64}$$

其中 a_0 是 Bohr 半径, 而 $k=\sqrt{2\mu E_k}$, $E_k=\hbar w+E_1=\hbar w-\dfrac{e^2}{2a_0}$ 是末态自由电子的能量.

12.9 设不考虑自旋, 原子中的电子态表示为

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)=R_{nl}(r)\mathrm{Y}_l^m(\theta,\varphi)$$

对于初态为 s 态 $(E_{nl},l=0)$, 终态为 p 态 $(E_{n'l'},l'=1)$ 的电偶极自发跃迁, 求终态分别为 $m=1$, 0, -1 的跃迁分支比.

解 按题意, 原子中的电子初态波函数为

$$\psi_{n00}(\boldsymbol{r})=R_{n0}(r)\mathrm{Y}_{00}=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}R_{n0}(r) \tag{12.65}$$

① 参见, 曾谨言, 量子力学 (第四版卷 I)[M], 北京: 科学出版社, 2007, p.149.

由于电偶极跃迁, 终态角量子数 $l'=1$, 波函数为

$$\psi_{n'1m}=R_{n'1}(r)\mathrm{Y}_{1m'}(\theta,\varphi),\quad m=1,0,-1 \tag{12.66}$$

电子由能量本征态 ψ_{n00} 跃迁至 $\psi_{n'1m}$ 电偶极自发跃迁速率[①]为

$$A_{n\to n'}=\frac{4}{3}\frac{e^2\omega^3}{\hbar c^3}|\boldsymbol{r}_{n'n}|^2 \tag{12.67}$$

由于三种终态的径向波函数相同, 跃迁分支比等于如下电偶极矩的矩阵元:

$$\langle 1m|\,\boldsymbol{n}\,|00\rangle=\int \mathrm{Y}^*_{1m}\boldsymbol{n}\mathrm{Y}_{00}\mathrm{d}\Omega \tag{12.68}$$

的绝对值平方之比, 其中 $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{r}/r$ 为 $\boldsymbol{r}$ 方向的单位矢量. 由于

$$\begin{aligned}\boldsymbol{n}&=n_x\boldsymbol{e}_1+n_y\boldsymbol{e}_2+n_z\boldsymbol{e}_3=\sin\theta\cos\varphi\boldsymbol{e}_1+\sin\theta\sin\varphi\boldsymbol{e}_2+\cos\theta\boldsymbol{e}_3\\&=\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}(\mathrm{Y}_{1-1}-\mathrm{Y}_{11})\boldsymbol{e}_1+\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(\mathrm{Y}_{11}+\mathrm{Y}_{1-1})\boldsymbol{e}_2+\mathrm{Y}_{10}\boldsymbol{e}_3\right]\end{aligned}$$

注意 $\mathrm{Y}_{00}=\dfrac{1}{\sqrt{4\pi}}$, 并利用球谐函数的正交归一性, 容易求出

$$\begin{aligned}|\langle 10|\,\boldsymbol{n}\,|00\rangle|^2&=\left|\frac{1}{\sqrt{3}}r\boldsymbol{e}_3\right|^2=\frac{1}{3}\\|\langle 11|\,\boldsymbol{n}\,|00\rangle|^2&=\left|\frac{1}{\sqrt{6}}(\mathrm{i}\boldsymbol{e}_2-\boldsymbol{e}_1)\right|^2=\frac{1}{6}\times 2=\frac{1}{3}\\|\langle 1-1|\,\boldsymbol{n}\,|00\rangle|^2&=\left|\frac{1}{\sqrt{6}}(\mathrm{i}\boldsymbol{e}_2+\boldsymbol{e}_1)\right|^2=\frac{1}{6}\times 2=\frac{1}{3}\end{aligned}$$

综上可见, 终态磁量子数 $m=1,\,0,\,-1$ 的分支比为 1:1:1, 即由 s 态跃迁到三种 p 态的概率相等.

12.10 同上题. 设初态为 nlm. (1) 末态为 $n'l'm'$, $n'l'$ 固定, 求跃迁到不同 m' 态的分支比. (2) 跃迁到不同 l' 能级的分支比 (略去末态径向波函数的差异).

解 电子由能量本征态 ψ_{nlm} 跃迁至 $\psi_{n'l'm'}$ 电偶极自发跃迁速率

$$A_{nlm\to n'l'm'}=\frac{4}{3}\frac{e^2\omega^3}{\hbar c^3}\,|\langle n'l'm'|\,\boldsymbol{r}\,|nlm\rangle|^2 \tag{12.69}$$

其中

$$\langle n'l'm'|\,\boldsymbol{r}\,|nlm\rangle=\int_0^\infty R^*_{n'l'}(r)r^3R_{nl}(r)\mathrm{d}r\,\langle l'm'|\,\boldsymbol{n}\,|lm\rangle \tag{12.70}$$

而 $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{r}/r$ 为 $\boldsymbol{r}$ 方向的单位矢量.

(1) $n'l'$ 固定, 则径向波函数 $R_{n'l'}$ 确定. 跃迁分支比等于如下电偶极矩的矩阵元

$$\langle l'm'|\,\boldsymbol{n}\,|lm\rangle=\int \mathrm{Y}^*_{l'm'}\boldsymbol{n}\mathrm{Y}_{lm}\mathrm{d}\Omega \tag{12.71}$$

的绝对值平方之比. $\boldsymbol{r}$ 方向的单位矢量 $\boldsymbol{n}$, 即

$$n_x=\sin\theta\cos\varphi,\quad n_y=\sin\theta\sin\varphi,\quad n_z=\cos\theta$$

或者

$$\boldsymbol{n}=\frac{\boldsymbol{r}}{r}=n_x\boldsymbol{e}_1+n_y\boldsymbol{e}_2+n_z\boldsymbol{e}_3=\frac{1}{2}(n_x+\mathrm{i}n_y)(\boldsymbol{e}_1-\mathrm{i}\boldsymbol{e}_2)+\frac{1}{2}(n_x-\mathrm{i}n_y)(\boldsymbol{e}_1+\mathrm{i}\boldsymbol{e}_2)+n_z\boldsymbol{e}_3$$

① 参见, 曾谨言, 量子力学 (第四版卷 I)[M], 北京: 科学出版社, 2007, p.402.

我们有球谐函数的如下递推公式

$$n_z \mathrm{Y}_{lm} = \cos\theta \mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$$
$$= \left[\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+3)(2l+1)}\right]^{\frac{1}{2}} \mathrm{Y}_{l+1,m} + \left[\frac{(l+m)(l-m)}{(2l-1)(21+1)}\right]^{\frac{1}{2}} \mathrm{Y}_{l-1,m} \tag{12.72}$$

以及

$$(n_x \pm \mathrm{i}n_y)\mathrm{Y}_{lm} = \sin\theta \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}\varphi} \mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$$
$$= \mp\left[\frac{(l\pm m+2)(l\pm m+1)}{(2l+3)(2l+1)}\right]^{\frac{1}{2}} \mathrm{Y}_{l+1,m\pm1} \mp \left[\frac{(l\mp m)(l\mp m-1)}{(2l-1)(2l+1)}\right]^{\frac{1}{2}} \mathrm{Y}_{l-1,m\pm1} \tag{12.73}$$

现由式 (12.72)、式 (12.73) 易知 $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{r}/r$ 的矩阵元中不等于 0 者为

$$\langle l\pm1, m|\, n_z\, |lm\rangle, \langle l\pm1, m\pm1|\, n_x + \mathrm{i}n_y\, |lm\rangle, \langle l\pm1, m\pm1|\, n_x - \mathrm{i}n_y\, |lm\rangle$$

这给出选择定则, $\Delta l = l' - l = \pm1$, $\Delta m = m' - m = 0,\ \pm1$.

(a) 终态 $l' = l+1$. 对于 $m' = m$, 根据式 (12.72) 以及球谐函数的正交归一关系得

$$|\langle l+1, m|\, \boldsymbol{n}\, |lm\rangle|^2 = \frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+3)(2l+1)} \tag{12.74}$$

对于 $m' = m\pm1$, 根据式 (12.73) 以及球谐函数的正交归一关系得

$$|\langle l+1, m\pm1|\, \boldsymbol{n}\, |lm\rangle|^2 = \frac{(l\pm m+2)(l\pm m+1)}{2(2l+3)(2l+1)} \tag{12.75}$$

由式 (12.74)、式 (12.75) 得

$$\sum_{m'} |\langle l+1, m'|\, \boldsymbol{n}\, |lm\rangle|^2 = \frac{l+1}{2l+1} \tag{12.76}$$

并且跃迁到终态 $m' = m+1, m, m-1$ 的分支比为

$$(l+m+2)(l+m+1) : 2(l+m+1)(l-m+1) : (l-m+2)(l-m+1) \tag{12.77}$$

例如若初态 $l = m = 0$, 则终态 $l' = 1$, 则 $m' = 1, 0, -1$ 的分支比为 2:2:2, 这与上题相应结果一致.

(b) 终态 $l' = l-1$. 对于 $m' = m$, 根据式 (12.72) 以及球谐函数的正交归一关系得

$$|\langle l-1, m|\, \boldsymbol{n}\, |lm\rangle|^2 = \frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)} \tag{12.78}$$

对于 $m' = m\pm1$, 根据式 (12.73) 以及球谐函数的正交归一关系得

$$|\langle l-1, m\pm1|\, \boldsymbol{n}\, |lm\rangle|^2 = \frac{(l\mp m)(l\mp m-1)}{2(2l+1)(2l-1)} \tag{12.79}$$

由式 (12.78)、式 (12.79) 得

$$\sum_{m'} |\langle l-1, m'|\, \boldsymbol{n}\, |lm\rangle|^2 = \frac{l}{2l+1} \tag{12.80}$$

并且跃迁到终态 $m' = m+1, m, m-1$ 的分支比为

$$(l-m)(l-m-1) : 2(l+m)(l-m) : (l+m)(l+m-1) \tag{12.81}$$

(2) 初态为 ψ_{nlm}, 按照前面得到的选择定则 $\Delta l = l' - l = \pm1$, 末态角量子数 l' 可以是 $l+1$ 或者 $l-1$. 如果略去末态径向波函数的差异, 则式 (12.76) 以及式 (12.80) 分别正比于从 ψ_{nlm} 向 $l' = l+1$ 以及 $l' = l-1$ 能级的跃迁速率, 这样给出终态 $l' = l+1$ 和 $l' = l-1$ 分支比为

$$(l+1) : l \tag{12.82}$$

这个分支比和初态磁量子数 m 无关. 根据式 (12.76) 以及式 (12.80), 本来跃迁到 $l'=l+1$ 或 $l'=l-1$ 态的概率 (对 m' 求和) 也与初态磁量子数 m 无关.

说明 考虑到选择定则 $\Delta l=l'-l=\pm 1$, 由式 (12.76) 以及式 (12.80) 即得

$$\sum_{l'm'}|\langle l'm'|\,\boldsymbol{n}\,|lm\rangle|^2=1$$

这个结果也可以利用球谐函数的正交归一性和完备性公式

$$\sum_{l'm'}|l'm'\rangle\,\langle l'm'|=1$$

如下直接导出

$$\begin{aligned}\sum_{l'm'}|\langle l'm'|\,\boldsymbol{n}\,|lm\rangle|^2&=\sum_{l'm'}\langle lm|\,\boldsymbol{n}\,|l'm'\rangle\cdot\langle l'm'|\,\boldsymbol{n}\,|lm\rangle\\&=\langle lm|\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{n}\,|lm\rangle=\langle lm|\,lm\rangle=1\end{aligned}$$

12.11 以平面线偏振光射向处于基态的氢原子, 电子可以跃迁到 2p 能级. 设初态电子自旋"向上" ($s_z=\hbar/2$). 设忽略末态 $\mathrm{p}_{3/2}$ 能级和 $\mathrm{p}_{1/2}$ 能级的能量差. (1) 求到 $\mathrm{p}_{3/2}$ 和 $\mathrm{p}_{1/2}$ 能级的分支比 (它与入射光偏振方向无关). (2) 设入射光 (电场) 沿 z 方向偏振, 求到 $\mathrm{p}_{3/2}$ 能级的 $m_j=3/2,1/2,-1/2,-3/2$ 各态的分支比. (3) 设光沿 x 方向入射, 但非偏振光, 求到 $\mathrm{p}_{3/2}$ 能级 $m_j=3/2,1/2,-1/2,-3/2$ 各态的分支比.

解 (1) 非相对论带电粒子受光的照射, 所受的磁场力远小于电场力, 只需要考虑入射光的电场作用. 入射光波长远大于原子大小范围, 则对于氢原子中的电子来说电场可以视为空间均匀电场 (相当于只考虑电偶极跃迁). 设入射光的电场为 $\boldsymbol{\mathcal{E}}=\boldsymbol{\mathcal{E}}_0\cos\omega t$, 入射光对于电子的作用可表示为

$$H'(t)=e\boldsymbol{\mathcal{E}}_0\cdot\boldsymbol{r}\cos\omega t=H'\cos\omega t \tag{12.83}$$

这是周期微扰. 以 $|i\rangle$ 表示电子的初态, $|f\rangle$ 表示终态, 则由一阶含时微扰论, 在入射光作用下电子的跃迁速率如下给出:

$$w_{k'k}=\frac{\pi e^2}{2\hbar}|\langle f|\,\boldsymbol{\mathcal{E}}_0\cdot\boldsymbol{r}\,|i\rangle|^2\,\delta(\omega_{k'k}-\omega) \tag{12.84}$$

按题意电子初态为基态, 终态在 2p 能级, 则初态 $|i\rangle$、终态 $|f\rangle$ 可以表示为

$$|i\rangle=R_{10}(r)\,\|i\rangle\,,\quad |f\rangle=R_{21}(r)\,\|f\rangle \tag{12.85}$$

式中 $\|i\rangle$、$\|f\rangle$ 分别表示初态、终态角动量部分的状态. 这样若令 $\Lambda=\int_0^\infty R_{21}(r)r^3R_{10}(r)\mathrm{d}r$, 电子的跃迁速率为

$$w_{k'k}=\frac{\pi e^2\Lambda^2}{2\hbar}|\langle f\|\,\boldsymbol{\mathcal{E}}_0\cdot\boldsymbol{n}\,\|i\rangle|^2\,\delta(\omega_{k'k}-\omega) \tag{12.86}$$

其中 $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{r}/r$ 为 $\boldsymbol{r}$ 方向的单位矢量. 由此可见, 到不同状态的跃迁速率的差别取决于"约化"跃迁矩阵 $\langle f\|\,\boldsymbol{\mathcal{E}}_0\cdot\boldsymbol{n}\,\|i\rangle$ 的复数平方, 由于 $\boldsymbol{\mathcal{E}}_0$ 为常数量, 上式又可以写为

$$w_{k'k}=\frac{\pi e^2\Lambda^2}{2\hbar}|\boldsymbol{\mathcal{E}}_0\cdot\langle f\|\,\boldsymbol{n}\,\|i\rangle|^2\,\delta(\omega_{k'k}-\omega) \tag{12.86'}$$

角动量态由自旋 - 轨道耦合而成. 采用耦合表象, 角动量态取为 $(\boldsymbol{l}^2,\boldsymbol{J}^2,J_z)$ 的共同本征态, 记为 $|ljm_j\rangle$. 电子初态 $l=m=0,j=1/2,m_j=s_z=1/2$. 故相应的角动量态为

$$\|i\rangle=\left|0\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right\rangle=\mathrm{Y}_{00}\alpha \tag{12.87}$$

这里自旋“向上”($s_z=\hbar/2$) 或者“向下”($s_z=-\hbar/2$) 的状态分别用 α 和 β 表示.

对于末态, 角动量态 $\mathrm{p}_{3/2}$ 由角量子数为 1 的轨道角动量态与自旋耦合而成, 共有 4 个简并态, 相应于 $m_j=\pm1/2,\ \pm3/2$. 查 C.G. 系数这 4 个态可以如下表示:

$$\left|1,\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle=\mathrm{Y}_{11}\alpha \tag{12.88a}$$

$$\left|1,\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}\mathrm{Y}_{11}\beta+\sqrt{\frac{2}{3}}\mathrm{Y}_{10}\alpha \tag{12.88b}$$

$$\left|1,\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle=\sqrt{\frac{2}{3}}\mathrm{Y}_{10}\beta+\frac{1}{\sqrt{3}}\mathrm{Y}_{1,-1}\alpha \tag{12.88c}$$

$$\left|1,\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\right\rangle=\mathrm{Y}_{1,-1}\beta \tag{12.88d}$$

角动量态 $\mathrm{p}_{1/2}$ 由角量子数为 1 的轨道角动量态与自旋耦合而成, 共有 2 个简并态, 相应于 $m_j=\pm1/2$. 查 C.G. 系数[①] 这 2 个态可以如下表示:

$$\left|1,\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle=\sqrt{\frac{2}{3}}\mathrm{Y}_{11}\beta-\frac{1}{\sqrt{3}}\mathrm{Y}_{10}\alpha \tag{12.89a}$$

$$\left|1,\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}\mathrm{Y}_{10}\beta-\sqrt{\frac{2}{3}}\mathrm{Y}_{1,-1}\alpha \tag{12.89b}$$

按照电子的跃迁速率的表达式 (12.86) 或者 (12.86′), 现来计算“约化”矩阵元 $\langle f\|\boldsymbol{n}\|i\rangle$. 由于初态自旋状态为 α, 计算该矩阵元时, 有贡献的只是终态波函数中含有 α 的项. 利用公式

$$\begin{aligned}\boldsymbol{n}&=n_x\boldsymbol{e}_1+n_y\boldsymbol{e}_2+n_z\boldsymbol{e}_3=\sin\theta\cos\varphi\boldsymbol{e}_1+\sin\theta\sin\varphi\boldsymbol{e}_2+\cos\theta\boldsymbol{e}_3\\&=\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}(\mathrm{Y}_{1-1}-\mathrm{Y}_{11})\boldsymbol{e}_1+\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(\mathrm{Y}_{11}+\mathrm{Y}_{1-1})\boldsymbol{e}_2+\mathrm{Y}_{10}\boldsymbol{e}_3\right]\end{aligned} \tag{12.90}$$

由表达式 (12.87)~ 式 (12.89), 注意 $Y_{00}=1/\sqrt{4\pi}$, 并利用球谐函数正交归一关系, 容易求出

$$\begin{cases}\left\langle 1\dfrac{3}{2}\dfrac{3}{2}\right|\boldsymbol{n}\|i\rangle=\dfrac{1}{\sqrt{6}}(-\boldsymbol{e}_1+\mathrm{i}\boldsymbol{e}_2)\\ \left\langle 1\dfrac{3}{2}\dfrac{1}{2}\right|\boldsymbol{n}\|i\rangle=\dfrac{\sqrt{2}}{3}\boldsymbol{e}_3\\ \left\langle 1\dfrac{3}{2}-\dfrac{1}{2}\right|\boldsymbol{n}\|i\rangle=\dfrac{\sqrt{2}}{6}(\boldsymbol{e}_1+\mathrm{i}\boldsymbol{e}_2)\\ \left\langle 1\dfrac{3}{2}-\dfrac{3}{2}\right|\boldsymbol{n}\|i\rangle=0\\ \left\langle 1\dfrac{1}{2}\dfrac{1}{2}\right|\boldsymbol{n}\|i\rangle=-\dfrac{1}{3}\boldsymbol{e}_3\\ \left\langle 1\dfrac{1}{2}-\dfrac{1}{2}\right|\boldsymbol{n}\,|i\rangle=-\dfrac{1}{3}(\boldsymbol{e}_1+\mathrm{i}\boldsymbol{e}_2)\end{cases} \tag{12.91}$$

令入射光 (电场) 为

$$\boldsymbol{\mathcal{E}}_0=\mathcal{E}_{0x}\boldsymbol{e}_1+\mathcal{E}_{0y}\boldsymbol{e}_2+\mathcal{E}_{0z}\boldsymbol{e}_3 \tag{12.92}$$

即得

$$\left|\left\langle 1\frac{3}{2}\frac{3}{2}\right|\boldsymbol{\mathcal{E}}_0\cdot\boldsymbol{n}\|i\rangle\right|^2=\frac{1}{6}\left(\mathcal{E}_{0x}^2+\mathcal{E}_{0y}^2\right)$$

---

① 式 (12.88) 中, 第一式可以直接写出, 其余三式可用降算符 $(J_x-\mathrm{i}J_y)$ 逐次作用于第一式而得出. 式 (12.89) 中, 第一式可以利用与式 (12.88b) 的正交条件写出; 再用降算符 $(J_x-\mathrm{i}J_y)$ 作用于第一式, 得出第二式.

$$
\begin{aligned}
&\left|\left\langle 1\frac{3}{2}\frac{1}{2}\right| \boldsymbol{\mathcal{E}}_0\cdot\boldsymbol{n}\,\|i\rangle\right|^2=\frac{2}{9}\mathcal{E}_{0z}^2\\
&\left|\left\langle 1\frac{3}{2}-\frac{1}{2}\right| \boldsymbol{\mathcal{E}}_0\cdot\boldsymbol{n}\,\|i\rangle\right|^2=\frac{1}{18}\left(\mathcal{E}_{0x}^2+\mathcal{E}_{0y}^2\right)\\
&\left|\left\langle 1\frac{3}{2}-\frac{3}{2}\right| \boldsymbol{\mathcal{E}}_0\cdot\boldsymbol{n}\,\|i\rangle\right|^2=0\\
&\left|\left\langle 1\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right| \boldsymbol{\mathcal{E}}_0\cdot\boldsymbol{n}\,\|i\rangle\right|^2=\frac{1}{9}\mathcal{E}_{0z}^2\\
&\left|\left\langle 1\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right| \boldsymbol{\mathcal{E}}_0\cdot\boldsymbol{n}\,|i\rangle\right|^2=\frac{1}{9}\left(\mathcal{E}_{0x}^2+\mathcal{E}_{0y}^2\right)
\end{aligned}
\tag{12.93}
$$

根据式 (12.86)、式 (12.93), 单位时间内向 $2\mathrm{p}_{3/2}$ 态跃迁的总概率为

$$
w_{3/2}=\frac{\pi e^2\Lambda^2}{2\hbar}\delta(\omega_{k'k}-\omega)\sum_{m_j}\left|\left\langle 1\frac{3}{2}m_j\right| \boldsymbol{\mathcal{E}}_0\cdot\boldsymbol{n}\,\|i\rangle\right|^2=\frac{\pi e^2\Lambda^2}{2\hbar}\delta(\omega_{k'k}-\omega)\times\frac{2}{9}\boldsymbol{\mathcal{E}}_0^2 \tag{12.94}
$$

而单位时间内向 $2\mathrm{p}_{1/2}$ 态跃迁的总概率为

$$
w_{1/2}=\frac{\pi e^2\Lambda^2}{2\hbar}\delta(\omega_{k'k}-\omega)\sum_{m_j}\left|\left\langle 1\frac{1}{2}m_j\right| \boldsymbol{\mathcal{E}}_0\cdot\boldsymbol{n}\,\|i\rangle\right|^2=\frac{\pi e^2\Lambda^2}{2\hbar}\delta(\omega_{k'k}-\omega)\times\frac{1}{9}\boldsymbol{\mathcal{E}}_0^2 \tag{12.95}
$$

二者均和入射光的偏振方向无关. 忽略末态 $\mathrm{p}_{3/2}$ 能级和 $\mathrm{p}_{1/2}$ 能级的能量差, 或者设入射光场中与该两个能级共振的频率处的能量密度相等, 给出分支比为

$$
w_{3/2}:w_{1/2}=2:1 \tag{12.96}
$$

(2) 设入射光 (电场) 沿 z 方向偏振, 则

$$
\boldsymbol{\mathcal{E}}_0=\mathcal{E}_{0z}\boldsymbol{e}_3,\quad \mathcal{E}_{0x}=\mathcal{E}_{0y}=0,\ \mathcal{E}_{0z}=\mathcal{E}_0
$$

根据式 (12.86)、式 (12.93) 易知, 当终态为 $2\mathrm{p}_{3/2}$ 时到 $m_j=3/2,1/2,-1/2,-3/2$ 态的分支比为 0:1:0:0. 也就是终态只能是 $(ljm_j)=\left(1\frac{3}{2}\frac{1}{2}\right)$. 其原因在于, 此时 $[H,J_z]=0$, 从而 $\Delta m_j=0$. 终态为 $2\mathrm{p}_{3/2}$ 时, 除了 $(ljm_j)=\left(1\frac{3}{2}\frac{1}{2}\right)$ 以外, 其余的不满足 $\Delta m_j=0$.

(3) 当入射光为沿 x 方向入射的非偏振光时

$$
\mathcal{E}_{0x}=0,\ \left\langle\mathcal{E}_{0y}^2\right\rangle=\left\langle\mathcal{E}_{0z}^2\right\rangle=\frac{1}{2}\mathcal{E}_0^2
$$

这种情况下, 由式 (12.93) 得

$$
\begin{aligned}
&\left|\left\langle 1\frac{3}{2}\frac{3}{2}\right| \boldsymbol{\mathcal{E}}_0\cdot\boldsymbol{n}\,\|i\rangle\right|^2=\frac{1}{12}\mathcal{E}_0^2\\
&\left|\left\langle 1\frac{3}{2}\frac{1}{2}\right| \boldsymbol{\mathcal{E}}_0\cdot\boldsymbol{n}\,\|i\rangle\right|^2=\frac{1}{9}\mathcal{E}_0^2\\
&\left|\left\langle 1\frac{3}{2}-\frac{1}{2}\right| \boldsymbol{\mathcal{E}}_0\cdot\boldsymbol{n}\,\|i\rangle\right|^2=\frac{1}{36}\mathcal{E}_0^2\\
&\left|\left\langle 1\frac{3}{2}-\frac{3}{2}\right| \boldsymbol{\mathcal{E}}_0\cdot\boldsymbol{n}\,\|i\rangle\right|^2=0
\end{aligned}
$$

根据式 (12.86), 当终态为 $2\mathrm{p}_{3/2}$ 时到 $m_j=3/2,1/2,-1/2,-3/2$ 态的分支比为 3:4:1:0.

12.12 用沿 z 方向传播的右旋圆偏振光照射原子, 原子从能级 $E_{nl}\to E_{n'l'}$, 求选择定则.

解 非相对论带电粒子受光的照射, 所受的磁场力远小于电场力, 只需要考虑入射光的电场作用. 入射光波长远大于原子大小范围, 则对于原子中的电子来说电场可以视为空间均匀电场 (相当于只考虑电偶极跃迁). 入射光为沿正 z 方向传播的右旋圆偏振光, 其电场可表示为

$$\begin{aligned}
&\mathcal{E}_x(t) = \mathcal{E}_0 \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} + \mathcal{E}_0 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} = 2\mathcal{E}_0 \cos\omega t \\
&\mathcal{E}_y(t) = -\mathrm{i}\mathcal{E}_0 \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} + \mathrm{i}\mathcal{E}_0 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} = 2\mathcal{E}_0 \sin\omega t \\
&\mathcal{E}_z(t) = 0
\end{aligned}$$

或者

$$\boldsymbol{\mathcal{E}}(t) = \boldsymbol{e}_1 \mathcal{E}_x(t) + \boldsymbol{e}_2 \mathcal{E}_y(t) = (\boldsymbol{e}_1 - \mathrm{i}\boldsymbol{e}_2)\, \mathcal{E}_0 \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} + (\boldsymbol{e}_1 + \mathrm{i}\boldsymbol{e}_2) \mathcal{E}_0 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \tag{12.97}$$

入射光对电子的作用可表示为

$$H'(t) = e\boldsymbol{\mathcal{E}}_0 \cdot \boldsymbol{r} \cos\omega t = (x - \mathrm{i}y)\, e\mathcal{E}_0 \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} + (x + \mathrm{i}y) e\mathcal{E}_0 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \tag{12.98}$$

这是周期微扰.

(a) 电子由 (nlm) 态 $\to (n'l'm')$ 态, $E_{nl} > E_{n'l'}$. 电子由高能级跃迁到低能级 (放出光子), 这时式 (12.98) 中只有 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}$ 项对跃迁产生其作用. 按照一阶含时微扰, 单位时间的跃迁概率为

$$w_{k'k} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} P_{k'k} = \frac{\pi}{2\hbar} \left| \langle n'l'm' | \, (x - \mathrm{i}y)\, e\mathcal{E}_0 \, | nlm \rangle \right|^2 \delta(\omega_{k'k} - \omega) \tag{12.99}$$

式中 $\langle n'l'm' | \, (x - \mathrm{i}y)\, e\mathcal{E}_0 \, | nlm \rangle$ 为跃迁矩阵元, 如下给出:

$$\langle n'l'm' | \, (x - \mathrm{i}y)\, e\mathcal{E}_0 \, | nlm \rangle = e\mathcal{E}_0 \int_0^{+\infty} R^*_{n'l'} r^3 R_{nl} \mathrm{d}r \, \langle l'm' | \, n_x - \mathrm{i}n_y \, | lm \rangle$$

利用球谐函数的递推关系

$$\begin{aligned}
&(n_x \pm \mathrm{i}n_y)\, \mathrm{Y}_{lm} = \sin\theta \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}\varphi} \mathrm{Y}_{lm}(\theta, \varphi) \\
&= \mp \left[\frac{(l \pm m + 2)(l \pm m + 1)}{(2l + 3)(2l + 1)} \right]^{\frac{1}{2}} \mathrm{Y}_{l+1, m\pm 1} \mp \left[\frac{(l \mp m)(l \mp m - 1)}{(2l - 1)(2l + 1)} \right]^{\frac{1}{2}} \mathrm{Y}_{l-1, m\pm 1}
\end{aligned} \tag{12.100}$$

以及正交关系, 要求跃迁矩阵元不等于零, 给出选择定则为

$$\Delta l = \pm 1, \quad \Delta m = m' - m = -1$$

(b) 电子由 (nlm) 态 $\to (n'l'm')$ 态, $E_{nl} < E_{n'l'}$. 电子由高能级跃迁到低能级 (吸收光子), 这时式 (12.98) 中只有 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$ 项对跃迁产生其作用. 跃迁矩阵元为 $\langle n'l'm' | \, (x + \mathrm{i}y)\, e\mathcal{E}_0 \, | nlm \rangle$, 如下给出:

$$\langle n'l'm' | \, (x + \mathrm{i}y)\, e\mathcal{E}_0 \, | nlm \rangle = e\mathcal{E}_0 \int_0^{+\infty} R^*_{n'l'} r^3 R_{nl} \mathrm{d}r \, \langle l'm' | \, n_x + \mathrm{i}n_y \, | lm \rangle$$

同样利用球谐函数递推关系得到的式 (12.100) 与球谐函数正交关系, 要求跃迁矩阵元不等于零, 给出选择定则为

$$\Delta l = \pm 1, \quad \Delta m = m' - m = +1$$

我们可以用角动量守恒定律解释以上结果. 光子自旋为 $\hbar$, 其 z 分量为 $\hbar$、0、$-\hbar$. 沿正 z 方向传播的右旋偏振光, 光子自旋的 z 分量为 $\hbar$, 当电子吸收一个光子后, 其角动量的 z 分量增加 $\hbar$, 故有选择定则 $\Delta m = m' - m = +1$. 反之, 在受激辐射中, 电子放出一个右旋偏振光子后, 角动量 z 分量减少 $\hbar$, 故选择定则为 $\Delta m = m' - m = -1$.

量子数 l 的选择定则 $\Delta l = \pm 1$ 也可以用电子–光子角动量耦合的矢量模型 (三角形法则) 结合宇称考虑而得到解释.

说明 被电子吸收或放出的光子, 其轨道角动量为 0, 理由如下: 光子动量 $p = \hbar/\lambda$, λ 为波长. 轨道角动量约为 $|\boldsymbol{l}| \sim rp \sim \hbar a_0/\lambda$, a_0 为 Bohr 半径. 由于 $\lambda \gg a_0$, 所以 $|\boldsymbol{l}| \ll \hbar$, 即 $|\boldsymbol{l}| \sim 0$. 所以被电子吸收或放出的光子角动量只需要考虑光子的自旋.

12.13 一维运动的体系, 从 $|m\rangle$ 态跃迁到 $|n\rangle$ 态所相应的振子强度定义为

$$f_{nm} = \frac{2\mu\omega_{nm}}{\hbar} |\langle n| x |m\rangle|^2$$

μ 为粒子质量. 求证

$$\sum_n f_{nm} = 1 \quad \left(\sum_n \text{指对一切能量本征态求和}\right)$$

(Thomas-Reich-Kuhn 求和规则)

证明 题 5.18 证明了求和规则, 即如下式 (5.46)

$$\sum_n (E_n - E_m)|x_{nm}|^2 = \frac{\hbar^2}{2\mu}$$

那里是对于多维情况而言的, 对于一维体系上式当然也成立. 上式可化为

$$\sum_n \frac{E_n - E_m}{\hbar} \frac{2\mu}{\hbar} |\langle n| x |m\rangle|^2 = 1$$

根据题给定义, 上式即

$$\sum_n f_{nm} = 1$$

第 13 章　散 射 理 论

13.1　试用 Born 近似法计算如下势散射的微分截面：(1) $V(r)=\begin{cases}-V_0, & r<a\\ 0, & r>a\end{cases}$ (2) $V(r)=V_0\mathrm{e}^{-\alpha r^2}\quad(\alpha>0)$; (3)$V(r)=\kappa\dfrac{\mathrm{e}^{-\alpha r}}{r}\quad(\alpha>0)$; (4) $V(r)=V_0\mathrm{e}^{-\alpha r}\quad(\alpha>0)$; (5) $V(r)=\alpha/r^2$.

解　先列出 Born 近似法的基本公式 ①. 设粒子质量是 μ, 势函数是 $V(\boldsymbol{r})$. 入射粒子波数 $\boldsymbol{k}_i=(0,0,k)$, 散射粒子波数 $\boldsymbol{k}_f$. 因是弹性散射, 散射前后波数大小不变 $k_f=k_i=k$ 不变, 它与粒子能量 E 的关系是 $k^2=2\mu E/\hbar^2$. 散射粒子与入射粒子波数矢量差

$$\boldsymbol{k}_f-\boldsymbol{k}_i=\boldsymbol{q},\quad q=q(\theta)=2k\sin\frac{\theta}{2} \tag{13.1}$$

$\hbar\boldsymbol{q}$ 是散射导致的动量转移. 散射振幅如下给出

$$f(\theta,\varphi)=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\iiint \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}V(\boldsymbol{r}) \tag{13.2}$$

此为一级近似下的 Born 散射振幅公式, 一般适用于高能粒子散射. 微分截面

$$\sigma(\theta,\varphi)=|f(\theta,\varphi)|^2 \tag{13.3}$$

对于中心势 $V(r)$, 散射振幅与 φ 无关. 此时散射振幅用下述一维定积分计算

$$f(\theta)=\frac{-2\mu}{\hbar^2q}\int_0^\infty rV(r)\sin qr\mathrm{d}r \tag{13.4}$$

微分截面

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2 \tag{13.5}$$

现在来求题给各种势散射的微分截面.

(1) $V(r)=\begin{cases}-V_0, & r<a\\ 0, & r>a\end{cases}$, 根据式 (13.4) 得散射振幅为

$$\begin{aligned}f(\theta)&=\frac{-2\mu}{\hbar^2q}\int_0^\infty rV(r)\sin qr\mathrm{d}r=\frac{-2\mu}{\hbar^2q}\int_0^a r\,(-V_0)\sin qr\mathrm{d}r\\&=\frac{2\mu V_0}{\hbar^2q}\int_0^a r\sin qr\mathrm{d}r=\frac{2\mu V_0}{\hbar^2q}\left(-\frac{a\cos aq}{q}+\frac{\sin aq}{q^2}\right)\\&=\frac{2\mu V_0}{\hbar^2q^3}\left(\sin aq-aq\cos aq\right)\end{aligned}$$

根据式 (13.5), 得微分散射截面为 $\sigma(\theta)=\dfrac{4\mu^2V_0^2}{\hbar^4q^6}\left(\sin aq-aq\cos aq\right)^2$. 其中 q 为动量转移的大小是 θ 的函数. 为行文简单, 这里不再将 q 的具体表达式 (13.1) 代入, 下同.

① 读者可参考题 13.2 的从式 (13.8) 到式 (13.11) 的有关结果.

(2) $V(r)=V_0\mathrm{e}^{-\alpha r^2}$ $(\alpha>0)$, 根据式 (13.4) 得散射振幅为

$$\begin{aligned}f(\theta)&=\frac{-2\mu}{\hbar^2 q}\int_0^\infty rV_0\mathrm{e}^{-\alpha r^2}\sin qr\mathrm{d}r=\frac{\mu V_0}{\hbar^2 q\alpha}\int_0^\infty \sin qr\mathrm{d}\mathrm{e}^{-\alpha r^2}\\&=\frac{\mu V_0}{\hbar^2\alpha}\int_0^\infty \mathrm{e}^{-\alpha r^2}\cos qr\mathrm{d}r=\frac{\mu V_0}{2\hbar^2\alpha}\int_{-\infty}^\infty \mathrm{e}^{-\alpha r^2}\cos qr\mathrm{d}r\\&=\frac{\mu V_0}{4\hbar^2\alpha}\int_{-\infty}^\infty\left(\mathrm{e}^{-\alpha r^2+\mathrm{i}qr}+\mathrm{e}^{-\alpha r^2-\mathrm{i}qr}\right)\mathrm{d}r\\&=\frac{\mu V_0}{4\hbar^2\alpha}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}\left(\mathrm{e}^{-\frac{q^2}{4\alpha}}+\mathrm{e}^{-\frac{q^2}{4\alpha}}\right)=\frac{\mu V_0\sqrt{\pi}}{2\hbar^2\alpha^{\frac{3}{2}}}\mathrm{e}^{-\frac{q^2}{4\alpha}}\end{aligned}$$

根据式 (13.5), 得微分散射截面为 $\sigma(\theta)=\dfrac{\pi\mu^2V_0^2}{4\hbar^4\alpha^3}\mathrm{e}^{-\frac{q^2}{2\alpha}}$.

(3) $V(r)=\kappa\dfrac{\mathrm{e}^{-\alpha r}}{r}$ $(\alpha>0)$, 根据式 (13.4) 得散射振幅为

$$f(\theta)=\frac{-2\mu}{\hbar^2 q}\int_0^\infty r\left(\kappa\frac{\mathrm{e}^{-\alpha r}}{r}\right)\sin qr\mathrm{d}r=\frac{-2\mu\kappa}{\hbar^2 q}\int_0^\infty \mathrm{e}^{-\alpha r}\sin qr\mathrm{d}r \tag{13.6}$$

式中出现的积分 $I=\displaystyle\int_0^\infty \mathrm{e}^{-\alpha r}\sin qr\mathrm{d}r$ 可以如下计算:

$$\begin{aligned}I&=\int_0^\infty \mathrm{e}^{-\alpha r}\sin qr\mathrm{d}r=\frac{1}{-\alpha}\int_0^\infty \sin qr\mathrm{d}\mathrm{e}^{-\alpha r}\\&=0-\frac{q}{-\alpha}\int_0^\infty \mathrm{e}^{-\alpha r}\cos qr\mathrm{d}r=-\frac{q}{\alpha^2}\int_0^\infty \cos qr\mathrm{d}\mathrm{e}^{-\alpha r}\\&=-\frac{q}{\alpha^2}\left(\cos qr\mathrm{e}^{-\alpha r}\big|_0^\infty-q\int_0^\infty -\sin qr\mathrm{e}^{-\alpha r}\mathrm{d}r\right)=\frac{q}{\alpha^2}-\frac{q^2}{\alpha^2}I\end{aligned}$$

即有 $I=\dfrac{q}{\alpha^2}-\dfrac{q^2}{\alpha^2}I$, 可见 $I=\dfrac{q}{\alpha^2}\Big/\left(1+\dfrac{q^2}{\alpha^2}\right)=\dfrac{q}{\alpha^2+q^2}$. 这样式 (13.6) 得到散射振幅为

$$f(\theta)=\frac{-2\mu\kappa}{\hbar^2 q}\times\frac{q}{\alpha^2+q^2}=\frac{-2\mu\kappa}{\hbar^2\left(\alpha^2+q^2\right)} \tag{13.7}$$

根据式 (13.5), 得微分散射截面为

$$\sigma(\theta)=\frac{4\mu^2\kappa^2}{\hbar^4\left(\alpha^2+q^2\right)^2}$$

(4) $V(r)=V_0\mathrm{e}^{-\alpha r}(\alpha>0)$, 根据式 (13.4) 得散射振幅为

$$\begin{aligned}f(\theta)&=\frac{-2\mu}{\hbar^2 q}\int_0^\infty rV_0\mathrm{e}^{-\alpha r}\sin qr\mathrm{d}r=\frac{\mathrm{i}\mu V_0}{\hbar^2 q}\int_0^\infty\left[r\mathrm{e}^{-(\alpha-\mathrm{i}q)r}-r\mathrm{e}^{-(\alpha+\mathrm{i}q)r}\right]\mathrm{d}r\\&=\frac{\mathrm{i}\mu V_0}{\hbar^2 q}\left[\frac{1}{(\alpha-\mathrm{i}q)^2}-\frac{1}{(\alpha+\mathrm{i}q)^2}\right]=\frac{\mathrm{i}\mu V_0}{\hbar^2 q}\frac{4\mathrm{i}\alpha q}{\left(\alpha^2+q^2\right)^2}\end{aligned}$$

即散射振幅为

$$f(\theta)=-\frac{\mu V_0}{\hbar^2}\frac{4\alpha}{\left(\alpha^2+q^2\right)^2}$$

根据式 (13.5), 得微分散射截面为

$$\sigma(\theta)=\frac{16\mu^2V_0^2}{\hbar^4}\frac{\alpha^2}{\left(\alpha^2+q^2\right)^4}$$

(5) $V(r)=\alpha/r^2 \quad (\alpha>0)$, 根据式 (13.4) 得散射振幅为

$$f(\theta)=\frac{-2\mu}{\hbar^2 q}\int_0^\infty r\frac{\alpha}{r^2}\sin qr\mathrm{d}r=\frac{-2\mu\alpha}{\hbar^2 q}\int_0^\infty\frac{\sin qr}{r}\mathrm{d}r$$
$$=\frac{-\mu\alpha}{\hbar^2 q}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x=\frac{-\pi\mu\alpha}{\hbar^2 q}$$

根据式 (13.5), 得微分散射截面为

$$\sigma(\theta)=\frac{\pi^2\mu^2\alpha^2}{\hbar^4 q^2}$$

13.2 证明散射波幅的 Born 二级修正表示式为

$$f^{(2)}(\theta,\varphi)=\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^2\frac{1}{4\pi}\frac{1}{(2\pi)^3}\iiint\mathrm{d}^3\boldsymbol{k}'\frac{V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')V(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}_0)}{\boldsymbol{k}'^2-\boldsymbol{k}^2}$$

其中

$$V(\boldsymbol{q})=\iiint\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}V(\boldsymbol{r})$$

证明 本题要求证明 Born 近似的二级修正, 因二级修正计算要用到一阶近似的结果和有关推导, 为完整和方便起见, 一阶近似的有关推导和结果也在这里一并列出.

具有一定能量 E 的入射粒子 (设其质量为 μ) 在势场的作用下发生散射, 它的波函数满足如下定态 Schrödinger 方程

$$\left(\nabla^2+k^2\right)\psi=\frac{2\mu}{\hbar^2}V(\boldsymbol{r})\psi,\quad k=\sqrt{2\mu E}/\hbar \tag{13.8}$$

入射粒子可用平面波来描述

$$\psi_i=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{x}} \tag{13.9}$$

其中 $\boldsymbol{k}_0=(0,0,k)$ 为相应的波矢. 粒子总的波函数为

$$\psi=\psi_i+\psi_{\mathrm{sc}}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}+\psi_{\mathrm{sc}} \tag{13.10}$$

其中 ψ_{sc} 为散射波. 散射边界条件为

$$\psi=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}+\psi_{\mathrm{sc}}\xrightarrow{r\to\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}+\frac{1}{r}f(\theta,\varphi)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr} \tag{13.11}$$

其中的 $f(\theta,\varphi)$ 为粒子散射到 (θ,φ) 方向的散射振幅.

根据 Schrödinger 方程 (13.8), 可知散射问题的波函数满足积分方程

$$\psi(\boldsymbol{x})=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{x}}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\int\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}'G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')V(\boldsymbol{x}')\psi(\boldsymbol{x}') \tag{13.12}$$

此式称为 Lippman-Schwinger 方程. 式中 Green 函数为

$$G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')=\frac{1}{(2\pi)^3}\int\frac{1}{k^2-k'^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')}\mathrm{d}^3\boldsymbol{k}' \tag{13.13}$$

满足

$$\left(\nabla^2+k^2\right)G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')=\delta^{(3)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \tag{13.14}$$

表达式 (13.13) 中包含一个奇异函数积分. 相应于散射边界条件, 式中 Green 函数应取

$$G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')=G(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')=-\frac{1}{4\pi|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|} \tag{13.15}$$

这相当于在式 (13.13) 中, 令 ①

$$k \to k + \mathrm{i}0^+ \tag{13.16}$$

在 Born 近似中, 以式 (13.9) 的 ψ_i 作为 ψ 的零级近似, ψ 的逐级展开为

$$\psi = \psi^{(0)} + \psi^{(1)} + \psi^{(2)} + \cdots, \quad \psi^{(0)} = \psi_i \tag{13.17}$$

与式 (13.10) 比较, 也就是

$$\psi_{\mathrm{sc}} = \psi^{(1)} + \psi^{(2)} + \cdots$$

按散射边界条件

$$\psi^{(1)} \xrightarrow{r\to\infty} f^{(1)}(\theta,\varphi)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}, \quad \psi^{(2)} \xrightarrow{r\to\infty} f^{(2)}(\theta,\varphi)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} \tag{13.18}$$

也就有

$$\psi_{\mathrm{sc}} \xrightarrow{r\to\infty} \left[f^{(1)} + f^{(2)} + \cdots\right]\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} = f(\theta,\varphi)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} \tag{13.19}$$

上式看出 $f^{(1)}$、$f^{(2)}$ 为散射振幅 $f(\theta,\varphi)$ 的一级近似和二级修正.

现在将 ψ 的逐级展开式 (13.17) 代入 Lippman-Schwinger 方程 (13.12) 中, 将势场 V 视为微扰, 比较同级项 ②, 给出一阶和二阶方程如下:

$$\psi^{(1)}(\boldsymbol{x}) = \frac{2\mu}{\hbar^2}\int G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')\,V(\boldsymbol{x}')\psi^{(0)}(\boldsymbol{x}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}' \tag{13.20}$$

$$\psi^{(2)}(\boldsymbol{x}) = \frac{2\mu}{\hbar^2}\int G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')\,V(\boldsymbol{x}')\psi^{(1)}(\boldsymbol{x}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}' \tag{13.21}$$

在式 (13.20) 中, $\psi^{(0)}(\boldsymbol{x}') = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{x}'}$, 再代入 Green 函数的表达式 (13.15)

$$\psi^{(1)}(\boldsymbol{x}) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}V(\boldsymbol{x}')\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{x}'}\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}' \tag{13.22}$$

一般情况下, 位势 V 基本上局限于空间有限区域. 当 $r\to\infty$ 时, $r \gg r'$, 因而

$$|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'| = \sqrt{r^2 - 2\boldsymbol{x}'\cdot\boldsymbol{x}} \approx r - \boldsymbol{x}'\cdot\frac{\boldsymbol{x}}{r}$$

式 (13.22) 的被积函数中, 分母 $|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|$ 是一个光滑的缓变函数, 当 $r\to\infty$ 时, 可以直接用 r 代替, 但分子是一个随 $\boldsymbol{r}'$ 迅速振荡的函数, 其中

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|} \approx \mathrm{e}^{\mathrm{i}k\left(r-\boldsymbol{x}'\cdot\frac{\boldsymbol{x}}{r}\right)} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-\boldsymbol{k}_f\cdot\boldsymbol{x}')} \tag{13.23}$$

其中 $\boldsymbol{k} = k\dfrac{\boldsymbol{x}}{r}$, $\hbar\boldsymbol{k}$ 是出射粒子动量. 由于是弹性散射, $|\boldsymbol{k}| = |\boldsymbol{k}_0| = k$. 这样式 (13.22) 给出

$$\psi^{(1)} \xrightarrow{r\to\infty} -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}\int V(\boldsymbol{x}')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}_f-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{x}'}\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}' \tag{13.24}$$

---

① 若是令 $k \to k - \mathrm{i}0^+$, 则给出

$$G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') = -\frac{1}{4\pi|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}$$

不符合散射边界条件, 应舍去. 式 (13.14) 作为二阶微分方程, 其独立解只有两个. 由此知因散射边界条件的要求, Green 函数只有式 (13.5) 所给的一个解.

② 作为一种技巧, 也可以对微扰 V 引进小量 λ, 使得 $V = \lambda W$; 再将式 (13.17) 表示为按 λ 的级数展开式 $\psi = \psi^{(0)} + \lambda\psi^{(1)} + \lambda^2\psi^{(2)} + \cdots$ 代入 Lippman-Schwinger 方程后比较 λ 的同次幂项.

与式 (13.18) 比较, 即得散射振幅的一级近似

$$f^{(1)}(\theta,\varphi)=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int V(\boldsymbol{x}')\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}'}\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}' \tag{13.25}$$

其中 $\boldsymbol{q}=\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0$, 大小为 $q=2k\sin\dfrac{\theta}{2}$, 而 θ 为散射角. 将 $\hbar$ 乘 $\boldsymbol{q}$, $\hbar\boldsymbol{q}=\hbar\boldsymbol{k}-\hbar\boldsymbol{k}_0$ 为末动量与初始动量的矢量差, 即动量转移. 可见一阶散射振幅形式上正好为势函数的 Fourier 变换, 或者说它是动量空间的作用势.

将式 (13.20) 代入式 (13.21), 并将式 (13.21) 中积分变数 $\boldsymbol{x}'$ 改写为 $\boldsymbol{x}''$, 得到

$$\psi^{(2)}(\boldsymbol{x})=\left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^2\iint G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}'')V(\boldsymbol{x}'')G(\boldsymbol{x}'',\boldsymbol{x}')V(\boldsymbol{x}')\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{x}'}\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}'\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}'' \tag{13.26}$$

考察散射行为. 当 $r\to\infty$ 时, $r\gg r''$, 对 $G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}'')$ 可作类似于式 (13.23) 的近似处理, 即

$$G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}'')=-\frac{1}{4\pi}\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}''|}}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}''|}\xrightarrow{r\to\infty}-\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{4\pi r}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{x}''} \tag{13.27}$$

观察所要证明的形式, 式 (13.26) 中 $G(\boldsymbol{x}'',\boldsymbol{x}')$ 取式 (13.13) 代入, 可得当 $r\to\infty$ 时,

$$\begin{aligned}\psi^{(2)}(\boldsymbol{x})&=-\left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^2\frac{1}{(2\pi)^3}\frac{1}{4\pi}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}\iiint\frac{V(\boldsymbol{x}'')}{k'^2-k^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot(\boldsymbol{x}''-\boldsymbol{x}')}V(\boldsymbol{x}')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}_0)\cdot\boldsymbol{x}'}\mathrm{d}^3\boldsymbol{k}'\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}'\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}''\\&=\left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^2\frac{1}{32\pi^4}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}\int\frac{1}{k'^2-k^2}V\left(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'\right)V\left(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}_0\right)\mathrm{d}^3\boldsymbol{k}'\end{aligned} \tag{13.28}$$

与式 (13.18) 比较, 即得散射振幅的二级近似

$$f^{(2)}(\theta,\varphi)=\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^2\frac{1}{4\pi}\frac{1}{(2\pi)^3}\iiint\mathrm{d}^3\boldsymbol{k}'\frac{V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')V(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}_0)}{\boldsymbol{k}'^2-\boldsymbol{k}^2} \tag{13.29}$$

得证.

说明 1 式 (13.28)、式 (13.29) 中, k^2 均应根据散射边界条件要求, 理解成 $(k+\mathrm{i}0^+)^2$.

说明 2 从量子跃迁观点来看, 散射过程相当于从初态 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{x}}$ 向终态 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}$ 的跃迁, $V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0)$ 相当于跃迁矩阵元. 式 (13.24) 相当于微扰论一级近似. 式 (13.28) 相当于二级微扰修正, 即二级跃迁: 先由 $\boldsymbol{k}_0$ 变到中间态 $\boldsymbol{k}'$, 再由中间态 $\boldsymbol{k}'$ 变到终态 $\boldsymbol{k}$, V 的两个矩阵元清楚地表明了这一点.

13.3 用 Born 近似处理快速电子对氢原子 (处于基态) 的散射, 证明 (1) 氢原子的形状因子为 $F(\theta)=\left(1+q^2a^2/4\right)^{-2}$, 其中 $q=2k\sin(\theta/2)$, $k=\sqrt{2\mu E}/\hbar$, $a=\hbar^2/\mu e^2$(Bohr 半径). (2) 微分截面为

$$\sigma(\theta)=\frac{4a^2(8+q^2a^2)^2}{(4+q^2a^2)^4}$$

(3) 总截面为

$$\sigma_t=\frac{\pi a^2}{3}\frac{7k^4a^4+18k^2a^2+12}{(k^2a^2+1)^3}$$

(4) 在高能极限下

$$\sigma_t\approx\frac{7\pi}{3k^2}$$

证明 (1) 电子受原子的散射, 一方面受到原子核的 Coulomb 引力作用, 另外还受到核外电子的 Coulomb 斥力. 核外电子的作用近似用一个电荷分布 $-e\rho(\boldsymbol{r})$ 的作用来代替, 这样电子受原子的散射, 势函数取

$$V(r)=-\frac{e^2}{r}+e^2\iiint\frac{\rho(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'$$

利用 Born 一级近似, 可得散射振幅 ① 为

$$f(\theta)=\frac{2\mu e^2}{\hbar^2q^2}\left[1-F(\theta)\right]=\frac{2}{aq^2}\left[1-F(\theta)\right] \tag{13.30}$$

其中

$$F(\theta)=\iiint\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}\rho(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{13.31}$$

是 $\rho(\boldsymbol{r})$ 的 Fourier 变换, 称为与电荷分布 $[-e\rho(\boldsymbol{r})]$ 相应的形状因子, 它反映核外电子的屏蔽效应.

氢原子基态波函数

$$\psi_{100}=\frac{1}{\sqrt{\pi\,a_0^3}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}} \tag{13.32}$$

其中 $a_0=\hbar^2/\mu e^2$ 为 Bohr 半径. 相应的电子密度为

$$\rho(\boldsymbol{r})=|\psi_{100}|^2=\frac{1}{\pi a_0^3}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}} \tag{13.33}$$

将上式代入式 (13.31), 得氢原子核外电子的形状因子

$$F(\theta)=\frac{1}{\pi a_0^3}\iiint\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{13.34}$$

式中 $\boldsymbol{r}$ 是积分变量, 我们不妨选其 z 轴沿动量转移 $\boldsymbol{q}$ 方向, 这样 $\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}=pr\cos\theta$. 因而

$$\begin{aligned}F(\theta)&=\frac{1}{\pi a_0^3}\iiint\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a}-\mathrm{i}qr\cos\theta}r^2\sin\theta\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi=\frac{2}{a_0^3}\iint\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a}-\mathrm{i}qr\cos\theta}\sin\theta\mathrm{d}\theta r^2\mathrm{d}r\\&=\frac{2}{a_0^3}\int_0^\infty\frac{1}{\mathrm{i}qr}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a}-\mathrm{i}qr\cos\theta}\Big|_{\theta=0}^{\pi}r^2\mathrm{d}r=\frac{2}{\mathrm{i}qa_0^3}\int_0^\infty\left(\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a}+\mathrm{i}qr}-\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a}-\mathrm{i}qr}\right)r\mathrm{d}r\\&=\frac{2}{\mathrm{i}qa_0^3}\left\{\frac{1}{(2/a-\mathrm{i}q)^2}-\frac{1}{(2/a+\mathrm{i}q)^2}\right\}=\frac{1}{(1+q^2a^2/4)^2}\end{aligned}$$

也就是氢原子核外电子的形状因子为

$$F(\theta)=\frac{1}{(1+q^2a^2/4)^2} \tag{13.35}$$

(2) 式 (13.35) 代入式 (13.30) 得散射振幅

$$f(\theta)=\frac{2}{aq^2}\left[1-F(\theta)\right]=\frac{2a\left(8+q^2a^2\right)}{\left(4+q^2a^2\right)^2} \tag{13.36}$$

因而微分散射截面为

$$\sigma(\theta)=\frac{4a^2(8+q^2a^2)^2}{(4+q^2a^2)^4} \tag{13.37}$$

① 参见, 曾谨言, 量子力学 (第四版卷 I)[M], 北京: 科学出版社, 2007, p.421.

(3) 式 (13.37) 对整个 4π 立体角空间积分给出总散射截面, 即

$$\sigma_t = \int \frac{4a^2(8+q^2a^2)^2}{(4+q^2a^2)^4}\sin\theta \mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi = 2\pi\int_0^\pi \frac{4a^2(8+q^2a^2)^2}{(4+q^2a^2)^4}\sin\theta\mathrm{d}\theta$$

式中 $q = 2k\sin\dfrac{\theta}{2}$, 而 $\sin\theta\mathrm{d}\theta$ 可表示为

$$\sin\theta\mathrm{d}\theta = 2\mathrm{d}\sin^2\frac{\theta}{2}$$

故可作变量代换 $x = k^2a^2\sin^2\dfrac{\theta}{2}$, $\mathrm{d}x = k^2a^2\mathrm{d}\sin^2\dfrac{\theta}{2} = \dfrac{1}{2}k^2a^2\sin\theta\mathrm{d}\theta$, 这样

$$\begin{aligned}
\sigma_t =& 4\pi\int_0^{k^2a^2}\frac{4a^2(8+4x)^2}{(4+4x)^4}k^{-2}a^{-2}\mathrm{d}x = \frac{\pi}{k^2}\int_0^{k^2a^2}\frac{(2+x)^2}{(1+x)^4}\mathrm{d}x \\
=& \frac{\pi}{k^2}\int_0^{k^2a^2}\left[\frac{1}{(1+x)^4}+\frac{2}{(1+x)^3}+\frac{1}{(1+x)^2}\right]\mathrm{d}x \\
=& -\frac{\pi}{k^2}\left[\frac{1}{3(1+x)^3}+\frac{1}{(1+x)^2}+\frac{1}{1+x}\right]\Bigg|_0^{k^2a^2} \\
=& \frac{\pi a^2}{3}\frac{7k^4a^4+18k^2a^2+12}{(k^2a^2+1)^3}
\end{aligned}$$

也就是总散射截面为

$$\sigma_t = \frac{\pi a^2}{3}\frac{7k^4a^4+18k^2a^2+12}{(k^2a^2+1)^3} \tag{13.38}$$

(4) 在高能极限下, $ka \gg 1$, 这样在式 (13.38) 中 ka 的最高次幂占主导, 因而此时

$$\sigma_t \approx \frac{7\pi}{3k^2} \tag{13.39}$$

证毕.

13.4 质量为 μ 的粒子被球壳势场 $V(r) = \gamma\delta(r-a)$ 散射, 在高能散射情况下, 可用 Born 近似计算其散射波幅和截面, 给出计算结果.

解 根据式 (13.4) 得散射振幅为

$$f(\theta) = \frac{-2\mu}{\hbar^2 q}\int_0^\infty rV(r)\sin qr\mathrm{d}r = \frac{-2\mu}{\hbar^2 q}\int_0^\infty r\gamma\delta(r-a)\sin qr\mathrm{d}r = \frac{-2\mu\gamma}{\hbar^2 q}a\sin qa$$

其中动量转移的大小 $q = 2k\sin(\theta/2)$, 故

$$f(\theta) = -\frac{2\mu\gamma a^2}{\hbar^2}\frac{\sin\left(2ak\sin\dfrac{\theta}{2}\right)}{2ak\sin\dfrac{\theta}{2}} \tag{13.40}$$

根据式 (13.5), 得微分散射截面为

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{4\mu^2a^2\gamma^2}{\hbar^4q^2}\sin^2 qa = \frac{4\mu^2a^2\gamma^2}{\hbar^4}\frac{\sin^2\left(2ak\sin\dfrac{\theta}{2}\right)}{\left(2ak\sin\dfrac{\theta}{2}\right)^2} \tag{13.41}$$

在高能条件 ($ka \gg 1$) 下, 对于一般的散射角 θ, 有 $ka\theta \gg 1$, 上式中 $\sin\left(2ak\sin\dfrac{\theta}{2}\right)$ 随 θ 变化而快速振荡, 因而其平方可以取其平均值 $1/2$, 此时微分散射截面可表示为

$$\sigma(\theta) \approx \frac{\mu^2 a^2 \gamma^2}{2\hbar^4 k^2 \sin^2\dfrac{\theta}{2}}, \quad ka\theta \gg 1 \tag{13.42}$$

对于 $\theta \to 0$, 式 (13.42) 不适用. 根据式 (13.40)

$$f(0) = -\frac{2\mu\gamma a^2}{\hbar^2} \tag{13.43}$$

故 $\theta \to 0$ 时微分散射截面为

$$\sigma(0) = |f(0)|^2 = \frac{4\mu^2 a^4 \gamma^2}{\hbar^4} \tag{13.44}$$

13.5 用 Born 近似法计算粒子对 δ 势 $V(r) = V_0\delta^{(3)}(\boldsymbol{r})$ 的散射截面. 截面有何特点? 并与低能粒子的散射截面及 Coulomb 势的散射截面的特点比较.

解 根据式 (13.2) 得散射振幅为

$$f(\theta,\varphi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\iiint \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}\gamma\delta^{(3)}(\boldsymbol{r}) = -\frac{\mu\gamma}{2\pi\hbar^2} \tag{13.45}$$

可见散射振幅各向同性. 根据式 (13.3), 得微分散射截面为

$$\sigma(\theta,\varphi) = \frac{\mu^2 V_0^2}{4\pi^2\hbar^4}$$

各向同性, 而且与粒子能量无关. 散射总截面为

$$\sigma_t = \frac{\mu^2 V_0^2}{\pi\hbar^4}$$

低能粒子的刚球散射或者球方势阱散射也有同样的特点, 即散射振幅各向同性并且与粒子能量无关. 其实这种特点对于低能粒子的散射具有一定普遍性, 设短程相互作用势函数为 $V(\boldsymbol{r})$ 局限在空间有限区域, 相互作用力程量级为 r_0. 若 Born 近似适用 ①, 则根据式 (13.2) 得散射振幅为

$$f(\theta,\varphi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\iiint \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}V(\boldsymbol{r}) \tag{13.46}$$

若粒子能量足够低, 粒子波数 k 足够小 (粒子运动 de Broglie 波波长足够长), 使得 $kr_0 \ll 1$, 此时上面积分式中 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}$ 可以取为 1, 这样

$$f(\theta,\varphi) \approx -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\iiint \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}V(\boldsymbol{r}) = -\frac{\mu A}{2\pi\hbar^2} \tag{13.47}$$

其中 $A = \iiint \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}V(\boldsymbol{r})$ 为一实的常数量.

可见相互作用力程有限的势场对于能量足够低的粒子的散射, 与 δ 势的散射相同. 我们也可以说 δ 势是一个理想的, 作用力程极小的相互作用势, 作用力程要远小于碰撞粒子的相对运动的 de Broglie 波波长. 作为例子, δ 势用来形式地描述足够慢的中子受原子核的散射.

与此不同, Coulomb 势散射的特点则是: (a) 主要集中在小角度 ($\theta \approx 0$ 附近); (b) 截面与入射粒子能量平方成反比. 导致这种不同的主要原因是, Coulomb 力是长程力.

① 关于 Born 近似适用条件的讨论可参见, 曾谨言, 量子力学 (第四版卷 I)[M], 北京: 科学出版社, 2007, p.419.

13.6 质量为 m, 自旋为 $1/2$, 能量为 E 的两个全同粒子, 从相反方向入射 (质心系即实验室坐标系), 发生弹性散射. 设粒子之间作用势为 Yukawa 势 $V(r)=\dfrac{\beta}{r}\mathrm{e}^{-\alpha r}(\alpha>0)$, 两个粒子均未极化. (1) 设入射能很大 ($ka\gg 1$, 其中 $a=1/\alpha$ 为 Yukawa 势力程), 用 Born 近似求散射截面. (2) 设在 θ 和 $\pi-\theta$ 方向同时测两个出射粒子, 求它们处于自旋三重态 ($S=1$) 的概率, 以及两个粒子自旋都向上的概率. 如 $E\to 0$, 两个粒子自旋都向上的概率又如何? (3) 讨论 Born 近似对能量 E 的要求.

解 按题意, 本题的质心系就是实验室坐标系, 两粒子相对运动折合质量 $\mu=m/2$, 它们的相对运动动能也就是质心系两粒子总动能 $E_c=2E$. 令

$$k=\sqrt{2\mu E_c}/\hbar=\sqrt{4mE}/\hbar \tag{13.48}$$

(1) 设入射能很大 ($ka\gg 1$), 采用用 Born 近似计算. Yukawa 势散射振幅的 Born 近似计算, 在题 13.1 算过, 利用该题式 (13.7) 写出散射振幅为

$$f(\theta)=\frac{-2\mu\beta}{\hbar^2\left(\alpha^2+q^2\right)}=-\frac{2\mu\beta a^2}{\hbar^2}\frac{1}{1+4k^2a^2\sin^2\dfrac{\theta}{2}} \tag{13.49}$$

当 $ka\gg 1$, $\theta\approx 0$ 邻域除外, 可取近似

$$f(\theta)\approx-\frac{2\mu\beta}{4\hbar^2k^2\sin^2\dfrac{\theta}{2}}=-\frac{\beta}{8E}\frac{1}{\sin^2\dfrac{\theta}{2}} \tag{13.49'}$$

而在 $\theta\approx 0$ 邻域, 则由式 (13.14), $f(\theta)\approx-\dfrac{2\beta a^2}{\hbar^2}$ 为一常数量, 与能量无关.

由于粒子自旋为 $1/2$ 为 Fermi 子, 二粒子体系的总波函数应该是交换反对称的, 如入射波为自旋单态 ($S=0$), 空间波函数应对称, 散射振幅为 $[f(\theta)+f(\pi-\theta)]$, 在 $\theta\approx 0$ 邻域除外, 相应的微分散射截面为

$$\sigma_s(\theta)=|f(\theta)+f(\pi-\theta)|^2=\frac{\beta^2}{4E^2\sin^4\theta} \tag{13.50}$$

如入射波为自旋三重态 ($S=1$), 空间波函数应反对称, 散射振幅为 $[f(\theta)-f(\pi-\theta)]$, 相应的微分散射截面为

$$\sigma_a(\theta)=|f(\theta)-f(\pi-\theta)|^2=\frac{\beta^2\cos^2\theta}{4E^2\sin^4\theta} \tag{13.51}$$

二粒子均未极化, 则构成自旋单态的概率为 $1/4$, 构成三重态的概率为 $3/4$, 故对初态求平均的结果得微分散射截面为

$$\sigma(\theta)=\frac{3}{4}\sigma_a(\theta)+\frac{1}{4}\sigma_s(\theta)=\frac{\beta^2(1+3\cos^2\theta)}{16E^2\sin^4\theta} \tag{13.52}$$

在 $\theta\approx 0$ 邻域, 上面式 (13.50)$\sim$ 式 (13.52) 不适用, 应分别是

$$\sigma_s(\theta)\approx\frac{16\beta^2a^4}{\hbar^4},\quad \sigma_a(\theta)\approx 0,\quad \sigma(\theta)=\frac{3}{4}\sigma_a(\theta)+\frac{1}{4}\sigma_s(\theta)\approx\frac{4\beta^2a^4}{\hbar^4} \tag{13.53}$$

(2) 在 θ 和 $\pi-\theta$ 方向测得出射粒子的概率和微分散射截面成正比, 因而两个出射粒子总自旋 $S=0$ 和 1 的概率分别为

$$P(S=0)=\frac{\dfrac{1}{4}\sigma_s(\theta)}{\sigma(\theta)}=\frac{1}{1+3\cos^2\theta} \tag{13.54}$$

$$P(S=1)=\frac{\dfrac{3}{4}\sigma_a(\theta)}{\sigma(\theta)}=\frac{3\cos^2\theta}{1+3\cos^2\theta} \tag{13.55}$$

两个粒子自旋都向上的自旋态 $S=1$, 而 $S=1$ 的态共有 3 种, 即

$$\chi_{11}=\alpha(1)\alpha(2),\quad \chi_{10}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\alpha(1)\beta(2)+\beta(1)\alpha(2)\right],\quad \chi_{1-1}=\beta(1)\beta(2)$$

由于二粒子初态均未极化, 两个粒子自旋都向上的概率为

$$P(\uparrow\uparrow)=\frac{1}{3}P(S=1)=\frac{\cos^2\theta}{1+3\cos^2\theta}$$

若 $\theta\approx 0$, 则因 $\sigma_a(\theta)\approx 0$, 只能测到两个粒子处于自旋单态 $(S=0)$, 总自旋 $S=1$ 的概率基本上为零.

当 $E\to 0$ 时, 采用分波法分析. $E\to 0$, $l=0$ 分波占主导, 此时 f 与 θ 无关, 因而 $\sigma_a(\theta)=0$, 即只有自旋单态 $(S=0)$ 对散射截面有贡献. 所以散射后两个粒子自旋必处于 $S=0$ 态, 而 $S=1$ 概率为 0, $P(\uparrow\uparrow)=0$.

(3)Born 近似波函数的表达式为

$$\psi(\boldsymbol{x})=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}+\psi_{sc}(\boldsymbol{x})=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}V(\boldsymbol{x}')\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}'}\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}' \tag{13.56}$$

Born 近似适用, 则要求

$$|\psi_{sc}(\boldsymbol{x})|=\left|\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}V(\boldsymbol{x}')\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}'}\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}'\right|\ll\left|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\right|=1 \tag{13.57}$$

上式中积分的主要贡献来自 $\boldsymbol{x}'$ 的变化范围 $\Delta|\boldsymbol{x}'|\sim 1/k$, 作为数量级估计, 可取

$$\begin{aligned}&|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|\sim r',\quad \mathrm{d}^3x'\sim 4\pi r'^2\Delta r'\sim 4\pi r'^2/k\\&\int\cdots\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}'\sim 4\pi\beta/k\end{aligned}$$

此时条件 (13.57) 相当于

$$\frac{2\mu\beta}{\hbar^2 k}\ll 1,\quad \text{即}E\gg\frac{m\beta^2}{2\hbar^2}$$

此即 Born 近似对能量 E 的要求.

13.7 设中性原子的电荷分布为球对称, 密度 $\rho(r)$ 具有如下性质: $r\to\infty$, $\rho(r)$ 迅速趋于 0, 且 $\int\rho(r)\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}=0$, 但 $\int\rho(r)r^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}=A\neq 0$(正负电荷分布不均匀). 今有质量为 m, 荷电 e 粒子沿 z 轴方向入射, 受到此电荷分布所产生静电场的散射. 试用 Born 近似计算前向散射 $(\theta=0)$ 的微分截面.

解 对于非相对论粒子, 忽略磁场作用, 入射带电粒子受到的静电作用势为

$$V(r)=e\int\frac{\rho(r')}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}' \tag{13.58}$$

按题意采用 Born 近似计算粒子受该势场的散射截面. 设入射粒子的能量为 E, 入射波波矢为 $\boldsymbol{k}_0=(0,0,k)$, 被散射到 (θ,φ) 方向粒子的波矢量记为 $\boldsymbol{k}$. 由于弹性散射, $|\boldsymbol{k}|=|\boldsymbol{k}_0|=k$. 势函数球对称, 散射振幅与 φ 无关, 按照 Born 一级近似, 散射振幅为

$$f(\theta)=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int V(r)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}_0-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{x}}\mathrm{d}^3\boldsymbol{x} \tag{13.59}$$

对于前向散射 ($\theta = 0$), $\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k}_0$, 散射振幅为

$$f(0) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int V(r)\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{x} \tag{13.60}$$

将式 (13.58) 代入得

$$f(0) = -\frac{me}{2\pi\hbar^2}\iint \frac{\rho(r')}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}'\mathrm{d}^3\boldsymbol{x} = -\frac{me}{2\pi\hbar^2}\int \rho(r')\int \frac{1}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}' \tag{13.61}$$

其中 $\int \frac{1}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}$ 可以直接进行积分, 也可以如下借用静电场模型进行计算. 假设空间均匀分布单位电荷密度, 则该积分为这种均匀分布电荷在 $\boldsymbol{x}'$ 处的总电势. 按电势叠加原理, 把空间分为以原点为球心, 以原点到 $\boldsymbol{x}'$ 的距离为半径的球内部分和球外两部分. 按照对称性和静电场 Gauss 定理, 球内部分电荷在 $\boldsymbol{x}'$ 激发的电场与所有电荷集中在原点给出的电场完全相同, 因而这部分电荷在 $\boldsymbol{x}'$ 激发的电势 (采用 Gauss 单位制, 下同) 为

$$\frac{4\pi}{3}r'^3\frac{1}{r'} = \frac{4\pi}{3}r'^2$$

球外部分以原点为球心, 分为一系列厚度为 $\mathrm{d}r$ 的薄球壳. 按照对称性和静电场 Gauss 定理, 对于某一 r 到 $r+\mathrm{d}r$ 的薄球壳上的电荷, 在其薄球壳内激发的电场为零, 而其外的电场与电荷集中在原点相同. 因而薄球壳上的电荷在 $\boldsymbol{x}'$ 处产生的电势与在薄球壳上产生的相等, 为

$$4\pi r^2\mathrm{d}r\frac{1}{r} = 4\pi r\mathrm{d}r$$

根据以上分析和电势叠加原理

$$\int \frac{1}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\mathrm{d}^3\boldsymbol{x} = \frac{4\pi}{3}r'^2 + \int_{r'}^{\infty} 4\pi r\mathrm{d}r = 2\pi R^2 - \frac{2\pi}{3}r'^2, \quad R\to\infty \tag{13.62}$$

把上式代入式 (13.61), 即得

$$f(0) = \frac{me}{\hbar^2}\lim_{R\to\infty}\int \rho(r')\left(\frac{1}{3}r'^2 - R^2\right)\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}' \tag{13.63}$$

代入题设结果 $\int \rho(r)\mathrm{d}^3\boldsymbol{x} = 0$, 以及 $\int \rho(r)r^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{x} = A$ 即得

$$f(0) = \frac{meA}{3\hbar^2} \tag{13.64}$$

因而前向散射 ($\theta = 0$) 的微分截面为

$$\sigma(0) = |f(0)|^2 = \frac{m^2e^2A^2}{9\hbar^4} \tag{13.65}$$

13.8 考虑中子束对双原子分子 H_2 的散射. 中子束沿 z 轴方向入射, 两个氢原子核位于 $x = \pm a$ 处, 中子与电子无相互作用, 中子与氢原子核 (即质子) 之间的短程作用取为

$$V(r) = -V_0\left[\delta(x-a)\delta(y)\delta(z) + \delta(x+a)\delta(y)\delta(z)\right]$$

为简单起见, 不考虑反冲. 试用 Born 一级近似公式计算散射波幅及微分截面.

解 根据 Born 一级近似公式 (13.2), 得散射振幅为

$$f(\theta,\varphi)=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\iiint \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}(-V_0)\left[\delta(x-a)\delta(y)\delta(z)+\delta(x+a)\delta(y)\delta(z)\right]$$
$$=\frac{\mu V_0}{2\pi\hbar^2}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}aq_x}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}aq_x}\right)=\frac{\mu V_0}{\pi\hbar^2}\cos aq_x$$

动量转移 $\boldsymbol{q}=\boldsymbol{k}_f-\boldsymbol{k}_i$, 其 x 方向的分量为

$$q_x=k_{fx}-k_{ix}=k_{fx}=k\sin\theta\cos\varphi$$

这样散射振幅可表示为

$$f(\theta,\varphi)=\frac{\mu V_0}{\pi\hbar^2}\cos\left(ka\sin\theta\cos\varphi\right)$$

根据式 (13.3), 得微分散射截面

$$\sigma(\theta,\varphi)=|f(\theta,\varphi)|^2=\frac{\mu^2V_0^2}{2\pi^2\hbar^4}\left[1+\cos\left(2ka\sin\theta\cos\varphi\right)\right]$$

13.9 质量为 μ 的粒子被中心势 $V(r)=\dfrac{\alpha}{r^2}(\alpha>0)$ 散射, (1) 求各分波的相移 δ_l. (2) 设作用势较弱, $8\mu\alpha/\hbar^2\ll 1$, 求相移、散射波幅和截面的表达式. (3) 用 Born 近似计算散射波幅和截面, 并与 (2) 结果比较.

解 (1) 定态 Schrödinger 方程为

$$\nabla^2\psi+\left[k^2-\frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)\right]\psi=0 \tag{13.66}$$

考虑到入射波的形式 $\psi_i=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}$, 将 ψ 如下按 $\boldsymbol{L}^2$、L_z 的共同本征态展开

$$\psi=\sum_l R_l(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta)=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\sum_l\sqrt{2l+1}R_l(r)\mathrm{P}_l(\cos\theta) \tag{13.67}$$

代入式 (13.66), 可知 R_l 满足径向方程

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}R_l+\frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}R_l+\left[k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}-\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2r^2}\right]R_l=0 \tag{13.68}$$

取 $\alpha=0$, 这相当于势场为 0, 粒子作自由运动. 此时方程 (13.68) 为 l 阶球 Bessel 方程, 2 个独立解分别为 l 阶球 Bessel 函数 j_l 与 l 阶球 Neuman 函数 n_l; n_l 在 $r\to 0$ 处发散, 故舍去. 因此方程 (13.68) 在 $\alpha=0$ 时的解为

$$R_l^{(0)}(r)=\mathrm{j}_l(kr)=\sqrt{\frac{\pi}{2kr}}\mathrm{J}_{l+1/2}(kr) \tag{13.69}$$

$r\to\infty$ 处, 渐近表示为

$$R_l^{(0)}(r)=\mathrm{j}_l(kr)\xrightarrow{r\to\infty}\frac{1}{kr}\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right) \tag{13.70}$$

现在对于 $\alpha\neq 0$ 情况, 令

$$l(l+1)+2\mu\alpha/\hbar^2=\nu(\nu+1) \tag{13.71}$$

即

$$\nu=\left[(l+1/2)^2+\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}\right]^{1/2}-\frac{1}{2},\quad \nu>l\geqslant 0 \tag{13.71'}$$

则式 (13.68) 可以写成

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}R_l+\frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}R_l+\left[k^2-\frac{\nu(\nu+1)}{r^2}\right]R_l=0 \tag{13.68'}$$

此为 ν 阶球 Bessel 方程, 2 个独立解分别为 ν 阶球 Bessel 函数 j_ν 与 ν 阶球 Neuman 函数 n_ν; n_ν 在原点发散, 故舍去. 因此方程 (13.68′) 的解为

$$R_\nu^{(0)}(r)=\mathrm{j}_\nu(kr)=\sqrt{\frac{\pi}{2kr}}\mathrm{J}_{\nu+1/2}(kr) \tag{13.72}$$

式 (13.72) 与式 (13.69) 的差别仅在于 l 换成了 ν. $r\to\infty$ 处, 式 (13.72) 的渐近表示为

$$R_\nu^{(0)}(r)=\mathrm{j}_\nu(kr)\xrightarrow{r\to\infty}\frac{1}{kr}\sin\left(kr-\frac{\nu\pi}{2}\right) \tag{13.73}$$

按照散射理论分波法, R 的渐近表示为 (略去常数因子)

$$R_l(r)\xrightarrow{r\to\infty}\frac{1}{kr}\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right) \tag{13.74}$$

比较式 (13.73)、式 (13.74), 即得 l 分波的相移公式

$$\delta_l=-\frac{\pi}{2}(\nu-l)=-\frac{\pi}{2}\left[\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2+\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}}-\left(l+\frac{1}{2}\right)\right] \tag{13.75}$$

题给 $\alpha\geqslant 0$, 故上式可见, 相移 $\delta_l<0$, 并且与入射能量 ($E=\hbar^2k^2/2\mu$) 无关. 根据分波法结果, 散射振幅为

$$f(\theta)=\frac{1}{k}\sum_l(2l+1)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}\sin\delta_l\mathrm{P}_l(\cos\theta) \tag{13.76}$$

可见 $f(\theta)\propto 1/k$, 因此散射微分截面 $\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2\propto 1/E$.

(2) 若作用势较弱, $8\mu\alpha/\hbar^2\ll 1$, 则式 (13.75) 按小量 $8\mu\alpha/\hbar^2$ 展开得

$$\delta_l=-\frac{\pi}{2}\left(l+\frac{1}{2}\right)\left[\sqrt{1+\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2\left(l+1/2\right)^2}}-1\right]\approx-\frac{\pi\mu\alpha}{(2l+1)\hbar^2} \tag{13.77}$$

可见 $\delta_l\ll 1$, 因而在式 (13.76) 可取 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}\approx 1$, $\sin\delta_l\approx\delta_l$, 这样得到

$$f(\theta)\approx\frac{1}{k}\sum_l(2l+1)\delta_l\mathrm{P}_l(\cos\theta)=-\frac{\pi\mu\alpha}{\hbar^2k}\sum_{l=0}^{\infty}\mathrm{P}_l(\cos\theta)=-\frac{\pi\mu\alpha}{2\hbar^2k\sin\dfrac{\theta}{2}} \tag{13.78}$$

最后一个等号利用了

$$2\sum_{l=0}^{\infty}\mathrm{P}_l(\cos\theta)=\frac{1}{\sin\dfrac{\theta}{2}} \tag{13.79}$$

上式只需在球谐函数的如下母函数公式:

$$\left(1+z^2-2xz\right)^{-1/2}=\sum_l z^l\mathrm{P}_l(x)$$

中, 取 $z=1$, $x=\cos\theta$ 即可得到. 而由式 (13.78) 可得散射微分截面为

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2=\frac{\pi^2\mu^2\alpha^2}{4\hbar^4k^2\sin^2\dfrac{\theta}{2}} \tag{13.80}$$

由于 $\theta \to 0$ 处 $\sigma(\theta) \propto 1/\theta^2$, 总截面是发散的.

(3) 按照 Born 近似的计算见题 13.1 第 (5) 小题, 那里得到散射振幅为

$$f(\theta) = \frac{-\pi\mu\alpha}{\hbar^2 q}$$

代入 $q = 2k\sin\dfrac{\theta}{2}$, 即知与分波法对于作用势较弱 ($8\mu\alpha/\hbar^2 \ll 1$) 时的结果式 (13.78) 相同. 因而 Born 近似计算的截面也如式 (13.80) 所给.

说明 即使条件 $8\mu\alpha/\hbar^2 \ll 1$ 不成立, 对于足够大的 l, 式 (13.77) 仍可成立, 因此 $\theta \to 0$ 处 $f(\theta)$ 和 $\sigma(\theta)$ 的奇异性仍如式 (13.78) 和 (13.80) 所示, 总截面仍是发散的. 发散是由角动量 l 很大的分波造成, 亦即来自小角度散射. 这是长程力散射的固有特点.

13.10 质量为 μ 的粒子被球壳势场 $V(r) = \gamma\delta(r-a)$ 散射, 求各分波的相移 δ_l, 并和刚球散射的结果比较.

解 设粒子能量为 E. 定态 Schrödinger 方程为

$$\nabla^2\psi + \left[k^2 - \frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)\right]\psi = 0 \tag{13.81}$$

入射波取为 $\psi_i = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}$, 其中 $k = \sqrt{2\mu E}$. 将 ψ 如下按 $\boldsymbol{L}^2$、L_z 的共同本征态展开

$$\psi = \sum_l R_l(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\sum_l \sqrt{2l+1}R_l(r)\mathrm{P}_l(\cos\theta) \tag{13.82}$$

R_l 为第 l 分波的径向波函数, 按照分波法一般结果它具有如下渐近性质:

$$R_l(r) \xrightarrow{kr\to\infty} \frac{1}{kr}\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) \tag{13.83}$$

式 (13.82) 代入式 (13.81), 可知 R_l 满足径向方程

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}R_l + \frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}R_l + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2\mu}{\hbar^2}\gamma\delta(r-a)\right]R_l = 0 \tag{13.84}$$

对势函数引进无量纲参数 Ω, 令

$$\gamma = \frac{\hbar^2}{2\mu a}\Omega \tag{13.85}$$

并令 $kr = \rho$, 方程式 (13.84) 可以写成

$$\frac{\mathrm{d}^2R_l}{\mathrm{d}\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{\mathrm{d}R_l}{\mathrm{d}\rho} + \left[1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R_l - \frac{\Omega}{ka}\delta(\rho - ka)R_l = 0 \tag{13.86}$$

当 $\rho \neq ka$, 式 (13.86) 即球 Bessel 方程, 在 $\rho < ka$ 区域, 该式在 $\rho \to 0$ 处有限的解为

$$R_l = C\mathrm{j}_l(\rho), \quad \rho < ka \tag{13.87}$$

在 $\rho > ka$ 区域, 式 (13.86) 具有渐近性质 (13.83) 的解为

$$R_l = \mathrm{j}_l(\rho)\cos\delta_l - \mathrm{n}_l(\rho)\sin\delta_l, \quad \rho > ka \tag{13.88}$$

j_l 为球 Bessel 函数, n_l 为球 Neumann 函数.

在 $\rho \neq ka$ 处, 波函数连续性条件给出

$$C\mathrm{j}_l(ka) - \mathrm{j}_l(ka)\cos\delta_l + \mathrm{n}_l(ka)\sin\delta_l = 0 \tag{13.89}$$

方程 (13.86) 在 $\rho = ka$ 的邻域作积分 $\int_{ka-0^+}^{ka+0^+} \mathrm{d}\rho$, 即得

$$R_l'(ka+0^+) - R_l'(ka-0^+) = \frac{\Omega}{ka} R_l(ka) \tag{13.90}$$

代入波函数表达式 (13.87)、式 (13.88), 即得

$$\mathrm{j}_l'(ka)\cos\delta_1 - \mathrm{n}_l'(ka)\sin\delta_l - \mathrm{j}_l'(ka) = \frac{\Omega}{ka} C\mathrm{j}_l(ka) \tag{13.91}$$

式 (13.89) 乘 j_l' 并与式 (13.91) 乘 j_l 相加消去 C, 并利用 Bessel 函数 Wronski 行动式的如下公式:

$$\mathrm{j}_l(\rho)\mathrm{n}_l'(\rho) - \mathrm{n}_l'(\rho)\mathrm{j}_l'(\rho) = \frac{1}{\rho^2}$$

即得

$$\tan\delta_l = \frac{ka\Omega[\mathrm{j}_l(ka)]^2}{ka\Omega\mathrm{j}_l(ka)\mathrm{n}_l(ka) - 1} \tag{13.92}$$

由此式即可确定 δ_l.

当 $\Omega \gg 1$, 则式 (13.92) 分母中可以略去 (-1), 得到

$$\tan\delta_l \approx \frac{\mathrm{j}_l(ka)}{\mathrm{n}_l(ka)}$$

与刚球 (半径 a) 的散射相移公式 ①相同.

对于低能散射, $ka \ll 1$, 式 (13.92) 分母中 $ka\Omega$ 项可以略去 (低能极限), 则得

$$\delta_l \approx \tan\delta_l \approx -ka\Omega\,[\mathrm{j}_l(ka)]^2 \approx -\Omega\frac{(ka)^{2l+1}}{[(2l+1)!!]^2}$$

δ_l 和作用强度 Ω 以及 $(ka)^{2l+1}$ 成正比, 与球方势垒 (阱) 低能散射结果 ②类似.

13.11 粒子被势场 $V(r) = \alpha/r^4 (\alpha > 0)$ 散射, 求低能极限下 (只考虑 s 波) 散射的散射长度、相移、散射振幅和截面.

提示 引进无量纲变量 $\xi = \hbar r/\sqrt{2\mu\alpha}$.

解 低能散射可采用分波法, 此时 s 波 $(l=0)$ 占主导. 设粒子质量为 μ, 入射动能为 E. s 波的波函数是球对称的, 设为

$$\psi(r) = \frac{u(r)}{r} \tag{13.93}$$

代入定态 Schrödinger 方程, 在 $E \to 0$ 得如下径向方程

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + k^2 u(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(r) u = \frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}\frac{u}{r^4} \tag{13.94}$$

按题给提示, 引进无量纲变量 $\xi = \hbar r/\sqrt{2\mu\alpha}$, 式 (13.94) 变成

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2} u - \frac{u}{\xi^4} = 0 \tag{13.95}$$

容易验证, 上式满足 $u(r)|_{r=0}$ 的解为

$$u = \xi \mathrm{e}^{-\frac{1}{\xi}} \tag{13.96}$$

---

① 参见, 曾谨言, 量子力学 (第四版卷 I)[M], 北京: 科学出版社, 2007, p.432.
② 参见, 曾谨言, 量子力学 (第四版卷 I)[M], 北京: 科学出版社, 2007, p.433~434.

当 $r \to \infty$, $1/\xi \to 0$, 此时 $u(r)$ 的渐近表示为

$$\begin{aligned} u(r) &\approx \xi\left(1-\frac{1}{\xi}\right)=\xi-1 \\ &=-\left(1-\frac{\hbar}{\sqrt{2\mu\alpha}}r\right) \end{aligned} \tag{13.97}$$

把式 (13.97) 和本题附录式 (13.104) 比较, 即得散射长度

$$a_0=\sqrt{2\mu\alpha}/\hbar \tag{13.98}$$

按本题附录式 (13.111)、式 (13.104), 可得相移

$$\delta_0=-ka_0=-\frac{k}{\hbar}\sqrt{2\mu\alpha}=-\frac{2\mu}{\hbar^2}\sqrt{\alpha E} \tag{13.99}$$

以及散射振幅

$$f=-a_0=\sqrt{2\mu\alpha}/\hbar \tag{13.100}$$

从而总截面为

$$\sigma_t=4\pi|f|^2=8\pi\mu\alpha/\hbar^2$$

附录 (关于极低能粒子的短程中心势散射的散射长度、相移、散射振幅和截面) 设势函数为 $V(r)$, 由于是短程作用势, 当 r 大于某个值 ("作用球"半径 a), $V(r)$ 即迅速趋于 0(快于 $1/r^3$). 设入射粒子质量为 μ, 能量为 E, 低能粒子散射 s 波占主导, s 波 ($l=0$) 的波函数可以记为

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}R_0(r)=\frac{u(r)}{r} \tag{13.101}$$

它满足径向方程

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}u+\left[k^2-\frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)\right]u=0 \tag{13.102}$$

其中 $k=\sqrt{2\mu E}$.

方程 (13.102) 中当 $r>a$ 时 $V(r)$ 可以略去; 如再取低能极限, 即 $k\to 0$, 则方程 (13.102) 成为

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}u\approx 0 \quad (r>a, k\to 0) \tag{13.103}$$

其解为

$$u(r)\approx C\left(1-\frac{r}{a_0}\right) \tag{13.104}$$

其中 C 为归一化常数, a_0 称为散射长度.

另一方面, 在作用球外 ($r>a$), $V(r)\to 0$, 方程 (13.102) 的一般解可以表示为

$$u(r)\approx A\sin(kr+\delta_0)=A\sin\delta_0\left(\cos kr+\cot\delta_0\sin kr\right) \tag{13.105}$$

δ_0 为 s 波相移, 对上式同样取低能极限 $k\to 0$, 则 $\cos kr\to 1$ 以及 $\sin kr\to kr$, 因而

$$u(r)\approx A\sin\delta_0(1+kr\cot\delta_0) \tag{13.106}$$

比较式 (13.104)、式 (13.106), 即得相移和散射长度的关系

$$k\cot\delta_0=-\frac{1}{a_0} \quad (k\to 0) \tag{13.107}$$

在低能极限, 散射 s 波占主导, 散射振幅可以只计 s 波振幅, 即得

$$f = \frac{1}{k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_0}\sin\delta_0 = \frac{1}{k\cot\delta_0 - \mathrm{i}k} \tag{13.108}$$

为各向同性. 将式 (13.107) 代入式 (13.108), 即得

$$f = -\frac{a_0}{1+\mathrm{i}ka_0} \quad (k\to 0) \tag{13.109}$$

总截面为

$$\sigma_0 = 4\pi|f|^2 = \frac{4\pi a_0^2}{1+(ka_0)^2} \tag{13.110}$$

如散射长度 a_0 取有限值, 则在低能极限 $k\to 0$, $k|a_0|\ll 1$, 式 (13.109) 和式 (13.110) 分母上的 ka_0 可以略去, 从而得到

$$f = -a_0, \quad \sigma_0 = 4\pi a_0^2 \quad (k\to 0) \tag{13.111}$$

而式 (13.107) 则给出

$$-ka_0 = \tan\delta_0 \approx \delta_0 \quad (k\to 0) \tag{13.112}$$

这种情况下势场 $V(r)$ 的散射效果相当于半径为 a_0 的钢球.

如散射长度 $a_0\to\infty$, 就出现共振散射, 这时式 (13.107) 给出

$$k\cot\delta_0 \to 0, \quad \delta_0 = \frac{\pi}{2}\text{或}-\frac{\pi}{2} \tag{13.113}$$

因而此时式 (13.108)、式 (13.110) 给出

$$f = \frac{\mathrm{i}}{k}, \quad \sigma_0 = 4\pi|f|^2 = \frac{4\pi}{k^2} = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu E} \tag{13.114}$$

散射截面和入射动能 E 成反比, 当 $E\to 0$, $\sigma_0\to\infty$.

13.12 粒子被势场 $V(r) = -\dfrac{\hbar^2}{\mu}\left[\dfrac{\lambda}{\cosh(\lambda r)}\right]^2$ 散射, 求低能散射 (只考虑 s 波) 的截面.

解法一 低能散射可采用分波法, 此时 s 波 ($l=0$) 占主导. 设粒子质量为 μ, 入射动能为 E. s 波的波函数是球对称的, 设为

$$\psi(r) = \frac{u(r)}{r} \tag{13.115}$$

代入定态 Schrödinger 方程得

$$u''(r) + k^2u(r) = -\left[\frac{\lambda}{\cosh(\lambda r)}\right]^2 u(r) \tag{13.116}$$

其中 $k = \sqrt{2\mu E}/\hbar$, λ 为常数.

可以验证, 式 (13.116) 的二阶常微分方程的解为

$$u(r) = \alpha(\lambda\tanh\lambda r - \mathrm{i}k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr} + \beta(\lambda\tanh\lambda r + \mathrm{i}k)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr} \tag{13.117}$$

其中 α、β 为积分常数. 在原点波函数有界, 因而 $u(0) = r\psi(r)|_{r=0} = 0$, 因而

$$u(r)|_{r\to 0} = \alpha(0-\mathrm{i}k) + \beta(0+\mathrm{i}k) = 0$$

所以 $\alpha=\beta$, 这样 s 波波函数为

$$\psi(r)=\frac{\alpha}{r}\left[(\lambda\tanh\lambda r-\mathrm{i}k)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}+(\lambda\tanh\lambda r+\mathrm{i}k)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}\right] \tag{13.118}$$

$r\to\infty$ 时, $\tanh\lambda r=\dfrac{\mathrm{e}^{\lambda r}-\mathrm{e}^{-\lambda r}}{\mathrm{e}^{\lambda r}-\mathrm{e}^{-\lambda r}}\to 1$, 因而

$$\begin{aligned}\psi(r)\xrightarrow{r\to\infty}&\frac{\alpha}{r}\left[(\lambda-\mathrm{i}k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}+(\lambda+\mathrm{i}k)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}\right]=\frac{\alpha}{r}\sqrt{\lambda^2+k^2}\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr-\mathrm{i}\alpha_1}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr+\mathrm{i}\alpha_1}\right]\\ =&\frac{\alpha}{r}\sqrt{\lambda^2+k^2}\cdot 2\cos(kr-\alpha_1)\\ =&\frac{2\alpha}{r}\sqrt{\lambda^2+k^2}\sin\left(kr+\frac{\pi}{2}-\alpha_1\right)\end{aligned} \tag{13.119}$$

式中

$$\alpha_1=\arctan\frac{k}{\lambda} \tag{13.120}$$

所以 s 分波相移为

$$\delta_0=\frac{\pi}{2}-\alpha_1 \tag{13.121}$$

因而散射总截面为

$$\sigma_t=\frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0=\frac{4\pi}{k^2}\cos^2\alpha_1 \tag{13.122}$$

当 $E\to 0$ 时, $k\to 0,\alpha_1\to 0$, 有

$$\sigma_t=\frac{4\pi}{k^2}=\frac{4\pi}{2\mu E/\hbar^2}=\frac{4\pi\hbar^2}{2\mu E}=\frac{2\pi\hbar^2}{\mu E}$$

这里也看到, 散射截面和入射动能 E 成反比, 当 $E\to 0$, $\sigma_0\to\infty$.

解法二 本题所给的势函数是短程势, 当 $r\to\infty$ 时, 以负指数方式趋于零. 在极低能情形下, 式 (13.118) 给出

$$u(r)=r\psi(r)=2\alpha\lambda\tanh\lambda r\xrightarrow{r\to\infty}2\alpha\lambda$$

与题 13.11 附录比较, 可知散射长度 $a_0=\infty$, 因而在极低能情形下出现共振散射. 因此, 根据题 13.11 附录的结果, 散射振幅和散射截面分别为

$$f=\frac{\mathrm{i}}{k}=\frac{\mathrm{i}\hbar}{\sqrt{2\mu E}}$$

$$\sigma_0=4\pi|f|^2=\frac{4\pi}{k^2}=\frac{2\pi\hbar^2}{\mu E}$$

13.13 对某一低能粒子散射问题, 假设只考虑 s 波、p 波及 d 波情况下, 给出截面与散射角 θ 的依赖关系的一般表示式.

解 在中心力场中的低能粒子散射, l 分波散射振幅为

$$f_l(\theta)=\frac{2l+1}{k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}\sin\delta_l\mathrm{P}_l(\theta)=\frac{\sqrt{4\pi(2l+1)}}{k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}\sin\delta_l\mathrm{Y}_{l0}(\theta) \tag{13.123}$$

如果只考虑 s 波、p 波及 d 波, 则散射振幅为

$$f(\theta)=f_0(\theta)+f_1(\theta)+f_2(\theta)=\frac{1}{k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_0}\sin\delta_0+\frac{3}{k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_1}\sin\delta_1\cos\theta+\frac{5}{k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_2}\sin\delta_2\frac{1}{2}\left(3\cos^2\theta-1\right)$$

其中 $\delta_0, \delta_1, \delta_2$ 分别是 s 波、p 波及 d 波的相移. 由上式得微分散射截面

$$\begin{aligned}\sigma(\theta) &= |f(\theta)|^2 = f^*(\theta) f(\theta) \\ &= \frac{1}{k^2}\left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta_0}\sin\delta_0 + 3\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta_1}\sin\delta_1\cos\theta + \frac{5}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta_2}\sin\delta_2\left(3\cos^2\theta - 1\right)\right] \\ &\quad \times\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_0}\sin\delta_0 + 3\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_1}\sin\delta_1\cos\theta + \frac{5}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_2}\sin\delta_2\left(3\cos^2\theta - 1\right)\right]\end{aligned}$$

上式两个中括号相乘以后, 将 $\cos\theta$ 的同次幂合并, 结果可写为如下形式

$$\sigma(\theta) = \frac{1}{k^2}\left(A_0 + A_1\cos\theta + A_2\cos^2\theta + A_3\cos^3\theta + A_4\cos^4\theta\right)$$

而 $\cos\theta$ 的各次幂系数如下给出

$$\begin{aligned}A_0 &= \sin^2\delta_0 + \frac{25}{4}\sin^2\delta_2 - 5\cos(\delta_0 - \delta_2)\sin\delta_0\sin\delta_2 \\ A_1 &= 6\cos(\delta_0 - \delta_1)\sin\delta_0\sin\delta_1 - 15\cos(\delta_1 - \delta_2)\sin\delta_1\sin\delta_2 \\ A_2 &= 9\sin^2\delta_1 - \frac{75}{2}\sin^2\delta_2 + 15\cos(\delta_0 - \delta_2)\sin\delta_0\sin\delta_2 \\ A_3 &= 45\cos(\delta_1 - \delta_2)\sin\delta_1\sin\delta_2 \\ A_4 &= \frac{225}{4}\sin^2\delta_2\end{aligned}$$

散射总截面为微分截面对全空间立体角的积分

$$\sigma_t = \iint \mathrm{d}^2\Omega\sigma(\theta) = \iint \mathrm{d}^2\Omega\,|f(\theta)|^2$$

利用式 (13.123), 并根据球谐函数的正交归一性得到散射总截面为

$$\sigma_t = \sigma_{0t} + \sigma_{1t} + \sigma_{2t} = \frac{4\pi}{k^2}\left(\sin^2\delta_0 + 3\sin^2\delta_1 + 5\sin^2\delta_2\right)$$

13.14 求中子 - 中子低能 ($E \to 0$)s 波的散射截面. 设中子–中子作用势为

$$V(r) = \begin{cases} V_0\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2, & r \leqslant a(V_0 > 0) \\ 0, & r > a \end{cases}$$

设入射中子及靶中子均未极化.

解答 自旋 1/2 全同粒子交换反对称. 对于 s 态 ($l = 0$), 空间波函数对称, 这要求自旋波函数反对称, 两粒子自旋只能是单态 (χ_{00} 态, $S = 0$). 在自旋单态下 $\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2 = -3$ ($\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2\chi_{00} = -3\chi_{00}$). 这样两粒子的相互作用为

$$V(r) = \begin{cases} -3V_0, & r \leqslant a \\ 0, & r > a \end{cases}$$

这是低能粒子的球方势阱散射问题. 设粒子能量为 E, 令

$$k = \frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar}, \quad k_0 = \frac{\sqrt{6\mu V_0}}{\hbar}, \quad k_1 = \sqrt{k_0^2 + k^2} \tag{13.124}$$

设 s 波相移为 δ_0, 根据球方势阱散射问题的已知结果 ①, δ_0 由下式给出

$$\tan\delta_0 = \frac{k\tan k_1 a - k_1\tan ka}{k_1 + k\tan k_1 a\tan ka} \approx ka\left(\frac{\tan k_0 a}{k_0 a} - 1\right), \quad ka \ll 1, k \ll k_0 \tag{13.125}$$

① 例如参见, 曾谨言, 量子力学 (第四版卷 I)[M], 北京: 科学出版社, 2007, p.433~434.

而散射振幅为

$$f(\theta)=\frac{1}{k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_0}\sin\delta_0 \tag{13.126}$$

考虑粒子的全同性后散射振幅为 $f(\theta)+f(\pi-\theta)=2f(\theta)=2\times\dfrac{1}{k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_0}\sin\delta_0$. 故得微分散射截面为

$$\sigma=|f(\theta)+f(\pi-\theta)|^2=\frac{4}{k^2}\sin^2\delta_0\approx\frac{4}{k^2}\tan^2\delta_0\approx 4a^2\left(\frac{\tan k_0a}{k_0a}-1\right)^2 \tag{13.127}$$

满足各向同性. 总截面为 $\sigma_t=4\pi\sigma$.

由于入射粒子和靶粒子均未极化, 自旋取向随机分布, 两粒子自旋形成单态 (χ_{00} 态, $S=0$) 的概率是 $1/4$, 而形成三重态 (χ_{1s_z} 态, $S=1$) 的概率是 $3/4$, 而后者对于 s 波散射无贡献. 因此有效的总截面为

$$\sigma_{\mathrm{eff}}=\frac{1}{4}\sigma_t=\pi\sigma\approx 4\pi a^2\left(\frac{\tan k_0a}{k_0a}-1\right)^2 \tag{13.128}$$

在不发生共振散射的条件下, 散射振幅和散射截面均和入射能量无关, 这是低能散射的特点. 如果 V_0 足够大, 使得式 (13.124) 定义的 k_0 满足

$$k_0a=\frac{\pi}{2}n,\quad n=1,3,5,7,\cdots \tag{13.129}$$

此时 发生共振散射 (这也是势阱口具有束缚态的条件). 式 (13.125) 表明, 这相应于 $\delta_0=\pm\pi/2$. 此时式 (13.127) 与式 (13.128) 分别为

$$\sigma=\frac{4}{k^2}\sin^2\delta_0=\frac{4}{k^2}=\frac{2\hbar}{\mu E} \tag{13.130}$$

$$\sigma_{\mathrm{eff}}=\frac{1}{4}\sigma_t=\pi\sigma=\frac{4\pi}{k^2}=\frac{2\pi\hbar}{\mu E} \tag{13.131}$$

13.15 氢分子对慢中子散射. 设散射波幅近似等于中子被两个质子散射的波幅之和, 即散射波幅算符可表示成

$$f=\frac{f_1+3f_3}{2}+\frac{f_3-f_1}{4}\left[\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{n}}\cdot\left(\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{p1}}+\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{p2}}\right)\right]$$

令 $\boldsymbol{S}=\dfrac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{p1}}+\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{p2}})$(取 $\hbar=1$), 表示两个质子总自旋. (1) 证明 $(\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{n}}\cdot\boldsymbol{S})^2=\boldsymbol{S}^2-\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{n}}\cdot\boldsymbol{S}$. (2) 证明 $\hat{f}^2=\dfrac{1}{4}\left[(3f_3+f_1)^2+\left(5f_3^2-3f_1^2-2f_1f_3\right)(\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{n}}\cdot\boldsymbol{S})+(f_3-f_1)^2\boldsymbol{S}^2\right]$. (3) 证明对于正氢分子 ($S=1$), 总截面 $\sigma_{\mathrm{orth}}=\pi(11f_3^2+3f_1^2+2f_3f_1)$. 对于仲氢分子 ($S=0$), 总截面 $\sigma_{\mathrm{para}}=\pi(3f_3+f_1)^2$. 从而证明 $\sigma_{\mathrm{orth}}/\sigma_{\mathrm{para}}=1+\dfrac{2(f_3-f_1)^2}{(3f_3+f_1)^2}$. (4) 常温下, 氢气中约 $3/4$ 为正氢, $1/4$ 为仲氢. 求总截面平均值. 题中设 f_1, f_3 均为实数量.

解 按题意整个氢分子对散射振幅的贡献近似等于两个质子的贡献之和, 散射波幅算符可表示成

$$f=\frac{f_1+3f_3}{2}+\frac{f_3-f_1}{4}\left[\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{n}}\cdot\left(\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{p1}}+\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{p2}}\right)\right] \tag{13.132}$$

(1) 如题两个质子总自旋为

$$\boldsymbol{S}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{p1}}+\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{p2}}) \tag{13.133}$$

式中取 $\hbar=1$. 质子自旋与中子自旋对易, 也就有 $[\sigma_{\mathrm{n}i}, S_j]=0$, 利用 Pauli 算符代数关系 $\sigma_i\sigma_j=\delta_{ij}+\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_k$, 即得

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\sigma}_n\cdot\boldsymbol{S})^2=&\sigma_{\mathrm{n}i}S_i\sigma_{\mathrm{n}j}S_j=S_iS_j\left(\delta_{ij}+\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_{\mathrm{n}k}\right)\\=&\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{S}+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_n\cdot(\boldsymbol{S}\times\boldsymbol{S})=\boldsymbol{S}^2-\dot{\boldsymbol{\sigma}}_n\cdot\boldsymbol{S}\end{aligned}$$

也就是

$$(\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{n}}\cdot\boldsymbol{S})^2=\boldsymbol{S}^2-\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{n}}\cdot\boldsymbol{S} \tag{13.134}$$

(2) 利用两个质子总自旋算符 (13.133), 散射波幅算符 (13.132) 可以如下表示为

$$\hat{f}=\frac{1}{2}\left(f_1+3f_3\right)+\frac{1}{2}\left(f_3-f_1\right)\boldsymbol{\sigma}_n\cdot\boldsymbol{S} \tag{13.132'}$$

利用式 (13.134) 即得

$$\begin{aligned}\hat{f}^2=&\frac{1}{4}\left[\left(f_1+3f_3\right)^2+\left(f_3-f_1\right)^2(\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{n}}\cdot\boldsymbol{S})^2+2\left(f_1+3f_3\right)\left(f_3-f_1\right)\boldsymbol{\sigma}_n\cdot\boldsymbol{S}\right]\\=&\frac{1}{4}\left[\left(3f_3+f_1\right)^2+\left(5f_3^2-3f_1^2-2f_1f_3\right)\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{n}}\cdot\boldsymbol{S}+\left(f_3-f_1\right)^2\boldsymbol{S}^2\right]\end{aligned} \tag{13.135}$$

(3) 如果入射波的自旋态是一个纯态, 以 $\chi(\mathrm{n},\mathrm{p}_1,\mathrm{p}_2)$ 表示, 则总截面等于

$$\sigma=4\pi\left\langle\chi(\mathrm{n},\mathrm{p}_1,\mathrm{p}_2)\right|\hat{f}^2\left|\chi(\mathrm{n},\mathrm{p}_1,\mathrm{p}_2)\right\rangle \tag{13.136}$$

即等于 $\hat{f}^2$ 在入射波的自旋态下的平均值. 一般情形, 入射波的自旋态是一个混合态, 可用一个密度算符表示. 如果入射波中子与氢原子中的质子自旋态可分离, 密度算符可写成二者直乘的形式. 则求总截面对初态求平均时, 可依次分别对中子态与质子自旋态求平均.

在如式 (13.135) 所给的 $\hat{f}^2$ 中 $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{n}}$ 对于中子态求平均, 给出 $\langle\boldsymbol{P}_{\mathrm{n}}\rangle$, 即入射中子极化度. 假如入射中子非极化, 则 $\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{n}}$ 对于中子态求平均, 给出零. $\hat{f}^2$ 中还含有 $\boldsymbol{S}^2$, 对于正氢, $S=1$, $\boldsymbol{S}^2=2$; 对于仲氢, $S=0$, $\boldsymbol{S}^2=0$.

根据以上分析, 对于正氢, 总截面为

$$\sigma_{\mathrm{orth}}=\pi(11f_3^2+3f_1^2+2f_3f_1) \tag{13.137}$$

对于仲氢, 总截面为

$$\sigma_{\mathrm{para}}=\pi(3f_3+f_1)^2 \tag{13.138}$$

式 (13.137)、式 (13.138) 给出

$$\frac{\sigma_{\mathrm{orth}}}{\sigma_{\mathrm{para}}}=\frac{11f_3^2+3f_1^2+2f_3f_1}{(3f_3+f_1)^2}=1+\frac{2(f_3-f_1)^2}{(3f_3+f_1)^2} \tag{13.139}$$

(4) 常温下, 氢气中约 3/4 为正氢, 1/4 为仲氢, 此时则中子的平均总截面为

$$\sigma_{\text{平均}}=\frac{3}{4}\sigma_{\mathrm{orth}}+\frac{1}{4}\sigma_{\mathrm{para}}=\pi(3f_3+f_1)^2+\frac{3\pi}{2}(f_3-f_1)^2 \tag{13.140}$$

说明 如氢分子中两质子的自旋非极化, 则 $\hat{f}^2$ 中 $(\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{n}}\cdot\boldsymbol{S})$ 的平均值等于零; $\hat{f}^2$ 中 $\left(\boldsymbol{S}^2\right)$ 的平均值为 $3/2[\boldsymbol{S}^2=2\times\frac{3}{4}+2\boldsymbol{s}_{\mathrm{p}1}\cdot\boldsymbol{s}_{\mathrm{p}2}$, 由于两质子的自旋非极化, $\boldsymbol{s}_{\mathrm{p}1}\cdot\boldsymbol{s}_{\mathrm{p}2}$ 的随机平均值为 0]. 因此总截面为

$$\sigma=\frac{3}{4}\sigma_{\mathrm{orth}}+\frac{1}{4}\sigma_{\mathrm{para}}=\pi(3f_3+f_1)^2+\frac{3\pi}{2}(f_3-f_1)^2$$

这一结果与入射中子的自旋态无关, 而且与式 (13.140) 结果相等.

13.16 质量为 m 的粒子被一个很重的靶粒子散射, 两粒子的自旋均为 1/2. 设两粒子的相互作用势为

$$V = A\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2 \delta(\boldsymbol{r}), \quad \boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2 \tag{13.141}$$

其中 A 是很小的常量, 因此可以用 Born 一级近似来处理. 设入射粒子的自旋"向上", 靶粒子的自旋取向为无规分布, 求散射总截面以及散射后粒子自旋仍然保持"向上"的概率.

解法一 由于靶粒子很重, 可以不考虑其空间运动, 但由于两粒子相互作用势的特点, 其自旋状态与散射过程有关, 应该包括在入射波和散射波的波函数中加以分析. 考虑到相互作用势的特点, $\boldsymbol{L}^2$、L_z 以及 $\boldsymbol{S}^2$ 守恒, 其中 $\boldsymbol{S}$ 为两粒子的总自旋算符

$$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{s}_1 + \boldsymbol{s}_2 \tag{13.142}$$

$\boldsymbol{S}^2$ 本征态 (自旋单态或者三重态) 的本征态属性在散射过程中不变. 对于自旋单态, 散射过程可以表示成

$$\chi_{00}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} \to \chi_{00} f_1(\theta, \varphi) \frac{1}{r}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr} \tag{13.143}$$

$f_1(\theta, \varphi)$ 为自旋单态散射振幅. 对于自旋三重态, 散射过程可以表示成

$$\chi_{1M}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} \to \chi_{1M} f_3(\theta, \varphi) \frac{1}{r}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}, \quad M = -1, 0, 1 \tag{13.144}$$

$f_3(\theta, \varphi)$ 为自旋三重态散射振幅.

按题意, 作用势很弱 (A 很小), 因而 $f_1(\theta, \varphi)$、$f_3(\theta, \varphi)$ 可用 Born 近似公式计算

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int V(\boldsymbol{x}') \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}'} \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}' \tag{13.145}$$

对于入射粒子 - 靶粒子体系的自旋单态 ($S = 0$) 和三重态 ($S = 1$), 式 (13.141) 中 $\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2$ 分别等于 $-3\hbar^2/4$ 和 $\hbar^2/4$, 作用势分别为

$$V_1 = -\frac{3}{4} A\hbar^2 \delta(\boldsymbol{r}), \quad V_3 = \frac{1}{4} A\hbar^2 \delta(\boldsymbol{r}) \tag{13.146}$$

代入式 (13.145), 给出自旋单态或者三重态的散射振幅

$$f_1 = \frac{3}{8\pi} mA, \quad f_3 = -\frac{1}{8\pi} mA \tag{13.147}$$

二者均是实数量且均和方位角 (θ, φ) 无关, 散射是各向同性的. 上式可见 $f_1 = -3f_3$. 由此得到自旋单态或者三重态散射的总截面为

$$\sigma_1 = 4\pi f_1^2, \quad \sigma_3 = 4\pi f_3^2 \tag{13.148}$$

本题入射粒子的自旋"向上", 靶粒子的自旋非极化. 若用 α、β 表示粒子的自旋"向上"、"向下"的状态. 入射粒子自旋态为 α, 靶粒子自旋态为 α 及 β 的概率各为 1/2. 下面分别予以分析.

(a) 靶粒子自旋"向上", 则入射波波函数

$$\Psi_i = \alpha(1)\alpha(2)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} = \chi_{11}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} \tag{13.149}$$

为三重态, 总散射截面为 σ_3. 按照式 (13.144), 散射波应该是

$$\psi_{sc} \xrightarrow{r\to\infty} \chi_{11} f_3(\theta, \varphi) \frac{1}{r}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr} \tag{13.150}$$

入射粒子的自旋指向在散射过程中保持不变, 仍为"向上".

出现这种情况的概率为 1/2, 故对总截面的贡献为 $\frac{1}{2}\sigma_3$.

(b) 靶粒子自旋“向下”, 则入射波波函数

$$\Psi_i = \alpha(1)\beta(2)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\chi_{10}+\chi_{00}\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} \tag{13.151}$$

按照式 (13.143)、式 (13.144), 散射波应该是

$$\psi_{sc} \xrightarrow{r\to\infty} \frac{1}{\sqrt{2}}\left(f_3\chi_{10}+f_1\chi_{00}\right)\frac{1}{r}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr} = \left[\frac{1}{2}\left(f_3+f_1\right)\alpha(1)\beta(2)+\frac{1}{2}\left(f_3-f_1\right)\beta(1)\alpha(2)\right] \tag{13.152}$$

相应的总截面为

$$\sigma = 4\pi\left|\frac{1}{\sqrt{2}}(f_3\chi_{10}+f_1\chi_{00})\right|^2 = 2\pi\left(f_3^2+f_1^2\right) \tag{13.153}$$

上面用到了自旋态 χ_{10}、χ_{00} 的正交归一性.

出现这种情况的概率亦为 1/2, 故对总截面的贡献为

$$\pi\left(f_3^2+f_1^2\right) = \frac{1}{4}(\sigma_3+\sigma_1)$$

综合 (a)、(b) 两种情况, 可知有效的总截面为

$$\begin{aligned}\sigma_t &= \frac{1}{2}\sigma_3+\frac{1}{4}(\sigma_3+\sigma_1)\\ &= \frac{3}{4}\sigma_3+\frac{1}{4}\sigma_1 = \frac{3}{16\pi}m^2A^2\end{aligned}$$

只有 (b) 的式 (13.152) 中第二项相当于入射粒子经过散射后自旋方向“向下”, 按照散射截面的意义, 易知相应的概率为

$$P_{\mathrm{flip}} = \frac{1}{\sigma_t}\times\frac{1}{2}\times 4\pi\left(\frac{f_3-f_1}{2}\right)^2 = \frac{\left(f_3-f_1\right)^2}{3f_3^2+f_1^2} = \frac{2}{3}$$

因而散射后粒子自旋仍然保持“向上”的概率为 $P_{\mathrm{nflip}} = 1-2/3 = 1/3$.

解法二 (较形式的处理) 设入射波波函数为

$$\Psi_i = \chi\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} \tag{13.154}$$

其中 χ 为入射波两粒子的归一化自旋态. 我们可以将入射波波函数 (13.154) 按照 $\boldsymbol{S}^2$ 的本征态即自旋单态与三重态展开. 利用自旋单态与三重态投影算符

$$\hat{P}_1 = \frac{1}{4}\left(1-\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2\right), \quad \hat{P}_3 = \frac{1}{4}\left(1+\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2\right) \tag{13.155}$$

式 (13.154) 自旋态 χ 可展开为 $\chi = \hat{P}_1\chi+\hat{P}_3\chi$, $\hat{P}_1\chi$ 与 $\hat{P}_3\chi$ 分别为自旋单态与三重态, 相应的入射波波函数表达式 (13.154) 展开为

$$\hat{P}_1\chi\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}, \quad \hat{P}_3\chi\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} \tag{13.156}$$

散射过程中 $\hat{P}_1\chi$ 与 $\hat{P}_3\chi$ 自旋态不改变, 相应的散射态为

$$\hat{P}_1\chi f_1\left(\theta,\varphi\right)\frac{1}{r}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}, \quad \hat{P}_3\chi f_3\left(\theta,\varphi\right)\frac{1}{r}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr} \tag{13.157}$$

散射波应为上式二者之叠加, 即

$$\left[f_1(\theta,\varphi)\hat{P}_1+f_3(\theta,\varphi)\hat{P}_3\right]\chi\frac{1}{r}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr} \tag{13.158}$$

相应于入射波波函数表达式 (13.154) 的散射态可写为

$$\Psi_{sc}\xrightarrow{r\to\infty}\phi(\theta,\varphi)\frac{1}{r}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}=\left[f_1(\theta,\varphi)\hat{P}_1+f_3(\theta,\varphi)\hat{P}_3\right]\chi\frac{1}{r}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr} \tag{13.159}$$

$\phi(\theta,\varphi)$ 是 (θ,φ) 方向散射波的自旋态.

引进“散射振幅算符”

$$\hat{f}=f_1(\theta,\varphi)\hat{P}_1+f_3(\theta,\varphi)\hat{P}_3=\frac{1}{4}(f_1+3f_3)+\frac{1}{4}(f_3-f_1)\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{13.160}$$

(θ,φ) 方向散射波的自旋态 $\phi(\theta,\varphi)$ 即可表示为

$$\phi=\hat{f}\chi=f_1(\theta,\varphi)\hat{P}_1\chi+f_3(\theta,\varphi)\hat{P}_3\chi \tag{13.161}$$

而散射截面可表示为

$$\sigma(\theta,\varphi)=\phi^\dagger\phi=\chi^\dagger\hat{f}^\dagger\hat{f}\chi=\chi^\dagger\hat{f}^2\chi \tag{13.162}$$

也即“散射振幅算符”平方在入射波自旋态下的期望值.

更一般的, 若入射波的自旋态是混合态, 用密度算符 $\rho_i=\sum_\alpha p_\alpha\chi_\alpha\chi_\alpha^\dagger$ 描述, 则散射波的自旋密度算符为

$$\rho_{sc}=\sum_\alpha p_\alpha\phi_\alpha\phi_\alpha^\dagger=\hat{f}\sum_\alpha p_\alpha\chi_\alpha\chi_\alpha^\dagger\hat{f}^\dagger=\hat{f}\rho_i\hat{f} \tag{13.163}$$

而散射截面可表示为

$$\sigma(\theta,\varphi)=\sum_\alpha p_\alpha\mathrm{tr}\phi_\alpha\phi_\alpha^\dagger=\mathrm{tr}\sum_\alpha p_\alpha\phi_\alpha\phi_\alpha^\dagger=\mathrm{tr}\rho_{sc}=\mathrm{tr}\hat{f}\rho_i\hat{f}=\mathrm{tr}\hat{f}^2\rho_i \tag{13.164}$$

为“散射振幅算符”平方与入射波自旋态密度矩阵相乘以后求迹, 也即“散射振幅算符”平方在入射波自旋态下的期望值.

对于本题, 根据式 (13.147), “散射振幅算符”为

$$\hat{f}=\lambda\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2,\quad \lambda=f_3=-\frac{1}{8\pi}mA \tag{13.165}$$

利用 Pauli 算符的代数关系, $\sigma_i\sigma_j=\delta_{ij}+\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_k$, “散射振幅算符”平方为

$$\hat{f}^2=\lambda^2(3-2\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2) \tag{13.166}$$

本题入射粒子的自旋“向上”, 靶粒子的自旋非极化. 则自旋态可用如下密度矩阵表示:

$$\rho_i=\alpha(1)\alpha(1)^\dagger\otimes\frac{1}{2}I_2=\frac{1}{4}(1+\sigma_{1z})\otimes I_2$$

$\hat{f}^2$ 中第 2 个粒子的自旋算符 $\boldsymbol{\sigma}_2$ 对于非极化态求平均给出零, 这样得到 $\hat{f}^2$ 在入射波自旋态下的期望值为

$$\sigma(\theta,\varphi)=\mathrm{tr}\rho_{sc}=\mathrm{tr}\hat{f}^2\rho_i=3\lambda^2=\frac{3m^2A^2}{64\pi^2}$$

与空间方位角 (θ,φ) 无关, 这样总截面为 $\dfrac{3m^2A^2}{16\pi}$.

散射后粒子自旋仍然保持“向上”的可能态有 $\alpha(1)\alpha(2)$ 与 $\alpha(1)\beta(2)$, 可以分别用如下密度算符表示:

$$\rho_1 = \alpha(1)\alpha(1)^\dagger \otimes \alpha(2)\alpha(2)^\dagger = \frac{1}{4}(1+\sigma_{1z}) \otimes (1+\sigma_{2z}) \tag{13.167a}$$

$$\rho_2 = \alpha(1)\alpha(1)^\dagger \otimes \beta(2)\beta(2)^\dagger = \frac{1}{4}(1+\sigma_{1z}) \otimes (1-\sigma_{2z}) \tag{13.167b}$$

利用散射波的自旋密度算符 ρ_{sc}, 按照对末态求和, 知粒子自旋仍然保持“向上”的概率为

$$\begin{aligned} P_{\text{nflip}} =& \frac{\text{tr}\rho_{sc}\rho_1}{\text{tr}\rho_{sc}} + \frac{\text{tr}\rho_{sc}\rho_2}{\text{tr}\rho_{sc}} = \frac{\text{tr}\rho_{sc}(\rho_1+\rho_2)}{\text{tr}\rho_{sc}} = \frac{1}{3\lambda^2}\text{tr}\hat{f}\rho_i\hat{f}(\rho_1+\rho_2) \\ =& \frac{1}{3}\times\frac{1}{8}\text{tr}\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2(1+\sigma_{1z})\otimes I_2\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2(1+\sigma_{1z})\otimes I_2 \\ =& \frac{1}{3}\times\frac{1}{4}\text{tr}\sigma_{1i}(1+\sigma_{1z})\sigma_{1i}(1+\sigma_{1z}) \end{aligned}$$

上面最后一个等号用到了 Pauli 算符的代数关系, 并通过对第二个粒子自旋态空间求迹得到. 重复指标 i 表示求和. 对 $i=x,y$, 由于 Pauli 算符不同分量的反对易性, 求迹均给出零, 只有 $i=z$ 给出不为零的结果, 这样所求的概率为

$$P_{\text{nflip}} = \frac{1}{12}\text{tr}\sigma_{1z}(1+\sigma_{1z})\sigma_{1z}(1+\sigma_{1z}) = \frac{1}{12}\text{tr}(1+\sigma_{1z})^2 = \frac{1}{12}\text{tr}(2+2\sigma_{1z}) = \frac{1}{3}$$

上面看到, 两种解法所得结果完全一致.

13.17 考虑 np 低能 s 波散射. 相移与自旋态有关. 三重态和单态下的 s 波相移分别记为 δ_t 和 δ_s. 设入射中子自旋指向前进方向 (z 轴), 靶质子则未极化. 试求 (1) 中子自旋取向不变的散射截面. (2) 中子自旋反向的散射截面. (3) 总截面.

解 以 f_1 和 f_3 表示自旋单态和三重态的散射振幅, 它们与相移的关系是

$$f_1 = \frac{1}{k}\exp(\text{i}\delta_s)\sin\delta_s, \quad f_3 = \frac{1}{k}\exp(\text{i}\delta_t)\sin\delta_t$$

入射波中, 中子自旋“向上”, 质子自旋非极化. 若用 α、β 表示粒子的自旋“向上”、“向下”的状态. 入射中子自旋态为 α, 质子自旋态为 α 及 β 的概率各为 1/2. 下面分别予以分析.

(a) 质子自旋“向上”, 入射波波函数

$$\Psi_i = \alpha(\text{n})\alpha(\text{p})\text{e}^{\text{i}kz} = \chi_{11}\text{e}^{\text{i}kz} \tag{13.168}$$

为三重态, 仿照题 13.16 的分析, 散射波为

$$\psi_{sc} \xrightarrow{r\to\infty} \chi_{11}f_3(\theta,\varphi)\frac{1}{r}\text{e}^{\text{i}kr} = \alpha(\text{n})\alpha(\text{p})f_3(\theta,\varphi)\frac{1}{r}\text{e}^{\text{i}kr} \tag{13.169}$$

入射中子的自旋指向在散射过程中保持不变, 仍为“向上”. 这种情况下, 散射截面为 $4\pi|f_3|^2$.

出现这种情况的概率为 1/2, 故对散射截面 $\sigma_{\uparrow\uparrow}$ 的贡献为 $\frac{1}{2}\sigma_3$.

(b) 质子自旋“向下”, 入射波波函数为

$$\Psi_i = \alpha(1)\beta(2)\text{e}^{\text{i}kz} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{10}+\chi_{00})\text{e}^{\text{i}kz} \tag{13.170}$$

仿照题 13.16 的分析, 散射波为

$$\psi_{sc} \xrightarrow{r\to\infty} \frac{1}{\sqrt{2}}(f_3\chi_{10}+f_1\chi_{00})\frac{1}{r}\text{e}^{\text{i}kr} = \left[\frac{1}{2}(f_3+f_1)\alpha(\text{n})\beta(\text{p}) + \frac{1}{2}(f_3-f_1)\beta(\text{n})\alpha(\text{p})\right] \tag{13.171}$$

其中第一项相当于中子自旋取向保持不变, 第二项相当于中子自旋反向. 出现这种情况的概率亦为 1/2, 故对散射截面 $\sigma_{\uparrow\uparrow}$ 的贡献为 $2\pi\left|\frac{1}{2}(f_3+f_1)\right|^2$, 对 $\sigma_{\uparrow\downarrow}$(中子自旋反向的截面) 的贡献为 $2\pi\left|\frac{1}{2}(f_3-f_1)\right|^2$. 综合上述分析, 可得结论如下:

(1) 中子自旋取向保持不变的散射截面为

$$\sigma_{\uparrow\uparrow}=2\pi|f_3|^2+\frac{\pi}{2}|f_3+f_1|^2 \tag{13.172}$$

(2) 中子自旋反向的散射截面为

$$\sigma_{\uparrow\downarrow}=\frac{\pi}{2}|f_3-f_1|^2 \tag{13.173}$$

(3) 总截面为

$$\sigma_t=\sigma_{\uparrow\uparrow}+\sigma_{\uparrow\downarrow}=\pi\left(|f_1|^2+3|f_3|^2\right)=\frac{1}{4}\sigma_1+\frac{3}{4}\sigma_3 \tag{13.174}$$

其中 $\sigma_1=4\pi|f_1|^2, \sigma_3=4\pi|f_3|^2$.

说明 本题也可仿照题 13.16 的第二种解法, 利用"散射振幅算符"求解.

13.18 能量为 $E=\hbar^2k^2/2\mu$ 的粒子被一个非定域势 $V(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ 散射, 波函数满足方程

$$\left(\nabla^2+k^2\right)\psi(\boldsymbol{r})=\frac{2\mu}{\hbar^2}\int V(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{13.175}$$

设 V 可分离变量如下:

$$\frac{2\mu}{\hbar^2}V(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')=-\lambda U(r)U(r') \tag{13.176}$$

证明只有 s 波对散射有贡献, 并证明在 Born 近似下散射波幅可表示为 (注意, 与角度无关!)

$$f(k)=4\pi\lambda|U(k)|^2\left[1-\frac{2\lambda}{\pi}\int\frac{|U(k')|^2}{k^2-k'^2+\mathrm{i}\varepsilon}\mathrm{d}^3\boldsymbol{k}'\right] \tag{13.177}$$

其中 $\varepsilon\to0^+$, 而

$$U(k)=\int_0^\infty U(r)\frac{\sin kr}{kr}r^2\mathrm{d}r$$

提示 势场是轴对称的. 不仅入射波为轴对称, 散射波也是轴对称. 令 $\psi(r,\theta)=\sum_l R_l(r)\mathrm{Y}_l^0(\theta)$ 代入式 (13.175), 利用式 (13.176), 由于 $\int\mathrm{Y}_l^0(\theta)\mathrm{d}\Omega=0$(对 $l\neq0$), 只有 s 波对式 (13.175) 右边积分有贡献.

证明 观察式 (13.176), 势场是轴对称的. 入射波为轴对称, 散射波也应为轴对称. 设

$$\psi(r,\theta)=\sum_l R_l(r)\mathrm{Y}_l^0(\theta) \tag{13.178}$$

代入式 (13.175), 利用式 (13.176), 由于

$$\int\mathrm{Y}_l^0(\theta)\mathrm{d}\Omega=0,\quad l\neq0$$

只有 s 波对式 (13.175) 右边积分有贡献. 除了 s 波以外, 其他分波不受该非定域势影响. 因此, 散射完全来自 s 波.

按题意, 采用 Born 近似, 观察所证结果, 需要考虑二阶修正. 故仿照题 13.2, 以入射波

$$\psi_i = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{r}} \tag{13.179}$$

作为 ψ 的零级近似, ψ 的逐级展开为

$$\psi = \psi^{(0)} + \psi^{(1)} + \psi^{(2)} + \cdots, \quad \psi^{(0)} = \psi_i \tag{13.180}$$

各项分别为零级近似、一级修正、二级修正 …… 总的波函数为

$$\psi = \psi_i + \psi_{\mathrm{sc}} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} + \psi_{\mathrm{sc}} \tag{13.181}$$

式 (13.180) 与上式比较, 也就是

$$\psi_{\mathrm{sc}} = \psi^{(1)} + \psi^{(2)} + \cdots$$

按照逐级近似解法

$$\left(\nabla^2 + k^2\right)\psi^{(1)}(\boldsymbol{r}) = \frac{2\mu}{\hbar^2}\int V\left(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}'\right)\psi^{(0)}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{13.182}$$

$$\left(\nabla^2 + k^2\right)\psi^{(2)}(\boldsymbol{r}) = \frac{2\mu}{\hbar^2}\int V\left(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}'\right)\psi^{(1)}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{13.183}$$

将式 (13.176) 及式 (13.179) 代入式 (13.182), 得到

$$\left(\nabla^2 + k^2\right)\psi^{(1)}(\boldsymbol{r}) = -\lambda U(\boldsymbol{r})\int U(\boldsymbol{r}')\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{r}'}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{13.184}$$

对于式 (13.184) 的积分变量 $\boldsymbol{r}'$, 采用球坐标, 先将角度部分积分算出, 得到

$$\begin{aligned}\int U(\boldsymbol{r}')\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{r}'}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' &= \int U(\boldsymbol{r}')\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{r}'}r'^2\mathrm{d}r'\sin\theta'\mathrm{d}\theta'\mathrm{d}\varphi \\ &= 4\pi\int_0^\infty U(r')\frac{\sin kr'}{kr'}r'^2\mathrm{d}r' = 4\pi U(k)\end{aligned} \tag{13.185}$$

其中

$$U(k) = \int_0^\infty U(r)\frac{\sin kr}{kr}r^2\mathrm{d}r \tag{13.186}$$

为一个实函数.

于是, 式 (13.184) 可以写为

$$\left(\nabla^2 + k^2\right)\psi^{(1)}(\boldsymbol{r}) = -4\pi\lambda U(k)U(r) \tag{13.187}$$

其解为

$$\psi^{(1)}(\boldsymbol{r}) = -4\pi\lambda U(k)\int G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')U(r')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{13.188}$$

式 (13.188) 对任何 r 成立. 根据散射边界条件, 其中 Green 函数如下给出:

$$G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}'') = \frac{1}{(2\pi)^3}\int\frac{1}{(k+\mathrm{i}0^+)^2 - k'^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'')}\mathrm{d}^3\boldsymbol{k}' = -\frac{1}{4\pi\left|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'\right|}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\left|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}''\right|} \tag{13.189}$$

或者对于很大的 r, 作类似于式 (13.23) 的近似处理, 即有

$$G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}'') \xrightarrow{r\to\infty} -\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{4\pi r}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{x}''} \tag{13.190}$$

代入式 (13.188), 即得

$$\psi^{(1)}(\boldsymbol{r}) \xrightarrow{r\to\infty} \lambda U(k)\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{r}\int U(r')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}'}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{13.191}$$

对上式积分中的积分变量作变换 $\boldsymbol{r}'\to-\boldsymbol{r}'$, 并利用式 (13.185) 即得

$$\int U(r')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}'}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' = \int U(r')\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}'}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' = 4\pi U(k)$$

因此

$$\psi^{(1)}(\boldsymbol{r}) \xrightarrow{r\to\infty} 4\pi\lambda|U(k)|^2\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{r} \tag{13.192}$$

此式给出散射振幅的一级近似为

$$f^{(1)}(\boldsymbol{k}) = 4\pi\lambda|U(k)|^2 \tag{13.193}$$

波函数的二级修正 $\psi^{(2)}(\boldsymbol{r})$ 满足方程 (13.183), 也即

$$\left(\nabla^2+k^2\right)\psi^{(2)}(\boldsymbol{r}) = -\lambda U(r)\int U(r)\psi^{(1)}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' = -\lambda 4\pi A(k)U(r) \tag{13.183'}$$

其中

$$A(k) = \frac{1}{4\pi}\int U(r)\psi^{(1)}(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{13.194}$$

式 (13.183') 的解为

$$\psi^{(2)}(\boldsymbol{r}) = -4\pi\lambda A(k)\int G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')U(r')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \tag{13.195}$$

此式和式 (13.191) 比较, 可见

$$\psi^{(2)} = \frac{A(k)}{U(k)}\psi^{(1)} \tag{13.196}$$

代入式 (13.192) 即得

$$\psi^{(2)}(\boldsymbol{r}) \xrightarrow{r\to\infty} 4\pi\lambda A(k)U(k)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} \tag{13.197}$$

此式给出散射振幅的二级近似为

$$f^{(2)}(\boldsymbol{k}) = 4\pi\lambda A(k)U(k) \tag{13.198}$$

下面计算 $A(k)$. 将式 (13.191) 代入式 (13.194), 得到

$$\begin{aligned}A(k) &= -\lambda U(k)\iint G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')U(r')\mathrm{d}^3x\mathrm{d}^3x' \\ &= -\lambda U(k)\frac{1}{(2\pi)^3}\iiint\frac{U(r)U(r')}{k^2-k'^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}\mathrm{d}^3\boldsymbol{k}'\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\end{aligned}$$

其中 $G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ 的已用式 (13.189) 代入. 将对于 $\boldsymbol{r}$、$\boldsymbol{r}'$ 积分的角度部分积分算出, 并利用 $U(k)$ 的定义 (13.186), 即得

$$A(k) = -\frac{2}{\pi}\lambda U(k)\int\frac{|U(k')|^2}{(k+\mathrm{i}0^+)^2-k'^2}\mathrm{d}^3\boldsymbol{k}' \tag{13.199}$$

代入式 (13.198) 即得

$$f^{(2)} = -4\pi\lambda|U(k)|^2\frac{2\lambda}{\pi}\int\frac{|U(k')|^2}{(k+\mathrm{i}0^+)^2-k'^2}\mathrm{d}^3\boldsymbol{k}' \tag{13.200}$$

或者等效的, 写为

$$f^{(2)} = -4\pi\lambda|U(k)|^2\frac{2\lambda}{\pi}\int\frac{|U(k')|^2}{k^2-k'^2+\mathrm{i}\varepsilon}\mathrm{d}^3\boldsymbol{k}' \tag{13.200'}$$

其中 $\varepsilon\to0^+$. 式 (13.193) 与式 (13.200') 相加, 即得式 (13.177), 即为所证.

说明 观察式 (13.177), 可知散射振幅 f 与方向无关, 它仅为 $|k|$ 的函数, 这正是 s 波散射的特点.

第 14 章　其他近似方法

14.1　对于一维谐振子, 取基态试探波函数形式为 $\mathrm{e}^{-\lambda x^2}$, λ 为参数. 试用变分法求基态能量, 并与严格解比较.

提示　建议试探波函数取为 $\psi(x)=\mathrm{e}^{-\lambda x^2}$, λ 是待定参数.

解　按照变分法, 先计算在试探波函数 $\psi(x)=\mathrm{e}^{-\lambda x^2}$ 下的能量期望值

$$\langle H\rangle=\frac{\int \mathrm{d}x\psi^*(x)H\psi(x)}{\int \mathrm{d}x\psi^*(x)\psi(x)} \tag{14.1}$$

而波函数的模平方

$$\int \mathrm{d}x\psi^*(x)\psi(x)=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\mathrm{e}^{-2\lambda x^2}=\frac{1}{\sqrt{2\lambda}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}y\mathrm{e}^{-y^2}=\sqrt{\frac{\pi}{2\lambda}} \tag{14.2}$$

谐振子 Hamilton 量

$$H=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega_0^2x^2=T+V \tag{14.3}$$

其中 $T=-\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$, $V=\dfrac{1}{2}\mu\omega_0^2x^2$. 按照上面式 (14.1)、式 (14.2), 能量期望值为

$$\langle H\rangle=\sqrt{\frac{2\lambda}{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\lambda x^2}(T+V)\mathrm{e}^{-\lambda x^2}=\langle T\rangle+\langle V\rangle \tag{14.4}$$

利用积分公式 (A.2) 对上面 $\langle T\rangle$ 和 $\langle V\rangle$ 进行计算

$$\begin{aligned}\langle T\rangle&=\sqrt{\frac{2\lambda}{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\lambda x^2}T\mathrm{e}^{-\lambda x^2}=\sqrt{\frac{2\lambda}{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\lambda x^2}\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\right)\mathrm{e}^{-\lambda x^2}\\&=\sqrt{\frac{2\lambda}{\pi}}\frac{\hbar^2}{2\mu}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\mathrm{e}^{-\lambda x^2}\right]^2=\frac{\hbar^2}{2\mu}\sqrt{\frac{2\lambda}{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x4\lambda^2x^2\mathrm{e}^{-2\lambda x^2}\\&=\frac{2\lambda^2\hbar^2}{\mu}\sqrt{\frac{2\lambda}{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}xx^2\mathrm{e}^{-2\lambda x^2}=\frac{2\lambda^2\hbar^2}{\mu}\sqrt{\frac{2\lambda}{\pi}}\frac{\sqrt{\pi}}{2(2\lambda)^{\frac{3}{2}}}=\frac{\lambda\hbar^2}{2\mu}\end{aligned} \tag{14.5}$$

上面用到了动量算符的 Hermite 性. 而

$$\begin{aligned}\langle V\rangle&=\sqrt{\frac{2\lambda}{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\lambda x^2}V\mathrm{e}^{-\lambda x^2}=\sqrt{\frac{2\lambda}{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\lambda x^2}\left(\frac{1}{2}\mu\omega_0^2x^2\right)\mathrm{e}^{-\lambda x^2}\\&=\frac{\mu\omega_0^2}{2}\sqrt{\frac{2\lambda}{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}xx^2\mathrm{e}^{-2\lambda x^2}=\frac{\mu\omega_0^2}{2}\sqrt{\frac{2\lambda}{\pi}}\frac{\sqrt{\pi}}{2(2\lambda)^{\frac{3}{2}}}=\frac{\mu\omega_0^2}{8\lambda}\end{aligned} \tag{14.6}$$

由式 (14.4)、式 (14.5) 与式 (14.6) 得

$$\overline{H}(\lambda)=\langle H\rangle=\frac{\lambda\hbar^2}{2\mu}+\frac{\mu\omega_0^2}{8\lambda} \tag{14.7}$$

对 $\overline{H}$ 求极值

$$0=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\overline{H}=\frac{\hbar^2}{2\mu}-\frac{\mu\omega_0^2}{8\lambda^2} \tag{14.8}$$

解得 $\lambda=\mu\omega_0/(2\hbar)$ $(=\alpha^2/2)$, 代入式 (14.7) 与试探波函数得基态能量和波函数为

$$E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega_0,\quad \psi_0(x)=\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$$

结果与严格解完全相同. 因为试探波函数的形式与严格解相同, 所以得到这一结果也就不奇怪了.

14.2 一维谐振子, 取自然单位 ($\hbar=m=\omega=1$), Hamilton 量量可表示成

$$H=-\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}x^2$$

取基态试探波函数为

$$\psi=\begin{cases} N\left(1-\dfrac{|x|}{a}\right), & |x|<a \\ 0, & |x|>a \end{cases}$$

a 为变分参数, N 为归一化常数. 求基态能量, 并与精确解比较.

解 题给波函数为归一化形式, 即要求 $\langle\psi\,|\psi\rangle=1$, 也就是

$$1=\int_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2\,\mathrm{d}x=|N|^2\int_{-a}^{a}\left(1-\frac{|x|}{a}\right)^2\mathrm{d}x=2\,|N|^2\,a\int_0^1(1-\xi)^2\mathrm{d}\xi=\frac{2}{3}\,|N|^2\,a$$

由上式知归一化常数可以取为

$$N=\sqrt{\frac{3}{2a}} \tag{14.9}$$

在试探波函数 $\psi(x)$ 下体系的能量期望值为

$$\overline{H}(a)=\int\mathrm{d}x\psi^*(x)H\psi(x)=\int\mathrm{d}x\psi^*(x)\,(T+V)\,\psi(x)=\langle T\rangle+\langle V\rangle \tag{14.10}$$

即动能与势能的期望值之和. 其中势能的期望值为

$$\langle V\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)V(x)\psi(x)\mathrm{d}x=\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}x^2\psi^2\mathrm{d}x=N^2a^3\int_0^1\xi^2(1-\xi)^2\mathrm{d}\xi=N^2\frac{a^3}{30}=\frac{a^2}{20} \tag{14.11}$$

而动能期望值为 (取自然单位制)

$$\langle T\rangle=-\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\psi\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}\mathrm{d}x \tag{14.12}$$

根据题给的波函数, 得

$$\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}=\begin{cases} 0, & |x|>a \\ N/a, & -a<x<0 \\ -N/a, & 0<x<a \end{cases} \tag{14.13}$$

以及

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}=\frac{N}{a}\delta(x+a)-\frac{2N}{a}\delta(x)+\frac{N}{a}\delta(x-a) \tag{14.14}$$

代入式 (14.12), 即得 ①

$$\langle T\rangle = -\frac{N}{2a}\psi(-a) + \frac{N}{a}\psi(0) - \frac{N}{2a}\psi(a) = \frac{N^2}{a} = \frac{3}{2a^2} \tag{14.15}$$

式 (14.11) 与式 (14.15) 代入式 (14.10), 即得

$$\overline{H}(a) = \langle T + V\rangle = \frac{3}{2a^2} + \frac{a^2}{20} \tag{14.16}$$

按照 Ritz 变分法, 对 $\overline{H}(a)$ 求极值

$$0 = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}a}\overline{H}(a) = -\frac{3}{a^3} + \frac{a}{10}$$

求得 a 的最佳值为

$$a = (30)^{1/4} \tag{14.17}$$

代入式 (14.16) 即得

$$E = \frac{3}{2\sqrt{30}} + \frac{\sqrt{30}}{20} = \frac{\sqrt{30}}{10} = 0.5477 \tag{14.18}$$

上式为根据题给试探波函数计算得到的基态能量 E_0 的上限, 与精确值 $E_0 = 1/2$ 相比, 误差达 9.54%.

说明 谐振子位势函数处处连续, 没有无限大的不连续点, 因而波函数导数应处处连续. 而由式 (14.13) 知, 试探波函数的导数却有 3 处不连续. 再根据一维束缚态的节点定理, 基态没有节点. 然而试探波函数却是在 $|x| \geqslant a$ 处均为零, 违背节点定理. 此外由式 (14.14) 知, 试探波函数满足的方程与谐振子满足的 Schrödinger 方程偏离较大. 这些是所得结果误差大的原因.

14.3 对于非简谐振子, Hamilton 量为

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \lambda x^4$$

假设处于基态. 试用简谐振子的波函数

$$\psi_0(x) = \frac{\sqrt{\alpha}}{\pi^{1/4}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$$

为试探波函数, 其中 α 为参数. 试用变分法求基态能量.

解 试探波函数 $\psi_0(x)$ 已归一化. 题给非简谐振子 Hamilton 量为

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \lambda x^4 = T + V \tag{14.19}$$

其中 $T = -\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$, $V = \lambda x^4$. 在试探波函数 $\psi_0(x)$ 下的能量期望值

$$\overline{H} = \int \mathrm{d}x\psi_0^*(x)H\psi_0(x) = \int \mathrm{d}x\psi_0^*(x)\left(T + V\right)\psi_0(x) = \overline{T} + \overline{V} \tag{14.20}$$

---

① 从式 (14.12) 出发, 利用 p 的 Hermite 性, $\langle T\rangle$ 也可如下计算

$$\begin{aligned}\langle T\rangle &= \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\left|\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right|^2\mathrm{d}x = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\left|\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right|^2\mathrm{d}x \\ &= \frac{1}{2}\left(\frac{N}{2}\right)^2\int_{-a}^{a}\mathrm{d}x = \frac{N^2}{a} = \frac{3}{2a^2}\end{aligned}$$

这与式 (14.15) 结果相同.

利用积分公式 (A.2)、式 (A.3), 对上面 $\langle T\rangle$ 和 $\langle V\rangle$ 进行计算

$$\begin{aligned}\overline{T}&=\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2/2}T\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2/2}\\&=\sqrt{\frac{\alpha^2}{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2/2}\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\right)\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2/2}\\&=\sqrt{\frac{\alpha^2}{\pi}}\frac{\hbar^2}{2\mu}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2/2}\right]^2=\frac{\hbar^2}{2\mu}\sqrt{\frac{\alpha^2}{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\alpha^4x^2\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2}\\&=\frac{\alpha^4\hbar^2}{2\mu}\sqrt{\frac{\alpha^2}{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}xx^2\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2}=\frac{\alpha^5\hbar^2}{2\mu}\sqrt{\frac{1}{\pi}}\frac{\sqrt{\pi}}{2(\alpha^2)^{\frac{3}{2}}}=\frac{\alpha^2\hbar^2}{4\mu}\end{aligned}\tag{14.21}$$

上面用到了动量算符的 Hermite 性. 而

$$\begin{aligned}\overline{V}&=\sqrt{\frac{\alpha^2}{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2/2}V\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2/2}=\sqrt{\frac{\alpha^2}{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2/2}\left(\lambda x^4\right)\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2/2}\\&=\lambda\sqrt{\frac{\alpha^2}{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}xx^4\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2}=\lambda\sqrt{\frac{\alpha^2}{\pi}}\frac{3\sqrt{\pi}}{4(\alpha^2)^{\frac{5}{2}}}=\frac{3\lambda}{4\alpha^4}\end{aligned}\tag{14.22}$$

由式 (14.20)、式 (14.21) 与式 (14.22) 得

$$\overline{H}(\alpha)=\frac{\alpha^2\hbar^2}{4\mu}+\frac{3\lambda}{4\alpha^4}\tag{14.23}$$

对 $\overline{H}$ 求极值, $0=\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\alpha}\overline{H}=\dfrac{\alpha\hbar^2}{2\mu}-\dfrac{3\lambda}{\alpha^5}$, 解得 $\alpha=\sqrt[6]{\dfrac{6\lambda\mu}{\hbar^2}}$, 代入式 (14.23) 得基态能量为

$$E_0=\frac{3}{8}\sqrt[3]{\frac{6\lambda\hbar^4}{\mu^2}}\approx1.082\sqrt[3]{\frac{\lambda\hbar^4}{\mu^2}}$$

14.4 设 φ 为基态的试探波函数, ψ_0 是真实的基态波函数, 两者均已归一化. 令 $\varepsilon=1-|\langle\psi_0|\,\varphi\rangle|^2$ 表示 φ 偏离 ψ_0 的程度. 令 $E=\langle\varphi|\,H\,|\varphi\rangle$, 证明 $E-E_0\geqslant(E_1-E_0)\varepsilon$, 其中 E_0 和 E_1 分别是体系真实的基态和第一激发态能量.

证明 设 Hamilton 量 H 的完备的归一化本征态为 $|\psi_n\rangle(n=0,1,2,\cdots)$. 则 $|\varphi\rangle$ 可按 $|\psi_n\rangle$ 作如下展开:

$$\varphi=\sum_{n=0}^{\infty}C_n\psi_n\tag{14.24}$$

从而

$$\varepsilon=1-|\langle\psi_0\,|\varphi\rangle|^2=1-C_0^*C_0\tag{14.25}$$

另一方面

$$\begin{aligned}E-E_0&=\langle\varphi|\,(H-E_0)\,|\varphi\rangle=\sum_nC_n^*C_n\,(E_n-E_0)\\&=C_1^*C_1\,(E_1-E_0)+C_2^*C_2\,(E_2-E_0)+\cdots\\&\geqslant(E_1-E_0)\,(C_1^*C_1+C_2^*C_2+\cdots)=(E_1-E_0)\,(1-C_0^*C_0)\end{aligned}\tag{14.26}$$

将式 (14.25) 代入上式, 即得

$$E-E_0\geqslant(E_1-E_0)\varepsilon\tag{14.27}$$

即为所证.

说明 假如 $|\varphi\rangle$ 按照 $|\psi_n\rangle$ 的展开式中, $|\psi_1\rangle$ 不出现, 则式 (14.26) 变为 $E-E_0 \geqslant (E_2-E_0)(1-C_0^*C_0)$, 从而式 (14.26) 变为

$$E-E_0 \geqslant (E_2-E_0)\varepsilon$$

同样, 假如 $|\varphi\rangle$ 按照 $|\psi_n\rangle$ 的展开式中, 从 $|\psi_1\rangle$ 一直到 $|\psi_k\rangle$ 都不出现, 则式 (14.26) 变为

$$E-E_0 \geqslant (E_{k+1}-E_0)\varepsilon$$

14.5 设试探波函数 φ 与本征函数 ψ_E 差一个小量, 即 $\varphi=\psi_E+\varepsilon f$, ψ_E 及 f 已归一化, ε 为小的实数. 证明 φ 态下 Hamilton 量的期望值 $\overline{H}$ 与本征值 E 之差为 $O(\varepsilon^2)$.

证明 不妨设

$$\varphi=\psi_E+\varepsilon f \tag{14.28}$$

中, ψ_E 与 f 正交[①], φ 态下 Hamilton 量的期望值为

$$\overline{H}=\frac{(\varphi,H\varphi)}{(\varphi,\varphi)}=\frac{1}{1+\varepsilon^2}(\psi_E+\varepsilon f,E\psi_E+\varepsilon Hf)=\frac{1}{1+\varepsilon^2}\left[E+\varepsilon^2(f,Hf)\right]$$

因而

$$\overline{H}-E=\frac{\varepsilon^2}{1+\varepsilon^2}\left[-E+(f,Hf)\right]=\left(\varepsilon^2-\varepsilon^4+\cdots\right)\left[(f,Hf)-E\right] \tag{14.29}$$

上式可见 φ 态下 Hamilton 量的期望值 $\overline{H}$ 与本征值 E 之差为 $O(\varepsilon^2)$.

14.6 设不加微扰前体系的 Hamilton 量 H_0 的基态能量和波函数分别记为 E_0 和 ψ_0(已归一化). 设体系受到微扰 H', $H=H_0+H'$. 取试探波函数为 $\psi(\lambda)=N(1+\lambda H')\psi_0$, λ 为变分参数, N 为归一化常数, 可取为实数. 试用变分法求 H 基态能量的上限. 计算时保留二级小量.

解 加微扰前体系基态 ψ_0 下的期望值记为 $\langle\ \rangle_0$, 即

$$\langle\psi_0|\,H'\,|\psi_0\rangle=\langle H'\rangle_0\,,\quad \langle\psi_0|\,H'^2\,|\psi_0\rangle=\langle H'^2\rangle_0 \tag{14.30}$$

将试探波函数 $\psi(\lambda)$ 归一化, 即使得

$$\langle\psi(\lambda)|\,\psi(\lambda)\rangle=1 \tag{14.31}$$

这给出

$$N^2=\frac{1}{1+2\lambda\langle H'\rangle_0+\lambda^2\langle H'^2\rangle_0} \tag{14.32}$$

在试探波函数 $\psi(\lambda)$ 下 Hamilton 量的期望值

$$\begin{aligned}E(\lambda)&=\langle\psi|\,H\,|\psi\rangle=N^2\langle(1+\lambda H')(H_0+H')(1+\lambda H')\rangle_0\\&=N^2\left(E_0+\langle H'\rangle_0+2\lambda E_0\langle H'\rangle_0+2\lambda\langle H'^2\rangle_0+\lambda^2\langle H'H_0H'\rangle_0+\lambda^2\langle H'^3\rangle_0\right)\end{aligned} \tag{14.33}$$

由 $H'H_0H'=H'[H_0,H']+H'^2H_0=H_0H'^2-[H_0,H']H'$ 得

$$2H'H_0H'=H'[H_0,H']+H'^2H_0+H_0H'^2-[H_0,H']H'$$

① 不然, 将 f 中含有 ψ_E 的成分与 ψ_E 合并, 再乘以一个适当的因子, 得到 $\varphi_1=\psi_E+\varepsilon_1 f_1$, 可适当选择 ε_1 使 f_1 归一化, $|\varepsilon_1|\leqslant\varepsilon$. φ_1 与 φ 是同一个态, 而 φ_1 中 ψ_E 与 f_1 正交.

因此

$$\langle H'H_0H'\rangle_0 = E_0\langle H'^2\rangle_0 + \frac{1}{2}\langle[H',[H_0,H']]\rangle_0 \tag{14.34}$$

代入式 (14.33), 得到

$$\begin{aligned} E(\lambda) = {} & E_0 + \langle H'\rangle_0 + 2N^2\lambda\langle H'^2\rangle_0 - 2N^2\lambda(\langle H'\rangle_0)^2 \\ & + N^2\left\{\lambda^2\langle H'^3\rangle_0 + \frac{\lambda^2}{2}\langle[H',[H_0,H']]\rangle_0 - \lambda^2\langle H'\rangle_0\langle H'^2\rangle_0\right\} \end{aligned}$$

其中 N^2 见式 (14.32). 按照题设要求, 上式中略去微扰 H' 的三级小量, 得到

$$E(\lambda) = E_0 + \langle H'\rangle_0 + 2\lambda\langle H'^2\rangle_0 - 2\lambda(\langle H'\rangle_0)^2 + \frac{\lambda^2}{2}\langle[H',[H_0,H']]\rangle_0 \tag{14.35}$$

按照 Ritz 变分法, 对式 (14.35) 求极值, 极值条件为 $\dfrac{\partial E}{\partial\lambda} = 0$, 由此求得

$$\lambda = -\frac{\langle H'^2\rangle_0 - (\langle H'\rangle_0)^2}{\frac{1}{2}\langle[H',[H_0,H']]\rangle_0} = \frac{\langle H'^2\rangle_0 - (\langle H'\rangle_0)^2}{E_0\langle H'^2\rangle_0 - \langle H'H_0H'\rangle_0} \tag{14.36}$$

代入式 (14.36), 即得 $E(\lambda)$ 极小值为

$$E = E_0 + \langle H'\rangle_0 - \frac{2\left[\langle H'^2\rangle_0 - (\langle H'\rangle_0)^2\right]^2}{\langle[H',[H_0,H']]\rangle_0} \tag{14.37}$$

$$= E_0 + \langle H'\rangle_0 + \frac{\left[\langle H'^2\rangle_0 - (\langle H'\rangle_0)^2\right]^2}{E_0\langle H'^2\rangle_0 - \langle H'H_0H'\rangle_0} \tag{14.38}$$

也就是

$$E = E_0 + \langle\psi_0|H'|\psi_0\rangle + \frac{\left[\langle\psi_0|H'^2|\psi_0\rangle - \langle\psi_0|H'|\psi_0\rangle^2\right]^2}{E_0\langle\psi_0|H'^2|\psi_0\rangle - \langle\psi_0|H'H_0H'|\psi_0\rangle}$$

上式即为试探波函数为 $\psi(\lambda) = N(1+\lambda H')\psi_0$ 下, 基态能级的上限.

说明 在一些情况下, 如微扰论的波函数一阶微扰修正用零级波函数展开只有一项, 则试探波函数 $\psi(\lambda) = N(1+\lambda H')\psi_0$ 与微扰论准确到一阶的波函数形式相同, 由此用变分法保留二级项得到的结果与微扰论相应结果相同. 见题 14.13 的讨论.

14.7 设 Hamilton 量 H 的最低的 $(n-1)$ 个本征函数已知, 写出变分法的试探波函数的形式, 用以求出第 n 条能级的上界.

解 设 H 的已知 $(n-1)$ 个本征函数为 $\phi_k(k=1,2,\cdots,n-1)$, 相应的能量为 E_k, 即有本征方程 $H\phi_k = E_k\phi_k$. 取试探波函数 $\psi(\alpha)$, α 为变分参数 (若是多个变分参数, 则仍记为 α). 第 n 条能级的波函数应与 $\phi_k(k=1,2,\cdots,n-1)$ 正交, 不妨设 $\psi(\alpha)$ 以及各 $\phi_k(k=1,2,\cdots,n-1)$ 已归一化. 则可取

$$\phi(\alpha) = \psi(\alpha) - \sum_{k=1}^{n-1}\phi_k(\phi_k,\psi(\alpha))$$

$\phi(\alpha)$ 与所有 ϕ_k 正交. 在 $\phi(\alpha)$ 下能量期望值为

$$\overline{H}(\alpha) = \frac{(\phi(\alpha),H\phi(\alpha))}{(\phi(\alpha),\phi(\alpha))} = \frac{(\psi_a,H\psi_a) - \sum_{k=1}^{n-1}|(\phi_k,\psi(\alpha))|^2 E_k}{1 - \sum_{k=1}^{n-1}|(\phi_k,\psi(\alpha))|^2}$$

而第 n 条能级的上界归结为上面 $\overline{H}(\alpha)$ 对于参数 α 求极值.

附录 (定态问题一条定理[①]) 设体系的 Hamilton 量 H 有下限; 亦即对于体系任一个状态 $|\psi\rangle$, 能量期望值 $\dfrac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$ 永远大于一固定常数 c. H 的本征方程可写成 $H|a\rangle = E_a|a\rangle$, 它的本征值可按照从小到大顺序如下排列 $(a = 0, 1, 2, \cdots)$:

$$E_0 \leqslant E_1 \leqslant E_2 \leqslant \cdots \leqslant E_n \leqslant \cdots \tag{14.39}$$

则能量期望值 $\dfrac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$ 的极小值为

(i) E_0, 若 $|\psi\rangle$ 是任意态矢;

(ii) E_1, 若 $|\psi\rangle$ 是满足 $\langle 0|\psi\rangle = 0$ 的任意态矢;

(iii) E_n, 若 $|\psi\rangle$ 是满足 $\langle 0|\psi\rangle = \langle 1|\psi\rangle = \cdots = \langle n-1|\psi\rangle = 0$ 的任意态矢.

14.8 设氢原子的基态试探波函数取为

$$\psi(\lambda, r) = \mathrm{e}^{-\lambda(r/a)^2}, a = \hbar^2/(\mu e^2)$$

N 为归一化常数, λ 为参数. 求基态能量, 并与精确解比较.

解 按照 Ritz 变分法, 先计算在试探波函数 $\psi(\boldsymbol{x}) = \mathrm{e}^{-\lambda(r/a)^2}$ 下的能量期望值

$$\overline{H} = \frac{\iiint \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\psi^*(\boldsymbol{x})H\psi(\boldsymbol{x})}{\iiint \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\psi^*(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x})} \tag{14.40}$$

而波函数的模平方

$$\begin{aligned}\iiint \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\psi^*(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x}) &= \iiint \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\mathrm{e}^{-2\lambda\frac{r^2}{a^2}} = 4\pi\int_0^{+\infty}\mathrm{d}r r^2\mathrm{e}^{-(2\lambda/a^2)r^2} \\ &= 2\pi\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}r r^2\mathrm{e}^{-(2\lambda/a^2)r^2} = 2\pi\frac{\sqrt{\pi}}{2\left(2\lambda/a^2\right)^{3/2}} = \left(\frac{\pi}{2\lambda}\right)^{\frac{3}{2}}a^3\end{aligned} \tag{14.41}$$

氢原子 Hamilton 量

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 - \frac{e^2}{r} = T + V \tag{14.42}$$

其中 $T = -\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2$, $V = -\dfrac{e^2}{r}$. 上式代入式 (14.40) 计算, 得能量期望值为

$$\overline{H} = \frac{\int \mathrm{d}x\psi^*(x)H\psi(x)}{\int \mathrm{d}x\psi^*(x)\psi(x)} = \left(\frac{2\lambda}{\pi a^2}\right)^{\frac{3}{2}}\iiint \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\mathrm{e}^{-\lambda\frac{r^2}{a^2}}(T+V)\mathrm{e}^{-\lambda\frac{r^2}{a^2}} = \overline{T} + \overline{V} \tag{14.43}$$

下面分别计算上式中势能期望值 $\overline{V}$ 和动能期望值 $\overline{T}$.

$$\begin{aligned}\overline{V} &= \left(\frac{2\lambda}{\pi a^2}\right)^{\frac{3}{2}}\iiint \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\mathrm{e}^{-\frac{\lambda r^2}{a^2}}\left(-\frac{e^2}{r}\right)\mathrm{e}^{-\frac{\lambda r^2}{a^2}} = -\left(\frac{2\lambda}{\pi a^2}\right)^{\frac{3}{2}} \times 4\pi e^2 \times \int_0^{+\infty}\mathrm{d}r r\mathrm{e}^{-(2\lambda/a^2)r^2} \\ &= -\left(\frac{2\lambda}{\pi a^2}\right)^{\frac{3}{2}} \times 4\pi e^2 \times \frac{1}{2}\frac{a^2}{2\lambda} = -\sqrt{\frac{8\lambda}{\pi}}\frac{e^2}{a}\end{aligned} \tag{14.44}$$

---

① 出处以及定理证明可见李政道, 粒子物理和场论, 上海科学技术出版社, 2006 年, p.12~13; 或者粒子物理和场论简引 (上册), 科学出版社, 1984 年, p.11~12.

对于 $\overline{T}$, 由于 ① $T=\dfrac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}=\dfrac{1}{2\mu}\left(p_r^2+\dfrac{1}{r^2}\boldsymbol{L}^2\right)$ 以及 $p_r^2=-\hbar^2\left(\dfrac{\partial}{\partial r}+\dfrac{1}{r}\right)^2=-\hbar^2\dfrac{1}{r}\dfrac{\partial^2}{\partial r^2}r$ 得

$$\begin{aligned}
\overline{T}&=\left(\frac{2\lambda}{\pi a^2}\right)^{\frac{3}{2}}\iiint \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\mathrm{e}^{-\lambda\frac{r^2}{a^2}}\frac{1}{2\mu}\left(p_r^2+\frac{1}{r^2}\boldsymbol{L}^2\right)\mathrm{e}^{-\lambda\frac{r^2}{a^2}}\\
&=\frac{1}{2\mu}\left(\frac{2\lambda}{\pi a^2}\right)^{\frac{3}{2}}\iiint \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\mathrm{e}^{-\frac{\lambda r^2}{a^2}}p_r^2\mathrm{e}^{-\frac{\lambda r^2}{a^2}}=\left(\frac{2\lambda}{\pi a^2}\right)^{\frac{3}{2}}\iiint \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\mathrm{e}^{-\frac{\lambda r^2}{a^2}}\left(-\hbar^2\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r\right)\mathrm{e}^{-\frac{\lambda r^2}{a^2}}\\
&=-\frac{1}{2\mu}\left(\frac{2\lambda}{\pi a^2}\right)^{\frac{3}{2}}\times 4\pi\hbar^2\times\int_0^{+\infty}\mathrm{d}r r\mathrm{e}^{-(\lambda/a^2)r^2}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r\mathrm{e}^{-(\lambda/a^2)r^2}\\
&=\frac{1}{2\mu}\left(\frac{2\lambda}{\pi a^2}\right)^{\frac{3}{2}}\times 4\pi\hbar^2\times\int_0^{+\infty}\mathrm{d}r\left[\frac{\partial}{\partial r}r\mathrm{e}^{-(\lambda/a^2)r^2}\right]^2\\
&=\frac{1}{2\mu}\left(\frac{2\lambda}{\pi a^2}\right)^{\frac{3}{2}}\times 2\pi\hbar^2\times\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}r\left[1-\frac{4\lambda}{a^2}r^2+\frac{4\lambda^2}{a^4}r^4\right]\mathrm{e}^{-(2\lambda/a^2)r^2}
\end{aligned}$$

上面倒数第二个等号作了分部积分. 从上面结果再利用积分公式 (A.1,A.2) 与式 (A.3), 直接写出

$$\begin{aligned}
\overline{T}&=\frac{1}{2\mu}\left(\frac{2\lambda}{\pi a^2}\right)^{\frac{3}{2}}\times 2\pi\hbar^2\left[\frac{\sqrt{\pi}}{(2\lambda/a^2)^{\frac{1}{2}}}-\frac{4\lambda}{a^2}\frac{\sqrt{\pi}}{2(2\lambda/a^2)^{\frac{3}{2}}}+\frac{4\lambda^2}{a^4}\frac{3\sqrt{\pi}}{4(2\lambda/a^2)^{\frac{5}{2}}}\right]\\
&=\frac{3\lambda\hbar^2}{2\mu a^2}=\frac{3\lambda}{2}\frac{e^2}{a}
\end{aligned}\tag{14.45}$$

由式 (14.43)、式 (14.44) 与式 (14.45) 得

$$\overline{H}(\lambda)=\left(\frac{3\lambda}{2}-\sqrt{\frac{8\lambda}{\pi}}\right)\frac{e^2}{a}\tag{14.46}$$

对 $\overline{H}$ 求极值

$$0=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\overline{H}=\left(\frac{3}{2}-\sqrt{\frac{2}{\lambda\pi}}\right)\frac{e^2}{a}\tag{14.47}$$

解得 $\lambda=\dfrac{8}{9\pi}$, 代入式 (14.46) 得基态能量为

$$E_0=-\frac{8}{3\pi}\frac{e^2}{2a}\approx 0.85\left(-\frac{e^2}{2a}\right)$$

它与严格解 $-\dfrac{e^2}{2a}$ 的偏离是由于基态试探波函数未恰当选取所致. 若取基态试探波函数为 $\mathrm{e}^{-\lambda r/a}$, 则所得结果与严格解完全相同.

14.9 . 处于基态的氢原子, 受到沿 z 轴方向的均匀电场 $\mathcal{E}$ 的作用, 试用变分法计算其极化率. 试探波函数取为 $(1+\lambda z)\psi_{100}$, λ 为变分参数. 设电场 $\mathcal{E}$ 较弱, 计算时略去 $\mathcal{E}$ 的高次项.

参阅 D. Rapp, Quantum Mechanics (1971), p.291.

解 加上电场以前, 体系的 Hamilton 量为

$$H_0=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2-\frac{e^2}{r}=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}-\frac{e^2}{r}=T+V\tag{14.48}$$

① 见题 4.17(d),(e).

氢原子的基态能级和基态波函数分别为

$$E_0 = -\frac{e^2}{2a_0} = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \tag{14.49}$$

$$\psi_0 = \psi_{100} = (\pi a_0^3)^{-1/2} \mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}} \tag{14.50}$$

其中 $a_0 = \hbar^2/\mu e^2$ 为 Bohr 半径. 记 ψ_0 下力学量的期望值为 $\langle\ \rangle_0$, 考虑到 ψ_0 的对称性, 并按照 Virial 定理在 ψ_0 下

$$\langle V\rangle_0 = \left\langle -\frac{e^2}{r}\right\rangle_0 = 2E_0, \quad \langle T\rangle_0 = \left\langle \frac{p^2}{2\mu}\right\rangle_0 = -E_0, \quad \langle z\rangle_0 = 0 \tag{14.51}$$

加了电场以后, 体系的 Hamilton 量为

$$H = H_0 + H' = H_0 + e\mathcal{E}z = T + V + H' \tag{14.52}$$

按题意, 试探波函数取为 $(1+\lambda z)\psi_{100}$, λ 为变分参数. 将该试探波函数归一化, 令

$$\psi(\lambda) = N(1+\lambda z)\psi_{100} \tag{14.53}$$

其中 N 为正实数, 要求 $\int \psi(\lambda)^* \psi(\lambda) \mathrm{d}^3\boldsymbol{x} = 1$, 也就有

$$\begin{aligned} N^{-2} &= \int \psi_{100} \left(1+\lambda z\right)^2 \psi_{100} \mathrm{d}^3\boldsymbol{x} = \int \psi_{100} \left(1+2\lambda z+\lambda^2 z^2\right) \psi_{100} \mathrm{d}^3\boldsymbol{x} \\ &= 1 + 2\lambda \langle z\rangle_0 + \lambda^2 \left\langle z^2\right\rangle_0 = 1 + \frac{\lambda^2}{3}\left\langle r^2\right\rangle_0 = 1+\lambda^2 a_0^2 \end{aligned}$$

上式中用了 $\left\langle r^2\right\rangle_0 = 3a_0^2$, 可见题 (6.5) 式 (6.84) 或者题 6.12 式 (6.117) 等. 这样

$$N^2 = \frac{1}{1+\lambda^2 a_0^2} \tag{14.54}$$

按式 (14.52), 在 $\psi(\lambda)$ 下 Hamilton 量期望值 $\langle H\rangle = \langle T\rangle + \langle V\rangle + \langle H'\rangle$, 根据式 (14.50)

$$\nabla\psi_0 = -\frac{1}{a_0}\frac{\boldsymbol{r}}{r}\psi_0 = -\frac{1}{a_0}\boldsymbol{n}_r\psi_0 \tag{14.55}$$

并利用 $\boldsymbol{p}$ 的 Hermite 性, 可得动能期望值为

$$\begin{aligned} \langle T\rangle &= \frac{1}{2\mu}N^2 \int \psi_0 \left(1+\lambda z\right) \boldsymbol{p}^2 \left(1+\lambda z\right) \psi_0 \mathrm{d}^3\boldsymbol{x} = \frac{1}{2\mu}N^2 \int \left|\boldsymbol{p}\left(1+\lambda z\right)\psi_0\right|^2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{x} \\ &= \frac{\hbar^2}{2\mu}N^2 \int \left|\nabla\left(1+\lambda z\right)\psi_0\right|^2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{x} = \frac{\hbar^2}{2\mu}N^2 \int \left|\lambda\boldsymbol{e}_z - \left(1+\lambda z\right)\frac{1}{a_0}\boldsymbol{n}_r\psi_0\right|^2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{x} \\ &= \frac{\hbar^2}{2\mu a_0^2}N^2 \int \left|\lambda a_0\boldsymbol{e}_z - \left(1+\lambda z\right)\boldsymbol{n}_r\right|^2 \psi_0^2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{x} \\ &= \frac{\hbar^2}{2\mu a_0^2}N^2 \int \left[\lambda^2 a_0^2\psi_0^2 + \left(1+\lambda z\right)^2\psi_0^2 - 2\lambda a_0\left(1+\lambda z\right)\frac{z}{r}\psi_0^2\right] \mathrm{d}^3\boldsymbol{x} \\ &= \frac{\hbar^2}{2\mu a_0^2}\left[N^2\lambda^2 a_0^2 + 1 + 0 - \frac{2}{3}\lambda^2 a_0 N^2 \int r\psi_0^2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\right] \end{aligned}$$

上面利用了波函数 ψ_0 的球对称性, 直接计算或者利用题 6.12 式 (6.116) 得 $\langle r\rangle_0 = 3a_0/2$. 这样

$$\langle T\rangle = \frac{\hbar^2}{2\mu a_0^2}\left[N^2\lambda^2 a_0^2 + 1 - N^2\lambda^2 a_0^2\right] = \frac{\hbar^2}{2\mu a_0^2} = -E_0 \tag{14.56}$$

势能期望值为

$$\begin{aligned}\langle V\rangle &= N^2\int\psi_0\left(1+\lambda z\right)\frac{-e^2}{r}\left(1+\lambda z\right)\psi_0\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\\ &= N^2\int\psi_0\left(\frac{-e^2}{r}-2\lambda e^2\frac{z}{r}+\frac{-e^2}{r}\lambda^2z^2\right)\psi_0\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\\ &= N^2\left\langle V\right\rangle_0+0-\frac{\lambda^2e^2}{3}\int\psi_0r\psi_0\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}=2N^2E_0-\frac{\lambda^2e^2}{3}\left\langle r\right\rangle_0\end{aligned}$$

再利用 $\langle r\rangle_0=3a_0/2$, 并代入 N^2 得

$$\langle V\rangle=\frac{2}{1+\lambda^2a_0^2}E_0-\frac{\lambda^2a_0^2e^2}{2a_0}=\frac{2}{1+\lambda^2a_0^2}E_0+\lambda^2a_0^2E_0 \tag{14.57}$$

现计算微扰 H' 的期望值, 利用波函数 ψ_0 的球对称性得

$$\begin{aligned}\langle H'\rangle &= N^2\int\psi_0\left(1+\lambda z\right)\left(e\mathcal{E}z\right)\left(1+\lambda z\right)\psi_0\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\\ &= N^2\int\psi_0^2\left(e\mathcal{E}z+\lambda^2e\mathcal{E}z^3+2\lambda e\mathcal{E}z^2\right)\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}=N^2\int2\lambda e\mathcal{E}z^2\psi_0^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\\ &= \frac{2\lambda e\mathcal{E}}{3}N^2\int r^2\psi_0^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}=\frac{2\lambda e\mathcal{E}}{3}N^2\left\langle r^2\right\rangle_0\end{aligned}$$

因而

$$\langle H'\rangle=2\lambda e\mathcal{E}N^2a_0^2=\frac{2\lambda}{1+\lambda^2a_0^2}e\mathcal{E}a_0^2 \tag{14.58}$$

根据式 (14.56)~ 式 (14.58) 可得

$$\langle H\rangle=\langle T\rangle+\langle V\rangle+\langle H'\rangle=-E_0+\frac{2}{1+\lambda^2a_0^2}E_0+\lambda^2a_0^2E_0+\frac{2\lambda}{1+\lambda^2a_0^2}e\mathcal{E}a_0^2$$

上式保留到 λ^2(相应于电场 $\mathcal{E}$ 较弱的情况), 得

$$\langle H\rangle=\left(1-\lambda^2a_0^2\right)E_0+2\lambda e\mathcal{E}a_0^2 \tag{14.59}$$

按 Ritz 变分, 将 $\langle H\rangle$ 对参数 λ 求极值

$$0=\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial\lambda}=-2\lambda a_0^2E_0+2e\mathcal{E}a_0^2$$

给出

$$\lambda=\frac{e\mathcal{E}}{E_0}$$

代入式 (14.53)、式 (14.59), 略去 $\mathcal{E}/\lambda$ 的高次项, 即得加弱电场以后氢原子的基态能级和波函数为

$$E=-\frac{e^2}{2a_0}-2\mathcal{E}^2a_0^3 \tag{14.60}$$

$$\psi=N\left(1-\frac{2a_0}{e^2}e\mathcal{E}z\right)\psi_0 \tag{14.61}$$

从式 (14.61) 看出加弱电场以后基态波函数不再是球对称的. 略去 $\mathcal{E}/\lambda$ 的高次项, 电偶极矩平均值为

$$\langle D_z\rangle=\langle\psi|\left(-ez\right)|\psi\rangle=4\mathcal{E}a_0\left\langle z^2\right\rangle_0=4\mathcal{E}a_0^3 \tag{14.62}$$

而极化率[①]为

$$\kappa=\frac{\langle D_z\rangle}{E}=-\frac{\partial^2 E}{\partial\mathcal{E}^2}=4a_0^3=0.59\times10^{-24}\mathrm{cm}^3 \tag{14.63}$$

说明 本题的试探波函数可写为 $\psi=N(1+\lambda' H')\psi_0$, 故可利用题 14.6 的结果求解, 见题 14.17.

14.10 粒子在一维势场 $V(x)$ 中运动, $V(x)<0$. 当 $x\to\pm\infty$ 时, $V(x)\to0$. 用变分法证明, 至少存在一个束缚态 ($E<0$).

提示 建议取试探波函数为 $\psi(\lambda,x)=\dfrac{\sqrt{\lambda}}{\pi^{1/4}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\lambda^2x^2}$ (已归一化), $\lambda>0$.

证明 粒子运动的 Hamilton 量

$$H=T+V=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x) \tag{14.64}$$

按题给提示, 取归一化试探波函数为

$$\psi(\lambda,x)=\frac{\sqrt{\lambda}}{\pi^{1/4}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\lambda^2x^2} \tag{14.65}$$

$\lambda>0$ 为变分参数.

在试探波函数 (14.65) 下, 动能和势能的期望值分别为

$$\langle T\rangle=-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi\mathrm{d}x=\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\left|\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right|^2\mathrm{d}x=\frac{\hbar^2\lambda^5}{2m\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}x^2\mathrm{e}^{-\lambda^2x^2}\mathrm{d}x=\frac{\hbar\lambda^2}{4m} \tag{14.66}$$

$$\langle V\rangle=\frac{\lambda}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\lambda^2x^2}V(x)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\lambda^2x^2}\mathrm{d}x=\frac{\lambda}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}V(x)\mathrm{e}^{-\lambda^2x^2}\mathrm{d}x=\frac{\lambda}{\sqrt{\pi}}U(\lambda) \tag{14.67}$$

其中

$$U(\lambda)=\int_{-\infty}^{\infty}V(x)\mathrm{e}^{-\lambda^2x^2}\mathrm{d}x$$

在 $\psi(\lambda,x)$ 下能量期望值为

$$E(\lambda)=\langle T+V\rangle=\frac{\hbar\lambda^2}{4m}+\frac{\lambda}{\sqrt{\pi}}U(\lambda) \tag{14.68}$$

因 $\lambda>0$ 为变分参数, 由于当 $\lambda\to0$ 时

$$U(\lambda)\to U(0)=\int_{-\infty}^{\infty}V(x)\mathrm{d}x<0$$

可知当 λ 足够小时, 式 (14.68) 中第二项占主导的. 可以取某个小的 λ^*, 使得

$$E(\lambda^*)\to\frac{1}{\sqrt{\pi}}\lambda U(0)<0$$

由此知粒子必存在某个能量本征态 $E_0<E(\lambda^*)<0$, 对于该能量本征态, 粒子在 $|x|\to\infty$ 时, 波函数趋于零, 即满足束缚态条件.

这就证明了粒子存在束缚能级.

---

① 采用二阶微扰可知基态氢原子极化系数满足 $4a_0^3<\kappa<\dfrac{16}{3}a_0^3$, 见张鹏飞, 阮图南, 朱栋培, 吴强, 量子力学学习指导 [M], 合肥: 中国科学技术大学出版社,2008: p. 225~227. 教材中二阶微扰计算结果是 $\kappa=\dfrac{9}{2}a_0^3$, 见曾谨言. 量子力学: 卷 I[M]. 4 版. 北京: 科学出版社, 2007: p. 361~362.

14.11 粒子在无限深方势阱 $(-a<x<+a)$ 中运动, 试选用多项式形式波函数为试探波函数, 求基态能量, 并和精确解比较.

解 粒子在题给无限深方势阱中运动其波函数所需满足的边界条件为

$$\psi(x)=0,\ |x|\geqslant a \tag{14.69}$$

粒子局限在 $(-a<x<+a)$ 区间运动. 教材给出精确的基态波函数和能级为

$$\psi_1(x)=\frac{1}{\sqrt{a}}\cos\frac{\pi x}{2a},\quad -a<x<a \tag{14.70}$$

$$E_1=\frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2} \tag{14.71}$$

现按题设要求, 选用多项式形式波函数为试探波函数, 求解基态. 因势阱对称, 束缚定态波函数必有确定宇称, 基态必为偶宇称, 势阱 $(-a<x<+a)$ 内波函数可表示为

$$\psi=c_0+c_2\left(\frac{x}{a}\right)^2+c_4\left(\frac{x}{a}\right)^4+\cdots \tag{14.72}$$

如只取前二项, 根据边界条件 (14.69), $\psi(-a)=\psi(a)=0$, 这给出 $c_2=-c_0$. 归一化后, 波函数写为

$$\psi(x)=c_0\left(1-\frac{x^2}{a^2}\right)=\sqrt{\frac{15}{16a}}(1-\frac{x^2}{a^2}) \tag{14.73}$$

可见 ψ 已经完全被限定, 不能再引入变分参数求极值. 在此波函数 ψ 下, 粒子能量期望值为

$$E=-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-a}^{a}\psi\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}\mathrm{d}x=\frac{5}{4}\frac{\hbar^2}{ma^2} \tag{14.74}$$

和精确基态能级的比值为

$$E/E_1=10/\pi^2=1.0132 \tag{14.75}$$

式 (14.73) 和式 (14.70) 所给精确波函数的偏离度为

$$\varepsilon=1-|\langle\psi_1\ |\psi\rangle|^2=1-\frac{960}{\pi^6}=1.445\times10^{-3} \tag{14.76}$$

为了对结果加以改进, 取式 (14.72) 中前三项, 考虑到边界条件 (14.69), 要求 $c_4=-(c_0+c_2)$. 因为式 (14.73) 已经与精确较接近, 试探波函数可以表成

$$\psi(\lambda,x)=N\left[1-\lambda\left(\frac{x}{a}\right)^2-(1-\lambda)\left(\frac{x}{a}\right)^4\right] \tag{14.77}$$

其中 N 为归一化常数, λ 为变分参数. 利用归一化条件

$$\langle\psi\ |\psi\rangle=\int_{-a}^{a}|\psi|^2\,\mathrm{d}x=1$$

容易求得

$$N^2a=\frac{315}{16\left(\lambda^2-8\lambda+28\right)} \tag{14.78}$$

在 $\psi(\lambda,x)$ 下, 粒子能量期望值为

$$
\begin{aligned}
E&=-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-a}^{a}\psi^*(\lambda,x)\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(\lambda,x)\mathrm{d}x=\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-a}^{a}\left|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi(\lambda,x)\right|^2\mathrm{d}x\\
&=\frac{\hbar^2}{2m}N^2\int_{-a}^{a}\left[2\lambda\frac{x}{a^2}+4(1-\lambda)\frac{x^3}{a^4}\right]^2\mathrm{d}x=\frac{2\hbar^2N^2a}{ma^2}\int_{-1}^{1}\left[\lambda y+2(1-\lambda)y^3\right]^2\mathrm{d}y\\
&=\frac{2\hbar^2N^2a}{ma^2}\int_{-1}^{1}\left[\lambda^2y^2+4\lambda(1-\lambda)y^4-4\lambda(1-\lambda)y^6\right]\mathrm{d}y\\
&=\frac{4\hbar^2N^2a}{ma^2}\left[\frac{1}{3}\lambda^2+\frac{4}{5}\lambda(1-\lambda)-\frac{4}{7}\lambda(1-\lambda)y^6\right]
\end{aligned}
$$

再将式 (14.78) 代入即得

$$
E(\lambda)=\frac{3}{4}\frac{11\lambda^2-36\lambda+60}{\lambda^2-8\lambda+28}\frac{\hbar^2}{ma^2} \tag{14.79}
$$

下面求 $E(\lambda)$ 的极值, 由上这可归结为下面关于 λ 的函数

$$
f(\lambda)=\frac{11\lambda^2-36\lambda+60}{\lambda^2-8\lambda+28}=11+\frac{52\lambda-248}{\lambda^2-8\lambda+28}
$$

的极值问题. 极值条件 $f'(\lambda)=0$ 可化为

$$
13\lambda^2-124\lambda+132=0
$$

解得

$$
\lambda_1=\frac{62-\sqrt{2128}}{13},\quad \lambda_2=\frac{62+\sqrt{2128}}{13} \tag{14.80}
$$

其中 $\lambda_1\approx 1$, $\lambda_2\approx 8$. 考虑到式 (14.73) 已与精确较接近, 可以预期 $E(\lambda)$ 的极小值在 λ_1 处取到, 将 λ_1 代入式 (14.79) 求得

$$
E(\lambda_1)=1.233719\hbar^2/(ma^2)=1.0000015E_1 \tag{14.81}
$$

若将 λ_2 代入式 (14.79) 结果为 $E(\lambda_2)\approx 13\hbar^2/(ma^2)\approx 10E_1$, 已在第二激发态能级附近.

$E(\lambda_1)$ 与基态能级 E_1 相比, 误差只有 10^{-6}. 还可以计算 $\psi(\lambda_1,x)$ 和基态精确解的偏离度为

$$
\varepsilon=1-|\langle\psi_1\ |\psi\rangle|^2=6.8\times10^{-7} \tag{14.82}
$$

由不等式 (参看题 14.4 的说明)

$$
E(\lambda_1)-E_1>(E_3-E_1)\varepsilon
$$

亦可估算 $\varepsilon<1.8\times10^{-6}$, 和式 (14.82) 一致.

14.12 同上题, 求第一激发态的能量. 并与精确解比较.

解 粒子在题给无限深方势阱中运动其波函数所需满足的边界条件为

$$
\psi(x)=0,\ |x|\geqslant a \tag{14.83}
$$

粒子局限在 $(-a<x<+a)$ 区间运动. 第一激发态精确波函数和能级为

$$
\psi_2(x)=\frac{1}{\sqrt{a}}\sin\frac{\pi x}{a},\quad -a<x<a \tag{14.84}
$$

$$
E_2=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \tag{14.85}
$$

现按题设要求, 选用多项式形式波函数为试探波函数, 求解第一激发态. 因势阱对称, 束缚定态波函数必有确定宇称, 第一激发态宇称为奇, 故取势阱 $(-a<x<+a)$ 内波函数为

$$\psi(x)=c_1\left(\frac{x}{a}\right)+c_3\left(\frac{x}{a}\right)^3+c_5\left(\frac{x}{a}\right)^5$$

考虑到边界条件 (14.83), 得 $c_5=-(c_1+c_3)$, 因此可表示成

$$\psi(\lambda,x)=N\left[\left(\frac{x}{a}\right)-\lambda\left(\frac{x}{a}\right)^3-(1-\lambda)\left(\frac{x}{a}\right)^5\right] \tag{14.86}$$

其中 N 为归一化常数, λ 为变分参数. 从宇称考虑, 已自动保证与基态正交. 利用归一化条件

$$\langle\psi\,|\psi\rangle=\int_{-a}^{a}|\psi|^2\,\mathrm{d}x=1$$

容易求得

$$N^2a=\frac{3465}{16(5\lambda^2-32\lambda+60)} \tag{14.87}$$

在归一化波函数 $\psi(\lambda,x)$ 下, 粒子能量期望值为

$$E(\lambda)=\frac{1}{4}\frac{253\lambda^2-1100\lambda+1540}{5\lambda^2-32\lambda+60}\frac{\hbar^2}{ma^2} \tag{14.88}$$

求 $E(\lambda)$ 的极小值, 得极值点位置有

$$\lambda_1=\frac{3740-\sqrt{3136320}}{1298},\quad \lambda_2=\frac{3740+\sqrt{3136320}}{1298} \tag{14.89}$$

应取 λ_1, 代入式 (14.88), 即得

$$E(\lambda_1)=4.937694\frac{\hbar^2}{ma^2}=1.00059E_2 \tag{14.90}$$

$E(\lambda_1)$ 与第一激发态能级 E_2 相比, 误差只有 10^{-4}. $\psi(\lambda_1,x)$ 和第一激发态精确解的偏离度为

$$\varepsilon=1-|\langle\psi_1\,|\psi\rangle|^2=0.0027 \tag{14.91}$$

由不等式 (参看题 14.4 的说明)

$$E(\lambda_1)-E_2>(E_4-E_1)\varepsilon$$

亦可估算 $\varepsilon<0.019$. 以上表明, 采用多项式形式试探波函数计算第一激发态能级与波函数, 精度仍很高, 但稍逊于基态的计算结果.

14.13 转动惯量为 I, 具有电偶极矩 D 的空间转子, 自由转动时, Hamilton 量表示为 $H_0=\boldsymbol{L}^2/2I$. 设转子置于均匀电场 $\boldsymbol{\mathcal{E}}$(沿 z 轴方向) 中, 则受到作用 $H'=-D\mathcal{E}\cos\theta$, θ 是电偶极矩 $\boldsymbol{D}$ 与电场方向的夹角. (1) 写出 H_0 的本征值与本征函数. (2) 视 H' 为微扰, 求基态能级 (到二级微扰修正). (3) 取试探波函数为 $\psi=N(1+\lambda H')\psi_0$, ψ_0 为 H_0 基态波函数, λ 为变分参数. 求基态能量, 并与微扰论计算结果比较.

解 (1)题给空间转子自由转动 Hamilton 量

$$H_0=\frac{\boldsymbol{L}^2}{2I} \tag{14.92}$$

因而本征态也就是 $\boldsymbol{L}^2$ 的本征态, 记为 $|lm\rangle$, 本征函数即球谐函数 $\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$. H_0 本征值为

$$E_l = l(l+1)\frac{\hbar^2}{2I}, \quad l = 0,1,2,\cdots \tag{14.93}$$

给定 l 后, m 可取 $0,\pm1,\cdots,\pm l$, 故能级 E_l 的简并度为 $(2l+1)$. 基态 $E_0 = 0$ 非简并, 波函数为 $\psi_0 = \mathrm{Y}_{00} = 1/\sqrt{4\pi}$.

(2) 转子置于均匀电场 $\boldsymbol{\mathcal{E}}$(沿 z 轴方向) 中, Hamilton 量

$$H = H_0 + H' = \frac{\boldsymbol{L}^2}{2I} - D\mathcal{E}\cos\theta \tag{14.94}$$

其中微扰 $H' = -D\mathcal{E}\cos\theta$. 按照非简并态微扰论, 基态能级的微扰论一级修正和二级修正为

$$E_0^{(1)} = \langle H'\rangle_0 = -D\mathcal{E}\langle\cos\theta\rangle_0 = 0 \tag{14.95}$$

$$E_0^{(2)} = \sum_{l,m}{}' \frac{|\langle lm|H'|00\rangle|^2}{E_0 - E_l} \tag{14.96}$$

其中 $\langle lm|H'|00\rangle = -D\mathcal{E}\int \mathrm{d}\Omega \mathrm{Y}_{lm}^* \cos\theta \mathrm{Y}_{00}$. 由于

$$\cos\theta\mathrm{Y}_{00} = \frac{\cos\theta}{\sqrt{4\pi}} = \frac{1}{\sqrt{3}}\mathrm{Y}_{10}$$

根据球谐函数的正交归一关系, 可知式 (14.96) 中有贡献的只有一项, 相应于 $(l,m) = (1,0)$, 因此

$$E_0^{(2)} = -\frac{|D\mathcal{E}\langle 10|\cos\theta|00\rangle|^2}{E_1} = -\frac{1}{3}\frac{\mathcal{E}^2D^2I}{\hbar^2} \tag{14.97}$$

因而若准确到二级微扰, 基态能级为

$$E = E_0 + E_0^{(1)} + E_0^{(2)} = -\frac{1}{3}\frac{\mathcal{E}^2D^2I}{\hbar^2} \tag{14.98}$$

(3) 用变分法求基态能级近似值, 按题设取试探波函数为

$$\psi = N(1+\lambda H')\psi_0 \tag{14.99}$$

ψ_0 为 H_0 基态波函数, λ 为变分参数, N 为归一化常数. 可利用题 14.6 式 (14.38) 计算. 按照式 (14.95) 知 $\langle H'\rangle_0 = 0$, 其余有关量为

$$\langle H'^2\rangle_0 = \mathcal{E}^2D^2\langle 00|\cos^2\theta|00\rangle = \mathcal{E}^2D^2\int \mathrm{d}\Omega\frac{1}{4\pi}\cos^2\theta = \frac{1}{3}\mathcal{E}^2D^2$$

$$\langle H'H_0H'\rangle_0 = \mathcal{E}^2D^2\langle 00|\cos\theta\cdot H_0\cdot\cos\theta|00\rangle = \frac{1}{3}\mathcal{E}^2D^2\langle 10|H_0|10\rangle = \frac{1}{3}\mathcal{E}^2D^2E_1 = \frac{1}{3}\mathcal{E}^2D^2\frac{\hbar^2}{I}$$

这样由式 (14.38) 得

$$E = E_0 - \frac{1}{3}\frac{\mathcal{E}^2D^2I}{\hbar^2} = -\frac{1}{3}\frac{\mathcal{E}^2D^2I}{\hbar^2} \tag{14.100}$$

和微扰论结果式 (14.98) 相同.

讨论 按照微扰论一级近似, 基态波函数为

$$\psi = \psi_0 + \sum_{l,m}{}'\frac{\langle lm|H'|00\rangle}{E_0 - E_1}\mathrm{Y}_{lm} = \mathrm{Y}_{00} - \frac{\langle 10|H'|00\rangle}{E_1}\mathrm{Y}_{10} = \mathrm{Y}_{00} + \frac{1}{\sqrt{3}}\frac{ID\mathcal{E}}{\hbar^2}\mathrm{Y}_{10} \tag{14.101}$$

可见本题所取基态试探波函数的形式与微扰论的一级近似波函数相同. 按照定态微扰论, 波函数一级近似给出能量二级修正. 在采用与微扰论的一级近似波函数相同形式的试探波函数用变分法计算, 保留二级项, 所得结果应与微扰法准确到二级修正的能量结果相同.

我们还可以将取变分参数最佳值的试探波函数与微扰论准确到一级近似的波函数作一比较. 利用题 14.6 式 (14.36) 得变分参数最佳值为

$$\lambda=\frac{\langle H'^2\rangle_0-(\langle H'\rangle_0)^2}{E_0\langle H'^2\rangle_0-\langle H'H_0H'\rangle_0}=-\frac{I}{\hbar^2} \tag{14.102}$$

因而由变分法得到基态波函数为

$$\psi=N\left(1+\frac{ID}{\hbar^2}\mathcal{E}\cos\theta\right)\mathrm{Y}_{00}=N\left(\mathrm{Y}_{00}+\frac{1}{\sqrt{3}}\frac{ID\mathcal{E}}{\hbar^2}\mathrm{Y}_{10}\right) \tag{14.103}$$

N 为归一化常数, 可见上式也与微扰法准确到一级修正的波函数 (14.101) 相同.

对于本问题, 变分法与微扰法计算所得到的能量本征值和波函数完全一致.

14.14 质量为 μ 的粒子在具有空间反射不变性的势场 $V(x)=F|x|(F>0)$ 中运动. 分别取下列类型试探波函数求基态能量. (1)$\psi=\sqrt{\lambda}\exp(-\lambda|x|)$; (2)$\psi=N\exp(-\alpha^2x^2/2)$; (3) $\psi=\begin{cases}N\left(1-\dfrac{|x|}{a}\right), & |x|<a\\ 0, & |x|>a\end{cases}$. N 为归一化常数, a 为变分参数, 并与精确解比较, 给予物理上说明.

解 粒子在具有空间反射不变性的一维势场中运动, 束缚定态必具有确定宇称, 而基态必为偶宇称. 题给三种试探波函数显然都符合这个条件.

(1) 题给试探波函数记为

$$\psi(\lambda,x)=\sqrt{\lambda}\mathrm{e}^{-\lambda|x|} \tag{14.104}$$

已经归一化. 这样该态下动能与势能期望值分别为

$$\langle T\rangle=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi\mathrm{d}x=\frac{\hbar^2}{2\mu}\int_{-\infty}^{\infty}\left|\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right|^2\mathrm{d}x=\frac{\lambda^3\hbar^2}{\mu}\int_0^{\infty}\mathrm{e}^{-2\lambda x}\mathrm{d}x=\frac{\hbar^2\lambda^2}{2\mu}$$

$$\langle V\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}V(x)\left|\psi\right|^2\mathrm{d}x=F\int_{-\infty}^{\infty}|x|\left|\psi\right|^2\mathrm{d}x=2F\lambda\int_0^{\infty}x\mathrm{e}^{-2\lambda x}\mathrm{d}x=\frac{F}{2\lambda}$$

故能量期望值为

$$E(\lambda)=\langle T+V\rangle=\frac{\hbar^2\lambda^2}{2\mu}+\frac{F}{2\lambda} \tag{14.105}$$

求上式的极值, 极值条件 $\dfrac{\partial E(\lambda)}{\partial\lambda}=0$ 给出

$$\frac{\hbar^2\lambda}{\mu}-\frac{F}{2\lambda^2}=0$$

由此得极值点 $\lambda=(\mu F/2\hbar^2)^{1/3}$, 代入式 (14.105) 即得基态能级的上限为

$$E=\frac{3}{2}\left(\frac{1}{2}\right)^{2/3}\left(\frac{\hbar^2F^2}{\mu}\right)^{1/3}=0.94494\left(\frac{\hbar^2F^2}{\mu}\right)^{1/3} \tag{14.106}$$

(2) 将题给试探波函数归一化, 记为

$$\psi(\alpha,x)=N\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}=\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2} \tag{14.107}$$

该态下动能与势能期望值分别为

$$\begin{aligned}\langle T\rangle &= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi\mathrm{d}x = \frac{\hbar^2}{2\mu}\int_{-\infty}^{\infty}\left|\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right|^2\mathrm{d}x \\ &= \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\alpha^4x^2\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2}\mathrm{d}x = \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\alpha^5}{\sqrt{\pi}}\frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha^3} = \frac{\hbar^2\alpha^2}{4\mu} \\ \langle V\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty}V(x)\left|\psi\right|^2\mathrm{d}x = F\int_{-\infty}^{\infty}\left|x\right|\left|\psi\right|^2\mathrm{d}x \\ &= 2F\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\int_0^{\infty}x\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2}\mathrm{d}x = F\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\int_0^{\infty}\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2}\mathrm{d}x^2 = \frac{F}{\alpha\sqrt{\pi}}\end{aligned}$$

故能量期望值为

$$E(\alpha) = \langle T+V\rangle = \frac{\hbar^2\alpha^2}{4\mu} + \frac{F}{\alpha\sqrt{\pi}} \tag{14.108}$$

求上式的极值, 极值条件 $\dfrac{\partial E(\lambda)}{\partial\lambda} = 0$ 给出

$$\frac{\hbar^2\alpha}{2\mu} - \frac{F}{\alpha^2\sqrt{\pi}} = 0$$

由此得极值点 $\alpha = \left(2\mu F/\sqrt{\pi}\hbar^2\right)^{1/3}$, 代入式 (14.108) 即得即得基态能级的上限为

$$E = \frac{3}{2}\left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/3}\left(\frac{\hbar^2F^2}{\mu}\right)^{1/3} = 0.81289\left(\frac{\hbar^2F^2}{\mu}\right)^{1/3} \tag{14.109}$$

(3) 将题给归一化试探波函数记为

$$\psi(a,x) = \begin{cases} N\left(1-\dfrac{|x|}{a}\right), & |x|<a \\ 0, & |x|>a \end{cases} \tag{14.110}$$

根据归一化条件 $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(\lambda,x)\psi(\lambda,x)\mathrm{d}x = 1$, 可求得 $N^2 = \dfrac{3}{2a}$. 该态下动能与势能期望值分别为

$$\langle T\rangle = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi\mathrm{d}x = \frac{\hbar^2}{2\mu}\int_{-\infty}^{\infty}\left|\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right|^2\mathrm{d}x = 2\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{3}{2a}\int_0^a\frac{1}{a^2}\mathrm{d}x = \frac{3\hbar^2}{2\mu a^2}$$

$$\langle V\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}V(x)\left|\psi\right|^2\mathrm{d}x = F\int_{-\infty}^{\infty}\left|x\right|\left|\psi\right|^2\mathrm{d}x = F\frac{3}{2a}\int_{-a}^{a}x\left(1-\frac{|x|}{a}\right)\mathrm{d}x = 2F\frac{3}{2a}\int_0^a\left(1-\frac{x}{a}\right)\mathrm{d}x = \frac{Fa}{4}$$

故能量期望值为

$$E(a) = \langle T+V\rangle = \frac{3\hbar^2}{2\mu a^2} + \frac{Fa}{4} \tag{14.111}$$

求上式的极值, 极值条件 $\dfrac{\partial E(a)}{\partial\lambda} = 0$ 给出

$$-\frac{3\hbar^2}{\mu a^3} + \frac{F}{4} = 0$$

由此得极值点 $a = \left(12\hbar^2/\mu F\right)^{1/3}$, 代入式 (14.111) 即得即得基态能级的上限为

$$E = \frac{3}{8}(12)^{1/3}\left(\frac{\hbar^2F^2}{\mu}\right)^{1/3} = 0.85854\left(\frac{\hbar^2F^2}{\mu}\right)^{1/3} \tag{14.112}$$

基态能级的精确值在本题附录给出

$$E_0 = 0.80862\left(\frac{\hbar^2 F^2}{\mu}\right)^{1/3} \tag{14.113}$$

说明 三种变分法结果以 (2) 结果即式 (14.109) 为最好, 比式 (14.113) 的精确值高 0.5%; (3) 结果即式 (14.112) 比精确值式 (14.113) 高 6%; (1) 结果即式 (14.106) 最差, 比精确值高 17%. 主要原因是, 题给位势函数处处连续, 没有无限大的不连续点, 因而波函数及其导数应处处连续. 而且由于基态为偶宇称, $\psi'(0)=0$. 三种试探波函数中只有 (2) 满足这些条件, 在 $x\sim 0$ 处 (概率最大的区域) 的性质比较接近真实情况, 因此所得能量值更接近于真正的基态能级.

附录 基态能级精确解. 类似于教材 p.93~96 例子的讨论, 对于能量本征函数, 考虑与经典禁区 ($|x|>E/F$) 光滑连接, 在经典允许区 ($|x|\leqslant E/F$) 解的形式只能是

$$\psi(x) = z^{1/3}\left[\mathrm{J}_{1/3}(z)+\mathrm{J}_{-1/3}(z)\right] \tag{14.114}$$

其中

$$z=\frac{2}{3}|\xi|^{3/2},\quad \xi=\left(|x|-\frac{E}{F}\right)\left(2mF/\hbar^2\right)^{1/3}$$

经典允许区波函数正比于 Airy 函数, 而能级取决于 $x=0$ 处 ψ 的边界条件. 基态为偶宇称态, 其边界条件为

$$\left.\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right|_{x=0}=0,\quad \text{或}\left.\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}z}\right|_{x=0}=0 \tag{14.115}$$

利用 Bessel 函数的递推公式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left[z^{\nu}\mathrm{J}_{\nu}(z)\right]=z^{\nu}\mathrm{J}_{\nu-1}(z)$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left[z^{-\nu}\mathrm{J}_{\nu}(z)\right]=-z^{-\nu}\mathrm{J}_{\nu+1}(z)$$

可得

$$\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}z}=z^{1/3}\left[\mathrm{J}_{-2/3}(z)-\mathrm{J}_{2/3}(z)\right]$$

因此基态 $x=0(z\neq 0)$ 处边界条件 (14.115) 可以表示成

$$\mathrm{J}_{-2/3}(z_0)-\mathrm{J}_{2/3}(z_0)=0 \tag{14.116}$$

其中 z_0 的下标“0”表示在 $x=0$ 处取值, 即

$$z_0=\frac{2}{3}|\xi_0|^{3/2},\quad \xi_0=\xi(x)|_{x=0}=-\frac{E}{F}\left(2mF/\hbar^2\right)^{1/3}$$

由 Bessel 函数表, 或者采用数值计算, 可得式 (14.116) 的第一个根 (相当于基态) 为

$$z_0=0.68555,\quad |\xi_0|=1.0188$$

因此

$$E_0=1.0188\left(\frac{\hbar^2F^2}{2\mu}\right)^{1/3}=0.80862\left(\frac{\hbar^2F^2}{\mu}\right)^{1/3}$$

即为式 (14.113).

14.15 设在氘核中, 质子与中子的作用表示成 $V(r)=-A\mathrm{e}^{-r/a}$(A=32MeV, $a=2.2\times10^{-15}$m). 氘核内部的中子与质子的相对运动波函数试取为 $R(r)=N\mathrm{e}^{-\lambda r/2a}$, λ 为变分参数, N 为归一化常数. 试用变分法计算氘核的基态能量.

解 氘核的基态必为 s 态, 中子与质子的相对运动波函数为

$$\psi(\lambda,\boldsymbol{x})=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}N\mathrm{e}^{-\lambda r/2a}=N'\mathrm{e}^{-\lambda r/2a} \tag{14.117}$$

其中 N' 取为正实数, 为归一化常数. 利用式 (A.8)

$$1=\int\psi^*(\lambda,\boldsymbol{x})\psi(\lambda,\boldsymbol{x})\mathrm{d}\boldsymbol{x}=4\pi N'^2\int_0^\infty\mathrm{e}^{-\lambda r/a}r^2\mathrm{d}r=4\pi N'^2\frac{2a^3}{\lambda^3}$$

由此

$$N'^2=\frac{\lambda^3}{8\pi a^3},\quad N'=\left(\frac{\lambda^3}{8\pi a^3}\right)^{1/2} \tag{14.118}$$

体系的 Hamilton 量为

$$H=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2-A\mathrm{e}^{-r/a}=T+V \tag{14.119}$$

其中 $T=-\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2$, $V=-A\mathrm{e}^{-r/a}$, $\mu\approx\dfrac{1}{2}m_\mathrm{n}\approx\dfrac{1}{2}m_\mathrm{p}$ 为折合质量. 按照式 (14.117)、式 (14.118), 体系能量期望值

$$\overline{H}=\frac{\lambda^3}{8\pi a^3}\iiint\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\mathrm{e}^{-\lambda r/2a}\left(T+V\right)\mathrm{e}^{-\lambda r/2a}=\overline{T}+\overline{V} \tag{14.120}$$

下面分别计算 $\overline{T}$ 和 $\overline{V}$. 势能期望值为

$$\begin{aligned}\overline{V}&=\frac{\lambda^3}{8\pi a^3}\iiint\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\mathrm{e}^{-\lambda r/2a}\left(-A\mathrm{e}^{-r/a}\right)\mathrm{e}^{-\lambda r/2a}=-\frac{\lambda^3}{8\pi a^3}\times4\pi A\times\int_0^{+\infty}\mathrm{d}r r^2\mathrm{e}^{-\frac{\lambda+1}{a}r}\\&=-\frac{\lambda^3}{8\pi a^3}\times4\pi A\times\frac{2}{\left(\dfrac{\lambda+1}{a}\right)^3}=-\frac{\lambda^3}{(\lambda+1)^3}A\end{aligned} \tag{14.121}$$

与题 14.8 类似, 由于[①] $T=\dfrac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}=\dfrac{1}{2\mu}\left(p_r^2+\dfrac{1}{r^2}\boldsymbol{L}^2\right)$ 以及 $p_r^2=-\hbar^2\left(\dfrac{\partial}{\partial r}+\dfrac{1}{r}\right)^2=-\hbar^2\dfrac{1}{r}\dfrac{\partial^2}{\partial r^2}r$, 得动能期望值为

$$\begin{aligned}\overline{T}&=\frac{\lambda^3}{8\pi a^3}\iiint\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\mathrm{e}^{-\lambda r/2a}\frac{1}{2\mu}\left(p_r^2+\frac{1}{r^2}\boldsymbol{L}^2\right)\mathrm{e}^{-\lambda r/2a}\\&=\frac{\lambda^3}{8\pi a^3}\iiint\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\mathrm{e}^{-\lambda r/2a}p_r^2\mathrm{e}^{-\lambda r/2a}=\frac{\lambda^3}{8\pi a^3}\iiint\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\mathrm{e}^{-\lambda r/2a}\left(-\hbar^2\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r\right)\mathrm{e}^{-\lambda r/2a}\\&=-\frac{1}{2\mu}\frac{\lambda^3}{8\pi a^3}\times4\pi\hbar^2\times\int_0^{+\infty}\mathrm{d}r r\mathrm{e}^{-\lambda r/2a}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r\mathrm{e}^{-\lambda r/2a}\\&=\frac{1}{2\mu}\frac{\lambda^3}{8\pi a^3}\times4\pi\hbar^2\times\int_0^{+\infty}\mathrm{d}r\left[\frac{\partial}{\partial r}r\mathrm{e}^{-\frac{\lambda}{2a}r}\right]^2\\&=\frac{1}{2\mu}\frac{\lambda^3}{8\pi a^3}\times4\pi\hbar^2\times\int_0^{+\infty}\mathrm{d}r\left[1-\frac{\lambda}{a}r+\frac{\lambda^2}{4a^2}r^2\right]\mathrm{e}^{-\frac{\lambda}{a}r}\end{aligned}$$

上面倒数第二个等号作了分部积分. 从上面结果再利用积分公式 (A.6, A.7) 与式 (A.8), 直接写出

$$\overline{T}=\frac{1}{2\mu}\frac{\lambda^3}{8\pi a^3}\times4\pi\hbar^2\times\left[\frac{a}{\lambda}-\frac{\lambda}{a}\left(\frac{a}{\lambda}\right)^2+\frac{\lambda^2}{4a^2}\times2\left(\frac{a}{\lambda}\right)^3\right]=\frac{\lambda^2\hbar^2}{8\mu a^2} \tag{14.122}$$

① 见题 4.17(d),(e).

由式 (14.120)、式 (14.121) 与式 (14.122) 得

$$\overline{H}(\lambda)=\frac{\lambda^2\hbar^2}{8\mu a^2}-\frac{\lambda^3}{(\lambda+1)^3}A \tag{14.123}$$

按 Ritz 变分法, 对 $\overline{H}$ 求极值

$$0=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\overline{H}=\frac{\lambda\hbar^2}{4\mu a^2}-\frac{3\lambda^2}{(\lambda+1)^4}A \tag{14.124}$$

给出极值点满足的方程

$$\frac{\lambda}{(1+\lambda)^4}=\xi\equiv\frac{\hbar^2}{12\mu a^2A} \tag{14.125}$$

代入题给参数 A=32MeV, $a=2.2\times10^{-15}\mathrm{m}=2.2fm$ 得

$$\xi=\frac{(\hbar c)^2}{12\mu c^2a^2A}=\frac{197^2\mathrm{MeV}^2\mathrm{fm}^2}{6\times938\mathrm{MeV}\times2.2^2\mathrm{fm}^2\times32\mathrm{MeV}}=0.0445 \tag{14.126}$$

由式 (14.125) 在 $\lambda=1$ 附近用迭代法 (也可采用 4 次代数方程求根公式, 因其表达式冗长, 这里略去) 解得 $\lambda^*\approx1.34$, 代入式 (14.123) 得基态能量

$$E=A\left(\frac{3\xi}{2}\lambda^2-\frac{\lambda^3}{(\lambda+1)^3}\right)=2.17\mathrm{MeV}$$

14.16 设氘核中质子与中子的作用为 Yukawa 势 $V(r)=-V_0\exp\left(-\frac{r}{a}\right)/\left(\frac{r}{a}\right)$, 其中 V_0, $a>0$. 取试探波函数 $\psi=\exp(-\lambda r/2a)$, 求基态能量.

解 题给试探波函数与题 14.15 试探波函数相同, 由题 14.15 式 (14.118) 给出其模平方, 故将其归一化

$$\psi(\lambda,\boldsymbol{x})=\left(\frac{\lambda^3}{8\pi a^3}\right)^{1/2}\mathrm{e}^{-\lambda r/2a} \tag{14.127}$$

按题 14.15 式 (14.122) 在 $\psi(\lambda,\boldsymbol{x})$ 下动能的期望值为

$$\langle T\rangle=\frac{\lambda^2\hbar^2}{8\mu a^2} \tag{14.128}$$

而势能的期望值为

$$\begin{aligned}\langle V\rangle&=\frac{\lambda^3}{8\pi a^3}\iiint\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\mathrm{e}^{-\lambda r/2a}\left(-V_0\mathrm{e}^{-r/a}\frac{a}{r}\right)\mathrm{e}^{-\lambda r/2a}\\&=-\frac{\lambda^3}{8\pi a^2}\times4\pi V_0\times\int_0^{+\infty}\mathrm{d}r r\mathrm{e}^{-\frac{\lambda+1}{a}r}\\&=-\frac{\lambda^3}{8\pi a^2}\times4\pi V_0\times\frac{1}{\left(\frac{\lambda+1}{a}\right)^2}=-\frac{\lambda^3}{2(\lambda+1)^2}V_0\end{aligned} \tag{14.129}$$

这样在 $\psi(\lambda,\boldsymbol{x})$ 下能量的期望值为

$$E(\lambda)=\langle T+V\rangle=\frac{\lambda^2\hbar^2}{8\mu a^2}-\frac{\lambda^3}{2(\lambda+1)^2}V_0 \tag{14.130}$$

束缚态能量 $E<0$, 因此必须

$$V_0\geqslant\frac{(1+\lambda)^2}{\lambda}\frac{\hbar^2}{4\mu a^2}=\left(2+\lambda+\frac{1}{\lambda}\right)\frac{\hbar^2}{4\mu a^2} \tag{14.131}$$

对应束缚态, λ 应取正值, 上式当 $\lambda=1$ 时取最小值 $\dfrac{\hbar^2}{ma^2}$, 因此若形成束缚态要求

$$V_0 \geqslant \frac{\hbar^2}{\mu a^2} \tag{14.132}$$

按 Ritz 变分法, 求式 (14.130)$E(\lambda)$ 的极值, $\dfrac{\partial E(\lambda)}{\partial \lambda}=0$ 给出极值点满足的方程

$$\frac{\lambda(3+\lambda)}{(1+\lambda)^3}=\eta \equiv \frac{\hbar^2}{2\mu a^2 V_0} \tag{14.133}$$

其中 $0<\eta \leqslant \dfrac{1}{2}$. 由上式求 (可采用 3 次代数方程求根公式, 因其表达式冗长, 这里略去) 得最小值点 λ^*, 相应的 $E(\lambda)$ 最小值为

$$E=\frac{V_0\lambda^{*2}}{2}\left[\frac{\eta}{2}-\frac{\lambda^*}{(\lambda^*+1)^2}\right]=\frac{V_0}{4}\frac{(\lambda^*-1)\lambda^{*3}}{(1+\lambda^*)^3} \tag{14.134}$$

14.17 氢原子置于均匀外电场 $\mathcal{E}$(沿 z 轴方向) 中, 外场作用 $H'=e\mathcal{E}z$. 取试探波函数为 $\psi=N(1+\lambda H')\psi_0$, ψ_0 是无外电场时的基态波函数 (即 ψ_{100}), 求基态能量和电极化率, 和微扰论计算结果比较.

解 本题与题 14.9 实际上是同样的题目. 这里按照题意, 换一种方法求解. 加上电场以前, 体系的 Hamilton 量为

$$H_0=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2-\frac{e^2}{r}=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}-\frac{e^2}{r}=T+V \tag{14.135}$$

氢原子的基态能级和基态波函数为

$$E_0=-\frac{e^2}{2a_0}=-\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \tag{14.136}$$

$$\psi_0=\psi_{100}=(\pi a_0^3)^{-1/2}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}} \tag{14.137}$$

其中 $a_0=\hbar^2/(\mu e^2)$ 为 Bohr 半径. 加了电场以后, 体系的 Hamilton 量为

$$H=H_0+H'=H_0+e\mathcal{E}z=T+V+H' \tag{14.138}$$

题给试探波函数为

$$\psi=N(1+\lambda H')\psi_0 \tag{14.139}$$

可利用题 14.6 的结果求解. 按式 (14.37) 计算, 有关对易式为

$$[H_0,H']=\frac{e\mathcal{E}}{2\mu}\left[p^2,z\right]=-\mathrm{i}\hbar\frac{e\mathcal{E}}{\mu}p_z \tag{14.140}$$

$$[H',[H_0,H']]=-\mathrm{i}\hbar\frac{e^2\mathcal{E}^2}{\mu}\left[z,p_z\right]=\hbar^2\frac{e^2\mathcal{E}^2}{\mu} \tag{14.141}$$

另外, 容易算出

$$\langle H'\rangle_0=e\mathcal{E}\langle z\rangle_0=0 \tag{14.142}$$

$$\langle H'^2\rangle_0=e^2\mathcal{E}^2\langle z^2\rangle_0=\frac{1}{3}e^2\mathcal{E}^2\langle r^2\rangle_0=e^2\mathcal{E}^2a_0^2 \tag{14.143}$$

上式中用了 $\langle r^2\rangle_0 = 3a_0^2$, 可见题 6.5 式 (6.84) 或者题 6.12 式 (6.11.7) 等. 将上面求得的诸式结果代入题 14.6 式 (14.36)、式 (14.37), 即得加弱电场以后氢原子的基态能级和波函数为

$$\lambda = \frac{e\mathcal{E}}{E_0} \tag{14.144}$$

$$E = -\frac{e^2}{2a_0} - 2\mathcal{E}^2 a_0^3 \tag{14.145}$$

$$\psi = N\left(1 - \frac{2a_0}{e^2} e\mathcal{E}z\right)\psi_0 \tag{14.146}$$

按题 14.6, 得到上面结果时所作近似是保留微扰 2 级量, 略去 3 级以上的小量. 式 (14.146) 看出加弱电场以后基态波函数不再是球对称的, 略去 $\mathcal{E}/\lambda$ 的高次项, 电偶极矩平均值为

$$\langle D_z\rangle = \langle\psi|\,(-ez)\,|\psi\rangle = 4\mathcal{E}a_0\left\langle z^2\right\rangle_0 = 4\mathcal{E}a_0^3 \tag{14.147}$$

极化率为

$$\kappa = \frac{\langle D_z\rangle}{E} = -\frac{\partial^2 E}{\partial\mathcal{E}^2} = 4a_0^3 = 0.59\times 10^{-24}\mathrm{cm}^3 \tag{14.148}$$

上面结果与题 14.17 相同. 二阶微扰计算结果 ①为

$$E = E_0 - \frac{9}{4}\mathcal{E}^2 a_0^3, \quad D_z = \frac{9}{2}\mathcal{E}a_0^3, \quad \kappa = \frac{9}{2}a_0^3$$

可见变分法所得能级略高于微扰论结果, 而 $D(z)$ 及 κ 则略小于后者.

说明 本题变分法所得能级与微扰论结果不同, 这与题 14.13 不同. 原因是题 14.13 中, 微扰论的波函数一阶微扰修正 ② 用零级波函数展开只有一项, 则试探波函数 $\psi(\lambda) = N(1+\lambda H')\psi_0$ 与微扰论准确到一阶的波函数形式相同. 本题的情形, 微扰论的波函数一阶微扰修正用零级波函数展开不止一项, 它与本题所采用的试探波函数 $\psi(\lambda) = N(1+\lambda H')\psi_0$ 形式不同, 这是导致本题变分法所得能级与微扰论结果不同的原因.

① 见曾谨言. 量子力学: 卷 I [M]. 4 版. 北京: 科学出版社, 2007: p. 361~362.
② 见曾谨言. 量子力学: 卷 I [M]. 4 版. 北京: 科学出版社, 2007: p. 361~362.

第 15 章　量子力学与经典力学的关系

15.1　试根据量子化条件 $\oint p\mathrm{d}x=\left(n+\dfrac{3}{4}\right)h,\quad n=0,1,2,\cdots$, 求下列势阱中粒子的束缚能级: (a) $V(x)=\begin{cases}\dfrac{1}{2}m\omega^2x^2, & x\geqslant 0,\\ \infty, & x<0.\end{cases}$ (b) $V(x)=\begin{cases}gx, & x\geqslant 0, g>0,\\ \infty, & x<0.\end{cases}$

解　(a) 粒子在 $0\leqslant x<\infty$ 作一维运动, 其总能量表达式为

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

由上式解出粒子动量为

$$p=\sqrt{2m\left(E-\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)}$$

要求 $E-\dfrac{1}{2}m\omega^2x^2\geqslant 0$, 即有 $0\leqslant x\leqslant\dfrac{1}{\omega}\sqrt{\dfrac{2E}{m}}$. 令 $x_m=\dfrac{1}{\omega}\sqrt{\dfrac{2E}{m}}$, 根据题给量子化条件得

$$\begin{aligned}\left(n+\frac{3}{4}\right)h=\oint p\mathrm{d}x&=\int_0^{x_m}p\mathrm{d}x-\int_0^{x_m}(-p)\mathrm{d}x=2\int_0^{x_m}p\mathrm{d}x\\&=2\int_0^{x_m}\sqrt{2m\left(E-\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)}\mathrm{d}x=2m\omega\int_0^{x_m}\sqrt{x_m^2-x^2}\mathrm{d}x\end{aligned}$$

其中 n 取非负整数, 即 $n=0,1,2,\cdots$. 对上式积分 (参考题 1.1) 得

$$\begin{aligned}\left(n+\frac{3}{4}\right)h&=2m\omega\int_0^{x_m}\sqrt{x_m^2-x^2}\mathrm{d}x=2m\omega\,\frac{1}{2}\left[x\sqrt{x_m^2-x^2}+x_m^2\arcsin\frac{x}{a}\right]\Bigg|_0^{x_m}\\&=m\omega\frac{2E}{m\omega^2}\frac{\pi}{2}=\frac{\pi E}{\omega}\end{aligned}$$

所以 $E=E_n=(2n+3/2)\hbar\omega$, $n=0,1,2,\cdots$, 这与题 3.16 的精确结果一致.

(b) 粒子在 $0\leqslant x<\infty$ 作一维运动, 其总能量表达式为

$$E=\frac{p^2}{2m}+gx$$

或者

$$E-gx=\frac{p^2}{2m}$$

因 $p^2/2m\geqslant 0$, 这要求 $0\leqslant x\leqslant E/g$, 令 $x_m=E/g$. 由上式解得

$$p=\sqrt{2m\left(E-gx\right)}=\sqrt{2m/g}\sqrt{x_m-x}$$

根据题给量子化条件得

$$\begin{aligned}\left(n+\frac{3}{4}\right)h=\oint p\mathrm{d}x&=\int_0^{x_m}p\mathrm{d}x+\int_{x_m}^{0}(-p)\mathrm{d}x=2\int_0^{x_m}p\mathrm{d}x\\&=2\int_0^{x_m}\sqrt{2m/g}\sqrt{x_m-x}\mathrm{d}x=\sqrt{2m/g}\int_0^{x_m}\sqrt{x_m-x}\mathrm{d}x\\&=\frac{2}{3}\sqrt{\frac{2m}{g}}x_m^{3/2}=\frac{2}{3}\sqrt{\frac{2m}{g}}\left(\frac{E}{g}\right)^{3/2}\end{aligned}$$

或者

$$\frac{2}{3}\sqrt{\frac{2m}{g}}\left(\frac{E}{g}\right)^{3/2}=\left(n+\frac{3}{4}\right)h$$

其中 $n=0,1,2,\cdots$. 由此解得 $E_n=\frac{1}{2}(9\pi^2g^2\hbar^2/m)^{1/3}\left(n+\frac{3}{4}\right)^{2/3}$.

15.2 在准经典近似下, 计算粒子对下列势垒 (图 15.1) 的透射系数, 粒子能量 $E<0$.

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

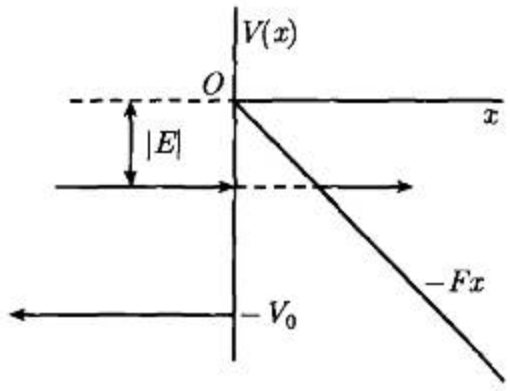

图 15.1 强电场作用下电子穿透金属表面的简化模型

这是在强电场作用下, 电子穿透金属表面的简化模型.

解 Wentzel-Kramers-Brillouin(WKB) 近似是求解 Schrödinger 方程的一种准经典近似方法, 近似到一阶. 对于一维势垒的散射, 若势函数 $V(x)$ 变化比较缓慢, 而且入射粒子能量 E 不太靠近 $V(x)$ 的峰值, 经典转折点 x_1 与 x_2 也不太靠近势垒顶部, 则可采用 WKB 近似. 考虑经典允许区和经典禁区在经典转折点附近的连接条件, 可得质量为 m 的粒子透射系数的计算公式[①]为

$$P\approx\exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m[V(x)-E]}\mathrm{d}x\right]=\exp\left[-G\right] \tag{15.1}$$

其中 $G=\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m[V(r)-E]}\mathrm{d}x$.

题给粒子能量 E 满足 $-V_0<E<0$, $x_1=0$ 为一个经典转折点. 另一个经典转折点由 $E=-Fx$ 给出, 即 $x_2=-E/F$. 这样根据式 (15.1) 计算, 其中

$$\begin{aligned}G&=\frac{2}{\hbar}\int_0^{x_2}\sqrt{2m[V(x)-E]}\mathrm{d}x=\frac{2\sqrt{2mF}}{\hbar}\int_0^{x_2}\sqrt{x_2-x}\mathrm{d}x\\&=\frac{2\sqrt{2mF}}{\hbar}\int_0^{x_2}\sqrt{y}\mathrm{d}y=\frac{2}{3}\sqrt{2mF}x_2^{3/2}=\frac{4}{3\hbar F}\sqrt{2m}\,|E|^{3/2}\end{aligned} \tag{15.2}$$

把上式结果代入式 (15.1), 即得所求的透射系数

$$P=\exp\left[-\frac{4}{3\hbar F}\sqrt{2m}\,|E|^{3/2}\right] \tag{15.3}$$

结果与 V_0 无关 (只要 V_0 是适当的, 使位势满足 WKB 近似的条件).

15.3 同上题, 但计及电象势, 此时

$$V(x)=\begin{cases}-V_0, & x<0\\ -Fx-e^2/4x, & x>0\end{cases}$$

计算电子穿透金属表面的透射系数.

解 假设 $|E|$ 足够大, 或者 E 足够低 (这使得位势满足 WKB 近似条件). 电子从势垒左边开始向势垒右边前进. 经典转折点为动能等于零的点, 即满足 $E=V(x)$ 的点或者是从 $E>V(x)$

① 曾谨言, 量子力学 (第四版卷 II)[M], 北京: 科学出版社, 2007, p.82.

向 $E<V(x)$ 跳跃的转折点. 计及电象势以后, 使得原来 $x_1=0$ 的第一个经典转折点右移, 这样两个经典转折点都是位势的连续点, 满足

$$E=-Fx-\frac{e^2}{4x}$$

解得

$$x_1=-\frac{E}{2F}-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{E^2}{F^2}-\frac{e^2}{F}},\quad x_2=-\frac{E}{2F}+\frac{1}{2}\sqrt{\frac{E^2}{F^2}-\frac{e^2}{F}} \tag{15.4}$$

有 $0<x_1<x_2$. 根据题 15.2 中的式 (15.1) 计算, 其中

$$G=\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m[-Fx-e^2/4x-E]}\mathrm{d}x \tag{15.5}$$

令 $x=\dfrac{|E|}{F}\xi$, 相应的, 有 $x_1=\dfrac{|E|}{F}\xi_1$, $x_2=\dfrac{|E|}{F}\xi_2$, 根据 x_1, x_2 的值, 有

$$\xi_1=\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\sqrt{1-4\lambda^2},\quad \xi_2=\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\sqrt{1-4\lambda^2} \tag{15.6}$$

其中 $\lambda=\sqrt{e^2F/4E^2}$. 这样式 (15.5) 化为

$$G=\frac{2}{\hbar F}\sqrt{2m}\,|E|^{3/2}\int_{\xi_1}^{\xi_2}\sqrt{1-\xi-\lambda^2/\xi}\mathrm{d}\xi=\frac{4}{3\hbar F}\sqrt{2m}\,|E|^{3/2}\,\varphi(\lambda) \tag{15.7}$$

其中 $\varphi(\lambda)=\dfrac{3}{2}\displaystyle\int_{\xi_1}^{\xi_2}\sqrt{1-\xi-\lambda^2/\xi}\mathrm{d}\xi=3\int_{\xi_1^2}^{\xi_2^2}\sqrt{y^2-y^4-\lambda^2}\mathrm{d}y$, 而 ξ_1 和 ξ_2 如式 (15.6) 所给. 这样透射系数为

$$P=\exp\left[-\frac{4}{3}\frac{\sqrt{2m}}{\hbar F}|E|^{3/2}\varphi(\lambda)\right]$$

结果也与 V_0 无关.

15.4 放射性原子核 α 衰变时, α 粒子受到的势场可近似表示为 (图 15.2)

$$V(r)=\begin{cases}-V_0, & r<R\\ \beta/r, & r>R\end{cases}$$

式中 $\beta=2Ze^2$, Z 是子核的质子数, R 是“核半径”. 求 α 粒子透此 Coulomb 势垒的系数.

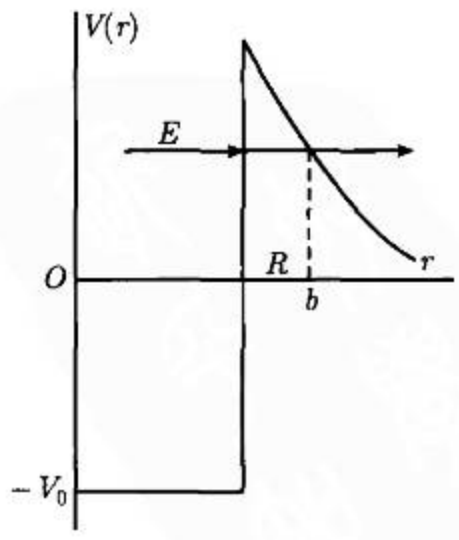

图 15.2 α 衰变时 α 粒子受到的势场

解 我们知道有心力场中运动的粒子, 其 CSCO 可选为 $(H,\boldsymbol{l}^2,l_z)$, 它们的共同本征态为 ψ_{nlm}. 求解 ψ_{nlm} 的径向波函数 R_{nl} 满足的方程可归结为一维问题, 只要令 $\chi=rR_{nl}$, 边界条件为 $\chi(0)=\chi(\infty)=0$, 位势则是

$$V_{\text{eff}}=V(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{r^2}$$

对于 s 态, $V_{\text{eff}}=V(r)$. 现考虑处于 s 态的 α 粒子对 Coulomb 势垒的穿透. 假设 α 粒子能量以及势垒满足 WKB 近似条件, 则根据题 15.2 中的式 (15.1), 穿透概率 P 由下式给出:

$$P\approx\exp\left[-G\right],\quad G=\frac{2\sqrt{2\mu}}{\hbar}\int_R^b\sqrt{V(r)-E}\mathrm{d}r \tag{15.8}$$

其中 μ 为 α 粒子约化质量, E 为 α 粒子逸出核外时的动能, 即实验室中测得的 α 粒子动能, 而 b 对应经典转折点, 满足

$$E = V(b) = \frac{\beta}{b} \quad \text{或} \quad b = \frac{\beta}{E} \tag{15.9}$$

为求式 (15.8) 中的积分, 作变换

$$\sin\theta = \sqrt{r/b}, \quad r = b\sin^2\theta \tag{15.10}$$

这样式 (15.8) 中的 G 为

$$\begin{aligned} G &= \frac{2\sqrt{2\mu}}{\hbar}\int_R^b \sqrt{\frac{\beta}{r} - E}\mathrm{d}r = \frac{2\sqrt{2\mu\beta}}{\hbar}\int_R^b \sqrt{\frac{1}{r} - \frac{1}{b}}\mathrm{d}r \\ &= \frac{2\sqrt{2\mu b\beta}}{\hbar}\int_{\theta_0}^{\pi/2}(1+\cos 2\theta)\mathrm{d}\theta = \frac{2\sqrt{2\mu b\beta}}{\hbar}\left[\left(\frac{\pi}{2} - \theta_0\right) - \sin\theta_0\cos\theta_0\right] \end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned} &\sin\theta_0 = \sqrt{R/b}, \quad \cos\theta_0 = \sqrt{1 - R/b} \\ &\frac{\pi}{2} - \theta_0 = \arccos\sqrt{R/b} \end{aligned}$$

注意式 (15.9) 得

$$G = \frac{2\sqrt{2\mu b\beta}}{\hbar}\left[\arccos\sqrt{\frac{ER}{\beta}} - \sqrt{\frac{ER}{\beta}\left(1 - \frac{ER}{\beta}\right)}\right] \tag{15.11}$$

代入式 (15.8) 即得

$$P = \exp\left\{-\frac{2\beta}{\hbar}\sqrt{\frac{2\mu}{E}}\left[\arccos\sqrt{\frac{ER}{\beta}} - \sqrt{\frac{ER}{\beta}\left(1 - \frac{ER}{\beta}\right)}\right]\right\} \tag{15.12}$$

说明 可以估算, α 衰变需要克服的 Coulomb 势垒高度为 20MeV 以上. 而 α 衰变放出的 α 粒子能量一般不超过 10MeV, 因而势垒较好的符合 WKB 近似的条件.

设 α 粒子在核内 $(r < R)$ 的速度为 v, 则单位时间内撞击 Coulomb 势垒的次数为 $f = \dfrac{v}{2R}$, 此即单位时间内在核内的来回次数. 因此衰变常数为

$$\lambda = fP \approx \frac{v}{2R}P \tag{15.13}$$

半衰期为

$$T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda} = 2\ln 2\frac{R}{vP} \tag{15.14}$$

原子核中核子的平均动能约为 20MeV, 相当于 $v = 0.2c < c$ (c 为光速), 可认为 α 粒子在原子核中的速度与此大体相当. 式中"核半径" R 可以按照经验公式

$$R \approx A^{1/3} \times r_0 \tag{15.15}$$

由上可做核素 α 衰变寿命的估算. 若由式 (15.12)、式 (15.13) 作进一步近似, 可得到 α 衰变半衰期与放出的 α 粒子能量的关系

$$\ln T_{1/2} = C_1 E^{-1/2} + C_2$$

其中 C_1, C_2 为常数. 这与人们发现的实验规律 (Geiger-Nutall 定律) 一致①.

① 参见杨福家, 原子物理学, 高等教育出版社 (第四版) , 2008 年, p.345~347; 许咨宗, 核与粒子物理导论, 中国科学技术大学出版社, 2009 年, p.321~322

15.5 用 WKB 近似计算质量为 m 的粒子对下列势垒的透射系数

$$V(x)=\begin{cases} V_0(1-x^2/a^2), & |x|<a \\ 0, & |x|>a \end{cases}$$

其中 $V_0>0$. 设粒子能量 $E<V_0$, 质量为 m.

解 假设粒子能量、势函数满足 WKB 近似的条件, 这样有 $0<E<V_0$, 且 E 离 V_0 较远. 先由 $E=V(x)$ 确定经典转折点, 也就是

$$V_0(1-x^2/a^2)=E$$

给出经典转折点位置

$$x_{1,2}=\pm a\sqrt{1-\frac{E}{V_0}}=\pm b, \quad b=a\sqrt{1-\frac{E}{V_0}} \tag{15.16}$$

因而 $E=V_0(1-b^2/a^2)$.

现根据题 15.2 中的式 (15.1) 作计算. 透射系数 $P\approx \mathrm{e}^{-G}$, 而

$$\begin{aligned} G&=\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m[V(r)-E]}\mathrm{d}x=\frac{2}{a\hbar}\sqrt{2mV_0}\int_{-b}^{+b}\sqrt{b^2-x^2}\mathrm{d}x \\ &=\frac{2}{a\hbar}\sqrt{2mV_0}\frac{\pi}{2}b^2=\frac{\pi a}{\hbar}\sqrt{2mV_0}\left(1-\frac{E}{V_0}\right) \end{aligned} \tag{15.17}$$

把上式代入式 (15.1), 我们得到透射系数为

$$P\approx \mathrm{e}^{-G}=\exp\left[-\frac{\pi a}{\hbar}\left(1-\frac{E}{V_0}\right)\sqrt{2mV_0}\right]$$

15.6 对于无自旋的粒子, 将波函数写成 $\psi=\sqrt{\rho}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}$, 其中 ρ, φ 为实函数, $\rho\geqslant 0$. 求概率流密度的表示式, 并在准经典近似下导出量子化条件.

解 题给波函数的形式

$$\psi=\sqrt{\rho}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} \tag{15.18}$$

其中 $\sqrt{\rho}$ 为振幅, φ 是相位. 概率密度的量子力学公式为 $\psi^*\psi$, 可知上式中的 ρ 即粒子概率密度. 设粒子质量为 μ, 概率流密度的量子力学公式为

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{x},t)=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2\mu}(\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi) \tag{15.19}$$

由式 (15.18) 易得

$$\ln\psi=\frac{1}{2}\ln\rho+\mathrm{i}\varphi$$

两边求梯度, 即得

$$\frac{\nabla\psi}{\psi}=\frac{1}{2}\frac{\nabla\rho}{\rho}+\mathrm{i}\nabla\varphi$$

上式两边乘以 $\psi^*\psi$, 得到

$$\psi^*\nabla\psi=\frac{1}{2}\nabla\rho+\mathrm{i}\rho\nabla\varphi \tag{15.20}$$

上式两边取复数共轭得

$$\psi\nabla\psi^*=\frac{1}{2}\nabla\rho-\mathrm{i}\rho\nabla\varphi \tag{15.21}$$

将式 (15.20)、式 (15.21) 代入式 (15.19), 即得概率流密度的如下表达式:

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{x},t)=\frac{\hbar}{m}\rho\nabla\varphi \tag{15.22}$$

在准经典近似下, 可取粒子速度为

$$\boldsymbol{v}=\frac{1}{\rho}\boldsymbol{j} \tag{15.23}$$

则式 (15.22)、式 (15.23) 给出粒子动量的如下表达式

$$\boldsymbol{p}=m\boldsymbol{v}=\hbar\nabla\varphi \tag{15.24}$$

在准经典条件下, 粒子的运动可以用轨道描述. 将式 (15.24) 沿任何闭合轨道积分, 得到

$$\oint\boldsymbol{p}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\hbar\oint\nabla\varphi\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\hbar\oint\mathrm{d}\varphi \tag{15.25}$$

由于波函数的单值性, φ 沿闭合轨道的改变量必是 2π 的整倍数, 即上式右端必须等于 $2nh$ 的整倍数. 因此

$$\oint\boldsymbol{p}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r}=nh \tag{15.26}$$

其中 $n=1,2,3,\cdots$. 上式即量子化条件.

15.7 质量为 m 的粒子在势阱 $V(x)$ 中运动, 其能级由量子化条件

$$\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m\left[E-V\left(x\right)\right]}\mathrm{d}x=\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi\hbar,\quad n=0,1,2,\cdots \tag{15.27}$$

确定, x_1 与 x_2 为转折点, 由 $V(x_1)=V(x_2)=E$ 定出. 试用此量子化条件和 Hellmann-Feynman 定理 (卷 I , 6.5 节) 证明, 对于任何一个准经典束缚态 ψ_n, 动能平均值与能量本征值 E_n 有下列关系

$$\langle T\rangle_n=\frac{1}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\partial E_n}{\partial n} \tag{15.28}$$

证明 观察量子化条件式 (15.27), 可知第 n 个能级的能量 E_n 是 $\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar$ 的函数, 即

$$E_n=E\left[\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\right] \tag{15.29}$$

总能量算符为

$$H=T+V=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)$$

选 $\hbar$ 为参数, Hellmann-Feynman 定理给出

$$\frac{\partial E_n}{\partial\hbar}=\left\langle\frac{\partial H}{\partial\hbar}\right\rangle_n=\frac{2}{\hbar}\langle T\rangle_n \tag{15.30}$$

而由式 (15.29) 易见

$$\frac{1}{n+\frac{1}{2}}\frac{\partial E_n}{\partial\hbar}=\frac{1}{\hbar}\frac{\partial E_n}{\partial\left(n+\frac{1}{2}\right)}=\frac{1}{\hbar}\frac{\partial E_n}{\partial n} \tag{15.31}$$

上式代入式 (15.30), 即给出式 (15.28). 证毕.

说明 对于准经典束缚态 ψ_n, n 很大, 且往往 $\Delta E_n=E_{n+1}-E_n$ 很小 (在 E_n 附近能级非常密集), 因而 $\dfrac{\Delta E_n}{\Delta n}\approx\dfrac{\partial E_n}{\partial n}$.

15.8 质量为 m 的粒子在势场 $V(x)=\lambda|x|^{\nu}$ 中运动, $\lambda>0,\nu>0$. 证明在准经典近似下, 粒子能级 E 可表示成如下形式:

$$E_n=A(\nu)\left(n+\frac{1}{2}\right)^{2\nu/(\nu+2)}\cdot\lambda^{2/(\nu+2)}\cdot\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{\nu/(\nu+2)}$$

式中 $A(\nu)$ 无量纲, 是 ν 的函数.

证明 对于题给的幂律位势, Virial 定理给出

$$\langle T\rangle_n=\frac{\nu}{2}\langle V\rangle_n=\frac{\nu}{\nu+2}E_n \tag{15.32}$$

此式与题 15.7 所证明的式 (15.28) 联立, 消去 $\langle T\rangle_n$ 给出

$$\frac{\partial E_n}{\partial n}=\frac{2\nu}{(\nu+2)(n+1/2)}E_n \tag{15.33}$$

求解上式, 即得

$$E_n=C(\nu)\left(n+\frac{1}{2}\right)^{2\nu/(2+\nu)},\quad n=0,1,2,\cdots \tag{15.34}$$

其中 $C(\nu)$ 为积分常数, 具有能量的量纲.

现进行量纲分析. 粒子处在题给势场中, 其能量 E 可能值有关的量应包括粒子质量 m、势函数的唯一参数 λ, 再加上一个 Plank 常量 $\hbar$. 这样可以令 $E=f\lambda^{\alpha}m^{\beta}\hbar^{\gamma}$. λ 的量纲是 $[g]=[E/r^{\nu}]=[E]/[r^{\nu}]$. 将有关量的量纲列表如右.

	λ	m	$\hbar$	E
M	1	1	1	1
L	$2-\nu$	0	2	2
T	-2	0	-1	-2

若两个量相等, 其量纲必相等. 由此列出如下关于量纲指数的方程组:

$$\begin{cases}\alpha+\beta+\gamma=1\\ \alpha(2-\nu)+0+2\gamma=2\\ -2\alpha+0-\gamma=-2\end{cases}$$

解上面线性方程组, 得 $\alpha=2/(\nu+2)$, $\beta=-\nu/(\nu+2)$, $\gamma=2\nu/(\nu+2)$. 由此得

$$E=f_1\lambda^{2/(\nu+2)}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{\nu/(\nu+2)} \tag{15.35}$$

其中 f_1 为无量纲参数. 因此, 我们确定本问题中能量自然单位是 $\lambda^{2/(\nu+2)}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{\nu/(\nu+2)}$. 由此, 我们将式 (15.34) 中的具有能量的量纲积分常数 $C(\nu)$ 表示为

$$C(\nu)=A(\nu)\lambda^{2/(\nu+2)}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{\nu/(\nu+2)}$$

其中 $A(\nu)$ 为无量纲数, 一般是 ν 的函数. 这样我们将式 (15.34) 写为

$$E_n=A(\nu)\left(n+\frac{1}{2}\right)^{2\nu/(2+\nu)}\lambda^{2/(\nu+2)}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{\nu/(\nu+2)},\quad n=0,1,2,\cdots \tag{15.36}$$

即为所证. 由于本题证明过程中用到的式 (15.28) 对准经典近似成立, 故式 (15.36) 也是在准经典近似下成立.

15.9 质量为 m 的粒子, 在势阱 $V(x)=\lambda|x|^{\nu}$ 中运动, 其中 $\lambda,\nu>0$. 试根据量子化条件

$$\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m\left[E-V\left(x\right)\right]}\mathrm{d}x=\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi h,\quad n=0,1,2,\cdots$$

$V(x_1)=V(x_2)=E$, 求粒子能级.

解 经典转折点 x_1 与 x_2 满足 $V(x_1)=V(x_2)=E$, 即满足

$$V(x)=\lambda|x|^{\nu}=E$$

由此确定

$$x_1=-b,\quad x_2=b,\quad b=\left(\frac{E}{\lambda}\right)^{1/\nu}>0 \tag{15.37}$$

因而也可写 $E=\lambda b^{\nu}$. 量子化条件为

$$\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m\left[E-V\left(x\right)\right]}\mathrm{d}x=\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi \tag{15.38}$$

或者

$$\int_{0}^{b}\sqrt{2m\left[E-V\left(x\right)\right]}\mathrm{d}x=\frac{1}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi \tag{15.39}$$

代入题给的势函数得

$$\int_{0}^{b}\sqrt{2m\left[E-V\left(x\right)\right]}\mathrm{d}x=\sqrt{2m\lambda}\int_{0}^{b}\sqrt{b^{\nu}-x^{\nu}}\mathrm{d}x \tag{15.40}$$

对式 (15.40) 的积分作变量变换

$$x^{\nu}=b^{\nu}\sin^2\theta \tag{15.41}$$

因而 $\nu x^{\nu-1}\mathrm{d}x=2b^{\nu}\sin\theta\cos\theta\mathrm{d}\theta$, 也就是

$$\mathrm{d}x=2\frac{x^{1-\nu}}{\nu}b^{\nu}\sin\theta\cos\theta\mathrm{d}\theta=2\frac{b}{\nu}\left(\sin\theta\right)^{\frac{2}{\nu}-1}\cos\theta\mathrm{d}\theta \tag{15.42}$$

这样式 (15.40) 中的积分为

$$\begin{aligned}\int_{0}^{b}\sqrt{b^{\nu}-x^{\nu}}\mathrm{d}x&=\frac{2}{\nu}b^{\frac{\nu}{2}+1}\int_{0}^{\pi/2}\left(\sin\theta\right)^{\frac{2}{\nu}-1}\cos^2\theta\mathrm{d}\theta\\&=\frac{2}{\nu}b^{\frac{\nu}{2}+1}\int_{0}^{\pi/2}\left[\left(\sin\theta\right)^{\frac{2}{\nu}-1}-\left(\sin\theta\right)^{\frac{2}{\nu}+1}\right]\mathrm{d}\theta\\&=\frac{2}{\nu}b^{\frac{2}{\nu}+1}\left[\frac{\sqrt{\pi}\Gamma\left(1/\nu\right)}{2\Gamma\left(1/\nu+1/2\right)}-\frac{\sqrt{\pi}\Gamma\left(1/\nu+1\right)}{2\Gamma\left(1/\nu+3/2\right)}\right]\\&=\frac{\sqrt{\pi}}{\nu}b^{\frac{\nu}{2}+1}\left[\frac{\Gamma\left(1/\nu\right)\left(1/\nu+1/2\right)-\Gamma\left(1/\nu+1\right)}{\Gamma\left(1/\nu+3/2\right)}\right]\\&=b^{\frac{\nu}{2}+1}\frac{\sqrt{\pi}\Gamma\left(1/\nu\right)}{2\nu\Gamma\left(1/\nu+3/2\right)}\end{aligned}$$

以上用了积分公式 (A.14), 以及 Γ 函数递推关系 $\Gamma(z+1)=z\Gamma(z)$. 把上式代入式 (15.40), 并注意 b 与 E 的关系式 (15.37) 得

$$\begin{aligned}\int_{0}^{b}\sqrt{2m\left[E-V\left(x\right)\right]}\mathrm{d}x&=\sqrt{2m\lambda}b^{\frac{\nu}{2}+1}\frac{\sqrt{\pi}\Gamma\left(1/\nu\right)}{2\nu\Gamma\left(1/\nu+3/2\right)}\\&=\sqrt{2m}E^{\frac{\nu}{2}+1}\lambda^{\frac{1}{\nu}}\frac{\sqrt{\pi}\Gamma\left(1/\nu\right)}{2\nu\Gamma\left(1/\nu+3/2\right)}\end{aligned} \tag{15.43}$$

上式与式 (15.39) 联立即得

$$E_n = \left[\frac{\sqrt{\pi}\nu\Gamma\left(3/2+1/\nu\right)}{\Gamma\left(1/\nu\right)}\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]^{2\nu/(\nu+2)} \cdot \lambda^{2/(\nu+2)} \cdot \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{\nu/(\nu+2)}$$

其中 $n=0,1,2,\cdots$. 上式与题 15.8 结果一致.

讨论 对 $\nu=1$, 利用 $\Gamma(1)=1, \Gamma\left(\frac{1}{2}\right)=\sqrt{\pi}$ 以及 $\Gamma(z+1)=z\Gamma(z)$, 得

$$E_n = \left[\frac{3\pi}{4}\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]^{2/3} \cdot \left(\frac{\lambda^2\hbar^2}{2m}\right)^{1/3}, \quad n=0,1,2,\cdots$$

这与题 1.5 的结果一致. 对 $\nu=2$, 令 $\lambda=\frac{1}{2}m\omega^2$, 得

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

恰好和精确解相同.

15.10 将一维运动粒子的量子化条件推广, 用以处理中心力场中粒子的 s 态 ($l=0$). 设 $V(r)=\lambda r^\nu$, 其中 $\lambda>0, \nu>0$. 求 s 能级公式. 讨论 $\nu=1$、2 的结果.

解 根据势场球对称性的特点, 粒子的束缚定态波函数可取 $(H, \boldsymbol{l}^2, l_z)$ 的共同本征函数, 可以表示为

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R_l(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{1}{r}\chi(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) \tag{15.44}$$

其中 $\chi(r)$ 满足径向方程

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}r^2} + \left[E - V(r) - l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\right]\chi = 0 \tag{15.45}$$

对于 s 态, $l=0$, 离心势能等于 0, 上式成为

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}r^2} + \left[E - V(r)\right]\chi = 0 \tag{15.46}$$

束缚态条件以及 $r\to 0$ 处自然边界条件可表示为

$$\chi(0)=0, \quad \chi|_{r\to\infty}=0 \tag{15.47}$$

易见 χ 等价于一维问题中的能量本征函数 $\psi(x)$[边界条件为 $\psi(0)=0$, $\psi|_{r\to\infty}=0$]. 这也与等价于一维反射对称势场奇宇称能量本征态 $\psi(x)$, 后者在 WKB 准经典近似下的量子化条件为

$$\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2\mu\left[E-V\left(x\right)\right]}\mathrm{d}x = \left[(2n+1)+\frac{1}{2}\right]\pi\hbar, \quad n=0,1,2,\cdots \tag{15.48}$$

其中 x_1, x_2 为经典转折点, $x_1=-x_2<0$. 上式又可以写成

$$\int_{0}^{x_2}\sqrt{2\mu\left[E-V\left(x\right)\right]}\mathrm{d}x = \left(n+\frac{3}{4}\right)\pi\hbar, \quad n=0,1,2,\cdots \tag{15.49}$$

利用 χ 本征态问题求解与一维反射对称势场奇宇称能量本征态 $\psi(x)$ 的等效性, 我们由此写下到中心力场的 s 态 ($l=0$) 能量本征态量子化条件:

$$\int_{0}^{r_c}\sqrt{2\mu\left[E-V\left(r\right)\right]}\mathrm{d}r = \left(n+\frac{3}{4}\right)\pi\hbar \tag{15.50}$$

其中 $n=0,1,2,\cdots$, 是 s 能级的编号数, 即径向量子数 (也是径向波函数的节点个数). 经典转折点 r_c 满足 $V(r_c)=E$, 代入题给的势函数可定出

$$r_c=b=\left(\frac{E}{\lambda}\right)^{1/\nu}>0$$

按题给的势函数, 量子化条件的积分为 $\int_0^b\sqrt{2\mu\left[E-V\left(x\right)\right]}\mathrm{d}x$, 此积分已在题 15.9 的式 (15.43) 给出, 即

$$\int_0^b\sqrt{2m\left[E-V\left(x\right)\right]}\mathrm{d}x=\sqrt{2m\lambda}b^{\frac{\nu}{2}+1}\frac{\sqrt{\pi}\Gamma\left(1/\nu\right)}{4\nu\Gamma\left(1/\nu+3/2\right)}=\sqrt{2m}E^{\frac{\nu}{2}+1}\lambda^{\frac{1}{\nu}}\frac{\sqrt{\pi}\Gamma\left(1/\nu\right)}{4\nu\Gamma\left(1/\nu+3/2\right)}$$

代入式 (15.50) 即可求得

$$E_n=\left[\frac{2\sqrt{\pi}\nu\Gamma\left(3/2+1/\nu\right)}{\Gamma\left(1/\nu\right)}\left(n+\frac{3}{4}\right)\right]^{2\nu/(\nu+2)}\cdot\lambda^{2/(\nu+2)}\cdot\left(\frac{\hbar^2}{2\mu}\right)^{\nu/(\nu+2)}\tag{15.51}$$

其中 $n=0,1,2,\cdots$

特例 1 谐振子 ($\nu=2$), 令 $\lambda=\frac{1}{2}m\omega^2$, 得出 s 态能级的 WKB 近似解

$$E_n=\left(2n+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega,\quad n=0,1,2,\cdots$$

精确解为

$$E=\left(2n_r+l+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega,\quad n_r,l=0,1,2,\cdots$$

而对 s 态 $l=0$, 与 WKB 近似解相同.

特例 2 线性中心势 ($\nu=1$), 式 (15.51) 给出

$$E_n=\left(\frac{\lambda^2\hbar^2}{2\mu}\right)^{1/3}\left[\frac{3\pi}{2}\left(n+\frac{3}{4}\right)\right]^{2/3},\quad n=0,1,2,3,\cdots\tag{15.52}$$

s 态能级的精确解为 $E_n=\left(\frac{\lambda^2\hbar^2}{2\mu}\right)^{1/3}x_n$, x_n 为 Airy 函数的零点, 满足

$$\mathrm{J}_{1/3}\left(\frac{2}{3}x^{3/2}\right)+\mathrm{J}_{-1/3}\left(\frac{2}{3}x^{3/2}\right)=0\tag{15.53}$$

J_ν 为第一类 Bessel 函数. 经数值计算, 式 (15.52) 和式 (15.53) 给出的结果极其接近, 如下表所示:

n	x_n	$\left[\frac{3\pi}{2}\left(n+\frac{3}{4}\right)\right]^{2/3}$	相对偏差 (%)
0	2.33811	2.32025	0.7639
1	4.08795	4.08181	0.1502
2	5.52056	5.51716	0.0616
3	6.78671	6.78445	0.0333
4	7.94413	7.94249	0.0206
5	9.02265	9.02137	0.0142
6	10.04017	10.03914	0.0103
7	11.00852	11.00767	0.0077
8	11.93602	11.93528	0.0062
9	12.82878	12.82814	0.0050

由表可以看出, 当量子数 n 增大, 能级的准经典近似值与精确值的相对偏差逐渐减小. 这反映了 Bohr 对应原理在本问题上的正确性.

15.11 同上题, 求准经典近似下能级的公式 (不局限于 s 态).

解 s 态 ($l=0$) 能级公式已在上题求出, $l\neq 0$ 时的能级可以利用题 15.12 的结果以及本题附录给出的对应关系加以导出. 本题 $\lambda>0$, $\nu>0$, $E>0$, $l=0,1,2,\cdots$, 按照本题附录, 相应的 λ', ν', E' 以及 l' 为

$$\begin{aligned} &\nu'=-\frac{2\nu}{\nu+2}, \qquad l'=\frac{2l+1}{\nu+2}-\frac{1}{2} \\ &\lambda'=-\left(\frac{\nu'}{\nu}\right)^2 E, \quad E'=-\frac{\nu'}{\nu}\lambda E \end{aligned} \tag{15.54}$$

显然 $\lambda'<0$, $-2<\nu'<0$, $E'<0$. 根据题 15.12, 势场 $\lambda' r^{\nu'}$ 中与角量子数 l' 相应的准经典束缚态能级为

$$E'_{n_r l'}=-|\lambda'|^{\frac{2}{\nu'+2}}\left(\frac{\hbar^2}{2\mu}\right)^{\frac{\nu'}{\nu'+2}}\left[\sqrt{\pi}\,|\nu'|\left(2n_r+\frac{2l+\nu'+3}{\nu'+2}\right)\cdot\frac{\Gamma(1-1/\nu')}{\Gamma(-1/2-1/\nu')}\right]^{\frac{2\nu'}{\nu'+2}} \tag{15.55}$$

根据 λ、ν、E 以及 l 和 λ'、ν'、E' 以及 l' 的对应关系式 (15.54), 由上式经过整理化简, 即得

$$E_{n_r l}=\left[2\nu\sqrt{\pi}\left(n_r+\frac{l}{2}+\frac{3}{4}\right)\frac{\Gamma\left(3/2+1/\nu\right)}{\Gamma\left(1/\nu\right)}\right]^{\frac{2\nu}{\nu+2}}\cdot\lambda^{\frac{2}{\nu+2}}\cdot\left(\frac{\hbar^2}{2\mu}\right)^{\frac{\nu}{\nu+2}} \tag{15.56}$$

其中 $n_r, l=0,1,2,\cdots$, 此即所求能级公式. 当 $l=0$, 上式与上题式 (15.51) 相同. 对于 s 态, 尽管采用的方法不同, 但结果完全相同. 这说明了准经典近似处理这类问题的有效性.

特例 谐振子 ($\nu=2$), 令 $\lambda=\frac{1}{2}m\omega^2$, 利用 $\Gamma(2)=1, \Gamma\left(\frac{1}{2}\right)=\sqrt{\pi}$ 得 $E=\left(2n_r+l+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega$, 与严格解相同.

附录 (幂函数型中心势场 $V(r)=\lambda r^{\nu}$ 束缚定态能量 $\nu>0$ 与 $-2<\nu<0$ 情形的对应) 根据势场的球对称性, 束缚定态可取为 (H, l^2, l_z) 共同本征态, 相应的波函数可以写为

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)=R(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{1}{r}u(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) \tag{15.57}$$

其中 Y_{lm} 为球谐函数, $l=0,1,2,\cdots; m=0,\pm1,\pm2,\cdots\pm l$. 径向方程

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}u''+\left[E-\lambda r^{\nu}-l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u=0 \tag{15.58}$$

作变换

$$\rho=r^{\alpha}, \quad u(r)=\rho^{\beta}v(\rho) \tag{15.59}$$

α, β 待定. 因而 $\mathrm{d}\rho=\alpha r^{\alpha-1}\mathrm{d}r$, 或者 $\mathrm{d}\rho/\mathrm{d}r=\alpha r^{\alpha-1}$, 这样

$$\begin{aligned} &\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}=\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}=\alpha r^{\alpha-1}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}=\alpha\rho^{1-\frac{1}{\alpha}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho} \\ &\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}=\alpha\rho^{1-\frac{1}{\alpha}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\alpha\rho^{1-\frac{1}{\alpha}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}=\alpha^2\rho^{2-\frac{2}{\alpha}}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}+\alpha(\alpha-1)\rho^{-\frac{1}{\alpha}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho} \end{aligned}$$

进而

$$\begin{aligned} &\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}u=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\rho^{\beta}v(\rho)=\rho^{\beta}v'+\beta\rho^{\beta-1}v \\ &\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}u=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\left(\rho^{\beta}v'+\beta\rho^{\beta-1}v\right)=\rho^{\beta}v''+2\beta\rho^{\beta-1}v'+\beta(\beta-1)\rho^{\beta-2}v \end{aligned}$$

这样可算出

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2}=\alpha^2\rho^{2+\beta-\frac{2}{\alpha}}v''+\alpha^2\left(2\beta+1-\frac{1}{\alpha}\right)\rho^{1+\beta-\frac{2}{\alpha}}v'+\alpha^2\beta\left(\beta-\frac{1}{\alpha}\right)\rho^{\beta-\frac{2}{\alpha}}v$$

若 $2\beta+1-\dfrac{1}{\alpha}=0$, 则上式中 ν' 项消失. 我们可令

$$\alpha=-\frac{\nu}{\nu'},\quad \beta=-\frac{1}{2}\left(1+\frac{\nu'}{\nu}\right) \tag{15.60}$$

代入径向方程式 (15.58) 得

$$\begin{aligned}&\frac{\hbar^2}{2\mu}\rho^{2+\nu'+2\nu'/\nu}v''+\left\{-\lambda\left(\frac{\nu'}{\nu}\right)^2+E\left(\frac{\nu'}{\nu}\right)^2\rho^{\nu'}\right\}v\\&\quad-\frac{\hbar^2}{2\mu}\rho^{-2}\left[l(l+1)\left(\frac{\nu'}{\nu}\right)^2+\frac{1}{4}\left(\frac{\nu'}{\nu}\right)^2-\frac{1}{4}\right]\rho^{2+\nu'+2\nu'/\nu}v=0\end{aligned} \tag{15.61}$$

如取

$$2+\nu+2\nu'/\nu=0\quad 即\quad \nu'=-\frac{2\nu}{2+\nu} \tag{15.62}$$

则式 (15.61) 成为

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}v''+\left[E'-\lambda\rho^{\nu'}-l'(l'+1)\frac{\hbar^2}{2\mu\rho^2}\right]v=0 \tag{15.63}$$

其中

$$\begin{aligned}&\nu'=-\frac{2\nu}{\nu+2},\qquad l'=\frac{2l+1}{\nu+2}-\frac{1}{2}\\&\lambda'=-\left(\frac{\nu'}{\nu}\right)^2E,\quad E'=-\frac{\nu'}{\nu}\lambda E\end{aligned} \tag{15.64}$$

式 (15.63) 和式 (15.58) 构造相似, 只是 λ', ν', E' 的正负性质分别与 λ, ν, E 相反, 例如

$$\nu,\lambda,E>0\Rightarrow\nu',\lambda',E'<0$$

反之亦然. 由此可知, $\nu,\lambda>0$ 时式 (15.58) 的本征解, 可由式 (15.63) 中 $\nu,\lambda<0$ 的本征解得出. $\nu,\lambda>0$ 时显然有无限多个束缚态能级 $(0<E<\infty)$, 因此, $\nu,\lambda<0$ 时也有无限多个能级 $(E<0)$.

15.12 质量为 μ 的粒子在吸引中心势

$$V(r)=\lambda r^\nu,\quad \lambda<0,-2<\nu<0$$

中运动. 试在准经典近似下求出束缚能级的量子化条件, 并求出能级公式.

解 质量为 μ 的粒子在题给势场中运动, 当 $r\to\infty$, $V\to0$, 因而束缚定态的能量 $E<0$. 准经典近似适用于大量子数情形, 此时 $E\sim0^-$. 按题 6.1 结论, 对题给势场, 在 $E\sim0^-$ 附近粒子存在无限多条束缚态能级.

考虑到势场的球对称性, 可选 CSCO 为 $(H,\boldsymbol{l}^2,l_z)$, 而束缚定态为其共同本征态, 波函数可以写为

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)=R(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{1}{r}u(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) \tag{15.65}$$

其中 Y_{lm} 为球谐函数, $l=0,1,2,\cdots;m=0,\pm1,\pm2,\cdots\pm l$. 而径向波函数满足下面方程:

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}u''+\left[E-\lambda r^\nu-l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u=0 \tag{15.66}$$

根据本题附录式 (15.86), 在 r 很大处径向波函数的渐近形式为

$$u(r)\sim r^{-\nu/4}\sin\left[\int_0^r\sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-V)}\mathrm{d}r-\frac{2l+1}{2\left(\nu+2\right)}\pi+\frac{\pi}{4}\right] \tag{15.67}$$

经典转折点 r_c 满足 $E=V(r_c)$, 由此定出

$$r_c=b=\left(\frac{E}{\lambda}\right)^{1/\nu}>0 \tag{15.68}$$

当 r 从 0 变到 $r_c=b$, $u(r)$ 已经振荡了 n 次 (节点个数)(准经典近似, $n\gg1$), 渐近形式 (15.67) 可以成立; 另一方面, $r=r_c$ 处 $u(r)$ 的位相应该是

$$u(r_c)\sim\cdots\sin\left[\left(n+\frac{3}{4}\right)\pi\right] \tag{15.69}$$

比较式 (15.67) 与式 (15.69), 即得量子化条件①

$$\int_0^{r_c}\sqrt{2\mu\left[E-V\left(r\right)\right]}\mathrm{d}r=\left[n_r+\frac{2l+\nu+3}{2(\nu+2)}\right]\pi\hbar,\quad n_r,l=0,1,2,\cdots \tag{15.70}$$

n_r 为径向量子数.

式 (15.70) 适用于角量子数 l 的一切值它和题 15.10 式 (15.50) 相比, 只是右端添加了

$$\frac{(4l-\nu)\pi\hbar}{4(\nu+2)} \tag{15.71}$$

注意题 15.10 只适用于 $\lambda,\nu>0$, 且限于 s 态, 本题式 (15.70) 则对 $-2<\nu<0$ 情况下的所有束缚态均可适用.

对式 (15.70) 左端积分代入题给的势函数得

$$\int_0^b\sqrt{2\mu\left[E-V\left(r\right)\right]}\mathrm{d}r=\sqrt{2\mu|\lambda|}\int_0^b\sqrt{r^\nu-b^\nu}\mathrm{d}r \tag{15.72}$$

对上式积分作变量变换

$$r^\nu=b^\nu\csc^2\theta \tag{15.73}$$

因而 $\nu r^{\nu-1}\mathrm{d}r=-2b^\nu\csc^2\theta\cot\theta\mathrm{d}\theta$, 也就是

$$\mathrm{d}r=-2\frac{r^{1-\nu}}{\nu}b^\nu\csc^2\theta\cot\theta\mathrm{d}\theta=-\frac{2b}{\nu}\left(\csc\theta\right)^{\frac{2}{\nu}}\cot\theta\mathrm{d}\theta \tag{15.74}$$

这样式 (15.72) 中的积分为

$$\begin{aligned}\int_0^b\sqrt{r^\nu-b^\nu}\mathrm{d}r&=-\frac{2}{\nu}b^{\frac{\nu}{2}+1}\int_0^{\pi/2}\left(\csc\theta\right)^{\frac{2}{\nu}}\cot^2\theta\mathrm{d}\theta\\&=-\frac{2}{\nu}b^{\frac{\nu}{2}+1}\int_0^{\pi/2}\left[\left(\sin\theta\right)^{-\frac{2}{\nu}-2}-\left(\sin\theta\right)^{-\frac{2}{\nu}}\right]\mathrm{d}\theta\\&=-\frac{2}{\nu}b^{\frac{\nu}{2}+1}\frac{\sqrt{\pi}}{2}\left[\frac{\Gamma\left(-1/\nu-1/2\right)}{\Gamma\left(-1/\nu\right)}-\frac{\Gamma\left(-1/\nu+1/2\right)}{\Gamma\left(1-1/\nu\right)}\right]\\&=\frac{\sqrt{\pi}}{\nu}b^{\frac{\nu}{2}+1}\left[\frac{\Gamma\left(-1/\nu-1/2\right)/\nu+\Gamma\left(-1/\nu+1/2\right)}{\Gamma\left(1-1/\nu\right)}\right]\\&=-\frac{\sqrt{\pi}}{2\nu}b^{\frac{\nu}{2}+1}\frac{\Gamma\left(-1/\nu-1/2\right)}{\Gamma\left(1-1/\nu\right)}\end{aligned}$$

① 参看 C.Quigg & J. L. Rosner. Physics Reports,1979, **56**:167~235.

以上用了积分公式 (A.14), 以及 Γ 函数递推关系 $\Gamma(z+1)=z\Gamma(z)$. 把上式代入式 (15.72), 并注意 b 与 E 的关系式 (15.68) 得

$$\begin{aligned}\int_0^b \sqrt{2\mu\left[E-V\left(x\right)\right]}\mathrm{d}x &= \sqrt{2\mu\lambda}\frac{\sqrt{\pi}}{2\nu}b^{\frac{\nu}{2}+1}\frac{\Gamma\left(-1/\nu-1/2\right)}{\Gamma\left(1-1/\nu\right)}\\ &= \frac{\sqrt{\pi}}{2|\nu|}\left(\frac{E}{\lambda}\right)^{1/\nu}\sqrt{2\mu|E|}\frac{\Gamma\left(-1/\nu-1/2\right)}{\Gamma\left(1-1/\nu\right)}\end{aligned} \tag{15.75}$$

上式与式 (15.70) 联立即得 束缚能级 ($E<0$) 公式为

$$E_{n_r l}=-\left|\lambda\right|^{\frac{2}{\nu+2}}\left(\frac{\hbar^2}{2\mu}\right)^{\frac{\nu}{\nu+2}}\left[\sqrt{\pi}\left|\nu\right|\left(2n_r+\frac{2l+\nu+3}{\nu+2}\right)\cdot\frac{\Gamma(1-1/\nu)}{\Gamma(-1/2-1/\nu)}\right]^{\frac{2\nu}{\nu+2}} \tag{15.76}$$

其中 $\lambda<0,\ -2<\nu<0,\ n_r,l=0,1,2,\cdots$.

特例 氢原子 $V(r)=-e^2/r, \nu=-1, \lambda=-e^2$, 利用 $\Gamma(1)=1, \Gamma\left(\frac{1}{2}\right)=\sqrt{\pi}$ 给出

$$E_{n_r l}=-\frac{\mu e^4}{2\hbar^2(n_r+l+1)^2}$$

对于 n_r, l 的各种取值, 上式均与严格解一致.

说明 本来准经典方法用到大量子数极限近似, 如本题推导过程中式 (15.67) 是在 $n\gg 1$ 的条件下得到的, 因此式 (15.70) 本来只适用于 $n\gg 1$ 的情形. 可是对于氢原子情况, 由此得到的结果对所有 n 都正确.

附录 (题给势场下 $E\sim 0^-$ 时束缚态波函数的渐近形式) 考虑势场的球对称性, 束缚态波函数可取式 (15.65) 的形式. 通过量纲分析或者通过观察式 (15.66) 仿题 6.28 作法, 得体系特征长度如下构造

$$x_0=\left(\frac{\hbar^2}{2\mu|\lambda|}\right)^{1/(\nu+2)}$$

将 r 无量纲化, 作变换

$$\rho=\frac{r}{x_0}=r\left(\frac{2\mu|\lambda|}{\hbar^2}\right)^{1/(\nu+2)},\quad u(r)=w(\rho) \tag{15.77}$$

并取 $E=0^-$, 式 (15.66) 变成

$$\frac{\mathrm{d}^2w}{\mathrm{d}\rho^2}+\left[\rho^\nu-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]w=0 \tag{15.78}$$

再作变换

$$z=\frac{2}{\nu+2}\rho^{(\nu+2)/2},\quad w(\rho)=z^{1/(\nu+2)}v(z) \tag{15.79}$$

式 (15.78) 变成

$$\frac{\mathrm{d}^2v}{\mathrm{d}z^2}+\frac{1}{z}\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}z}+\left[1-\left(\frac{2l+1}{\nu+2}\right)^2\frac{1}{z^2}\right]v=0 \tag{15.80}$$

上式为 $\frac{2l+1}{\nu+2}$ 阶的 Bessel 方程.

波函数要求在 $r\to 0$ 处满足自然边界条件, 即 $u(0)=0$, 因此式 (15.80) 的边界条件为 $v(0)=0$. 式 (15.80) 满足这边界条件的解为第一类 Bessel 函数 (Neuman 函数解不满足边界条件, 舍去), 即

$$v(x)=A\mathrm{J}_{(2l+1)/(\nu+2)}(z) \tag{15.81}$$

其中 A 为归一化常数. 这样, 我们已经求得 $E=0^-$ 时径向方程式 (15.66) 的解为

$$u(r)=W(\rho)=z^{1/(\nu+2)}\mathrm{J}_{(2l+1)/(\nu+2)}(z) \tag{15.82}$$

利用 Bessel 函数的渐近表示式, 可知当 $r\to 0$(即 $\rho\to 0, z\to 0$) 时

$$u(r)\sim z^{1/(\nu+2)}z^{(2l+1)/(\nu+2)}\sim z^{(2l+2)/(\nu+2)}\sim r^{l+1} \tag{15.83}$$

当 $r\to\infty$(即 $\rho\to\infty, z\to\infty$) 时

$$\begin{aligned} u(r) &\sim z^{1/(\nu+2)}\sqrt{\frac{2}{\pi z}}\cos\left(z-\frac{2l+1}{\nu+2}\cdot\frac{\pi}{2}-\frac{\pi}{4}\right) \\ &\sim \rho^{-\nu/4}\cos\left[\frac{2}{\nu+2}\rho^{(\nu+2)/2}-\frac{2l+1}{\nu+2}\cdot\frac{\pi}{2}-\frac{\pi}{4}\right] \end{aligned} \tag{15.84}$$

$E=0^-$ 时

$$\begin{aligned} \int_0^r\sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-V)}\mathrm{d}r &= \left(\frac{2\mu|\lambda|}{\hbar^2}\right)^{1/2}\int_0^r r^{\nu/2}\mathrm{d}r \\ &= \left(\frac{2\mu|\lambda|}{\hbar^2}\right)^{1/2}\frac{2}{\nu+2}r^{(\nu+2)/2}=\frac{2}{\nu+2}\rho^{(\nu+2)/2} \end{aligned} \tag{15.85}$$

所以当 $E=0^-$ 和 $r\to\infty$ 时, 式 (15.84) 可以写成如下形式

$$\begin{aligned} u(r) &\sim r^{-\nu/4}\cos\left[\int_0^r\sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-V)}\mathrm{d}r-\frac{2l+1}{\nu+2}\cdot\frac{\pi}{2}-\frac{\pi}{4}\right] \\ &\sim r^{-\nu/4}\sin\left[\int_0^r\sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-V)}\mathrm{d}r-\frac{2l+1}{2(\nu+2)}\pi+\frac{\pi}{4}\right] \end{aligned} \tag{15.86}$$

其中 V 为题给的势函数.

第 16 章　二次量子化

16.1　设全同 Fermi 子体系在轴对称势场中运动. 单粒子能级 ε_ν 为二重简并, ε_ν 能级上的两个简并态分别用 $\nu, \bar{\nu}$ 标记. 令

$$\begin{aligned} S_\nu^\dagger &= a_\nu^\dagger a_{\bar{\nu}}^\dagger, \quad S_\nu = a_{\bar{\nu}} a_\nu \\ \hat{n}_\nu &= a_\nu^\dagger a_\nu + a_{\bar{\nu}}^\dagger a_{\bar{\nu}} \end{aligned} \tag{16.1}$$

$S_\nu^\dagger(S_\nu)$ 代表 ε_ν 能级上一对粒子的产生 (湮灭) 算符, $\hat{n}_\nu$ 表示 ε_ν 能级上的粒子数算符. 证明

$$\left[S_\mu, S_\nu^\dagger\right] = \left(1 - \hat{n}_\nu\right) \delta_{\mu\nu} \tag{16.2a}$$

$$\left[\hat{n}_\mu, S_\nu^\dagger\right] = 2 S_\mu^\dagger \delta_{\mu\nu} \tag{16.2b}$$

$$\left[\hat{n}_\mu, S_\nu\right] = -2 S_\mu \delta_{\mu\nu} \tag{16.2c}$$

证明　Fermi 子产生、湮灭算符基本对易关系式为

$$\begin{aligned} \left[a_\mu, a_\nu^\dagger\right]_+ &= \delta_{\mu\nu} \\ \left[a_\mu, a_\nu\right]_+ &= \left[a_\mu^\dagger, a_\nu^\dagger\right]_+ = 0 \end{aligned} \tag{16.3}$$

这是证明它们构成的 S_μ、$S_\mu^\dagger$ 以及 $\hat{n}_\mu$ 相互之间对易关系的出发点. 上式可见, 任何两个属于不同单粒子态 ($\mu \neq \nu$) 的产生、湮灭算符是反对易的. 此外易验证下列恒等式成立:

$$[AB, C] = A\,[B, C]_+ - [A, C]_+\, B \tag{16.4a}$$

$$[AB, C] = A\,[B, C] + [A, C]\, B \tag{16.4b}$$

或者等价的

$$\begin{aligned} [A, BC] &= [A, B]_+\, C - B\,[A, C]_+ \\ [A, BC] &= [A, B]\, C + B\,[A, C] \end{aligned}$$

按题给定义

$$\begin{aligned} \left[S_\mu, S_\nu^\dagger\right] &= \left[a_{\bar{\mu}} a_\mu, a_\nu^\dagger a_{\bar{\nu}}^\dagger\right] = a_{\bar{\mu}} \left[a_\mu, a_\nu^\dagger a_{\bar{\nu}}^\dagger\right] + \left[a_{\bar{\mu}}, a_\nu^\dagger a_{\bar{\nu}}^\dagger\right] a_\mu \\ &= a_{\bar{\mu}} \left[a_\mu, a_\nu^\dagger\right]_+ a_{\bar{\nu}}^\dagger - 0 - a_\nu^\dagger \left[a_{\bar{\mu}}, a_{\bar{\nu}}^\dagger\right]_+ a_\mu + 0 \\ &= a_{\bar{\mu}} \delta_{\mu\nu} a_{\bar{\nu}}^\dagger - a_\nu^\dagger \delta_{\mu\nu} a_\mu = \delta_{\mu\nu} \left(a_{\bar{\nu}} a_{\bar{\nu}}^\dagger - a_\nu^\dagger a_\nu\right) \\ &= \delta_{\mu\nu} \left(1 - a_{\bar{\nu}}^\dagger a_{\bar{\nu}} - a_\nu^\dagger a_\nu\right) = \left(1 - \hat{n}_\nu\right) \delta_{\mu\nu} \end{aligned}$$

此即式 (16.2a). 类似地

$$\begin{aligned} \left[\hat{n}_\mu, S_\nu^\dagger\right] &= \left[a_\mu^\dagger a_\mu + a_{\bar{\mu}}^\dagger a_{\bar{\mu}}, a_\nu^\dagger a_{\bar{\nu}}^\dagger\right] = \left[a_\mu^\dagger a_\mu, a_\nu^\dagger a_{\bar{\nu}}^\dagger\right] + \left[a_{\bar{\mu}}^\dagger a_{\bar{\mu}}, a_\nu^\dagger a_{\bar{\nu}}^\dagger\right] \\ &= \left[a_\mu^\dagger a_\mu, a_\nu^\dagger\right] a_{\bar{\nu}}^\dagger + 0 + a_\nu^\dagger \left[a_{\bar{\mu}}^\dagger a_{\bar{\mu}}, a_{\bar{\nu}}^\dagger\right] + 0 \\ &= a_\mu^\dagger \left[a_\mu, a_\nu^\dagger\right]_+ a_{\bar{\nu}}^\dagger + 0 + a_\nu^\dagger a_{\bar{\mu}}^\dagger \left[a_{\bar{\mu}}, a_{\bar{\nu}}^\dagger\right]_+ + 0 \\ &= a_\mu^\dagger \delta_{\mu\nu} a_{\bar{\nu}}^\dagger + a_\nu^\dagger a_{\bar{\mu}}^\dagger \delta_{\mu\nu} = 2 a_\nu^\dagger a_{\bar{\nu}}^\dagger \delta_{\mu\nu} = 2 S_\nu^\dagger \delta_{\mu\nu} \end{aligned}$$

此即式 (16.2b). 既然式 (16.2b) 成立, 则对此式两边取 Hermite 共轭, 即得

$$[S_\mu, \hat{n}_\nu] = 2S_\nu \delta_{\mu\nu} \quad \text{即} \quad [\hat{n}_\mu, S_\nu] = -2S_\mu \delta_{\mu\nu}$$

此即式 (16.2c), 证毕.

16.2 同上题. 设粒子之间有对力作用, Hamilton 量为

$$H = \sum_\nu \varepsilon_\nu (a_\nu^\dagger a_\nu + a_{\bar{\nu}}^\dagger a_{\bar{\nu}}) - G \sum_{\mu\nu} S_\mu^\dagger S_\nu$$

G 为对力强度. 设体系只有一对粒子, 求其能量本征值和本征态 (真空态能量取为 0).

提示: 分两类状态, 即 (a) 两个粒子“不配对”, 分别处于不同单粒子能级上, 用 $a_\mu^\dagger a_\nu^\dagger |0\rangle$ 描述 ($\mu \neq \nu$), 能量为 $\varepsilon_\mu + \varepsilon_\nu$. (b) 两个粒子“配对”, 用 $|\psi\rangle = A^\dagger |0\rangle = \sum_\nu c_\nu S_\nu^\dagger |0\rangle$ 描述, 代入 $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$, 利用 $\left[H, A^\dagger\right]|0\rangle = HA^\dagger|0\rangle = EA^\dagger|0\rangle$ 以及上题给出的对易式, 证明能量本征值 E 由下式确定

$$\sum_\nu \frac{1}{E - 2\varepsilon_\nu} = -\frac{1}{G}$$

解 按照提示, 分两种情况讨论.

(a) 两个粒子“不配对”, 分别处于不同单粒子能级 ε_μ, $\varepsilon_\nu (\mu \neq \nu)$ 上, 体系状态表示为

$$|\mu, \nu\rangle = a_\mu^\dagger a_\nu^\dagger |0\rangle \tag{16.5}$$

$|0\rangle$ 表示真空态, 按题设真空态能量取为 0. 根据 Fermi 子产生/湮灭算符基本对易式 (16.3) 即得

$$\sum_{\mu'\nu'} S_{\mu'}^\dagger S_{\nu'} |\mu, \nu\rangle = a_\mu^\dagger a_{\bar{\mu}}^\dagger a_{\bar{\nu}} a_\nu a_\mu^\dagger a_\nu^\dagger |0\rangle = 0$$

$$\sum_{\nu'} \varepsilon_{\nu'} (a_{\nu'}^\dagger a_{\nu'} + a_{\bar{\nu}'}^\dagger a_{\bar{\nu}'}) |\mu, \nu\rangle = \sum_{\nu'} \varepsilon_{\nu'} (a_{\nu'}^\dagger a_{\nu'} + a_{\bar{\nu}'}^\dagger a_{\bar{\nu}'}) a_\mu^\dagger a_\nu^\dagger |0\rangle = (\varepsilon_\mu + \varepsilon_\nu) |\mu, \nu\rangle$$

可见这种情况下“对力”项不起作用, 即有 $H = |\mu, \nu\rangle = (\varepsilon_\mu + \varepsilon_\nu) |\mu, \nu\rangle$, 体系能级为两个单粒子能量之和

$$E = \varepsilon_\mu + \varepsilon_\nu$$

而 $|\mu, \nu\rangle$ 为相应的能量本征态.

(b) 两个粒子“配对”, 例如处于同一单粒子能级 ε_ν 上

$$|\nu, \bar{\nu}\rangle = a_\nu^\dagger a_{\bar{\nu}}^\dagger |0\rangle \tag{16.6}$$

在“对力”项作用下

$$\begin{aligned} \sum_{\mu\nu'} S_\mu^\dagger S_{\nu'} |\nu, \bar{\nu}\rangle &= \sum_\mu a_\mu^\dagger a_{\bar{\mu}}^\dagger a_{\bar{\nu}} a_\nu |\nu, \bar{\nu}\rangle = \sum_\mu a_\mu^\dagger a_{\bar{\mu}}^\dagger a_{\bar{\nu}} a_\nu a_\nu^\dagger a_{\bar{\nu}}^\dagger |0\rangle \\ &= \sum_\mu a_\mu^\dagger a_\mu^\dagger |0\rangle = \sum_\mu |\mu, \bar{\mu}\rangle \end{aligned} \tag{16.7}$$

设体系能量本征态的一般形式为

$$|\psi\rangle = \sum_\lambda C_\lambda |\lambda, \bar{\lambda}\rangle = \sum_\lambda C_\lambda a_\lambda^\dagger a_{\bar{\lambda}}^\dagger |0\rangle \equiv A^\dagger |0\rangle \tag{16.8}$$

其中 $A^+=\sum_\lambda C_\lambda a_\lambda^+ a_{\bar{\lambda}}^+$ 能量本征方程为

$$HA^\dagger|0\rangle = EA^\dagger|0\rangle \tag{16.9}$$

式 (16.8) 中 C_λ 为待定系数 (即粒子数表象中的波函数). 利用题 16.1 所证明的式 (16.2a,16.2b), 可得

$$\begin{aligned}\left[H,A^\dagger\right]=&\sum_{\mu,\lambda}\varepsilon_\mu C_\lambda\left[\hat{n}_\mu,S_\lambda^\dagger\right]-G\sum_{\mu,\nu,\lambda}C_\lambda\left[S_\mu^\dagger S_\nu,S_\lambda^\dagger\right]\\=&2\sum_\nu\varepsilon_\nu C_\nu S_\nu^\dagger-G\sum_{\mu,\nu}C_\nu S_\mu^\dagger(1-\hat{n}_\nu)\end{aligned} \tag{16.10}$$

真空态能量为 0, 即 $H|0\rangle=0$, 利用式 (16.10) 可得

$$\begin{aligned}H|\psi\rangle=&HA^\dagger|0\rangle=\left[H,A^\dagger\right]|0\rangle=2\sum_\nu\varepsilon_\nu C_\nu S_\nu^\dagger|0\rangle-G\sum_{\mu,\nu}C_\nu S_\mu^\dagger(1-\hat{n}_\nu)|0\rangle\\=&2\sum_\nu\varepsilon_\nu C_\nu|\nu,\bar{\nu}\rangle-G\sum_{\mu,\nu}C_\nu|\mu,\bar{\mu}\rangle\end{aligned}$$

这样能量本征方程 (16.9) 可表示为

$$2\sum_\nu\varepsilon_\nu C_\nu|\nu,\bar{\nu}\rangle-G\sum_{\mu,\nu}C_\nu|\mu,\bar{\mu}\rangle=E\sum_\nu C_\nu|\nu,\bar{\nu}\rangle \tag{16.11}$$

以 $\langle\lambda,\bar{\lambda}|$ 左乘式 (16.10) 取内积, 得到

$$(E-2\varepsilon_\lambda)C_\lambda+G\sum_\nu C_\nu=0 \tag{16.12}$$

其中 $\lambda=1,2,\cdots$. 上式为一个关于 C_λ 的线性方程组, 它也可以写成

$$\sum_\nu\left[G+(E-2\varepsilon_\nu)\delta_{\nu\lambda}\right]C_\nu=0 \tag{16.12'}$$

此即确定能级和能量本征态的线性方程组.

式 (16.12') 为关于 C_λ 的线性方程组, 它存在非平凡解 (C_λ 不全为 0) 的条件是其系数行列式为零, 即得下列久期方程式

$$\det\left|G+(E-2\varepsilon_\nu)\delta_{\nu\lambda}\right|=0 \tag{16.13}$$

此即能级方程. 再令

$$x_\nu=\frac{1}{G}(E-2\varepsilon_\nu) \tag{16.14}$$

能级方程又可以化成

$$\det\left|1+x_\nu\delta_{\nu\lambda}\right|=0 \tag{16.13'}$$

根据题 11.23 附录 (P.274~275), 式 (16.13') 可以化简成

$$\sum_\nu\frac{1}{x_\nu}=-1 \tag{16.15}$$

也就是

$$\sum_\nu\frac{1}{E-2\varepsilon_\nu}=-\frac{1}{G} \tag{16.15'}$$

体系能级可由此式解出 (一般要用数值解法或近似解法), 记为 E_i, $i=1,2,\cdots$. 对于某个 E_i, 由式 (16.12), 就可以求出各 C_λ 为

$$C_{i\lambda}=-G\sum_{\nu}\frac{C_\nu}{E_i-2\varepsilon_\lambda}=\frac{C}{E_i-2\varepsilon_\lambda}$$

其中 $\lambda,i=1,2,3,\cdots$, C 为归一化常数. 利用归一化条件

$$\sum_{\lambda}|C_{i\lambda}|^2=1$$

即可求出

$$C_{i\lambda}=\frac{1}{E_i-2\varepsilon_\lambda}\left[\sum_{\nu}(E_i-2\varepsilon_\lambda)^{-2}\right]^{-1/2}$$

而相应于 E_i 的能量本征态为

$$|\psi_i\rangle=\sum_{\lambda}C_{i\lambda}\left|\lambda,\bar{\lambda}\right\rangle=\sum_{\lambda}C_{i\lambda}a_\lambda^\dagger a_{\bar{\lambda}}^\dagger|0\rangle \tag{16.16}$$

16.3 设 Fermi 子体系在中心力场中运动. 单粒子能级用 ε_j 表示, j 为粒子的角动量, 单粒子态记为 $a_{jm}^\dagger|0\rangle$, $m=j,j-1,\cdots,-j+1,-j$, 能级为 $(2j+1)$ 重简并. 考虑有一对粒子处于 ε_j 能级上, 角动量耦合为 $J=0$, 记为 $|jj00\rangle$. 试用产生算符把 $|jj00\rangle$ 表示出来.

解 Fermi 子产生、湮灭算符基本对易关系

$$\begin{aligned}&\left[a_{jm},a_{jm'}^\dagger\right]_+=a_{jm}a_{jm'}^\dagger+a_{jm'}^\dagger a_{jm}=\delta_{mm'}\\&\left[a_{jm},a_{jm'}\right]_+=0,\quad\left[a_{jm}^\dagger,a_{jm'}^\dagger\right]_+=0\end{aligned} \tag{16.17}$$

题给单粒子态记为

$$a_{jm}^\dagger|0\rangle=|jm\rangle \tag{16.18}$$

对于 2 粒子态, 当 $|jm\rangle$ 和 $|jm'\rangle$ 态各有一个 Fermi 子时, 体系状态为 $a_{jm}^\dagger a_{jm'}^\dagger|0\rangle$, 这里已经计入粒子的交换对称性. 如果需要明确表示第一个、第二个粒子处在哪个单粒子态的情况, 则该 2 粒子态又可表示为

$$a_{jm}^\dagger a_{jm'}^\dagger|0\rangle=|jm,jm'\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[|jm\rangle_1|jm'\rangle_2-|jm\rangle_2|jm'\rangle_1\right] \tag{16.19}$$

$|jj00\rangle$ 态在无耦合表象中的表示式为

$$|jj00\rangle=\sum_{m_1m_2}\langle jm_1jm_2|jj00\rangle|jm_1\rangle_1|jm_2\rangle_2=\sum_m\langle jmj-m|jj00\rangle_1|jm\rangle_1|j-m\rangle_2 \tag{16.20}$$

其中 $\langle jm_1jm_2|jj00\rangle$ 等为 CG 系数, 按 CG 系数性质

$$\langle jmj-m|00\rangle=(-1)^{j-m}/\sqrt{2j+1}\langle jm00|jm\rangle=(-1)^{j-m}/\sqrt{2j+1}$$

这样式 (16.20) 写为

$$|jj00\rangle=\sum_{m=-j}^{j}\frac{(-1)^{j-m}}{\sqrt{2j+1}}|jm\rangle_1|j-m\rangle_2 \tag{16.21}$$

由于 j, m 均为半奇数, 当 $m<0$, 如令 $m=-m'$, 就有

$$\begin{aligned}(-1)^{j-m}\left|jm\right\rangle_1\left|j,-m\right\rangle_2 &= (-1)^{j+m'}\left|j,-m'\right\rangle_1\left|j,m'\right\rangle_2\\ &= -(-1)^{j-m'}\left|j,-m'\right\rangle_1\left|j,m'\right\rangle_2\end{aligned}$$

因此式 (16.21) 又可写成

$$\left|jj00\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2j+1}}\sum_{m>0}(-1)^{j-m}\left(\left|jm\right\rangle_1\left|j,-m\right\rangle_2 - \left|j,-m\right\rangle_1\left|j,m\right\rangle_2\right) \tag{16.21'}$$

再利用式 (16.19), 上式又可进一步写为

$$\left|jj00\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{\Omega_j}}\sum_{m>0}(-1)^{j-m}a^\dagger_{jm}a^\dagger_{j,-m}\left|0\right\rangle \tag{16.22}$$

其中

$$\Omega_j = j+\frac{1}{2}$$

为能级 ε_j 上 $m>0$ 的状态数, 即能容纳的粒子对数.

$a^\dagger_{jm}\left|0\right\rangle$ 态的时间反演态为

$$\left|j\bar{m}\right\rangle = (-1)^{j-m}\left|j,-m\right\rangle = (-1)^{j-m}a^\dagger_{j-m}\left|0\right\rangle \tag{16.23}$$

将该态相应的产生、湮灭算符记为 $a^\dagger_{j\bar{m}}$, $a_{j\bar{m}}$, 则

$$a^\dagger_{j\bar{m}} = (-1)^{j-m}a^\dagger_{j-m},\quad a_{j\bar{m}} = (-1)^{j-m}a_{j-m} \tag{16.24}$$

这样, 式 (16.22) 可以写成

$$\left|jj00\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{\Omega_j}}\sum_{m>0}a^\dagger_{jm}a^\dagger_{j\bar{m}}\left|0\right\rangle = S^\dagger_j\left|0\right\rangle \tag{16.25}$$

其中

$$S^\dagger_j = \frac{1}{\sqrt{\Omega_j}}\sum_{m>0}a^\dagger_{jm}a^\dagger_{j\bar{m}} \tag{16.26}$$

$S^\dagger_j$ 是能级 ε_j 上角动量耦合为 0 的 Fermi 子对的产生算符. 而式 (16.25) 称为“配对态”.

16.4 同上题, 令

$$\begin{aligned}&S^\dagger_j = \frac{1}{\sqrt{\Omega_j}}\sum_{m>0}a^\dagger_{jm}a^\dagger_{j\bar{m}},\quad S_j = \frac{1}{\sqrt{\Omega_j}}\sum_{m>0}a_{j\bar{m}}a_{jm}\\ &\hat{n}_j = \sum_m a^\dagger_{jm}a_{jm} = \sum_{m>0}\left(a^\dagger_{jm}a_{jm}+a^\dagger_{j\bar{m}}a_{j\bar{m}}\right)\end{aligned} \tag{16.27}$$

证明

$$\left[\hat{n}_j, S^\dagger_j\right] = 2S^\dagger_j \tag{16.28a}$$

$$\left[\hat{n}_j, S_j\right] = -2S_j \tag{16.28b}$$

$$\left[S_j, S^\dagger_j\right] = 1-\hat{n}_j/\Omega_j \tag{16.28c}$$

试与 Bose 子对易关系比较.

证明 按照题 16.3 以及题 16.7, 本题所给出的角动量耦合为 0 的 Fermi 子对的产生算符、湮灭算符以及粒子数算符也可用题 16.7 式 (16.44) 定义的准自旋 (quasispin) 表示

$$S_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{\Omega_j}} \sum_{m>0} a_{jm}^\dagger a_{j\bar{m}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{\Omega_j}} \sum_{m>0} (-1)^{j+m} a_{jm}^\dagger a_{j,-m}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{\Omega_j}} \sum_{m>0} S_{m+}$$

$$S_j = \frac{1}{\sqrt{\Omega_j}} \sum_{m>0} S_{m-}$$

$$\hat{n}_j = \sum_{m>0} \left(a_{jm}^\dagger a_{jm} + a_{j,-m}^\dagger a_{j,-m} \right) = \sum_{m>0} (2S_{m0} + 1) = \Omega_j + 2 \sum_{m>0} S_{m0}$$

相应于不同 m 的准自旋算符互相对易, 而同一 m 的准自旋算符满足式 (16.45), 这样

$$\left[\hat{n}_j, S_j^\dagger \right] = \frac{1}{\sqrt{\Omega_j}} \sum_{m>0} [2S_{m0} + 1, S_{m+}] = \frac{2}{\sqrt{\Omega_j}} \sum_{m>0} S_{m+} = 2S_j^\dagger$$

这样证明了式 (16.28a), 而对该式取 Hermite 共轭即给出式 (16.28b), 进而

$$\left[S_j, S_j^\dagger \right] = \frac{1}{\Omega_j} \sum_{m>0} [S_{m-}, S_{m+}] = -\frac{2}{\Omega_j} \sum_{m>0} S_{m0} = 1 - \hat{n}_j / \Omega_j$$

这样证明了式 (16.28c).

$S_j^\dagger$、S_j 是能级 ε_j 上角动量耦合为 0 的一对 Fermi 子的产生、湮灭算符, 能否将这对 Fermi 子看成一个 Bose 子呢? 亦即是否相当于 Bose 子的产生、湮灭算符? 式 (16.28c) 表明, 只有当 $n_j \ll \Omega_j$ 时 (能级简并度很大, 而粒子数又很小) 才可以近似地这样看. 这种条件在实际的原子或原子核中是很难成立的, 这反映出在原子结构和原子核结构中 Pauli 原理是重要的.

16.5 同题 16.3.(a) 设 ε_j 能级上有两对 Fermi 子, 证明归一化的波函数可表示为

$$\frac{1}{\sqrt{2\left(1 - 1/\Omega_j\right)}} \left(S_j^\dagger \right)^2 |0\rangle$$

(b) 设 ε_j 能级上有 k 对粒子, 证明归一化的波函数可表示成

$$\left[k! \prod_{\nu=0}^{k-1} \left(1 - \frac{\nu}{\Omega_j} \right) \right]^{-1/2} \left(S_j^\dagger \right)^k |0\rangle$$

证明 (a)$S_j^\dagger$、S_j 是能级 ε_j 上角动量耦合为 0 的一对 Fermi 子的产生、湮灭算符, 式 (16.28c) 即

$$S_j S_j^\dagger = S_j^\dagger S_j + 1 - \frac{1}{\Omega_j} \hat{n}_j \tag{16.28c'}$$

上式两边对真空态 $|0\rangle$ 取平均值得到

$$\langle 0 | S_j S_j^\dagger | 0 \rangle = \langle 0 | S_j^\dagger S_j + 1 - \frac{1}{\Omega_j} \hat{n}_j | 0 \rangle = \langle 0 | 0 \rangle = 1 \tag{16.29}$$

这表明 $S_j^\dagger |0\rangle$ 是归一化的一对 Fermi 子的波函数, 也即式 (16.25) 所定义的 "配对" 态. 对于 $j \neq j'$, 有

$$\langle 0 | S_{j'} S_j^+ | 0 \rangle = \langle 0 | S_j^+ S_{j'} | 0 \rangle = 0$$

上式与式 (16.29) 可以合写为

$$\langle 0 | S_{j'} S_j^+ | 0 \rangle = S_{jj'} \tag{16.29'}$$

即 $S_j^+|0\rangle$ 具有正交归一性.

利用式 (16.28a), 可得

$$\begin{aligned}
&\hat{n}_j S_j^\dagger |0\rangle = \left(S_j^\dagger \hat{n}_j + 2S_j^\dagger\right)|0\rangle = 2S_j^\dagger |0\rangle \\
&\hat{n}_j \left(S_j^\dagger\right)^2 |0\rangle = \left(S_j^\dagger \hat{n}_j + 2S_j^\dagger\right) S_j^\dagger |0\rangle = 4\left(S_j^\dagger\right)^2 |0\rangle \\
&\cdots\cdots \\
&\hat{n}_j \left(S_j^\dagger\right)^k |0\rangle = \left(S_j^\dagger \hat{n}_j + 2S_j^\dagger\right)\left(S_j^\dagger\right)^{k-1} |0\rangle = 2k\left(S_j^\dagger\right)^k |0\rangle
\end{aligned} \tag{16.30}$$

以上结果表明, $\left(S_j^\dagger\right)^k |0\rangle$ 是能级 ε_j 上有 k 对 Fermi 子的态 (未归一化).

对于两对 Fermi 子的情形. 利用式 (16.28c′,16.30), 可得

$$\begin{aligned}
\langle 0|\left(S_j\right)^2\left(S_j^\dagger\right)^2|0\rangle &= \langle 0|S_j\left(S_j^\dagger S_j + 1 - \frac{1}{\Omega_j}\right)S_j^\dagger|0\rangle \\
&= 1 - \frac{2}{\Omega j} + \langle 0|\left(S_j S_j^\dagger\right)^2|0\rangle = 2 - \frac{2}{\Omega_j}
\end{aligned}$$

所以, 归一化的两对 Fermi 子态为

$$\frac{1}{\sqrt{2(1-1/\Omega_j)}}\left(S_j^\dagger\right)^2|0\rangle \tag{16.31}$$

(b) 设 ε_j 能级上有 k 对粒子, 根据式 (16.30) 相应的状态为 $\left(S_j^\dagger\right)^k|0\rangle$, 现需要求该态的模长. 反复利用式 (16.28c′) 可得

$$\begin{aligned}
S_j\left(S_j^\dagger\right)^k &= S_j^\dagger S_j\left(S_j^\dagger\right)^{k-1} + \left(1 - \frac{1}{\Omega_j}\hat{n}_j\right)\left(S_j^\dagger\right)^{k-1} \\
&= (S_j^\dagger)^2 S_j (S_j^\dagger)^{k-2} + S_j^\dagger\left(1 - \frac{1}{\Omega_j}\hat{n}_j\right)\left(S_j^\dagger\right)^{k-2} + \left(1 - \frac{1}{\Omega_j}\hat{n}_j\right)\left(S_j^\dagger\right)^{k-1} = \cdots \\
&= (S_j^\dagger)^k S_j + \left(S_j^\dagger\right)^{k-1}\left(1 - \frac{1}{\Omega_j}\hat{n}_j\right) + \left(S_j^\dagger\right)^{k-2}\left(1 - \frac{1}{\Omega_j}\hat{n}_j\right)S_j^\dagger + \cdots \\
&\quad + \left(1 - \frac{1}{\Omega_j}\hat{n}_j\right)\left(S_j^\dagger\right)^{k-1}
\end{aligned}$$

将上式作用于真空态 $|0\rangle$, 利用 $S_j|0\rangle = 0$ 及式 (16.30), 第一项贡献为 0, 其他各项中 $\hat{n}_j$ 分别变成本征值

$$\hat{n}_j = 0, 2, 4, \cdots, 2(k-1)$$

因此得到

$$\begin{aligned}
S_j\left(S_j^\dagger\right)^k|0\rangle &= \left[1 + \left(1 - \frac{2}{\Omega_j}\right) + \left(1 - \frac{4}{\Omega_j}\right) + \cdots + \left(1 - \frac{2k-2}{\Omega_j}\right)\right]\left(S_j^\dagger\right)^{k-1}|0\rangle \\
&= k\left(1 - \frac{k-1}{\Omega_j}\right)\left(S_j^\dagger\right)^{k-1}|0\rangle
\end{aligned} \tag{16.32}$$

由此立刻得到

$$\langle 0|\left(S_j\right)^k\left(S_j^\dagger\right)^k|0\rangle = k\left(1 - \frac{k-1}{\Omega_j}\right)\langle 0|\left(S_j\right)^{k-1}\left(S_j^\dagger\right)^{k-1}|0\rangle \tag{16.33}$$

如 $k = \Omega_j + 1$, 则 $\left(S_j^\dagger\right)^k|0\rangle = 0$. 从而当 $k > \Omega_j$ 时, $\left(S_j^\dagger\right)^k|0\rangle = 0$. 因此式 (16.30) 限于 $k \leqslant \Omega_j$.

利用式 (16.33) 依次递推, 并在最后利用式 (16.29), 得 ε_j 能级上 k 对粒子态 $\left(S_j^\dagger\right)^k|0\rangle$ 的模平方为

$$\langle 0|\left(S_j\right)^k\left(S_j^\dagger\right)^k|0\rangle = k!\prod_{\nu=0}^{k-1}\left(1-\frac{\nu}{\Omega_j}\right) \tag{16.34}$$

这样我们得到在 ε_j 能级上有 k 对粒子的归一化态为

$$\left[k!\prod_{\nu=0}^{k-1}\left(1-\frac{\nu}{\Omega_j}\right)\right]^{-1/2}\left(S_j^\dagger\right)^k|0\rangle \quad (k\leqslant\Omega_j)$$

证毕.

说明 作为对照, 处于相同单粒子态的 k 个 Bose 子, 其归一化波函数为

$$\frac{1}{\sqrt{k!}}\left(a^\dagger\right)^k|0\rangle$$

其中 $a^\dagger$ 为 Bose 子产生算符.

16.6 同题 16.3. 设粒子之间还有对力作用, Hamilton 量为

$$H=\sum_{jm}\varepsilon_j a_{jm}^\dagger a_{jm}-G\sum_{jj'}S_j^\dagger S_{j'}$$

设体系由一对粒子组成. 其配对态的一般形式为

$$A^\dagger|0\rangle=\sum_j c_j S_j^\dagger|0\rangle$$

利用题 16.4 证明了的关系式, 证明能量本征值 E 由下式确定:

$$\sum_j\frac{\Omega_j}{E-2\varepsilon_j}=-\frac{1}{G}$$

提示 计算 $[H,A^\dagger]$, 代入 $[H,A^\dagger]|0\rangle=HA^\dagger|0\rangle=EA^\dagger|0\rangle$. [参阅 J.Högaasen-Feldman, Nucl. Phys. 28(1961), 258.]

证明 利用题 16.4 定义式 (16.27), 题给 Hamilton 量可以表示为

$$H=\sum_j\varepsilon_j\hat{n}_j-G\sum_{jj'}S_j^\dagger S_{j'} \tag{16.35}$$

它和 $A^\dagger$ 的对易关系式为

$$[H,A^\dagger]=\left[\sum_j\varepsilon_j\hat{n}_j-G\sum_{jj'}S_j^\dagger S_{j'},\sum_{j''}c_{j''}S_{j''}^\dagger\right]$$

上式牵涉到 $\hat{n}_j$、$S_j^\dagger$ 以及 S_j 之间的对易关系. 利用 Fermi 子产生、湮灭算符的基本对易关系可知, 对于不同 j, 这 3 个算符之间相互对易, 对于同一 j, 可利用题 16.4 式 (16.28), 这样

$$[H,A^\dagger]=\sum_j 2\varepsilon_j c_j S_j^\dagger-G\sum_{jj'}S_j^\dagger c_{j'}\left(1-\frac{\hat{n}_{j'}}{\Omega_{j'}}\right) \tag{16.36}$$

按题设, 体系由一对粒子组成, 其配对态的一般形式为

$$|\psi\rangle=A^\dagger|0\rangle=\sum_j c_j S_j^\dagger|0\rangle \tag{16.37}$$

能量本征方程为

$$HA^{\dagger}\left|0\right\rangle = EA^{\dagger}\left|0\right\rangle \tag{16.38}$$

式 (16.37) 中 c_j 为待定系数 (即粒子数表象中的波函数). 真空态能量为 0, 即 $H\left|0\right\rangle = 0$, 所以

$$\begin{aligned} H\left|\psi\right\rangle &= HA^{\dagger}\left|0\right\rangle = \left[H, A^{\dagger}\right]\left|0\right\rangle = 2\sum_{j'}\varepsilon_{j'}c_{j'}S_{j'}^{\dagger}\left|0\right\rangle - G\sum_{j,j'}c_{j'}S_{j}^{\dagger}\left(1-\frac{\hat{n}_j}{\Omega_j}\right)\left|0\right\rangle \\ &= 2\sum_{j'}\varepsilon_{j'}c_{j'}S_{j+}^{+}\left|0\right\rangle - G\sum_{j,j'}c_{j'}S_{j}^{+}\left|0\right\rangle \end{aligned}$$

这样能量本征方程 (16.38) 可表示为

$$2\sum_{j'}\varepsilon_{j'}c_{j'}S_{j'}^{+}\left|0\right\rangle - G\sum_{j,j'}c_{j'}S_{j}^{+}\left|0\right\rangle = E\sum_{j'}c_{j'}S_{j'}^{+}\left|0\right\rangle \tag{16.39}$$

以 $\langle 0|S_j$ 左乘上式 (取内积), 利用式 (16.29′) 得到

$$\left(E-2\varepsilon_j\right)c_j + G\sum_{j'}c_{j'} = 0, \tag{16.40}$$

其中 $j = 1/2, 3/2, \cdots$. 上式为一个关于 c_j 的线性方程组, 它也可以写成

$$\sum_{j'}\left[G + (E-2\varepsilon_{j'})\delta_{j'j}\right]c_{j'} = 0 \tag{16.40'}$$

此即确定能级和能量本征态的线性方程组.

式 (16.40′) 为关于 c_j 的线性方程组, 它存在非平凡解 (c_j 不全为 0) 的条件是其系数行列式为零, 即得下列久期方程式

$$\det\left|G + (E-2\varepsilon_{j'})\delta_{j'j}\right| = 0 \tag{16.41}$$

此即能级方程. 再令

$$x_{j'} = \frac{1}{G}(E-2\varepsilon_{j'}) \tag{16.42}$$

能级方程又可以化成

$$\det\left|1 + x_{j'}\delta_{j'j}\right| = 0 \tag{16.41'}$$

根据题 16.2 附录, 式 (16.41′) 可以化简成

$$\sum_{j'}\frac{1}{x_{j'}} = -1 \tag{16.43}$$

也就是

$$\sum_{j}\frac{1}{E-2\varepsilon_j} = -\frac{1}{G} \tag{16.43'}$$

体系能级可由此式解出 (一般要用数值解法或近似解法), 记为 E_i, $i = 1, 2, \cdots$.

说明 对于某个 E_i, 由式 (16.40), 就可以求出各 c_j 为

$$c_{\alpha j} = -G\sum_{j'}\frac{c_{j'}}{E_\alpha - 2\varepsilon_j} = \frac{C}{E_\alpha - 2\varepsilon_j}$$

其中 $j = 1/2, 3/2, \cdots, \alpha = 1, 2, 3, \cdots$, C 为归一化常数. 利用归一化条件

$$\sum_{\lambda}\left|c_{\alpha j}\right|^2 = 1$$

即可求出

$$C=\left[\sum_{j'}(E_\alpha-2\varepsilon_j)^{-2}\right]^{-1/2},\quad 而\quad c_{\alpha j}=\frac{1}{E_\alpha-2\varepsilon_j}\left[\sum_{j'}(E_\alpha-2\varepsilon_j)^{-2}\right]^{-1/2}$$

而相应于 E_α 的能量本征态为

$$|\psi_\alpha\rangle=\sum_j c_{\alpha j}S_j^\dagger|0\rangle \tag{16.37'}$$

16.7 同题 16.3. 设只有一条单粒子能级 ε_j. 令

$$\begin{aligned}S_{m+}&=(-1)^{j-m}\,a_{jm}^\dagger a_{j-m}^\dagger\\ S_{m-}&=(S_{m+})^\dagger=(-1)^{j-m}\,a_{j-m}a_{jm}\\ S_{m0}&=\frac{1}{2}\left(a_{jm}^\dagger a_{jm}+a_{j-m}^\dagger a_{j-m}-1\right)\end{aligned} \tag{16.44}$$

证明

$$[S_{m+},S_{m-}]=2S_{m0} \tag{16.45a}$$

$$[S_{m0},S_{m+}]=S_{m+} \tag{16.45b}$$

$$[S_{m0},S_{m-}]=-S_{m-} \tag{16.45c}$$

与角动量的对易关系式比较

$$[j_+,j_-]=2j_z,\quad [j_z,j_+]=\hbar j_+,\quad [j_z,j_-]=-\hbar j_-$$

(S_{m+},S_{m-},S_{m0}) 称为准自旋 (quasispin). [参阅 A. K. Kerman, Annals of Physics, **12**(1961), 300.]

对于轴对称势场中的 Fermi 子体系 (题 16.1), 亦可类似处理. 令

$$\begin{aligned}S_{\nu+}&=a_\nu^\dagger a_{\bar\nu}^\dagger\\ S_{\nu-}&=(S_{\nu+})^\dagger=a_{\bar\nu}a_\nu\\ S_{\nu0}&=\frac{1}{2}\left(a_\nu^\dagger a_\nu+a_{\bar\nu}^\dagger a_{\bar\nu}-1\right)=\frac{1}{2}\left(\hat n_\nu-1\right)\end{aligned} \tag{16.46}$$

类似可证明

$$[S_{\mu+},S_{\nu-}]=2S_{\mu0}\delta_{\mu\nu} \tag{16.47a}$$

$$[S_{\mu0},S_{\nu\pm}]=\pm S_{\nu\pm}\delta_{\mu\nu} \tag{16.47b}$$

证明 根据 Fermi 子产生、湮灭算符基本对易关系

$$\left[a_{jm},a_{jm'}^\dagger\right]_+=a_{jm}a_{jm'}^\dagger+a_{jm'}^\dagger a_{jm}=\delta_{mm'}$$

$$[a_{jm},a_{jm'}]_+=0,\quad \left[a_{jm}^\dagger,a_{jm'}^\dagger\right]_+=0$$

以及算符恒等式

$$[A,BC]=[A,B]\,C+B\,[A,C]$$

$$[AB,C]=A\,[B,C]_+-[A,C]_+\,B$$

直接演算

$$
\begin{aligned}
[S_{m+}, S_{m-}] &= (-1)^{2j-2m}\left[a_{jm}^{\dagger}a_{j,-m}^{\dagger}, a_{j-m}a_{j,m}\right] \\
&= \left[a_{jm}^{\dagger}a_{j,-m}^{\dagger}, a_{j-m}\right]a_{j,m} + a_{j-m}\left[a_{jm}^{\dagger}a_{j,-m}^{\dagger}, a_{j,m}\right] \\
&= a_{jm}^{\dagger}\left[a_{j,-m}^{\dagger}, a_{j-m}\right]_{+}a_{j,m} - 0 - a_{j-m}\left[a_{jm}^{\dagger}, a_{j,m}\right]a_{j,-m}^{\dagger} + 0 \\
&= a_{jm}^{\dagger}a_{j,m} - a_{j-m}a_{j,-m}^{\dagger} = a_{jm}^{\dagger}a_{j,m} + a_{j,-m}^{\dagger}a_{j-m} - 1 = 2S_{m0}
\end{aligned}
$$

这给出了式 (16.45a) 的证明. 类似地

$$
\begin{aligned}
[S_{m0}, S_{m+}] &= (-1)^{j-m}\frac{1}{2}\left[a_{jm}^{\dagger}a_{jm} + a_{j-m}^{\dagger}a_{j-m}, a_{jm}^{\dagger}a_{j-m}^{\dagger}\right] \\
&= (-1)^{j-m}\frac{1}{2}\left\{\left[a_{jm}^{\dagger}a_{jm}, a_{jm}^{\dagger}\right]a_{j-m}^{\dagger} + a_{jm}^{\dagger}\left[a_{j-m}^{\dagger}a_{j-m}, a_{j-m}^{\dagger}\right]\right\} \\
&= (-1)^{j-m}\frac{1}{2}\left\{a_{jm}^{\dagger}\left[a_{jm}, a_{jm}^{\dagger}\right]_{+}a_{j-m}^{\dagger} + a_{jm}^{\dagger}a_{j-m}^{\dagger}\left[a_{j-m}, a_{j-m}^{\dagger}\right]_{+}\right\} \\
&= (-1)^{j-m}\frac{1}{2}\left(a_{jm}^{\dagger}a_{j-m}^{\dagger} + a_{jm}^{\dagger}a_{j-m}^{\dagger}\right) = (-1)^{j-m}a_{jm}^{\dagger}a_{j-m}^{\dagger} = S_{m+}
\end{aligned}
$$

这给出了式 (16.45b) 的证明. 再取式 (16.45b) 的 Hermite 共轭, 即得式 (16.45c).

式 (16.45) 与角动量的对易关系

$$
[j_+, j_-] = 2j_z, \quad [j_z, j_+] = \hbar j_+, \quad [j_z, j_-] = -\hbar j_-
$$

相同. 因而 (S_{m+}, S_{m-}, S_{m0}) 称为准自旋 (quasispin).

我们可讨论 S_{m0} 的本征值. 由定义式 (16.44) 易知: 如已有 Fermi 子对占据 $|jm\rangle$、$|j\bar{m}\rangle$ 态, 则 $S_{m0} = 1/2$. 如 $|jm\rangle$、$|j\bar{m}\rangle$ 态没有粒子, 则 $S_{m0} = -1/2$. 所以, 当能级 ε_j 上粒子成对出现时, 这种准自旋相当于自旋 1/2. 如只有 $|jm\rangle$ 态上有一个粒子, $|j\bar{m}\rangle$ 态上没有粒子, 则 $S_{m0} = 0$, 这种情况下的准自旋相当于自旋 0.

根据 Fermi 子产生、湮灭算符基本对易关系, 相应于不同 m 的准自旋算符互相对易. 如令

$$
S_+ = \sum_{m>0} S_{m+}, S_- = \sum_{m>0} S_{m-}, S_0 = \sum_{m>0} S_{m0} \tag{16.48}
$$

利用式 (16.45) 易证

$$
[S_+, S_-] = 2S_0, \quad [S_0, S_\pm] = \pm S_\pm \tag{16.49}
$$

可见 (S_+, S_-, S_0) 之间也满足角动量对易关系, 因而它们也可称为准自旋.

对于轴对称势场中的 Fermi 子体系, 根据 $(S_{\mu+}, S_{\mu-}, S_{\mu0})$ 的定义式, 从 Fermi 子产生、湮灭算符基本对易关系式[①]出发, 我们可以计算 $(S_{\mu+}, S_{\mu-}, S_{\mu0})$ 满足的对易关系. 但若将式 (16.46) 与题 16.1 式 (16.1) 比较, 可知 $S_{\mu+}$ 相当于那里的 $S_\nu^\dagger$, $S_{\mu-}$ 相当于 S_ν, 因而式 (16.47a) 相当于题 16.1 已证的式 (16.2a). 再利用定义式 (16.46) 对 $S_{\nu0}$ 的定义, 由式 (16.2b,16.2c) 即可给出式 (16.47b). 这就证明了 $(S_{\mu+}, S_{\mu-}, S_{\mu0})$ 之间所满足的角动量对易关系. 故它们也可称为准自旋.

16.8 设中心力场只有一条单粒子束缚能级 ε_j(为方便, 取 $\varepsilon_j = 0$). 设有 N 个 Fermi 子处于此能级上 $(N \leqslant 2j+1)$, 粒子之间有对力作用, Hamilton 量表示为

$$
H = -G\sum_{m,m'>0} a_{jm}^{\dagger}a_{j\bar{m}}^{\dagger}a_{j\bar{m}'}a_{jm'} \quad (G > 0)
$$

① 可见题 16.1 式 (16.2).

简记为

$$H=-G\sum_{m,m'>0}a_m^\dagger a_{\bar{m}}^\dagger a_{\bar{m}'}a_{m'}$$

求此 N 粒子系的能谱.

提示 令

$$S_+=\sum_{m>0}a_m^\dagger a_{\bar{m}}^\dagger, S_-=(S_+)^\dagger\, a_{\bar{m}'}a_{m'}$$

$$S_0=\frac{1}{2}\left(\hat{N}-\Omega\right),\quad \hat{N}=\sum_{m>0}\left(a_m^\dagger a_m+a_{\bar{m}}^\dagger a_{\bar{m}}\right),\quad \Omega=j+1/2$$

可证明

$$[S_+,S_-]=2S_0,[S_0,S_+]=S_+,[S_0,S_-]=-S_-$$

而

$$H=-GS_+S_-=-G\left(\boldsymbol{S}^2-S_0^2+S_0\right)$$

$\boldsymbol{S}$ 称为准自旋.

解 题 16.7 式 (16.48) 定义了能级 ε_j 上准自旋算符, 即

$$S_+=\sum_{m>0}S_{m+}=\sum_{m>0}a_m^\dagger a_{\bar{m}}^\dagger \tag{16.50a}$$

$$S_-=(S_+)^\dagger=\sum_{m>0}S_{m-}=\sum_{m>0}a_{\bar{m}}a_m \tag{16.50b}$$

$$S_0=\sum_{m>0}S_{m0}=\frac{1}{2}\left(\hat{N}-\Omega\right) \tag{16.50c}$$

其中

$$\hat{N}=\sum_{m>0}\left(a_m^\dagger a_m+a_{\bar{m}}^\dagger a_{\bar{m}}\right) \tag{16.51}$$

为粒子数算符. $\Omega=j+1/2$ 为能级 ε_j 上 $m>0$ 的状态数, 即能容纳的粒子对数. 为简便起见, 以上各有关量中, 略去了下标 j. 题 16.7 中证明

$$[S_+,S_-]=2S_0,\quad [S_0,S_+]=S_+,\quad [S_0,S_-]=-S_-$$

这是 $\boldsymbol{S}$ 称为准自旋的原因. 而借助于准自旋算符, 题给 Hamilton 量可以写成

$$H=-GS_+S_-=-G\left(\boldsymbol{S}^2-S_0^2+S_0\right) \tag{16.52}$$

能级 ε_j 上粒子数 N 给定后, $\boldsymbol{S}^2$, S_0 的本征值为

$$\boldsymbol{S}^2=S(S+1),\quad S_0=\frac{1}{2}(N-\Omega) \tag{16.53}$$

根据 Pauli 原理, 粒子数 N 不能超过 $2\Omega=2j+1$. 当 $N=2\Omega$ 时, 能级 ε_j 上各 $|jm\rangle$ 态均已填满粒子, 各 S_{m0} 均等于 $1/2$, 各准自旋互相平行, 总 S, S_0 均取最大值

$$S_{\max}=(S_0)_{\max}=\frac{\Omega}{2} \tag{16.54}$$

根据角动量理论, $S \geqslant S_0$, 故再综合式 (16.53)、式 (16.54) 知 S 的取值范围是

$$\frac{\Omega}{2} \geqslant S \geqslant \frac{1}{2}(N-\Omega) \tag{16.55}$$

引入量子数 ν(seniority 数) 以代替 S, 即令

$$\nu = \Omega - 2S, \quad S = \frac{1}{2}(\Omega - \nu) \tag{16.56}$$

则利用式 (16.52) 和式 (16.53), 即可写出能谱公式

$$\begin{aligned} E &= -G\left[S(S+1) - \frac{1}{4}(N-\Omega)^2 + \frac{1}{2}(N-\Omega)\right] \\ &= -G\left[\frac{\Omega-\nu}{2}\left(\frac{\Omega-\nu}{2}+1\right) - \frac{\Omega-N}{2}\left(\frac{\Omega-N}{2}+1\right)\right] \\ &= -\frac{G}{4}(N-\nu)(2\Omega+2-N-\nu) = E_\nu^{(N)} \end{aligned} \tag{16.57}$$

当粒子数 N 为偶数, $\nu = 0, 2, 4, \cdots, N$. 当粒子数 N 为偶数, $\nu = 1, 3, 5, \cdots, N$.

N 为偶数时, 基态和第一激发态能级分别为

$$E_0^{(N)} = -\frac{G}{4}N(2\Omega+2-N)$$

$$E_2^{(N)} = -\frac{G}{4}(N-2)(2\Omega-N)$$

二者间距为

$$E_2^{(N)} - E_0^{(N)} = \Omega G$$

这个能级间距与粒子数 N 无关, 称为能隙 (energy gap).

第 17 章　相对论量子力学

17.1　试证明自由粒子的 Klein-Gordon 方程

$$-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi=\left(-\hbar^2c^2\nabla^2+m^2c^4\right)\psi \tag{17.1}$$

可表示成类似于 Schrödinger 方程的形式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi=H\Psi \tag{17.2}$$

式中

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}(\tau_3+\mathrm{i}\tau_2)\nabla^2+mc^2\tau_3 \tag{17.3}$$

Ψ 是重新构造的二分量波函数, $\Psi=\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}$, φ 描述正电荷态, χ 描述负电荷态, 而 $\tau_i(i=1,2,3)$ 是 Pauli 矩阵

$$\tau_1=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\quad \tau_2=\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{pmatrix},\quad \tau_3=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$$

试找出 Ψ 与 ψ 的关系, 并用 Ψ 来表示连续性方程中的 ρ 与 $\boldsymbol{j}$.

证明　式 (17.1) 可以表示为

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\pm mc^2\right)\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\mp mc^2\right)\psi=-\hbar^2c^2\nabla^2\psi \tag{17.4}$$

上式两边除以 $2mc^2$, 即得

$$\frac{1}{2}\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-mc^2\right)\left(1+\frac{\mathrm{i}\hbar}{mc^2}\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi \tag{17.5a}$$

$$\frac{1}{2}\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}+mc^2\right)\left(1-\frac{\mathrm{i}\hbar}{mc^2}\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi=\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi \tag{17.5b}$$

现在令

$$\varphi=\frac{1}{2}\left(1+\frac{\mathrm{i}\hbar}{mc^2}\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi,\quad \chi=\frac{1}{2}\left(1-\frac{\mathrm{i}\hbar}{mc^2}\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi \tag{17.6}$$

其反解式为

$$\psi=\varphi+\chi,\quad \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=mc^2\left(\varphi-\chi\right) \tag{17.7}$$

由式 (17.6)、式 (17.7), 得式 (17.5a)、式 (17.5b) 变为

$$\begin{aligned}\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-mc^2\right)\varphi&=-\frac{\hbar^2}{2m}c^2\nabla^2\left(\varphi+\chi\right)\\ \left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}+mc^2\right)\chi&=\frac{\hbar^2}{2m}c^2\nabla^2\left(\varphi+\chi\right)\end{aligned} \tag{17.8}$$

或者

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi=-\frac{\hbar^2}{2m}c^2\nabla^2\left(\varphi+\chi\right)+mc^2\varphi \tag{17.9a}$$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\chi=\frac{\hbar^2}{2m}c^2\nabla^2\left(\varphi+\chi\right)-mc^2\chi \tag{17.9b}$$

比照 Pauli 矩阵的形式, 知可定义 $\Psi=\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}$, 从而上面式 (17.9a)、式 (17.9b) 可以写为题给的式 (17.2), 其中的 H 正如式 (17.3) 所给.

对式 (17.1) 两边取复数共轭得到

$$-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi^*=\left(-\hbar^2c^2\nabla^2+m^2c^4\right)\psi^* \tag{17.10}$$

$\psi^*\times$ 式 (17.1)$-\psi\times$ 式 (17.10), 即得连续性方程

$$-\hbar^2\frac{\partial}{\partial t}\left(\psi^*\frac{\partial}{\partial t}\psi-\psi\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\right)=-\hbar^2c^2\nabla\cdot\left(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*\right)$$

上式可写为

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0 \tag{17.11}$$

其中

$$\begin{aligned}\rho&=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2mc^2}\left(\psi^*\frac{\partial}{\partial t}\psi-\psi\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\right)\\ \boldsymbol{j}&=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*\right)\end{aligned} \tag{17.12}$$

即为粒子密度与粒子流密度. 它们也可以用 Ψ 来表示, 将式 (17.7) 代入式 (17.12) 得

$$\rho=\varphi^*\varphi-\chi^*\chi=\Psi^\dagger\tau_3\Psi \tag{17.13}$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{j}&=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}(\varphi^*\nabla\varphi+\chi^*\nabla\chi+\varphi^*\nabla\chi+\chi^*\nabla\varphi)+c.c.\\ &=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left[\Psi^\dagger(1+\tau_1)\nabla\Psi-\nabla\Psi^\dagger(1+\tau_1)\Psi\right]\end{aligned} \tag{17.14}$$

如再乘以粒子电荷 q, 则 $q\rho$ 与 $q\boldsymbol{j}$ 可以解释为电荷密度和电流密度, 式 (17.11) 乘 q 后可以理解成电荷守恒定律的表现形式. 二分量波函数 $\Psi=\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}$ 的意义则是 φ 表示粒子的正电荷态, χ 表示粒子的负电荷态.

如定义速度算符

$$\boldsymbol{v}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{r}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\boldsymbol{r},H\right]=\frac{1}{2\mathrm{i}\hbar m}(\tau_3+\mathrm{i}\tau_2)\left[\boldsymbol{r},\boldsymbol{p}^2\right]=\frac{\hbar}{\mathrm{i}m}\left(\tau_3+\mathrm{i}\tau_2\right)\nabla \tag{17.15}$$

则电流密度可以表示成

$$\boldsymbol{j}_e=e\boldsymbol{j}=\frac{e}{2}\Psi^\dagger\tau_3\boldsymbol{v}\Psi+c.c. \tag{17.16}$$

说明 位势不为零的情形, 有与本题类似的结果, 参见 Paul Strange, Relativistic Quantum Mechanics: with applications in condensed matter and atomic physics, 世界图书出版公司影印版,2008(Cambridge University Press, 1998), p73~77.

讨论 从表面上看式 (17.3)

$$H^\dagger = -\frac{\hbar^2}{2m}(\tau_3 - \mathrm{i}\tau_2)\nabla^2 + mc^2\tau_3 \neq H \tag{17.17}$$

似乎 H 非 Hermite, 这会导致[①] $\int \Psi^\dagger\Psi \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}$ 不守恒, 因此似乎也不能保证电荷守恒. 其实不然. 首先, 既有连续性方程 (17.11), 当然就能保证电荷守恒. 问题在于这里的密度如式 (17.13) 所给, 是 $\Psi^\dagger\tau_3\Psi$ 而不是 $\Psi^\dagger\Psi$. 连续性方程 (17.11) 给出 $\int \Psi^\dagger\tau_3\Psi \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}$ 守恒, 可以对波函数进行归一化使得

$$\int \rho \mathrm{d}^3\boldsymbol{x} = \int \Psi^\dagger\tau_3\Psi \mathrm{d}^3\boldsymbol{x} = 1 \tag{17.18}$$

一般的 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = H\Psi$$

中, $H^\dagger = H$, 两个波函数 Ψ 与 Φ 的"标积"定义为

$$(\Psi, \Phi) = \int \Psi^\dagger\Phi \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}$$

波函数的归一化条件为

$$(\Psi, \Psi) = \int \Psi^\dagger\Psi \mathrm{d}^3\boldsymbol{x} = 1$$

而这解释为概率守恒. 现在, 为和式 (17.18) 一致, 两个波函数 Ψ 与 Φ 的"标积"应定义为

$$(\Psi, \Phi) = \int \Psi^\dagger\tau_3\Phi \mathrm{d}^3\boldsymbol{x} \tag{17.19}$$

则式 (17.18) 就是波函数的归一化条件, 即

$$(\Psi, \Psi) = \int \Psi^\dagger\tau_3\Psi \mathrm{d}^3\boldsymbol{x} = 1 \tag{17.20}$$

在标积新的定义下, 算符 $\hat{O}$ 的 Hermite 性条件仍可写成

$$(\Psi, \hat{O}\Phi) = (\hat{O}\Psi, \Phi) \tag{17.21}$$

上式在坐标表象也就是

$$\int \Psi^\dagger\tau_3\hat{O}\Phi \mathrm{d}^3\boldsymbol{x} = \int \left(\hat{O}\Psi\right)^\dagger\tau_3\Phi \mathrm{d}^3\boldsymbol{x} = \int \Psi^\dagger\hat{O}^\dagger\tau_3\Phi \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}$$

故算符 $\hat{O}$ 的 Hermite 性条件可表示为 $\tau_3\hat{O} = \hat{O}^\dagger\tau_3$, 也就是

$$\hat{O}^\dagger = \tau_3\hat{O}\tau_3, \quad \text{或者} \hat{O} = \tau_3\hat{O}^\dagger\tau_3 \tag{17.22}$$

此即算符的厄米性条件. 由于

$$(\tau_3 + \mathrm{i}\tau_2)^\dagger\tau_3 = \tau_3(\tau_3 - \mathrm{i}\tau_2)\tau_3 = \tau_3 + \mathrm{i}\tau_2$$

可知由式 (17.3) 定义的 H 是满足 Hermite 性条件 (17.22) 的.

① 类似于题 2.7.

17.2　按照特殊相对论, 自由粒子的能量

$$E=\sqrt{c^2p^2+m^2c^4}$$

当 $v/c\ll 1$ 时

$$E=mc^2\left(1+\frac{pc}{mc^2}\right)^{1/2}=mc^2+\frac{p^2}{2m}-\frac{p^4}{8m^3c^2}+\cdots$$

$-p^4/(8m^3c^2)$ 是最低幂次的相对论修正. 把常数项 mc^2 去掉, 氢原子的 Hamilton 量可表示成 $H=H_0+H'$, 其中

$$H_0=\frac{p^2}{2m}-\frac{e^2}{r} \tag{17.23a}$$

$$H'=-\frac{p^4}{8m^3c^2} \tag{17.23b}$$

把 H' 看成微扰, 求能级的微扰论一级修正.

解　不考虑相对论修正情况下, 氢原子零级波函数可取为 (H_0,l^2,l_z) 的共同本征态 ψ_{nlm}, 相应的零级能量为

$$E_n^{(0)}=-\frac{1}{2n^2}\frac{me^4}{\hbar^2} \tag{17.24}$$

其中 $n=1,2,\cdots;l=0,1,\cdots,n-1;m=-l,-l+1,\cdots,l-1,l$. 观察 Hamilton 量微扰项 H' 的形式, 它具有转动不变性, 因而它在两个不同角动量态下的矩阵元一定为零. 这也意味着, 不同角动量态在微扰作用下不会相混, 而 (H_0,l^2,l_z) 的共同本征态 ψ_{nlm} 已经是合适的零级波函数. 因此尽管 n 能级是 n^2 重简并, 计算能级修正仍可以按照非简并微扰处理.

假设 ψ_{nlm} 已归一化, 则在微扰 H' 作用下, 相应于 ψ_{nlm} 的能量一级修正为

$$\begin{aligned}E_{nl}^{(1)}&=\langle nlm|\,H'\,|nlm\rangle=\left\langle nlm\left|-\frac{p^4}{8m^3c^2}\right|nlm\right\rangle\\&=-\frac{1}{2mc^2}\left\langle nlm\left|\frac{p^4}{(2m)^2}\right|nlm\right\rangle=-\frac{1}{2mc^2}\left\langle nlm\left|\left(H_0+\frac{e^2}{r}\right)^2\right|nlm\right\rangle\\&=-\frac{1}{2mc^2}\left[E_n^{(0)2}-2E_n^{(0)}\langle V\rangle_{nlm}+e^4\left\langle r^{-2}\right\rangle_{nlm}\right]\end{aligned}$$

在零级波函数 Ψ_{nlm} 下按照 Virial 定理, $\langle V\rangle_{nlm}=2E_n^{(0)}$, 而题 6.11 式 (6.100) 给出 $\left\langle r^{-2}\right\rangle_{nlm}=\dfrac{1}{(l+1/2)n^3a_0^2}$(其中 $a_0=\hbar^2/me^2$ 为 Bohr 半径), 代入上式得

$$E_{nl}^{(1)}=-\frac{1}{2mc^2}\left[-3E_n^{(0)2}+\frac{e^4}{a_0^2}\frac{1}{(l+1/2)n^3}\right] \tag{17.25}$$

代入式 (17.24) 结果, 并注意 $e^2/\hbar c=\alpha$, 能级的一级修正可表示为

$$E_{nl}^{(1)}=\frac{\alpha^2}{2n^4}\left[\frac{3}{4}-\frac{n}{l+1/2}\right]\frac{me^4}{\hbar^2}=\frac{\alpha^2}{2n^4}\left[\frac{3}{4}-\frac{n}{l+1/2}\right]\alpha^2mc^2 \tag{17.26}$$

加上零级能量 $E_n^{(0)}$, 即得

$$\begin{aligned}E_{nl}&=-\frac{1}{2n^2}\left[1+\frac{\alpha^2}{2n^4}\left(\frac{n}{l+1/2}-\frac{3}{4}\right)\right]\frac{me^4}{\hbar^2}\\&=-\frac{1}{2n^2}\left[1+\frac{\alpha^2}{2n^4}\left(\frac{n}{l+1/2}-\frac{3}{4}\right)\right]\alpha^2mc^2\end{aligned} \tag{17.27}$$

其中 $n=1,2,3,\cdots;l=0,1,\cdots,n-1$.

17.3 同上题, 考虑相对论最低级修正后, 中心力场 $V(r)$ 中粒子的 Schrödinger 方程可表示为

$$\left(\frac{p^2}{2m}+V(r)-\frac{p^4}{8m^3c^2}\right)\psi=E\psi \tag{17.28}$$

试把 $H'=-p^4/(8m^3c^2)$ 当作微扰, 并让

$$H'\psi\approx H'\psi^{(0)}=-\frac{T^2}{2mc^2}\psi^{(0)}=-\frac{(E-V)^2}{2mc^2}\psi^{(0)}\approx-\frac{(E-V)^2}{2mc^2}\psi$$

于是 Schrödinger 方程化为

$$\left[\frac{p^2}{2m}+(V(r)-E)-\frac{1}{2mc^2}(E-V(r))^2\right]\psi=0 \tag{17.29}$$

对于氢原子, $V(r)=-e^2/r$, 试求出其能级公式.

参阅 E. U. Condon and G. H. Shortley, The Theory of Atomic Spectra. (Cambridge University Press, 1935).

解 我们从式 (17.29) 出发求解能量本征值 E. 采用分离变量法求解上式, 设能量、角动量平方、角动量第三分量的共同本征函数为 $\psi_{nlm}=R(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$, 代入式 (17.29) 得径向波函数 R 满足的方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2mr}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}rR+\left\{[V(r)-E]-\frac{1}{2mc^2}(E-V(r))^2+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\right\}R=0. \tag{17.30}$$

代入 $V(r)=-e^2/r$, 得

$$-\frac{\hbar^2}{2mr}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}rR+\left\{-E-\frac{E^2}{2mc^2}-\left(1+\frac{E}{mc^2}\right)\frac{e^2}{r}+\frac{\hbar^2}{2m}\left[l(l+1)-\alpha^2\right]\frac{1}{r^2}\right\}R=0 \tag{17.31}$$

令 $R(r)=\chi(r)/r$ 代入式 (17.31) 得

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}\chi+\left\{-E-\frac{E^2}{2mc^2}-\left(1+\frac{E}{mc^2}\right)\frac{e^2}{r}+\frac{\hbar^2}{2m}\left[l(l+1)-\alpha^2\right]\frac{1}{r^2}\right\}\chi=0 \tag{17.32}$$

上式加上边界条件 $\chi(0)=\chi_{r\to\infty}=0$, 可确定一系列能级 E 以及本征函数 χ_E. 上式可写为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}\chi+\left\{-E'-\frac{e'^2}{r}+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l'(l'+1)}{r^2}\right\}\chi=0 \tag{17.33}$$

其中

$$E'=E+\frac{E^2}{2mc^2},\quad e'^2=\left(1+\frac{E}{mc^2}\right)e^2 \tag{17.34}$$

而 l' 满足 $l(l+1)-\alpha^2=l'(l'+1)$. 从中解出 l' 得 $l'=\pm\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2-\alpha^2}-\frac{1}{2}$, 这里 l' 应取正值, 使得满足当 $\alpha\to0$ 时, $l'\to l$. 也就是

$$l'=\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2-\alpha^2}-\frac{1}{2} \tag{17.35}$$

式 (17.33) 除了 E'、e' 与 l' 值不同, 与解氢原子束缚态的非相对论径向方程完全相同. 这样利用非相对论氢原子束缚态的结果写下

$$E' = -\frac{e'^2}{2a'} \cdot \frac{1}{n'^2} = -\frac{me'^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n'^2}, \tag{17.36}$$

式中的 n' 是主量子数, 如下给出

$$n' = n_r + l' + 1, \tag{17.37}$$

其中 $n_r = 0, 1, 2, \cdots$ 为径向波函数除 0、∞ 以外的零点 (节点), 这样 n' 一般不是整数. 相应的径向波函数为

$$R_{n'l'}(r) = N'_{n'l'} \mathrm{e}^{-\frac{\xi}{2}} \xi^l \mathrm{F}(-n' + l' + 1, 2l' + 2, \xi)$$

其中 F 为合流超几何函数, $N'_{n'l'}$ 为归一化系数.

由式 (17.34)、式 (17.36) 得

$$E + \frac{E^2}{2mc^2} = -\left(1 + \frac{E}{mc^2}\right)^2 \frac{me^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n'^2} \tag{17.38}$$

令 $E = \varepsilon mc^2$, 上式可化为

$$\varepsilon + \frac{\varepsilon^2}{2} = -(1+\varepsilon)^2 \frac{\alpha^2}{2n'^2}, \quad \text{或} \varepsilon^2 + 2\varepsilon + \frac{\alpha^2}{n'^2 + \alpha^2} = 0$$

解上面二次方程得

$$\varepsilon = \pm \frac{1}{\sqrt{1 + \alpha^2/n'^2}} - 1$$

式中 $\pm$ 应取正值, 使得当 $\alpha \to 0$ 时, $\varepsilon \to 0$. 再代入式 (17.37)、式 (17.35) 即得确定能级的如下表达式:

$$\frac{E}{mc^2} = \left[1 + \frac{\alpha^2}{\left(\sqrt{(l+1/2)^2 - \alpha^2} + n_r + 1/2\right)^2}\right]^{-1/2} - 1$$

其中 $n_r, l = 0, 1, 2, 3, \cdots$, 分别为径向波函数节点数和角量子数. 上式按 α^2 幂级数展开, 得

$$E = E_{nl} = -\frac{1}{2n^2}\left[1 + \frac{\alpha^2}{2n^4}\left(\frac{n}{l+1/2} - \frac{3}{4}\right) + \cdots\right]\frac{me^4}{\hbar^2}$$

如前 $l = 0, 1, 2, \cdots, n-1$ 为角量子数, 而 $n = n_r + l + 1 = 1, 2, 3, \cdots$ 为主量子数. 这与题 17.2 结果一致.

17.4 在非相对论近似下, 类氢原子的 Dirac 方程可化为 [参阅 10.4.3 节, 式 (10.4.32)、式 (10.4.33) 和式 (10.4.34)]

$$\left\{\frac{p^2}{2m} + V - \frac{p^4}{8m^3c^2} + \frac{Ze^2}{2m^2c^2}\frac{1}{r^3}\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{l} + \frac{\pi^2\hbar^2}{2m^2c^2}\delta(\boldsymbol{r})\right\}\Psi = E'\Psi$$

其中 $E' = E - mc^2$. 试把 { } 中后三项看成微扰, 用微扰论一级近似计算能级修正, 并与 Dirac 方程的严格解比较.

解 类氢原子中价电子在 Coulomb 势场中的运动应满足 Dirac 方程, Hamilton 量为

$$H = c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p} + mc^2\beta + V(r) \tag{17.39}$$

式中

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \tag{17.40}$$

对 Dirac 方程作非相对论近似 (取到二级近似), 基于其大分量波函数并要求总概率守恒, 构造非相对论近似下的二分量波函数 Ψ. Ψ 满足的方程为

$$\left[\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(r)-\frac{p^4}{8m^3c^2}+\frac{\hbar}{4m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}+\frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla^2V(r)\right]\Psi=E'\Psi \tag{17.41}$$

其中 $E'=E-mc^2$. 上式包含最低阶相对论修正 $[O(v^2/c^2)]$, 其 Hamilton 量可以表示为

$$H=H_0+H' \tag{17.42}$$

其中 H_0 即非相对论氢原子的 Hamilton 量, H' 为其相对论修正, 分别如下给出:

$$H_0=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(r) \tag{17.43}$$

$$H'=-\frac{p^4}{8m^3c^2}+\frac{\hbar}{4m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}+\frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla^2V(r) \tag{17.44}$$

将式 (17.40) 代入式 (17.44), 即得

$$H'=-\frac{p^4}{8m^3c^2}+\frac{Ze^2}{2m^2c^2}\frac{1}{r^3}\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{l}+\frac{\pi^2\hbar^2}{2m^2c^2}\delta(\boldsymbol{r})=H_{\mathrm{k}}+H_{\mathrm{ls}}+H_{\mathrm{D}} \tag{17.45}$$

其中第一项 H_{k} 为动能的相对论修正, 第二项 H_{sl} 为自旋-轨道耦合项, H_{D}(Darwin 项) 亦称为接触势. H_{sl} 只对 $l\neq0$ 的态有影响, 而 H_{D} 只对 s 态 ($l=0$) 有影响.

将 H' 视为微扰. 取零级波函数为 $(H_0,\boldsymbol{l}^2,\boldsymbol{J}^2,J_z)$ 的共同本征函数 Ψ_{nljm_j}, 可表示为

$$\Psi_{nljm_j}=R_{nl}(r)\phi_{ljm_j}(\theta,\varphi,s_z) \tag{17.46}$$

其中 $\phi_{ljm_j}(\theta,\varphi,s_z)$ 为 $(\boldsymbol{l}^2,\boldsymbol{J}^2,J_z)$ 的共同本征态. 相应于 Ψ_{nljm_j} 的零级近似能量仅取决于主量子数 n, 而与 l、j、m_j 无关, 能级的零级近似为 H_0 的本征值

$$E_n^{(0)}=-\frac{1}{2n^2}\frac{me^4}{\hbar^2}=-\frac{mc^2Z^2\alpha^2}{2n^2},\quad n=0,1,2,\cdots \tag{17.47}$$

其中 $\alpha=e^2/\hbar c$ 为精细结构常数. 能级 E_n 的简并度为 $2n^2$.

由式 (17.45) 可见, H' 中的 H_{k}, H_{sl} 与 H_{D} 均与 $(\boldsymbol{l}^2,\boldsymbol{J}^2,J_z)$ 对易, 在同能级各简并态之间, 它们只有对角矩阵元才不等于 0, 或者说在同能级简并子空间中, H' 已经对角化. 这样简并于空间中 Ψ_{nljm_j} 已经是合适的零级波函数, 在该态下 H' 的期望值就是能级的一级微扰修正. 下面依次计算 H_{k}, H_{sl} 与 H_{D} 在 Ψ_{nljm_j} 下的期望值.

H_{k} 期望值的计算类似题 17.2, 只需将式 (17.26) 中的 e^2 改为 Ze^2, 或者 α 改为 $Z\alpha$ 得到

$$\langle H_{\mathrm{k}}\rangle_{nljm_j}=mc^2\alpha^4\frac{1}{2n^4}\left[\frac{3}{4}-\frac{n}{l+1/2}\right] \tag{17.48}$$

现计算自旋-轨道耦合能 H_{sl} 的期望值. 利用 $2\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{l}=(\boldsymbol{s}+\boldsymbol{l})^2-\boldsymbol{s}^2-\boldsymbol{l}^2$, 以及题 6.11 的式 (6.102), 得

$$\begin{aligned}\langle H_{\mathrm{sl}}\rangle_{nljm_j}&=\frac{Ze^2}{2m^2c^2}\frac{\hbar^2}{2}\left[j(j+1)-l(l+1)-\frac{3}{4}\right]\left\langle r^{-3}\right\rangle\\&=mc^2Z^4\alpha^4\frac{j(j+1)-l(l+1)-3/4}{4n^3l\,(l+1/2)\,(l+1)}\end{aligned} \tag{17.49}$$

Darwin 项的期望值为

$$\langle H_{\mathrm{D}}\rangle_{nljm_j}=\frac{\pi Ze^2\hbar^2}{2m^2c^2}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\Psi^{\dagger}_{nljm_j}\delta(\boldsymbol{r})\Psi_{nljm_j}=\frac{\pi Ze^2\hbar^2}{2m^2c^2}\Psi^{\dagger}_{nljm_j}(\boldsymbol{0},s_z)\Psi_{nljm_j}(\boldsymbol{0},s_z)$$

$\Psi_{nljm_j}(\boldsymbol{0},s_z)$ 为非相对论类氢原子的 $(H_0,\boldsymbol{l}^2,l_z)$ 的共同本征态 $\psi_{nlm}(\boldsymbol{r})$ 与 s_z 本征态耦合而成, 只有当 $l=0$ 时才有 $\psi_{nlm}(\boldsymbol{0})\neq 0$, 因此

$$\langle H_{\mathrm{D}}\rangle_{nljm_j}=\frac{\pi Ze^2\hbar^2}{2m^2c^2}\left|\psi_{n00}(\boldsymbol{0})\right|^2 \tag{17.50}$$

再利用题 6.4 的式 (6.51a), 以及题 6.11 的式 (6.100) 得

$$\langle H_D\rangle_{l=0}=\frac{Z^2e^4}{4mc^2}\left\langle r^{-2}\right\rangle=mc^2Z^4\alpha^4\frac{1}{2n^3} \tag{17.51}$$

我们知道 $l=0$ 时, $\langle H_{\mathrm{sl}}\rangle_{nljm_j}=0$, 故式 (17.49) 仅当 $l>0$ 才成立. 但如将式 (17.49) 形式地推广到 $l=0$ 的情形 (取 $j=1/2$), 刚好给出式 (17.51). 在这个意义上, 可以将 Darwin 项形式地当作 $l=0$ 时的自旋 - 轨道耦合能. 于是, 对于 $l=0,1,2,\cdots$, 均有以下结果

$$\langle H_{\mathrm{sl}}+H_{\mathrm{D}}\rangle_{nljm_j}=mc^2Z^4\alpha^4\frac{j(j+1)-l(l+1)-3/4}{4n^3l\,(l+1/2)\,(l+1)} \tag{17.52}$$

式 (17.48) 与式 (17.52) 相加得

$$\langle H'\rangle_{nljm_j}=mc^2Z^4\alpha^4\left[\frac{3}{8n^4}+\frac{j(j+1)-3l(l+1)-3/4}{4n^3l\,(l+1/2)\,(l+1)}\right]$$

对于 $j=l+1/2$ 与 $j=l-1/2$ 两种情况分别代入上式, 上式可表示为下面同一个式子

$$\langle H'\rangle_{nljm_j}=mc^2Z^4\alpha^4\left[\frac{3}{8n^4}-\frac{1}{n^3\,(2j+1)}\right] \tag{17.53}$$

此即能级的一级微扰修正. 上式结果与量子数 l, m 无关, 但和 j 有关. 它与式 (17.47) 相加得

$$E_{nj}=E_n^{(0)}+\langle H'\rangle_{nljm_j}=-mc^2\frac{Z^2\alpha^2}{2n^2}\left[1+\frac{Z^2\alpha^2}{n^2}\left(\frac{n}{j+1/2}-\frac{3}{4}\right)\right] \tag{17.54}$$

能级的 j 简并已经消除, l 和 m_j 简并依然存在. 给定 n, l 可取 $0,1,2,\cdots,n-1$, 故对于每个 l, j 可取 $l+1/2$, $l-1/2$(对 $l=0$ 取 $j=1/2$), 可见

$$j+\frac{1}{2}=1,2,\cdots,n$$

共 n 种取值, 故非相对论类氢原子的 $E_n^{(0)}$ 分裂成 n 条能级, j 大者在上, j 小者在下, 这组能级的总裂距为

$$\Delta E_n=E_{n,n-\frac{1}{2}}-E_{n,\frac{1}{2}}=\frac{mc^2Z^4\alpha^4(n-1)}{2n^4}$$

根据 Dirac 方程精确解[①]知类氢原子能级 (减去静止能量 mc^2)

$$E_{nj}=mc^2\left\{1+\frac{Z^2\alpha^2}{\left[n_r+\sqrt{(j+1/2)^2-Z^2\alpha^2}\right]^2}\right\}^{-1/2}-mc^2$$

$n=n_r+j+1/2=1,2,3,\cdots,n_r=0,1,2,\cdots$. 作 α^2 幂级数展开, 到 α^4 项, 所得结果与式 (17.54) 即微扰论一级修正的结果相同.

① 曾谨言, 量子力学 (第四版卷 II)[M], 北京: 科学出版社, 2007, p.412~413.

17.5 自旋为 1/2 的粒子在三维各向同性谐振子势场中的运动, 试计算能级的相对论修正.

提示 用 $V(r)=\dfrac{1}{2}m\omega^2r^2$ 代入教材 10.4.3 节式 (10.4.32).

解 答案见钱伯初、曾谨言, 量子力学习题精选与剖析. 自旋为 1/2 的粒子在谐振子势场中的运动应满足 Dirac 方程, Hamilton 量为

$$H=c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+mc^2\beta+V(r) \tag{17.55}$$

其中

$$V(r)=\frac{1}{2}m\omega^2r^2 \tag{17.56}$$

对 Dirac 方程作非相对论近似 (取到二级近似), 基于其大分量波函数并要求总概率守恒, 构造非相对论近似下的二分量波函数 Ψ. Ψ 满足的方程为

$$\left[\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(r)-\frac{p^4}{8m^3c^2}+\frac{\hbar}{4m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}+\frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla^2V(r)\right]\Psi=E'\Psi \tag{17.57}$$

其中 $E'=E-mc^2$. 上式包含对非相对论谐振子的最低阶相对论修正 $[O(v^2/c^2)]$, 其 Hamilton 量可以表示为

$$H=H_0+H' \tag{17.58}$$

其中 H_0 即非相对论谐振子的 Hamilton 量, H' 为其相对论修正, 分别如下给出:

$$H_0=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(r) \tag{17.59}$$

$$H'=-\frac{p^4}{8m^3c^2}+\frac{\hbar}{4m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}+\frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla^2V(r) \tag{17.60}$$

将式 (17.56) 代入式 (17.60), 即得

$$H'=-\frac{p^4}{8m^3c^2}+\frac{\hbar^2\omega^2}{4mc^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}+\frac{3\hbar^2\omega^2}{8mc^2}=H_{\mathrm{k}}+H_{\mathrm{ls}}+\frac{3\hbar^2\omega^2}{8mc^2} \tag{17.61}$$

其中第一项 H_{k} 为动能的相对论修正, 第二项 H_{ls} 为自旋–轨道耦合能, 最后的常数项是对零点能的相对论修正.

将 H' 视为微扰. 能级的零级近似为 H_0 的本征值

$$E_N^{(0)}=\left(N+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega,\quad N=0,1,2,\cdots \tag{17.62}$$

零级波函数可取为 $(H_0,\boldsymbol{l}^2,\boldsymbol{J}^2,J_z)$ 的共同本征函数 Ψ_{nljm_j}. 由式 (17.61) 可见, H' 中的 H_{k} 与 H_{sl} 均与 $(\boldsymbol{l}^2,\boldsymbol{J}^2,J_z)$ 对易, 在同能级各简并态之间, H' 只有对角矩阵元才不等于 0, 或者说在同能级简并子空间中, H' 已经对角化. 这样 H' 在零级波函数 Ψ_{nljm_j} 下的期望值就是能级的一级微扰修正. 下面依次计算 H_{k} 与 H_{ls} 在零级波函数 Ψ_{nljm_j} 下的期望值.

$H_{\mathrm{k}}\sim p^4$, 考虑到 H_0 中 $\boldsymbol{x}$ 与 $\boldsymbol{p}$ 的对称关系, 我们猜想 $\langle p^4\rangle\sim\langle r^4\rangle$, 若如此则可通过 $\langle r^4\rangle$ 计算 $\langle H_{\mathrm{k}}\rangle$. 利用能量本征方程

$$H_0\psi_N=E_N^{(0)}\psi_N \tag{17.63}$$

也就是

$$\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\Psi_N=\left[E_N^{(0)}-V(r)\right]\Psi_N \tag{17.64}$$

因此

$$\langle H_{\mathrm{k}}\rangle = -\frac{1}{2mc^2}\left\langle \frac{p^4}{4m^2}\right\rangle = -\frac{1}{2mc^2}\langle \Psi_N|\left(E_N^{(0)}-V\right)^2|\Psi_N\rangle$$
$$= -\frac{1}{2mc^2}\left[E_N^{(0)2} - 2E_N^{(0)}\langle V\rangle + \langle V^2\rangle\right]$$

对于谐振子势, Virial 定理给出 $\langle V\rangle = \frac{1}{2}E_N^{(0)}$, 因此

$$\langle H_{\mathrm{k}}\rangle = -\frac{1}{2mc^2}\langle V^2\rangle = -\frac{m\omega^4}{8c^2}\langle r^4\rangle \tag{17.65}$$

这与我们先前的设想一致. 按照类似题 6.12 的计算, 对于谐振子势的能量本征函数 Ψ_{nljm_j}, 存在类似于式 (6.104) 的关系

$$(\lambda+2)\alpha^4\langle r^{\lambda+2}\rangle - (\lambda+1)(2N+3)\alpha^2\langle r^{\lambda}\rangle + \frac{\lambda}{4}\left[(2l+1)^2-\lambda^2\right]\langle r^{\lambda-2}\rangle = 0 \tag{17.66}$$

其中 $\alpha=\sqrt{m\omega/\hbar}$, 要求 $\lambda > -(2l+1)$. 对上式取 $\lambda=0$, 利用 $\langle r^0\rangle = 1$, 即得 $\langle r^2\rangle = (N+3/2)\alpha^{-2}$; 再取 $\lambda=2$, 并利用 $\langle r^0\rangle$、$\langle r^2\rangle$ 的结果, 即得

$$\langle r^4\rangle = \frac{1}{8}\left[3(2N+3)^2-(2l+3)(2l-1)\right]\frac{\hbar^2}{m^2\omega^2}$$

代入式 (17.65) 给出

$$\langle H_{\mathrm{k}}\rangle = -\frac{1}{64}\left[3(2N+3)^2-(2l+3)(2l-1)\right]\frac{\hbar^2\omega^2}{mc^2} \tag{17.67}$$

因 $N=2n_r+l$, 对同一个 N, l 可取 $N, N-2, \cdots, 1(N$ 奇数) 或 $0(N$ 偶数), 共有 $[N/2]+1$ 种可能取值. 因 $3(2N+3)^2-(2l+3)(2l-1) = 3(2N+3)^2-(2l+1)^2-4$, 故对这 $[N/2]+1$ 个不同的 l, $\langle H_{\mathrm{k}}\rangle$ 均不等, 且均有 $\langle H_{\mathrm{k}}\rangle < 0$.

零级波函数 Ψ_{nljm_j} 也是 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}$ 的本征态, 其相应本征值为

$$\langle \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}\rangle|_{eigv} = \begin{cases} l\hbar, & j = l+\dfrac{1}{2} \\ -(l+1)\hbar, & j = l-\dfrac{1}{2}, l\neq 0 \end{cases}$$

因此, 自旋轨道耦合能为

$$\langle H_{\mathrm{ls}}\rangle = \frac{\hbar^2\omega^2}{4mc^2}\times\langle\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}\rangle|_{eigv} = \frac{\hbar^2\omega^2}{4mc^2}\times\begin{cases} l\hbar, & j = l+\dfrac{1}{2} \\ -(l+1)\hbar, & j = l-\dfrac{1}{2}, l\neq 0 \end{cases} \tag{17.68}$$

自旋 – 轨道平行情形的能量要高于自旋 – 轨道反平行情形的能量, 这与氢原子中的电子的自旋 – 轨道耦合情况相同.

综上结果, 能级的相对论修正为

$$\langle H_{\mathrm{k}}\rangle + \langle H_{\mathrm{ls}}\rangle + \frac{3\hbar^2\omega^2}{8mc^2} \tag{17.69}$$

其中 $\langle H_{\mathrm{k}}\rangle$ 如式 (17.67) 所给, $\langle H_{\mathrm{ls}}\rangle$ 如式 (17.68) 所给. 可见上面 3 项量级相同, 与零级能量的比和零级能量与粒子静止能量量级相同. 常数项使得零级能量发生移动, 如式 (17.67) 所示, $\langle H_{\mathrm{k}}\rangle$ 总

小于零, 使得 N 相同但 l 不同的能级分裂为 $[N/2]+1$ 重. 如式 (17.68) 所示, $\langle H_{\rm ls}\rangle$ 有正有负, 它进一步使得 N、l 相同, 但 j 不同的能级再分裂为 2 重. 由于转动不变性, 每个能级仍存在有简并, 简并度为 $2j+1$.

例如对于 H_0 基态 $(N=l=0, j=1/2)$, 能级为

$$\frac{3}{2}\hbar\omega-\frac{3\hbar^2\omega^2}{32mc^2}$$

简并度为 2. 对于第一激发态, $N=l=1$, j 可以取 $1/2$ 与 $3/2$, 能级分裂为 2 重, 分别为

$$\frac{5}{2}\hbar\omega-\frac{39\hbar^2\omega^2}{32mc^2},\quad \frac{5}{2}\hbar\omega-\frac{15\hbar^2\omega^2}{32mc^2}$$

简并度分别为 2、4. 对于第二激发态, $N=2$, $l=0,2$, 对于 $l=0$, j 取 $1/2$, 对于 $l=2$, j 可以取 $3/2$ 与 $5/2$, 能级共分裂为 3 重, 分别为

$$\frac{7}{2}\hbar\omega-\frac{63\hbar^2\omega^2}{32mc^2},\quad \frac{7}{2}\hbar\omega-\frac{75\hbar^2\omega^2}{32mc^2},\quad \frac{7}{2}\hbar\omega-\frac{35\hbar^2\omega^2}{32mc^2}$$

而简并度分别为 2、4 和 6.

附录　几个积分和级数公式

(Ⅰ) 由 Gauss 积分公式衍生的一组积分公式 (其中 α 是复数, 要求被积函数满足可积条件)

$$I_{a,0}(\alpha)=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\alpha x^2}=\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \tag{A.1}$$

$$I_{a,2}(\alpha)=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\alpha x^2}x^2=-\frac{\partial}{\partial\alpha}I_0(\alpha)=\frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha^{\frac{3}{2}}} \tag{A.2}$$

$$I_{a,4}(\alpha)=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\alpha x^2}x^4=\left(-\frac{\partial}{\partial\alpha}\right)^2I_0(\alpha)=\frac{3\sqrt{\pi}}{4\alpha^{\frac{5}{2}}} \tag{A.3}$$

……

$$I_{a,2n}(\alpha)=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\alpha x^2}x^{2n}=\left(-\frac{\partial}{\partial\alpha}\right)^nI_0(\alpha)=\frac{(2n-1)!!\sqrt{\pi}}{2^n\alpha^{\frac{2n+1}{2}}} \tag{A.4}$$

式 (A.1) 可通过二重积分化为极坐标积分后进行. 而由此可得到式 (A.2-A.4). 由式 (A.1), 通过配方法又可得到下述广义 Gauss 积分公式

$$I_{a1,0}(\alpha,\beta)=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\alpha x^2+\beta x}=\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}\mathrm{e}^{\frac{\beta^2}{4\alpha}} \tag{A.5}$$

(Ⅱ) 由指数函数积分衍生的一组积分公式 (其中 α 是复数, 要求被积函数满足可积条件)

$$I_{b,0}(\alpha)=\int_0^{+\infty}\mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\alpha x}=\frac{1}{\alpha} \tag{A.6}$$

$$I_{b,1}(\alpha)=\int_0^{+\infty}\mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\alpha x}x=-\frac{\partial}{\partial\alpha}I_0(\alpha)=\frac{1}{\alpha^2} \tag{A.7}$$

$$I_{b,2}(\alpha)=\int_0^{+\infty}\mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\alpha x}x^2=\left(-\frac{\partial}{\partial\alpha}\right)^2I_0(\alpha)=\frac{2}{\alpha^3} \tag{A.8}$$

……

$$I_{b,n}(\alpha)=\int_0^{+\infty}\mathrm{d}x\mathrm{e}^{-\alpha x}x^n=\left(-\frac{\partial}{\partial\alpha}\right)^nI_0(\alpha)=\frac{\Gamma(n+1)}{\alpha^{n+1}} \tag{A.9}$$

其实量子力学、量子场论路径 (泛函) 积分真正常用的可积的积分公式并不多, R.P. Feynman 和 A.R. Hibbs 的 Quantum mechanics and path integrals(New York: McGraw-Hill, 1965) 一书在其附录 A(p.357) 只列了 10 个常用定积分公式.

(Ⅲ) 被积函数是幂函数与三角函数的乘积的不定积分 (省略积分常数 C)

$$\int x\cos px\mathrm{d}x=\frac{x}{p}\sin px+\frac{1}{p^2}\cos px \tag{A.10}$$

$$\int x^2\cos px\mathrm{d}x=\left(\frac{x^2}{p}-\frac{2}{p^3}\right)\sin px+\frac{2x}{p^2}\cos px \tag{A.11}$$

$$\int x\sin px\mathrm{d}x=-\frac{x}{p}\cos px+\frac{1}{p^2}\sin px \tag{A.12}$$

$$\int x^2\sin px\mathrm{d}x=\left(\frac{2}{p^3}-\frac{x^2}{p}\right)\cos px+\frac{2x}{p^2}\sin px \tag{A.13}$$

这四个不定积分均可通过分部积分法得到.

(Ⅳ) 一个较为常用的三角函数定积分

$$\int_0^{\pi/2}\sin^\alpha\theta\mathrm{d}\theta=\int_0^{\pi/2}\cos^\alpha\theta\mathrm{d}\theta=\frac{\sqrt{\pi}\Gamma\left(\dfrac{\alpha+1}{2}\right)}{2\Gamma\left(1+\dfrac{\alpha}{2}\right)} \tag{A.14}$$

其中 $\alpha>-1$ 为实数, 上面结果用 Γ 函数表示. 如 α 为正奇数 $\alpha=2n+1$, 则

$$\int_0^{\pi/2}\sin^{2n+1}\theta\mathrm{d}\theta=\int_0^{\pi/2}\cos^{2n+1}\theta\mathrm{d}\theta=\frac{(2n)!!}{(2n+1)!!} \tag{A.14$'$}$$

如 α 为正偶数 $\alpha=2n$, 则

$$\int_0^{\pi/2}\sin^{2n}\theta\mathrm{d}\theta=\int_0^{\pi/2}\cos^{2n}\theta\mathrm{d}\theta=\frac{(2n-1)!!}{(2n)!!}\frac{\pi}{2} \tag{A.14$''$}$$

(Ⅴ) 一个奇异积分

$$I(\lambda)=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{k^2-\lambda^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{d}k \tag{A.15}$$

这个积分在本书的一些题目中要用到. 在非齐次四维波动方程的 Green 函数以及坐标表象 Feynman 传播子等的计算中也都会涉及这个积分. 该积分的被积函数在 $k=\pm\lambda$ 处有两个一阶奇点. 若延拓到 k 的复平面积分, 相对于极点选取不同的积分路径, 就得到不同的积分结果. 我们对积分路径按如下方式选取

$$I_r(\lambda)=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{(k+\mathrm{i}0^+)^2-\lambda^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{d}k \tag{A.16}$$

其中 0^+ 表示正的小量. 当 $x>0$ 时

$$I_r(\lambda)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{(k+\mathrm{i}0^+)^2-\lambda^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{d}k=\oint_{C_r}\frac{1}{k^2-\lambda^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{d}k$$

其中围道 C_r 由 $(k=-\infty+\mathrm{i}0^+\to\infty+\mathrm{i}0^+)$ 直线与无穷远处上半平面的半圆组成, 在上半平面闭合, 且不包含奇点, 故所求得积分为零. 当 $x<0$ 时

$$I_r(\lambda)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{(k+\mathrm{i}0^+)^2-\lambda^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{d}k=\oint_{C_r}\frac{1}{k^2-\lambda^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{d}k$$

其中围道 C_r 由 $(k=-\infty+\mathrm{i}0^+\to\infty+\mathrm{i}0^+)$ 直线与无穷远处下半平面的半圆组成, 在下半平面闭合, 包含两个奇点 $k=\pm\lambda$, 根据留数定理得

$$\begin{aligned}I_r(\lambda)&=\oint_{C_r}\frac{1}{k^2-\lambda^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{d}k=-2\pi\mathrm{i}\mathrm{Res}\left[\frac{1}{k^2-\lambda^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\right]\\&=\frac{\mathrm{i}\pi}{\lambda}(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda x}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda x})=\frac{2\pi}{\lambda}\sin\lambda x\end{aligned}$$

因而

$$I_r(\lambda)=\begin{cases}0, & x>0\\ \dfrac{\mathrm{i}\pi}{\lambda}(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda x}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda x})=\dfrac{2\pi}{\lambda}\sin\lambda x, & x<0\end{cases} \tag{A.17}$$

利用阶跃函数 $\theta(x)$, 上式又可表示为

$$I_r(\lambda)=\theta(-x)\frac{2\pi}{\lambda}\sin\lambda x \tag{A.17'}$$

与式 (A.16) 不同, 若对式 (A.15) 的积分路径按如下方式选取

$$I_a(\lambda)=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{(k-\mathrm{i}0^+)^2-\lambda^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{d}k \tag{A.18}$$

则可以求得

$$I_a(\lambda)=\theta(x)\frac{2\pi}{\lambda}\sin\lambda x \tag{A.19}$$

若对式 (A.15) 采用其他的积分路径, 则结果总可以表示为上面式 (A.17,A.19) 的 I_r 与 I_a 的组合.

若对式 (A.15) 作一变化, 被积函数的分母 $k^2-\lambda^2$ 改为 $k^2+\lambda^2$, 则被积函数不再有奇异性. 若延拓到 k 的复平面积分, 则在虚轴上有奇点 $k=\pm\mathrm{i}\lambda$, 采用留数定理可得

$$I_{\mathrm{d}}(\lambda)=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{k^2+\lambda^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{d}k=\oint_{C_d}\frac{1}{k^2+\lambda^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{d}k=-2\pi\mathrm{i}\mathrm{Res}\left[\frac{1}{k^2+\lambda^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\right]=\frac{\pi}{\lambda}\mathrm{e}^{-\lambda|x|} \tag{A.20}$$

其中围道 C_{d} 由 $(k=-\infty\to\infty)$ 直线与无穷远处的半圆组成, $x>0$ 是上半平面的半圆, $x<0$ 是下半平面的半圆.

关于积分公式, 读者还可查阅: 龚昇、阮图南顾问, 金玉明主编,《实用积分表》, 中国科学技术大学出版社, 2006 年 1 月.《常用积分表》, 中国科学技术大学出版社, 2009 年 7 月.

(VI) 级数的部分和

$$\sum_{k=1}^{n}k=1+2+3+\cdots+n=\frac{1}{2}n(n+1) \tag{A.21}$$

$$\sum_{k=1}^{n}k^2=1^2+2^2+3^2+\cdots+n^2=\frac{1}{6}n(n+1)(2n+1) \tag{A.22}$$

$$\sum_{k=1}^{n}k^3=1^3+2^3+3^3+\cdots+n^3=\frac{1}{4}n^2(n+1)^2 \tag{A.23}$$

$$\sum_{k=1}^{n}k^4=1^4+2^4+3^4+\cdots+n^4=\frac{1}{30}n(n+1)(2n+1)(3n^2+3n-1) \tag{A.24}$$

(VII) 无穷级数求和

$$\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^2}=\frac{\pi^2}{6}\,,\quad\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^4}=\frac{\pi^4}{90}\,,\quad\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^6}=\frac{\pi^6}{945} \tag{A.25}$$

$$\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^{n+1}}{n}=\ln 2\,,\quad\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^{n+1}}{n^2}=\frac{\pi^2}{12} \tag{A.26}$$

$$\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(2n-1)^2}=\frac{\pi^2}{8}\,,\quad\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(2n-1)^4}=\frac{\pi^4}{96} \tag{A.27}$$

$$\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^{n+1}}{(2n-1)^3}=\frac{\pi^3}{32}\,,\quad\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{4n^2-1}=\frac{1}{2} \tag{A.28}$$

以上各式可见 GRADSHTEYN I S, RYZHIK I M, Table of Integrals, Series, and Products[M]. 6th ed. Elsevier (Singapore) Pte Ltd., 2004. 北京: 世界图书出版公司重印, 2004: p8~9, p1035.

主要参考文献

[1] 曾谨言. 量子力学. 卷 I . 4 版. 北京：科学出版社, 2007.

[2] 曾谨言. 量子力学. 卷II . 4 版. 北京：科学出版社, 2007.

[3] 钱伯初, 曾谨言. 量子力学习题精选与剖析. 3 版. 北京：科学出版社, 2008.

[4] 张永德, 柳盛典, 吴强等. 物理学大题典 —— 量子力学. 北京：科学出版社,2005.

[5] 吴强, 柳盛典. 量子力学习题精解. 北京：科学出版社, 2003.

[6] 张鹏飞, 阮图南, 朱栋培等. 量子力学学习指导. 合肥: 中国科学技术大学出版社,2008.

[7] Flügge S. Practical Quantum Mechanics. znd ed. Berlin: Springer-Verlag, 1994. 北京：世界图书出版公司重印, 2009.

[8] Haar D ter. Problems in Quantum Mechanics. 3rd ed. London: Pion Limited, 1975.

[9] Constantinescu F, Magyari Z. 量子力学习题与解答. 葛源译. 北京: 高等教育出版社,1985.

[10] 张永德. 量子力学. 北京：科学出版社, 2002.

[11] 朱栋培, 陈宏芳, 石名俊. 原子物理与量子力学. 北京：科学出版社, 2008.

[12] Landau L D, Lifshitz E M. Quantum Mechanics: Non-relativistic Theory. Course of Theoretical Physics: Vol. 3. 3rd ed. Oxford: Butterworth-Heinemann. 北京：世界图书出版公司重印, 1999.

[13] Cohen-Tannoudji C, Diu B, Laloë F. Quantum Mechanics: I , II . New York: Wiley, 1977.

[14] Messiah A. Quantum Mechanics:Vol.1,Vol.2. Amsterdan: North-Holland Pub. Co., 1961.

后　记

书稿总算写完了. 2006 年签的合同, 本来是计划 2007 年上半年交稿, 下半年出版的. 竟拖延至今, 这书稿拖的时间太长了, 越是拖延, 越感压力. 现在总算完成了任务, 心里也长长松了口气, 想起本书的缘起, 竟不由地百感交集.

3 年前由尹民教授牵线, 我与当时来中国科学技术大学的科学出版社热情而敬业的昌盛编辑见了面, 昌盛编辑说曾谨言先生正在对他的《量子力学 (卷 I 、卷 II)》进行修改, 准备 2007 年出第四版, 因此这时候他希望能够有一个全书的习题解答, 并与曾先生的第四版书配套出版. 那时候我跟随我的导师阮图南先生讲授量子力学已有好几个学期了, 并与阮先生编写过一本《量子力学习题解答》讲义. 曾先生的《量子力学 (卷 I 、卷 II)》书中习题较多, 但我在以往的学习以及教学中已把这些题的大部分都解过了 (积累起来的几个笔记本都还在), 所以我当时认为, 若与阮先生一起做一定可以把这件事做得很好的. 我说我会跟阮先生商量的, 昌盛编辑说由他负责征求曾谨言先生的意见.

过了一些日子, 安徽大学徐辅新教授在一次会上见到了曾谨言先生, 曾先生已知道了科学出版社要出这样一个习题解答的计划. 曾先生说, 虽然量子力学已有较多的学习指导、习题解的书, 但是《量子力学 (卷 I 、卷 II)》全部习题的解答还没有人出过, 这样一本书值得出. 曾先生请徐辅新教授转告阮图南老师, 写这本书只要有阮老师参加, 他就很放心.

昌盛编辑又一次来中国科学技术大学的时候, 阮先生与我和他会了面. 记得那次就在我的办公室, 阮先生与昌盛编辑这一对老少校友先是谈起了北京大学的一些事情, 聊得非常投机. 昌盛编辑说他已问过曾谨言先生, 而他所说的曾先生意见与先前徐辅新教授所说的一样, 就是本书值得出版, 而且只要有阮图南老师参加, 他就很放心. 阮先生与曾谨言先生是老朋友, 阮先生说, 这是曾谨言先生的信任, 要写就一定要写好.

我与阮先生很快就投入撰写. 先前我已把曾先生的《量子力学 (卷 I 、卷 II)》书中习题的大部分都解过, 但其中相当一部分都做得较为粗糙. 我曾从大物理学家 E. Fermi 的传记 (由他的学生 E. Segrè所写, 当时中国科学技术大学图书馆只有唯一的一本英文原版的书, 后来国内又出过中译本) 中看到, Fermi 给一些难题的解答通常只有一行文字. 受此“影响”, 有一阵子, 我解一些题也就有些偷懒, 解答常常只写我认为是最关键的很少的几步. 而有一次当我看到阮先生亲手做的量子力学习题时, 又曾受到大的触动. 阮先生曾做过曾先生的《量子力学导论》的前面几章的习题, 在我与阮先生等人合作编写的《量子力学学习指导》(2008 年 5 月出版) 一书的后记里写道:

……

> 先生要我重视这门课的教学, 他自己正是这么做的. 先生的量子力学讲稿每讲一轮都会重写. 他的讲稿, 看起来很随便, 有些用的都是发黄的稿纸、一些会议材料的背面或者用过的复印纸背面. 他一张一张地写, 写了一摞, 便拿个夹子一夹或者用订书机一订. 这一摞一摞讲稿里面, 每页纸上每个字、每个符号、每个公式都写得工工整整、稳稳当当、一丝不苟, 显得那么自信与正确. 我有事到先生家去, 要碰上他正备课的时候, 他便常让我在桌子对面先坐一会儿, 他却仍对着他的讲稿凝思. 等他一个式子写完, 才来招呼我. 先生可能是除了体育以外, 没有其他业余爱好的, 平常一有空就是做演算, 写

讲稿. 他到外地去, 也带着讲稿, 一有空就开始写或者演算. 我想正是他课堂以外下的功夫, 使得他上课可以基本不看讲稿, 在讲台前一黑板一黑板地写.

先生说要求学生做的, 自己要先做到. 那次他问我, 教科书上的习题做没做? 我说, 我以前读本科上这门课的时候, 把那时用的曾谨言先生编的教材上的习题全做过了. 只不过现在用的教材, 是曾先生后来编的, 可能有一些新题. 先生说, 以前做过的, 现在也应该做一些, 特别是新题, 一定要做. 只有做了, 才有把握让学生做. 而我因为各种原因, 他讲过以后有一段时间都还并没有真正花多少时间做题. 过了一些天, 先生拿给我几摞稿子, '喏, 这是我做的. ' 他要我整理一个教材的全部习题解答, 他做了前面一部分, 但后面部分他那个学期不一定有那么多时间做了, 他想我能不能完成. 他还告诉我, 前 3 章已经请助教录到电脑里了, 要我核对一下. 我拿起这几摞稿子, 翻了翻, 虽说已跟随先生多年, 还是觉得很惊异. 因为, 我原先也曾做过几次助教, 印象里习题一般都是助教的事, 主讲老师一般都是不太管的, 而先生现在却已做了这几本厚厚的稿子. 这也实在让我心下惭愧, 因为先生曾要求我做的, 我却并没有怎么做. 细细看来, 这一题一题, 按照次序写下来, 一题不拉; 每道题一步一步, 老老实实的, 不厌其烦, 一步都不跳, 一点都不省略. 而其中每个字、每个符号, 也都是秉承他一贯的风格: 工工整整、一丝不苟. 而这是一位年迈的教授亲手做的呀, 这又让我很惭愧. 我本来认为已把整本教材的习题基本全做了, 没有太大的必要再做了, 可那时才知道我做的那些东西在质量方面跟先生做的实在无法相比.

阮先生那时拿给我的由他亲手做的几摞习题的稿子, 对于我真正起了鞭策作用. 在撰写本书过程中, 我就再也不敢偷懒, 而是尽量按照先生的风格去写. 那一阵子, 我与先生每隔两三天就碰面, 也经常讨论本书撰写的事. 他由于要开一门新课, 所以他解的题就少一些, 但他经常看我写的稿子, 一步一步看, 并时不时提出意见. 偶尔碰上难题, 我给卡住了, 就跟先生说. 多半是第二天, 或者过几天, 先生就会与平常为我解答科研上的一些难题一样, 拿给我这道题的详细解答, 工工整整地写在纸上, 我只要录到电脑里即可. 我也把一些题的解答与一些流行的量子力学习题解答的书比较, 发现跟这些书不一致的地方, 我就很着急. 先生说, 不同的人解一样的题, 有不一样的地方很正常, 但涉及谁对谁错的地方要特别小心. 他让我再检查检查, 他也会检查和演算一遍, 先看看是不是自己搞错了. 如果确实是人家错, 还要看看人家错在哪里, 为什么错, 他会鼓励我不要怕, 就按我们认为正确的写. 正如阮先生言传身教不断让我们体会到的: 做学问不要认权威, 应该认真理. 我还相信, 如果是我跟曾先生讨论这种问题, 他也会给我一样的体会的, 曾先生在他的书中写道"吾爱吾师, 吾尤爱真理".

因为有阮先生作后盾, 那时候我们的书稿撰写非常顺利. 然而因为一场急性病, 先生在 2007 年春季开学的第一天住进了医院并在两个月后就去世了. 记得阮先生住院期间, 他还谈起过这本书的事, 而我也曾问过他问题. 阮先生的去世意味着先前我们之间的顺利合作不得不中止了, 书稿也因此被搁置起来, 很长一段时间没有动笔. 直到贾杨编辑催稿, 我想此书实际上大部分工作都完成了, 再怎么样也应当设法完成. 编辑同意本书交稿时间推迟, 于是在朱栋培、吴强两位教授的直接帮助下, 我又开始着手编写. 那段时间也得到了很多老师的鼓励和帮助. 但也许是因为少了与阮先生的讨论, 少了阮先生的督促, 书稿撰写变得迟缓了许多, 交稿时间也一推再推. 因为贾杨编辑要负责别的书, 此书后来又改由窦京涛编辑具体负责, 昌盛编辑也非常关心本书.

在一次会上, 我又碰到了安徽大学徐辅新教授. 徐老师特地拉我在一旁说话, 他问我书写得怎么样了? 徐老师说, 曾谨言先生一直关心本书的编写. 在阮先生去世以后, 徐老师已告诉曾先生, 此书主要由阮先生的一个学生在写. 后来, 徐老师每次与曾先生见面或者通电话时曾先生都

要问起此书, 最近一次曾先生问起来还说他愿意提供帮助, 如果出版时碰到问题, 他可以跟出版社说.

我 20 年前作学生时初学量子力学读的就是曾先生的书, 后来随阮图南先生讲授量子力学直到现在自己独立讲授量子力学又一直是用曾先生的书. 我还因为在中国科学技术大学讲过几种类型的量子力学课程, 所以曾先生的各种量子力学教材全用过, 此外也读过他编写的其他量子力学著作. 我读曾先生的书, 用曾先生的书, 对曾先生满怀敬仰, 可是始终没能与曾先生有过面对面认识的机会. 记得我曾经听过曾先生的报告, 报告会后带着问题挤在后面想去问曾先生, 可是也没轮到我问. 我这次因为阮先生的关系, 得以有机会编写曾先生名著的学习辅导书, 已深感荣幸, 现在又得到曾先生如此关心, 真是十分感动.

书完稿了, 它主要是阮先生等老师与我合作的产物, 也得到了曾谨言先生等多位老师的关心和帮助. "如临深渊, 如履薄冰", 这段时间里我满怀虔敬、小心翼翼地做着本书的编写工作, 衷心希望它正式出版以后能够如阮先生所说的"让学生看了受益, 让读者满意", 不辜负各位热心人的期待.

张鹏飞

2009 年 9 月 9 日