量子力学习题精选与剖析

（第二版）

上册

钱伯初
曾谨言 著

科学出版社

量子力学习题精选与剖析

（第二版）

上 册

钱伯初 曾谨言 著

科 学 出 版 社

1999

内 容 简 介

本书是作者在北京大学和兰州大学讲授量子力学课程基础上，精选内容新颖、难度较大的习题汇集．这些题大部分选自近年来国内外研究生试题和资格考试题，全部习题均给出了详细的分析和解答，其中有些解法是作者独创的．这次再版，为配合大学生和研究生的需要，分成了上下册，上册包括 Schrödinger 方程、δ 势场中粒子的运动、谐振子、力学量的算符表示、中心力场、角动量、磁场中粒子的运动、定态微扰论、变分法、量子跃迁、弹性散射．本书可以作为量子力学的参考书．

图书在版编目(CIP)数据

量子力学习题精选与剖析　上册/钱伯初，曾谨言著．
2版．-北京：科学出版社，1999.1

ISBN 7-03-006760-6

Ⅰ.量… Ⅱ.①钱…②曾… Ⅲ.量子力学-高等学校-习题 Ⅳ.0413.1-44

中国版本图书馆 CIP 数据核字(98)第 13163 号

科学出版社出版
北京东黄城根北街 16 号
邮政编码：100717
北京顺义印刷厂 印刷
新华书店北京发行所发行　各地新华书店经售
*
1988 年 4 月第 一 版　开本：850×1168　1/32
1999 年 1 月第 二 版　印张：15 7/8
1999 年 1 月第二次印刷　字数：418 000
印数：11 239—14 738

定 价：26.00 元

（如有印装质量问题，我社负责调换（环伟））

前　言

物理学的各门基础理论课，如果脱离了在具体问题中的应用，初学者就很难深入理解和掌握其基本概念和原理的实质. 对于量子力学，尤其是这样. 凡是有一些教学和科研实践经验的人，对此都会有同感. 做习题就是一种初步地运用基本概念和原理来处理一些简单的或理想化了的问题的训练. 在教学中我们发现，有相当一部分学生，他们可以将教科书中讲述的原理原封不动地复述出来，但是不会做题，更不会应用基本原理去处理具体问题. 更有甚者，不少人在学过《高等量子力学》课程之后，仍对某些很简单的量子力学问题束手无策. 这种"知识多，能力差"的通病应该引起我们深思. 我们认为，通过基础课的教学，不仅要向学生传授知识，更重要的是培养思考和解决问题的能力.

从近年来国外许多大学的量子力学新教材、习题、试题以及研究生资格考试题来看，其特点是难度高，灵活性大，反映量子力学在各前沿研究领域中应用的内容较多. 特别是，国外许多大学的研究生资格考试题有相当大一部分是从科研前沿课题中直接提取出来的. 国内的学生碰到这些问题时，往往感到无从下手. 近年来，由于教学的需要，我们接触了大量的这类题. 为了满足国内广大师生的要求，我们精选了 370 道有代表性的习题，作了较深入和新颖的剖析，整理成本书. 书中习题的解答，绝大多数都是我们自己给出的，即原始的(original)而不是转抄的. 解法力求简明，直截了当. 有些题，给出了多种解法，以便读者对照比较，有利于深入了解各种解法之间的内在联系. 我们希望读者能够以研究的态度阅读本书，这样才能较好地领会并掌握各种方法的精神实质，做到举一反三. 我们相信，凡是认真钻研了这本书的读者，对于量子力学基本

概念和原理的理解程度，以及应用量子力学处理具体问题的能力，一定会有较大的提高.

希望本书的出版，对于进一步提高我国的量子力学教学水平有所裨益. 不妥当和不正确之处，在所难免，诚恳希望广大读者提出批评指正.

作　者

1988 年

第二版序言

本书自 1988 年出版以来，受到广大读者和教师的热诚欢迎，作者曾经收到很多读者来信，认为：本书不仅对于帮助初学者确切掌握量子力学的基本概念和原理很有帮助，而且有助于初学者应用量子力学理论去处理和分析具体问题，以及掌握各种计算方法和技巧。这对于学习后继课和从事科研工作都很有用。一些有志深造的读者（包括研究生，出国留学生）几乎人手一册。本书还在台、港、澳和海外华裔读者中广泛流传。虽经大量重印，仍不能满足读者要求。

为适应目前国内情况，本书第二版分上、下两册发行，并增选了一些新的题目。大体说来，上册内容针对本科生量子力学课，下册则针对研究生的高等量子力学课。但此界线是很难划分的，读者可根据自己需要来选用。希望本书能对提高我国的量子力学教学水平有一点贡献。

作　者

1998年

目　录

第一章　Schrödinger 方程　一维运动 …… (1)
第二章　δ 势场中粒子的运动 …… (34)
第三章　谐振子 …… (57)
第四章　力学量的算符表示 …… (98)
第五章　中心力场 …… (115)
第六章　角动量 …… (169)
第七章　磁场中粒子的运动 …… (262)
第八章　定态微扰论 …… (271)
第九章　变分法 …… (359)
第十章　量子跃迁 …… (408)
第十一章　弹性散射 …… (441)

第一章　Schrödinger　方程　一维运动

1.1　设 $\psi_1(\boldsymbol{r},t)$ 和 $\psi_2(\boldsymbol{r},t)$ 是Schrödinger方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V(\boldsymbol{r})\psi$$

的两个解，证明 $\int\psi_1^*\psi_2\mathrm{d}^3x$ 与时间无关.

证　ψ_1 和 ψ_2 分别满足 Schrodinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_1=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_1+V\psi_1 \tag{1}$$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_2=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_2+V\psi_2 \tag{2}$$

以 ψ_1^* 左乘式(2)，ψ_2 左乘式(1)之共轭方程，再相减，即得

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi_1^*\psi_2)&=\frac{\hbar^2}{2m}(\psi_2\nabla^2\psi_1^*-\psi_1^*\nabla^2\psi_2)\\&=\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\cdot(\psi_2\nabla\psi_1^*-\psi_1^*\nabla\psi_2)\end{aligned}$$

再对全空间积分，得到

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int\psi_1^*\psi_2\mathrm{d}^3x&=\frac{\hbar^2}{2m}\int\nabla\cdot(\psi_2\nabla\psi_1^*-\psi_1^*\nabla\psi_2)\mathrm{d}^3x\\&=\frac{\hbar^2}{2m}\oint(\psi_2\nabla\psi_1^*-\psi_1^*\nabla\psi_2)\cdot\mathrm{d}s\end{aligned} \tag{3}$$

其中，$\mathrm{d}s$ 为面元，按照波函数在无穷远处迅速趋于零的条件，式(3)右端之面积分为零，故得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int\psi_1^*\psi_2\mathrm{d}^3x=0$$

亦即 $\int\psi_1^*\psi_2\mathrm{d}^3x$ 与时间无关.

1.2 粒子在一维势场 $V(x)$ 中运动，试证明：属于不同能级的束缚态波函数互相正交.

证 设 ψ_1、ψ_2 分别为属于能级 E_1、E_2 的束缚态波函数. 由于是一维束缚 态，ψ_1、ψ_2 都可以取为实函数，故只需证明

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1(x)\psi_2(x)\mathrm{d}x=0$$

ψ_1 和 ψ_2 均应满足定态Schrodinger方程，即

$$\psi_1''=\frac{2m}{\hbar^2}[V(x)-E_1]\psi_1 \tag{1}$$

$$\psi_2''=\frac{2m}{\hbar^2}[V(x)-E_2]\psi_2 \tag{2}$$

以 ψ_2 左乘式(1)，ψ_1 左乘以(2)，再相减，即得

$$\frac{2m}{\hbar^2}(E_2-E_1)\psi_1\psi_2=\psi_2\psi_1''-\psi_1\psi_2''$$

$$=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(\psi_2\psi_1'-\psi_1\psi_2')$$

对全空间积分，得到(束缚态波函数在无穷远处必须趋于 0)

$$\frac{2m}{\hbar^2}(E_2-E_1)\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1\psi_2\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(\psi_2\psi_1'-\psi_1\psi_2')\mathrm{d}x$$

$$=(\psi_2\psi_1'-\psi_1\psi_2')\Big|_{-\infty}^{+\infty}=0$$

因此，当 $E_2\neq E_1$，就有

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1\psi_2\mathrm{d}x=0 \tag{3}$$

亦即 ψ_1 与 ψ_2 正交.

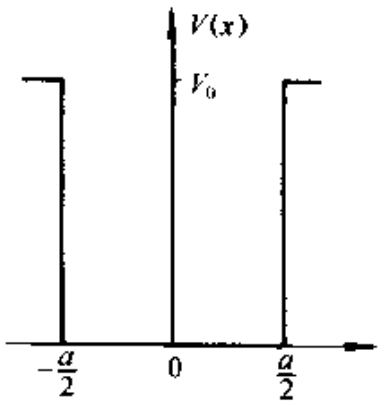


图 1.3

1.3 粒子在深度为 V_0，宽度为 a 的直角势阱(如图 1.3)中运动，求

(a) 阱口刚好出现一个束缚态能级(即 $E\approx V_0$)的条件；

(b) 束缚态能级总数，并和无限深势阱作比较.

解 粒子能量 E 小于 V_0 时为束缚态，E 大于 V_0 时为游离态. 能量本征方程为

$$\psi''+\frac{2m}{\hbar^2}[E-V(x)]\psi=0 \tag{1}$$

令

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

式(1)可以写成

$$\begin{cases}\psi''+\dfrac{2mE}{\hbar^2}\psi=0, & |x|\leqslant a/2 \text{（阱内）} \quad (3)\\ \psi''-\beta^2\psi=0, & |x|\geqslant a/2 \text{（阱外）} \quad (4)\end{cases}$$

无限远处束缚态波函数应趋于 0，因此式(4)的解应取为

$$\psi(x)=Ce^{-\beta|x|}, \qquad |x|\geqslant a/2 \tag{5}$$

当阱口刚好出现束缚态能级时，$E\approx V_0$，$\beta\approx 0$，因此

$$\psi'(x)=\pm\beta Ce^{-\beta|x|}\approx 0, \qquad |x|\geqslant a/2 \tag{6}$$

阱内波函数可由式(3)解出，当 $E\approx V_0$，解为

$$\begin{aligned}&\text{偶宇称} \quad \psi(x)=\cos k_0x,\\ &\text{奇宇称} \quad \psi(x)=\sin k_0x,\end{aligned} \qquad |x|\leqslant a/2 \tag{7}$$

阱内、外 ψ 和 ψ' 应该连续，而由式(6)可知，$x=a/2$ 处，$\psi'=0$，将这条件用于式(7)，即得

$$\begin{aligned}&\text{偶宇称} \quad \sin\frac{k_0a}{2}=0, \qquad k_0a=2\pi,4\pi,6\pi,\cdots\\ &\text{奇宇称} \quad \cos\frac{k_0a}{2}=0, \qquad k_0a=\pi,3\pi,5\pi,\cdots\end{aligned} \tag{8}$$

亦即阱口刚好出现束缚能级的条件为

$$k_0a=n\pi, \qquad n=1,2,3,\cdots \tag{9}$$

即

$$\boxed{2mV_0a^2/\hbar^2=n^2\pi^2} \tag{10}$$

这种类型的一维势阱至少有一个束缚能级. 因此，如 $2mV_0a^2/\hbar^2<\pi^2$，只存在一个束缚态，偶宇称(基态). 如 $2mV_0a^2/\hbar^2$

$=\pi^2$，除基态外，阱口将再出现一个能级（奇宇称态），共二个能级．如 $2mV_0a^2/\hbar^2=(2\pi)^2$，阱口将出现第三个能级（偶宇称）．依此类推．由此可知，对于任何 V_0a^2 值，束缚态能级总数为

$$N=1+\left[\frac{a}{\hbar\pi}\sqrt{2mV_0}\right] \tag{11}$$

其中符号[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

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

则 $E\leqslant V_0$ 的能级数为

$$n=\left[\frac{a}{\pi\hbar}\sqrt{2mV_0}\right]=N-1 \tag{12}$$

也就是说，如果只计算 $E\leqslant V_0$ 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．注意，后者的每一个能级均一一对应地高于前者的相应能级（参看下册题 5.5）．

1.4 对于直角势阱（深度为 V_0，宽度为 a）的第 n 个束缚态 ψ_n、E_n，在 $V_0\gg E_n$ 条件下，计算

(a) 粒子在阱外出现的概率；

(b) $V(x)$和 $V^2(x)$的平均值，并和 E_n 比较．

解 以偶宇称态为例．能量本征方程[见题 1.3，式(3)、(4)]可以写成

$$\begin{cases}\psi''+k^2\psi=0, & |x|\leqslant a/2\ (\text{阱内})\\ \psi''-\beta^2\psi=0, & |x|\geqslant a/2\ (\text{阱外})\end{cases} \tag{1}$$

其中

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

注意在 $V_0\gg E$ 条件下，$\beta\gg k$．

式(1)的偶宇称解为

$$\begin{aligned}&\psi=\cos kx, && |x|\leqslant a/2\\ &\psi=Ce^{-\beta|x|}, && |x|\geqslant a/2\end{aligned} \tag{3}$$

$x=a/2$ 处 ψ 应连续，由此得出

$$C=e^{\beta a/2}\cos\frac{ka}{2} \tag{4}$$

$x=a/2$ 处 ψ' 也应连续，由此得出

$$C=\frac{k}{\beta}e^{\beta a/2}\sin\frac{ka}{2}$$

和式(4)相除，即得能级公式

$$\tan\frac{ka}{2}=\frac{\beta}{k} \tag{5}$$

在 $\beta\gg k$ 条件下，式(5)的解为

$$ka\approx n\pi,\qquad n=1,3,5,\cdots \tag{6}$$

代入式(2)，即得能级为

$$E_n=\frac{\hbar^2k^2}{2m}\approx\frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2 \tag{7}$$

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．由式(3)、(4)容易求出

$$\int_{\text{阱外}}|\psi|^2dx=2C^2\int_{a/2}^{\infty}e^{-2\beta x}dx$$

$$=\frac{C^2}{\beta}e^{-\beta a}=\frac{1}{\beta}\cos^2\frac{ka}{2} \tag{8}$$

$$\int_{\text{阱内}}|\psi|^2dx=2\int_0^{a/2}\cos^2kxdx=\frac{a}{2}\left(1+\frac{\sin ka}{ka}\right) \tag{9}$$

考虑到 $ka\approx n\pi(n=1,3,5,\cdots)$，$\sin ka$ 和 $\cos(ka/2)$均接近于零，可知粒子出现在阱外概率远小于阱内概率．而且

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi|^2dx\approx\int_{\text{阱内}}|\psi|^2dx\approx\frac{a}{2}$$

$$\text{阱外概率}=\frac{\int_{\text{阱外}}|\psi|^2dx}{\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi|^2dx}\approx\frac{2}{\beta a}\cos^2\frac{ka}{2} \tag{10}$$

利用能级公式(5)，易得

$$1+\tan^2\frac{ka}{2}=\frac{k^2+\beta^2}{k^2}=\frac{V_0}{E}$$

$$\boxed{\cos^2\frac{ka}{2}=\frac{E}{V_0}} \tag{11}$$

代入式(10),即得

$$\text{阱外概率}=\frac{2E}{a\beta V_0}\approx\frac{2\hbar}{a\sqrt{2mV_0}}\frac{E}{V_0} \tag{12}$$

考虑到 $V_0\gg E$ 和能级公式(7),易见

$$\sqrt{2mV_0}\gg n\pi\hbar/a \tag{13}$$

因此,

$$\text{阱外概率}\ll\frac{2E}{n\pi V_0} \tag{14}$$

最后计算 $V(x)$和 $V^2(x)$平均值. 利用式(12),

$$\overline{V(x)}=(\text{阱外概率})\,V_0\approx\frac{2\hbar E}{a\sqrt{2mV_0}} \tag{15}$$

$$\overline{V^2}=(\text{阱外概率})\;V_0^2\approx\frac{\hbar E}{ma}\sqrt{2mV_0} \tag{16}$$

再利用式(13),即可和 E_n(即 E)作出比较,

$$\boxed{\overline{V(x)}\ll\frac{2E_n}{n\pi},\qquad\overline{V^2}\gg\frac{n\pi\hbar^2E}{ma^2}\approx\frac{2}{n\pi}E_n^2} \tag{17}$$

1.5 粒子在无限深方势阱(宽度为 a)中运动,处于第 n 个束缚态 ψ_n,求粒子对于每一侧阱壁的平均作用力.

解 无限深方势阱可以视为有限深(深度为 V_0)势阱当 $V_0\longrightarrow\infty$的极限情形,即

$$V(x)=\begin{cases}0, & |x|<a/2\\ V_0, & |x|\geqslant a/2\end{cases}\qquad(V_0\longrightarrow\infty) \tag{1}$$

粒子所受作用力为$-\mathrm{d}V/\mathrm{d}x$,粒子对阱壁的作用力为

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

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

$(x=-a/2)$. 第一项的平均值为

$$\langle F_{右}\rangle=\frac{\int|\psi|^2V_0\delta\left(x-\frac{a}{2}\right)\mathrm{d}x}{\int|\psi|^2\mathrm{d}x}=\frac{V_0\left|\psi\left(\frac{a}{2}\right)\right|^2}{\int|\psi|^2\mathrm{d}x} \tag{3}$$

其中积分均为全空间积分．利用题 1.5 的计算结果，容易算出

$$\langle F_{右}\rangle\approx\frac{2V_0}{a}\cos^2\frac{ka}{2}=\frac{2E_n}{a} \tag{4}$$

V_0/E 越大，式(4)越准确．

由对称性，显然有

$$\langle F_{左}\rangle=-\langle F_{右}\rangle \tag{5}$$

式(4)可作如下解释：设固定阱壁左侧而令右侧徐缓向外移动距离 Δa，则粒子对外作功 $\langle F_{右}\rangle\Delta a$，结果导致能级降低，根据能量守恒定律，应有

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

此即式(4).

1.6 粒子在图示之势场

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

中运动，求能级公式，并讨论如下极限情况：

$$a\longrightarrow 0,\quad V_0\longrightarrow\infty,\quad 2aV_0\longrightarrow U_0(\text{有限值})$$

解 由于 $V(x)\geqslant 0$，所以 $E>0$. 由于 $V(-x)=V(x)$，所以能量本征态有确定宇称．在 $V(x)\longrightarrow\infty$ 处，波函数应该趋于 0，所以边界条件为

$$\psi(x)=0,\quad |x|\geqslant L \tag{1}$$

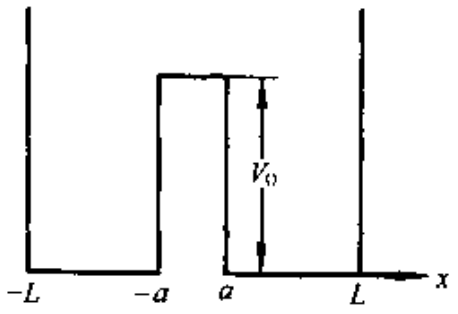


图 1.6

(a) 偶宇称态

1° $E<V_0$，令

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

能量本征方程可以写成

$$\begin{aligned}&\psi''-\xi^2\psi=0, && |x|<a\\&\psi''+k^2\psi=0, && a<|x|<L\end{aligned} \tag{3}$$

满足边界条件(1)的解为

$$\begin{aligned}&\psi=\mathrm{ch}\xi x=\frac{1}{2}(\mathrm{e}^{\xi x}+\mathrm{e}^{-\xi x}), && |x|<a\\&\psi=A\sin k(L-x). && a<x<L\end{aligned} \tag{4}$$

($-L<x<-a$ 区间的 ψ,可以按偶函数条件写出,从略.)由 $x=a$ 处 ψ'/ψ 的连续条件,即可得出能级方程

$$k\cot k(L-a)=-\xi\mathrm{th}\xi a \tag{5}$$

其中

$$\mathrm{th}\ x=\frac{\mathrm{e}^{x}-\mathrm{e}^{-x}}{\mathrm{e}^{x}+\mathrm{e}^{-x}}$$

2° $E>V_0$,令

$$\eta=\sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar \tag{6}$$

能量本征方程可以写为

$$\begin{aligned}&\psi''+\eta^2\psi=0, && |x|<a\\&\psi''+k^2\psi=0, && a<|x|<L\end{aligned} \tag{7}$$

满足边界条件(1)的解为

$$\begin{aligned}&\psi=\cos\eta x, && |x|<a\\&\psi=B\sin k(L-x). && a<x<L\end{aligned} \tag{8}$$

($-L<x<-a$ 区间的 ψ,按偶函数条件写出,从略.). 由 $x=a$ 处 ψ'/ψ 的连续条件,即可得出能级方程

$$k\cot k(L-a)=\eta\tan\eta a \tag{9}$$

(b) 奇宇称态

1° $E<V_0$,定态方程仍为式(3),满足边界条件式(1)的解为

$$\begin{aligned}&\psi=\mathrm{sh}\xi x=\frac{1}{2}(\mathrm{e}^{\xi x}-\mathrm{e}^{-\xi x}), && |x|<a\\&\psi=C\sin k(L-x), && a<x<L\end{aligned}\tag{10}$$

($-L<x<-a$ 区间的 ψ，按奇函数条件写出，从略．)能级方程为

$$k\cot k(L-a)=-\xi\coth\xi a\tag{11}$$

其中

$$\coth x=1/\mathrm{th}\ x=(\mathrm{e}^{x}+\mathrm{e}^{-x})/(\mathrm{e}^{x}-\mathrm{e}^{-x})$$

2° $E>V_0$，定态方程仍为式(7)，满足边界条件(1)的解为

$$\begin{aligned}&\psi=\sin\eta x, && |x|<a\\&\psi=D\sin k(L-x), && a<x<L\end{aligned}\tag{12}$$

($-L<x<-a$ 区间的 ψ，按奇函数条件写出，从略．)能级方程为

$$k\cot k(L-a)=-\eta\cot\eta a\tag{13}$$

讨论 如 $a\longrightarrow 0$，$V_0\longrightarrow\infty$，但 $2aV_0\longrightarrow U_0$，则

$$\int_{-a}^{a}V(x)\mathrm{d}x=2aV_0=U_0$$

相当于在 $x=0$ 处存在一个 δ 势垒

$$V(x)=U_0\delta(x),\qquad |x|<L\tag{14}$$

只需考虑 $E<V_0$ 的情形．

(a) 偶宇称态

这时，可取下列近似：

$$\xi^2a\approx 2mV_0a/\hbar^2=mU_0/\hbar^2$$

$$\xi a\ll 1,\quad \mathrm{th}\xi a\approx\xi a,\quad \xi\mathrm{th}\xi a\approx mU_0/\hbar^2$$

式(5)变成

$$k\cot kL=-mU_0/\hbar^2\tag{5'}$$

这和后面题 2.4 所得的结果一致．

(b) 奇宇称态

取上述近似后，式(11)变成

$$\tan kL=-ka\longrightarrow 0\tag{11'}$$

解为

$$k=\frac{n\pi}{L},\qquad E=\frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{L}\right)^2,\qquad n=1,2,3,\cdots$$

这结果等价于平底无限深势阱，因为奇宇称态 $\psi(0)=0$，中央的 δ 势垒不起作用(参看题 2.4).

1.7 粒子作自由运动，已知 $t=0$ 时初始波函数为

$$\psi(x,0)=(2\pi a^2)^{-1/4}\exp\left[ik_0(x-x_0)-\left(\frac{x-x_0}{2a}\right)^2\right],\quad a>0.$$

(a) 求 $t=0$ 时波包宽度 Δx，动量涨落 Δp 及 p 表象中的波函数 $\varphi(p)$；(b) 求 $t>0$ 时波函数 $\psi(x,t)$ 以及 $\bar{x}(t)$，Δx；(c) 讨论此波包的运动特征.

解 为了简化，计算过程中将取 $\hbar=1$，在最后结果中再添上. 先讨论 $t=0$ 时波包的形状

$$|\psi(x,0)|^2=(2\pi a^2)^{-1/2}e^{-(x-x_0)^2/2a^2} \tag{1}$$

为 Gauss 型分布. 按照平均值公式

$$\overline{f(x)}=\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi|^2 f(x)dx$$

容易算出 $t=0$ 时

$$\begin{aligned}&\bar{x}=x_0,\qquad \overline{x^2}=a^2+x_0^2\\&\Delta x=(\overline{x^2}-\bar{x}^2)^{1/2}=a\end{aligned} \tag{2}$$

即 $t=0$ 时波包中心在 x_0 处，波包宽度为 a.

令

$$\psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(k)e^{ikx}dk \tag{3}$$

$\varphi(k)$即动量表象中的初始波函数. 根据 Fourier 变换公式

$$\begin{aligned}\varphi(k)&=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x,0)e^{-ikx}dx\\&=\left(\frac{1}{2\pi}\right)^{3/4}\frac{1}{\sqrt{a}}e^{-ikx_0}\\&\quad\cdot\int_{-\infty}^{+\infty}dx\exp\left[-\left(\frac{x-x_0}{2a}\right)^2-i(k-k_0)(x-x_0)\right]\end{aligned}$$

$$= \left(\frac{2a^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \exp[-\mathrm{i}kx_0 - a^2(k-k_0)^2] \tag{4}$$

计算中利用了积分公式(A)(见本题末附注). 由式(4)

$$|\varphi(k)|^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi}} a \mathrm{e}^{-2a^2(k-k_0)^2} \tag{5}$$

即动量的概率分布也呈 Gauss 型分布. 由平均值公式

$$\overline{f(k)} = \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(k)|^2 f(k) \mathrm{d}k$$

容易算出

$$\bar{k} = k_0, \qquad \overline{k^2} = k_0^2 + \frac{1}{4a^2} \tag{6}$$

由于 $p=\hbar k$,因此

$$\bar{p} = \hbar k_0, \qquad \overline{p^2} = \hbar^2 k_0^2 + \frac{\hbar^2}{4a^2} \tag{7}$$

$$\Delta p = (\overline{p^2} - \bar{p}^2)^{1/2} = \hbar/2a$$

这是 $t=0$ 时的动量分布特征. 由于是自由粒子,动量守恒,动量概率分布也守恒,因此式(7)也是任意时刻的动量分布特征. 由式(2)及式(7),可得

$$\Delta x \cdot \Delta p = \hbar/2. \qquad (t=0 \text{ 时}) \tag{8}$$

在式(3)中,令

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \longrightarrow \mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)}, \qquad \omega = \frac{\hbar k^2}{2m} = \frac{k^2}{2m} \qquad (\hbar = 1)$$

即得 $t>0$ 时波函数 $\psi(x,t)$,即

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(k) \exp\left(\mathrm{i}kx - \frac{\mathrm{i}k^2 t}{2m}\right) \mathrm{d}k \tag{9}$$

将式(4)代入上式,并利用积分公式(B)(见本题末附注),即得

$$\psi(x,t) = \frac{\exp[\mathrm{i}k_0(x-x_0) - \mathrm{i}tk_0^2/2m]}{(2\pi)^{1/4}(a+\mathrm{i}t/2ma)^{1/2}} \cdot \exp\left[-\frac{1}{4}\left(x - x_0 - \frac{k_0 t}{m}\right)^2 \frac{1-\mathrm{i}t/2ma^2}{a^2+(t/2ma)^2}\right] \tag{10}$$

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\left[a^2 + \left(\frac{t}{2ma}\right)^2\right]^{1/2}}$$

$$\cdot \exp\left[-\frac{1}{2}\left(x-x_0-\frac{k_0 t}{m}\right)^2 \frac{1}{a^2+(t/2ma)^2}\right] \tag{11}$$

比较$|\psi(x,0)|^2$和$|\psi(x,t)|^2$的结构式，容易看出如下对应关系：

$$|\psi(x,0)|^2 \text{——} x_0, \qquad a^2$$

$$|\psi(x,t)|^2 \text{——} x_0+\frac{k_0 t}{m}, \qquad a^2+\left(\frac{t}{2ma}\right)^2$$

据此，对于$\psi(x,t)$，容易求出

$$\boxed{\bar{x}(t)=x_0+\frac{\hbar k_0 t}{m}} \tag{12}$$

$$\boxed{\Delta x=\left[a^2+\left(\frac{\hbar t}{2ma}\right)^2\right]^{1/2}} \tag{13}$$

（已按量纲关系将$\hbar$添回公式中．）由式(12)表示的$\bar{x}(t)$就是时刻t的波包中心，式(11)表明波包中心处$|\psi|^2$为极大．波包中心的前进速度（即群速度）为

$$v_g=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\bar{x}(t)=\frac{\hbar k_0}{m} \tag{14}$$

随着时间的增加，波包逐渐扩散，主要表现在两个方面：波包宽度Δx增大，波包中心强度减弱．由式(11)容易看出，波包中心处$(x=\bar{x})$

$$|\psi|^2=1/\sqrt{2\pi}\,\Delta x$$

而波包宽度Δx的变化规律[见式(13)]是，当$\hbar t \ll 2ma^2$时，$\Delta x \sim a$，波包扩散缓慢；当$\hbar t \gg 2ma^2$时，$\Delta x \sim \hbar t/2ma \gg a$．$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\Delta x$常称为波包扩散速度，在$\hbar t \gg 2ma^2$时，

$$\text{扩散速度} \sim \hbar/2ma=\Delta p/m \tag{15}$$

可见波包扩散的原因是动量的涨落Δp，Δp越大，扩散越快．在$\hbar t \ll 2ma^2$时，波包扩散不明显，波包的运动类似于一个以群速度$\hbar k_0/m$运动的经典粒子．

附注 积分公式

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\alpha^2 x^2 \pm 2\beta x}\mathrm{d}x = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}\mathrm{e}^{-\beta^2/\alpha^2} \tag{A}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dk \exp[-(\alpha^2 k^2 + i\beta k + i\gamma k^2)]$$

$$= \left(\frac{\pi}{\alpha^2 + ir}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left[-\frac{\beta^2(\alpha^2 - i\gamma)}{4(\alpha^4 + \gamma^2)}\right] \qquad (B)$$

其中 α, β, γ 为实数，$\alpha > 0$.

1.8 证明从单粒子 Schrödinger 方程得出的粒子速度场是非旋的，即求证

$$\nabla \times v = 0,$$

其中，$v = j/\rho$，ρ 为概率密度，j 为概率流密度.

证 概率密度和概率流密度的表达式为

$$\rho = \psi^* \psi$$

$$j = -\frac{i\hbar}{2m}(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$$

因此速度场为

$$v = j/\rho = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{\nabla \psi}{\psi} - \frac{\nabla \psi^*}{\psi^*}\right)$$

$$= -\frac{i\hbar}{2m}(\nabla \ln \psi - \nabla \ln \psi^*)$$

$$= -\frac{i\hbar}{2m} \nabla \left(\ln \frac{\psi}{\psi^*}\right)$$

其旋度为

$$\nabla \times v = -\frac{ih}{2m} \nabla \times \nabla \left(\ln \frac{\psi}{\psi^*}\right) = 0$$

1.9 求势阱 $V(x) = -V_0 \operatorname{sech}^2 \beta x$ 的束缚能级. $V_0 > 0$，$1/\beta$ 是势阱的特征长度(图 1.9).

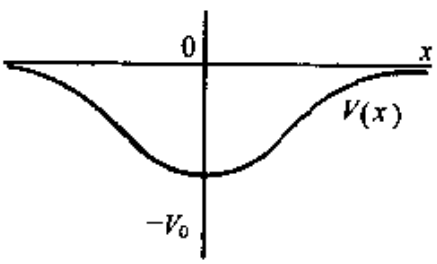


图 1.9

解 计算束缚能级($E < 0$). 引进无量纲参量 λ

$$\lambda=\frac{1}{4}\left[\sqrt{\frac{8mV_0}{\hbar^2\beta^2}+1}-1\right] \tag{1}$$

作函数变换，令

$$\psi(x)=(\mathrm{sech}\beta x)^{2\lambda}u(x) \tag{2}$$

代入能量本征方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}-V_0\mathrm{sech}^2\beta x\right]\psi(x)=E\psi(x) \tag{3}$$

得

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}x^2}-4\lambda\beta\tanh\beta x\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}+4\beta^2(\lambda^2-\kappa^2)u=0 \tag{4}$$

式中 κ 为无量纲参数，与 E 关系如下：

$$\kappa=\sqrt{\frac{-mE}{2\hbar^2\beta^2}},\quad 或\quad E=-\frac{\hbar^2\beta^2}{2m}(2\kappa)^2<0 \tag{5}$$

作变量替换，令 $z=-\mathrm{sh}^2\beta x$，则(4)式化为超几何方程

$$z(1-z)\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}z^2}+\left[\frac{1}{2}-(1-2\lambda)z\right]\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}z}-(\lambda^2-\kappa^2)u=0 \tag{6}$$

与超几何方程标准式

$$z(1-z)\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}z^2}+[\gamma-(\alpha+\beta+1)z]\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}z}-\alpha\beta u=0 \tag{7}$$

比较，相应的参数为 $\alpha=\kappa-\lambda,\beta=-(\kappa+\lambda),\gamma=1/2$. 所以方程(6)的两个线性独立解(在 $z=0$ 点有限)可取为

$$u_1=F(\alpha,\beta,\gamma;z)=F(-\lambda+\kappa,-\lambda-\kappa,1/2;z) \tag{8a}$$

$$\begin{aligned}u_2&=\sqrt{|z|}F(\alpha+1/2,\beta+1/2,\gamma+1;z)\\&=\sqrt{|z|}F(-\lambda+\kappa+1/2,-\lambda-\kappa+1/2,3/2;z)\end{aligned} \tag{8b}$$

它们分别给出偶宇称和奇宇称解．根据束缚态边条件，要求当 $|x|\longrightarrow\infty$ 时，$\psi(x)\longrightarrow 0$，就要求(8)式中的解(一般为无穷级数)中断为一个多项式．

对于(8a)，则要求 $\alpha=-\lambda+\kappa$ 或 $\beta=-\lambda-\kappa$ 为 0 或负整数．但仔细分析发现，后一条件得出的波函数 $\psi(x)$ 在 $|x|\longrightarrow\infty$ 时呈指数上升，不符合束缚态条件．因此，只能是 $(\lambda-\kappa)=l,(l=0,1,$

2,…). 利用 $\kappa=\lambda-l$,代入(5)式,可求出偶宇称能级

$$E_l=-\frac{\hbar^2\beta^2}{2m}\left[\frac{1}{2}\sqrt{\frac{8mV_0}{\hbar^2\beta^2}+1}-2l-1/2\right]^2, l=0,1,2,\cdots \quad (9)$$

对于(8b),类似可得,只当 $\lambda-\kappa-1/2=m$,($m=0,1,2,\cdots$)时,才能得出束缚态解. 相应的奇宇称能级为

$$E_m=-\frac{\hbar^2\beta^2}{2m}\left[\frac{1}{2}\sqrt{\frac{8mV_0}{\hbar^2\beta^2}+1}-(2m+1)-1/2\right]^2, \quad m=0,1,2,\cdots \quad (10)$$

(9),(10)联合起来,可表示为

$$E_n=-\frac{\hbar^2\beta^2}{2m}\left[\frac{1}{2}\sqrt{\frac{8mV_0}{\hbar^2\beta^2}+1}-(n+1/2)\right]^2, \quad n=0,1,2,\cdots \quad (11)$$

1.10 求势阱 $V(x)=V_0\cot^2(\pi\eta x)$的束缚能级,$V_0>0$,$1/\eta=a$ 为势阱特征长度(图1.10).

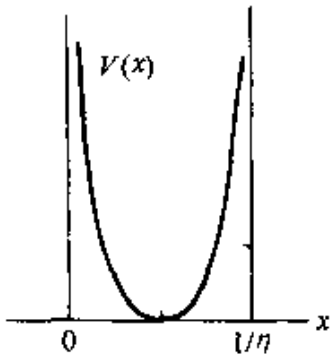


图 1.10

解 引进无量纲参数 λ

$$\lambda=\frac{1}{4}\left[\sqrt{\frac{8mV_0}{\pi^2\hbar^2\eta^2}+1}-1\right] \quad (1)$$

作函数变换,令

$$\psi(x)=(\sin\pi\eta x)^{-2\lambda}u(x) \quad (2)$$

代入能量本征方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V_0\cot^2(\pi\eta x)\right]\psi(x)=E\psi(x) \quad (3)$$

得

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}x^2}-4\pi\eta\lambda\cot(\pi\eta x)\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}+4\pi^2\eta^2(\nu^2-\lambda^2)u=0 \quad (4)$$

式中 ν 与能量 E 的关系为

$$\nu=\sqrt{\frac{m}{2\pi^2\hbar^2\eta^2}(E+V_0)} \tag{5}$$

引进新变量 $z=\cos(\pi\eta x)$，则(4)式化为

$$z(1-z)\frac{d^2u}{dz^2}+\left[\frac{1}{2}-(1-2\lambda)z\right]\frac{du}{dz}+(\nu^2-\lambda^2)u=0 \tag{6}$$

与超几何方程一般形式[见上题(7)式]比较，参数 $\alpha=-(\nu+\lambda)$，$\beta=(\nu-\lambda)$，$\nu=1/2$. 所以方程(6)的两个线性独立解可取为

$$u_1=F(-\nu-\lambda,\nu-\lambda,1/2;z) \tag{7a}$$

$$u_2=\sqrt{|z|}F(-\nu-\lambda+1/2,\nu\lambda+1/2;3/2;z) \tag{7b}$$

u_1 为偶函数，在 $z=0$ 点(即 $x=a/2$ 点)的值不为 0. u_2 为奇函数，在 $z=0$ 点为 0.

为了利用波函数在 $z=1$($x=0$ 或 a)点的束缚态边条件，可利用下列关系式

$$F(\alpha,\beta,\gamma,z)=(1-z)^{-\alpha}F\left(\alpha,\gamma-\beta,\gamma;\frac{z}{z-1}\right) \tag{8}$$

这样，u_1 与 u_2 可改写成

$$u_1=(1-z)^{\nu+\lambda}F\left(-\nu-\lambda,1/2-\nu+\lambda,1/2;\frac{z}{z-1}\right) \tag{9a}$$

$$u_2=\sqrt{|z|}(1-z)^{\nu+\lambda-1/2}F\left(-\nu-\lambda+1/2,1-\nu+\lambda,3/2;\frac{z}{z-1}\right) \tag{9b}$$

为保证 $z\longrightarrow 1$ 时，$\psi\longrightarrow 0$(束缚态)，(9)式作为 $z/(z-1)$ 的幂级数必须中断为一个多项式. 对于(9a)，则要求($-\nu-\lambda$)或($-\nu+\lambda+1/2$)为 0 或负整数. 但仔细分析表明，只有后一情况，即($\nu-\lambda-1/2$)$=k$，($k=0,1,2,\cdots$)，所得出的波函数满足束缚态条件. 因此，($\nu-\lambda$)$=k+1/2$，($k=0,1,2,\cdots$). 类似，对于(9b)，得($\nu-\lambda$)$=k+1$，($k=0,1,2,\cdots$). 概括起来，要求($\nu-\lambda$)$=n/2$，$n=1,2,3,\cdots$. 所以 $\nu=\lambda+n/2$. 代入(5)式，可求出 $E+V_0=2\pi^2\hbar^2\eta^2\nu^2/m$，再利用(1)式，可求出

$$E=E_n=\frac{\pi^2\hbar^2\eta^2}{2m}(n^2+4\lambda n-2\lambda),\quad n=1,2,3,\cdots \tag{10}$$

1.11 粒子作一维自由运动，设 $t=0$ 时初始波函数为

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

其中 $\varphi(k)$ 为任意给定的函数．试证明：在足够长时间以后，波函数取下列极限形式：

$$\psi(x,t)\approx\left(\frac{m}{\hbar t}\right)^{\frac{1}{2}}e^{-i\pi/4}e^{imx^2/(2\hbar t)}\varphi\left(\frac{mx}{\hbar t}\right)$$

并对 $|\psi(x,t)|^2$ 的极限形式作出合理解释．

解 根据平面波的时间变化规律

$$e^{ikx}\longrightarrow e^{i(kx-\omega t)},\qquad \omega=E/\hbar=\hbar k^2/2m$$

任意时刻的波函数为

$$\begin{aligned}\psi(x,t)&=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(k)e^{i(kx-\hbar k^2/2m)}dk\\&=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{imx^2/2\hbar t}\int_{-\infty}^{+\infty}dk\varphi(k)\\&\cdot\exp\left[-i\frac{\hbar t}{2m}\left(k-\frac{mx}{\hbar t}\right)^2\right]\end{aligned}\tag{1}$$

当时间足够长后（$t\longrightarrow\infty$），上式被积函数中的指数函数具有 δ 函数的性质．利用公式（其证明见本题末附注）

$$\lim_{\alpha\longrightarrow\infty}\sqrt{\alpha}e^{-i\alpha u^2}=\sqrt{\pi}e^{-i\pi/4}\delta(u)\tag{2}$$

并取

$$\alpha=\hbar t/2m,\qquad u=k-\frac{mx}{\hbar t}$$

即得

$$\begin{aligned}\psi(x,t)&\approx\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{imx^2/2\hbar t}\sqrt{\frac{2\pi m}{\hbar t}}e^{-i\pi/4}\int\varphi(k)\delta\left(k-\frac{mx}{\hbar t}\right)dk\\&=\sqrt{\frac{m}{\hbar t}}e^{-i\pi/4}e^{imx^2/(2\hbar t)}\varphi\left(\frac{mx}{\hbar t}\right)\end{aligned}\tag{3}$$

这正是所要证明的公式．上式取绝对值平方，即得

$$|\psi(x,t)|^2\approx\frac{m}{\hbar t}\left|\varphi\left(\frac{mx}{\hbar t}\right)\right|^2\tag{4}$$

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 $|\varphi(k)|^2$. 因子 $m/\hbar t$ 描述整个波包的扩散，波包强度 $|\psi|^2$ 和 t 成反比(参看题 1.10 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 $|\varphi(k)|^2$ 最大. 由式(4)可见，当 t 足够大以后，$|\psi|^2$ 的最大值出现在 $mx/\hbar t=k_0$ 处，即 $x=\hbar k_0 t/m$ 处，这表明波包中心处波群的主要成分为 k_0，这和题 1.10 的结论是一致的.

如用本题式(4)去处理题 1.10 中的 Gauss 型波包，应有

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

和严格解[题 1.7 式(11)]相比，相当于作了下列近似：

$$x-x_0\sim x,\qquad a^2+(\hbar t/2ma)^2\sim(\hbar t/2ma)^2$$

对于很大的 t 和 x，作这样的近似处理当然是允许的.

附注 公式(2)的证明如下：

对于任意平方可积的连续函数 $f(u)$，考虑定积分

$$I=\lim_{\alpha\to\infty}\sqrt{\alpha}\int_{-\infty}^{+\infty}f(u)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha u^2}\mathrm{d}u$$

在 $u\neq0$ 处，由于函数 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha u^2}$ 迅速振荡，对积分无贡献，因此，I 的值主要来自 $u\sim0$ 附近，这里 $f(u)$ 可用 $f(0)$ 代替，因而

$$\begin{aligned}
I&=f(0)\lim_{\alpha\to\infty}\sqrt{\alpha}\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha u^2}\mathrm{d}u, && (\varepsilon\text{ 为小正数})\\
&=f(0)\lim_{\alpha\to\infty}\int_{-\varepsilon\sqrt{\alpha}}^{+\varepsilon\sqrt{\alpha}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}v^2}\mathrm{d}v, && (v=\sqrt{\alpha}\,u)\\
&=f(0)\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}v^2}\mathrm{d}v\\
&=f(0)\int_{-\infty}^{+\infty}(\cos v^2-\mathrm{i}\sin v^2)\mathrm{d}v\\
&=f(0)(1-\mathrm{i})\sqrt{\frac{\pi}{2}}\\
&=\sqrt{\pi}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}f(0)
\end{aligned}$$

根据 δ 函数的积分性质

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(u)\delta(u)\mathrm{d}u = f(0)$$

即得

$$\lim_{\alpha\to\infty} \sqrt{\alpha}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha u^2} = \sqrt{\pi}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}\delta(u) \tag{2}$$

1.12 1.6 题中，设

$$\frac{a}{L}\ll 1, \qquad \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}\gg 1$$

(a) 计算最低的两个能级之差，并画出相应的本征态波形；(b) 以这两个能量本征函数构成一个初始波包 $\psi(x,0)$，使粒子刚好出现在势阱的左半边($x<0$)，讨论这个波包的运动，特别要求出粒子穿透到势阱的右半边所需时间．

解 1.6 题中，如保持 a 有限，而令 $V_0\longrightarrow\infty$，则中央的势垒变成完全不透明的，整个势阱被分隔成两个不相通的无限深势阱．这时能级为

$$E_n \longrightarrow \frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{L-a}\right)^2, \qquad n=1,2,3,\cdots \tag{1}$$

V_0 有限时，能级应比式(1)稍低．题设条件相当于

$$V_0a^2\gg E_1L^2/\pi^2 \tag{2}$$

最低的一些能级仍可以式(1)作为粗略近似，偶宇称态和奇宇称态的最低能级均为

$$E_1\sim\pi^2\hbar^2/2mL^2 \tag{3}$$

式(2)成立时，1.6 题中

$$\xi^2a^2\approx 2mV_0a^2/\hbar^2\gg 1 \tag{4}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{th}\xi a &\approx 1-2\mathrm{e}^{-2\xi a}\\ \coth\xi a &\approx 1+2\mathrm{e}^{-2\xi a}\end{aligned} \tag{5}$$

如以 E_1、E_2 分别表示偶宇称态和奇宇称态的最低能级，相应的 k 记为 k_1、k_2，则能级方程[见题 1.6 式(5)，(11)]可以写成

$$\tan k_1(L-a)=-\frac{k_1}{\xi}\coth\xi a\approx-\frac{k_1}{\xi}(1+2e^{-2\xi a}) \tag{6}$$

$$\tan k_2(L-a)=-\frac{k_2}{\xi}\mathrm{th}\xi a\approx-\frac{k_2}{\xi}(1-2e^{-2\xi a}) \tag{7}$$

由于 k_1、$k_2\ll\xi$，式(6)和(7)右端为小量，由公式

$$\tan(\pi-\theta)=-\tan\theta\approx-\theta,\qquad |\theta|\ll 1$$

可知式(6)、(7)之解为

$$k_1(L-a)\approx\pi-\frac{k_1}{\xi}(1+2e^{-2\xi a}) \tag{8}$$

$$k_2(L-a)\approx\pi-\frac{k_2}{\xi}(1-2e^{-2\xi a}) \tag{9}$$

即

$$\begin{aligned}k_1&\approx\pi/\left(L-a+\frac{1}{\xi}+\frac{2}{\xi}e^{-2\xi a}\right)\\&\approx\frac{\pi}{L-a+\frac{1}{\xi}}\left(1-\frac{2}{\xi L}e^{-2\xi a}\right)\end{aligned} \tag{8'}$$

$$\begin{aligned}k_2&\approx\pi/\left(L-a+\frac{1}{\xi}-\frac{2}{\xi}e^{-2\xi a}\right)\\&\approx\frac{\pi}{L-a+\frac{1}{\xi}}\left(1+\frac{2}{\xi L}e^{-2\xi a}\right)\end{aligned} \tag{9'}$$

两式相加、减，即得

$$\begin{aligned}k_2+k_1&\approx 2\pi/\left(L-a+\frac{1}{\xi}\right)\\k_2-k_1&\approx\frac{4\pi}{\xi L\left(L-a-\frac{1}{\xi}\right)}e^{-2\xi a}\end{aligned} \tag{10}$$

能级差为

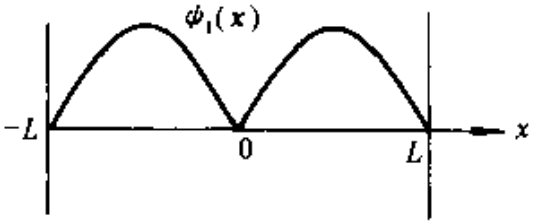
$$E_2-E_1=\frac{\hbar^2}{2m}(k_2^2-k_1^2)\approx\frac{4\pi^2\hbar^2}{m\xi L^3}e^{-2\xi a} \tag{11}$$

如略去这个差别，取粗略近似，则得

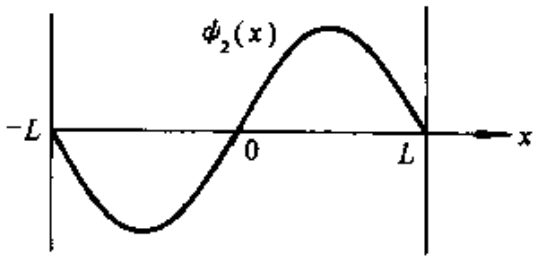
$$k_1\sim k_2\sim\pi/\left(L-a+\frac{1}{\xi}\right)\sim\pi/L$$

$$E_1 \sim E_2 \sim \hbar^2 k_1^2/2m \sim \pi^2\hbar^2/2mL^2$$

这就是式(3). 相应的本征函数如图 1.12 所示.



(a)



(b)

图 1.12 (a) 偶宇称态;(b) 奇宇称态

如取初始波函数

$$\psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(x)-\psi_2(x)] \tag{12}$$

则在 $x>0$ 处 $\psi(x,0)\sim 0$,粒子主要出现在势阱的左半区. ψ 随时间的变化为

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar}-\psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}] \tag{13}$$

当

$$t=n\pi\hbar/(E_2-E_1), \qquad n=1,3,5,\cdots \tag{14}$$

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(x)+\psi_2(x)]e^{-iE_1t/\hbar}$$

这时,在 $x<0$ 处 $\psi\sim 0$,粒子出现在右半区. 当

$$t=n\pi\hbar/(E_2-E_1), \qquad n=2,4,6,\cdots \tag{15}$$

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(x)-\psi_2(x)]e^{-iE_1t/\hbar}$$

粒子又回到左半区．粒子穿透中央的势垒所需时间

$$\Delta t=\pi\hbar/(E_2-E_1)\approx\frac{m\xi L^3}{4\pi\hbar}e^{2\xi a} \tag{16}$$

这个结果大体上可以按势垒穿透现象来理解．当 $E\ll V_0$，而且穿透概率很小时，粒子向势垒(高为 V_0，宽为 $2a$)每碰撞一次，透射波振幅和入射波振幅之比为①

$$|S|\sim 4\sqrt{\frac{E}{V_0}}e^{-2\xi a}\sim\frac{4k}{\xi}e^{-2\xi a}\sim\frac{4\pi}{\xi L}e^{-2\xi a}$$

当透射波振幅累积接近于入射波振幅时，可以认为粒子已基本透过势垒．所需碰撞次数为

$$N\sim 1/|S|\sim\frac{\xi L}{4\pi}e^{2\xi a}$$

粒子对势垒的碰撞频率为

$$v\sim v/2L\sim\hbar k/(2mL)\sim\pi\hbar/(2mL^2)$$

所需时间为

$$\Delta t\sim N/v\sim\frac{m\xi L^3}{2\pi^2\hbar}e^{2\xi a}$$

按数量级说，这个结果和式(16)一致．

1.13 能量为 E 的平行粒子束以入射角 θ 射向平面 $x=0$，如图 1.13 所示．在区域 $x<0$，$V=0$；在区域 $x>0$，$V=-V_0$．试分析粒子束的反射和折射规律，将结果用入射角 θ 和折射率 $n=(1+V_0/E)^{1/2}$ 表示．

解 显然，入射、反射、折射粒子束均可用平面波表示．取入射面为 x-y 平面，入射波可以表示成

$$\psi_0=e^{ik_0\cdot r},\qquad k_0=(k_1,k_2,0) \tag{1}$$

入射动量为 $\hbar k_0$，入射能量和入射角为

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

① 参看曾谨言，《量子力学》卷 I（科学出版社，1981），§ 3.3.

$$\theta=\tan^{-1}\frac{k_2}{k_1}=\sin^{-1}\frac{k_2}{k_0} \tag{3}$$

由于 $\partial V/\partial y=\partial V/\partial z=0$，反射和折射时粒子动量的 y 分量和 z 分量不变．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

$$\boldsymbol{k}_R=(-k_1,k_2,0) \tag{4}$$

所以反射角必然等于入射角．这就是反射定律．

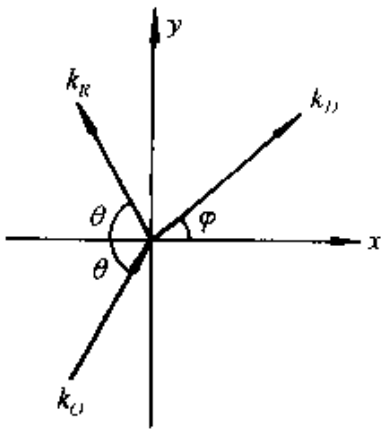


图 1.13

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 $\hbar\boldsymbol{k}_D$．$\boldsymbol{k}_D$ 应满足能量关系

$$\hbar^2k_D^2/2m=E+V_0 \tag{5}$$

$\boldsymbol{k}_D$ 的直角坐标分量可以写成

$$\boldsymbol{k}_D=(k,k_2,0) \tag{6}$$

由式(2)、(5)、(6)易见，k 和 k_1 间有下列关系：

$$k^2-k_1^2=2mV_0/\hbar^2 \tag{7}$$

设折射角为 φ，由图易见

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

$$\boxed{\frac{\sin\theta}{\sin\varphi}=\frac{k_D}{k_0}=\left(1+\frac{V_0}{E}\right)^{1/2}=n} \tag{8}$$

式(8)相当于光学中的折射定律．

下面求入射、反射、折射波的振幅及相位关系．

$$\begin{aligned}&\text{入射波}\quad \psi_0=e^{i\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{r}}=e^{i(k_1x+k_2y)}\\&\text{反射波}\quad \psi_R=Re^{i\boldsymbol{k}_R\cdot\boldsymbol{r}}=Re^{i(-k_1x+k_2y)}\\&\text{折射波}\quad \psi_D=De^{i\boldsymbol{k}_D\cdot\boldsymbol{r}}=De^{i(kx+k_2y)}\end{aligned} \tag{9}$$

系数 R、D 待定．在分界面两侧，ψ 及 $\partial\psi/\partial x$ 应该连续，即

$$\begin{aligned}&(\psi_0+\psi_R)|_{x=0}=\psi_D|_{x=0}\\&\left(\frac{\partial\psi_0}{\partial x}+\frac{\partial\psi_R}{\partial x}\right)\Bigg|_{x=0}=\frac{\partial\psi_D}{\partial x}\Bigg|_{x=0}\end{aligned}\tag{10}$$

将式(9)代入式(10)，即得

$$\begin{aligned}&1+R=D\\&(1-R)k_1=Dk\end{aligned}\tag{11}$$

容易解出

$$R=\frac{k_1-k}{k_1+k},\qquad D=\frac{2k_1}{k_1+k}\tag{12}$$

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．由于

$$\begin{aligned}&k_1=k_0\cos\theta=k_0\sqrt{1-\sin^2\theta}\\&k=k_D\cos\varphi=k_0\sqrt{n^2-\sin^2\theta}\end{aligned}\tag{13}$$

式(12)可以写成

$$R=\frac{\cos\theta-\sqrt{n^2-\sin^2\theta}}{\cos\theta+\sqrt{n^2-\sin^2\theta}},\qquad D=\frac{2\cos\theta}{\cos\theta+\sqrt{n^2-\sin^2\theta}}\tag{12'}$$

根据公式

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

容易得出入射粒子流量为 $\hbar k_1/m$，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

$$\begin{aligned}&\frac{\text{反射流量}}{\text{入射流量}}=|R|^2=\left[\frac{\cos\theta-\sqrt{n^2-\sin^2\theta}}{\cos\theta+\sqrt{n^2-\sin^2\theta}}\right]^2=\left(\frac{k_1-k}{k_1+k}\right)^2\\&\frac{\text{折射流量}}{\text{入射流量}}=\frac{k}{k_1}|D|^2=\frac{4kk_1}{(k_1+k)^2}\end{aligned}\tag{14}$$

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

$$\frac{\text{反射流量}}{\text{入射流量}}=\left(\frac{n-1}{n+1}\right)^2,\quad\frac{\text{折射流量}}{\text{入射流量}}=\frac{4n}{(n+1)^2}\tag{15}$$

本题结果和电磁波的反射、折射规律相似①.

1.14 考虑图 1.14(a)所示一维散射问题，

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

设 $E<V_0$. (a)设入射波为单色平面波 $e^{i(kx-\omega t)}$，$\omega=E/\hbar=\hbar k^2/2m$，求反射波．特别注意相位变化．(b)入射波改成波包

$$\psi_i(x,t)=\int_0^\infty dk A(k)e^{i(kx-\omega t)}$$

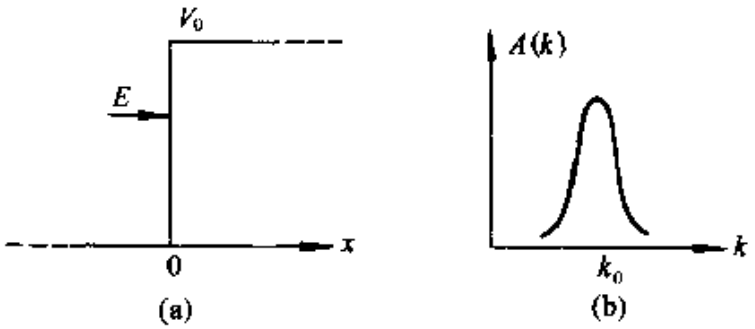


图 1.14

其中 $A(k)$是以 k_0 为对称中心的分布很窄的函数，如图 1.14(b)所示．并设 ψ_i 是空间宽度(Δx)很窄的波包．求反射波波函数，写出反射波包中心的运动方程，并求反射弛豫时间．

解 (a) 入射波为单色平面波时，总的波函数可以写成

$$\psi(x,t)=\psi(x)e^{-i\omega t} \tag{1}$$

$\psi(x)$满足能量本征方程

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

解为

$$\psi(x)=\begin{cases}e^{ikx}+Re^{ikx}, & x<0\\ De^{-\xi x}, & x>0\end{cases} \tag{3}$$

其中

① 参考 J. D. Jackson,《经典电动力学》(高等教育出版社,1978), § 7.3.

$$k=\sqrt{2mE}/\hbar, \qquad \xi=\sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar \tag{4}$$

R 项为反射波，D 项为衰减波．利用 $x=0$ 处 ψ 和 ψ' 的连续条件，容易求得

$$R=\frac{k-\mathrm{i}\xi}{k+\mathrm{i}\xi}, \qquad D=\frac{2k}{k+\mathrm{i}\xi} \tag{5}$$

注意 $|R|=1$，这表明反射波和入射波振幅相等，仅相位有所变化．为了突出相位关系，将 R 写成

$$R=\frac{k-\mathrm{i}\xi}{k+\mathrm{i}\xi}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta(k)} \tag{5'}$$

(b) 入射波改为波包

$$\psi_{\mathrm{i}}(x,t)=\int_0^{\infty}\mathrm{d}kA(k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)} \tag{6}$$

反射波显然是

$$\psi_{\mathrm{r}}(x,t)=\int_0^{\infty}\mathrm{d}kA(k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}[kx+\omega t+\theta(k)]} \tag{7}$$

其中

$$\omega=E/\hbar=\hbar k^2/2m \tag{8}$$

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

$$\left.\frac{\partial A(k)}{\partial k}\right|_{k=k_0}=0 \tag{9}$$

因此，入射波包的中心位置由下式决定：

$$\left.\frac{\partial}{\partial k}(kx-\omega t)\right|_{k=k_0}=0 \tag{10}$$

其意义为：在 $k\sim k_0$ 附近，各种成分波的相位一致，得以形成极大．式(10)的解为

$$x-\hbar k_0 t/m=0 \tag{11}$$

这就是入射波波包中心的运动方程．

仿此，反射波的波包中心位置由下式决定：

$$\left.\frac{\partial}{\partial k}[kx+\omega t+\theta(k)]\right|_{k=k_0}=0 \tag{12}$$

其中 $\partial\theta/\partial k$ 可以利用式(5′)求出，步骤如下：先将式(5′)写成

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

对 k 求导，得到

$$-i\frac{\partial\theta}{\partial k}e^{-i\theta(k)}=\frac{\hbar^2}{2mV_0}2(k-i\xi)\left(1-i\frac{\partial\xi}{\partial k}\right) \tag{13}$$

但因

$$k^2+\xi^2=2mV_0/\hbar^2 \tag{14}$$

所以

$$\partial\xi/\partial k=-k/\xi$$

代入式(13)即得

$$\frac{\partial\theta(k)}{\partial k}=-\frac{2}{\xi} \tag{15}$$

上式代入式(12)，即得反射波波包中心的运动方程

$$x+\frac{\hbar k_0}{m}t-\frac{2}{\xi_0}=0 \tag{16}$$

其中

$$\xi_0=\sqrt{2m(V_0-E_0)}/\hbar,\qquad E_0=\hbar^2k_0^2/2m \tag{4′}$$

式(16)中令 $x=0$，即得反射弛豫时间

$$t_R=\frac{2m}{\hbar k_0\xi_0}=\frac{\hbar}{\sqrt{E_0(V_0-E_0)}} \tag{17}$$

弛豫时间可作如下定性解释：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约为

$$t_R\sim\frac{2/\xi_0}{\hbar k_0/m}=\frac{2m}{\hbar k_0\xi_0}$$

此即式(17).

1.15 质量为 m 的粒子作一维自由运动，波函数 $\psi(x,t)$. 以各时刻位置 x 的涨落 Δx 作为波包的有效半宽，$\bar{x}$作为波包中心.

已知 $t=0$ 时$\bar{x}=x_0$，$\Delta x=a$，$\bar{p}=p_0$，$\Delta p=mu$，并设 $t=0$ 时波包宽度为各时刻的最小值．求 $t>0$ 时波包中心$\bar{x}(t)$及有效半宽 Δx.

解 根据涨落的定义，

$$(\Delta x)^2=\overline{x^2}-\bar{x}^2,\qquad (\Delta p)^2=\overline{p^2}-\bar{p}^2, \tag{1}$$

由于是自由运算，总能量算符为

$$H=\frac{1}{2m}p^2 \tag{2}$$

动量 p 为守恒量，$\bar{p}$及$\overline{p^2}$均不随 t 而变．因此在 $t>0$ 时恒有

$$\begin{aligned}&\bar{p}=p_0,\qquad \Delta p=mu\\&\overline{p^2}=\bar{p}^2+(\Delta p)^2=p_0^2+m^2u^2\end{aligned} \tag{3}$$

下面计算$\bar{x}(t)$及$\overline{x^2}(t)$．首先，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\bar{x}(t)=\frac{1}{m}\bar{p}=\frac{1}{m}p_0 \tag{4}$$

利用初始条件$\bar{x}(0)=x_0$，容易求出上式的解为

$$\bar{x}(t)=x_0+\frac{p_0}{m}t \tag{5}$$

这结果表明波包中心以恒速 p_0/m 向前移动．其次，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}x^2=\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}x+x\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{m}(px+xp) \tag{6}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}x^2=\frac{1}{m}\left(\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t}x+p\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}+\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}p+x\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t}\right)$$

由于是自由运动，动量守恒，$\mathrm{d}p/\mathrm{d}t=0$，所以

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}x^2=\frac{1}{m}\left(p\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}+\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}p\right)=\frac{2}{m^2}p^2 \tag{7}$$

取平均值，即得

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\overline{x^2}=\frac{2}{m^2}\overline{p^2}=2\left(\frac{p_0^2}{m^2}+u^2\right) \tag{8}$$

利用式(1)及(5)，可得

$$\overline{x^2}=(\Delta x)^2+\left(x_0+\frac{p_0}{m}t\right)^2$$

代入式(8)，得到 Δx 满足的微分方程

$$\frac{d^2}{dt^2}(\Delta x)^2=2u^2 \tag{9}$$

解为

$$(\Delta x)^2=u^2t^2+C_1t+C_2 \tag{10}$$

其中 C_1、C_2 为积分常数，由初始条件确定．根据题意，初始条件为

$$t=0\text{ 时，}\quad \Delta x=a,\quad \frac{d}{dt}\Delta x=0,\quad \text{（极小条件）} \tag{11}$$

而由式(10)，可得

$$t=0\text{ 时，}\quad (\Delta x)^2=C_2\quad 2\Delta x\frac{d}{dt}\Delta x=C_1 \tag{11'}$$

比较式(11)和(11')，即得

$$C_1=0,\qquad C_2=a^2 \tag{12}$$

代入式(10)，即得

$$\Delta x=\sqrt{a^2+u^2t^2} \tag{13}$$

此即 $t>0$ 时，波包的有效半宽．由上式易见

当 $t\ll a/u$，$\Delta x\sim a$，　波包扩散不明显．

当 $t\gg a/u$，$\Delta x\sim ut$，　波包宽度和 u 及 t 成正比，可以认为 $u=\Delta p/m$ 就是波包扩散速度．

请将本题结果和题 1.7 对照一下．

1.16　关于质量为 m 的粒子对有限深球方势阱

$$V(r)=\begin{cases}-V_0, & r<a\\ 0, & r>a\end{cases} \tag{1}$$

的散射，用 Born 一级近似讨论其截面随能量的变化规律．

解

按 Born 一级近似，散射波幅为

$$f_B(\theta)=\frac{2mV_0}{\hbar^2q}\int_0^a r\sin qr\mathrm{d}r$$

$$=\frac{2mV_0a^3}{\hbar^2 q}\left[\frac{\sin qa}{(qa)^3}-\frac{\cos qa}{(qa)^2}\right]$$

$$=\frac{2mV_0a^3}{3\hbar^2}\left[3j_1(z)/z\right]$$

$$=\frac{2mV_0a^3}{3\hbar^2}G(z) \tag{2}$$

式中 $q=2k\sin\frac{\theta}{2}=q_{\max}\sin\frac{\theta}{2}$，$q_{\max}=2k=2\sqrt{2mE}/\hbar$，$z=qa$（无量纲），这里利用了球 Bessel 函数

$$j_1(z)=\frac{\sin z}{z^2}=\frac{\cos z}{z} \tag{3}$$

取 $G(z)=3j_1(z)/z$ 是为了方便，使 $G(0)=1$.

散射截面为

$$\sigma(\theta)=|f_B(\theta)|^2=\frac{2mV_0a^3}{3\hbar^2}|G(z)|^2 \tag{4}$$

$|G(z)|^2$ 随角度的变化，如图 1.16 所示. 图中给出了几种不同能量 E（即 $Z_{\max}$）下的曲线，能量 $E=Z_{\max}^2\hbar^2/8ma^2$，是为了便于和球方

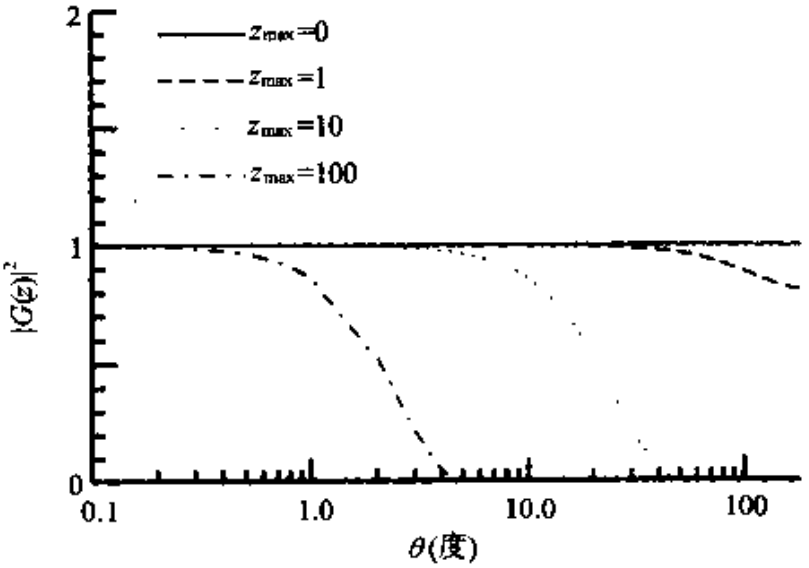


图 1.16 $|G(z)|^2$ 随角度 θ 的变化.

$G(z)=3j_1(z)/z$，$z=qa$，$z_{max}=2ka$，$z=z_{max}\sin\theta/2$.

随能量 E（即 z_{max}）不同，$|G(z)|^2$ 曲线呈现不同行为

势阱中的束缚能级进行比较.

讨论：

(1) 低能散射($z=qa\to 0$)

$$f_B(\theta)\approx\frac{2mV_0a^3}{3\hbar^2} \tag{5}$$

与散射角无关，是各向同性散射.

(2) 高能散射($qa\gg 1$)，截面的峰的位置往小角度($\theta\sim 0$)靠近. 由于 $\sin qa=\sin\left(2ka\sin\frac{\theta}{2}\right)$，相位迅速变化，$\theta$ 角实际上局限在 $\theta\leqslant\theta_{\max}$，而 $2ka\sin\frac{\theta}{2}\leqslant ka\theta_{\max}\sim 1$，$\theta_{\max}\sim 1/ka$. 散射总截面 σ_t 可粗略估算如下：

$$\begin{aligned}\sigma_t &= \int\sigma(\theta)\mathrm{d}\Omega\approx 2\pi\int_0^{1/ka}|f_B(\theta)|^2\sin\theta\mathrm{d}\theta\\ &\approx 2\pi|f(0)|^2\int_0^{1/ka}\theta\mathrm{d}\theta\approx\frac{\pi|f(0)|^2}{k^2a^2}\\ &\propto 1/E\end{aligned} \tag{6}$$

σ_t 随 E 增大而减小.

1.17 对于两束全同粒子的散射，计及波函数的交换对称性，证明：

(1) 对于自旋 $s=0$ 的全同粒子，散射截面为

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2+|f(\pi-\theta)|^2+2\mathrm{Re}[f(\theta)f^*(\pi-\theta)] \tag{1}$$

(2) 对于自旋 $s=1/2$ 的非极化全同粒子束，

$$\begin{aligned}\sigma(\theta)&=\frac{1}{4}|f(\theta)+f(\pi-\theta)|^2+\frac{3}{4}|f(\theta)-f(\pi-\theta)|^2\\ &=|f(\theta)^2|+|f(\pi-\theta)|^2-\mathrm{Re}[f(\theta)f^*(\pi-\theta)]\end{aligned} \tag{2}$$

(3) 对于自旋 $s=1$ 的非极化全同粒子束，

$$\begin{aligned}\sigma(\theta)&=\frac{5+1}{9}|f(\theta)+f(\pi-\theta)|^2+\frac{3}{9}|f(\theta)-f(\pi-\theta)|^2\\ &=|f(\theta)|^2+|f(\pi-\theta)|^2+\frac{2}{3}\mathrm{Re}[f(\theta)f^*(\pi-\theta)]\end{aligned} \tag{3}$$

(4) 对于自旋为 s 的全同粒子束，散射截面的表示式为

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2+|f(\pi-\theta)|^2+\frac{2(-1)^{2s}}{(2s+1)}\mathrm{Re}[f(\theta)f^*(\pi-\theta)] \tag{4}$$

1.18 荷电为 Z_1e 和 Z_2e 的两个粒子的 Coulomb 散射，$V(r)=Z_1Z_2e^2/r$，在 Born 近似下，散射振幅为

$$f_B(\theta)=-\frac{2\mu Z_1Z_2e^2}{\hbar^2}\frac{1}{q^2}, \tag{1}$$

$q^2=4k^2\sin^2\dfrac{\theta}{2}$. 散射截面为

$$\sigma_B(\theta)=|f_B(\theta)|^2=\left(\frac{2\mu Z_1Z_2e^2}{\hbar^2q^2}\right)^2=\left(\frac{Z_1Z_2e^2}{4E}\right)^2\frac{1}{\sin^4\theta/2} \tag{2}$$

更严格求解 Coulomb 散射，可得出散射波幅为

$$f_C(\theta)=f_B(\theta)\exp\left[-i\eta\ln\left(\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\right)+2i\beta\right] \tag{3}$$

$$\eta=\frac{\mu Z_1Z_2e^2}{\hbar^2k},$$

$$e^{2i\beta}=\Gamma(1+i\eta)/\Gamma(1-i\eta).$$

η 依赖于 Planck 常数 $\hbar$，是一种量子效应. 当 $\hbar\to0$ 时，$\eta\to\infty$，此急剧振荡的相因子，对于在有限 θ 角范围中的截面的观测值无贡献. $|f_C(\theta)|^2=|f_B(\theta)|^2$. 但对于全同粒子($Z_1=Z_2=Z$)的散射，此相因子有可观测的影响. 干涉项(见题 11.23)

$$\mathrm{Re}[f_C(\theta)f_C^*(\pi-\theta)]\propto\frac{1}{\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)}$$

$$\times\mathrm{Re}\left[e^{-i\eta\ln\left(\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\right)}\cdot e^{i\eta\ln\left(\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\right)}\right]$$

$$=\frac{1}{\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)}\mathrm{Re}\left[e^{-i\eta\ln\left(\tan^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\right)}\right]$$

$$=\frac{1}{\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)}\cos\left(\eta\ln\left(\tan^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\right)\right) \tag{4}$$

式中

$$\eta=\frac{\mu Z^2e^2}{\hbar^2k}$$

证明，对于自旋为 0 的两束全同荷电 Ze 的粒子，散射截面为

$$\sigma_C(\theta)=\left(\frac{Z^2e^2}{4E}\right)^2\left[\frac{1}{\sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)}+\frac{1}{\cos^4\left(\frac{\theta}{2}\right)}+\frac{2\cos\left(\eta\ln\left(\tan^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\right)\right)}{\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)\cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right)}\right] \tag{5}$$

第二章　δ势场中粒子的运动

2.1　粒子在δ势阱

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

中运动，求束缚态能级和波函数.

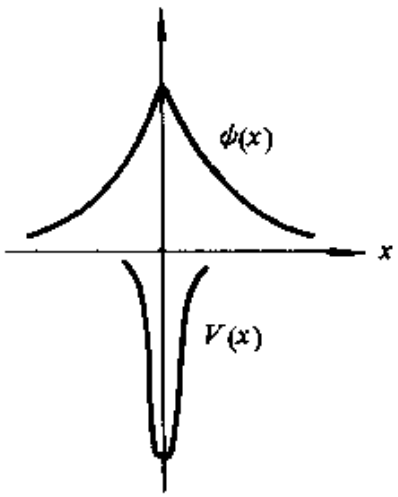


图 2.1

解　定态 Schrödinger 方程为

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E + V_0\delta(x)]\psi = 0 \tag{1}$$

$x\neq 0$ 处，$V(x)=0$，所以 $E>0$ 为游离态，$E<0$ 为束缚态. 由于 $V(x)$ 是偶函数，束缚定态波函数必有确定的宇称. 下面将分别就偶宇称态和奇宇称态进行讨论.

将式(1)在 $x\sim 0$ 附近积分，上下限取为 $\pm\varepsilon$，ε 为很小的正数，

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}\mathrm{d}x = \psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon)$$

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\psi\mathrm{d}x = \psi(0)2\epsilon$$

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\delta(x)\psi(x)\mathrm{d}x = \psi(0)$$

令 $\epsilon\to 0^+$（即保持 $\epsilon>0$，而又趋于 0），即得

$$\boxed{\psi'(0^+)-\psi'(0^-)=-\frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi(0)} \tag{2}$$

这是在 $x=0$(存在 δ 势阱处)两侧 ψ' 的跃变公式,它对于能级的确定起关键作用.

在 $x=0$ 两侧 ψ' 虽有跃变,但变化量是有限的(因 $\psi(0)$ 有限),所以 $\psi(x)$ 在 $x=0$ 两侧是连续的.

令

$$k=\sqrt{-2mE}/\hbar \tag{3}$$

在 $x\neq 0$ 处,式(1)可以写成

$$\psi''-k^2\psi=0 \tag{4}$$

$x\to\pm\infty$ 处 $\psi\to 0$(这是束缚态波函数必须满足的条件)的解为

$$\psi\sim \mathrm{e}^{-k|x|}$$

(a) 偶宇称态

$$\psi(x)=\begin{cases}C\mathrm{e}^{-kx}, & x>0\\ C\mathrm{e}^{kx}, & x<0\end{cases} \tag{5}$$

C 为归一化常数. 上式在 $x=0$ 两侧的微商分别为

$$\psi'(0^+)=-Ck,\qquad \psi'(0^-)=Ck$$

按照式(2),应有

$$-2Ck=-2mV_0C/\hbar^2$$

因此

$$k=mV_0/\hbar^2 \tag{6}$$

$$\boxed{E=-\frac{\hbar^2k^2}{2m}=-\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}} \tag{7}$$

这是唯一的束缚态能级. 由归一化条件

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi|^2\mathrm{d}x=1$$

容易求出归一化常数 $C=\sqrt{k}$. $\psi(x)$的图形见图 2.1.

在这个唯一的束缚态中,势能和动能的平均值分别为

$$\langle V\rangle=-V_0\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi|^2\delta(x)\mathrm{d}x$$

$$=-V_0|\psi(0)|^2=-mV_0^2/\hbar^2=2E \tag{8}$$

$$\langle T\rangle=E-\langle V\rangle=-E=-\frac{1}{2}\langle V\rangle \tag{9}$$

$\langle T\rangle$,$\langle V\rangle$,E 之间的关系和 Coulomb 场的束缚态类似. 其根源在于本题和 Coulomb 场均具有下列性质:

$$V(\lambda x)=\frac{1}{\lambda}V(x),\qquad \lambda>0$$

于是,根据位力定理必然有式(8)和(9)的结果. 本题的特征长度为

$$x_0=1/k=\hbar^2/mV_0 \tag{10}$$

粒子在 $|x|>x_0$ 处出现的概率为

$$2\int_{x_0}^{\infty}|\psi|^2\mathrm{d}x=2k\int_{1/k}^{\infty}\mathrm{e}^{-2kx}\mathrm{d}x=e^{-2}=0.1353$$

(b) 奇宇称态

$$\psi(x)=\begin{cases}A\mathrm{e}^{-kx}, & x>0\\ -A\mathrm{e}^{kx}, & x<0\end{cases}$$

由波函数的连续条件可知,奇宇称态 $\psi(0)=0$,这就要求 $A=0$. 因此奇宇称态没有束缚态. 这个结论也可结合式(2)来理解. 式(2)中,由于奇宇称态 $\psi(0)=0$,所以

$$\psi'(0^+) = \psi'(0^-)$$

即 ψ' 是连续的. 这和式(2)中 $V_0 \to 0$ 的结果相同，即 $x=0$ 处 δ 势阱的存在对奇宇称态并无作用，粒子的运动仍和自由粒子相同，因此 $E>0$，不存在束缚态.

2.2 利用波函数

$$\psi(x) = \sqrt{k}\,\mathrm{e}^{-k|x|}$$

计算 Δx 和 Δp，验证测不准关系.

解 归一化波函数和能级为

$$\psi(x)=\sqrt{k}\,\mathrm{e}^{-k|x|}, \quad k=mV_0/\hbar^2 \tag{1}$$

$$E=-\hbar^2k^2/2m=-mV_0^2/2\hbar^2 \tag{2}$$

注意 $\psi(x)$ 为偶宇称实函数. x 和 x^2 平均值以及 Δx 分别为

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} x\psi^2 \mathrm{d}x = 0$$

$$\bar{x^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2\psi^2 \mathrm{d}x = 2k\int_0^{\infty} x^2\mathrm{e}^{-2kx}\mathrm{d}x = \frac{1}{2k^2}$$

$$\Delta x = (\bar{x^2}-\bar{x}^2)^{1/2}=1/\sqrt{2}\,k$$

p 和 p^2 平均值分别为

$$\bar{p} = -\,\mathrm{i}\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\psi'\,\mathrm{d}x = 0$$

($\psi^*\psi'$ 为奇函数)

$$\bar{p}^2 = (-\,\mathrm{i}\hbar)^2\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\psi''\mathrm{d}x = -\hbar^2\int_{-\infty}^{+\infty}\psi\psi''\mathrm{d}x$$

利用能量本征方程

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}[E + V_0\delta(x)]\psi = 0$$

即得

$$p^2 = 2m\int_{-\infty}^{+\infty}[E + V_0\delta(x)]\psi^2 \mathrm{d}x$$

$$= 2m[E + V_0\psi^2(0)] = 2m(E + V_0 k) = \hbar^2 k^2$$

计算 p^2 平均值也可利用公式

$$\bar{p^2} = \int |\hat{p}\psi|^2 \mathrm{d}x = \hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi'|^2 \mathrm{d}x \tag{3}$$

由式(1)易见 $|\psi'| = k\psi$，因此

$$\bar{p^2} = \hbar^2 \int k^2\psi^2 \mathrm{d}x = \hbar^2 k^2$$

$$\Delta p = (\bar{p^2} - \bar{p}^2)^{1/2} = \hbar k$$

仍有

$$\Delta x \cdot \Delta p = \hbar / \sqrt{2}$$

2.3 求动能为 E 的粒子对 δ 势垒

$$V(x) = V_0\delta(x)$$

的透射系数.

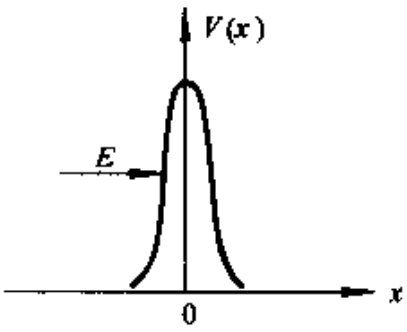


图 2.3

解 粒子的定态波函数可以写成

$$\psi(x,t) = \psi(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar} \tag{1}$$

其中 $\psi(x)$ 满足定态 Schrödinger 方程

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V_0\delta(x)]\psi = 0 \tag{2}$$

与题 2.1 相似，在 $x=0$ 处 ψ 连续，ψ' 则有跃变，

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = \frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi(0) \tag{3}$$

在 $x \neq 0$ 处，式(2)可以表示成

$$\psi'' + k^2\psi = 0, \quad k = \sqrt{2mE}/\hbar \tag{4}$$

其特解为

$$\psi = e^{ikx}, \quad e^{-ikx}$$

前者向$+x$轴方向运动，后者向$-x$轴方向运动.

设粒子从左方入射，入射波取为$e^{ikx-iEt/\hbar}$，则总波函数[式(4)之解]可以表示为

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx}, & x < 0 \\ Se^{ikx}, & x > 0 \end{cases} \tag{5}$$

其中R项为反射波，S项为透射波. 由$x=0$处ψ的连续条件得到

$$1 + R = S \tag{6}$$

由式(3)得到

$$ik(S + R - 1) = \frac{2mV_0}{\hbar^2}S \tag{7}$$

由式(6)、(7)容易解出

$$S = 1\Big/\left(1 + \frac{imV_0}{k\hbar^2}\right), \quad R = -\frac{imV_0}{k\hbar^2}\Big/\left(1 + \frac{imV_0}{k\hbar^2}\right) \tag{8}$$

所以

$$\text{透射系数} = |S|^2 = 1\Big/\left(1 + \frac{m^2V_0^2}{\hbar^4k^2}\right) = 1\Big/\left(1 + \frac{mV_0^2}{2E\hbar^2}\right) \tag{9}$$

$$\text{反射系数} = |R|^2 = \frac{mV_0^2}{2E\hbar^2}\Big/\left(1 + \frac{mV_0^2}{2E\hbar^2}\right) \tag{10}$$

注意，$|S|^2 + |R|^2 = 1$，这是粒子数守恒的具体体现. 由式(9)，(10)可见，如将δ势垒改成δ势阱，即$V_0 \to -V_0$，反射系数及透射系数不变.

δ势阱的束缚态能级(见题 2.1)

$$\varepsilon = -mV_0^2/2\hbar^2 \tag{11}$$

可以作为本题中衡量入射能量大小的标准. 因为式(9)可以写成

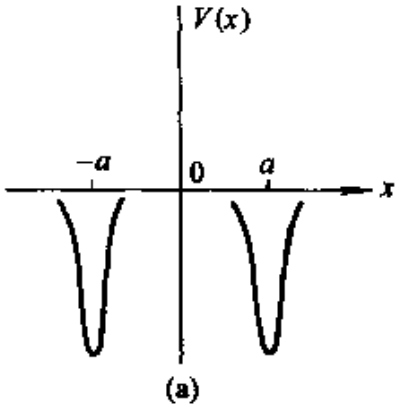
$$|S|^2 = 1/\left(1 + \frac{|\varepsilon|}{E}\right) = \frac{E}{E + |\varepsilon|} \tag{9'}$$

当 $E \ll |\varepsilon|$，透射系数 $|S|^2 \sim 0$；当 $E \gg |\varepsilon|$，$|S|^2 \sim 1$，即当入射能量足够大时，δ 势垒(阱)可以认为是"透明"的.

2.4 粒子在双 δ 势阱

$$V(x) = -V_0[\delta(x+a) + \delta(x-a)]$$

中运动，求束缚态能级公式，并和单 δ 势阱的结果作比较. (本题可以作为氢分子离子 H_2^+ 的一种近似一维模型.)



(a)

图 2.4

解 定态 Schrödinger 方程为

$$\psi'' + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi + \frac{2mV_0}{\hbar}[\delta(x+a) + \delta(x-a)]\psi = 0 \tag{1}$$

$E>0$ 为游离态，$E<0$ 为束缚态. $V(x)$为偶函数，因此束缚定态有确定的宇称. 和题 2.1 同样的理由，在 $x=\pm a$ 处 ψ 应连续，ψ' 的跃变条件为

$$\psi'(a-0)-\psi'(a+0)=\frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi(a)=\frac{2}{b}\psi(a) \qquad (2)$$

$$\psi'(-a-0)-\psi'(-a+0)=\frac{2}{b}\psi(-a) \qquad (2')$$

其中 $b=\hbar^2/mV_0$ 是反映 δ 势阱性质的一个特征长度，另一个特征长度为 $2a$. 令

$$k=\sqrt{-2mE}/\hbar \qquad (3)$$

除了 $x=-a$、a 两个奇异点外，式(1)可以写成

$$\psi''-k^2\psi=0 \qquad (4)$$

其特解为 $e^{\pm kx}$，式(1)在各个空间区域的解都可以由这两个特解叠加而成.

(a) 偶宇称态

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

$x\to\pm\infty$ 处 $\psi\to 0$(束缚态条件)的解为

$$\psi(x)=\begin{cases}Ae^{kx}, & x<-a\\ \mathrm{ch}kx=\dfrac{1}{2}(e^{kx}+e^{-kx}), & -a<x<a\\ Ae^{-kx}, & x>a\end{cases} \qquad (5)$$

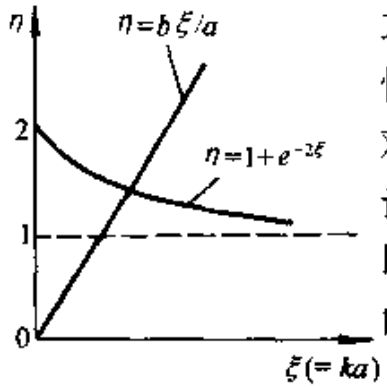
利用 $x=a$ 处 ψ 的连续条件和 ψ' 的跃变条件(2)，容易求得

$$\frac{2}{kb}-1=\frac{e^{ka}-e^{-ka}}{e^{ka}+e^{-ka}}$$

[由于 ψ 有确定的宇称，$x=-a$ 处 ψ 的连续条件和 ψ' 跃变条件(2′)给出同样的结果.]这个方程和下式等价：

$$kb=1+e^{-2ka} \qquad (6)$$

这就是能级方程. 给定 a、b 后，不难用数值解法求出 k 的值，再由



(b)

图 2.4

式(3)即可求出能量本征值 E. 我们先作定性讨论. 图 2.4(b)中直线和曲线的交点所对应的 k 值,就是所求的解. 由图可见,不论 a、b 取什么值,总有而且只有一个解,亦即偶宇称态总有而且只有一个束缚能级. k 的可能取值范围为

$$\frac{1}{b} < k < \frac{2}{b} \tag{7}$$

因此 E 的可能取值范围为

$$-\left(\frac{2mV_0^2}{\hbar^2}\right) < E < -\left(\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}\right) \tag{8}$$

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.

为了和单 δ 势阱能级(见题 2.1)比较,令

$$kb = \varepsilon \tag{9}$$

则

$$E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}\varepsilon^2 \tag{10}$$

ε 之值可根据 a/b 之值由式(6)求出,式(6)即

$$\varepsilon = 1 + \mathrm{e}^{-2a\varepsilon/b} \tag{6'}$$

数值结果如下:

$\frac{a}{b}$	0	0.1	0.2	0.3	0.5	0.7	1	2	3	5
ε	2	1.710	1.540	1.425	1.278	1.189	1.109	1.017	1.002	1.000

(b)奇宇称态

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

$x \to \pm\infty$ 处 $\psi \to 0$ 的解为

$$\psi(x)=\begin{cases}-Be^{kx}, & x<-a\\ \mathrm{sh}kx=\dfrac{1}{2}(e^{kx}-e^{-kx}), & -a<x<a\\ Be^{-kx}, & x>a.\end{cases}\tag{11}$$

利用 $x=a$ 处 ψ 的连续条件和 ψ' 跃变条件式(2)，容易求出能级方程为

$$kb=1-e^{-2ka}\tag{12}$$

由于上式右端总是小于 $2ka$，因此上式有解的条件可表为

$$b<2a,\qquad \text{即 } \hbar^2<2mV_0a\tag{13}$$

在此条件下，k 的取值范围显然是

$$0<k<1/b\tag{14}$$

E 的可能取值范围是

$$-\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}<E<0\tag{15}$$

如仍令 $kb=\varepsilon$，则能级 E 仍可表示成式(10)，能级方程(12)则可以写成

$$\varepsilon=1-e^{-2a\varepsilon/b}\tag{12'}$$

在满足式(13)的条件下，式(12′)必有而且只有一个解.[用类似于图 2.4(b)的图解法容易证明这一点.]

当 $2a\gg b$，E 取式(15)的下限，即趋于单 δ 势阱的能级；当 $2a\to b$，E 取上限，即 $E\to 0^-$；当 $2a<b$，无解. ε 和 a/b 的数值关系可由式(12′)求得如下：

$\frac{a}{b}$	0.5	0.6	0.7	0.8	1	1.2	1.5	2	3
ϵ	0	0.314	0.511	0.642	0.797	0.879	0.941	0.980	0.998

两种束缚态的波形如图 2.4(c)、(d)所示.

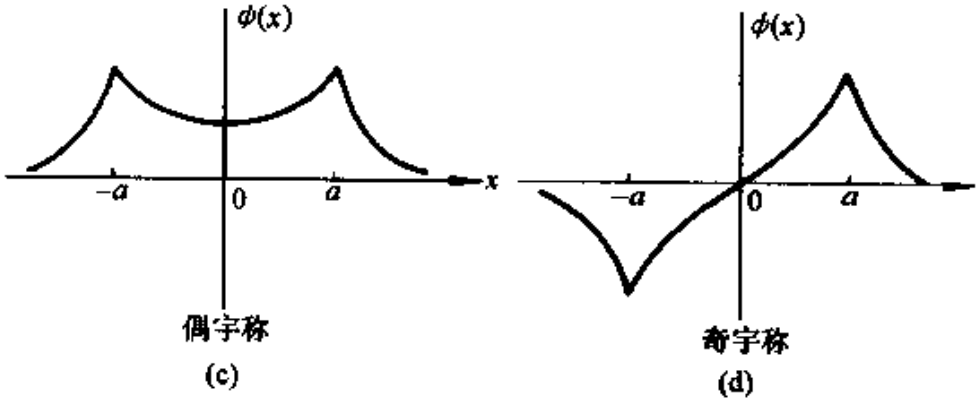


图 2.4

2.5 粒子在双 δ 势垒

$$V(x) = V_0[\delta(x+a) + \delta(x-a)]$$

作用下运动,求共振态能级.

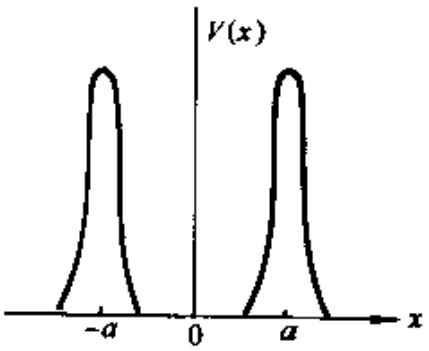


图 2.5

解 能量本征方程为

$$\psi'' + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi - \frac{2mV_0}{\hbar^2}[\delta(x+a) + \delta(x-a)]\psi = 0 \qquad (1)$$

由于 $V(x)\geqslant 0$，所以 $E>0$. 令

$$k=\sqrt{2mE}/\hbar \tag{2}$$

在 $x\neq\pm a$ 处，式(1)可以写成

$$\psi''+k^2\psi=0 \tag{3}$$

解为 $\psi=\cos kx$、$\sin kx$，在 $x\to\pm\infty$ 处 ψ 并不趋于 0，而呈周期性变化. 因此，本题没有严格的束缚态解和分立能级. 所谓共振态是指 ψ 在垒间区域($|x|<a$)的值远大于垒外区域($|x|>a$)的值. 与此相应的能量就称为共振态能级.

在 $x=a$ 处 ψ 应该连续，ψ' 的跃变条件为

$$\psi'(a+0)-\psi'(a-0)=\frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi(a) \tag{4}$$

在 $x=-a$ 处也有类似公式.

(a) 偶宇称态

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

我们只写出 $x>-a$ 区域的 ψ，$x<-a$ 区域的 ψ 可按偶函数条件写出. 由式(3)，有

$$\psi(x)=\begin{cases}\cos kx, & -a<x<a\\ A\cos kx+B\sin kx=C\sin(kx+\theta), & x>a\end{cases} \tag{5}$$

由 $x=a$ 处 ψ 的连续条件，应该有如下关系：

$$\cos ka=C\sin(ka+\theta) \tag{6}$$

由 ψ' 的跃变条件(4)，应该有如下关系：

$$C\cos(ka+\theta)+\sin ka=\frac{2mV_0}{k\hbar^2}\cos ka \tag{7}$$

作为共振态，要求 $C\sim 0$，由式(6)可得

$$|\cos ka| \ll 1 \tag{8}$$

因此可令

$$ka = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi - \epsilon$$

$$n = 0,1,2,\cdots, \qquad |\epsilon| \ll \pi/2 \tag{9}$$

代入式(7),并略去其中较小的 C 项,即得

$$\frac{k\hbar^2}{2mV_0} \approx \cot ka = \cot\left(n\pi + \frac{\pi}{2} - \epsilon\right) = \tan\epsilon \approx \epsilon$$

即

$$\epsilon \approx k/U_0 \approx \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi/aU_0 \tag{10}$$

其中

$$U_0 = 2mV_0/\hbar^2 \tag{11}$$

代入式(9),即得

$$k \approx \left(n + \frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{a}\left(1 - \frac{1}{aU_0}\right) \tag{12}$$

再代入式(2),即得共振态能级公式

$$E \approx \frac{\pi^2\left(n + \frac{1}{2}\right)^2\hbar^2}{2ma^2}\left(1 - \frac{2}{aU_0}\right). \quad n = 0,1,2,\cdots \tag{13}$$

(b) 奇宇称态

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

在区域 $x > -a$,波函数为

$$\psi(x) = \begin{cases} \sin kx, & -a < x < a \\ D\sin(kx + \varphi), & x > a \end{cases} \tag{14}$$

类似地可以求得

$$k \approx \frac{n\pi}{a}\left(1-\frac{1}{aU_0}\right), \qquad n=1,2,3,\cdots \tag{15}$$

$$E \approx \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\left(1-\frac{2}{aU_0}\right) \tag{16}$$

式(13)和(16)可以统一写成

$$\boxed{E_n \approx \frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{2a}\right)^2\left(1-\frac{2}{aU_0}\right). \qquad n=1,2,3,\cdots} \tag{17}$$

偶宇称态 n 取奇数,奇宇称态 n 取偶数.

共振态出现的必要条件为

$$\varepsilon \approx k/U_0 \ll \pi/2 \tag{18}$$

亦即

$$U_0a=\frac{2mV_0a}{\hbar^2} \gg n. \quad n=1,2,3,\cdots \tag{19}$$

在这条件下,对于能量 E_n 来说,δ 势垒可以近似地认为是"不透明"的,双 δ 势垒的作用近似于宽度为 $2a$ 的无限深势阱. 式(17)中当 $aU_0\to\infty$,即得

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

这正是无限深势阱的能级公式.

2.6 粒子以动能 E 入射,受到如下双 δ 势垒作用:

$$V(x)=V_0[\delta(x)+\delta(x-a)]$$

求反射概率和透射概率,以及发生完全透射的条件.

解 令

$$k = \sqrt{2mE}/\hbar, \qquad C = 2maV_0/\hbar^2 \tag{1}$$

能量本征方程可以写成

$$\psi'' + k^2\psi - \frac{C}{a}[\delta(x) + \delta(x-a)]\psi = 0 \tag{2}$$

在 $x=0$ 附近积分，可得 ψ' 跃变条件

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = \frac{C}{a}\psi(0) \tag{3}$$

类似地，$x=a$ 处 ψ' 跃变条件为

$$\psi'(a+0) - \psi'(a-0) = \frac{C}{a}\psi(a) \tag{4}$$

$\psi(x)$ 则应该是全空间的连续函数.

除了 $x=0,a$ 两个奇点外，式(2)化为

$$\psi'' + k^2\psi = 0 \tag{5}$$

特解为 $\psi=e^{\pm ikx}$. 如取入射波为 e^{ikx}，则总波函数可以表示成

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx}, & x<0 \\ Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & 0<x<a \\ De^{ikx}, & x>a \end{cases} \tag{6}$$

其中 R 项为反射波，D 项为透射波. $|R|^2$ 即反射概率，$|D|^2$ 即透射概率.

为了求出 R 和 D，可以利用 ψ 的连续条件和 ψ' 跃变条件. 由 $\psi(0)$ 连续以及式(3)，得到关系

$$1 + R = A + B$$

$$ik(A - B - 1 + R) = \frac{C}{a}(A + B) \tag{7}$$

由 $\psi(a)$ 连续以及式(4)，得到关系

$$Ae^{ika} + Be^{-ika} = De^{ika}$$

$$ik(D - A)e^{ika} + ikBe^{-ika} = \frac{C}{a}De^{ika} \tag{8}$$

式(7)和(8)共4个方程,恰好可以解出 R、D、A、B.

由式(7)得到

$$B = (i\theta - 1)A - i\theta \tag{9}$$

$$R = i\theta A - (1 + i\theta) \tag{10}$$

其中

$$\theta = 2ak/C = k\hbar^2/mV_0 \tag{11}$$

注意 C 和 θ 均为无量纲参数. 由式(8)得到

$$D = \frac{\theta}{\theta + i}A = i\theta Be^{-2iak} \tag{12}$$

将式(9)代入式(12),即可解出 A、B、D,再利用式(10),即可求出 R. 结果如下:

$$A = \frac{\theta^2 + i\theta}{(\theta + i)^2 + e^{2iak}}, \qquad B = \frac{-i\theta e^{2iak}}{(\theta + i)^2 + e^{2iak}}$$

$$R = \frac{1 - i\theta - (1 + i\theta)e^{2iak}}{(\theta + i)^2 + e^{2iak}}, \qquad D = \frac{\theta^2}{(\theta + i)^2 + e^{2iak}} \tag{13}$$

容易验证 $|R|^2+|D|^2=1$,这是概率守恒的具体体现.

完全透射条件为 $R=0$,即

$$e^{2iak} = \frac{1 - i\theta}{1 + i\theta} = \frac{C - 2iak}{C + 2iak} \tag{14}$$

这时透射波振幅 D 可以表示成

$$D = \frac{\theta - i}{\theta + i} \tag{15}$$

讨论 1° 如保持 V_0 不变，而 $a\to 0$，即两个 δ 势垒合而为一，$V(x)\to 2V_0\delta(x)$，这时透射概率为

$$|D|^2=\frac{1}{\left|1+\frac{2\mathrm{i}}{\theta}\right|^2}=\frac{1}{1+\frac{4m^2V_0^2}{\hbar^4k^2}} \tag{16}$$

这正是粒子对于单 δ 势垒的透射概率(参看题 2.3).

2° 如果粒子的入射能量很小，$ak\ll 1$，这时完全透射条件(14)的解为

$$C=-2 \qquad (\text{即 } \theta=-ak) \tag{17}$$

只有双 δ 势阱($V_0<0$)散射才可能出现这种情况.

3° 如果 $|C|$ 很小，而 $|\theta|\gg 1$，这时完全透射条件(14)的解为

$$\begin{aligned} k&\approx\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{a}+\frac{1}{a\theta} \\ &\approx\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{a}\left[1+\frac{C}{2\pi^2(n+\frac{1}{2})^2}\right]. \qquad n=0,1,2,\cdots \end{aligned} \tag{18}$$

如果 $|C|\gg 2n\pi$，而 $|\theta|\ll 1$，这时式(14)的解为

$$k\approx\frac{n\pi}{a}-\frac{\theta}{a}\approx\frac{n\pi}{a}\left(1-\frac{2}{C}\right), \quad n=1,2,\cdots \tag{19}$$

相应的能量为 $E=\hbar^2k^2/2m$.

2.7 粒子在势场

$$V(x)=\begin{cases} V_0\delta(x), & |x|<a \\ \infty & |x|\geqslant a \end{cases}$$

(即无限深势阱的中央有一个 δ 势垒)中运动，求能级公式，并讨论 V_0 很大和很小的极限情况.

解 在 $V(x)\to\infty$ 处 $\psi\to 0$，所以边界条件为

$$|x|\geqslant a, \qquad \psi(x)=0 \tag{1}$$

在阱内($|x|<a$),能量本征方程为

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V_0\delta(x)]\psi = 0 \quad (2)$$

和题 2.1 类似,$x=0$ 处 ψ' 的跃变条件为

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = \frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi(0) \quad (3)$$

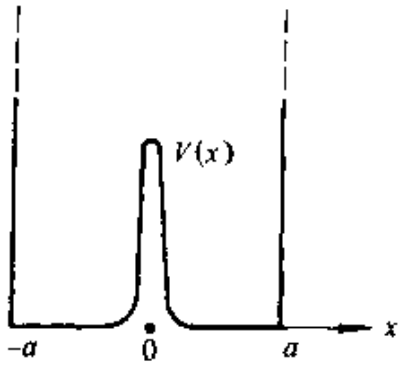


图 2.7

ψ 则是连续的.$V(x)$为偶函数,所以各能量本征态均有确定的宇称.令

$$k = \sqrt{2mE}/\hbar \quad (4)$$

在 $x\neq 0$ 处,式(2)可以写成

$$\psi'' + k^2\psi = 0, \quad -a < x < 0, \quad 0 < x < a \quad (5)$$

特解为

$$\psi = \sin kx, \qquad \cos kx$$

在 $x>0$ 和 $x<0$ 两个区域,$\psi(x)$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(1)和 ψ' 跃变条件(3).

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)就有 $\psi'(0^+)=\psi'(0^-)$,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

$$\psi(x) = C\sin kx, \qquad -a < x < a$$

由边界条件(1),得到

$$k = n\pi/a, \qquad n = 1,2,3,\cdots \quad (6)$$

因此,能级为

$$E = \frac{\hbar^2k^2}{2m} = \frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2, n = 1,2,3,\cdots \quad (7)$$

归一化的能量本征函数为

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}, n = 1,2,3,\cdots \tag{8}$$

偶宇称态，$\psi(-x)=\psi(x)$，在阱内区域满足式(5)的解为

$$\psi(x) = \begin{cases} A\cos kx + B\sin kx, & 0 < x < a \\ A\cos kx - B\sin kx, & -a < x < 0 \end{cases} \tag{9}$$

由边界条件(1)，得到

$$A\cos ka + B\sin ka = 0 \tag{10}$$

由 ψ' 跃变条件(3)，得到

$$Bk = mV_0A/\hbar^2 \tag{11}$$

式(11)给出

$$A/B = \hbar^2k/mV_0 \tag{11'}$$

代入式(10)即得能级方程

$$\boxed{\tan ka = -\frac{\hbar^2}{mV_0a}ka = -\frac{b}{a}ka} \tag{12}$$

其中 $b=\hbar^2/mV_0$ 是 δ 势垒的特征长度，给定 a，b 后，可用图解法或数值解法求出 k 的特征值，从而求出能级 E.

当 $a \gg bn\pi$，即 $V_0 \gg n\pi\hbar^2/ma$，式(12)的近似解为

$$\tan ka \approx 0, \quad ka \approx n\pi, \quad n = 1,2,3,\cdots \tag{13}$$

能级为

$$E \approx \frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2, \quad n = 1,2,3,\cdots \tag{14}$$

这种情况下 δ 势垒近似于“不透明”的，它将原来的无限深势阱分隔成两个宽为 a 的无限深势阱，式(14)即其能级公式.

当 $a \ll b$，即 $V_0 \ll \hbar^2/ma$，式(12)的近似解为

$$\cot ka \approx 0, \quad ka \approx \left(n+\frac{1}{2}\right)\pi, \quad n=0,1,2,\cdots \tag{15}$$

能级为

$$E=\frac{1}{2m}\left[\frac{(2n+1)\pi\hbar}{2a}\right]^2, \quad n=0,1,2,\cdots \tag{16}$$

式(15)和(16)相当于完全略去 δ 势垒的作用，式(16)正是无限深势阱中偶宇称态的能级公式. 式(7)和(16)可以统一写成

$$E_n=\frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{2a}\right)^2, \quad n=1,2,3,\cdots \tag{17}$$

偶宇称态 n 取奇数，奇宇称态 n 取偶数.

现在来求在条件 $V_0 \ll \hbar^2/ma$ 下偶宇称态稍为精确一些的能级表达式. 代替式(15)，令

$$ka=\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi+\theta, \quad \theta \ll \pi/2 \tag{18}$$

则

$$\tan ka = -\cot\theta \approx -1/\theta$$

代入能级方程(12)，即得

$$\theta \approx a/bka \approx a\Big/\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi b = mV_0 a\Big/\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi\hbar^2 \tag{19}$$

能级公式为

$$E=\hbar^2k^2/2m=\frac{\hbar^2}{2ma^2}\left[\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi+\theta\right]^2$$

略去 θ^2 项(即 V_0^2 项)，即得

$$E \approx \frac{1}{2m}\left[\frac{(2n+1)\pi\hbar}{2a}\right]^2+\frac{V_0}{a}, \quad n=0,1,2,\cdots \tag{20}$$

这个结果相当于将 δ 势垒视为微扰时能级的微扰论一级近似.

2.8 质量为 m 的粒子束以动量 $p=\hbar k$ 从 $x=-\infty$ 处入射，受到周期性 δ 势垒

$$V(x)=V_0\sum_{n=0}^{\infty}\delta(x-na),\quad a>0$$

的作用，求能够出现完全反射的动量值.

解 在 x 表象中直接计算，以便更加形象地分析在各个 δ 势垒处波的反射和透射情况. 为了便于讨论，先设 δ 势垒总数为 N，最后再令 $N\to\infty$. 各势垒位置为

$$x=0,a,2a,\cdots,(N-1)a$$

它们将空间分隔成 $(N+1)$ 个区域，我们将称区域 $(n-1)a<x<na$ 为第 n 区. [$x<0$ 为第 0 区，$x>(N-1)a$ 为第 N 区.]波函数 $\psi(x)$ 满足能量本征方程

$$\psi''+k^2\psi-\frac{2mV_0}{\hbar^2}\sum_n\delta(x-na)\psi(x)=0 \tag{1}$$

在各个区域中，式(1)的解只能取 $e^{\pm ikx}$ 的形式. 设第 n 区中波函数为

$$\psi_n(x)=D_ne^{ikx}+R_ne^{-ikx} \tag{2}$$

在 $x=na$ 处，ψ 的连续条件要求

$$\psi_n(na)=\psi_{n+1}(na),\qquad n=0,1,\cdots,(N-1) \tag{3}$$

$x=na$ 处 ψ' 的跃变条件为

$$\psi'_{n+1}(na)-\psi'_n(na)=\frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi_n(na) \tag{4}$$

在波函数取式(2)的情况下，式(3)、(4)给出

$$R_{n+1}-R_n=(D_n-D_{n+1})e^{2ina k} \tag{5}$$

$$R_{n+1} - R_n = \mathrm{i}a(R_n + D_n \mathrm{e}^{2\mathrm{i}nak}) \tag{6}$$

其中

$$a = mV_0/k\hbar^2 \tag{7}$$

各系数 D_n、R_n 原则上可由式(5)、(6)解出. 但如动量 $\hbar k$ 是任意给定的，结果较复杂，这里不讨论. 下面只讨论下式成立时有何结论：

$$\mathrm{e}^{2\mathrm{i}nak} = 1, \quad n = 0,1,2,\cdots$$

这时式(5)给出

$$\begin{aligned}
&D_0 - D_1 = R_1 - R_0 \\
&D_1 - D_2 = R_2 - R_1 \\
&\cdots\cdots \\
&D_n - D_{n+1} = R_{n+1} - R_n \\
&\cdots\cdots \\
&D_{N-1} - D_N = -R_{N-1}
\end{aligned} \tag{8}$$

(最后一个区域中只有透射波，$R_N = 0$.)以上各式相加，即得

$$D_0 + R_0 = D_N \tag{9}$$

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

$$\text{反射概率} = |R_0/D_0|^2, \qquad \text{透射概率} = |D_N/D_0|^2 \tag{10}$$

概率守恒要求

$$|D_0|^2 = |R_0|^2 + |D_N|^2 \tag{11}$$

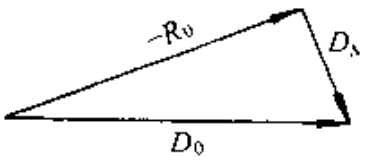


图 2.8

式(9)、(11)表明，D_0，R_0，D_N 作为复数，应该在复平面上构成直角三角形的三边，如图 2.8 所示.

式(8)给出

$$R_n + D_n = R_{n+1} + D_{n+1} = \cdots = D_n \tag{12}$$

式(6)给出

$$R_{n+1} - R_n = \mathrm{i}\alpha(R_n + D_n) = \mathrm{i}\alpha D_N, \quad n = 0,1,2,\cdots \tag{13}$$

即

$$R_1 - R_0 = R_2 - R_1 = \cdots = -R_{N-1} = \mathrm{i}\alpha D_N$$

容易解出

$$-R_0 = iN\alpha D_N, \quad -R_1 = \mathrm{i}(N-1)\alpha D_N, \cdots \tag{14}$$

给定入射波 $D_0 e^{ikx}$ 后，由于 $|R_0| \leqslant |D_0|$，当 δ 势垒总数 N 趋于 ∞ 时，必有 $D_N \to 0$，则式(9)给出

$$R_0 \to -D_0, \qquad (N \to \infty)$$

亦即透射概率为 0，反射概率为 1. 由式(14)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.

第三章 谐 振 子

3.1 一维谐振子的 Hamilton 算符为

$$\boxed{H=\frac{1}{2m}p^2+\frac{1}{2}m\omega^2x^2} \tag{1}$$

x 与 p 满足基本对易式

$$[x,p]=xp-px=\mathrm{i}\hbar \tag{2}$$

引入无量纲算符

$$Q=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x, \qquad P=\frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}p \tag{3}$$

$$\boxed{a=\frac{1}{\sqrt{2}}(Q+\mathrm{i}P), \qquad a^+=\frac{1}{\sqrt{2}}(Q-\mathrm{i}P)} \tag{4}$$

(a) 计算$[Q,P]$,$[a,a^+]$,$[a,a^+a]$,$[a^+,a^+a]$;

(b) 将 H 用 a、a^-表示,并求出全部能级;

(c) 在能量表象中,计算 a、a^+、Q、P、x、p 的矩阵元.

解 (a)利用基本对易式(2),容易算出

$$[Q,P]=\frac{1}{\hbar}[x,p]=\mathrm{i} \tag{5}$$

$$[a,a^{\dagger}]=\frac{1}{2}[Q+\mathrm{i}P,Q-\mathrm{i}P]=-\mathrm{i}[Q,P]=1 \tag{6}$$

利用式(6),可以进一步求出

$$[a,a^+a]=[a,a^+]a=a \tag{7}$$

$$[a^{+},a^{+}a]=a^{+}[a^{+},a]=-a^{+} \tag{8}$$

(b)根据定义式(4),可得

$$\begin{aligned}a^{+}a&=\frac{1}{2}(Q-\mathrm{i}P)(Q+\mathrm{i}P)\\&=\frac{1}{2}(Q^{2}+P^{2})+\frac{\mathrm{i}}{2}(QP-PQ)\\&=\frac{1}{2}(Q^{2}+P^{2}-1)\end{aligned} \tag{9}$$

因此,Hamilton 算符可以写成

$$H=\frac{p^{2}}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^{2}x^{2}=\frac{1}{2}\hbar\omega(P^{2}+Q^{2})=\hbar\omega\left(a^{+}a+\frac{1}{2}\right) \tag{10}$$

对于任何态矢量$|\psi\rangle$,均有

$$\langle\psi|a^{+}a|\psi\rangle=|a|\psi\rangle|^{2}\geqslant 0 \tag{11}$$

因此

$$\langle H\rangle=\langle\psi|H|\psi\rangle\geqslant\frac{1}{2}\hbar\omega$$

如ψ为能量本征态,则$\langle H\rangle=E$(能量本征值),上式即

$$E\geqslant\frac{1}{2}\hbar\omega \tag{12}$$

此式规定了能级的下限.

由式(7)及(10),可得

$$[a,H]=[a,a^{+}a]\hbar\omega=a\hbar\omega$$

亦即

$$a(H-\hbar\omega)=Ha \tag{13}$$

将算符关系(13)作用于任何一个能量本征态矢量$|E'\rangle$(E'为相应的能量本征值),得到

$$Ha|E'\rangle=a(H-\hbar\omega)|E'\rangle=(E'-\hbar\omega)a|E'\rangle \tag{14}$$

这结果表明，如 $a|E'\rangle\neq0$，它就是 H 的另一个本征态矢量，本征值为 $(E'-\hbar\omega)$. 重复这个推理过程，易知

$$E',\ E'-\hbar\omega,\ E'-2\hbar\omega,\ \cdots$$

都是能量本征值. 但是，由于 $E\geqslant\hbar\omega/2$，这个数列必须终止于某个最小值 E_0，即 $(E_0-\hbar\omega)$ 不再是能量本征值. 其条件为

$$a|E_0\rangle=0 \tag{15}$$

因此，利用式(10)即得

$$H|E_0\rangle=\hbar\omega\left(a^{+}a+\frac{1}{2}\right)|E_0\rangle=\frac{\hbar\omega}{2}|E_0\rangle$$

亦即

$$E_0=\hbar\omega/2 \tag{16}$$

这就是基态能量.

类似地，由式(8)及(10)，可得

$$Ha^{+}=a^{+}(H+\hbar\omega) \tag{17}$$

因此

$$Ha^{+}|E'\rangle=(E'+\hbar\omega)a^{+}|E'\rangle \tag{18}$$

即 $a^{+}|E'\rangle$ 也是 H 的本征态矢量，本征值为 $(E'+\hbar\omega)$. 重复这个推理过程，可知

$$E',\ E'+\hbar\omega,\ E'+2\hbar\omega,\ \cdots \tag{19}$$

都是能量本征值. 利用式(6)，H 可以写成

$$H=\hbar\omega\left(aa^{+}-\frac{1}{2}\right)$$

将此式作用于$|E'\rangle$，由于$E'\geqslant\hbar\omega/2$，因此$a^+|E\rangle$不可能等于0. 由此可知数列(19)没有上限.

综合以上分析，可知全部能级为

$$\boxed{E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\quad n=0,1,2,\cdots} \tag{20}$$

相应的本征态矢量记为$|n\rangle$，在x表象中波函数记为$\psi_n(x)$，并规定它们都是归一化的. 一维束缚态是不简并的，各本征态矢量互相正交，正交归一化条件可以表示成

$$\langle n'|n\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_{n'}(x)\psi_n(x)\mathrm{d}x=\delta_{n'n} \tag{21}$$

各$\psi_n(x)$为实函数，$\psi_n=\psi_n^*$.

由本征方程

$$H|n\rangle=E_n|n\rangle=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega|n\rangle$$

以及H的表示式(10)，即得

$$\boxed{a^+a|n\rangle=n|n\rangle} \tag{22}$$

因此，常称a^+a为量子数目算符，并记为

$$a^+a=\hat{n} \tag{23}$$

在二次量子化理论中，$\hat{n}=a^+a$也称粒子数算符.

(c) 上述推导能级的过程中，已经证明算符a、a^+对于能量本征态的作用结果是

$$\begin{aligned}a|n\rangle&=\lambda(n)|n-1\rangle\\ a^+|n\rangle&=\nu(n)|n+1\rangle\end{aligned} \tag{24}$$

λ、ν为待定系数. 上式的共轭方程是

$$\begin{aligned}\langle n|a^+&=\lambda^*(n)\langle n-1|\\ \langle n|a&=\nu^*(n)\langle n+1|\end{aligned} \tag{24'}$$

式(24′)和(24)相乘(取内积),并利用式(22)以及式(6),即得

$$\lambda^*\lambda=\langle n|a^+a|n\rangle=n$$

$$\nu^*\nu=\langle n|aa^+|n\rangle=\langle n|(a^+a+1)|n\rangle=n+1$$

适当选择态矢量$|n\rangle$的相因子($e^{i\alpha}$),总可使各 λ 和 ν 为非负实数,因此

$$\lambda(n)=\sqrt{n}\,,\quad \nu(n)=\sqrt{n+1} \tag{25}$$

即

$$\boxed{a|n\rangle=\sqrt{n}\,|n-1\rangle,\quad a^+|n\rangle=\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle} \tag{26}$$

由此可知,在能量表象中,a 和 a^+唯一不等于 0 的矩阵元是

$$\begin{aligned} a_{n-1,n}&=\langle n-1|a|n\rangle=\sqrt{n}\\ a^+_{n+1,n}&=\langle n+1|a^+|n\rangle=\sqrt{n+1}\end{aligned} \tag{27}$$

亦即

$$\begin{aligned} a_{n'n}&=\langle n'|a|n\rangle=\sqrt{n}\,\delta_{n',n-1}\\ a^+_{nn'}&=\langle n|a^+|n'\rangle=a_{n'n}=\sqrt{n}\,\delta_{n,n'+1}\end{aligned} \tag{28}$$

利用式(4),可将 Q、P 表示成 a、a^+,

$$Q=\frac{1}{\sqrt{2}}(a^++a),\qquad P=\frac{i}{\sqrt{2}}(a^+-a) \tag{29}$$

由式(26),易得

$$Q|n\rangle=\sqrt{\frac{n+1}{2}}\,|n+1\rangle+\sqrt{\frac{n}{2}}\,|n-1\rangle \tag{30}$$

$$P|n\rangle=i\sqrt{\frac{n+1}{2}}\,|n+1\rangle-i\sqrt{\frac{n}{2}}\,|n-1\rangle \tag{31}$$

不等于 0 的矩阵元为

$$Q_{n+1,n}=Q_{n,n+1}=\sqrt{\frac{n+1}{2}}$$
$$P_{n+1,n}=-P_{n,n+1}=\mathrm{i}\sqrt{\frac{n+1}{2}} \tag{32}$$

类似地，x、p 也可表示成 a、a^+，

$$x=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}Q=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a^++a)$$
$$p=\sqrt{m\omega\hbar}\ P=\mathrm{i}\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(a^+-a) \tag{33}$$

由式(26)，得到

$$x|n\rangle=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle+\sqrt{n}\,|n-1\rangle) \tag{34}$$

$$p|n\rangle=\mathrm{i}\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle-\sqrt{n}\,|n-1\rangle) \tag{35}$$

将它们写成波函数的形式，就是

$$x\psi_n(x)=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}[\sqrt{n+1}\psi_{n+1}(x)+\sqrt{n}\,\psi_{n-1}(x)] \tag{34'}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_n(x)=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}[\sqrt{n}\,\psi_{n-1}(x)-\sqrt{n+1}\psi_{n+1}(x)] \tag{35'}$$

x、p 的不等于 0 的矩阵元为

$$x_{n+1,n}=x_{n,n+1}=\left(\frac{n+1}{2}\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2}$$
$$p_{n+1,n}=-p_{n,n+1}=\mathrm{i}\left(\frac{n+1}{2}m\omega\hbar\right)^{1/2} \tag{36}$$

注意

$$p_{n+1,n}=\mathrm{i}m\omega x_{n+1,n}$$
$$p_{n,n+1}=-\mathrm{i}m\omega x_{n,n+1} \tag{37}$$

式(26)反映了算符 a^+ 和 a 的主要性质，因此常将 a^+ 和 a 分别称为量子数升、降算符. 在二次量子化理论中，则将 a^+ 和 a 分别称为产生、消灭算符.

3.2 利用升、降算符 a^+、a，求谐振子的能量本征函数(x 表象)，并扼要讨论其数学性质.

解 从基态波函数 $\psi_0(x)$ 开始. 根据题 3.1 式(26)，

$$a|0\rangle=0 \tag{1}$$

在 x 表象中写出来，就是

$$(\mathrm{i}\hat{p}+m\omega x)\psi_0(x)=\left(\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}+m\omega x\right)\psi_0(x)=0 \tag{2}$$

令 $\alpha=\sqrt{m\omega/\hbar}$，上式可以写成

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_0+\alpha^2x\psi_0=0 \tag{2'}$$

容易解出

$$\boxed{\psi_0(x)=N_0\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2/2}} \tag{3}$$

式中 N_0 为归一化常数. 由归一化条件

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi_n(x)|^2\mathrm{d}x=1 \tag{4}$$

求出(取为实数)

$$N_0=\sqrt{\alpha}/\pi^{1/4} \tag{5}$$

其次，题 3.1 式(26)中令 $n=0$，可得

$$a^+|0\rangle=|1\rangle$$

即

$$\psi_1(x)=a^+\psi_0(x)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha x-\frac{1}{\alpha}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\psi_0(x) \tag{6}$$

将式(3)及(5)代入式(6),容易求出

$$\psi_1=\sqrt{2}\,\alpha x\psi_0=\frac{\sqrt{2a}}{\pi^{1/4}}\alpha x\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2/2} \tag{7}$$

普遍地,由题 3.1 式(26)可得

$$\psi_n=\frac{1}{\sqrt{n}}a^+\psi_{n-1}=\frac{1}{\sqrt{2n}}\left(\alpha x-\frac{1}{\alpha}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\psi_{n-1} \tag{8}$$

引入无量纲变量

$$\xi=\alpha x \tag{9}$$

(ξ 即题 3.1 中的 Q),可将式(8)写成

$$\psi_n=\frac{1}{\sqrt{2n}}\left(\xi-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)\psi_{n-1} \tag{10}$$

依次递推,可得

$$\begin{aligned}\psi_n&=\left(\frac{1}{2^nn!}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\xi-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^n\psi_0\\&=\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}\,2^nn!}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\xi-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^n\mathrm{e}^{-\xi^2/2}\\&=N_nH_n(\xi)\mathrm{e}^{-\xi^2/2}\end{aligned} \tag{11}$$

其中

$$N_n=\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}\,2^nn!}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{12}$$

为归一化常数. 注意

$$N_n = N_{n-1}/\sqrt{2n} \tag{13}$$

式(11)中，

$$H_n(\xi) = \mathrm{e}^{\xi^2/2}\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^n \mathrm{e}^{-\xi^2/2} \tag{14}$$

易见 $H_n(\xi)$是 ξ 的 n 次多项式，称为 Hermite 多项式.

下面扼要讨论 $H_n(\xi)$的数学性质.

1° 宇称

由式(14)显而易见

$$H_n(-\xi) = (-1)^n H_n(\xi) \tag{15}$$

当 n 为偶数时，$H_n(\xi)$为偶宇称；n 为奇数时，$H_n(\xi)$为奇宇称.

2° 递推关系

由题 3.1 的式(26)，

$$a\psi_n = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)\psi_n = \sqrt{n}\,\psi_{n-1}$$

将式(11)代入上式，并利用式(13)消去归一化常数，即得

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}H_n(\xi) = 2nH_{n-1}(\xi)} \tag{16}$$

另外，题 3.1 的式(30)即

$$\xi\psi_n = \sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1} + \sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}$$

将式(11)，(13)代入此式，即得

$$\boxed{2\xi H_n(\xi) = H_{n+1}(\xi) + 2nH_{n-1}(\xi)} \tag{17}$$

3° 微分方程

将式(16)，(17)合并，消去 H_{n-1}，再微分一次，并利用式(16)

再消去 $\mathrm{d}H_{n+1}/\mathrm{d}\xi$，即得 H_n 满足如下微分方程：

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}H_n(\xi)-2\xi\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}H_n(\xi)+2nH_n(\xi)=0 \tag{18}$$

此方程称为 Hermite 方程. 式(14)是这个方程唯一的多项式解.

4° 微分表达式

式(14)和下式等价：

$$H_n(\xi)=(-1)^n\mathrm{e}^{\xi^2}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^n\mathrm{e}^{-\xi^2} \tag{14'}$$

可用数学归纳法证明如下. 首先，当 $n=0,1$ 时，式(14)和(14′)均给出

$$H_0(\xi)=1,\qquad H_1(\xi)=2\xi$$

设 $n=k$ 时命题成立，即设

$$\mathrm{e}^{\xi^2}\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^k\mathrm{e}^{-\xi^2}=\mathrm{e}^{\xi^2/2}\left(\xi-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^k\mathrm{e}^{-\xi^2/2}=H_k(\xi)$$

则

$$\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^{k+1}\mathrm{e}^{-\xi^2}=-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}(\mathrm{e}^{-\xi^2}H_k)=(2\xi H_k-H_k')\mathrm{e}^{-\xi^2}$$

$$\left(\xi-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^{k+1}\mathrm{e}^{-\xi^2/2}=\left(\xi-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)(\mathrm{e}^{-\xi^2/2}H_k)=(2\xi H_k-H_k')\mathrm{e}^{-\xi^2/2}$$

因此

$$\mathrm{e}^{\xi^2}\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^{k+1}\mathrm{e}^{-\xi^2}=2\xi H_k-H_k'=\mathrm{e}^{\xi^2/2}\left(\xi-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^{k+1}\mathrm{e}^{-\xi^2/2}$$

即 $n=k+1$ 时命题成立. 证明完毕.

5° $H_n(0)$ 和 $\psi_n(0)$

当 $n=2k+1$(奇数)，由式(15)，有

$$H_{2k+1}(-\xi)=-H_{2k+1}(\xi)$$

令 $\xi\to 0$，即得

$$H_{2k+1}(0)=0,\qquad k=1,2,3,\cdots \tag{19}$$

当 $n=2k$（偶数），在式(17)中令 $\xi\to 0$，并将 n 换成$(n-1)$，即得

$$H_{2k}(0)=-2(2k-1)H_{2k-2}(0)$$

反复利用此式，并注意 $H_0=1$，即得

$$H_{2k}(0)=(-1)^k 2^k(2k-1)!!\ =(-1)^k(2k)!\ /k! \tag{20}$$

再利用式(11)、(12)，即得

$$\psi_{2k+1}(0)=0 \tag{21}$$

$$\psi_{2k}(0)=(-1)^k\frac{\sqrt{\alpha}}{\pi^{1/4}}\frac{\sqrt{(2k)!}}{(2k)!!} \tag{22}$$

$$[\psi_{2k}(0)]^2=\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\frac{(2k)!}{[(2k)!!]^2}=\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\frac{(2k-1)!!}{(2k)!!} \tag{23}$$

3.3 对于谐振子的能量本征态$|n\rangle$，计算 x、p、x^2、p^2 的平均值及 Δx、Δp.

解 由题 3.1 式(34)、(35)，$x|n\rangle$及 $p|n\rangle$均可表示成$|n+1\rangle$和$|n-1\rangle$的线性叠加. 由正交归一化条件

$$\langle n|n'\rangle=\delta_{nn'} \tag{1}$$

可知

$$\begin{aligned}\bar{x}&=\langle n|x|n\rangle=0\\ \bar{p}&=\langle n|p|n\rangle=0\end{aligned} \tag{2}$$

这个结论也可以利用波函数 $\psi_n(x)$的宇称性而得出.

由题 3.1 的式(33)，有

$$x^2=\frac{\hbar}{2m\omega}(a^{\dagger}+a)^2=\frac{\hbar}{2m\omega}(a^2+a^{\dagger 2}+2\hat{n}+1) \tag{3}$$

$$p^2=-\frac{m\omega\hbar}{2}(a^+-a)^2=\frac{m\omega\hbar}{2}(2\hat{n}+1-a^2-a^{+2}) \tag{4}$$

由于

$$a^2|n\rangle=\sqrt{n(n-1)}\,|n-2\rangle$$

$$a^{+2}|n\rangle=\sqrt{(n+1)(n+2)}\,|n+2\rangle$$

根据正交条件(1),即得

$$\langle n|a^2|n\rangle=0,\quad \langle n|a^{+2}|n\rangle=0$$

因此

$$\overline{x^2}=\langle n|x^2|n\rangle=\frac{\hbar}{m\omega}\left(n+\frac{1}{2}\right) \tag{5}$$

$$\overline{p^2}=\langle n|p^2|n\rangle=m\omega\hbar\left(n+\frac{1}{2}\right) \tag{6}$$

$$\Delta x=(\overline{x^2}-\bar{x}^2)^{\frac{1}{2}}=\left[\frac{\hbar}{m\omega}\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]^{\frac{1}{2}} \tag{7}$$

$$\Delta p=(\overline{p^2}-\bar{p}^2)^{\frac{1}{2}}=\left[m\omega\hbar\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]^{\frac{1}{2}} \tag{8}$$

$$\boxed{\Delta x\cdot\Delta p=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar} \tag{9}$$

对于基态,$n=0$,$\Delta x\cdot\Delta p=\hbar/2$,刚好是测不准关系所规定的下限.

3.4 质量为 m 之粒子处于一维谐振子势场

$$V_1(x)=\frac{1}{2}kx^2,\quad k>0 \tag{1}$$

的基态.(a)如弹性系数 k 突然变为 $2k$,即势场变成

$$V_2(x)=kx^2 \tag{2}$$

随即测量粒子的能量，求发现粒子处于新势场 V_2 的基态的概率；(b)势场突然由 V_1 变成 V_2 后，不进行测量，经过一段时间 τ 后，势场又恢复成 V_1. 问 τ 取什么值时粒子仍恢复到原来 V_1 场的基态(概率 100%)?

解 (a)粒子的波函数 $\psi(x,t)$ 随时间的变化应满足 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi+V\psi \tag{3}$$

当 V 发生突变(由 $V_1\to V_2$)但变化量有限时，ψ 仍是 t 的连续函数，亦即 V 突变时 ψ 不变.

如以 $\psi_0(x)$ 和 $\phi_0(x)$ 分别表示 V_1 场和 V_2 场的基态波函数，当势场突然由 V_1 变成 V_2 后，粒子的波函数仍为 ψ_0，测得粒子处于 ϕ_0 态的概率为 $|\langle\psi_0|\phi_0\rangle|^2$.

将 V_1 和 V_2 写成标准形式：

$$V_1(x)=\frac{1}{2}kx^2=\frac{1}{2}m\omega_1^2x^2 \tag{1'}$$

$$V_2(x)=kx^2=\frac{1}{2}m\omega_2^2x^2 \tag{2'}$$

易见

$$\omega_2=\sqrt{2}\,\omega_1 \tag{4}$$

ψ_0 和 ϕ_0 可以按照题 3.2 的式(3)和(5)写出，即

$$\psi_0(x)=\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2/2},\quad \alpha^2=m\omega_1/\hbar \tag{5}$$

$$\phi_0(x)=\left(\frac{\beta}{\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-\beta^2x^2/2},\quad \beta^2=m\omega_2/\hbar \tag{6}$$

其中

$$\beta^2/\alpha^2=\omega_2/\omega_1=\sqrt{2} \tag{7}$$

因此

$$\langle\psi_0|\phi_0\rangle=\sqrt{\frac{\alpha\beta}{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}(\alpha^2+\beta^2)x^2}\mathrm{d}x=\left(\frac{2\alpha\beta}{\alpha^2+\beta^2}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$|\langle\psi_0|\phi_0\rangle|^2=\frac{2\alpha\beta}{\alpha^2+\beta^2}=\frac{2\beta/\alpha}{1+\beta^2/\alpha^2}=\frac{2^{5/4}}{1+\sqrt{2}}=0.9852 \tag{8}$$

此即所求概率.

(b) 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

$$\psi(x,0)=\psi_0(x) \tag{9}$$

以 $\phi_n(x)$表示 V_2 场的能量本征态,相应于能级

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_2$$

将 ψ_0 展开成 ϕ_n 的线性叠加,

$$\psi_0(x)=\sum_n C_n\phi_n(x),\quad (n\text{ 只能取偶数}) \tag{10}$$

当 $0<t<\tau$,Schrödinger 方程(3)中 $V=V_2(x)$,其解为

$$\psi(x,t)=\sum_n C_n\phi_n(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt/\hbar}$$

$$=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_2t/2}\sum_n C_n\phi_n(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\omega_2t} \tag{11}$$

如要求 $\psi(x,\tau)=A\psi_0(x)$,必须

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\omega_2\tau}=1,\quad n=0,2,4,\cdots \tag{12}$$

亦即

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_2\tau}=\pm1 \tag{12'}$$

满足这条件的 τ 值为

$$\tau=l\pi/\omega_2=l\pi\sqrt{\frac{m}{2k}},\quad l=1,2,3,\cdots \tag{13}$$

当 $t=\tau$，势场又由 V_2 变成 V_1 后，粒子即永远处于 ψ_0 态，能量 $E=\hbar\omega_1/2$.

3.5 耦合谐振子的 Hamilton 量为

$$H=\frac{1}{2m}(p_1^2+P_2^2)+\frac{1}{2}m\omega^2(x_1^2+x_2^2)+\lambda x_1x_2 \tag{1}$$

其中

$$p_1=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x_1},\quad p_2=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x_2} \tag{2}$$

x_1、p_1 和 x_2、p_2 分属于不同的自由度. 设 $\lambda<m\omega^2$，试求这耦合谐振子的能级.

解 如没有耦合项 λx_1x_2，就成为二维各向同性谐振子，Hamilton 量为

$$H_0=H_1+H_2=\frac{1}{2m}p_1^2+\frac{1}{2}m\omega^2x_1^2+\frac{1}{2m}p_2^2+\frac{1}{2}m\omega^2x_2^2 \tag{3}$$

用分离变量法即可化成两个独立的一维谐振子问题，能级和本征函数为

$$E_{n_1n_2}=(n_1+n_2+1)\hbar\omega \tag{4}$$

$$\psi_{n_1n_2}(x_1,x_2)=\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2) \tag{5}$$

$$n_1,n_2=0,1,2,\cdots\cdots$$

其中 $\psi_n(x)$ 为一维谐振子的能量本征函数.

对于耦合振子，可以用坐标变换的办法将问题化成两个独立的一维谐振子问题. 令

$$x_1=\frac{1}{\sqrt{2}}(y_1+y_2),\quad x_2=\frac{1}{\sqrt{2}}(y_1-y_2) \tag{6}$$

即

$$y_1=\frac{1}{\sqrt{2}}(x_1+x_2),\quad y_2=\frac{1}{\sqrt{2}}(x_1-x_2) \tag{6'}$$

容易证明

$$x_1^2+x_2^2=y_1^2+y_2^2$$

$$x_1x_2=\frac{1}{2}(y_1^2-y_2^2) \tag{7}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}=\frac{\partial^2}{\partial y_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_2^2}$$

因此,Hamilton 量可以表示成

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial y_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_2^2}\right)+\frac{1}{2}m\omega^2(y_1^2+y_2^2)+\frac{\lambda}{2}(y_{-1}^2-y_2^2)$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial y_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_2^2}\right)+\frac{1}{2}m\omega_1^2y_1^2+\frac{1}{2}m\omega_2^2y_2^2 \tag{8}$$

其中

$$\omega_1^2=\omega^2+\frac{\lambda}{m},\qquad \omega_2^2=\omega^2-\frac{\lambda}{m} \tag{9}$$

式(8)正是两个独立谐振子(频率 ω_1,ω_2)能量算符之和. 因此,能量本征值和本征函数为

$$E_{N_1N_2}=\left(N_1+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_1+\left(N_2+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_2 \tag{10}$$

$$\psi_{N_1N_2}(y_1,y_2)=\psi_{N_1}(y_1)\psi_{N_2}(y_2) \tag{11}$$

$$N_1,N_2=0,1,2,\cdots$$

3.6 在上题中，自由振子本征态 $\psi_{n_1n_2}(x_1,x_2)$ 记为 $|n_1n_2\rangle$，耦合振子本征态 $\psi_{N_1N_2}(y_1,y_2)$ 记为 $|N_1N_2\rangle$. 试对于 $|N_1N_2\rangle$ 态计算 n_1、n_2 的平均值.

解 仿照题 3.1，如引入升、降算符和粒子数算符

$$\hat{n}_1=a_1^{\dagger}a_1,\quad \hat{n}_2=a_2^{+}a_2 \tag{1}$$

$$\hat{N}_1=b_1^{+}b_1,\quad \hat{N}_2=b_2^{+}b_2 \tag{2}$$

其中

$$\begin{aligned}&a_1=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x_1+\frac{\mathrm{i}}{m\omega}p_1\right)\\&b_1=\sqrt{\frac{m\omega_1}{2\hbar}}\left[y_1+\frac{\mathrm{i}}{m\omega_1}p(y_1)\right],\qquad p(y_1)=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial y_1}\end{aligned} \tag{3}$$

等等. 容易求得

$$\begin{aligned}\hat{n}_1&=\frac{m\omega}{2\hbar}x_1^2+\frac{1}{2m\omega\hbar}p_1^2-\frac{1}{2}\\&=\frac{m\omega}{4\hbar}(y_1^2+y_2^2+2y_1y_2)+\frac{1}{4m\omega\hbar}[p^2(y_1)+p^2(y_2)\\&\quad+2p(y_1)p(y_2)]-\frac{1}{2}\end{aligned} \tag{4}$$

在 $|N_1N_2\rangle$ 态中算平均值时，按照题 3.3 计算结果，应有

$$\overline{y_1y_2}=0,\qquad \overline{p(y_1)p(y_2)}=0$$

$$\overline{y_1^2}=\left(N_1+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar}{m\omega_1},\quad \overline{p^2(y_1)}=\left(N_1+\frac{1}{2}\right)m\omega_1\hbar \tag{5}$$

$$\overline{y_2^2}=\left(N_2+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar}{m\omega_2},\quad \overline{p^2(y_2)}=\left(N_2+\frac{1}{2}\right)m\omega_2\hbar$$

因此，

$$\overline{n_1}=\frac{1}{4}\left(N_1+\frac{1}{2}\right)\left(\frac{\omega}{\omega_1}+\frac{\omega_1}{\omega}\right)$$

$$+\frac{1}{4}\left(N_2+\frac{1}{2}\right)\left(\frac{\omega}{\omega_2}+\frac{\omega_2}{\omega}\right)-\frac{1}{2} \tag{6}$$

类似地，可以求出

$$\bar{n}_2=\bar{n}_1 \tag{7}$$

如上题中耦合强度 $\lambda\to 0$，则 $\omega_1=\omega_2=\omega$，这时

$$\bar{n}_1=\bar{n}_2\to \frac{1}{2}(N_1+N_2) \tag{8}$$

3.7 电荷为 q 的自由谐振子，能量算符为

$$H_0=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2 \tag{1}$$

能量本征函数记为 $\psi_n(x)$，能级记为 $E_n^{(0)}$. 如外加均匀电场 $\mathscr{E}$，使振子额外受力 $f=q\mathscr{E}$，从而总能量算符变成

$$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2-q\mathscr{E}x \tag{2}$$

新的能级记为 E_n，本征函数记为 $\varphi_n(x)$. 求 E_n 和 φ_n，并将 φ_n 用 ψ_n 表示出来.

解一 H_0 和 H 中，p 是动量算符，

$$p=-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$$

式(2)中势能项可以写成

$$\frac{1}{2}m\omega^2x^2-q\mathscr{E}x=\frac{1}{2}m\omega^2[(x-x_0)^2-x_0^2]$$

其中

$$x_0=q\mathscr{E}/m\omega^2 \tag{3}$$

如作坐标平移，令

$$x' = x - x_0 \tag{4}$$

由于

$$p = -\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} = -\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x'} = p' \tag{5}$$

H 可以表示成

$$H = \frac{p'^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x'^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 x_0^2 \tag{6}$$

比较式(1)和(6)，易见 H 和 H_0 的差别在于变量由 x 换成 x'，并添加了常数项$\left(-\frac{1}{2}m\omega^2 x_0^2\right)$. 由此可知

$$E_n = E_n^{(0)} - \frac{1}{2}m\omega^2 x_0^2 \tag{7}$$

$$\varphi_n(x) = \psi_n(x') = \psi_n(x - x_0) \tag{8}$$

如所周知，自由振子的能级为

$$E_n^{(0)} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \cdots \tag{9}$$

因此

$$\begin{aligned} E_n &= \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{1}{2}m\omega^2 x_0^2 \\ &= \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{q^2\mathscr{E}^2}{2m\omega^2} \end{aligned} \tag{10}$$

如引入坐标平移算符

$$D_x(x_0) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}x_0 p/\hbar} = \mathrm{e}^{-x_0\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}} \tag{11}$$

它对波函数的作用是

$$D_x(x_0)\psi(x) = \psi(x - x_0) \tag{11'}$$

则 H 和 H_0 的本征函数可用平移算符联系起来：

$$\boxed{\varphi_n(x)=\psi_n(x-x_0)=D_x(x_0)\psi_n(x)} \tag{12}$$

反之，

$$\psi_n(x)=\varphi_n(x+x_0)=D_x(-x_0)\varphi_n(x) \tag{12'}$$

解二 利用自由振子的升、降算符

$$a=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x+\frac{\mathrm{i}}{m\omega}p\right),\quad a^+=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x-\frac{\mathrm{i}}{m\omega}p\right) \tag{13}$$

将 H_0 及 H 表示成

$$H_0=\left(a^+a+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{14}$$

$$H=\left(a^+a+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega-q\mathscr{E}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a+a^+) \tag{15}$$

引入

$$x_0=q\mathscr{E}/m\omega^2 \tag{3}$$

则

$$\begin{aligned}H&=\hbar\omega\left[a^+a+\frac{1}{2}-x_0\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(a+a^+)\right]\\&=\hbar\omega\left[\left(a^+-x_0\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\right)\left(a-x_0\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\right)+\frac{1}{2}-\frac{m\omega x_0^2}{2\hbar}\right]\\&=\hbar\omega\left[(a^+-a_0)(a-a_0)+\frac{1}{2}\right]-\frac{1}{2}m\omega^2x_0^2\end{aligned} \tag{16}$$

其中

$$a_0=x_0\sqrt{m\omega/2\hbar} \tag{17}$$

比较式(14)、(16)，H 和 H_0 的差别在于 $a\to a-a_0$，$a^+\to a^+-a_0$，

以及添加了常数项$\left(-\frac{1}{2}m\omega^2x_0^2\right)$.

在题 3.1 中,从基本对易式

$$[a,a^+]=1 \tag{18}$$

出发,证明了能级公式(9)以及本征态之间的递推关系

$$a\psi_n=\sqrt{n}\,\psi_{n-1},\quad a^+\psi_n=\sqrt{n+1}\psi_{n+1} \tag{19}$$

并得出了基态波函数满足的方程

$$a\psi_0=0 \tag{20}$$

由于

$$[a-a_0,a^+-a_0]=[a,a^+]=1$$

所以用同样的逻辑推理也可得出 H 的本征值和本征函数的类似结论,只需在整个推导过程中用$(a-a_0)$代替 a,用(a^+-a_0)代替 a^+. H 的本征值显然就是式(10). 本征函数的递推关系及基态方程则是

$$(a-a_0)\varphi_n(x)=\sqrt{n}\,\varphi_{n-1}(x) \tag{21}$$

$$(a^+-a_0)\varphi_n(x)=\sqrt{n+1}\varphi_{n+1}(x)$$

$$(a-a_0)\varphi_0(x)=0 \tag{22}$$

$a\to(a-a_0)$(以及 $a^+\to a^+-a_0$)等价于 $x\to(x-x_0)$,因此将 $\psi_n(x)$ 中 x 换成$(x-x_0)$,即得

$$\varphi_n(x)=\psi_n(x-x_0)=D_x(x_0)\psi_n(x) \tag{12}$$

φ_n 和 φ_0 可以通过算符(a^+-a_0)联系起来:

$$\varphi_n(x)=\frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+-a_0)^n\varphi_0(x) \tag{23}$$

3.8 电荷为 q 的谐振子,$t<0$ 和 $t>\tau$ 时处于自由振动状态,

总能量算符为

$$H_0=\frac{1}{2m}p^2+\frac{1}{2}m\omega^2x^2 \tag{1}$$

能量本征态记为 ψ_n，能级 $E_n^{(0)}=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$. 当 $0\leqslant t\leqslant\tau$，外加均匀电场 $\mathscr{E}$，总能量算符变成

$$H=\frac{1}{2m}p^2+\frac{1}{2}m\omega^2x^2-q\mathscr{E}x \tag{2}$$

H 的本征态记为 φ_n，本征值为 E_n.

设 $t\leqslant 0$ 时该谐振子处于基态 ψ_0，求 $t>\tau$ 时的波函数 $\psi(x,t)$，以及 $\psi(x,t)$中各能量本征态 ψ_n 的成分.

解 $t>\tau$ 时，外电场已经消失，波函数满足 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=H_0\psi(x,t) \tag{3}$$

通解为

$$\psi(x,t)=\sum_n f_n\psi_n(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n^{(0)}(t-\tau)/\hbar} \tag{4}$$

其中 ψ_n 态成分为

$$|\langle\psi_n|\psi\rangle|^2=|f_n|^2 \tag{5}$$

各系数 f_n 取决于 $t=\tau$ 时的波函数

$$\psi(x,\tau)=\sum_n f_n\psi_n(x) \tag{6}$$

所以关键是求出 $\psi(x,\tau)$.

在 $0\leqslant t\leqslant\tau$，Schrödinger 方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=H\psi(x,t) \tag{7}$$

解为

$$\psi(x,t)=\sum_n C_n\varphi_n(x)e^{-iE_nt/\hbar} \tag{8}$$

其中 C_n 取决于初始波函数

$$\psi(x,0)=\psi_0(x)=\sum_n C_n\varphi_n(x) \tag{9}$$

在题 3.7 中已经证明

$$\psi_0(x)=\varphi_0(x+x_0)=D_x(-x_0)\varphi_0(x) \tag{10}$$

其中 $x_0=q\mathscr{E}/m\omega^2$. 如将位移算符 $D_x(-x_0)$表示成升降算符：

$$D_x(-x_0)=e^{ix_0p/\hbar}=e^{-\alpha_0(a^+-a)} \tag{11}$$

再利用 Glauber 公式

$$e^{A+B}=e^Ae^Be^{-\frac{1}{2}[A,B]}$$

即得

$$\begin{aligned}D_x(-x_0)&=e^{-\frac{1}{2}\alpha_0^2}e^{-\alpha_0a^+}e^{\alpha_0a}\\&=e^{-\frac{1}{2}\alpha_0^2}e^{-\alpha_0(a^+-\alpha_0)}e^{\alpha_0(a-\alpha_0)}\end{aligned} \tag{11'}$$

其中 $\alpha_0=x_0\sqrt{m\omega/2\hbar}$. 将式(11′)代入式(10)，得到

$$\psi_0(x)=e^{-\frac{1}{2}\alpha_0^2}e^{-\alpha_0(a^+-\alpha_0)}e^{\alpha_0(a-\alpha_0)}\varphi_0(x) \tag{12}$$

在题 3.7 中已经证明

$$(a-\alpha_0)\varphi_0=0 \tag{13}$$

$$(a^+-\alpha_0)^n\varphi_0=\sqrt{n!}\varphi_n \tag{14}$$

所以

$$e^{\alpha_0(a-\alpha_0)}\varphi_0=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha_0^n}{n!}(a-\alpha_0)^n\varphi_0=\varphi_0 \tag{12'}$$

$$\psi_0(x)=e^{-\frac{1}{2}\alpha_0^2}e^{-\alpha_0(a^+-\alpha_0)}\varphi_0$$

$$=e^{-\frac{1}{2}\alpha_0^2}\sum_n \frac{(-\alpha_0)^n}{n!}(a^+-\alpha_0)^n\varphi_n$$

$$=e^{-\frac{1}{2}\alpha_0^2}\sum_n \frac{(-\alpha_0)^n}{\sqrt{n!}}\varphi_n(x) \tag{15}$$

即 $\psi_0(x)$是以各 φ_n 为基矢组成的相干态波函数. 比较式(9)和(15),即得

$$C_n=\frac{(-\alpha_0)^n}{\sqrt{n!}}e^{-\frac{1}{2}\alpha_0^2} \tag{16}$$

将式(16)代入式(8),并利用题 3.7 求得的能级公式

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega-\frac{1}{2}m\omega^2x_0^2$$

即得

$$\psi(x,\tau)=e^{i\delta}e^{-\frac{1}{2}\alpha_0^2}\sum_n \frac{[-\alpha(\tau)]^n}{\sqrt{n!}}\varphi_n(x) \tag{17}$$

其中

$$\alpha(\tau)=\alpha_0e^{-i\omega\tau} \tag{18}$$

$$\delta=m\omega^2x_0^2\tau/2\,\hbar-\omega\tau/2 \tag{19}$$

$\psi(x,\tau)$也是各 φ_n 态组成的相干态波函数.

利用式(14),可以将式(17)表示成

$$\psi(x,\tau)=e^{i\delta}e^{-\frac{1}{2}\alpha_0^2}e^{-\alpha(\tau)(a^+-\alpha_0)}\varphi_0(x) \tag{20}$$

而由式(12′),则得

$$e^{-\frac{1}{2}\alpha_0^2}\varphi_0=e^{\alpha_0(a^+-\alpha_0)}\psi_0$$

代入式(20),即得

$$\psi(x,\tau)=e^{i\delta}e^{[\alpha_0-\alpha(\tau)](a^+-\alpha_0)}\psi_0$$

$$=e^{i\delta}e^{-\alpha_0^2+\alpha_0\alpha(\tau)}e^{[\alpha_0-\alpha(\tau)]a^{\dagger}}\psi_0 \tag{21}$$

为了将 $\psi(x,\tau)$表示成各 ψ_n 的线性叠加，可以利用公式

$$(a^{\dagger})^n\psi_0=\sqrt{n!}\psi_n \tag{22}$$

即得

$$\psi(x,\tau)=e^{i\delta}e^{\alpha_0\alpha(\tau)-\alpha_0^2}\sum_n\frac{[\alpha_0-\alpha(\tau)]^n}{\sqrt{n!}}\psi_n(x) \tag{23}$$

其中 ψ_n 态所占成分为

$$|\langle\psi_n|\psi(x,\tau)\rangle|^2=|e^{\alpha_0\alpha(\tau)-\alpha_0^2}|^2\frac{|\alpha_0-\alpha(\tau)|^{2n}}{n!}$$

$$=\frac{1}{n!}\left(2\alpha_0\sin\frac{\omega\tau}{2}\right)^{2n}e^{-\left(2\alpha_0\sin\frac{\omega\tau}{2}\right)^2} \tag{24}$$

容易验证

$$\sum_n|\langle\psi_n|\psi(x,\tau)\rangle|^2=1 \tag{25}$$

这是总概率守恒的具体体现.

如改变外电场作用时间 τ，则每当

$$\tau=k2\pi/\omega,\qquad k=1,2,3,\cdots$$

在 $\psi(x,\tau)$中，各激发态($n\geqslant1$)成分为 0，基态(ψ_0)成分为 1. 每当

$$\tau=(2k+1)\pi/\omega,\qquad k=0,1,2,\cdots$$

$\psi(x,\tau)$中基态成分取最小值 $e^{-4\alpha_0^2}$，ψ_n 态成分为

$$|f_n|^2=\frac{(4\alpha_0^2)^n}{n!}e^{-4\alpha_0^2}$$

3.9 二维各向同性谐振子，势能为

$$V=\frac{1}{2}\mu\omega^2(x^2+y^2)=\frac{1}{2}\mu\omega^2\rho^2$$

μ 为粒子质量.(a)在直角坐标系(x,y)中写出能级和能量本征函数,讨论本征态的宇称和简并度;(b)在平面极坐标系(ρ,φ)中求能级和能量本征函数.

解 (a)在直角坐标系中,能量算符可以写成

$$H=H_1+H_2 \tag{1}$$

$$\begin{aligned} H_1&=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2 \\ H_2&=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2y^2 \end{aligned} \tag{2}$$

显然 H、H_1、H_2 互相对易,而且都是守恒量. H_1 或 H_2 的本征值问题,即一维谐振子的能量本征值问题,结论是众所周知的:

$$\begin{aligned} &E_{n_1}=\left(n_1+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \qquad n_1=0,1,2,\cdots \\ &\psi_{n_1}(x)=H_{n_1}(\alpha x)\,\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2/2}, \\ &E_{n_2}=\left(n_2+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \qquad n_2=0,1,2,\cdots \\ &\psi_{n_2}(y)=H_{n_2}(\alpha y)\,\mathrm{e}^{-\alpha^2y^2/2}, \end{aligned} \tag{3}$$

其中 $H_n(\xi)$是 Hermite 多项式(n 次多项式),$\alpha=\sqrt{\mu\omega/\hbar}$.

H 的本征函数和本征值显然是

$$\psi_{n_1n_2}(x,y)=\psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y) \tag{4}$$

$$\boxed{\begin{aligned} &E=(n_1+n_2+1)\hbar\omega=(N+1)\hbar\omega=E_N \\ &N=n_1+n_2=0,1,2,\cdots \end{aligned}} \tag{5}$$

N 给定后,(n_1,n_2)显然有下列$(N+1)$种可能组合方式:

$$n_1=0 \qquad 1 \qquad 2 \quad \cdots N$$

$$n_2=N \quad N-1 \quad N-2\cdots 0$$

故能级 E_N 的简并度为$(N+1)$. 与 E_N 相应的$(N+1)$个本征态的宇称显然均为

$$(-1)^{n_1+n_2}=(-1)^N \tag{6}$$

基态$(n_1=n_2=0, N=0)$为偶宇称.

(b) 平面极坐标和直角坐标的关系为

$$\begin{cases} x=\rho\cos\varphi, \\ y=\rho\sin\varphi, \end{cases} \qquad \begin{cases} \rho=\sqrt{x^2+y^2} \\ \varphi=\arctan(y/x) \end{cases}$$

在极坐标系中,H 可以写成

$$H=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)+\frac{1}{2}\mu\omega^2\rho^2 \tag{7}$$

守恒量完全集可以选$\left(H, -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$,后者即三维问题中的轨道角动量 z 分量 l_z. $\left(H, -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$的共同本征函数可以表示成

$$\psi=R(\rho)\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}, \quad m=0, \pm1, \pm2, \cdots \tag{8}$$

当$(x, y)\to(-x, -y)$,ρ 不变,$\varphi\to\varphi+\pi$,而

$$\psi(\rho, \varphi+\pi)=R(\rho)\mathrm{e}^{\mathrm{i}m(\varphi+\pi)}=(-1)^m\psi(\rho, \varphi) \tag{9}$$

所以波函数的宇称为$(-1)^m$.

将式(8)代入能量本征方程

$$H\psi=E\psi$$

易得 $R(\rho)$满足的径向方程为

$$\frac{\mathrm{d}^2R}{\mathrm{d}\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}\rho}+\left(\frac{2\mu E}{\hbar^2}-a^4\rho^2-\frac{m^2}{\rho^2}\right)R=0 \tag{10}$$

仿照一维谐振子和氢原子问题，不难确定 $R(\rho)$ 的极限行为是

$$\rho\to 0,\qquad R(\rho)\to\rho^{|m|}$$

$$\rho\to\infty,\qquad R(\rho)\sim e^{-\alpha^2\rho^2/2}$$

因此可令

$$R(\rho)=\rho^{|m|}u(\rho)e^{-\alpha^2\rho^2/2} \tag{11}$$

即

$$\psi=\rho^{|m|}u(\rho)e^{-\alpha^2\rho^2/2}e^{im\varphi} \tag{12}$$

能谱、宇称、简并度等物理量应该和坐标系的选择无关，因此，在极坐标系中，能级仍应为 E_N，相应的本征函数的宇称仍应为 $(-1)^N$. 比较关于宇称的两种结果，可知

$$N-m=\text{偶数} \tag{13}$$

至于极坐标系中的能量本征函数，当然不一定简单地直接等于式(4)所表示的 $\psi_{n_1n_2}(x,y)$，但是一定可以表示成它们的线性叠加. 由式(3)和(4)可知，和能级 E_N 相应的能量本征函数的普遍形式是

$$(x,y\text{ 的 }N\text{ 次多项式})\times e^{-\alpha^2(x^2+y^2)/2}$$

而在式(12)中，

$$\rho^{|m|}e^{im\varphi}=\rho^{|m|}(\cos m\varphi+i\sin m\varphi)$$

$$=(x,y\text{ 的 }|m|\text{ 次多项式})$$

因此 $u(\rho)$ 必可表示成 (x,y) 的 $(N-|m|)$ 次多项式. 但是，只有 ρ 的偶次幂才能表示成 (x,y) 的多项式，ρ 的奇次幂则不能. 因此可以进一步断定，$u(\rho)$ 必为 ρ^2 的 n 次多项式，而

$$N-|m|=2n,\qquad n=0,1,2,\cdots \tag{14}$$

基于以上分析，令

$$\varepsilon=E/\hbar\omega,\qquad \xi=\alpha^2\rho^2$$

和式(11)一起代入式(10),得到 u 满足的方程是

$$\xi\frac{d^2u}{d\xi^2}+(|m|+1-\xi)\frac{du}{d\xi}-\frac{1}{2}(|m|+1-\varepsilon)u=0 \tag{15}$$

这正是合流超几何方程. 在 $\xi\to 0$ 处有限的解为

$$u=F\left(\frac{|m|+1-\varepsilon}{2},|m|+1,\xi\right) \tag{16}$$

$F(a,c,\xi)$为合流超几何级数,定义为

$$F(a,c,\xi)=1+\frac{a}{c}\xi+\frac{a(a+1)}{c(c+1)}\frac{\xi^2}{2!}+\cdots \tag{17}$$

当 $a=-n$,则 $F(a,c,\xi)$中断成 n 次多项式. 由于 $u(\rho)$必须是 ρ^2 的 n 次多项式,即 ξ 的 n 次多项式,因此

$$\frac{1}{2}(|m|+1-\varepsilon)=-n$$

$$\varepsilon=2n+|m|+1=N+1 \tag{18}$$

$$\boxed{E=(2n+|m|+1)\hbar\omega=(N+1)\hbar\omega} \tag{19}$$

本征函数[式(12)]现在可以写成

$$\psi_{nm}=(\rho,\varphi)=|\rho|^m F(-n,|m|+1,\alpha^2\rho^2)e^{-\alpha^2\rho^2/2}e^{im\varphi} \tag{20}$$

给定 N 后,$|m|$,n 的可能取值为

$$\boxed{\begin{array}{lll} N=\text{偶数}, & |m|=N,\ N-2,\ \cdots,\ 0 \\ & n\ =0,\quad 1,\quad \cdots,\ N/2 \\ N=\text{奇数}, & |m|=N,\ N-2,\ \cdots,\ 1 \\ & n\ =0,\quad 1,\quad \cdots,\ (N-1)/2 \end{array}} \tag{21}$$

注意,除 $|m|=0$ 外,对于任何 $|m|\geqslant 1$,均有两个相应的 m 值($m=$

$|m|,-|m|$)，因此，无论 N 是偶数还是奇数，能级 E_N 的简并度都是$(N+1)$. 这个结论在前面早已指出过了.

3.10 质量 μ，电荷 q，自旋为 0 的非相对论性粒子，在均匀磁场 $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$ 中运动，求能量本征值.

解 以磁场 $\boldsymbol{B}$ 的方向为 z 轴，并取

$$\boldsymbol{A}=\frac{1}{2}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r}=\left(-\frac{B}{2}y,\frac{B}{2}x,0\right) \tag{1}$$

Hamilton 算符为

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

其中

$$\boldsymbol{v}=\frac{1}{\mu}\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right) \tag{3}$$

是速度算符. 容易求出 $\boldsymbol{v}$ 的各分量间的对易式为

$$\begin{aligned}[v_x,v_y]&=-\frac{q}{\mu^2c}([p_x,A_y]+[A_x,p_y])\\&=\mathrm{i}\frac{\hbar q}{\mu^2c}\left(\frac{\partial A_y}{\partial x}-\frac{\partial A_x}{\partial y}\right)=\mathrm{i}\frac{\hbar qB}{\mu^2c}\end{aligned} \tag{4}$$

$$[v_x,v_z]=0$$

$$[v_y,v_z]=0$$

如 $q>0$，令

$$Q=\left(\frac{\mu^2c}{\hbar|q|B}\right)^{\frac{1}{2}}v_x,\qquad P=\left(\frac{\mu^2c}{\hbar|q|B}\right)^{\frac{1}{2}}v_y \tag{5}$$

(如 $q<0$，则 Q、P 的定义互换.)显然就有关系

$$[Q,P]=\mathrm{i} \tag{6}$$

而 Hamilton 算符则可以写成

$$H=\frac{\hbar|q|B}{2\mu c}(Q^2+P^2)+\frac{1}{2\mu}p_z^2$$

$$=\frac{1}{2}\hbar\omega(Q^2+P^2)+\frac{1}{2\mu}p_z^2 \tag{7}$$

其中 $\omega=|q|B/\mu c$,$\omega/2$ 即经典 Larmor 频率. p_z(即 μv_z)和 Q,P 对易. 式(7)中第一项以及对易式(6)和一维谐振子完全类似(参看题 3.1),其本征值为

$$\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\quad n=0,1,2,\cdots \tag{8}$$

p_z 的本征值则可以连续变化,$-\infty<p_z<\infty$. 因此,总能量本征值为

$$\boxed{\begin{aligned}&E=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega+\frac{1}{2\mu}p_z^2\\&n=0,1,2,\cdots,\quad -\infty<p_z<\infty\\&\omega=|q|B/\mu c\end{aligned}} \tag{9}$$

3.11 用柱坐标系(ρ,φ,z)具体求解上题.

解 柱坐标系中变量 ρ、φ 的定义和平面极坐标系相同,z 的定义和直角坐标系相同. Laplace 算符的表示式为

$$\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}=\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2} \tag{1}$$

Hamilton 算符为

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

$$=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}+\frac{q^2}{2\mu c^2}\boldsymbol{A}^2-\frac{q}{2\mu c}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}) \tag{2}$$

取

$$\boldsymbol{A}=\frac{1}{2}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r}$$

$$\left(A_x=-\frac{B}{2}y,\quad A_y=\frac{B}{2}x,\quad A_z=0\right) \tag{3}$$

则

$$\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}=2\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}=B(xp_y-yp_x)=Bl_z \tag{4}$$

$$A^2=\frac{1}{4}B^2(x^2+y^2) \tag{5}$$

式(2)可以写成

$$\boxed{\begin{aligned}H&=\frac{1}{2\mu}(p_x^2+p_y^2)+\frac{q^2B^2}{8\mu c^2}(x^2+y^2)-\frac{qB}{2\mu c}l_z+\frac{p_z^2}{2\mu}\\&=H_0-\omega_L l_z+\frac{1}{2\mu}p_z^2\end{aligned}} \tag{6}$$

其中

$$\omega_L=qB/2\mu c,\qquad (\text{Larmor 频率}) \tag{7}$$

$$l_z=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$p_z=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

$$\begin{aligned}H_0&=\frac{1}{2\mu}(p_x^2+p_y^2)+\frac{q^2B^2}{8\mu c^2}(x^2+y^2)\\&=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)+\frac{1}{2}\mu\omega_L^2\rho^2\end{aligned} \tag{8}$$

注意 H_0 即二维各向同性谐振子的能量算符(见题 3.9),H_0、l_z、p_z 互相对易. 利用题 3.9 结果,即可写出 H 的本征函数和本征值:

$$\psi_{nmk}=\rho^{|m|}F(-n,|m|+1,\alpha^2\rho^2)\mathrm{e}^{-\alpha^2\rho^2/2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} \tag{9}$$

$$\boxed{\begin{aligned} E_{nmk} &= (2n+1+|m|)\hbar|\omega_L| - m\hbar\omega_L + \hbar^2k^2/2\mu \\ &= (2n+1+|m|\mp m)\frac{\hbar B|q|}{2\mu c} + \frac{\hbar^2k^2}{2\mu} \end{aligned}} \tag{10}$$

其中

$$n=0,1,2,\cdots,\quad m=0,\pm1,\pm2,\cdots,\quad -\infty<k<\infty$$

$$\alpha^2=\mu|\omega_L|/\hbar=|q|B/2\hbar c$$

式(9)中 e^{ikz} 是 p_z 的本征函数($p_z=\hbar k$),$e^{im\varphi}$ 是 l_z 的本征函数($l_z=m\hbar$). 式(10)第一项中,$q>0$ 时取"$-$"号,$q<0$ 时取"$+$"号. 式(9)和(10)称为 Laudau 波函数和 Laudau 能级. 本题中 $|\omega_L|$ 相当于上题中 $\omega/2$,本题中 $(2n+|m|\mp m)$ 相当于上题中 $2n$.

3.12 质量 μ、电荷 q、固有频率 ω_0 的三维各向同性谐振子置于均匀外磁场 $\boldsymbol{B}$ 中,求能级公式,并对最低 4 个能级进行分析讨论.

解 和前两题相比,本题 Hamilton 量中应该再添加一项谐振子势能 $\frac{1}{2}\mu\omega_0^2(x^2+y^2+z^2)$,因此

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2\mu}\boldsymbol{p}^2+\frac{1}{2}\mu\omega_0^2(x^2+y^2+z^2) \\ &\quad +\frac{q^2B^2}{8\mu c^2}(x^2+y^2)-\frac{qB}{2\mu c}l_z \\ &= H_1+H_2-\omega_L l_z \end{aligned} \tag{1}$$

其中

$$\begin{aligned} H_1 &= \frac{1}{2\mu}p_z^2+\frac{1}{2}\mu\omega_0^2z^2 \\ H_2 &= \frac{1}{2\mu}(p_x^2+p_y^2)+\frac{1}{2}\mu(\omega_0^2+\omega_L^2)(x^2+y^2) \\ \omega_L &= qB/2\mu c \end{aligned} \tag{2}$$

H_1、H_2、l_z 是互相对易的守恒量，可以选为守恒量完全集. H_1 相当于一维谐振子的能量算符，其本征值为

$$E_{n_1}=\left(n_1+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0, \qquad n_1=0,1,2,\cdots \tag{3}$$

H_2 相当于二维各向同性谐振子的总能量算符，其本征值为(见题 3.9)

$$\begin{cases} E_{n_2m}=(2n_2+1+|m|)\hbar\omega, \\ n_2=0,1,2,\cdots, \qquad m=0,\pm1,\pm2,\cdots \end{cases} \tag{4}$$

其中

$$\omega=\sqrt{\omega_0^2+\omega_L^2} \tag{5}$$

l_z 的本征值为 $m\hbar$. 因此，本题能级为

$$\boxed{E_{n_1n_2m}=\left(n_1+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0+(2n_2+1+|m|)\hbar\omega-m\hbar\omega_L} \tag{6}$$

注意：ω_L 可正可负，视电荷 q 之正负而定；磁量子数 m 也可正可负. 因此 q 之正、负对总的能谱并无影响. 为确切起见，以下只讨论 $q>0(\omega_L>0)$的情形.

三种频率 ω_0、ω_L、ω 有如下关系：

$$0<(\omega-\omega_L)<\omega_0 \tag{7}$$

能级和各量子数的依赖关系为(按能级变化量的大小次序排列)

$m\geqslant0$， m 增加 1， E 增加 $\hbar(\omega-\omega_L)$

n_1 增加 1， E 增加 $\hbar\omega_0$

$m\leqslant0$， $|m|$增加 1， E 增加 $\hbar(\omega+\omega_L)$

n_2 增加 1， E 增加 $2\hbar\omega$

最后这种变化 E 的增量最大，和最低 4 个能级没有关系，即最低 4

个能级均相当于 $n_2=0$.

基态 E_0，显然 n_1、n_2、$|m|$ 均取最小值，

$$E_0=E_{000}=\frac{1}{2}\hbar\omega_0+\hbar\omega \tag{8}$$

第一激发态 E_1，$n_1=n_2=0$，$m=1$，

$$E_1=E_{001}=\frac{1}{2}\hbar\omega_0+2\hbar\omega-\hbar\omega_L=E_0+\hbar(\omega-\omega_L) \tag{9}$$

以下分别几种情况，讨论能级 E_2、E_3 的量子数取值.

1° $\omega_L/\omega_0<1/\sqrt{8}$，即 $\omega_0<(\omega+\omega_L)<2(\omega-\omega_L)$

$$E_2=E_{100}=\frac{3}{2}\hbar\omega_0+\hbar\omega=E_0+\hbar\omega_0$$

$$E_3=E_{00,-1}=\frac{1}{2}\hbar\omega_0+2\hbar\omega+\hbar\omega_L=E_0+\hbar(\omega+\omega_L)$$

特别是，如果 $\omega_L\ll\omega_0$，则 $\omega\sim\omega_0$，这时

$$E_1\sim\frac{5}{2}\hbar\omega_0-\hbar\omega_L,\quad E_2\sim\frac{5}{2}\hbar\omega_0,\quad E_3\sim\frac{5}{2}\hbar\omega_0+\hbar\omega_L$$

这正是三维各向同性谐振子第一激发能级(三重简并)在弱磁场中的分裂(简单 Zeeman 效应). 这个结果通常用微扰论得出.

2° $\omega_L/\omega_0=1/\sqrt{8}$，这时

$$\omega+\omega_L=2(\omega-\omega_L),\qquad \omega=3\omega_L$$

$$E_2=E_{100}=\left(\frac{3}{2}+\frac{3}{\sqrt{8}}\right)\hbar\omega_0=E_0+\hbar\omega_0$$

$$E_3=E_{00-1}=E_{002}=E_0+\sqrt{2}\,\hbar\omega_0$$

3° $\frac{1}{\sqrt{8}}<\frac{\omega_L}{\omega_0}<\frac{3}{4}$，即 $\omega_0<2(\omega-\omega_L)<\omega+\omega_L$

$$E_2=E_{100}=E_0+\hbar\omega_0$$

$$E_3=E_{002}=E_0+2\hbar(\omega-\omega_L)$$

4° $\omega_L/\omega_0=3/4$，这时

$$\omega=5\omega_0/4,\quad \omega_0=2(\omega-\omega_L),\quad \omega+\omega_L=2\omega_0$$

$$E_2=E_{100}=E_{002}=\frac{11}{4}\hbar\omega_0=E_0+\hbar\omega_0$$

$$E_3=E_{101}=E_{003}=\frac{13}{4}\hbar\omega_0=E_0+\frac{3}{2}\hbar\omega_0$$

5° $\frac{3}{4}<\frac{\omega_L}{\omega_0}<\frac{4}{3}$，即 $2(\omega-\omega_L)<\omega_0<3(\omega-\omega_L)$

$$E_2=E_{002}=E_0+2\hbar(\omega-\omega_L)$$

$$E_3=E_{100}=E_0+\hbar\omega_0$$

6° $\omega_L/\omega_0=4/3$，这时

$$\omega=5\omega_0/3,\qquad 3(\omega-\omega_L)=\omega_0$$

$$E_2=E_{002}=\frac{17}{6}\hbar\omega_0=E_0+2\hbar(\omega-\omega_L)=E_0+\frac{2}{3}\hbar\omega_0$$

$$E_3=E_{100}=E_{003}=\frac{19}{6}\hbar\omega_0=E_0+\hbar\omega_0$$

7° $\omega_L/\omega_0>4/3$，即 $\omega_0>3(\omega-\omega_L)$

$$E_2=E_{002}=E_0+2\hbar(\omega-\omega_L)$$

$$E_3=E_{003}=E_0+3\hbar(\omega-\omega_L)$$

3.13 质量 μ、电荷 q 的粒子在方向互相垂直的均匀电场 $\mathscr{E}$ 和均匀磁场 $\boldsymbol{B}$ 中运动，求能级和能量本征函数.

解 以电场方向为 x 轴，磁场方向为 z 轴，则

$$\mathscr{E}=(\mathscr{E},0,0),\quad \boldsymbol{B}=(0,0,B)\qquad(1)$$

取电磁场的标势和矢势为

$$\phi=-\mathscr{E}x,\quad \boldsymbol{A}=(0,Bx,0) \tag{2}$$

满足关系

$$\mathscr{E}=-\nabla\phi,\quad \boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$$

粒子的 Hamilton 量为

$$H=\frac{1}{2\mu}\left[p_x^2+\left(p_y-\frac{qB}{e}x\right)^2+p_z^2\right]-q\mathscr{E}x \tag{3}$$

取守恒量完全集为(H,p_y,p_z),它们的共同本征函数可以写成

$$\psi(x,y,z)=\psi(x)e^{i(p_y y+p_z z)/\hbar} \tag{4}$$

其中 p_y 和 p_z 为本征值,可取任意实数.

$\psi(x,y,z)$满足能量本征方程

$$H\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z)$$

因此 $\psi(x)$满足方程

$$\frac{1}{2\mu}\left[p_x^2+\left(p_y-\frac{qB}{c}x\right)^2+p_z^2\right]\psi-q\mathscr{E}x\psi=E\psi \tag{5}$$

亦即,对于 $\psi(x)$来说,H 和下式等价:

$$\begin{aligned}H\Rightarrow\ & -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{q^2B^2}{2\mu c^2}x^2\\ & -\left(q\mathscr{E}+\frac{qB}{\mu c}p_y\right)x+\frac{1}{2\mu}(p_y^2+p_z^2)\\ =\ & -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{q^2B^2}{2\mu c^2}(x-x_0)^2\\ & -\frac{q^2B^2}{2\mu c^2}x_0^2+\frac{1}{2\mu}(p_y^2+p_z^2)\end{aligned} \tag{6}$$

其中

$$x_0=\frac{\mu c^2}{q^2B^2}\left(q\mathscr{E}+\frac{qB}{\mu c}p_y\right)=\frac{\mu c}{qB}\left(\frac{c\mathscr{E}}{B}+\frac{p_y}{\mu}\right) \tag{7}$$

式(6)相当于一维谐振子能量算符

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2(x-x_0)^2,\quad \omega=|q|B/\mu c$$

再加上两项常数.因此,本题能级为

$$\begin{aligned}E&=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega-\frac{q^2B^2}{2\mu c^2}x_0^2+\frac{1}{2\mu}(p_y^2+p_z^2)\\&=\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar B|q|}{\mu c}-\frac{c^2\mathscr{E}^2\mu}{2B^2}-\frac{c\mathscr{E}}{B}p_y+\frac{1}{2\mu}p_z^2\end{aligned} \tag{8}$$

其中 p_y、p_z 为任意实数,$n=0,1,2,\cdots$.

式(4)中 $\psi(x)$为以$(x-x_0)$为变量的一维谐振子能量本征函数,即

$$\psi(x)=\psi_n(x-x_0)=H_n(\xi)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2} \tag{9}$$

$H_n(\xi)$是 Hermite 多项式,$\xi=\left(\frac{|q|B}{\hbar c}\right)^{\frac{1}{2}}(x-x_0)$.

3.14 束缚在晶格中的原子核发生无反冲 γ 辐射,是产生 Mössbauer 效应的必要条件.晶格中原子核所受作用势可以近似为谐振子势

$$V(x)=\frac{1}{2}M\omega^2x^2$$

M 为原子核的质量,x 为原子核质心的坐标,ω 为振动频率.设开始时原子核的质心运动(谐振动)处于基态,$t=0$ 时,由于核内能级跃迁,沿 x 轴方向发射出一个光子,能量 E_γ,动量 E_γ/c.由于 γ 辐射是突然发生的,可以认为原子核的质心运动受到的唯一影响是动量本征值由 p 变成$(p-E_\gamma/c)$.求发射光子后原子核质心运动仍然留在基态的概率.例如,对于^{57}Fe 核,$E_\gamma=18$ keV,$\omega=10^{12}$

Hz/s，求上述“无反冲辐射”(即没有能量传给原子)概率之值.

解 由于受到谐振子势场的作用，核的质心运动为谐振动，$t<0$时处于基态 $\psi_0(x)$，如将 $\psi_0(x)$按动量本征函数展开：

$$\psi_0(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p)e^{ipx/\hbar}dp \ , \tag{1}$$

由于发射 γ 光子，动量发生改变(总动量守恒!)由 p 变成 $p-p_0$，($p_0=E_\gamma/c$)亦即 p 表象中的波函数 $\varphi(p)$发生下列变化：

$$\varphi(p) \to \varphi(p+p_0) \tag{2}$$

因此发生 γ 辐射后，核的质心运动波函数为

$$\begin{aligned}\psi(x) &= (2\pi\hbar)^{-1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p+p_0)e^{ipx/\hbar}dp \\ &= (2\pi\hbar)^{-1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p')e^{i(p'-p_0)x/\hbar}dp' \\ &= \psi_0(x)e^{-ip_0x/\hbar}\end{aligned} \tag{3}$$

其中指数因子表示核的质心动量减少 p_0.

发射光子后，核的质心振动仍留在基态的概率为

$$P = |\langle\varphi_0|\psi\rangle|^2 = \left|\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_0^2(x)e^{-ip_0x/\hbar}dx\right|^2 \tag{4}$$

利用基态波函数 ψ_0 的具体函数形式

$$\psi_0(x)=\frac{\sqrt{\alpha}}{\pi^{1/4}}e^{-\alpha^2x^2/2}, \quad \alpha=\sqrt{M\omega/\hbar} \tag{5}$$

容易算出

$$\begin{aligned}\langle\psi_0|\psi\rangle &= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\alpha^2x^2-ip_0x/\hbar}dx \\ &= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\cos\left(\frac{p_0x}{\hbar}\right)e^{-\alpha^2x^2}dx \\ &= e^{-p_0^2/4\hbar^2\alpha^2} = e^{-E_\gamma^2/4\hbar\omega Mc^2}\end{aligned} \tag{6}$$

代入式(4),即得所求概率,为

$$P=|\langle\psi_0|\psi\rangle|^2=e^{-E_\gamma^2/2\hbar\omega Mc^2} \tag{7}$$

具体数值如下:

^{57}Fe 核,$Mc^2\approx57m_pc^2\approx57\times938\ \text{MeV}=5.35\times10^{10}\ \text{eV}$

$$E_\gamma=18\ \text{keV}=1.8\times10^4\ \text{eV}$$

$$\hbar\omega=\hbar c\cdot\frac{\omega}{c}\approx1.97\times10^{-5}\text{eV}\cdot\text{cm}\times\frac{2\pi\times10^{12}}{3\times10^{10}}\text{cm}^{-1}$$

$$=4.13\times10^{-3}\text{eV}$$

$$P=\exp\left[-\frac{(1.8\times10^4)^2}{2\times4.13\times10^{-3}\times5.35\times10^{10}}\right]$$

$$=e^{-0.733}=0.48$$

3.15 同上题,计算 γ 辐射后核的质心振动处于各能量本征态的概率.

解 上题已经求出,γ 辐射后核的质心运动波函数为

$$\psi(x)=e^{-ip_0x/\hbar}\psi_0(x),\quad p_0=E_\gamma/c \tag{1}$$

则处于第 n 个振动激发态 $\psi_n(x)$的概率为

$$P_n=|\langle\psi_n|\psi\rangle|^2=|\langle\psi_n|e^{-ip_0x/\hbar}\psi_0\rangle|^2 \tag{2}$$

令 $\lambda=-p_0/\hbar$,下面计算$\langle\psi_n|e^{i\lambda x}\psi_0\rangle$,式中 $e^{i\lambda x}$可以视为算符,将它用升、降算符表示,有下列关系:

$$i\lambda x=aa^+-a^*a,\qquad a=i\lambda\sqrt{\hbar/2M\omega} \tag{3}$$

$$e^{i\lambda x}=e^{aa^+-a^*a}=e^{aa^+}e^{-a^*a}e^{-\frac{1}{2}|a|^2} \tag{4}$$

$$e^{i\lambda x}|\psi_0\rangle=e^{-\frac{1}{2}|a|^2}e^{aa^+}e^{-a^*a}|\psi_0\rangle=|\psi_a\rangle$$

$$=e^{-\frac{1}{2}|a|^2}\sum_n\frac{a^n}{\sqrt{n!}}|\psi_n\rangle \tag{5}$$

(参看下册题 4.3)其中 ψ_α 为谐振子相干态.利用式(5),即得

$$\langle\psi_n|e^{i\lambda x}\psi_0\rangle=\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \tag{6}$$

$$P_n=\frac{|\alpha|^{2n}}{n!}e^{-|\alpha|^2}=\frac{(\lambda^2\hbar/2M\omega)^n}{n!}e^{-\lambda^2\hbar/2M\omega}$$

$$=\frac{(E_\gamma^2/2\hbar\omega Mc^2)^n}{n!}e^{-E_\gamma^2/2\hbar\omega Mc^2} \tag{7}$$

容易验证 $\sum_n P_n=1$.

对于上题^{57}Fe 核的实例,前几个概率值为

$$P_0=0.48,\quad P_1=0.35,\quad P_2=0.13$$

第四章　力学量的算符表示

4.1　设 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$、$\boldsymbol{C}$ 为矢量算符，其直角坐标系分量为

$$\boldsymbol{A}=(A_x,A_y,A_z)=(A_1,A_2,A_3)$$

等等. $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$ 的标积和矢积定义为

$$\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}=\sum_\alpha A_\alpha B_\alpha=A_xB_x+A_yB_y+A_zB_z \tag{1}$$

$$(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})_x=A_yB_z-A_zB_y \tag{2}$$

等等. 试验证下列各式：

$$\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})=(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\cdot\boldsymbol{C} \tag{3}$$

$$[\boldsymbol{A}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})]_\alpha=\boldsymbol{A}\cdot(B_\alpha\boldsymbol{C})-(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})C_\alpha \tag{4}$$

$$[(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\times\boldsymbol{C}]_\alpha=\boldsymbol{A}\cdot(B_\alpha\boldsymbol{C})-A_\alpha(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{C}) \tag{5}$$

证　式(3)左端写成分量形式，为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})&=A_x(B_yC_z-B_zC_y)+A_y(B_zC_x-B_xC_z)\\&\quad+A_z(B_xC_y-B_yC_x)\\&=\sum_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\alpha B_\beta C_\gamma\end{aligned}$$

其中 $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$ 为 Levi-Civita 符号，即

$$\begin{aligned}&\varepsilon_{123}=\varepsilon_{231}=\varepsilon_{312}=1\\&\varepsilon_{132}=\varepsilon_{213}=\varepsilon_{321}=-1\\&\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}=0,\qquad \alpha、\beta、\gamma\text{ 中有两个或三个相同}\end{aligned} \tag{6}$$

式(3)右端也可化成

$$(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\cdot\boldsymbol{C}=\sum_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\alpha B_\beta C_\gamma$$

故得

$$\boxed{\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})=(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\cdot\boldsymbol{C}=\sum_{\alpha\beta\gamma}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\alpha B_\beta C_\gamma}\qquad(7)$$

验证式(4),以第一分量为例,左端为

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{A}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})]_1&=A_2(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})_3-A_3(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})_2\\&=A_2(B_1C_2-B_2C_1)\\&\quad-A_3(B_3C_1-B_1C_3)\\&=A_2B_1C_2+A_3B_1C_3\\&\quad-(A_2B_2+A_3B_3)C_1\end{aligned}\qquad(8)$$

而式(4)右端第一分量为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}\cdot(B_1\boldsymbol{C})-(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})C_1&=A_1B_1C_1+A_2B_1C_2+A_3B_1C_3\\&\quad-(A_1B_1+A_2B_2+A_3B_3)C_1\\&=A_2B_1C_2+A_3B_1C_3\\&\quad-(A_2B_2+A_3B_3)C_1\end{aligned}$$

和式(8)相等,故式(4)成立.

同样可以验证式(5).式(4)和(5)有时写成下列矢量形式:

$$\boldsymbol{A}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})=\overbrace{\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{BC})}-(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})\boldsymbol{C},\qquad(4')$$

$$(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\times\boldsymbol{C}=\overbrace{\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{BC})}-\boldsymbol{A}(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{C}).\qquad(5')$$

$\boldsymbol{A}$与$\boldsymbol{C}$间联线表示$\boldsymbol{A}$和$\boldsymbol{C}$取标积.(但是$\boldsymbol{B}$的位置在$\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{C}$之间.)如果$\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$、$\boldsymbol{C}$互相对易,上二式就可写成

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})&=(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{C})\boldsymbol{B}-(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})\boldsymbol{C}\\(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\times\boldsymbol{C}&=(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{C})\boldsymbol{B}-\boldsymbol{A}(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{C})\end{aligned}$$

这正是经典物理中的三重矢积公式.

4.2 设$\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$为矢量算符,F为标量算符,证明

$$[F,\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}]=[F,\boldsymbol{A}]\cdot\boldsymbol{B}+\boldsymbol{A}\cdot[F,\boldsymbol{B}]\qquad(1)$$

$$[F,\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}]=[F,\boldsymbol{A}]\times\boldsymbol{B}+\boldsymbol{A}\times[F,\boldsymbol{B}]\qquad(2)$$

证 式(1)右端等于

$$[FA-AF]\cdot B+A\cdot(FB-BF)=FA\cdot B-A\cdot BF$$
$$=[F,A\cdot B]$$

这正是式(1)左端,故式(1)成立.

同样可以证明式(2).

4.3 以 r、$\hat{p}$ 表示位置和动量算符,$l=r\times\hat{p}$ 为轨道角动量算符,$\hat{F}=F(r,\hat{p})$ 为由 r、$\hat{p}$ 构成的标量算符.证明

$$[\hat{F},l]=\mathrm{i}\hbar r\times\frac{\partial\hat{F}}{\partial r}-i\hbar\frac{\partial\hat{F}}{\partial p}\times\hat{F} \tag{1}$$

证 利用对易式

$$[r\hat{F}]=\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial\hat{F}}{\partial p_x},\frac{\partial\hat{F}}{\partial p_y},\frac{\partial\hat{F}}{\partial p_z}\right)\equiv\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\hat{F}}{\partial p} \tag{2}$$

$$[\hat{p},\hat{F}]=-\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial\hat{F}}{\partial x},\frac{\partial\hat{F}}{\partial y},\frac{\partial\hat{F}}{\partial z}\right)\equiv-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\hat{F}}{\partial r} \tag{3}$$

以及题 4.2 式(2),即得

$$[F,l]=[F,r\times p]=[F,r]\times p+r\times[F,p]$$
$$=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial F}{\partial p}\times p+\mathrm{i}\hbar r\times\frac{\partial F}{\partial r}$$

此即式(1).

4.4 计算$\left[p,\frac{1}{r}\right]$、$[p^2,r^2]$、$\left[p^2,\frac{1}{r}\right]$、$\left[p^2,\frac{r}{r}\right]$.

解 利用对易式

$$[p,F(r)]=-\mathrm{i}\hbar\nabla F \tag{1}$$

即得

$$\left[p,\frac{1}{r}\right]=-\mathrm{i}\hbar\left(\nabla\frac{1}{r}\right)=\mathrm{i}\hbar\frac{r}{r^3} \tag{2}$$

再利用公式(见题 4.2)

$$[\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B},F]=[A,F]\cdot\boldsymbol{B}+\boldsymbol{A}\cdot[\boldsymbol{B},F]$$

即得

$$\begin{aligned}\left[p^2,\frac{1}{r}\right]&=\left[\boldsymbol{p},\frac{1}{r}\right]\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\cdot\left[\boldsymbol{p},\frac{1}{r}\right]\\&=\mathrm{i}\hbar\left(\frac{1}{r^3}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}\right)\\&=2\mathrm{i}\hbar\frac{1}{r^3}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}+\hbar^2\left(\nabla\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}\right)\end{aligned}$$

但因

$$\begin{aligned}\nabla\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}&=\frac{1}{r^3}\nabla\cdot\boldsymbol{r}+\boldsymbol{r}\cdot\left(\nabla\frac{1}{r^3}\right)\\&=\frac{3}{r^3}-\boldsymbol{r}\cdot\frac{3\boldsymbol{r}}{r^5}=0\end{aligned}$$

所以

$$\left[p^2,\frac{1}{r}\right]=2\mathrm{i}\hbar\frac{1}{r^3}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}=2\hbar^2\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\tag{3}$$

其次,利用式(1)可得

$$[\boldsymbol{p},r^2]=-\mathrm{i}\hbar\nabla(r^2)=-2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}\tag{4}$$

$$\begin{aligned}[p^2,r^2]&=[\boldsymbol{p},r^2]\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\cdot[\boldsymbol{p},r^2]\\&=-2\mathrm{i}\hbar(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})\\&=-4\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}-2\hbar^2\nabla\cdot\boldsymbol{r}\\&=-4\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}-6\hbar^2\\&=-4\hbar^2r\frac{\partial}{\partial r}-6\hbar^2\end{aligned}\tag{5}$$

最后,利用对易式

$$[p^2,\boldsymbol{r}]=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial p^2}{\partial\boldsymbol{p}}=-2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}\tag{6}$$

以及式(3),即得

$$\left[p^2,\frac{r}{r}\right]=[p^2,r]\frac{1}{r}+r\left[p^2,\frac{1}{r}\right]$$

$$=-2\mathrm{i}\hbar p\frac{1}{r}+2\mathrm{i}\hbar r\frac{1}{r^3}(r\cdot p)$$

$$=-2\mathrm{i}\hbar\left[\frac{1}{r}p-\mathrm{i}\hbar\left(\nabla\frac{1}{r}\right)\right]+2\mathrm{i}\hbar\frac{r}{r^3}(r\cdot p)$$

$$=2\hbar^2\frac{r}{r^3}+2\mathrm{i}\hbar\left[\frac{r}{r^3}(r\cdot p)-\frac{1}{r}p\right]$$

$$=2\hbar^2\left(\frac{r}{r^3}+r\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{1}{r}\nabla\right) \tag{7}$$

4.5 定义径向动量算符

$$\hat{p}_r=\frac{1}{2}\left(\frac{r}{r}\cdot p+p\cdot\frac{r}{r}\right) \tag{1}$$

试求其球坐标表达式,并求 $\hat{p}_r^2$ 及$[r,\hat{p}_r]$.

解 在经典力学中,径向动量就是动量的径向投影,定义为

$$p_r=\frac{r}{r}\cdot p\text{ 或 }p\cdot\frac{r}{r} \tag{2}$$

过渡到量子力学,动量算符为

$$\hat{p}=-\mathrm{i}\hbar\nabla \tag{3}$$

由于 $\hat{p}$ 和 r/r 不对易,为了保证径向动量算符是 Hermite 算符,应取

$$\hat{p}_r=\frac{1}{2}\left(\frac{r}{r}\cdot p+p\cdot\frac{r}{r}\right)$$

此即式(1). 利用式(3),易得

$$\hat{p}_r=\frac{r}{r}\cdot p-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\left(\nabla\cdot\frac{r}{r}\right)$$

$$=-\mathrm{i}\hbar\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\cdot\nabla-\frac{\mathrm{i}\hbar}{r}$$

$$=-\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right) \tag{4}$$

此即 $\hat{p}_r$ 的球坐标表达式.

利用式(4),容易算出

$$\hat{p}_r^2=-\hbar^2\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)^2$$

$$=-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)$$

$$=-\hbar^2\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} \tag{5}$$

$$[r,\hat{p}_r]=-\mathrm{i}\hbar\left[r,\frac{\partial}{\partial r}\right]=\mathrm{i}\hbar \tag{6}$$

4.6 证明 $\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}+\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}$

$$\mathrm{i}\hbar(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}-\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=[\boldsymbol{l}^2,\boldsymbol{p}]$$

证 $(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}+\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})_x=p_yl_z-p_zl_y+l_yp_z-l_zp_y$

$$=[p_y,l_z]+[l_y,p_z]$$

利用基本对易式

$$[l_\alpha,p_\beta]=[p_\alpha,l_\beta]=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}p_\gamma$$

即得

$$(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}+\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})_x=2\mathrm{i}\hbar p_x$$

因此

$$\boxed{\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}+\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}} \tag{1}$$

其次,由于 p_x 和 l_x 对易,所以

$$
\begin{aligned}
[l^2, p_x] &= [l_x^2, p_x] + [l_y^2, p_x] \\
&= [l_x, p_x] l_x + l_x [l_x, p_x] \\
&\quad + [l_y, p_x] l_y + l_y [l_y, p_x] \\
&= \mathrm{i}\hbar (p_y l_z + l_z p_y - p_z l_y - l_y p_z) \\
&= \mathrm{i}\hbar (\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{l} - \boldsymbol{l} \times \boldsymbol{p})_x
\end{aligned}
$$

因此

$$
\mathrm{i}\hbar (\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{l} - \boldsymbol{l} \times \boldsymbol{p}) = [l^2, \boldsymbol{p}] \tag{2}
$$

4.7 证明

$$
\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{l} = \boldsymbol{l} \cdot \boldsymbol{r} = 0, \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{l} = \boldsymbol{l} \cdot \boldsymbol{p} = 0
$$

计算 $(\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{l})$ 或$(\boldsymbol{l} \times \boldsymbol{p})$ 和 $\boldsymbol{p}$ 及 $\boldsymbol{l}$ 的标积.

证 利用题 4.1 证明过的三重积公式

$$
\boldsymbol{A} \cdot (\boldsymbol{B} \times \boldsymbol{C}) = (\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{B}) \cdot \boldsymbol{C} \tag{1}
$$

以及

$$
\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{r} = 0, \ \boldsymbol{p} \times \boldsymbol{p} = 0 \tag{2}
$$

$$
\boldsymbol{l} \times \boldsymbol{l} = \mathrm{i}\hbar \boldsymbol{l} \tag{3}
$$

等基本对易式,即得

$$
\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{l} = \boldsymbol{r} \cdot (\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}) = (\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{r}) \cdot \boldsymbol{p} = 0 \tag{4}
$$

当 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$ 为 Hermite 算符,即

$$
\boldsymbol{A}^+ = \boldsymbol{A}, \quad \boldsymbol{B}^+ = \boldsymbol{B}
$$

容易验证

$$
(\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B})^+ = \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{A}, \quad (\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{B})^+ = -\boldsymbol{B} \times \boldsymbol{A} \tag{5}
$$

因此,式(4) 取共轭,即得

$$
\boldsymbol{l} \cdot \boldsymbol{r} = 0 \tag{4'}
$$

类似地，可证

$$\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{p}=(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{p}=\boldsymbol{r}\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{p})=0 \tag{6}$$

取共轭即得

$$\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{l}=0 \tag{6'}$$

类似地，可得

$$(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{p}=\boldsymbol{l}\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{p})=0 \tag{7}$$

再利用题 4.6 式(1)，可得

$$(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})\cdot\boldsymbol{p}=(2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}-\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{p}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}^2 \tag{8}$$

上两式分别取共轭，即得

$$\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})=0 \tag{7'}$$

$$\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}^2 \tag{8'}$$

利用式(3)及(6')，可得

$$(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})\cdot\boldsymbol{l}=\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{l})=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{l}=0 \tag{9}$$

$$(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{l}=(2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})\cdot\boldsymbol{l}=0 \tag{10}$$

上两式分别取共轭，即得

$$\boldsymbol{l}\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=0,\quad \boldsymbol{l}\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})=0 \tag{11}$$

式(9)至(11)的另外一种证法是，利用题 4.6 式(2)，并和 $\boldsymbol{l}$ 取标积，即得

$$\mathrm{i}\hbar(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}-\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{l}=(\boldsymbol{l}^2\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}\boldsymbol{l}^2)\cdot\boldsymbol{l}=0$$

这里利用了 $\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{l}=0$ 以及 $[\boldsymbol{l}^2,\boldsymbol{l}]=0$. 再利用题 4.6 式(1)，即得式(9)和(10). 再取共轭，即得式(11).

4.8 证明 $\boldsymbol{l}^2=r^2\boldsymbol{p}^2-(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})^2+\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}$，进而再证明

$$p^2 = \frac{1}{r^2}l^2 - \hbar^2\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} = \frac{1}{r^2}l^2 + p_r^2$$

证 利用题 4.1 式(3)和(5′),可得

$$\begin{aligned} l^2 &= -(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{r})\cdot(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}) = -[(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{r})\times\boldsymbol{r}]\cdot\boldsymbol{p} \\ &= [\boldsymbol{p}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{r}) - (\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})\boldsymbol{r}]\cdot\boldsymbol{p} \\ &= (\boldsymbol{p}r^2)\cdot\boldsymbol{p} - (\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}) \end{aligned}$$

其中

$$\boldsymbol{p}r^2 = r^2\boldsymbol{p} - \mathrm{i}\hbar(\nabla r^2) = r^2\boldsymbol{p} - 2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}$$
$$\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p} - \mathrm{i}\hbar(\nabla\cdot\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p} - 3\mathrm{i}\hbar$$

因此

$$l^2 = r^2p^2 - (\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})^2 + \mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p} \tag{1}$$

此即要证明的第一个公式,其中

$$\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p} = -\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}\cdot\nabla = -\mathrm{i}\hbar r\frac{\partial}{\partial r} \tag{2}$$

因而

$$\begin{aligned} l^2 &= r^2p^2 + \hbar^2\left(r\frac{\partial}{\partial r}r\frac{\partial}{\partial r}\right) + \hbar^2 r\frac{\partial}{\partial r} \\ &= r^2p^2 + \hbar^2\left(r^2\frac{\partial^2}{\partial r^2} + 2r\frac{\partial}{\partial r}\right) \end{aligned} \tag{3}$$

以 r^{-2} 左乘上式各项,即得

$$\begin{aligned} p^2 &= \frac{1}{r^2}l^2 - \hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) \\ &= \frac{1}{r^2}l^2 - \hbar^2\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} \end{aligned} \tag{4}$$

根据题 4.5 式(2),上式亦即

$$p^2 = \frac{1}{r^2}l^2 + p_r^2 \tag{4′}$$

经典力学中也有类似的公式.

4.9 化简 $(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}$ 和 $\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})$

解 利用公式

$$(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\cdot\boldsymbol{C}=\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})$$

即得

$$(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}=\boldsymbol{l}\cdot\left(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{r}\frac{1}{r}\right)=-\boldsymbol{l}\cdot\left(\boldsymbol{l}\frac{1}{r}\right)=-\frac{\boldsymbol{l}^2}{r}\tag{1}$$

再利用公式(题 4.6)

$$\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}+\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}\tag{2}$$

可得

$$\begin{aligned}\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})&=\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\cdot(2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})\\&=2\mathrm{i}\hbar\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}-\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})\\&=2\mathrm{i}\hbar\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}-\frac{1}{r}(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{l}\\&=2\mathrm{i}\hbar\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}-\frac{1}{r}\boldsymbol{l}^2\\&=2\hbar^2\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\boldsymbol{l}^2}{r}\end{aligned}\tag{3}$$

4.10 证明 $\boldsymbol{p}\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=-(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times\boldsymbol{p}=\boldsymbol{l}\boldsymbol{p}^2$

证 利用题 4.1 式(5′),即得

$$-(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times\boldsymbol{p}=\boldsymbol{l}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p})-(\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{p})\boldsymbol{p}=\boldsymbol{l}\boldsymbol{p}^2\tag{1}$$

注意 $\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{p}=0$. 利用题 4.1 式(4′)及上题式(2),可得

$$\begin{aligned}\boldsymbol{p}\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})&=\boldsymbol{p}\times(2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})=-\boldsymbol{p}\times(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})\\&=(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p})\boldsymbol{l}-\boldsymbol{p}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{l})=\boldsymbol{p}^2\boldsymbol{l}=\boldsymbol{l}\boldsymbol{p}^2\end{aligned}\tag{2}$$

注意 p^2 和 $\boldsymbol{l}$ 对易，$\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{l}=0$. 类似地还可以证明

$$(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})\times\boldsymbol{p}=-\boldsymbol{p}\times(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})=\boldsymbol{l}p^2 \tag{3}$$

4.11 证明 $\frac{\boldsymbol{r}}{r}\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})+(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times\frac{\boldsymbol{r}}{r}=2\mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{l}}{r}$

证 利用公式(见题 4.6)

$$\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p} \tag{1}$$

即得

$$\boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{l}-\boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}) \tag{2}$$

由题 4.1 式(4)，

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})]_x&=\boldsymbol{r}p_x\cdot\boldsymbol{l}-(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})l_x\\&=\left(p_x\boldsymbol{r}+\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\boldsymbol{r}}{\partial x}\right)\cdot\boldsymbol{l}-(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})l_x\\&=p_x\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{l}+\mathrm{i}\hbar l_x-(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})l_x\\&=(\mathrm{i}\hbar-\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})l_x\end{aligned}$$

亦即

$$\boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})=(\mathrm{i}\hbar-\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})\boldsymbol{l} \tag{3}$$

代入式(2)，即得

$$\boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{l}+(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})\boldsymbol{l} \tag{4}$$

$$\frac{\boldsymbol{r}}{r}\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=\mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{l}}{r}+\frac{1}{r}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})\boldsymbol{l} \tag{5}$$

类似地，可得

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times\frac{\boldsymbol{r}}{r}&=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{r}\frac{1}{r}-(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})\times\frac{\boldsymbol{r}}{r}\\&=-2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{l}\frac{1}{r}-(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})\times\frac{\boldsymbol{r}}{r}\end{aligned} \tag{6}$$

而式(5)取共轭，则得

$$(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})\times\frac{\boldsymbol{r}}{r}=\quad \mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{l}}{r}+\boldsymbol{l}\left(\boldsymbol{p}\cdot\right.$$

$$=-\mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{l}}{r}+\boldsymbol{l}\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p}\right.$$

$$=\boldsymbol{l}\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p}\right)-3\mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{l}}{r}$$

$$=\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p}\right)\boldsymbol{l}-3\mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{l}}{r}\tag{7}$$

注意，$\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p}=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial r}$，和 $\boldsymbol{l}$ 对易. 式(7)代入式(6)，得到

$$(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times\frac{\boldsymbol{r}}{r}=\mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{l}}{r}-\frac{1}{r}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})\boldsymbol{l}\tag{8}$$

式(5)加式(8)，即得

$$\frac{\boldsymbol{r}}{r}\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})+(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times\frac{\boldsymbol{r}}{r}=2\mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{l}}{r}\tag{9}$$

4.12 证明 $(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})^2=(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})^2=-(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})$

$$=\boldsymbol{l}^2\boldsymbol{p}^2,$$

$$-(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=\boldsymbol{l}^2\boldsymbol{p}^2+4\hbar^2\boldsymbol{p}^2$$

证 首先，利用公式[见题 4.7 式(7)]

$$(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{p}=\boldsymbol{l}\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{p})=0\tag{1}$$

再利用题 4.1 式(5′)，和题 4.10 式(1)，即得

$$-(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})=-[(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\times\boldsymbol{p}]\cdot\boldsymbol{l}$$

$$=(\boldsymbol{l}\boldsymbol{p}^2)\cdot\boldsymbol{l}=\boldsymbol{l}^2\boldsymbol{p}^2\tag{2}$$

注意 $\boldsymbol{l}$ 和 $\boldsymbol{p}^2$ 对易. 类似地，可得

$$(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})^2=(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})=[(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})\times\boldsymbol{p}]\cdot\boldsymbol{l}$$

$$=(\boldsymbol{l}\boldsymbol{p}^2)\cdot\boldsymbol{l}=\boldsymbol{l}^2\boldsymbol{p}^2\tag{3}$$

$$(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})^2=(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})=\boldsymbol{l}\cdot[\boldsymbol{p}\times(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{p})]$$

$$= \boldsymbol{l} \cdot (\boldsymbol{l}p^2) = \boldsymbol{l}^2 p^2 \tag{4}$$

最后,利用公式(见题 4.6)

$$\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{l} + \boldsymbol{l} \times \boldsymbol{p} = 2\mathrm{i}\hbar \boldsymbol{p}$$

即得

$$\begin{aligned} -(\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{l}) \cdot (\boldsymbol{l} \times \boldsymbol{p}) &= (\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{l}) \cdot (\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{l} - 2\mathrm{i}\hbar \boldsymbol{p}) \\ &= (\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{l})^2 - 2\mathrm{i}\hbar (\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{l}) \cdot \boldsymbol{p} \\ &= \boldsymbol{l}^2 p^2 - 2\mathrm{i}\hbar (2\mathrm{i}\hbar \boldsymbol{p} - \boldsymbol{l} \times \boldsymbol{p}) \cdot \boldsymbol{p} \\ &= \boldsymbol{l}^2 p^2 + 4\hbar^2 p^2 \end{aligned} \tag{5}$$

这里再次利用了式(1).

4.13 证明$(\boldsymbol{l} \times \boldsymbol{p}) \times (\boldsymbol{l} \times \boldsymbol{p}) = -\mathrm{i}\hbar \boldsymbol{l} p^2$

证 就此式的一个分量加以证明.由题 4.1 式(4),

$[(\boldsymbol{l} \times \boldsymbol{p}) \times (\boldsymbol{l} \times \boldsymbol{p})]_x = (\boldsymbol{l} \times \boldsymbol{p}) \cdot (l_x \boldsymbol{p}) - [(\boldsymbol{l} \times \boldsymbol{p}) \cdot \boldsymbol{l}] p_x$,

其中

$$l_x \boldsymbol{p} = \boldsymbol{p} l_x + \mathrm{i}\hbar (p_z \boldsymbol{e}_2 - p_y \boldsymbol{e}_3)$$

$\boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3$ 为 y 轴和 z 轴方向的单位矢量.因此

$$\begin{aligned} [(\boldsymbol{l} \times \boldsymbol{p}) \times (\boldsymbol{l} \times \boldsymbol{p})]_x = {} & (\boldsymbol{l} \times \boldsymbol{p}) \cdot \boldsymbol{p} l_x + \mathrm{i}\hbar [(\boldsymbol{l} \times \boldsymbol{p}) \times \boldsymbol{p}]_x \\ & - [(\boldsymbol{l} \times \boldsymbol{p}) \cdot \boldsymbol{l}] p_x \end{aligned} \tag{1}$$

而题 4.7 已经证明

$$(\boldsymbol{l} \times \boldsymbol{p}) \cdot \boldsymbol{p} = 0, \quad (\boldsymbol{l} \times \boldsymbol{p}) \cdot \boldsymbol{l} = 0$$

题 4.10 已经证明

$$(\boldsymbol{l} \times \boldsymbol{p}) \times \boldsymbol{p} = -\boldsymbol{l} p^2$$

代入式(1),即得

$$[(\boldsymbol{l} \times \boldsymbol{p}) \times (\boldsymbol{l} \times \boldsymbol{p})]_x = -\mathrm{i}\hbar \, l_x p^2 \tag{2}$$

类似地，可得到 y 分量和 z 分量的公式.

4.14 对于任何两个代表不同状态的态矢量 $|\psi\rangle$ 及 $|\varphi\rangle$（未归一化），试证明下列 Schwarz 不等式：

$$|\langle\psi|\varphi\rangle|^2 < \langle\psi|\psi\rangle\langle\varphi|\varphi\rangle$$

证一 令 $\langle\psi|\psi\rangle = a(>0)$，$\langle\varphi|\varphi\rangle = b(>0)$，$\langle\psi|\varphi\rangle = c$，并令

$$|\chi\rangle = |\varphi\rangle - \frac{c}{a}|\psi\rangle \tag{1}$$

由于 ψ、φ 代表不同状态，所以 $|\chi\rangle \neq 0$，$\langle\chi|\chi\rangle > 0$，即

$$\langle\chi|\chi\rangle = \left(\langle\varphi| - \frac{c^*}{a}\langle\psi|\right)\left(|\varphi\rangle - \frac{c}{a}|\psi\rangle\right)$$

$$= b - \frac{1}{a}c^*c > 0$$

所以

$$c^*c < ab \tag{2}$$

亦即

$$|\langle\psi|\varphi\rangle|^2 < \langle\psi|\psi\rangle\langle\varphi|\varphi\rangle \tag{3}$$

证二 对于任何复数 λ，显然有

$$\langle\psi - \lambda\varphi|\psi - \lambda\varphi\rangle > 0 \tag{4}$$

但因

$$\langle\psi - \lambda\varphi| = \langle\psi| - \lambda^*\langle\varphi|$$

代入上式，即得

$$\langle\psi|\psi\rangle + \lambda^*\lambda\langle\varphi|\varphi\rangle - \lambda\langle\psi|\varphi\rangle - \lambda^*\langle\varphi|\psi\rangle > 0 \tag{5}$$

令

$$\lambda = \frac{\langle\varphi|\psi\rangle}{\langle\varphi|\varphi\rangle}, \quad \lambda^* = \frac{\langle\psi|\varphi\rangle}{\langle\varphi|\varphi\rangle} \tag{6}$$

代入式(5),并以$\langle\varphi|\varphi\rangle$乘各项(注意$\langle\varphi|\varphi\rangle > 0$),即得

$$\langle\psi|\psi\rangle\langle\varphi|\varphi\rangle - \langle\psi|\varphi\rangle\langle\varphi|\psi\rangle \geq 0$$

此即式(3).

4.15 利用 Schwarz 不等式证明测不准关系式.

证 对于任何归一化的态矢量$|\psi\rangle$和 Hermite 算符$\hat{A}$、$\hat{B}$及实参数ξ,作

$$|\varphi\rangle = (\hat{A} + \mathrm{i}\xi\hat{B})|\psi\rangle \tag{1}$$

则

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \langle\psi|(\hat{A} + \mathrm{i}\xi\hat{B})|\psi\rangle = \overline{A} + \mathrm{i}\xi\overline{B} \tag{2}$$

$$|\langle\psi|\varphi\rangle|^2 = \overline{A}^2 + \xi^2\overline{B}^2 \tag{3}$$

$$\begin{aligned}\langle\varphi|\varphi\rangle &= \langle\psi|(\hat{A} - \mathrm{i}\xi\hat{B})(\hat{A} + \mathrm{i}\xi\hat{B})|\psi\rangle \\ &= \overline{A^2} + \xi^2\overline{B^2} + \mathrm{i}\xi\overline{(AB - BA)}\end{aligned} \tag{4}$$

其中平均值都是对ψ态而言. 注意$\overline{A}$、$\overline{B}$均为实数.

根据题 4.22 证明的 Schwarz 不等式,应有

$$\langle\psi|\psi\rangle\langle\varphi|\varphi\rangle \geq |\langle\psi|\varphi\rangle|^2 \tag{5}$$

等号成立的条件为φ、ψ代表同一个状态,即

$$|\varphi\rangle = (\hat{A} + \mathrm{i}\xi\hat{B})|\psi\rangle = C|\psi\rangle \tag{6}$$

由式(3)、(4)、(5)以及$\langle\psi|\psi\rangle = 1$,即得

$$(\Delta A)^2 + \xi^2(\Delta B)^2 + \mathrm{i}\xi\overline{(AB - BA)} \geq 0 \tag{7}$$

其中

$$\Delta A = (\overline{A^2} - \overline{A}^2)^{\frac{1}{2}}, \quad \Delta B = (\overline{B^2} - \overline{B}^2)^{\frac{1}{2}} \tag{8}$$

由于$\hat{A}$、$\hat{B}$为 Hermite 算符,$\mathrm{i}\,\overline{(AB - BA)}$为实数. 在式(7)中,取

$$\xi = \pm \Delta A/\Delta B \tag{9}$$

如 $\mathrm{i}\overline{(AB-BA)}>0$，$\xi$ 取负值；如 $\mathrm{i}\overline{(AB-BA)}<0$，$\xi$ 取正值. 以式(9)代入式(7)，即得测不准关系式：

$$\boxed{\Delta A \cdot \Delta B \geqslant \frac{1}{2}\left|\overline{(AB-BA)}\right|} \tag{10}$$

等号成立的条件为式(6)，即 ψ 为 $(\hat{A}+\mathrm{i}\xi\hat{B})$ 的本征态.

4.16 设 $\hat{H}$ 为正定的 Hermite 算符，$|\psi\rangle$、$|\varphi\rangle$ 为任意态矢量，证明 $|\langle\psi|\hat{H}|\varphi\rangle|^2 \leqslant \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle\langle\varphi|\hat{H}|\varphi\rangle$.

证 $$|\langle\psi|\hat{H}|\varphi\rangle|^2 = \langle\psi|\hat{H}|\varphi\rangle\langle\varphi|\hat{H}|\psi\rangle \tag{1}$$

如 $\hat{H}|\psi\rangle=0$；或 $\hat{H}|\varphi\rangle=0$，命题显然成立. 以下只讨论 $\hat{H}|\psi\rangle$ 及 $\hat{H}|\varphi\rangle$ 均不为 0 的情形. 由于 $\hat{H}$ 是正定的，必有

$$\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle > 0, \quad \langle\varphi|\hat{H}|\varphi\rangle > 0 \tag{2}$$

对于任何复数 λ，作

$$|\chi\rangle = |\psi\rangle - \lambda|\varphi\rangle \tag{3}$$

则

$$\langle\chi| = \langle\psi| - \lambda^*\langle\varphi| \tag{3'}$$

由于 $\hat{H}$ 是正定的，应有 $\langle\chi|\hat{H}|\chi\rangle \geqslant 0$，即

$$\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle + \lambda^*\lambda\langle\varphi|\hat{H}|\varphi\rangle - \lambda\langle\psi|\hat{H}|\varphi\rangle^* - \lambda^*\langle\varphi|\hat{H}|\psi\rangle \geqslant 0$$

取

$$\lambda = \frac{\langle\varphi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\varphi|\hat{H}|\varphi\rangle}, \quad \lambda^* = \frac{\langle\psi|\hat{H}|\varphi\rangle}{\langle\varphi|\hat{H}|\varphi\rangle} \tag{4}$$

代入上式，并以 $\langle\varphi|\hat{H}|\varphi\rangle$ 乘各项，即得

$$\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle\langle\varphi|\hat{H}|\varphi\rangle \geqslant |\langle\psi|\hat{H}|\varphi\rangle|^2 \tag{5}$$

这正是所要证明的. 等号成立的条件为

或
$$\begin{aligned}&\hat{H}|\psi\rangle = 0 \quad 或 \quad \hat{H}|\varphi\rangle = 0\\&\hat{H}|\chi\rangle = 0, \quad 即 \quad \hat{H}|\psi\rangle = \lambda\hat{H}|\varphi\rangle\end{aligned} \tag{6}$$

例如 $|\varphi\rangle = C|\psi\rangle$($C$ 为常数) 就属于这种特例.

如 $\hat{H}$ 的本征值谱中不包含 0,则式(5)中等号能够成立的条件是 $|\chi\rangle = 0$,即 $|\psi\rangle = \lambda|\varphi\rangle$.

4.17 证明:为了保证 $\hat{l}_z = -\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial\varphi}$ 是 Hermite 算符,波函数 $\psi(r,\theta,\varphi)$ 必须满足单值性条件

$$\psi(r,\theta,\varphi) = \psi(r,\theta,\varphi + 2\pi)$$

证 $\hat{l}_z$作为 Hermite 算符,对于任意两个波函数 ψ 和 χ,应有

$$\int\chi^*\hat{l}_z\psi\mathrm{d}^3x = \int(\hat{l}_z\chi)^*\psi\mathrm{d}^3x \tag{1}$$

(积分范围为全空间) 如取 $\chi = \chi(r,\theta)$,与 φ 无关,则 $\hat{l}_z\chi = 0$,因此

$$\int\chi^*\hat{l}_z\psi\mathrm{d}^3x = 0$$

即

$$\int_0^\infty r^2\mathrm{d}r\int_0^\pi\sin\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\chi^*(r,\theta)\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi(r,\theta,\varphi)\mathrm{d}\varphi = 0$$

由于被积函数的 r、θ 部分有任意性,因此必须

$$\int_0^{2\pi}\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi(r,\theta,\varphi)\,\mathrm{d}\varphi = \psi(r,\theta,\varphi)\Big|_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi} = 0 \tag{2}$$

由于 $\varphi = 0$ 的方向可以任意选择,故上式亦即

$$\psi(r,\theta,\varphi) = \psi(r,\theta,\varphi + 2\pi) \tag{3}$$

此即周期性边界条件.

第五章　中心力场

5.1[①]　质量为 μ 的粒子在中心力场

$$V(r)=-\frac{\alpha}{r^s},\ \alpha>0 \tag{1}$$

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.

证　当势能取式(1)时，根据位力定理，在任何束缚态中，有下列平均值关系：

$$\langle T\rangle=\frac{1}{2\mu}\langle \boldsymbol{P}^2\rangle=-\frac{s}{2}\langle V\rangle \tag{2}$$

所以

$$E=\langle T+V\rangle=\left(1-\frac{2}{s}\right)\langle T\rangle \tag{3}$$

由于 $\langle T\rangle>0$，而束缚态 $E<0$，所以存在束缚态的条件为

$$0<s<2 \tag{4}$$

在这条件下，式(3)还可以写成

$$\begin{aligned}E=\langle T+V\rangle&=\left(1-\frac{s}{2}\right)\langle V\rangle\\&=-\alpha\left(1-\frac{s}{2}\right)\left\langle\frac{1}{r^s}\right\rangle\end{aligned} \tag{5}$$

如能构造一个波包，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

---

① 参看 Landau 等，《量子力学》(高等教育出版社，1980)，§18.

$$E=-\alpha\left(1-\frac{s}{2}\right)\left\langle\frac{1}{r^s}\right\rangle$$

$$\approx-\alpha\left(1-\frac{s}{2}\right)\frac{1}{r_0^s} \tag{6}$$

只要 r_0 足够大，$|E|$就可以小于任意指定正数，这样就得到无限多条密集在 $E\sim0^-$附近的能级.

另外，波包的构成必须受测不准关系的制约.

$$\Delta r\cdot\Delta p\gtrsim\hbar \tag{7}$$

由于束缚定态 $\langle\boldsymbol{P}\rangle=0$，所以

$$\langle\boldsymbol{P}^2\rangle=(\Delta p)^2\gtrsim\hbar^2/(\Delta r)^2 \tag{8}$$

$$E=\langle T+V\rangle\gtrsim\frac{\hbar^2}{2\mu(\Delta r)^2}-\frac{\alpha}{r_0^s} \tag{9}$$

由于 Δr 必须小于 r_0，如 $s>2$，则对于足够大的 r_0，上式将给出 $E>0$，不能成为束缚态；反之，如 $0<s<2$，对于足够大的 r_0，式(9)中第二项起主要作用，将给出 $E<0$，而且当 $r_0\to\infty$，$E\to0^-$，各能级密集在 $E\sim0^-$附近.

5.2[①] 试将三维各向同性谐振子的径向方程和 Coulomb 场中束缚态的径向方程联系起来，并利用后者的本征解得出前者的本征解.

解 谐振子势场为

$$V(r)=\lambda r^2,\quad \lambda>0 \tag{1}$$

(H,l^2,l_z)的共同本征函数可以表示成

$$\psi=R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{1}{r}\chi(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{2}$$

---

① 题 5.2 至 5.6，参看 C. Quigg & J. L. Rosner, *Physics Reports*, **56** (1979), 167～235.

$\chi(r)$满足径向方程

$$\frac{\hbar}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}r^2}+\left[E-\lambda r^2-l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\right]\chi=0 \tag{3}$$

Coulomb 吸引场为

$$V(r)=\lambda'/r,\quad \lambda'<0 \tag{4}$$

(H,l^2,l_z)的共同本征函数表示成

$$\psi=\frac{1}{r}u(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) \tag{5}$$

$u(r)$满足径向方程

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2}+\left[E'-\frac{\lambda'}{r}-l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u=0 \tag{6}$$

如对式(3)作变换

$$r^2=\rho,\quad \chi(r)=\rho^{-1/4}v(\rho) \tag{7}$$

可得 $v(\rho)$满足的方程为

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2v}{\mathrm{d}\rho^2}+\left[E''-\frac{\lambda''}{\rho}-l'(l'+1)\frac{\hbar^2}{2\mu\rho^2}\right]v=0 \tag{8}$$

其中

$$\boxed{E''=-\lambda/4<0,\quad \lambda''=-E/4<0} \tag{9}$$

$$l'(l'+1)=\frac{1}{4}l(l+1)-\frac{3}{16} \tag{10}$$

式(10)亦即

$$\boxed{l'=\frac{l}{2}-\frac{1}{4}} \tag{10'}$$

式(8)和(6)构造相同，其间对应关系为

$$u-v,\quad r-\rho,\quad l-l',\ E'-E'',\ \lambda'-\lambda''$$

如所周知，式(6)的本征解(束缚态，$E'<0$)为①

$$E'=-\frac{\mu}{2\hbar^2}(\lambda')^2(n_r+l+1)^{-2},\quad n_r=0,1,2,\cdots \tag{11}$$

$$u(r)=r^{l+1}F\left(-n_r,2l+2,\frac{2\mu|\lambda'|r}{(n_r+l+1)\hbar^2}\right)e^{-\mu|\lambda'|r/(n_r+l+1)\hbar^2} \tag{12}$$

因此，式(8)的本征解为

$$E''=-\frac{\mu}{2\hbar^2}(\lambda'')^2(n_r+l'+1)^{-2},\quad n_r=0,1,2,\cdots \tag{13}$$

$$v(\rho)=\rho^{l'+1}F\left(-n_r,2l'+2,\frac{2\mu|\lambda''|\rho}{(n_r+l'+1)\hbar^2}\right)e^{-\mu|\lambda''|\rho/(n_r+l'+1)\hbar^2} \tag{14}$$

式(12)、(14)中 $F(\alpha,\gamma,z)$ 是合流超几何级数.

将式(9)及(10′)代入式(13)，即可得到三维各向同性谐振子的能级公式：

$$E=\left(\frac{2\hbar^2\lambda}{\mu}\right)^{\frac{1}{2}}\left(l+2n_r+\frac{3}{2}\right).\quad n_r=0,1,2,\cdots \tag{15}$$

通常，将谐振子势场写成

$$V(r)=\lambda r^2=\frac{1}{2}\mu\omega^2r^2 \tag{1′}$$

---

① 参看曾谨言，《量子力学》卷 I (科学出版社，1997)，§ 6.3. 谐振子解见同书 § 6.4.

即 $\lambda=\frac{1}{2}\mu\omega^2$. 如再令

$$N=l+2n_r \tag{16}$$

则式(15)可以写成

$$\boxed{E=\left(N+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega,\quad N=0,1,2,\cdots} \tag{15}$$

将式(14)代入式(7),则得谐振子径向波函数为(未归一化)

$$\begin{aligned}R(r)&=\frac{\chi(r)}{r}\\&=r^l F\left(-n_r,l+\frac{3}{2},\frac{\mu\omega}{\hbar}r^2\right)e^{-\mu\omega r^2/2\hbar}\end{aligned} \tag{17}$$

如令 $\alpha=\sqrt{\mu\omega/\hbar}$,上式即

$$R(r)=r^l F\left(-n_r,\ l+\frac{3}{2},\alpha^2r^2\right)e^{-\alpha^2r^2/2} \tag{17'}$$

这个结果也可以直接解式(3)而得出.

5.3 对于幂函数型中心势场

$$V(r)=\lambda r^\nu,\quad -2<\nu<\infty \tag{1}$$

试找一个变换,将 $\nu>0$ 和 $\nu<0$ 的径向方程联系起来,并加以讨论.

解 (H,l^2,l_z) 的共同本征函数表示成

$$\psi=R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{1}{r}u(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{2}$$

径向方程为

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2}+\left[E-\lambda r^{\nu}-l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u=0 \tag{3}$$

依照上题，作变换

$$\rho=r^{\alpha},\qquad u(r)=\rho^{\beta}v(\rho) \tag{4}$$

α、β 待定. 利用公式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}=\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}=\alpha\rho^{1-\frac{1}{\alpha}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}, \tag{5}$$

容易算出

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2}=\alpha^2\rho^{2+\beta-\frac{2}{\alpha}}v''+\alpha^2\left(2\beta+1-\frac{1}{\alpha}\right)\rho^{1+\beta-\frac{2}{\alpha}}v'$$
$$+\alpha^2\beta\left(\beta-\frac{1}{\alpha}\right)\rho^{\beta-\frac{2}{\alpha}}v$$

取 $\beta=\frac{1}{2}\left(\frac{1}{\alpha}-1\right)$，就可以使 v' 项消失. 为此目的，可令

$$\alpha=-\nu/\nu',\qquad \beta=-\frac{1}{2}\left(1+\frac{\nu'}{\nu}\right) \tag{6}$$

代入式(4)，再代入式(3)，即得

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\rho^{2+\nu'+2\nu'/\nu}v''+\left\{-\lambda\left(\frac{\nu'}{\nu}\right)^2+E\left(\frac{\nu'}{\nu}\right)^2\rho^{\nu'}\right\}v$$
$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\rho^{-2}\left[l(l+1)\left(\frac{\nu'}{\nu}\right)^2\right.$$
$$\left.+\frac{1}{4}\left(\frac{\nu'}{\nu}\right)^2-\frac{1}{4}\right]\rho^{2+\nu'+2\nu'/\nu}v=0$$

如取

$$2+\nu'+2\nu'/\nu=0,\quad \text{即}\quad \boxed{\nu'=-\frac{2\nu}{2+\nu}} \tag{7}$$

则上式成为

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}v''+\left[E'-\lambda'\rho^{\nu'}-l'(l'+1)\frac{\hbar^2}{2\mu\rho^2}\right]v=0 \tag{8}$$

其中

$$\boxed{E'=-\lambda\left(\frac{\nu'}{\nu}\right)^2,\quad \lambda'=-E\left(\frac{\nu'}{\nu}\right)^2} \tag{9}$$

$$\boxed{\begin{aligned} l'&=-\left(l+\frac{1}{2}\right)\frac{\nu'}{\nu}-\frac{1}{2}\\ &=\frac{2l+1}{2+\nu}-\frac{1}{2}\end{aligned}} \tag{10}$$

式(8)和(3)构造相似，只是 ν'、λ'、E' 的正负性质分别与 ν、λ、E 相反，例如

$$\nu,\lambda,E>0,\qquad \nu',\lambda',E'<0$$

反之亦然. 由此可知，ν、$\lambda>0$ 时式(3)的本征解，可由式(8)中 ν'、$\lambda'<0$ 的本征解得出. ν、$\lambda>0$ 时显然有无限多条束缚态能级($0<E<\infty$)，因此 $-2<\nu<0$ 时也有无限多条能级($E<0$). 题 7.2 就是一个具体实例，而且是能量本征方程可以精确求解的唯一情形.

根据式(4)、(6)、(7)，有

$$\boxed{\rho=r^{1+\nu/2}} \tag{11}$$

当 $-2<\nu<\infty$，必有 $1+\nu/2>0$，因此

$$r\to 0 \text{ 即 } \rho\to 0,\quad r\to\infty \text{ 即 } \rho\to\infty$$

由式(8)可知

$$\rho\to 0 \text{ 处，}\quad v(\rho)\to\rho^{l'+1}=\rho^{\frac{2l+1}{2+\nu}+\frac{1}{2}} \tag{12}$$

则由式 (4) 就有

$$r\to 0 \text{ 处}, \quad u(r)\to\rho^{\frac{2l+2}{2+\nu}}=r^{l+1} \tag{13}$$

这个结果可以直接从式(3)得出.

5.4 质量为 μ 的粒子在中心势场

$$V(r)=\lambda r^{\nu}, \quad -2<\nu<\infty \tag{1}$$

中运动. 只讨论能够出现束缚态的情形,即 $\lambda\nu>0$ 的情形. (a)找出特征长度的量纲构造式,将径向方程无量纲化; (b) 视$\hbar$、μ、λ 为参量,确定能级构造和它们的关系; (c) 分别就 $\nu=2$、1、-1 三种特例作具体讨论.

解 束缚态波函数 (H,l^2,l_z的共同本征函数)可以写成

$$\psi=R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{u(r)}{r}Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{2}$$

径向方程为

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2u}{dr^2}+\left[E-\lambda r^{\nu}-l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u=0 \tag{3}$$

方程中各项量纲相同,故特征长度的量纲构造式为

$$r\sim\left(\frac{\hbar^2}{\mu|\lambda|}\right)^{\frac{1}{2+\nu}} \tag{4}$$

特征能量的量纲构造式为

$$E\sim\hbar^2/\mu r^2\sim\left(\frac{\hbar^2}{\mu}\right)^{\frac{\nu}{2+\nu}}|\lambda|^{\frac{2}{2+\nu}} \tag{5}$$

据此,引入无量纲的径向距离 ρ 及能量 ε,定义为

$$\rho=r\left(\frac{2\mu|\lambda|}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2+\nu}} \tag{6}$$

$$\varepsilon=E\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(\frac{\hbar^2}{2\mu|\lambda|}\right)^{\frac{2}{2+\nu}} \tag{7}$$

并令

$$u(r)=w(\rho) \tag{8}$$

则径向方程(3)变成

$$\frac{\mathrm{d}^2w}{\mathrm{d}\rho^2}+\left[\varepsilon-\frac{\lambda}{|\lambda|}\rho^{\nu}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]w=0 \tag{9}$$

现在径向方程已经和$\hbar$、μ、λ的数值无关，ε作为式(9)的特征值，当然与$\hbar$、μ、λ的值无关. 由式(7)易知，任何两个能级之差ΔE必然和式(5)具有相同的量纲构造，即

$$\boxed{\Delta E\propto\left(\frac{\hbar^2}{2\mu}\right)^{\frac{\nu}{2+\nu}}|\lambda|^{\frac{2}{2+\nu}}} \tag{5'}$$

由此可见：

1°不论ν取什么值($\nu>-2$)，如作用强度$|\lambda|$增大，ΔE亦随之增大.

2°粒子质量μ和能级差ΔE的依赖关系为

$\nu>0$，　μ增大时ΔE减少

$\nu<0$，　μ增大时ΔE增大

具体说来，$\nu=-1,2,1$三种特例的规律如下：

1°Coulomb 势 ($\nu=-1,\lambda<0$)

$$V(r)=\lambda/r,\quad \Delta E\propto\mu\lambda^2/\hbar^2 \tag{10}$$

事实上，能级公式为

$$E_n=-\mu\lambda^2/2n^2\hbar^2,\quad n=1,2,3,\cdots \tag{11}$$

2°谐振子势 ($\nu=2,\lambda>0$)

$$V(r)=\lambda r^2, \quad \Delta E\propto\hbar\left(\frac{\lambda}{\mu}\right)^{1/2} \tag{12}$$

事实上,能级公式为

$$E_N=\left(N+\frac{3}{2}\right)\left(\frac{2\lambda\hbar^2}{\mu}\right)^{1/2}, \quad N=0,1,2,\cdots \tag{13}$$

3°线性中心势 ($\nu=1$, $\lambda>0$)

$$V(r)=\lambda r, \quad \Delta E\propto(\hbar^2\lambda^2/\mu)^{1/3} \tag{14}$$

能级公式没有简单表达式. s 态($l=0$)能级的 WKB 近似为

$$E_n\approx\left[\frac{3}{2}\pi\left(n+\frac{3}{4}\right)\right]^{\frac{2}{3}}\left(\frac{\hbar^2\lambda^2}{2\mu}\right)^{\frac{1}{3}}, \quad n=0,1,2,\cdots \tag{15}$$

5.5 粒子在中心力场中运动,处于束缚态

$$\psi=R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{u(r)}{r}Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{1}$$

径向波函数的归一化条件为

$$\int_0^\infty R^2r^2\mathrm{d}r=\int_0^\infty u^2\mathrm{d}r=1 \tag{2}$$

如以原点为球心以给定的半径 a 画一球面,则粒子在球内出现概率为

$$P(a)=\int_0^a R^2r^2\mathrm{d}r=\int_0^a u^2\mathrm{d}r \tag{3}$$

如势能为幂函数型:

$$V(r)=\lambda r^\nu, \quad -2<\nu<\infty \tag{4}$$

试证明:当粒子质量 μ 或作用强度 $|\lambda|$ 增大时,概率 $P(a)$ 只能增大,不会减小.

证 以 $P(a)$ 和 μ 的关系为例. 令

$$G(a)=\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial\mu}P(a)=\int_0^a u(r)\frac{\partial u(r)}{\partial\mu}\mathrm{d}r \tag{5}$$

需要证明 $G(a)\geqslant 0$.

式(1)中 $u(r)$ 满足径向方程

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2}+\left[E-\lambda r^\nu-l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u=0 \tag{6}$$

按照题 5.4 分析,令

$$\rho=r\left(\frac{2\mu|\lambda|}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2+\nu}} \tag{7}$$

$$u(r)=Cw(\rho)$$

$$\epsilon=E\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(\frac{\hbar^2}{2\mu|\lambda|}\right)^{\frac{2}{2+\nu}} \tag{8}$$

则式(6)就可以无量纲化,变成

$$\frac{\mathrm{d}^2w}{\mathrm{d}\rho^2}+\left[\epsilon-\frac{\lambda}{|\lambda|}\rho^\nu-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]w=0 \tag{9}$$

$w(\rho)$ 作为方程(9)的特征解,和 $\mu,|\lambda|$ 之值没有直接关系. 如令 $w(\rho)$ 满足归一化条件

$$\int_0^\infty w^2\mathrm{d}\rho=1 \tag{10}$$

则利用 $u(r)$ 的归一化条件(2)容易确定式(7)中的归一化常数 C,显然

$$C=\left(\frac{\rho}{r}\right)^{1/2}=\left(\frac{2\mu|\lambda|}{\hbar^2}\right)^{1/2(2+\nu)} \tag{11}$$

现在只需计算 $\partial u(r)/\partial\mu$,然后代入式(5)即可证明 $G(a)\geqslant 0$.

$$\frac{\partial u(r)}{\partial\mu}=\frac{\partial C}{\partial\mu}w(\rho)+C\frac{\partial\rho}{\partial\mu}\frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}\rho}$$

$$= \frac{C}{2(2+\nu)\mu} w(\rho) + \frac{C}{(2+\nu)\mu} \rho \frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}\rho}$$
$$= \frac{1}{2(2+\nu)\mu}\left[u(r) + 2r\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}r}\right]$$
$$= \frac{1}{2(2+\nu)\mu}\frac{1}{u(r)}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left[ru^2(r)\right] \tag{12}$$

代入式(5),即得

$$G(a) = \frac{1}{2(2+\nu)\mu} ru^2 \Big|_{r=0}^{r=a}$$
$$= \frac{1}{2(2+\nu)\mu} au^2(a) \tag{13}$$

由上式易见

$$G(a) \geqslant 0 \tag{14}$$

这正是所要证明的. 等号仅出现于$u(a)=0$的情形,即$r=a$恰好是$u(r)$的节点.

在ρ-r关系式(7)中,μ和$|\lambda|$地位相同,所以$P(a)$对$|\lambda|$的依赖关系可以仿照以上步骤进行推导、分析,结果为

$$\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial|\lambda|}P(a) = \int_0^a u(r)\frac{\partial u(r)}{\partial|\lambda|}\mathrm{d}r$$
$$= \frac{1}{2(2+\nu)|\lambda|} au^2(a) \geqslant 0 \tag{15}$$

即作用强度增大时,概率$P(a)$只能增大,不会减小.

式(13)中,如$\nu \to \infty$,则$G(a) \to 0$,这时$P(a)$与μ无关. 这正好反映如下事实:无限深势阱中的粒子,波函数与粒子质量无关,因此粒子的空间概率分布与质量无关.

本题证明的结论可以从量纲的角度给以简单解释如下:特征长度r_0和μ、$|\lambda|$的关系(参看题 5.4)为

$$r_0 = \left(\frac{\hbar^2}{\mu|\lambda|}\right)^{\frac{1}{2+\nu}} \tag{16}$$

当 μ 或 $|\lambda|$ 变化时，如 a/r_0 保持不变，则概率 $P(a)$ 也不变. 本题的条件是 a 给定不变，因此 μ 或 $|\lambda|$ 增大时，r_0 变小，a/r_0 增大，亦即，如距离以特征长度 r_0 为单位，则 μ 或 $|\lambda|$ 增大时，球面半径 (a/r_0) 增大，故粒子在球内出现概率增大.

5.6 粒子在中心势场 $V(r)$ 中运动，处于能量本征态

$$\psi = R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{u(r)}{r}Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{1}$$

如 ψ 已经归一化，则势能平均值等于

$$\langle V\rangle = \int V\psi^*\psi \mathrm{d}^3x = \int_0^\infty V(r)u^2(r)\mathrm{d}r \tag{2}$$

试证明：如 $V(r)$ 为单调上升函数，即 $\mathrm{d}V/\mathrm{d}r > 0$，则对于任意给定的距离 a，均有

$$\int_0^a (V - \langle V\rangle)u^2\mathrm{d}r < 0 \tag{3}$$

证 由于 $V(r)$ 是单调上升的，显然对于粒子的任何状态，总可以找到某个 r_0，使

$$V(r_0) = \langle V\rangle \tag{4}$$

面且，当 $r < r_0$ 时，$V(r) < \langle V\rangle$；当 $r > r_0$ 时，$V(r) > \langle V\rangle$. 因此，如 $a < r_0$，式(3) 显然成立. 如 $a \geqslant r_0$，则

$$\int_a^\infty (V - \langle V\rangle)u^2\mathrm{d}r > 0$$

但因

$$\int_0^\infty (V - \langle V\rangle)u^2\mathrm{d}r = \langle V\rangle - \langle V\rangle = 0 \tag{5}$$

所以仍得

$$\int_0^a (V - \langle V\rangle)u^2\mathrm{d}r < 0 \tag{3}$$

5.7 对于中心力场 $V(r)$ 的任何一个束缚态，证明

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right\rangle - \left\langle \frac{l^2}{\mu r^3} \right\rangle = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu} |\psi(0)|^2 \tag{1}$$

并解释其经典力学含义.

证 Hamilton 算符为

$$\begin{aligned} H &= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{l^2}{2\mu r^2} + V(r) \end{aligned} \tag{2}$$

计算算符 $\frac{\partial}{\partial r}$ 和 H 的对易式，容易得到

$$\left[\frac{\partial}{\partial r}, H\right] = \frac{\hbar^2}{\mu r^2}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{l^2}{\mu r^3} + \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \tag{3}$$

在任何一个束缚态下计算上式的平均值，左端贡献为 0，所以

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right\rangle - \left\langle \frac{l^2}{\mu r^3} \right\rangle &= -\frac{\hbar^2}{\mu}\left\langle \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} \right\rangle \\ &= -\frac{\hbar^2}{\mu}\int \psi^* \frac{1}{r^2}\frac{\partial\psi}{\partial r} r^2 \mathrm{d}r\mathrm{d}\Omega \\ &= -\frac{\hbar^2}{\mu}\int \mathrm{d}\Omega \int_0^\infty \psi^* \frac{\partial\psi}{\partial r}\mathrm{d}r \end{aligned} \tag{4}$$

上式左端之平均值为实数，则右端亦为实数，因此，

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \psi^* \frac{\partial\psi}{\partial r}\mathrm{d}r &= \int_0^\infty \psi \frac{\partial\psi^*}{\partial r}\mathrm{d}r \\ &= \frac{1}{2}\int_0^\infty \frac{\partial}{\partial r}(\psi^*\psi)\mathrm{d}r \\ &= \frac{1}{2}\psi^*\psi\Big|_{r=0}^{r\to\infty} \\ &= -\frac{1}{2}|\psi(0)|^2 \end{aligned} \tag{5}$$

代入式(4),并计及 $\int \mathrm{d}\Omega = 4\pi$,即得式(1).

在多数场合下,束缚态波函数 ψ 是 $(H, \boldsymbol{l}^2, l_z)$ 的共同本征函数,即

$$\psi = R(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta, \varphi) \tag{6}$$

这时式(1)中 $\boldsymbol{l}^2$ 可以用本征值 $l(l+1)\hbar^2$ 代替. 由于只有 s 态($l = 0$) $\psi(0)$ 才不等于 0,因此式(1)等价于

(a) $$\left(\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right) = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu}|\psi(0)|^2, \qquad l = 0 \tag{7a}$$

(b) $$\left(\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right) = \left(\frac{\boldsymbol{l}^2}{\mu r^3}\right) = l(l+1)\frac{\hbar^2}{\mu}\left(\frac{1}{r^3}\right). \quad l \neq 0 \tag{7b}$$

讨论:式(7a)显含 $\hbar$,所以是量子效应,没有经典对应. 式(7b)则有经典对应. 经典力学中,粒子在中心力场中运动时,对于任何周期性轨道,均有

$$\begin{aligned} E &= \frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu} + V(r) \\ &= \frac{\mu}{2}\left(\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\right)^2 + \frac{\boldsymbol{l}^2}{2\mu r^2} + V(r) \end{aligned}$$

由于 $\boldsymbol{l}$ 守恒,上式对 r 求导,得到

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} - \frac{\boldsymbol{l}^2}{\mu r^3} &= -\frac{\mu}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\right)^2 \\ &= -\mu\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\right) \end{aligned}$$

上式求周期平均值,即得

$$\left(\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right)_{\text{平均}} - \frac{\boldsymbol{l}^2}{\mu}\left(\frac{1}{r^3}\right)_{\text{平均}} = -\frac{\mu}{\oint \mathrm{d}t}\oint \mathrm{d}t\,\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\right)$$

$$= -\mu \oint \mathrm{d}\left(\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\right) \Big/ \oint \mathrm{d}t = 0$$

其意义为：外力的周期平均值等于向心力的周期平均值. 式(7b)是上式的量子力学推广.

5.8 类氢离子(核电荷 Ze) 中电子处于束缚态 ψ_{nlm}，计算 $\langle r^\lambda \rangle, \lambda = -1, -2, -3$.

解 已知类氢离子的能级为

$$E_{nlm} = E_n = -\frac{Z^2 e^2}{2n^2 a_0}, \quad n = n_r + l + 1 \tag{1}$$

其中 $a_0 = \hbar^2/\mu e^2$ 为 Bohr 半径. 根据位力定理，

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu} \right\rangle_{nlm} &= \left\langle \frac{r}{2} \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right\rangle_{nlm} \\ &= \frac{Ze^2}{2} \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nlm} \\ &= -\frac{1}{2} \langle V \rangle_{nlm} \end{aligned} \tag{2}$$

所以

$$E_n = \frac{1}{2} \langle V \rangle_{nlm} = -\frac{Ze^2}{2} \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nlm}$$

$$\boxed{\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nlm} = -\frac{2E_n}{Ze^2} = \frac{Z}{n^2 a_0}, \quad n = 1, 2, 3, \cdots} \tag{3}$$

其次，ψ_{nlm} 的球坐标表示式为

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) \mathrm{Y}_{lm}(\theta, \varphi) \tag{4}$$

它是 (H, l^2, l_z) 的共同本征函数，满足能量本征方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r\psi_{nlm} + \left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{r} \right] \psi_{nlm}$$

$$= E_n\psi_{nlm} \tag{5}$$

总能量算符等价于

$$H \to -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{r} \tag{6}$$

视 l 为参变量，式(6)对 l 求导，利用F-H定理(参阅下册，第五章)，即得

$$\frac{\partial E_n}{\partial l} = \langle\frac{\partial H}{\partial l}\rangle_{nlm}$$

$$= \left(l+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar^2}{\mu}\langle\frac{1}{r^2}\rangle_{nlm} \tag{7}$$

由于 $n = n_r + l + 1$，所以

$$\frac{\partial E_n}{\partial l} = \frac{\partial E_n}{\partial n} = \frac{Z^2e^2}{n^3a_0} \tag{8}$$

代入式(7)，并利用 $a_0 = \hbar^2/\mu e^2$，即得

$$\boxed{\langle\frac{1}{r^2}\rangle_{nlm} = \frac{1}{\left(l+\frac{1}{2}\right)n^3}\frac{Z^2}{a_0^2}} \tag{9}$$

最后，计算 $\langle r^{-3}\rangle$.

对于 s 态 $(l=0)$，$r \to 0$ 处 $\psi \to C$(常数)，所以

$$\langle r^{-3}\rangle_{n00} \to \infty \tag{10}$$

当 $l \neq 0$，利用题(5.7)式(7b)，即得

$$\langle\frac{1}{r^3}\rangle_{nlm} = \frac{Z}{l(l+1)a_0}\langle\frac{1}{r^2}\rangle_{nlm} \tag{11}$$

因此

$$\langle\frac{1}{r^3}\rangle_{nlm}=\frac{1}{n^3l\left(l+\frac{1}{2}\right)(l+1)}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 \tag{12}$$

当 $l\to 0$，上式右端 $\to\infty$，所以上式实际上适用于一切 l 值.

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 $\langle r^\lambda\rangle$ 与 m 无关. 但 $\langle r^{-1}\rangle$ 与角量子数 l 也无关，仅取决于主量子数 n. $\langle r^{-2}\rangle$ 及 $\langle r^{-3}\rangle$ 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，$\langle r^{-2}\rangle$ 或 $\langle r^{-3}\rangle$ 具有不同的数值.

利用式(9)，易得 ψ_{nlm} 态下离心势能的平均值为

$$\begin{aligned}\langle\frac{l^2}{2\mu r^2}\rangle_{nlm}&=\frac{l(l+1)Z^2e^2}{(2l+1)n^3a_0}\\&=-E_n\frac{l(l+1)}{\left(l+\frac{1}{2}\right)n}\end{aligned} \tag{13}$$

由于 $(-E_n)$ 为动能平均值，所以在动能中离心热能所占比例为 $l(l+1)\Big/\left(l+\frac{1}{2}\right)n$，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 $(n-1)\Big/\left(n-\frac{1}{2}\right)$，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.

5.9 对于类氢离子（核电荷 Ze）的 (H,l^2,l_z) 共同本征态 ψ_{nlm}，证明各 $\langle r^\lambda\rangle$ 之间有递推关系（Kramers 公式）

$$\begin{aligned}&\frac{\lambda+1}{n^2}\langle r^\lambda\rangle-(2\lambda+1)\frac{a_0}{Z}\langle r^{\lambda-1}\rangle\\&+\frac{\lambda}{4}[(2l+1)^2-\lambda^2]\frac{a_0^2}{Z^2}\langle r^{\lambda-2}\rangle=0\end{aligned} \tag{1}$$

求出这公式成立的条件，并用来计算 $\langle r\rangle$ 及 $\langle r^2\rangle$.

解 ψ_{nlm} 的球坐标表示式为

$$\psi_{nlm} = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{1}{r}u_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{2}$$

r^λ 的平均值为

$$\langle r^\lambda\rangle_{nlm} = \int r^\lambda|\psi_{nlm}|^2 d^3x = \int_0^\infty r^\lambda(u_{nl})^2 dr \tag{3}$$

u_{nl} 满足径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}u'' + \left[l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{r}\right]u = E_n u \tag{4}$$

由于

$$E_n = -\frac{Z^2e^2}{2n^2a_0}, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \tag{5}$$

式(4)可以写成

$$u'' + \left[\frac{2Z}{a_0 r} - \frac{l(l+1)}{r^2} - \left(\frac{Z}{na_0}\right)^2\right]u = 0 \tag{4'}$$

用 $r^\lambda u$ 乘式(4')各项，并积分 $\int_0^\infty \cdots dr$，后三项显然给出 $r^{\lambda-1}$、$r^{\lambda-2}$ 及 r^λ 的平均值，而第一项给出

$$\begin{aligned}\int_0^\infty r^\lambda u u'' dr &= r^\lambda u u'\Big|_0^\infty - \int_0^\infty (r^\lambda u' + \lambda r^{\lambda-1}u)u' dr \\ &= \left(r^\lambda u u' - \frac{\lambda}{2}r^{\lambda-1}u^2\right)\Big|_0^\infty \\ &\quad + \frac{\lambda(\lambda-1)}{2}\langle r^{\lambda-2}\rangle - \int_0^\infty r^\lambda(u')^2 dr\end{aligned} \tag{6}$$

如果 λ 的取值能够保证

$$r^\lambda u u'\Big|_0^\infty = 0, \quad r^{\lambda-1}u^2\Big|_0^\infty = 0 \tag{7}$$

我们就有下列初步结果：

$$\left[\frac{\lambda(\lambda-1)}{2}-l(l+1)\right]\langle r^{\lambda-2}\rangle+\frac{2Z}{a_0}\langle r^{\lambda-1}\rangle-\left(\frac{Z}{na_0}\right)^0\langle r^{\lambda}\rangle$$

$$=\int_0^\infty r^{\lambda}(u')^2\mathrm{d}r \tag{8}$$

再用 $2r^{\lambda+1}u'$ 乘式(4′)各项，并积分，依次得到

$$\int_0^\infty 2r^{\lambda+1}u'u''\mathrm{d}r=r^{\lambda+1}(u')^2\Big|_0^\infty-\int_0^\infty(\lambda+1)r^{\lambda}(u')^2\mathrm{d}r$$

$$\int_0^\infty 2r^{\lambda+1}u'u\mathrm{d}r=r^{\lambda+1}u^2\Big|_0^\infty-(\lambda+1)\langle r^{\lambda}\rangle$$

$$\int_0^\infty 2r^{\lambda+1}u'\frac{u}{r}\mathrm{d}r=r^{\lambda}u^2\Big|_0^\infty-\lambda\langle r^{\lambda-1}\rangle$$

$$\int_0^\infty 2r^{\lambda+1}u'\frac{u}{r^2}\mathrm{d}r=r^{\lambda-1}u^2\Big|_0^\infty-(\lambda-1)\langle r^{\lambda-2}\rangle$$

在式(7)得到保证的条件下，以上各式中第一项均为0，故得

$$(\lambda-1)l(l+1)\langle r^{\lambda-2}\rangle-2\lambda\frac{Z}{a_0}\langle r^{\lambda-1}\rangle+(\lambda+1)\left(\frac{Z}{na_0}\right)^2\langle r^{\lambda}\rangle$$

$$=(\lambda+1)\int_0^\infty r^{\lambda}(u')^2\mathrm{d}r \tag{9}$$

将式(8)、(9)合并，消去右端的积分，即得式(1). 式(1)成立的条件即式(7). 由于[①]

$$r\to 0,\quad u\sim r^{l+1}$$

$$r\to\infty,\quad u\sim r^{n}\mathrm{e}^{-zr/na_0} \tag{10}$$

易见，为了保证式(7)成立，充分而且必要条件为

① 参看曾谨言，《量子力学》卷 I（科学出版社，1997），§ 6.3.

$$\boxed{\lambda > -(2l+1)} \tag{11}$$

在式(1)中,如取 $\lambda = 0$,并注意到$\langle r^0 \rangle = 1$,立即得到

$$\langle \frac{1}{r} \rangle_{nlm} = Z/n^2 a_0 \tag{12}$$

上题中已经用位力定理得到这个结果.

依次再取 $\lambda = 1, 2$,就得到

$$\langle r \rangle_{nlm} = \frac{1}{2}[3n^2 - l(l+1)]\frac{a_0}{Z} \tag{13}$$

$$\langle r^2 \rangle_{nlm} = \frac{n^2}{2}[1 + 5n^2 - 3l(l+1)]\left(\frac{a_0}{Z}\right)^2 \tag{14}$$

例如 1s 态(基态),$\langle r \rangle_{100} = \frac{3}{2}$,$\langle r^2 \rangle_{100} = 3$

$$\begin{aligned} &\text{2s 态,} \quad \langle r \rangle_{200} = 6, \langle r^2 \rangle_{200} = 42 \\ &\text{2p 态,} \quad \langle r \rangle_{21m} = 5, \langle r^2 \rangle_{21m} = 30 \end{aligned} \tag{15}$$

式(15)中,$\langle r \rangle$ 以 a_0/Z 为单位,$\langle r^2 \rangle$ 以 a_0^2/Z^2 为单位.

注意,如限于本题式(1),不能计算$\langle r^{-2} \rangle$,但如利用上题关于$\langle r^{-2} \rangle$ 的计算结果,则只要在式(1)中取 $\lambda = -1$,就可算出$\langle r^{-3} \rangle$,结果和上题相同. 如再取 $\lambda = -2 (l \geqslant 1)$,就可算出

$$\langle r^{-4} \rangle = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^4 \frac{3n^2 - l(l+1)}{2n^5\left(l - \frac{1}{2}\right)l\left(l + \frac{1}{2}\right)(l+1)\left(l + \frac{3}{2}\right)} \tag{16}$$

计算其他$\langle r^\lambda \rangle$ 可以依此类推①.

5.10 三维各向同性谐振子,总能量算符为

---

① 参看 H. A. Kramers, Quantum Mechanics, North-Holland, Amsterdam, 1958, § 59.

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 \tag{1}$$

对于(H, l^2, l_z)的共同本征态

$$\psi_{n_r lm} = R_{n_r l}(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{1}{r}u_{n_r l}(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) \tag{2}$$

计算$\langle r^{-2}\rangle$，进而计算离心势能和径向动能平均值.

解 三维各向同性谐振子的能级为

$$E_{n_r lm} = E_N = \left(N + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega, \quad N = l + 2n_r \tag{3}$$

对于 $\psi_{n_r lm}$，H 等价于

$$H \to -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}$$

$$+ \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 \tag{4}$$

根据 F-H 定理，应有

$$\frac{\partial E_{n_r lm}}{\partial l} = \left\langle \frac{\partial H}{\partial l}\right\rangle_{n_r lm}$$

$$= \left(l + \frac{1}{2}\right)\frac{\hbar^2}{\mu}\left\langle \frac{1}{r^2}\right\rangle_{n_r lm} \tag{5}$$

由式(3)易见

$$\frac{\partial E_{n_r lm}}{\partial l} = \frac{\partial E_N}{\partial N} = \hbar\omega \tag{6}$$

代入式(5)，即得

$$\left\langle \frac{1}{r^2}\right\rangle_{n_r lm} = \frac{1}{l+\frac{1}{2}}\frac{\mu\omega}{\hbar} = \frac{\alpha^2}{l+\frac{1}{2}}, \quad \alpha = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}} \tag{7}$$

离心势能平均值为

$$\langle \frac{\boldsymbol{l}^2}{2\mu r^2} \rangle_{n_r lm} = \frac{l(l+1)}{2l+1} \hbar\omega \tag{8}$$

注意，离心势能平均值直接由角量子数 l 决定，而与主量子数 N 无关(这一点和氢原子不同，请参看题 5.8). 同属能级 E_N的各态中，以 $l = N$ 态的离心势能为最高.

$$\langle \frac{\boldsymbol{l}^2}{2\mu r^2} \rangle_{l=N} = \frac{N(N+1)}{2N+1} \hbar\omega \tag{9}$$

相应的径向动能仅为

$$\begin{aligned} \langle \frac{p_r^2}{2\mu} \rangle_{l=N} &= \langle \frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu} - \frac{\boldsymbol{l}^2}{2\mu r^2} \rangle_{l=N} \\ &= \frac{E_N}{2} - \frac{N(N+1)}{2N+1} \hbar\omega \\ &= \left(1 + \frac{1}{4N+2}\right) \frac{\hbar\omega}{2} \end{aligned} \tag{10}$$

当 $N \gg 1$，就有

$$\langle \frac{p_r^2}{2\mu} \rangle_{l=N} \approx \frac{1}{2} \hbar\omega \tag{10'}$$

这种情况相当于 Bohr 量子论中的圆形轨道.

径向动能平均值的一般公式为

$$\begin{aligned} \langle \frac{p_r^2}{2\mu} \rangle_{n_r lm} &= \frac{E_N}{2} - \langle \frac{\boldsymbol{l}^2}{2\mu r^2} \rangle_{n_r lm} \\ &= \left[N + \frac{3}{2} - \frac{l(l+1)}{l+\frac{1}{2}} \right] \frac{\hbar\omega}{2} \end{aligned} \tag{11}$$

如 n_r、$l \gg 1$ (准经典情形)，可以作如下近似处理：

$$\frac{l(l+1)}{l+\frac{1}{2}} \approx l + \frac{1}{2}$$

式(8) 和(11) 成为

$$\langle \frac{\boldsymbol{l}^2}{2\mu r^2} \rangle_{n_r lm} \approx \left(l + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar \omega}{2}$$

$$= \left(\frac{l}{2} + \frac{1}{4} \right) \hbar \omega \tag{8'}$$

$$\langle \frac{p_r^2}{2\mu} \rangle_{n_r lm} \approx (N + 1 - l) \frac{\hbar \omega}{2}$$

$$= \left(n_r + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \tag{11'}$$

5.11 对于三维各向同性谐振子，$(H, \boldsymbol{l}^2, l_z)$ 的共同本征态为 $\psi_{n_r lm}$，求各 $\langle r^l \rangle$ 的递推关系，并用以计算 $\langle r^2 \rangle$ 及 $\langle r^4 \rangle$.

解 $\psi_{n_r lm}$ 可以表示成[①]

$$\psi_{n_r lm} = R_{n_r l}(r) \mathrm{Y}_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{1}{r} u_{n_r l}(r) \mathrm{Y}_{lm}(\theta, \varphi), \tag{1}$$

$u_{n_r l}$ 满足径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} u'' + \left[\frac{1}{2} \mu \omega^2 r^2 + l(l+1) \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \right] u = E_N u. \tag{2}$$

利用能级公式

$$E_N = \left(N + \frac{3}{2} \right) \hbar \omega, \tag{3}$$

可将式(2) 改写成

$$u'' + \left[(2N + 3)\alpha^2 - \alpha^4 r^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u = 0, \tag{2'}$$

其中 $\alpha^2 = \mu\omega / \hbar$　$u_{n_r l}$ 的渐近行为是

$$r \to 0, \quad u \sim r^{l+1};$$

---

① 参看曾谨言，《量子力学》卷 I（科学出版社，1997），§ 6.4.

$$r \to \infty, \quad u \sim r^{N+1} e^{-\alpha^2 r^2/2}. \tag{4}$$

完全仿照题 7.9 的方法，即分别以 $r^\lambda u$ 和 $2r^{\lambda+1}u'$ 乘式(2′)，再积分，相消，可得 $\langle r^\lambda \rangle$ 的递推关系：

$$(\lambda+2)\alpha^4\langle r^{\lambda+2}\rangle - (\lambda+1)(2N+3)\alpha^2\langle r^\lambda\rangle + \frac{\lambda}{4}[(2l+1)^2-\lambda^2]\langle r^{\lambda-2}\rangle = 0, \tag{5}$$

适用条件仍为

$$\lambda > -(2l+1). \tag{6}$$

式(5) 中取 $\lambda = 0$，立即得到

$$\langle r^2\rangle_{n_r lm} = \left(N+\frac{3}{2}\right)\alpha^{-2} = \left(N+\frac{3}{2}\right)\frac{\hbar}{\mu\omega}, \tag{7}$$

这个结果很容易由位力定理导出.

式(5) 中取 $\lambda = 2$，并利用式(7)，可得

$$\langle r^4\rangle_{n_r lm} = \frac{1}{8}[3(2N+3)^2 - (2l+3)(2l-1)]\alpha^{-4} \tag{8}$$

例如，$N = 0$(基态，$l = n_r = 0$)，

$$\langle r^2\rangle = \frac{3}{2}\alpha^{-2}, \quad \langle r^4\rangle = \frac{15}{4}\alpha^{-4} \tag{9}$$

$N = 1$ (第一激发能级，$l = 1$，$n_r = 0$)，

$$\langle r^2\rangle = \frac{5}{2}\alpha^{-2}, \quad \langle r^4\rangle = \frac{35}{4}\alpha^{-4} \tag{10}$$

这些结果不难用直接积分的办法加以验证.

对于给定的能级 E_N，l 可取 $N, N-2, \cdots$(1 或 0). 式(7) 表明 $\langle r^2\rangle$ 只与 N 直接有关，与 l 无关. 式(8) 则表明 $\langle r^4\rangle$ 与 N, l 都有关，N 给定后，l 越大，$\langle r^4\rangle$ 越小.

5.12 电荷为 Ze 的原子核突然发生 β^- 衰变，核电荷变成 $(Z+1)e$. 对于衰变前原子 Z 中的一个 K 电子(1s 层电子)，衰变后仍保持为新原子的 K 电子的概率等于多少？

解 由于原子核的 β^- 衰变是突然发生的，可以认为核外的电子状态还来不及变化. 对于原来的 K 电子，其波函数仍为

$$\psi_{100}(Z,r)=\left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-Zr/a_0} \tag{1}$$

而新原子中 K 电子的波函数应该是

$$\psi_{100}(Z+1,r)=\left[\frac{(Z+1)^3}{\pi a_0^3}\right]^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-(z+1)r/a_0} \tag{2}$$

将 $\psi_{100}(Z,r)$ 按新原子的能量本征态作线性展开：

$$\psi_{100}(Z,r)=\sum_{nlm}C_{nlm}\psi_{nlm}(Z+1,r) \tag{3}$$

则衰变前的 1s 电子在衰变后处于新原子的 $\psi_{nlm}(Z+1,r)$ 态的概率为

$$P_{nlm}=|C_{nlm}|^2=|\langle\psi_{nlm}(Z+1)|\psi_{100}(Z)\rangle|^2 \tag{4}$$

因此，本题所求概率为

$$\begin{aligned}P_{100}&=|\langle\psi_{100}(Z+1)|\psi_{100}(Z)\rangle|^2\\&=\frac{Z^3(Z+1)^3}{\pi^2a_0^6}(4\pi)^2\left|\int_0^\infty\mathrm{e}^{-(2Z+1)r/a_0}r^2\mathrm{d}r\right|^2\\&=\frac{Z^3(Z+1)^3}{\left(Z+\frac{1}{2}\right)^6}\\&=\left(1+\frac{1}{Z}\right)^3\left(1+\frac{1}{2Z}\right)^{-6}\end{aligned} \tag{5}$$

当 $Z\gg1$，上式可以近似取成

$$P_{100}\approx1-\frac{3}{4Z^2} \tag{5'}$$

例如，

$$Z = 10, \quad P_{100} \approx 0.9932$$

$$Z = 30, \quad P_{100} \approx 0.9992$$

5.13 质量为 m 的粒子在势场 $V(r) = -\lambda/r^{3/2}(\lambda > 0)$ 中运动，试用测不准关系估算基态能量.

解 总能量算符为

$$H = T + V = p^2/2m - \lambda/r^{3/2}, \tag{1}$$

在任何一个能量本征态下求平均值，有

$$E = \langle T + V \rangle = \frac{1}{2m}\langle p^2 \rangle - \lambda\langle r^{-3/2} \rangle \tag{2}$$

设基态的最概然半径为 $r \sim R$，作为数量级估算，可取

$$\langle r^{-3/2} \rangle \approx R^{-3/2} \tag{3}$$

根据测不准关系(注意：束缚态动量平均值为 0)，可取

$$\langle p^2 \rangle = (\Delta p)^2 \approx \hbar^2/R^2 \tag{4}$$

代入式(2)，即得

$$E \approx \hbar^2/2mR^2 - \lambda/R^{3/2} \tag{5}$$

R 的取值应使 E 为极小. 由极值条件

$$\partial E/\partial R = 0$$

易得

$$R = \frac{4}{9}\left(\frac{\hbar^2}{m\lambda}\right)^2 \tag{6}$$

代入式(5)，即得基态能量的近似值：

$$E \approx -\frac{27}{32}\left(\frac{m^3\lambda^4}{\hbar^6}\right) = -0.84\frac{m^3\lambda^4}{\hbar^6} \tag{7}$$

5.14 用测不准关系估算氦原子的基态能量.

解 氦原子中共有两个电子,电荷各为 $-e$,核电荷 $2e$,总能量算符为

$$H = \frac{1}{2m}(\boldsymbol{p}_1^2 + \boldsymbol{p}_2^2) - 2e^2\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) + \frac{e^2}{r_{12}} \tag{1}$$

设原子的最概然半径为 $r \sim R$,则在式(1)的基态平均值中可取

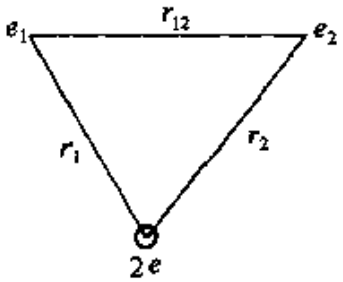


图 5.14

$$\langle\frac{1}{r_1}\rangle = \langle\frac{1}{r_2}\rangle \approx \frac{1}{R}$$
$$\langle\frac{1}{r_{12}}\rangle \approx \frac{1}{2R} \tag{2}$$

根据测不准关系,可取

$$\langle\boldsymbol{p}_1^2\rangle = \langle\boldsymbol{p}_2^2\rangle \approx \hbar^2/R^2 \tag{3}$$

因此,基态能量约为

$$E = \langle H\rangle \approx \frac{\hbar^2}{mR^2} - \left(4 - \frac{1}{2}\right)\frac{e^2}{R} \tag{4}$$

R 的取值应使 E 为极小.由极值条件

$$\partial E/\partial R = 0$$

求得

$$R = \frac{1}{2 - \frac{1}{4}}\frac{\hbar^2}{me^2} = \frac{4}{7}a_0 \tag{5}$$

其中 $a_0 = \hbar^2/me^2$ 为 Bohr 半径.将式(5)代入式(4),即得

$$E \approx -\left(\frac{7}{4}\right)^2 \frac{e^2}{a_0} = -3.06\,\frac{e^2}{a_0} \tag{6}$$

氦原子基态能量的实验值为 $-2.9035\,e^2/a_0$.

5.15 按照核力的介子理论，核力的较长程部分是通过核子间吞吐 π 介子而传递的. 已知 π 介子质量 $m_\pi \sim 270m_e$，试据此估算核力力程.

解一 实验表明，核力与电荷无关. 因此在力程 r_0 的结构式中，除介子质量 m_π 外，只能出现普适常数. 由于问题涉及到介子的生、灭，有关的普适常数中应包含光速 c(代表相对论效应) 和 Planck 常量$\hbar$(代表量子效应). 从量纲结构看，由 m_π、$\hbar$ 和 c 只能构造出一种特征长度，即 Compton 波长. 因此，核力的较长程部分的力程大致是

$$r_0 \approx \frac{\hbar}{m_\pi c} = \frac{\hbar c}{m_\pi c^2} = \frac{197\text{MeV}\cdot\text{fm}}{270 \times 0.511\text{MeV}} = 1.4\text{fm}$$

解二 利用测不准关系. 问题涉及的能量不定值约为

$$\Delta E \sim m_\pi c^2$$

动量不定值约为

$$\Delta p \sim \Delta E/c \sim m_\pi c$$

位置不定值约为

$$\Delta x \sim \hbar/\Delta p \sim \hbar/m_\pi c$$

Δx（按数量级说）应该就是核力力程 r_0，所以

$$r_0 \approx \hbar/m_\pi c = 1.4\text{fm}$$

5.16 对于氢原子的基态，求 Δx、Δp_x，验证测不准关系.

解 氢原子基态波函数为

$$\psi_{100}=\left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-r/a_0} \tag{1}$$

宇称为偶. 由于 x、p_x 均为奇宇称算符，所以

$$\langle x\rangle=0,\quad \langle p_x\rangle=0 \tag{2}$$

由于 ψ_{100} 各向同性，呈球对称分布，显然有

$$\begin{aligned}&\langle x^2\rangle=\langle y^2\rangle=\langle z^2\rangle=\frac{1}{3}\langle r^2\rangle\\&\langle p_x^2\rangle=\langle p_y^2\rangle=\langle p_z^2\rangle=\frac{1}{3}\langle \boldsymbol{p}^2\rangle\end{aligned} \tag{3}$$

容易算出

$$\langle r^2\rangle=\int r^2(\psi_{100})^2\mathrm{d}^3x=3a_0^2 \tag{4}$$

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{p}^2\rangle&=\int|\boldsymbol{p}\psi_{100}|^2\mathrm{d}^3x=\hbar^2\int|\nabla\psi_{100}|^2\mathrm{d}^3x\\&=\hbar^2\int\left(\frac{\partial}{\partial r}\psi_{100}\right)^2\mathrm{d}^3x=\hbar^2/a_0^2\end{aligned} \tag{5}$$

因此

$$\langle x^2\rangle=a_0^2,\quad \Delta x=[\langle x^2\rangle-\langle x\rangle^2]^{\frac{1}{2}}=a_0 \tag{6}$$

$$\langle p_x^2\rangle=\hbar^2/3a_0^2,\quad \Delta p_x=[\langle p_x^2\rangle-\langle p_x\rangle^2]^{\frac{1}{2}}=\hbar/\sqrt{3}\,a_0 \tag{7}$$

$$\Delta x\cdot\Delta p_x=\hbar/\sqrt{3} \tag{8}$$

测不准关系的普遍结论是

$$\Delta x\cdot\Delta p_x\geqslant\hbar/2 \tag{9}$$

显然式(8)和(9)是一致的，而且$\hbar/\sqrt{3}$很接近式(9)规定的下限$\hbar/2$.

5.17 对于类氢离子(核电荷 Ze)的 $l=n-1(n_r=0)$ 状态，

计算(a)最概然半径$r_{概}$;(b)平均半径$\langle r\rangle$;(c)涨落Δr,并和$\langle r\rangle$比较.

解 类氢离子中电子波函数ψ_{nlm}可以表示成

$$\psi_{nlm}=R_{n,l}(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{1}{r}u_{n,l}(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) \tag{1}$$

(a) 最概然半径由径向概率分布的极值条件

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}u_{n,l}(r)=0 \tag{2}$$

决定.$l=n-1$时,$n_r=0$,

$$u_{0,n-1}(r)=Cr^n\mathrm{e}^{-Zr/na_0} \tag{3}$$

利用极值条件(2),容易求得

$$r_{概}=n^2a_0/Z \tag{4}$$

这结果和 Bohr 量子论中圆轨道的半径公式一致.

(b) r 的平均值已在题 5.9 中普遍算出.对于本题,

$$\langle r\rangle_{n,n-1,m}=\left(n^2+\frac{n}{2}\right)a_0/Z \tag{5}$$

(c) r^2的平均值也已在题 5.9 中算出.对于本题,

$$\begin{aligned}\langle r^2\rangle_{n,n-1,m}&=\left(n^4+\frac{3}{2}n^3+\frac{1}{2}n^2\right)\left(\frac{a_0}{Z}\right)^2\\&=n^2\left(n+\frac{1}{2}\right)(n+1)\left(\frac{a_0}{Z}\right)^2\end{aligned} \tag{6}$$

因此,r 的涨落为

$$\Delta r=[\langle r^2\rangle-\langle r\rangle^2]^{\frac{1}{2}}=\left(\frac{n^3}{2}+\frac{n^2}{4}\right)^{\frac{1}{2}}a_0/Z \tag{7}$$

$$\Delta r/\langle r\rangle=\sqrt{\frac{n}{2}}\Big/\sqrt{n^2+\frac{n}{2}}=1/\sqrt{2n+1} \tag{8}$$

可见，n 越大，$\Delta r/\langle r\rangle$ 越小，量子力学的结果和 Bohr 量子化轨道的图像越加接近.

5.18 对于氢原子的 $(n, n-1, m)$ 态，求电子在经典禁区($V > E$ 的区域) 出现的概率.

解 能级 E_n 给定后，经典允许区和禁区以球面 r_n 为分界，球外为禁区. r_n 由下式决定：

$$V(r_n) = -\frac{e^2}{r_n} = E_n = \frac{-e^2}{2n^2 a_0} \tag{1}$$

求得

$$r_n = 2n^2 a_0 \tag{2}$$

它是最概然半径的 2 倍. $(n, n-1, m)$ 态波函数为

$$\psi_{n,n-1,m} = Cr^{n-1}\mathrm{e}^{-r/na_0}\mathrm{Y}_{n-1,m}(\theta,\varphi) \tag{3}$$

其中 C 为归一化常数. 容易求得

$$C^2 = \frac{1}{(2n)!}\left(\frac{2}{na_0}\right)^{2n+1} \tag{4}$$

电子在经典禁区出现的概率为

$$\begin{aligned} w &= \int_{r_n}^{\infty} (R_{n,n-1})^2 r^2 dr \\ &= C^2\left(\frac{na_0}{2}\right)^{2n+1}\int_{4n}^{\infty} x^{2n}\mathrm{e}^{-x}\mathrm{d}x \end{aligned}$$

这个积分可以用分部积分法算出，结果为

$$w = \left[1 + 4n + \frac{(4n)^2}{2!} + \frac{(4n)^3}{3!} + \cdots + \frac{(4n)^{2n}}{(2n)!}\right]e^{-4n} \tag{5}$$

例如，

$n = 1$ (基态)，$w = 13 \times \mathrm{e}^{-4} = 0.2381$

$n = 2$，$w = 297 \times \mathrm{e}^{-8} = 0.0996$

$n=3$，　　$w=7457.8\times e^{-12}=0.0458$

$n=4$，　　$w=195381\times e^{-16}=0.0220$

$n=5$，　　$w=5244270\times e^{-20}=0.0108$

$n=10$，　　$w=8.669\times 10^{13}\times e^{-40}=0.000368$

可见，n 很大时，量子力学结果和经典力学结果趋于一致. 这正是对应原理的具体体现.

5.19　对于氢原子的各 s 态($nlm=n00$)，计算 Δx、Δp_x，并讨论 $n\gg 1$ 的情形.

解　由于 s 态各向同性，所以

$$\begin{aligned}&\langle x\rangle=0, \qquad \langle p_x\rangle=0\\ &\langle x^2\rangle=\frac{1}{3}\langle r^2\rangle, \quad \langle p_x^2\rangle=\frac{1}{3}\langle p^2\rangle\end{aligned} \tag{1}$$

r^2 平均值已在题 5.9 中算出，对子 s 态，为

$$\langle r^2\rangle_{n00}=\frac{n^2}{2}(1+5n^2)a_0^2 \tag{2}$$

因此

$$\begin{aligned}\Delta x&=\sqrt{\langle x^2\rangle}=\sqrt{\langle r^2\rangle}/\sqrt{3}\\ &=\frac{n}{\sqrt{6}}\sqrt{1+5n^2}\ a_0\end{aligned} \tag{3}$$

$$\text{当 } n\gg 1, \quad \Delta x\approx\sqrt{\frac{5}{6}}\ na_0 \tag{3'}$$

p^2平均值可以利用位力定理和能级公式求出.

$$\frac{1}{2\mu}\langle p^2\rangle_{n00}=|E_n|=\frac{e^2}{2n^2a_0} \tag{4}$$

$$\langle p^2\rangle_{n00}=\frac{\mu e^2}{n^2a_0}=\frac{\hbar^2}{n^2a_0^2} \tag{5}$$

因此

$$\Delta p_x = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle} = \sqrt{\langle p^2 \rangle / 3} = \hbar / \sqrt{3}\, n a_0 \tag{6}$$

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = \sqrt{\frac{1+5n^2}{18}}\,\hbar \tag{7}$$

当 $n \gg 1$,

$$\Delta x \Delta p_x \approx \sqrt{\frac{5}{18}} n\hbar = 0.527\, n\hbar \tag{7'}$$

差不多是测不准关系规定的下限$\hbar/2$ 的 n 倍.

5.20 单价原子中价电子(最外层电子) 所受原子实(原子核及内层电子) 的作用势可以近似表示成

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} - \lambda \frac{e^2 a_0}{r^2}, \quad 0 < \lambda \ll 1 \tag{1}$$

a_0为 Bohr 半径. 求价电子的能级,并与氢原子能级作比较.

解 取守恒量完全集为(H, l^2, l_z),其共同本征函数为

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{u(r)}{r}\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) \tag{2}$$

$u(r)$ 满足径向方程

$$-\frac{\hbar}{2\mu}u'' + \left[l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r} - \lambda\frac{e^2 a_0}{r^2}\right]u = Eu \tag{3}$$

令

$$l(l+1) - 2\lambda = l'(l'+1) \tag{4}$$

式(3) 就可以化成

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}u'' + \left[l'(l'+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r}\right]u = Eu \tag{3'}$$

相当于氢原子径向方程中 l 换成 l'. 所以式(3′)的求解过程完全类似于氢原子问题. 后者能级为

$$E_n = -\frac{e^2}{2n^2a_0}, \quad n = n_r + l + 1, \quad n_r = 0,1,2,\cdots \tag{5}$$

将 l 换成 l',即得价电子的能级:

$$E_{nl} = -\frac{e^2}{2(n')^2a_0}, \quad n' = n_r + l' + 1 \tag{6}$$

通常令

$$l' = l + \Delta_l \tag{7}$$

$$n' = n_r + l + \Delta_l + 1 = n + \Delta_l \tag{8}$$

Δ_l 称为量子数 l 和 n 的"修正数". 由于 $\lambda \ll 1$,可以对式(4)作如下近似处理:

$$\begin{aligned} l(l+1) - 2\lambda = l'(l'+1) &= (l+\Delta_l)(l+\Delta_l+1) \\ &= l(l+1) + (2l+1)\Delta_l + (\Delta_l)^2 \end{aligned}$$

略去 $(\Delta_l)^2$,即得

$$\Delta_l \approx -\lambda \Big/ \left(l + \frac{1}{2}\right) \tag{9}$$

由于 $\lambda \ll 1$,所以 $|\Delta_l| \ll 1$. 因此,本题所得能级 E_{nl} 和氢原子能级仅有较小的差别,但是能级的"l 简并"已经消除. 式(6)和碱金属光谱的实验资料大体一致,尤其是,修正数 $|\Delta_l|$ 随 l 之升高而减小,这一点和实验符合得极好.

式(4)的精确解为

$$l' = -\frac{1}{2} + \left(l + \frac{1}{2}\right)\left[1 - \frac{8\lambda}{(2l+1)^2}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{10}$$

如对上式作二项式展开,保留 λ 项,略去 λ^2 以上各项,即可得到式(9).

5.21 中心力问题中，常称 $V(r)$ 和离心势之和为等效势能．记作

$$V_l(r) = V(r) + l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}$$

如 V_l 存在极小值，相应的距离 r_l 称为“平衡距离”，对于类氢离子（核电荷 Ze），$l \gg 1$ 的情形，试按下列步骤处理径向方程：

(a) 求 V_l 的极小值及平衡距离 r_l；

(b) 将 V_l 在 r_l 附近作 Taylor 展开，保留 $(r-r_l)^2$ 项；

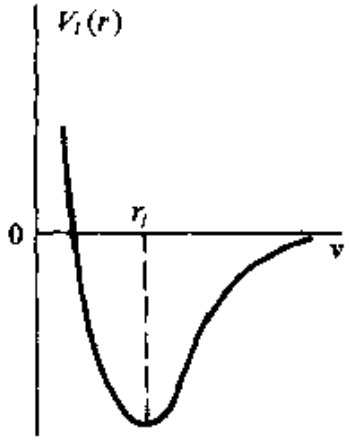


图 5.21

(c) 视电子的径向运动为 $r \sim r_l$ 附近的小振动，对于确定的 $l(l \gg 1)$，求最低能级和激发能级，并和精确解比较．

解 (a) 类氢离子的势能和等效势能为

$$V(r) = -Ze^2/r \tag{1}$$

$$V_l(r) = l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{r} \tag{2}$$

由极值条件

$$\partial V_l/\partial r = 0 \tag{3}$$

求出

$$r_l = l(l+1)a_0/Z \tag{4}$$

$$V_l(r_l) = -Z^2e^2/2l(l+1)a_0 = -Ze^2/2r_l \tag{5}$$

(b) 令 $r = r_l + \xi$，将 $V_l(r)$ 在 r_l 附近作 Taylor 展开，

$$V_l(r) = V_l(r_l+\xi) = V_l(r_l) + V_l'(r_l)\frac{\xi^2}{2!} + \cdots$$

$$= V_l(r_l) + \frac{1}{2}\mu\omega_l^2\xi^2 + \cdots \tag{6}$$

其中

$$\mu\omega_l^2 = V_l''(r_l) = 3l(l+1)\frac{\hbar^2}{\mu r_l^4} - \frac{2Ze^2}{r_l^3}$$

$$= \frac{Ze^2}{r_l^3}$$

$$\omega_l^2 = \frac{Ze^2}{\mu r_l^3} = \frac{(Ze)^4}{l^3(l+1)^3\hbar^2 a_0^2} \tag{7}$$

(c) (H, l^2, l_z) 的共同本征函数可以表示成

$$\psi = R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{u(r)}{r}Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{8}$$

$u(r)$ 满足径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2u}{dr^2} + V_l(r)u = Eu \tag{9}$$

将 V_l 的展开式(6) 代入上式，即得

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2u}{d\xi^2} + \frac{1}{2}\mu\omega_l^2\xi^2 u = [E - V_l(r_l)]u = E'u \tag{10}$$

式(10) 在形式上正是一维谐振子的能量本征方程，本征值为

$$E - V_l(r_l) = E' = \left(n_r + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_l,\ n_r = 0,1,2,\cdots \tag{11}$$

以式(7) 代入上式，即得本题所求能级公式：

$$E = V_l(r_l) + \left(n_r + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_l$$

$$= -\frac{Z^2e^2}{2a_0}\left[\frac{1}{l(l+1)} - \frac{1+2n_r}{l^{3/2}(l+1)^{3/2}}\right] = E_{n_r l} \tag{12}$$

由于利用了近似展开式(6)，所以上式只适用于 n_r 较小的情形，即“小振动”. 式(12) 的特点是，能级间距是均匀的. 可以按 $n_r = 0$、1、2、…，将它们依次记为 E_{0l}、E_{1l}、E_{2l}、….

类氢离子能级的精确解为

$$E_n = -\frac{Z^2e^2}{2n^2a_0}, \qquad n = l + n_r + 1 \tag{13}$$

现在将式(12),(13)在 $l \gg 1, n_r \ll l$ 条件下加以比较. 对于给定的 l,精确解式(13)中最低能级($n_r = 0$)为

$$E_n(n_r = 0) = E_{l+1} = -\frac{Z^2e^2}{2(l+1)^2a_0} \tag{14}$$

低激发($n_r \ll l$)能级为

$$\begin{aligned} E_n = E_{l+1+n_r} &= -\frac{Z^2e^2}{2a_0(l+1+n_r)^2} \\ &= E_{l+1}\left(1 + \frac{n_r}{l+1}\right)^{-2} \\ &\approx E_{l+1}\left(1 - \frac{2}{l+1}n_r\right) \end{aligned} \tag{15}$$

能级间距也是近似均匀的,相邻能级之差为

$$\Delta E \approx \frac{2}{l+1}|E_{l+1}| = \frac{Z^2e^2}{(l+1)^3a_0} \tag{16}$$

式(12)的最低能级为

$$\begin{aligned} E_{0l} &= -\frac{Z^2e^2}{2a_0}\left[\frac{1}{l(l+1)} - \frac{1}{l^{3/2}(l+1)^{3/2}}\right] \\ &= -\frac{Z^2e^2}{2a_0(l+1)^2}\left[\frac{l+1}{l} - \frac{\sqrt{l+1}}{l^{3/2}}\right] \end{aligned}$$

由于 $l \gg 1$,可取近似

$$\begin{aligned} \frac{l+1}{l} - \frac{\sqrt{l+1}}{l^{3/2}} &= 1 + \frac{1}{l} - \frac{1}{l}\sqrt{1+\frac{1}{l}} \\ &\approx 1 - \frac{1}{2l^2} \end{aligned}$$

因此

$$E_{0l} \approx E_{l+1}\left(1 - \frac{1}{2l^2}\right) \tag{17}$$

和式(14)很接近.式(12)的能级间距为

$$\begin{aligned}\hbar\omega_l &= \frac{Z^2e^2}{a_0[l(l+1)]^{3/2}} \\ &= \frac{Z^2e^2}{a_0(l+1)^3}\left(\frac{l+1}{l}\right)^{3/2} \\ &\approx \frac{Z^2e^2}{a_0(l+1)^3}\left(1+\frac{3}{2l}\right)\end{aligned} \tag{18}$$

和式(16)也很接近.

5.22 双原子分子中两原子的相对运动波函数(H,l^2,l_z的共同本征函数)可以表示成

$$\psi = R(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{1}{r}u(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) \tag{1}$$

其中球谐函数 Y_{lm} 描写分子的转动.$u(r)$ 满足径向方程

$$-\frac{\hbar}{2\mu}u'' + \left[V(r) + l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u = Eu \tag{2}$$

其中 μ 为约化质量,$l = 0,1,2,\cdots$ 为转动角动量量子数,$V(r)$ 为两原子的相互作用势.近似地取 $V(r)$ 为振子势能:

$$V(r) = \frac{1}{2}\mu\omega_0^2(r-R)^2 \tag{3}$$

R 为分子键长,即振动、转动完全停止时两原子核间距离.设

$$\frac{1}{2}\mu\omega_0^2R^2 \gg l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu R^2} = E_l \tag{4}$$

(E_l是 $r = R$ 时分子的转动能级),试求分子内部运动(振动和转动)能级 E 的近似表达式,并扼要说明各项的意义.

解 径向方程(2)中,等效势能为

$$V_l(r) = V(r) + l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}$$

$$= \frac{1}{2}\mu\omega_0^2(r-R)^2 + l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \tag{5}$$

在条件(4)下，必然存在平衡点 r_0，$V_l(r_0)$ 取极小值. r_0 由极值条件

$$\left.\frac{dV_l}{dr}\right|_{r=r_0} = 0 \tag{6}$$

确定如下：

$$\frac{dV_l}{dr} = \mu\omega_0^2(r-R) - l(l+1)\frac{\hbar^2}{\mu r^3}$$

$$\approx \mu\omega_0^2(r-R) - l(l+1)\frac{\hbar^2}{\mu R^3}$$

利用式(6)即得

$$r_0 \approx R + l(l+1)\frac{\hbar^2}{\mu^2\omega_0^2 R^3} \tag{7}$$

其中第二项是由于转动引起的键的伸长.

将 $V_l(r)$ 在平衡点 r_0 附近作 Taylor 展开，得到

$$V_l(r) = V_l(r_0) + \frac{1}{2}V_l''(r_0)(r-r_0)^2 + \cdots \tag{8}$$

略去 $(r-r_0)^3$ 以上各项，并令

$$x = r - r_0, \quad V_l''(r_0) = \mu\omega^2 \tag{9}$$

即得

$$V_l(r) = V_l(r_0) + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 \tag{8'}$$

代入径向方程(2)，即得

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2u}{dx^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2x^2u = [E - V_l(r_0)]u = E'u \tag{10}$$

上式形式上和一维谐振子的能量本征方程完全一样，所以

$$E - V_l(r_0) = E' = \left(\nu + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \qquad \nu = 0,1,2,\cdots \tag{11}$$

ν 为振动量子数. 由式(5)、(7) 容易求出

$$V_l(r_0) = \frac{1}{2}\mu\omega_0^2\left[l(l+1)\frac{\hbar^2}{\mu^2\omega_0^2R^3}\right]^2 + l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2} \tag{12}$$

其中

$$\frac{1}{r_0^2} = \frac{1}{R^2}\left[1 + l(l+1)\frac{\hbar^2}{\mu^2\omega_0^2R^4}\right]^{-2} \approx \frac{1}{R^2} - \frac{2l(l+1)\hbar^2}{\mu^2\omega_0^2R^6}$$

代入式(12),即得

$$V_l(r_0) \approx \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu R^2} - \frac{l^2(l+1)^2\hbar^4}{2\mu^3\omega_0^2R^6} \tag{13}$$

由式(5)、(7)、(9) 可得

$$\omega^2 = \frac{1}{\mu}V_l''(r_0) = \omega_0^2 + 3l(l+1)\frac{\hbar^2}{\mu^2r_0^4}$$

$$\omega = \omega_0\left[1 + 3l(l+1)\frac{\hbar^2}{\mu^2\omega_0^2r_0^4}\right]^{\frac{1}{2}} \approx \omega_0 + \frac{3l(l+1)\hbar^2}{2\mu^2\omega_0R^4} \tag{14}$$

其中第二项是由于转动而引起的振动频率的变化.

将式(13) 代入式(11),即得分子能级的表达式

$$E_{\nu l} \approx \left(\nu + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + E_l - \frac{l^2(l+1)^2\hbar^4}{2\mu^3\omega_0^2R^6} \tag{15}$$

$$\nu = 0,1,2,\cdots, \quad l = 0,1,2,\cdots$$
$$E_l = l(l+1)\hbar^2/2\mu R^2 \tag{16}$$

式(15)中第一项通常称为振动能级，E_l 称为转动能级，第三项则是由于分子键长可变而引起的振-转修正项[①].

5.23 双原子分子中两原子间的作用可以用 Morse 势

$$V(r) = V_0[1 - e^{-(r-R)/a}]^2 - V_0 \tag{1}$$

来描写[②]. 对于分子内部运动(相对运动)的 s 态($l = 0$)，试设法解出径向方程，确定能级公式(束缚态).

解 s 态波函数可以写成

$$\psi(r) = u(r)/r \tag{2}$$

$u(r)$ 满足径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2u}{dr^2} + V(r)u = Eu, \quad -V_0 < E < 0 \tag{3}$$

μ 为约化质量，r 为两原子核间距离.

由式(1)可知，$r = R$ 时 $V(r)$ 取极小值 $-V_0$，故 R 相当于分子的键长. 根据实验测定，$R > a$(数量级相同)，所以将 $V(r)$ 在 $r \sim R$ 附近作 Taylor 展开的办法对于本题并不适用. 试作变换

$$\xi = e^{-(r-R)/a} \tag{4}$$

则

$$\frac{d}{dr} = \frac{d\xi}{dr}\frac{d}{d\xi} = -\frac{\xi}{a}\frac{d}{d\xi}$$

式(3)变成

---

① 参看 1. 曾谨言，《量子力学》卷 I (科学出版社，1997)，§ 3.4. 2. Pauling and Wilson, Introduction to Quantum Mechanics, McGraw-Hill, N. Y., 1935, § 35c.

② 参看 P. M. Morse, *Phys. Rev.* **34**(1929), 57.

$$\xi^2\frac{d^2u}{d\xi^2}+\xi\frac{du}{d\xi}+(2\alpha^2\xi-\alpha^2\xi^2-\beta^2)u=0 \tag{5}$$

其中

$$\alpha=\frac{a}{\hbar}\sqrt{2\mu V_0}\,,\quad \beta=\frac{a}{\hbar}\sqrt{-2\mu E} \tag{6}$$

由定义式(4)易见

$r\to\infty,\quad \xi\to 0$

$r\to R,\quad \xi\to 1$

$r\to 0,\quad \xi\to e^{R/a}\gg 1$

近似地可以认为 $r\to 0$ 相当于 $\xi\to\infty$.

根据 $\xi\to 0,\infty$ 处式(5)的渐近性质，令

$$u=\xi^\beta e^{-\alpha\xi}F(\xi) \tag{7}$$

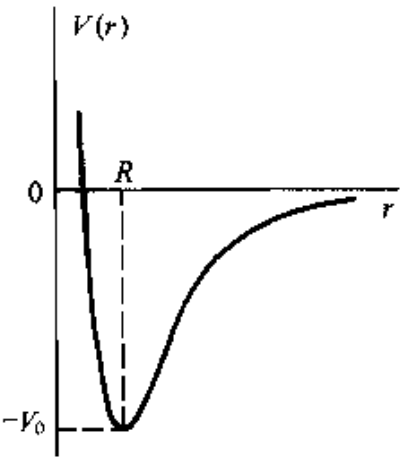


图 5.23

代入式(5)，得到 $F(\xi)$ 满足的方程

$$\xi\frac{d^2F}{d\xi^2}+(2\beta+1-2\alpha\xi)\frac{dF}{d\xi}+(\alpha+2\alpha\beta-2\alpha)F=0 \tag{8}$$

再令 $\eta=2\alpha\xi$，上式就变成合流超几何方程

$$\eta\frac{d^2F}{d\eta^2}+(2\beta+1-\eta)\frac{dF}{d\eta}-\left(\beta+\frac{1}{2}-\alpha\right)F=0 \tag{9}$$

式(9)当 $\eta\to 0(\xi\to 0,r\to\infty)$ 能使 $u\to 0$ 的解为

$$F=F\left(\beta+\frac{1}{2}-\alpha,2\beta+1,2\alpha\xi\right) \tag{10}$$

为了保证 $\xi\to\infty$ 处 $u\to 0$，合流超几何级数[式(10)]必须中断成 ν 次多项式，其条件为

$$\beta+\frac{1}{2}-\alpha=-\nu,\quad \nu=0,1,2,\cdots \tag{11}$$

即

$$\beta = \alpha - \left(\nu + \frac{1}{2}\right) \tag{11'}$$

代入式(6),即得能级公式

$$\begin{aligned} E_\nu &= -\beta^2 \frac{\hbar^2}{2\mu a^2} = -\frac{\hbar^2}{2\mu a^2}\left[\alpha - \left(\nu + \frac{1}{2}\right)\right]^2 \\ &= \left(\nu + \frac{1}{2}\right)\frac{\hbar}{a}\sqrt{\frac{2V_0}{\mu}} - V_0 - \left(\nu + \frac{1}{2}\right)^2 \frac{\hbar^2}{2\mu a^2} \\ &= \left(\nu + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega - V_0 - \left(\nu + \frac{1}{2}\right)^2 \frac{\hbar^2}{2\mu a^2} \end{aligned} \tag{12}$$

其中 $\omega = \sqrt{2V_0/\mu a^2}$. 上式中第一项相当于谐振动能级,第三项为 $V(r)$ 中的非谐成分引起的能级修正. 式(12) 仅当 ν 不太大时才成立,而且必须 $V_0 a^2 > \hbar^2/32\mu$,以保证 $E_\nu > -V_0$.

5.24 质量为 μ 的粒子在"球方势阱"中运动,

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r < a \\ V_0 > 0, & r \geqslant a \end{cases} \tag{1}$$

只考虑束缚态($0 < E < V_0$). 设 V_0 由小到大逐渐变化,

(a) 求出现第一个束缚态时 $V_0 a^2$ 之值;

(b) 对角量子数 l 的每一个值($l = 0,1,2,\cdots$),求出现一个新的束缚态(相应能级 $E_{nl} \approx V_0 - 0$) 的条件;

(c) 求各能级出现的先后次序;

(d) 对于很大的 V_0 值,估算束缚态总数.

解 作为中心力问题,可以取束缚态波函数为 (H, l^2, l_z) 的共同本征函数,写成

$$\psi = R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{2}$$

径向方程为

$$R'' + \frac{2}{r}R' + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2}(E - V) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R = 0 \qquad (3)$$

当 V_0 由小到大逐渐变化，出现新束缚态时 $E \approx V_0$，上式成为

$$R'' + \frac{2}{r}R' + \left[\frac{2\mu V_0}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R = 0,\ r < a(\text{阱内}) \qquad (4a)$$

$$R'' + \frac{2}{r}R' - \frac{l(l+1)}{r^2}R = 0,\ r > a(\text{阱外}) \qquad (4b)$$

阱内方程(4a)正是球 Bessel 方程，物理上允许的解为球 Bessel 函数：

$$R(r) = j_l(k_0 r),\quad k_0 = \sqrt{2\mu V_0}/\hbar \qquad (5a)$$

阱外方程(4b)的解为

$$R(r) = C/r^{l+1} \qquad (5b)$$

(另一解 r^l 不符合"$r \to \infty$ 处 $R \to 0$"的束缚态边界条件，舍去.)对于阱外波函数(5b)，显然有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}[r^{l+1}R(r)] = 0,\quad r \geqslant a \qquad (6)$$

在 $r = a$ 处，R 及 R' 均应连续，因此对于阱内波函数(5a)，当 $r \to a$，也应满足条件(6)，即

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}[r^{l+1}j_l(k_0 r)]_{r=a} = 0 \qquad (6')$$

利用公式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}[x^{l+1}j_l(x)] = x^{l+1}j_{l-1}(x)$$

式(6')可以化成

$$\boxed{j_{l-1}(k_0 a) = 0} \qquad (7)$$

这就是出现一个新束缚态(角量子数 l,能级 $E_{nl} \approx V_0$) 的条件.

第一个束缚态 $l = 0$,考虑到

$$j_{-1}(k_0 a) = \frac{\cos k_0 a}{k_0 a}$$

故出现一条 s 态($l = 0$) 新能级($E \approx V_0$) 的条件为

$$\cos k_0 a = 0, \quad k_0 a = \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \frac{5\pi}{2}, \cdots \tag{8}$$

出现第一个束缚态时,$k_0 a = \pi/2$,即

$$\boxed{V_0 a^2 = \pi^2 \hbar^2 / 8\mu} \tag{9}$$

当 V_0 逐渐增大,每当满足式(7),就出现一条新能级 $E_{nl} \approx V_0$,根据球 Bessel 函数 $j_l(x)$ 的零点数值,可以确定各能级的出现次序为

$$1s, 1p, 1d, 2s, 1f, 2p, 1g, 2d, 3s, 1h, 2f, 1i, 3p,$$
$$2g, 1k, 3d, 4s, \cdots$$

各光谱符号代表之 l 值为

l	0	1	2	3	4	5	6	7
字母	s	p	d	f	g	h	i	j

V_0 很大时,可按"相空间中每 h^3 范围有一个束缚态"来估算束缚态总数. 处于束缚态的粒子,在阱内的最大动量为

$$p_0 = \hbar k_0 = \sqrt{2\mu V_0} \tag{10}$$

因此,束缚态所占相空间总范围为

$$\frac{4\pi}{3} a^3 \cdot \frac{4\pi}{3} p_0^3 = \frac{16}{9} \pi^2 (a \hbar k_0)^3 = \Omega$$

束缚态总数为

$$N \approx \Omega/(2\pi\hbar)^3 = \frac{4\pi^2}{9}\left(\frac{ak_0}{\pi}\right)^3$$

$$= \frac{2\pi^2}{9}\left(\frac{a}{\pi\hbar}\right)^3 (2\mu V_0)^{3/2} \tag{11}$$

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(注意能级 E_{nl} 的简并度为 $2l+1$) 为 99，而由式 (11) 则得 $N \approx 94$，二者确很接近①.

5.25 氘核由质子和中子结合而成，是质子 - 中子体系唯一的束缚态. 根据实验测定，结合能为 2.23 MeV. 如 n-p 作用势近似地用球方势阱表示：

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r < a \\ 0, & r \geqslant a \end{cases} \tag{1}$$

求力程 a 和作用强度 V_0 的数值关系.

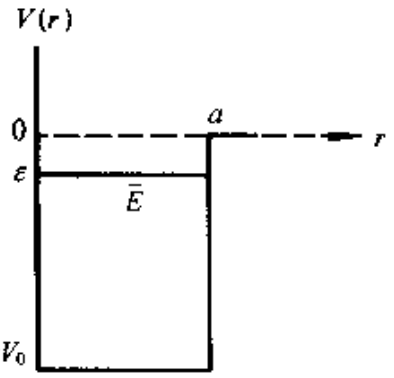


图 5.25

解 n-p 体系既然只有唯一的束缚态，应该就是基态，$l = 0$. 也就是说，V_0a^2 的值，仅够形成一个 s 态能级，而不足以形成 p 态能级. 根据上题讨论，可知 V_0a^2 比 $\pi^2\hbar^2/8\mu$ 稍大. 作为粗略估算，可即取

$$a^2 \approx \pi^2\hbar^2/8\mu V_0 = \pi^2(\hbar c)^2/8\mu c^2 V_0. \tag{2}$$

其中

$$\mu = \frac{m_n m_p}{m_n + m_p}, \qquad 2\mu c^2 = 939\text{MeV}$$

---

① 本题参看 Landau 等，《量子力学》(高等教育出版社，1980)，§ 33.

$$\hbar c = 197\text{MeV} \cdot \text{fm}$$

由式(2)给出的 $V_0 - a$ 数值关系如下表：

V_0(MeV)	30	25	20
a(fm)	1.84	2.02	2.26

下面作比较精确的计算. n-p 体系相对运动的 s 态波函数可以表示成

$$\psi(r) = u(r)/r \tag{3}$$

$u(r)$ 满足径向方程

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}[E - V(r)]u = 0, \qquad -V_0 < E < 0 \tag{4}$$

以式(1)代入式(4),即得

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2} + \alpha^2 u = 0, \qquad r < a \tag{5a}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2} - \beta^2 u = 0, \qquad r \geqslant a \tag{5b}$$

其中

$$\alpha = \sqrt{2\mu(V_0 + E)}/\hbar, \quad \beta = \sqrt{-2\mu E}/\hbar \tag{6}$$

边界条件为

$$\text{当} \quad r \to 0 \text{时}, \quad u \to 0; \quad \text{当} r \to \infty \text{时}, \quad u \to 0 \tag{7}$$

满足边界条件(7)的式(5)的解为

$$u = A\sin\alpha r, \qquad r < a \tag{8a}$$

$$u = Be^{-\beta r}, \qquad r \geqslant a \tag{8b}$$

利用 $r = a$ 处 u'/u 的连续条件,容易求得能级方程

$$\cot\alpha a = -\beta/\alpha \tag{9}$$

式(9)和下式等价：

$$\sin^2\alpha a = \frac{\alpha^2}{\alpha^2+\beta^2} = 1 + \frac{E}{V_0} \tag{9'}$$

本题能级值已由实验给出，$E = -2.23\text{MeV}$，则指定一个V_0值，由式(6)就可以算出α，再由式(9')算出αa，就可求出相应的a值. 数值结果如下表(注意，$\pi/2 < \alpha a < \pi$)

V_0(MeV)	30	25	20
a(fm)	2.26	2.53	2.92

5.26 有一种关于基本粒子的非常简单的"袋"模型，将介子描述成限制在弹性口袋中的夸克 - 反夸克态. 袋为球形，半径(可变)R，表面张力系数 $\sigma = 50\text{MeV}/(\text{fm})^2$. 夸克和反夸克均作为非相对论粒子处理，静质量取为 $200\text{MeV}/c^2$，不考虑相互作用. (a)当R固定，估算夸克 - 反夸克体系基态能量(不包括静止质量)；(b)允许R变化，计算基态的"袋"半径，并和公认的介子大小作比较.

解 当R固定时，夸克和反夸克(质量均为m)可以认为是在无限深球形势阱中运动，基态($l = 0$)能级为

$$E_1 = \pi^2\hbar^2/2mR^2 \tag{1}$$

因此体系的基态能量为

$$E_0(R) = 2E_1 = \pi^2\hbar^2/mR^2 \tag{2}$$

当R可变，还应该考虑弹性袋的表面能

$$E_\sigma(R) = \sigma 4\pi R^2 \tag{3}$$

R的取值应使 $E_0(R) + E_\sigma(R)$ 为极小. 由极值条件

$$\frac{\partial}{\partial R}(E_0 + E_\sigma) = 0 \tag{4}$$

求得

$$R = \left(\frac{\pi\hbar^2}{4m\sigma}\right)^{1/4} = \left(\frac{\pi\hbar^2c^2}{4mc^2\sigma}\right)^{1/4}$$

$$= \left[\frac{\pi}{4} \times \frac{(197\text{MeV} \cdot \text{fm})^2}{200\text{MeV} \times 50\text{MeV}/(\text{fm})^2}\right]^{1/4}$$

$$\approx 1.3\text{fm}$$

公认的基本粒子的线度正是这个数量级.

5.27 质量为 μ 的粒子在球壳 δ 势阱

$$V(r) = -V_0\delta(r-a), \quad V_0 > 0, a > 0 \tag{1}$$

中运动,求存在束缚态所需的最小 V_0 值.

解 基态为 s 态($l=0$),波函数可以写成

$$\psi(r) = u(r)/r \tag{2}$$

$u(r)$ 满足径向方程

$$u'' + \frac{2\mu E}{\hbar^2}u + \frac{2\mu V_0}{\hbar^2}\delta(r-a)u = 0 \tag{3}$$

由于 $r \to \infty$ 处 $V(r) \to 0$,所以束缚态 $E < 0$. 令

$$\beta = \sqrt{-2\mu E}/\hbar \tag{4}$$

式(3) 可以改写成

$$u'' - \beta^2 u + \frac{2\mu V_0}{\hbar^2}\delta(r-a)u = 0 \tag{3'}$$

边界条件为

$$r \to 0, \infty \text{ 处}, \qquad u \to 0$$

在 $r \sim a$ 附近对式(3′)积分，可得 u' 的跃变条件(参看题 2.1)

$$u'(a+0) - u'(a-0) = -\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}u(a) \tag{5}$$

亦即

$$\frac{u'}{u}\Big|_{r=a-0}^{r=a+0} = -\frac{2\mu V_0}{\hbar^2} \tag{5'}$$

在 $r \neq a$ 处，式(3′)即

$$u'' - \beta^2 u = 0 \tag{3''}$$

在 $r > a$ 区域，满足无限远处边界条件的解为

$$u = Ce^{-\beta r}, \quad r > a \tag{6}$$

因此

$$\left(\frac{u'}{u}\right)_{r=a+0} = -\beta \tag{7}$$

如 V_0 之值刚够形成第一个束缚态，能级必为 $E = 0^-$，这时 $\beta = 0$，式(3″)成为

$$u'' = 0. \quad (E \to 0^-) \tag{8}$$

式(7)成为

$$\left(\frac{u'}{u}\right)_{r=a+0} = 0. \quad (E \to 0^-) \tag{7'}$$

$E \to 0^-$ 时，式(8)[满足边界条件 $u(0) = 0$ 的]在 $r < a$ 区域的解为

$$u = Ar, \quad r < a, \quad (E \to 0\ ) \tag{9}$$

因此

$$\left(\frac{u'}{u}\right)_{r=a-0} = \frac{1}{a}. \quad (E \to 0^-) \tag{10}$$

将式(7′)、(10)代入式(5′)即得

$$V_0 = \hbar^2/2\mu a \tag{11}$$

此即存在束缚态所需要小 V_0 值，相应能级为 $E = 0^-$.

5.28 求二维和三维中心力场能量本征值问题的对应关系. 对于氢原子和各向同性谐振子，利用已知的三维问题能级公式，导出相应的二维问题的能级公式①.

解 众所周知，在三维中心力场问题中，(H, l^2, l_z) 的共同本征函数可以表示成

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{u(r)}{r}Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{1}$$

$u(r)$ 满足径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2} + \left[V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u = Eu \tag{2}$$

二维中心力场的能量本征方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi + V(\rho)\psi = E'\psi \tag{3}$$

Laplace 算符 ∇^2 的平面极坐标表示式为

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \tag{4}$$

$\left(H, l_z = -\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right)$ 的共同本征函数可以表示成

$$\psi(\rho,\varphi) = R(\rho)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\Lambda\varphi} \tag{5}$$

其中 $\Lambda = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$. $R(\rho)$ 满足径向方程

---

① 更系统的讨论，参见曾谨言，《量子力学》卷 I，§6.6，科学出版社，1997.

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}-\frac{\Lambda^2}{\rho^2}\right)R+V(\rho)R=E'R \tag{6}$$

令

$$R(\rho)=v(\rho)/\rho^{1/2} \tag{7}$$

可得 $v(\rho)$ 满足的方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2v}{\mathrm{d}\rho^2}+\left[V(\rho)+\left(\Lambda^2-\frac{1}{4}\right)\frac{\hbar^2}{2\mu\rho^2}\right]v=E'v \tag{8}$$

式(2)和(8)的结构完全相似,其对应关系为

$$r-\rho,\quad u-v,\quad l-\left(|\Lambda|-\frac{1}{2}\right),\quad E-E'$$

由此可见,如将三维中心力场能级公式中的量子数 l 换成 $|\Lambda|-\frac{1}{2}$,即得相应的二维中心力场能级公式.

例如,三维氢原子,$V=-e^2/r$,束缚态能级为

$$E=-\frac{e^2}{2n^2a_0},\qquad a_0=\frac{\hbar^2}{\mu e^2}\ (\text{Bohr 半径}) \tag{9}$$

$$n=n_r+l+1=1,2,3,\cdots$$

其中 $n_r=0,1,2,\cdots$ 为径向量子数,和角量子数 l 互相独立,n_r 出现于径向方程(2)的求解过程.仿此,对子二维氢原子,$V=-e^2/\rho$,由式(8)求解,必然得出束缚态能级为

$$E'=-e^2/2a_0\left(n_\rho+|\Lambda|+\frac{1}{2}\right)^2 \tag{10}$$

其中 $n_\rho=0,1,2,\cdots$ 为径向量子数.

又如,三维各向同性谐振子,$V=\frac{1}{2}\mu\omega^2r^2$,能级为

$$E=\left(N+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega,\quad N=l+2n_r=0,1,2,\cdots \tag{11}$$

其中，$n_r = 0,1,2,\cdots$ 为径向量子数. 仿此，对于二维各向同性谐振子，$V = \frac{1}{2}\mu\omega^2\rho^2$，能级公式应为

$$E' = (2n_\rho + |A| + 1)\hbar\omega \tag{12}$$

其中 $n_\rho = 0,1,2,\cdots$ 为径向量子数. 式(12) 和题 3.9 的结果一致(在题 3.9 中 A 记作 m，n_ρ记作 n).

第六章　角动量

6.1　以 $\boldsymbol{l}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ 表示轨道角动量. 证明：在 l_z 的任何一个本征态下，l_x 和 l_y 的平均值为 0.

证　设 ψ_m 为 l_z 的本征态，属于本征值 $m\hbar$，则

$$l_z|\psi_m\rangle = m\hbar|\psi_m\rangle, \qquad \langle\psi_m|l_z = m\hbar\langle\psi_m| \tag{1}$$

利用基本对易式

$$l_yl_z - l_zl_y = \mathrm{i}\hbar l_x \tag{2}$$

在 ψ_m 态下求平均值，即得

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\langle l_x\rangle &= \langle\psi_m|l_yl_z|\psi_m\rangle - \langle\psi_m|l_zl_y|\psi_m\rangle \\ &= m\hbar\langle\psi_m|l_y|\psi_m\rangle - m\hbar\langle\psi_m|l_y|\psi_m\rangle = 0\end{aligned} \tag{3}$$

类似地，将对易式

$$l_zl_x - l_xl_z = \mathrm{i}\hbar l_y,$$

在 ψ_m 态下求平均值，可证 $\langle l_y\rangle=0$.

注意，在证明中只利用了角动量的基本对易式，并未用到算符和波函数的具体构造式. 因此，所得结论适用于任何一种角动量，即：在角动量 $\boldsymbol{J}$ 的任何一个直角坐标分量(J_z)的本征态下，$\boldsymbol{J}$ 的另外两个分量(J_x,J_y)的平均值均为 0.

6.2　对于(l^2,l_z)的共同本征态 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$，计算 l_x^2 和 l_y^2 的平均值，以及 Δl_x、Δl_y，并验证测不准关系.

解　本征态 Y_{lm} 的态矢量记为 $|lm\rangle$，满足本征方程

$$\boldsymbol{l}^2|lm\rangle = l(l+1)\hbar^2|lm\rangle, \tag{1}$$

$$l_z|lm\rangle = m\hbar|lm\rangle, \langle lm|l_z = m\hbar\langle lm| \tag{2}$$

利用基本对易式

$$\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{l} = \mathrm{i}\hbar\boldsymbol{l} \tag{3}$$

可得算符关系

$$\mathrm{i}\hbar l_x^2 = (l_y l_z - l_z l_y)l_x = l_y(l_x l_z + \mathrm{i}\hbar l_y) - l_z l_y l_z$$

$$= \mathrm{i}\hbar l_y^2 + l_y l_x l_z - l_z l_y l_x \tag{4}$$

将上式在$|lm\rangle$态下求平均，因 l_z 作用于$|lm\rangle$或$\langle lm|$后变成本征值 $m\hbar$，后二项对平均值的贡献互相抵消，因此

$$\langle l_x^2\rangle = \langle l_y^2\rangle \tag{5}$$

由于

$$\langle l_x^2 + l_y^2\rangle = \langle l^2 - l_z^2\rangle = [l(l+1) - m^2]\hbar^2$$

所以

$$\boxed{\langle l_x^2\rangle = \langle l_y^2\rangle = \frac{1}{2}[l(l+1) - m^2]\hbar^2} \tag{6}$$

上题已证$\langle l_x\rangle = \langle l_y\rangle = 0$，因此 l_x, l_y 的涨落为

$$\Delta l_x = \Delta l_y = \langle l_x^2\rangle^{1/2} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\sqrt{l(l+1) - m^2} \tag{7}$$

$$\Delta l_x \cdot \Delta l_y = \frac{1}{2}[l(l+1) - m^2]\hbar^2 \tag{8}$$

而测不准关系给出

$$\Delta l_x \cdot \Delta l_y \geqslant \frac{1}{2}|\langle [l_x, l_y]\rangle| = \frac{1}{2}|m|\hbar^2 \tag{9}$$

由于 $l \geqslant |m|$，式(8)和(9)是一致的. 当 $|m| = l$，式(9)中的等号成立.

6.3 轨道角动量 $\boldsymbol{l}$ 的三个分量 l_x、l_y、l_z 是互相不对易的，它们有没有共同本征态？

解 如果存在 $\boldsymbol{l}$ 三个分量的共同本征态，则根据题 6.1，由于它是 l_z 的本征态，l_x 和 l_y 的平均值必须为 0，而平均值等于本征值，因此 l_x 和 l_y 的本征值必须为 0. 同样，l_z 的本征值也应为 0. 因而

$$\boldsymbol{l}\psi = 0,\ \boldsymbol{l}^2\psi = \boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{l}\psi = 0 \tag{1}$$

满足这条件的波函数只有

$$\psi = \mathrm{Y}_{00} = 1/\sqrt{4\pi} \tag{2}$$

如果还考虑径向变量 r，则

$$\psi = f(r) \tag{3}$$

f 为任意函数.

6.4 在 $l=1(l^2=2\hbar^2)$ 的情形下，证明：$l_z=0$ 的本征态，$l_x=0$ 的本征态以及 $l_y=0$ 的本征态互相正交.

证 $l=1$ 时，$l_z=0$ 的状态即 $|lm\rangle = |1\ 0\rangle$，根据题 6.2 的计算，在这态下 l_x^2 的平均值为

$$\langle 1\ 0|l_x^2|1\ 0\rangle = \frac{1}{2}[l(l+1) - m^2]\hbar^2 = \hbar^2 \tag{1}$$

由于 $l=1$ 时 l_x 的本征值只能是 $\hbar$、0、$-\hbar$，故知 $|1\ 0\rangle$ 中只包含 $l_x=\pm\hbar$ 这两种本征态，而没有 $l_x=0$ 的本征态成分，所以

$$\langle l=1, l_z=0|l=1, l_x=0\rangle = 0 \tag{2}$$

同理可证

$$\langle l=1, l_x=0 | l=1, l_y=0\rangle = 0$$

$$\langle l=1, l_x=0 | l=1, l_y=0\rangle = 0$$

6.5 限于 $l=1(l^2=2\hbar^2)$，求(l^2, l_z)的共同本征函数，表示成球谐函数 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$的线性叠加.

解 $l=1$ 时，l_z 的本征值为 0 及$\pm\hbar$. 由 x、y、z 的轮换对称性可知 l_x(以及 l_y)的本征值也是 0 及$\pm\hbar$. 相应的(l^2, l_z)的共同本征函数如记为 ϕ_{11}、ϕ_{10}、ϕ_{1-1}，它们可以利用(l^2, l_z)的共同本征函数 Y_{11}、Y_{10}、Y_{1-1}的具体函数形式，用 x、y、z 轮换的方法求出. 当

$$x \to y, y \to z, z \to x$$

有

$$l_z \to l_y, l_y \to l_x, l_x \to l_z, l^2 \text{ 不变}$$

已知

$$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{i\varphi} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{x+iy}{r} \tag{1a}$$

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{z}{r} \tag{1b}$$

$$Y_{1-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{-i\varphi} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{x-iy}{r} \tag{1c}$$

经过 x、y、z 轮换，成为

$$Y_{11} \to -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{y+iz}{r} = -i\left(\frac{1}{2}Y_{11} + \frac{1}{\sqrt{2}}Y_{10} + \frac{1}{2}Y_{1-1}\right) \tag{2a}$$

$$Y_{10} \to \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{x}{r} = \frac{1}{\sqrt{2}}(-Y_{11} + Y_{1\,-1}) \qquad (2b)$$

$$Y_{1\,-1} \to \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{y - iz}{r} = i\left(\frac{1}{2}Y_{11} - \frac{1}{\sqrt{2}}Y_{10} + \frac{1}{2}Y_{1\,-1}\right) \qquad (2c)$$

选择适当的相因子后，可取

$$\phi_{11} = \frac{1}{2}Y_{11} + \frac{1}{\sqrt{2}}Y_{10} + \frac{1}{2}Y_{1\,-1}, \qquad (l_x = \hbar) \qquad (3a)$$

$$\phi_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{11} - Y_{1\,-1}), \qquad (l_x = 0) \qquad (3b)$$

$$\phi_{1,-1} = \frac{1}{2}Y_{11} - \frac{1}{\sqrt{2}}Y_{10} + \frac{1}{2}Y_{1\,-1}, \quad (l_x = -\hbar) \qquad (3c)$$

它们都已经归一化. 注意 ϕ_{10} 中没有 Y_{10} 的成分(参看上题).

6.6 对于 (l^2, l_z) 的共同本征态 Y_{10}，求 l_x 的可能测值及相应概率.

解一 l_x 的可能测量值即本征值 $\hbar$、0、$-\hbar$. 设相应概率为 w_1、w_0、w_{-1}. 计算这三个概率，可以设法找三个方程. 首先，总概率为 1，因此已有

$$w_1 + w_0 + w_{-1} = 1 \qquad (1)$$

其次，题 6.1 已经证明，l_z 的本征态下 l_x 平均值为 0，因此

$$\langle l_x \rangle = w_1\hbar + w_{-1}(-\hbar) = (w_1 - w_{-1})\hbar = 0 \qquad (2)$$

即

$$w_1 = w_{-1} \qquad (2')$$

还有，根据题 6.2，应有

$$\langle l_x^2\rangle_{10}=\frac{1}{2}(2-0)\hbar^2=\hbar^2 \tag{3}$$

因此

$$\langle l_x^2\rangle=w_1\hbar^2+w_{-1}(-\hbar)^2=(w_1+w_{-1})\hbar^2=\hbar^2$$

即

$$w_1+w_{-1}=1 \tag{3'}$$

由式(1)、(2')、(3')容易解出

$$w_1=w_{-1}=\frac{1}{2},\qquad w_0=0 \tag{4}$$

结论：在 Y_{10}态下，l_x 的可能测值为$\pm\hbar$，概率各为 1/2.

解二 利用上题结果，可以将 Y_{10}展开为

$$Y_{10}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{11}-\phi_{1,-1}) \tag{5}$$

各项系数的绝对值平方，即 l_x 取相应本征值的概率，因此结论仍为：$l_x=\pm\hbar$，概率均为 1/2.

6.7 粒子处于状态

$$\psi=C(x+y+2z)e^{-\alpha r},\qquad \alpha>0 \tag{1}$$

C 为归一化常数. 求(a)l^2 的取值；(b)l_z 的平均值；(c) $l_z=\hbar$的概率；(d)l_x 的可能取值及相应概率.

解一 由球谐函数 $Y_{1m}(m=1,0,-1)$的具体函数形式可知，ψ 可以展开为

$$\psi=re^{-\alpha r}(C_1Y_{11}+C_0Y_{10}+C_{-1}Y_{1-1}) \tag{2}$$

其中 Y_{10}项来自式(1)中 z 项，Y_{11}和 $Y_{1,-1}$项来自$(x+y)$项.

(a) 显然 ψ 是 l^2 的本征态，$l=1$，$l^2=2\hbar^2$.

(b) 由于 ψ 是实函数，所以

$$\langle l_z\rangle = -\mathrm{i}\hbar\int\psi\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi\mathrm{d}^3x = \text{纯虚数}$$

但因 l_z 是 Hermite 算符，其平均值应该是实数，由这“矛盾”可以推论出

$$\langle l_z\rangle = 0 \tag{3}$$

事实上，上式中对 φ 的积分可以立即积出，再利用 φ 的单值性条件，仍得同样的结论.

(c) 设 l_z 取本征值 $\hbar$、0、$-\hbar$ 的概率分别为 w_1、w_0、w_{-1}，易见 $w_1=w_{-1}$.

式(2)中 Y_{10} 项即式(1)中 z 项. 式(1)中 x、y、z 项显然互相正交，三项的概率波幅比为 1∶1∶2，强度比为 1∶1∶4，即 z 项占 4/6，x 项和 y 项各占 1/6. 因此式(2)中 Y_{10} 项成分为 4/6，Y_{11} 和 $Y_{1,-1}$ 项成分各为 1/6. 因此，$l_z=\hbar$ 的概率为 $w_1=1/6$.

(d) $l=1$ 时，l_x 的可能测值为 $\hbar$、0、$-\hbar$，由 x、y、z 及 l_x、l_y、l_z 的轮换关系及(c)的分析结果可知，ψ 中 x 项相当于 $l_x=0$，其概率为 1/6. 由于 ψ 为实函数，$\langle l_x\rangle=0$（$\langle l_y\rangle$ 也等于 0，利用 l_z 和 l_y 的直角坐标算符构造形式即可看出），因此 $l_x=\pm\hbar$ 的概率相等. 故结论为

$l_x=0$，　概率 1/6；　$l_x=\hbar,-\hbar$，　概率各为 5/12.

解二　利用 Y_{1m} 的具体函数形式，不难将展开式(2)彻底求出，为

$$\psi = C(x+y+2z)\mathrm{e}^{-\alpha r}$$

$$= Cr\mathrm{e}^{-\alpha r}\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\left[\frac{\mathrm{i}-1}{\sqrt{2}}Y_{11}+2Y_{10}+\frac{\mathrm{i}+1}{\sqrt{2}}Y_{1-1}\right]$$

因此

$$|C_1|^2 : |C_0|^2 : |C_{-1}|^2 = 1 : 4 : 1$$

亦即

$$l_x = \hbar, 0, -\hbar, \text{概率分别为 } 1/6、4/6、1/6,$$

$$\langle l_x \rangle = \frac{1}{6} \cdot \hbar + \frac{4}{6} \cdot 0 + \frac{1}{6} \cdot (-\hbar) = 0$$

式(2)中三项均属于 $l=1$,所以 $l^2 = l(l+1)\hbar^2 = 2\hbar^2$.

利用题 6.5 结果,可将 ψ 展开为

$$\psi = Cre^{-\alpha r}\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\left[\frac{i+2}{\sqrt{2}}\phi_{11} - \phi_{10} + \frac{i-2}{\sqrt{2}}\phi_{1-1}\right] \tag{4}$$

所以 $l_x = \hbar、0、-\hbar$的概率之比为 $\frac{5}{2} : 1 : \frac{5}{2}$,亦即 $l_x = \hbar、0、-\hbar$的概率分别为 5/12,1/6,5/12.

6.8 将(l^2, l_z)的共同本征态 Y_{lm}记为$|lm\rangle$,证明

$$\sum_m \left|\langle 0\ 0 \left|\frac{r}{r}\right| 1m\rangle\right|^2$$

$$= \sum_m \left|\int Y_{00}\frac{r}{r}Y_{1m}(\theta,\varphi)d\Omega\right|^2 = 1 \tag{1}$$

证 根据球谐函数的递推公式①,

$$\frac{r}{r}Y_{00} \to Y_{1m}, \qquad m = 1, 0, -1$$

因此,利用球谐函数的正交性,即得

$$\langle l\ m|\frac{r}{r}|0\ 0\rangle = 0, \quad l \neq 1 \tag{2}$$

利用公式

① 参看曾谨言,《量子力学》卷 I (科学出版社,1997),附录四,p. 637.

$$\sum_{l,m} |l\ m\rangle\langle l\ m| = 1 \tag{3}$$

即得

$$1 = \langle 0\ 0|0\ 0\rangle = \langle 0\ 0|\ \frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}|0\ 0\rangle$$

$$= \sum_{l,m}\langle 0\ 0|\ \frac{\boldsymbol{r}}{r}|lm\rangle\cdot\langle l\ m|\ \frac{\boldsymbol{r}}{r}|0\ 0\rangle$$

$$= \sum_{m}\langle 0\ 0|\ \frac{\boldsymbol{r}}{r}|1m\rangle\cdot\langle 1m|\ \frac{\boldsymbol{r}}{r}|0\ 0\rangle$$

$$= \sum_{m}\left|\langle 0\ 0|\ \frac{\boldsymbol{r}}{r}|1m\rangle\right|^2$$

此即式(1).

读者不难利用 Y_{lm}的具体函数形式,具体算出各矩阵元$\langle 0\ 0|\ \frac{\boldsymbol{r}}{r}|1\ m\rangle$,从而验证式(1).

6.9 考虑$|l\ m\rangle$态矢量空间中 $l=1$ 的子空间,

(a) 写出(l^2,l_z)表象中 l_x 的矩阵表示式;

(b) 利用题 6.5 求得的(l^2,l_x)共同本征函数,写出联系(l^2,l_z)表象和(l^2,l_z)表象的幺正变换矩阵 S;

(c) 利用幺正变换矩阵 S,求出(l^2,l_z)表象中 l_y 的表示式;

(d) 求出(l^2,l_z)表象中 l_y 的表示式;

(e) 求(l^2,l_y)的共同本征函数,表示成 Y_{lm}的线性叠加.

解 (a) $l=1$ $(l^2=2\hbar^2)$时,l 的任何一个分量的本征值都是$\hbar$、0、$-\hbar$,在(l^2,l_z)表象中 l_x 自身的矩阵表示显然是

$$l'_x = \begin{bmatrix}\hbar & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -\hbar\end{bmatrix} = \hbar\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{bmatrix} \tag{1}$$

(b) 根据题 6.5 的计算，$l=1$ 时，l_x 的本征函数为

$$\phi_{11}=\frac{1}{2}Y_{11}+\frac{1}{\sqrt{2}}Y_{10}+\frac{1}{2}Y_{1-1},\quad (l_x=\hbar)$$

$$\phi_{10}=\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{11}-Y_{1-1}),\quad (l_x=0) \tag{2}$$

$$\phi_{1-1}=\frac{1}{2}Y_{11}-\frac{1}{\sqrt{2}}Y_{10}+\frac{1}{2}Y_{1-1},\quad (l_x=-\hbar)$$

写成(l^2,l_z)表象中的态矢量，就是

$$\phi_{11}=\begin{bmatrix}\frac{1}{2}\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{2}\end{bmatrix},\qquad \phi_{10}=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\ 0\\ -\frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}$$

$$\phi_{1-1}=\begin{bmatrix}\frac{1}{2}\\ -\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{2}\end{bmatrix} \tag{3}$$

它们就是变换矩阵 S 的第 1、2、3 列，因此

$$S=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1 & \sqrt{2} & 1\\ \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2}\\ 1 & -\sqrt{2} & 1\end{bmatrix} \tag{4}$$

显然，$S^{+}=S$. 容易验证，$S^{+}S=1$.

(c) 按照表象变换公式，(l^{2},l_{z})表象中 l_{x} 的矩阵表示为

$$l_{x}=Sl'_{x}S^{+}=\frac{\hbar}{4}\begin{bmatrix}1&\sqrt{2}&1\\\sqrt{2}&0&-\sqrt{2}\\1&-\sqrt{2}&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{bmatrix}$$

$$\cdot\begin{bmatrix}1&\sqrt{2}&1\\\sqrt{2}&0&-\sqrt{2}\\1&-\sqrt{2}&1\end{bmatrix}$$

$$=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{bmatrix}\tag{5}$$

(d) (l^{2},l_{z})表象中 l_{z} 自身的矩阵表示显然是

$$l_{z}=\hbar\begin{bmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{bmatrix}\tag{6}$$

由于算符的对易式不随表象而变，利用对易式

$$l_{z}l_{x}-l_{x}l_{z}=\mathrm{i}\hbar l_{y}\tag{7}$$

以及式(5)，(6)，即得

$$l_{y}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(l_{z}l_{x}-l_{x}l_{z})=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0&-\mathrm{i}&0\\\mathrm{i}&0&-\mathrm{i}\\0&\mathrm{i}&0\end{bmatrix}\tag{8}$$

此即(l^{2},l_{z})表象中 l_{y} 的矩阵表示.

(e) 设 $l=1$ 时 l_y 的本征函数为

$$\psi = C_1 Y_{11} + C_0 Y_{10} + C_{-1} Y_{1-1} \tag{9}$$

写成(l^2, l_z)表象中的态矢量，就是

$$\psi = \begin{bmatrix} C_1 \\ C_0 \\ C_{-1} \end{bmatrix} \tag{9'}$$

以 $\lambda\hbar$表示 l_y 的本征值，则 l_y 的本征方程的矩阵形式为

$$l_y \psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \hbar \begin{bmatrix} 0 & -\mathrm{i} & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & \mathrm{i} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 \\ C_0 \\ C_{-1} \end{bmatrix}$$

$$= \lambda\hbar\psi = \lambda\hbar \begin{bmatrix} C_1 \\ C_0 \\ C_{-1} \end{bmatrix} \tag{10}$$

本征值 $\lambda\hbar$由下式决定：

$$\det |(l_y)_{mn} - \lambda\hbar\delta_{mn}| = 0 \tag{11}$$

即

$$\begin{bmatrix} -\lambda & -\dfrac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}} & 0 \\ \dfrac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}} & -\lambda & -\dfrac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}} \\ 0 & \dfrac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}} & -\lambda \end{bmatrix} = 0 \tag{11'}$$

由上式解得 $\lambda=1、0、-1$，这是意料之中的结果. 将本征值逐个代

入本征方程(10),并利用归一化条件

$$\psi^{+}\psi = C_1^{*}C_1 + C_0^{*}C_0 + C_{-1}^{*}C_{-1} = 1 \tag{12}$$

即可得到各个本征态矢量.结果为

$$\lambda = 1, \psi_{11} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{2} \end{bmatrix}; \lambda = 0, \psi_{10} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$$

$$\lambda = -1, \psi_{1-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \tag{13}$$

在(θ,φ)表象中写出来,就是

$$\psi_{11} = \frac{1}{2}\mathrm{Y}_{11} + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\mathrm{Y}_{10} - \frac{1}{2}\mathrm{Y}_{1-1}, \qquad (l_y = \hbar)$$

$$\psi_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathrm{Y}_{11} + \mathrm{Y}_{1-1}), \qquad (l_y = 0) \tag{14}$$

$$\psi_{1-1} = \frac{1}{2}\mathrm{Y}_{10} - \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\mathrm{Y}_{10} - \frac{1}{2}\mathrm{Y}_{1-1}. \qquad (l_y = -\hbar)$$

请将此结果和题 6.5 的结果对照比较.

6.10 在$|lm\rangle$态矢量空间的 $l=1$ 的子空间中,取$\hbar=1$.

(a) 证明 $l_x^3 = l_x$;

(b) 证明 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha l_x} = 1 + \mathrm{i}\sin\alpha \cdot l_x - (1-\cos\alpha)l_x^2$($\alpha$ 为实数).

证 (a)在 $l=1$ 子空间中，$l^2=2, l_z=1,0,-1$. 如以 $|\phi_{1m}\rangle$ ($m=1,0,-1$)表示(l^2, l_z)的共同本征态，即

$$l^2|\phi_{1m}\rangle = 2|\phi_{1m}\rangle, \quad l_z|\phi_{1m}\rangle = m|\phi_{1m}\rangle, \quad m=1,0,-1$$

显然，对于任何一个态矢量

$$|\psi\rangle = C_1|\phi_{11}\rangle + C_0|\phi_{10}\rangle + C_{-1}|\phi_{1-1}\rangle$$

均有

$$(l_z-1)(l_z-0)(l_z+1)|\psi\rangle = 0 \tag{1}$$

亦即

$$(l_z^3 - l_z)|\psi\rangle = 0 \tag{1'}$$

因 $|\phi\rangle$ 是任意的，所以 l_z 必满足代数方程(参看下册题 3.13)

$$l_z^3 - l_z = 0 \tag{2}$$

亦即 $l_z^3=l_z$. 这个结论容易用上题求得的(l^2, l_z)表象中 l_z 的具体矩阵表示加以验证. 利用式(2)可得

$$\left.\begin{aligned} l_z &= l_z^3 = l_z^5 = \cdots \\ l_z^2 &= l_z^4 = l_z^6 = \cdots \end{aligned}\right\} \tag{2'}$$

(b) 将 $e^{i\alpha l_z}$ 展开成 l_z 的幂级数，再利用式(2')，即得

$$\begin{aligned} e^{i\alpha l_z} &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(i\alpha)^n}{n!} l_z^n \\ &= 1 + l_z\left[i\alpha + \frac{(i\alpha)^3}{3!} + \frac{(i\alpha)^5}{5!} + \cdots\right] \\ &\quad + l_z^2\left[\frac{(i\alpha)^2}{2!} + \frac{(i\alpha)^4}{4!} + \frac{(i\alpha)^6}{6!} + \cdots\right] \\ &= 1 + il_z\left[\alpha - \frac{\alpha^3}{3!} + \frac{\alpha^5}{5!} - \cdots\right] \end{aligned}$$

$$+ l_x^2\left[-\frac{\alpha^2}{2!}+\frac{\alpha^4}{4!}-\frac{\alpha^6}{6!}+\cdots\right]$$

和 $\sin\alpha$ 及 $\cos\alpha$ 的级数展开式

$$\sin\alpha=\alpha-\frac{\alpha^3}{3!}+\frac{\alpha^5}{5!}-\cdots$$

$$\cos\alpha=1-\frac{\alpha^2}{2!}+\frac{\alpha^4}{4!}-\frac{\alpha^6}{6!}+\cdots$$

比较，即得

$$e^{i\alpha l_z}=1+(i\sin\alpha)l_z-(1-\cos\alpha)l_z^2 \tag{3}$$

由证明过程可知，上式中 l_z 可以换成 $\boldsymbol{l}$ 在任何方向 $\boldsymbol{n}$ 的投影 $\boldsymbol{l}\cdot\boldsymbol{n}$，公式仍然成立.

6.11 设矢量算符 $\boldsymbol{\sigma}$ 在任何方向的投影的本征值只能取 ±1. 求 $\boldsymbol{\sigma}$ 各分量间的代数关系.

解 以 $\boldsymbol{n}$ 表示任意方向单位矢量，$\boldsymbol{\sigma}$ 在 $\boldsymbol{n}$ 方向的投影为

$$\sigma_n=\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}=\sigma_x n_x+\sigma_y n_y+\sigma_z n_z \tag{1}$$

它的本征态记为$|\pm,\boldsymbol{n}\rangle$，相应本征值为$\pm1$，即

$$\sigma_n|\pm,\boldsymbol{n}\rangle=\pm|\pm,\boldsymbol{n}\rangle \tag{2}$$

再以 σ_n 作用上式，即得

$$\sigma_n^2|\pm,\boldsymbol{n}\rangle=|\pm,\boldsymbol{n}\rangle \tag{3}$$

因为任何自旋态矢量总可展开成$|\pm,\boldsymbol{n}\rangle$的线性叠加，所以对任意状态$|\psi\rangle$，均有

$$(\sigma_n^2-1)|\psi\rangle=0$$

因此 σ_n 满足代数方程

$$\boxed{\sigma_n^2=1} \tag{4}$$

令 $\boldsymbol{n}$ 分别指向 x、y、z 轴，即得

$$\boxed{\sigma_x^2 = 1, \sigma_y^2 = 1, \sigma_z^2 = 1} \tag{5}$$

一般情况下，

$$\begin{aligned}\sigma_n^2 &= (\sigma_x n_x + \sigma_y n_y + \sigma_z n_z)^2 \\ &= (\sigma_x^2 n_x^2 + \sigma_y^2 n_y^2 + \sigma_z^2 n_z^2) + (\sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x) n_x n_y \\ &\quad + (\sigma_y\sigma_z + \sigma_z\sigma_y) n_y n_z + (\sigma_z\sigma_x + \sigma_x\sigma_z) n_z n_x = 1\end{aligned}$$

根据式(5)，上式中第一项等于 1. 因 $\boldsymbol{n}$ 是任意的，所以必有

$$\boxed{\sigma_x\sigma_y = -\sigma_y\sigma_x, \quad \sigma_y\sigma_z = -\sigma_z\sigma_y, \quad \sigma_z\sigma_x = -\sigma_x\sigma_z} \tag{6}$$

亦即 $\boldsymbol{\sigma}$ 各分量互相反对易.

$\boldsymbol{\sigma}$ 和 1(单位算符)形成封闭代数系统(参见题 6.14)，因此可设

$$\sigma_x\sigma_y = a\sigma_x + b\sigma_y + c\sigma_z + d \tag{7}$$

以 σ_x 左乘上式，并利用 $\sigma_i^2=1$，得到

$$\sigma_y = a + d\sigma_x + b\sigma_x\sigma_y + c\sigma_x\sigma_z$$

以 σ_x 右乘式(7)，并利用式(6)，得到

$$-\sigma_y = a + d\sigma_x + b\sigma_y\sigma_x + c\sigma_z\sigma_x$$

两式相加，并再次利用式(6)，即得

$$a + d\sigma_x = 0$$

因为 σ_x 满足的最简单的代数方程为 $\sigma_x^2=1$，所以，为了上式成立，必须 $a=0, d=0$. 现在式(7)已经被限制成下列形式：

$$\sigma_x\sigma_y = b\sigma_y + c\sigma_z \tag{7'}$$

以 σ_z 分别左乘和右乘上式，得到

$$\sigma_x\sigma_y\sigma_z = c + b\sigma_y\sigma_z$$

$$\sigma_z\sigma_x\sigma_y = c + b\sigma_z\sigma_1$$

根据反对易关系式(6)，可知

$$\sigma_z\sigma_x\sigma_y = -\sigma_x\sigma_z\sigma_y = \sigma_x\sigma_y\sigma_z$$

因此，将前两式相加，即得

$$\sigma_x\sigma_y\sigma_z = c \tag{8}$$

即 $b=0$. 上式取平方，得到

$$c^2 = \sigma_x\sigma_y\sigma_z\sigma_x\sigma_y\sigma_z$$

利用式(6)调换右端各算符次序，易得右端为(-1)，因此

$$c^2 = -1 \tag{9}$$

作为一种选择，可取

$$c = \sqrt{-1} = \mathrm{i} \tag{9'}$$

代入式(8)，即得

$$\boxed{\sigma_x\sigma_y\sigma_z = \mathrm{i}} \tag{10}$$

分别以 σ_z、σ_x、σ_y 乘上式，并利用式(6)，即得

$$\boxed{\sigma_x\sigma_y = \mathrm{i}\sigma_z, \quad \sigma_y\sigma_z = \mathrm{i}\sigma_x, \quad \sigma_z\sigma_x = \mathrm{i}\sigma_y} \tag{11}$$

式(5)和(11)可以统一起来，写成

$$\boxed{\sigma_\alpha\sigma_\beta = \mathrm{i}\sum_\gamma \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_\gamma + \delta_{\alpha\beta}} \tag{12}$$

联合式(11)和(6)，就有

$$\sigma_x\sigma_y - \sigma_y\sigma_x = 2\mathrm{i}\sigma_z \tag{12}$$

等等. 如令

$$\boldsymbol{s} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma} \tag{13}$$

就有对易关系

$$s_x s_y - s_y s_x = \mathrm{i}\hbar s_z \tag{14}$$

等等，即

$$\boxed{\boldsymbol{s} \times \boldsymbol{s} = \mathrm{i}\hbar \boldsymbol{s}} \tag{14'}$$

与一般角动量的对易式相同.

6.12 给定(θ,φ)方向单位矢量

$$\boldsymbol{n} = (n_x, n_y, n_z) = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$$

求 $\sigma_n = \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$ 的本征值和本征函数.(取 σ_z 表象)

解 在 σ_z 表象中，Pauli 算符 $\boldsymbol{\sigma}$ 的矩阵表示为

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{bmatrix}$$

$$\sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{1}$$

因此，

$$\sigma_n = \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n} = \sigma_x n_x + \sigma_y n_y + \sigma_z n_z$$

$$= \begin{bmatrix} n_z & n_x - \mathrm{i}n_y \\ n_x + \mathrm{i}n_y & -n_z \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} \\ \sin\theta\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} & -\cos\theta \end{bmatrix} \tag{2}$$

设 σ_n 的本征函数表为 $\phi=\begin{bmatrix}C_1\\C_2\end{bmatrix}$，本征值 λ，则本征方程为

$$(\sigma_z-\lambda)\phi=0，即\begin{bmatrix}\cos\theta-\lambda & \sin\theta e^{-i\varphi}\\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta-\lambda\end{bmatrix}\begin{bmatrix}C_1\\C_2\end{bmatrix}=0 \quad (3)$$

亦即

$$\begin{cases}(\cos\theta-\lambda)C_1+\sin\theta e^{-i\varphi}C_2=0\\ \sin\theta e^{i\varphi}C_1-(\cos\theta+\lambda)C_2=0\end{cases} \quad (3')$$

存在非平庸解(即 C_1,C_2 不全为 0)的条件为

$$\det(\sigma_n-\lambda)=\begin{vmatrix}\cos\theta-\lambda & \sin\theta e^{-i\varphi}\\ \sin\theta e^{i\varphi} & -(\cos\theta+\lambda)\end{vmatrix}=0 \quad (4)$$

容易解出 $\lambda=\pm1$，即 σ_n 的本征值为 ±1.(这是基本实验事实!)

对于本征值 $\sigma_n=\lambda=1$，由式(3')可得

$$\frac{C_1}{C_2}=\frac{1+\cos\theta}{\sin\theta}e^{-i\varphi}=\frac{\cos\frac{\theta}{2}}{\sin\frac{\theta}{2}}e^{-i\varphi}$$

$$=\frac{1+n_z}{n_x+in_y}=\frac{n_x-in_y}{1-n_z}$$

归一化本征函数用 (θ,φ) 表示，通常取为

$$\phi_1(\theta,\varphi)=\begin{bmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{bmatrix}$$

$$或\begin{bmatrix}\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}\\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi/2}\end{bmatrix} \quad (5)$$

后者形式上更加对称，它和前者相差一个公共的相因子 $e^{-i\varphi}$，并无实质差别. 如用 $\boldsymbol{n}$ 的直角坐标分量来表示，可以取为

$$\phi_1(\boldsymbol{n}) = -\frac{1}{\sqrt{2(1+n_z)}}\begin{bmatrix}1+n_z\\ n_x+in_y\end{bmatrix}$$

或

$$\frac{1}{\sqrt{2(1-n_z)}}\begin{bmatrix}n_x-in_y\\ 1-n_z\end{bmatrix} \tag{5'}$$

如 $n_z\neq\pm1$，二者等价(仅有相因子的差别). 如 $\boldsymbol{n}=(0,0,1)$，应取前者；如 $\boldsymbol{n}=(0,0,-1)$，应取后者.

对于本征值 $\sigma_n=\lambda=-1$，类似地可以求得

$$\frac{C_1}{C_2}=-\frac{1-\cos\theta}{\sin\theta}e^{-i\varphi}=-\frac{\sin\frac{\theta}{2}}{\cos\frac{\theta}{2}}e^{-i\varphi}$$

$$=-\frac{1-n_z}{n_x+in_y}=-\frac{n_x-in_y}{1+n_z}$$

归一化本征函数为

$$\phi_{-1}(\theta,\varphi)=\begin{bmatrix}\sin\frac{\theta}{2}\\ -\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{bmatrix}$$

或

$$\begin{bmatrix}\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}\\ -\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi/2}\end{bmatrix} \tag{6}$$

或

$$\phi_{-1}(\boldsymbol{n})=\frac{1}{\sqrt{2(1+n_z)}}\begin{bmatrix}n_x-\mathrm{i}n_y\\-(1+n_z)\end{bmatrix}$$

或

$$\frac{1}{\sqrt{2(1-n_z)}}\begin{bmatrix}-(1-n_z)\\n_x+\mathrm{i}n_y\end{bmatrix}\tag{6'}$$

如 $\boldsymbol{n}=(0,0,1)$，取 $\phi_{-1}=\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$；如 $\boldsymbol{n}=(0,0,-1)$，取 $\phi_{-1}=\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$

6.13 (a) 对于电子的自旋态 $\chi_{\frac{1}{2}}(\sigma_z=1)$，求 σ_n 的可能测值及相应概率；(b) 对于 $\sigma_n=1$ 的自旋态，求 $\boldsymbol{\sigma}$ 各分量的可能测值及相应概率，以及 $\boldsymbol{\sigma}$ 的平均值.

解一 利用上题求得的 σ_n 的本征函数，容易求出

(a) 自旋态 $\chi_{\frac{1}{2}}=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$中，

$\sigma_n=1$ 的概率为

$$|\langle\phi_1|\chi_{\frac{1}{2}}\rangle|^2=\cos^2\frac{\theta}{2}=\frac{1}{2}(1+n_z)\tag{1}$$

$\sigma_n=-1$ 的概率为

$$|\langle\phi_{-1}|\chi_{\frac{1}{2}}\rangle|^2=\sin^2\frac{\theta}{2}=\frac{1}{2}(1-n_z)\tag{2}$$

(b) 自旋态 $\phi_1(\sigma_n=1)$中，

$\sigma_z=1$ 的概率为 $|\langle\chi_{\frac{1}{2}}|\phi_1\rangle|^2=\frac{1}{2}(1+n_z)$ (3)

$\sigma_z=-1$ 的概率为

$$1-\frac{1}{2}(1+n_z)=\frac{1}{2}(1-n_z)\tag{4}$$

$$\langle\sigma_z\rangle = \frac{1}{2}(1+n_z) - \frac{1}{2}(1-n_z) = n_z \tag{5}$$

考虑到

$$\sigma_n = \sigma_x n_x + \sigma_y n_y + \sigma_z n_z$$

σ 各分量以及 n 各分量在 σ_n 的构造中地位对称，所以利用式(3)、(4)、(5)，作 x、y、z 轮换，就可推论出以下各点：

$$\sigma_x = \pm 1 \text{ 的概率为} \frac{1}{2}(1 \pm n_x) \tag{6}$$

$$\langle\sigma_x\rangle = n_x \tag{7}$$

$$\sigma_y = \pm 1 \text{ 的概率为} \frac{1}{2}(1 \pm n_y) \tag{8}$$

$$\langle\sigma_y\rangle = n_y \tag{9}$$

将式(5)、(7)、(9)合并写成矢量形式如下：

自旋态 $\phi_1(\sigma_n=1)$ 中，

$$\boxed{\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle = \boldsymbol{n}} \tag{10}$$

类似地，容易算出

自旋态 $\phi_{-1}(\sigma_n=-1)$ 中，

$$\boxed{\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle = -\boldsymbol{n}} \tag{11}$$

解二 (a) 在 $\sigma_z=1$ 的自旋态 $\chi_{\frac{1}{2}}$ 中，σ_n 的可能测值为本征值 ±1；设相应概率为 w_+ 及 w_-，则

$$\langle\sigma_n\rangle = w_+ \times 1 + w_- \times (-1) = w_+ - w_- \tag{12}$$

由于

$$\sigma_n = \sigma_x n_x + \sigma_y n_y + \sigma_z n_z \tag{13}$$

考虑到在 σ_z 的本征态中 σ_x 和 σ_y 的平均值为 0，σ_z 的平均值即本征值，因此在 $\chi_{\frac{1}{2}}$ 态下，

$$\langle\sigma_n\rangle = \langle\sigma_z\rangle n_z = n_z = \cos\theta \tag{14}$$

由式(12)，(14)，并利用 $w_+ + w_- = 1$，就可求出

$$w_+ = \frac{1}{2}(1 + n_z), w_- = \frac{1}{2}(1 - n_z) \tag{15}$$

这就是解一中的式(1)、(2).

(b) 在式(14)中，θ 是 z 轴和 $\boldsymbol{n}$ 的夹角. z 轴和 $\boldsymbol{n}$ 的选取是任意的，完全可以将原来的 z 轴作为新的 $\boldsymbol{n}$，而原来的 $\boldsymbol{n}$ 取作新的 z 轴. 由此可知：在 $\sigma_n = 1$ 的自旋态中，σ_z 的平均值仍为 $\cos\theta$，即 n_z. 再令 x、y、z 轮换，即得

$$\text{自旋态 } \phi_1(\sigma_n = 1) \text{ 中，} \langle\boldsymbol{\sigma}\rangle = \boldsymbol{n} \tag{10}$$

在 ϕ_1 态下 $\boldsymbol{\sigma}$ 各分量的取值当然均为 ± 1，其概率也可仿照(a)中计算而写出，即

$$\sigma_x = \pm 1 \text{ 的概率为} \frac{1}{2}(1 \pm n_x) \tag{6}$$

$$\sigma_y = \pm 1 \text{ 的概率为} \frac{1}{2}(1 \pm n_y) \tag{8}$$

$$\sigma_z = \pm 1 \text{ 的概率为} \frac{1}{2}(1 \pm n_z) \tag{3,4}$$

6.14 (a) 证明 Pauli 矩阵 σ_x、σ_y、σ_z 及 I(2×2 单位矩阵)构成 2×2 矩阵的完全集. (b) 将任意 2×2 矩阵表示成 σ_x、σ_y、σ_z 及 I

的线性叠加.

解 (a)线性独立的 2×2 矩阵最多只有 4 个,因此只需证明 σ_x、σ_y、σ_z、I 是线性独立的.

用反证法. 设存在数 C_0、C_1、C_2、C_3,使

$$C_0I + C_1\sigma_x + C_2\sigma_y + C_3\sigma_z = 0 \tag{1}$$

取上式之迹(对角元之和),因为

$$\mathrm{Tr}\sigma = 0, \qquad \mathrm{Tr}I = 2 \tag{2}$$

故得

$$\mathrm{Tr}(C_0I) = 2C_0 = 0, \qquad 即\ C_0 = 0$$

再以 σ_x 左乘式(1),得到

$$C_0\sigma_x + C_1I + C_2\mathrm{i}\sigma_z - C_3\mathrm{i}\sigma_y = 0$$

再取其迹,即得

$$\mathrm{Tr}(C_1I) = 2C_1 = 0, \qquad 即\ C_1 = 0$$

同样可证,$C_2=0$,$C_3=0$. 因此使式(1)成立的 C_0、C_1、C_2、C_3 必须全为 0,亦即 σ_x、σ_y、σ_z、I 互相线性独立,它们构成 2×2 矩阵的完全集.

(b) 因此,给定 2×2 矩阵 M,必定可以表示成

$$M = M_0I + M_1\sigma_x + M_2\sigma_y + M_3\sigma_z \tag{3}$$

今求系数 $M_0,\cdots,M_3$. 取式(3)之迹,有

$$\mathrm{Tr}M = \mathrm{Tr}(M_0I) = 2M_0$$

所以

$$M_0 = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}M \tag{4}$$

以 σ_x 右乘式(3),得到

$$M\sigma_x = M_0\sigma_x + M_1 I - \mathrm{i}M_2\sigma_z + \mathrm{i}M_3\sigma_y$$

再取其迹，就可求出

$$M_1 = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(M\sigma_x) \tag{5}$$

同理可得

$$M_2 = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(M\sigma_y),\ M_3 = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(M\sigma_z) \tag{6}$$

因此，式(3)具体化为

$$\boxed{M = \frac{1}{2}[(\mathrm{Tr}M)I + \{\mathrm{Tr}(M\boldsymbol{\sigma})\}\cdot\boldsymbol{\sigma}]} \tag{7}$$

利用公式

$$\mathrm{Tr}(AB) = \mathrm{Tr}(BA)$$

式(7)也可写成

$$\boxed{M = \frac{1}{2}[(\mathrm{Tr}M)I + \{\mathrm{Tr}(\boldsymbol{\sigma}M)\}\cdot\boldsymbol{\sigma}]} \tag{7'}$$

6.15 证明：与 $\boldsymbol{\sigma}$ 的三个分量都对易的非零二维矩阵必为常数矩阵.

证 设二维矩阵 A 满足

$$A\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}A \tag{1}$$

根据题 6.14 的论证，A 必定可以表示成

$$A = C_0 I + C_1\sigma_x + C_2\sigma_y + C_3\sigma_z \tag{2}$$

以 σ_x 分别左乘和右乘上式，得到

$$\sigma_x A = C_0\sigma_x + C_1 + \mathrm{i}C_2\sigma_z - \mathrm{i}C_3\sigma_y \tag{3}$$

$$A\sigma_x = C_0\sigma_x + C_1 - \mathrm{i}C_2\sigma_z + \mathrm{i}C_3\sigma_y \tag{3'}$$

根据题设条件(1),式(3)和(3′)应相等,所以

$$C_2\sigma_x - C_3\sigma_y = C_3'\sigma_y - C_2\sigma_x$$

因为 σ_y、σ_x 互相独立,因此必有

$$C_2 = 0, \qquad C_3 = 0 \tag{4}$$

类似地,以 σ_y 分别左乘和右乘式(2),可证

$$C_1 = 0, \qquad C_3 = 0 \tag{5}$$

因此

$$C_1 = C_2 = C_3 = 0 \tag{6}$$

$$A = C_0 I \tag{7}$$

即 A 为常数矩阵.

6.16 证明:不存在与 $\boldsymbol{\sigma}$ 的三个分量都反对易的非零二维矩阵.

证 设二维矩阵 A 和 $\boldsymbol{\sigma}$ 反对易,即满足

$$A\sigma_x = -\sigma_x A \tag{1}$$

$$A\sigma_y = -\sigma_y A \tag{2}$$

$$A\sigma_z = -\sigma_z A \tag{3}$$

今证 $A=0$. 以 σ_y 右乘式(1),得到

$$\mathrm{i}A\sigma_z = -\sigma_x A\sigma_y$$

利用式(2),(3)以改写上式两端,得到

$$-\mathrm{i}\sigma_z A = \sigma_x\sigma_y A = \mathrm{i}\sigma_z A$$

再以 $\mathrm{i}\sigma_z$ 左乘上式,即得

$$A = -A, \qquad \text{即 } A = 0 \tag{4}$$

证明完毕.

6.17 满足条件

$$U^+U = UU^+ = 1,\ \det U = 1$$

的 n 维矩阵 U，称为 SU_n 矩阵. 试求 SU_2 的一般表示式.

解 设

$$U = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}, U^+ = \begin{bmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{bmatrix} \tag{1}$$

由条件 $U^+U=1$，得到

$$a^*a + c^*c = b^*b + d^*d = 1 \tag{2a}$$

$$a^*b + c^*d = ab^* + cd^* = 0 \tag{2b}$$

由条件 $UU^+=1$，得到

$$a^*a + b^*b = c^*c + d^*d = 1 \tag{3a}$$

$$ac^* + bd^* = a^*c + b^*d = 0 \tag{3b}$$

由条件 $\det U=1$，得到

$$ad - bc = 1 \tag{4}$$

由式(2a)及(3a)易得

$$b^*b = c^*c, \qquad a^*a = d^*d \tag{5}$$

$$a^*a + b^*b = 1 \tag{6}$$

因此可令

$$\left.\begin{aligned} a &= \cos\omega \cdot e^{i\alpha}, \quad b = \sin\omega \cdot e^{i\beta} \\ d &= \cos\omega \cdot e^{i\gamma}, \quad c = \sin\omega \cdot e^{i\delta} \end{aligned}\right\} \tag{7}$$

ω、α、β、γ、δ 为实数. 将式(7)代入式(4)，得到

$$\cos^2\omega \cdot e^{i(\alpha+\gamma)} - \sin^2\omega \cdot e^{i(\beta+\delta)} = 1$$

为此，必须

$$e^{i(\alpha+\gamma)} = 1, \qquad e^{i(\beta+\delta)} = -1 \tag{8}$$

式(8)给出

$$\gamma = -\alpha, \qquad e^{i\delta} = -e^{-i\beta} \tag{8'}$$

至此，矩阵 U 已经具体化为

$$U = \begin{bmatrix} \cos\omega e^{i\alpha} & \sin\omega e^{i\beta} \\ -\sin\omega e^{-i\beta} & \cos\omega e^{-i\alpha} \end{bmatrix} \tag{9}$$

容易验证，这个矩阵已经满足所有题设条件，所以它就是 SU_2 矩阵的普遍表示式. 可以看出，它含有 3 个独立的参量.

6.18 讨论下列算符是否存在. 如存在，将其表示成 I、σ_x、σ_y、σ_z 的线性叠加. (a) $(1+\sigma_x)^{1/2}$; (b) $(1+\sigma_x+i\sigma_y)^{1/2}$; (c) $(1+\sigma_x)^{-1}$.

解 (a) $(1+\sigma_x)^{1/2}$. σ_x 的本征值为 ± 1，对每一个本征值，$(1+\sigma_x)^{1/2}$都给出明确的值(规定取正根)，因此可以判断，$(1+\sigma_x)^{1/2}$ 存在，而且是 σ_x 的函数. 根据题 6.14 的论证，可令

$$(1+\sigma_x)^{1/2} = C_0 + C_1\sigma_x \tag{1}$$

上式取平方，得到

$$1+\sigma_x = (C_0 + C_1\sigma_x)^2 = C_0^2 + C_1^2 + 2C_0C_1\sigma_x$$

因此

$$C_0^2 + C_1^2 = 1$$

$$2C_0C_1 = 1$$

两式相加、减，得到

$$(C_0 + C_1)^2 = 2$$

$$(C_0 - C_1)^2 = 0$$

如规定(C_0+C_1)取正值，就可解出

$$C_0 = C_1 = 1/\sqrt{2}$$

代入式(1)，即得

$$(1 + \sigma_x)^{1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + \sigma_x) \tag{2}$$

容易验证，对于σ_x的任何一个本征值(± 1)，上式确定成立.

(b) 试令

$$(1 + \sigma_x + \mathrm{i}\sigma_y)^{1/2} = C_0 + C_1\sigma_x + C_2\sigma_y + C_3\sigma_z \tag{3}$$

两端取平方，得到

$$1 + \sigma_x + \mathrm{i}\sigma_y = C_0^2 + C_1^2 + C_2^2 + C_3^2$$
$$+ 2C_0(C_1\sigma_x + C_2\sigma_y + C_3\sigma_z)$$

因此

$$C_3 = 0$$

$$C_0^2 + C_1^2 + C_2^2 = 1$$

$$2C_0C_1 = 1$$

$$2C_0C_2 = \mathrm{i}$$

将后两式代入第一式中，即得$C_0^2=1$，如规定C_0取正值，即得

$$C_0 = 1, \quad C_1 = \frac{1}{2}, \quad C_2 = \frac{\mathrm{i}}{2}, \quad C_3 = 0$$

代入式(3)，即得

$$(1 + \sigma_x + \mathrm{i}\sigma_y)^{1/2} = 1 + \frac{1}{2}(\sigma_x + \mathrm{i}\sigma_y) \tag{4}$$

(c) $(1+\sigma_x)^{-1}$不存在.因为当σ_x取本征值-1,$(1+\sigma_x)^{-1}$变成无限大.为了证实这个判断,不妨先试令

$$(1+\sigma_x)^{-1}=C_0+C_1\sigma_x+C_2\sigma_y+C_3\sigma_z$$

以$(1+\sigma_x)$左乘和右乘上式,再相加,得到

$$1=C_0+C_1+(C_0+C_1)\sigma_x+C_2\sigma_y+C_3\sigma_z$$

因此

$$C_2=0,\qquad C_3=0$$

$$C_0+C_1=1,\qquad C_0+C_1=0$$

后面两式矛盾,无解.这表明$(1+\sigma_x)^{-1}$确实不存在.

6.19 设$\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$是与$\boldsymbol{\sigma}$对易的任何矢量算符,证明

$$\boxed{(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})} \tag{1}$$

证一 将左端展开成$\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$、$\boldsymbol{\sigma}$的分量式,

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})=&(\sigma_xA_x+\sigma_yA_y+\sigma_zA_z)\\&\cdot(\sigma_xB_x+\sigma_yB_y+\sigma_zB_z)\\=&(\sigma_x^2A_xB_x+\sigma_y^2A_yB_y+\sigma_z^2A_zB_z)\\&+(\sigma_x\sigma_yA_xB_y+\sigma_y\sigma_xA_yB_x)\\&+(y、z\text{ 分量项})+(z、x\text{ 分量项})\end{aligned}$$

利用

$$\sigma_x^2=\sigma_y^2=\sigma_z^2=1$$

$$\sigma_x\sigma_y=\mathrm{i}\sigma_z=-\sigma_y\sigma_x,\text{等等},$$

即得

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}+\mathrm{i}\sigma_z(A_xB_y-A_yB_x)+\cdots$$

$$= \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B} + \mathrm{i}\sigma_z(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})_z + \cdots$$

$$= \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B} + \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})$$

证明完毕. 由证明过程可以知道，只要 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{\sigma}$ 对易，$\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{\sigma}$ 对易，式(1)就可成立. $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$ 之间即使互不对易，也无妨.

证二 式(1)左端可以写成

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}) = \Big(\sum_{\alpha}\sigma_\alpha A_\alpha\Big)\Big(\sum_{\beta}\sigma_\beta B_\beta\Big)$$

$$= \sum_{\alpha,\beta}\sigma_\alpha\sigma_\beta A_\alpha B_\beta$$

利用公式(见题 6.11)

$$\sigma_\alpha\sigma_\beta = \mathrm{i}\sum_{\gamma}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_\gamma + \delta_{\alpha\beta}$$

即得

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}) = \sum_{\alpha,\beta}A_\alpha B_\beta\delta_{\alpha\beta} + \mathrm{i}\sum_{\alpha,\beta,\gamma}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_\gamma A_\alpha B_\beta$$

$$= \sum_{\alpha}A_\alpha B_\alpha + \mathrm{i}\sum_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\gamma\alpha\beta}\sigma_\gamma A_\alpha B_\beta$$

根据题 4.1 式(7)，上式中第二项即是 $\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})$，而第一项显然就是 $\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}$，因此

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}) = \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B} + \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})$$

此即式(1).

以下讨论几个重要的特例.

如 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}$，而且 $\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{A}=0$，则式(1)简化成

$$\boxed{(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})^2 = \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}^2} \tag{2}$$

例如，取 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{n}$(单位矢量，$\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{n}=0$)，即得

$$(\sigma \cdot \boldsymbol{n})^2 = \sigma_n^2 = 1 \tag{3}$$

又如，取 $\boldsymbol{A}$ 为 $\boldsymbol{r}$ 或 $\boldsymbol{p}$，即得

$$(\sigma \cdot \boldsymbol{r})^2 = \boldsymbol{r}^2 \tag{4}$$

$$(\sigma \cdot \boldsymbol{p})^2 = \boldsymbol{p}^2 \tag{5}$$

式(1)中，如取 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}=\boldsymbol{l}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$，利用基本对易式

$$\boldsymbol{l} \times \boldsymbol{l} = \mathrm{i}\boldsymbol{l}, \qquad (\text{取 } \hbar = 1)$$

即得

$$\boxed{(\sigma \cdot \boldsymbol{l})^2 = \boldsymbol{l}^2 - \sigma \cdot \boldsymbol{l}} \tag{6}$$

6.20 计算 $\mathrm{Tr}(\sigma \cdot \boldsymbol{A})$，$\mathrm{Tr}[(\sigma \cdot \boldsymbol{A})(\sigma \cdot \boldsymbol{B}]$以及 $\mathrm{Tr}[(\sigma \cdot \boldsymbol{A})(\sigma \cdot \boldsymbol{B})(\sigma \cdot \boldsymbol{C})]$，其中 σ 为 **Pauli** 矩阵，$\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$、$\boldsymbol{C}$ 为与 σ 对易的算符或常矢量.

解 $\sigma \cdot \boldsymbol{A} = \sigma_x A_x + \sigma_y A_y + \sigma_z A_z$

由于

$$\mathrm{Tr}\sigma_x = \mathrm{Tr}\sigma_y = \mathrm{Tr}\sigma_z = 0 \tag{1}$$

显然有

$$\boxed{\mathrm{Tr}(\sigma \cdot \boldsymbol{A}) = 0} \tag{2}$$

其次，利用上题证明的公式

$$(\sigma \cdot \boldsymbol{A})(\sigma \cdot \boldsymbol{B}) = \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B} + \mathrm{i}\sigma \cdot (\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{B}) \tag{3}$$

并利用式(2)，即得

$$\boxed{\mathrm{Tr}[(\sigma \cdot \boldsymbol{A})(\sigma \cdot \boldsymbol{B})] = 2\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B}} \tag{4}$$

最后，利用式(3)，可得

$$(\sigma \cdot \boldsymbol{A})(\sigma \cdot \boldsymbol{B})(\sigma \cdot \boldsymbol{C}) = (\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B})(\sigma \cdot \boldsymbol{C})$$

$$+\mathrm{i}[\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})](\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{C})$$

上式求迹，第一项是 $\boldsymbol{\sigma}$ 的线性项，迹为 0，因此

$$\mathrm{Tr}[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{C})]$$

$$=\mathrm{i}\mathrm{Tr}\{[\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})](\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{C})\}$$

再利用式(4)，即得

$$\boxed{\begin{aligned}&\mathrm{Tr}[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{C})]\\&=2\mathrm{i}(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\cdot\boldsymbol{C}=2\mathrm{i}\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})\end{aligned}}\tag{5}$$

在以上求迹的过程中，由于已经假定 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$、$\boldsymbol{C}$ 与 $\boldsymbol{\sigma}$ 对易，所以 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$、$\boldsymbol{C}$ 的任何组合均可当作常数矩阵处理(参看题 6.12)，只是 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$、$\boldsymbol{C}$ 的次序不能随意调换.

6.21 设 $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{\sigma}$ 对易，证明

$$\boxed{\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})-\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}-(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\boldsymbol{\sigma}=\mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma}}$$

证一 引入任意常数矢量 $\boldsymbol{B}$，并利用公式

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\tag{1}$$

即得

$$[\boldsymbol{A}-(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\boldsymbol{\sigma}]\cdot\boldsymbol{B}=-\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})$$

$$=-\mathrm{i}(\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{A})\cdot\boldsymbol{B}$$

因为 $\boldsymbol{B}$ 是任意的，所以

$$\boldsymbol{A}-(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\boldsymbol{\sigma}=-\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{A}=\mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma}\tag{2}$$

同理可得

$$[\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})-\boldsymbol{A}]\cdot\boldsymbol{B}=\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{A})$$

$$=-\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})=-\mathrm{i}(\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{A})\cdot\boldsymbol{B}$$

因为 $\boldsymbol{B}$ 是任意的，所以

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})-\boldsymbol{A}=-\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{A}=\mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma} \tag{3}$$

式(3)减式(2)，即得

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})+(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\boldsymbol{\sigma}=2\boldsymbol{A} \tag{4}$$

式(3)加式(2)，即得

$$\boxed{[\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}]=\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})-(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\boldsymbol{\sigma}=2\mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma}} \tag{5}$$

证二 以 $\boldsymbol{e}_\alpha(\alpha=x,y,z)$ 表示 x、y、z 方向单位矢量，则

$$\boldsymbol{\sigma}=\sum_\alpha\sigma_\alpha\boldsymbol{e}_\alpha,\quad \boldsymbol{A}=\sum_\alpha A_\alpha\boldsymbol{e}_\alpha$$

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}=\sum_\alpha\sigma_\alpha A_\alpha,\quad \boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma}=\sum_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\alpha\sigma_\beta\boldsymbol{e}_\gamma$$

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})=\sum_\alpha\sigma_\alpha\boldsymbol{e}_\alpha\sum_\beta\sigma_\beta A_\beta=\sum_{\alpha,\beta}\sigma_\alpha\sigma_\beta A_\beta\boldsymbol{e}_\alpha$$

利用公式(见题 6.11)

$$\sigma_\alpha\sigma_\beta=\sigma_{\alpha\beta}+\mathrm{i}\sum_\gamma\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_\gamma$$

即得

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})=\sum_{\alpha\beta}\delta_{\alpha\beta}A_\beta\boldsymbol{e}_\alpha+\mathrm{i}\sum_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_\gamma A_\beta\boldsymbol{e}_\alpha$$

$$=\sum_\alpha A_\alpha\boldsymbol{e}_\alpha+\mathrm{i}\sum_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\beta\gamma\alpha}A_\beta\sigma_\gamma e_\alpha$$

$$=\boldsymbol{A}+\mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma}$$

此即式(3)．同样可证式(2)．将式(2)、(3)相减、相加，即得式(4)、(5)．

6.22 设 λ 为常数，证明

$$\boxed{e^{i\lambda\sigma_z} = \cos\lambda + i\sigma_z\sin\lambda} \qquad (1)$$

证一 将 $e^{i\lambda\sigma_z}$ 展开成 σ_z 的级数，

$$e^{i\lambda\sigma_z} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}(i\lambda\sigma_z)^n = \left\{\sum_{n\text{偶}} + \sum_{n\text{奇}}\right\}\frac{1}{n!}(i\lambda)^n\sigma_z^n \qquad (2)$$

由于 $\sigma_z^2=1$，所以

$$n\text{ 偶}, \sigma_z^n = 1, \quad n\text{ 奇}, \sigma_z^n = \sigma_z$$

代入式(2)，即得

$$e^{i\lambda\sigma_z} = \sum_{n\text{偶}}\frac{(i\lambda)^n}{n!} + \sigma_z\sum_{n\text{奇}}\frac{(i\lambda)^n}{n!} \qquad (2')$$

其中

$$\sum_{n\text{偶}}\frac{(i\lambda)^n}{n!} = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(i\lambda)^{2k}}{(2k)!} = \sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\frac{\lambda^{2k}}{(2k)!} = \cos\lambda$$

$$\sum_{n\text{奇}}\frac{(i\lambda)^n}{n!} = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(i\lambda)^{2k+1}}{(2k+1)!} = i\sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\frac{\lambda^{2k+1}}{(2k+1)!} = i\sin\lambda$$

故得

$$e^{i\lambda\sigma_z} = \cos\lambda + i\sigma_z\sin\lambda. \qquad (1)$$

证二 由于 $\sigma_z^2=1$，σ_z 的任何正幂级数必定可以简化成 $(a+b\sigma_z)$ 的形式. 因此可令

$$e^{i\lambda\sigma_z} = a + b\sigma_z \qquad (3)$$

a、b 为待定常数. 将上式作用于 σ_z 的本征态 $\chi_{\pm\frac{1}{2}}$，得到

对于 $\chi_{\frac{1}{2}}$， $\sigma_z = 1$， $e^{i\lambda} = a + b$

对于 $\chi_{-\frac{1}{2}}$， $\sigma_z = -1$， $e^{-i\lambda} = a - b$

容易解出

$$a = \cos\lambda, \qquad b = \mathrm{i}\sin\lambda \tag{4}$$

代入式(3),即得式(1).

证三 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}$是$\sigma_z$的函数,在$\sigma_z$表象中可以表示成对角化矩阵,对角元等于其本征值.$\sigma_z$的本征值为$\pm1$,$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}$的本征值为$\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\lambda}$.因此,在$\sigma_z$表象中$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}$的矩阵表示为

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z} = \begin{bmatrix} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\lambda + \mathrm{i}\sin\lambda & 0 \\ 0 & \cos\lambda - \mathrm{i}\sin\lambda \end{bmatrix} \tag{5}$$

由于

$$I = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \qquad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

故得

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z} = \cos\lambda + \mathrm{i}\sigma_z\sin\lambda \tag{1}$$

算符间的关系式与表象的选择无关,故上式可以脱离σ_z表象而普遍成立.

讨论 以上的证明过程,主要利用了σ_z的本征值以及$\sigma_z^2=1$.如将σ_z改成$\boldsymbol{\sigma}$在$\boldsymbol{n}$方向的投影σ_n,由于σ_n的本征值仍为±1,而且$\sigma_n^2=1$,因此显然仍可证明

$$\boxed{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_n} = \cos\lambda + \mathrm{i}\sigma_n\sin\lambda} \tag{6}$$

6.23 设$\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$为实常数矢量,试将$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}}$和$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}}$表示成$I$及$\sigma_x$、$\sigma_y$、$\sigma_z$的线性叠加,并计算它们的迹.

解 将$\boldsymbol{A}$写成$A\boldsymbol{n}$,$\boldsymbol{n}$为$\boldsymbol{A}$方向单位矢量$\left(\boldsymbol{n}=\dfrac{\boldsymbol{A}}{A}\right)$,则

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}A\sigma_n}, \qquad A = |\boldsymbol{A}| \tag{1}$$

利用上题式(6),即得

$$e^{i\sigma\cdot A}=\cos A+i\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}}{A}\sin A \tag{2}$$

其中第一项应理解成 $I\cos A$,I 为单位矩阵.第二项为 σ 的线性项,对迹无贡献.因此

$$\boxed{\mathrm{Tr}\ e^{i\sigma\cdot A}=2\cos A,\qquad A=|\boldsymbol{A}|} \tag{3}$$

类似地可以写出 $e^{i\sigma\cdot B}$ 的表示式.因此

$$\begin{aligned}
e^{i\sigma\cdot A}e^{i\sigma\cdot B}&=\left(\cos A+\frac{i}{A}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}\sin A\right)\\
&\quad\cdot\left(\cos B+\frac{i}{B}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}\sin B\right)\\
&=\cos A\cos B-(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})\frac{1}{AB}\sin A\sin B\\
&\quad+i(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\frac{1}{A}\sin A\cos B\\
&\quad+i(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})\frac{1}{B}\cos A\sin B\\
&=\cos A\cos B-\frac{\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}}{AB}\sin A\sin B\\
&\quad-i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\frac{1}{AB}\sin A\sin B\\
&\quad+i(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\frac{1}{A}\sin A\cos B\\
&\quad+i(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})\frac{1}{B}\cos A\sin B
\end{aligned} \tag{4}$$

上式中后三项为 σ 的线性项,迹为 0,所以

$$\boxed{\mathrm{Tr}(e^{i\sigma\cdot A}e^{i\sigma\cdot B}) = 2\cos A\cos B - 2\frac{\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}}{AB}\sin A\sin B} \qquad (5)$$

下面讨论几个特例.

1°$\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{B}$ 互相平行,这时

$$\boldsymbol{A} = A\boldsymbol{n},\quad \boldsymbol{B} = B\boldsymbol{n},\quad \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B} = AB,\quad \boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B} = 0$$

式(4)退化成

$$e^{i\sigma\cdot(A+B)} = e^{i(A+B)\sigma_n} = \cos(A+B) + i\sigma_n\sin(A+B)$$

这实际上就是式(2),A 换成$(A+B)$而已.

2°$\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{B}$ 垂直. 如以 $\boldsymbol{n}$、$\boldsymbol{m}$、$\boldsymbol{k}$ 分别表示 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$、$\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}$ 方向的单位矢量,则

$$\boldsymbol{A} = A\boldsymbol{n},\quad \boldsymbol{B} = B\boldsymbol{m},\quad \boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B} = AB\boldsymbol{k},\quad \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B} = 0$$

式(4)成为

$$e^{iA\sigma_n}e^{iB\sigma_m} = \cos A\cos B + i\sigma_n\sin A\cos B + i\sigma_m\cos A\sin B - i\sigma_k\sin A\sin B \qquad (6)$$

如 $A=B=\lambda$,则上式进一步简化成

$$e^{i\lambda\sigma_n}e^{i\lambda\sigma_m} = \cos^2\lambda + \frac{i}{2}(\sigma_n+\sigma_m)\sin 2\lambda - i\sigma_k\sin^2\lambda \qquad (7)$$

例如,当 $\boldsymbol{n}$、$\boldsymbol{m}$、$\boldsymbol{k}$ 分别代表 x、y、z 轴,就有

$$e^{i\lambda\sigma_x}e^{i\lambda\sigma_y} = \cos^2\lambda + \frac{i}{2}(\sigma_x+\sigma_y)\sin 2\lambda - i\sigma_z\sin^2\lambda \qquad (8)$$

3°$\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{B}$ 垂直时,式(5)简化成

$$\boxed{\mathrm{Tr}(e^{i\sigma\cdot A}e^{i\sigma\cdot B}) = 2\cos A\cos B} \qquad (9)$$

6.24 化简 $e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_\alpha e^{-i\lambda\sigma_z}$，$\alpha=x,y,\lambda$ 为常数.

解一 利用题 6.22 证明的公式

$$e^{i\lambda\sigma_z}=\cos\lambda+i\sigma_z\sin\lambda \tag{1}$$

可得

$$e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_x e^{-i\lambda\sigma_z}=(\cos\lambda+i\sigma_z\sin\lambda)\sigma_x(\cos\lambda-i\sigma_z\sin\lambda)$$

再利用

$$\sigma_z^2=1,\sigma_z\sigma_x=-\sigma_x\sigma_z=i\sigma_y \tag{2}$$

即得

$$e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_x e^{-i\lambda\sigma_z}=\sigma_x\cos2\lambda-\sigma_y\sin2\lambda \tag{3}$$

类似地，可得

$$e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_y e^{-i\lambda\sigma_z}=\sigma_x\sin2\lambda+\sigma_y\cos2\lambda \tag{4}$$

解二 根据题 6.14 的分析，可令

$$e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_x e^{-i\lambda\sigma_z}=C_0I+C_1\sigma_x+C_2\sigma_y+C_3\sigma_z \tag{5}$$

将上式作用于 σ_z 的本征态 $\chi_{\frac{1}{2}}$，利用

$$\sigma_z\chi_{\frac{1}{2}}=\chi_{\frac{1}{2}},\quad \sigma_x\chi_{\frac{1}{2}}=\chi_{-\frac{1}{2}},\quad \sigma_y\chi_{\frac{1}{2}}=i\chi_{-\frac{1}{2}} \tag{6}$$

即得

$$e^{-2i\lambda}\chi_{\frac{1}{2}}=(C_0+C_3)\chi_{\frac{1}{2}}+(C_1+iC_2)\chi_{-\frac{1}{2}}$$

由于 $\chi_{\frac{1}{2}}$ 和 $\chi_{-\frac{1}{2}}$ 是线性独立的，比较上式两端系数，即得

$$\left.\begin{aligned}C_0+C_3&=0\\C_1+iC_2&=e^{-2i\lambda}\end{aligned}\right\} \tag{7}$$

再将式(5)作用于 σ_z 的本征态 $\chi_{-\frac{1}{2}}$，利用

$$\sigma_z\chi_{-\frac{1}{2}}=-\chi_{\frac{1}{2}},\quad \sigma_x\chi_{-\frac{1}{2}}=\chi_{\frac{1}{2}},\quad \sigma_y\chi_{-\frac{1}{2}}=-i\chi_{\frac{1}{2}} \tag{8}$$

即得

$$e^{2i\lambda}\chi_{\frac{1}{2}} = (C_1 - iC_2)\chi_{\frac{1}{2}} + (C_0 - C_3)\chi_{-\frac{1}{2}}$$

比较两端系数，得到

$$C_0 - C_3 = 0$$

$$C_1 - iC_2 = e^{2i\lambda} \tag{9}$$

由式(7)、(9)容易解出

$$C_0 = C_3 = 0, \quad C_1 = \cos 2\lambda, \quad C_2 = -\sin 2\lambda \tag{10}$$

代入式(5)，即得

$$e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_x e^{-i\lambda\sigma_z} = \sigma_x \cos 2\lambda - \sigma_y \sin 2\lambda \tag{3}$$

类似地可以证明

$$e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_y e^{-i\lambda\sigma_z} = \sigma_x \sin 2\lambda + \sigma_y \cos 2\lambda \tag{4}$$

解三 视 λ 为参变数，令

$$f(\lambda) = e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_x e^{-i\lambda\sigma_z} \tag{11}$$

$$g(\lambda) = e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_y e^{-i\lambda\sigma_z} \tag{12}$$

注意

$$f(0) = \sigma_x, \quad g(0) = \sigma_y \tag{13}$$

式(11)，(12)对 λ 求导，可得

$$\begin{aligned} f'(\lambda) &= e^{i\lambda\sigma_z} i(\sigma_z\sigma_x - \sigma_x\sigma_z)e^{-i\lambda\sigma_z} = -2g(\lambda) \\ g'(\lambda) &= e^{i\lambda\sigma_z} i(\sigma_z\sigma_y - \sigma_y\sigma_z)e^{-i\lambda\sigma_z} = 2f(\lambda) \end{aligned} \tag{14}$$

式(14)中第二式乘 i，和第一式相加，得到

$$\frac{d}{d\lambda}[f(\lambda) + ig(\lambda)] = 2i[f(\lambda) + ig(\lambda)] \tag{14'}$$

作为一阶微分方程，上式的解显然是

$$f(\lambda)+\mathrm{i}g(\lambda)=[f(0)+\mathrm{i}g(0)]\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\lambda}$$
$$=(\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y)\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\lambda} \tag{15}$$

式(14)中第二式乘(−i)，和第一式相加，得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}[f(\lambda)-\mathrm{i}g(\lambda)]=-2\mathrm{i}[f(\lambda)-\mathrm{i}g(\lambda)] \tag{14''}$$

解为

$$f(\lambda)-\mathrm{i}g(\lambda)=[f(0)-\mathrm{i}g(0)]\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\lambda}$$
$$=(\sigma_x-\mathrm{i}\sigma_y)\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\lambda} \tag{16}$$

式(15)、(16)相加、减，即得

$$\begin{aligned} f(\lambda)&=\sigma_x\cos 2\lambda-\sigma_y\sin 2\lambda \\ g(\lambda)&=\sigma_x\sin 2\lambda+\sigma_y\cos 2\lambda \end{aligned} \tag{17}$$

此即式(3)和(4).

(注) 如 λ 为实数，则 $f(\lambda)$ 及 $g(\lambda)$ 均为 Hermite 算符，这时式(16)为式(15)的共轭方程，而式(17)可直接由式(15)得出.

6.25 定义 $\sigma_+=\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y$，$\sigma_-=\sigma_x-\mathrm{i}\sigma_y=(\sigma_+)^+$，

(a) 计算$[\sigma_+,\sigma_-]$，$[\sigma_z,\sigma_\pm]$，证明$(\sigma_+)^2=(\sigma_-)^2=0$；

(b) 证明 $\mathrm{e}^{\xi\sigma_z}\sigma_+=\sigma_\pm\mathrm{e}^{\xi\sigma_z}\mathrm{e}^{\pm 2\xi}$($\xi$ 为常数)；

(c) 化简 $\mathrm{e}^{\xi\sigma_z}\sigma_x\mathrm{e}^{-\xi\sigma_z}$和 $\mathrm{e}^{\xi\sigma_z}\sigma_y\mathrm{e}^{\xi\sigma_z}$.

解 (a) 利用 σ 的基本公式

$$\sigma_x^2=\sigma_y^2=\sigma_z^2=1$$

$$\sigma_x\sigma_y=-\sigma_y\sigma_x=\mathrm{i}\sigma_z$$

等等，容易算出

$$(\sigma_+)^2=(\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y)^2$$

$$= \sigma_x^2 - \sigma_y^2 + \mathrm{i}(\sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x) = 0 \tag{1}$$

再取共轭，即得

$$(\sigma_-)^2 = 0 \tag{2}$$

另外，

$$\begin{aligned}\sigma_+\sigma_- &= (\sigma_x + \mathrm{i}\sigma_y)(\sigma_x - \mathrm{i}\sigma_y)\\ &= \sigma_x^2 + \sigma_y^2 - \mathrm{i}\sigma_x\sigma_y + \mathrm{i}\sigma_y\sigma_x\\ &= 2(1 + \sigma_z)\end{aligned} \tag{3}$$

$$\sigma_-\sigma_+ = (\sigma_x - \mathrm{i}\sigma_y)(\sigma_x + \mathrm{i}\sigma_y) = 2(1 - \sigma_z) \tag{4}$$

所以

$$\boxed{[\sigma_+, \sigma_-] = 4\sigma_z} \tag{5}$$

另外，

$$\begin{aligned}[\sigma_z, \sigma_+] &= [\sigma_z, \sigma_x] + \mathrm{i}[\sigma_z, \sigma_y]\\ &= 2\mathrm{i}\sigma_y + \mathrm{i}(-2\mathrm{i}\sigma_x) = 2\sigma_+\end{aligned} \tag{6}$$

取共轭，可得

$$[\sigma_z, \sigma_-] = -2\sigma_- \tag{7}$$

(b) 将式(6)和(7)写成

$$\boxed{\sigma_z\sigma_\pm = \sigma_\pm(\sigma_z \pm 2)} \tag{8}$$

反复利用此式，显然可得

$$\sigma_z^n\sigma_\pm = \sigma_\pm\,(\sigma_z \pm 2)^n, \quad n = 0, 1, 2, \cdots \tag{9}$$

因此，对于可以表示成 σ_z 幂级数的任意函数 $f(\sigma_z)$，有

$$\boxed{f(\sigma_z)\sigma_\pm = \sigma_\pm f(\sigma_z \pm 2)} \tag{10}$$

特别是，当 f 是指数函数时，上式给出

$$\boxed{e^{\xi\sigma_z}\sigma_\pm = \sigma_\pm e^{\xi\sigma_z} e^{\mp 2\xi}} \tag{11}$$

以 $e^{-\xi\sigma_z}$ 右乘上式，则得

$$e^{\xi\sigma_z}\sigma_\pm e^{-\xi\sigma_z} = \sigma_\pm e^{\mp 2\xi} \tag{12}$$

(c) 按照 $\sigma_\pm$ 的定义，可将 σ_x、σ_y 表示成

$$\begin{aligned} \sigma_x &= \frac{1}{2}(\sigma_+ + \sigma_-) \\ \sigma_y &= \frac{1}{2\mathrm{i}}(\sigma_+ - \sigma_-) \end{aligned} \tag{13}$$

再利用式(12)，容易得到

$$\begin{aligned} e^{\xi\sigma_z}\sigma_x e^{-\xi\sigma_z} &= \frac{1}{2}(\sigma_+ e^{2\xi} + \sigma_- e^{-2\xi}) \\ &= \frac{1}{2}\sigma_x(e^{2\xi} + e^{-2\xi}) + \frac{\mathrm{i}}{2}\sigma_y(e^{2\xi} - e^{-2\xi}) \\ &= \sigma_x \mathrm{ch}(2\xi) + \mathrm{i}\sigma_y \mathrm{sh}(2\xi) \end{aligned} \tag{14}$$

类似地，可得

$$e^{\xi\sigma_z}\sigma_y e^{-\xi\sigma_z} = \sigma_y \mathrm{ch}(2\xi) - \mathrm{i}\sigma_x \mathrm{sh}(2\xi) \tag{15}$$

其中 ch 和 sh 表示双曲余弦和双曲正弦函数.

如令 $\xi = \mathrm{i}\lambda$，则

$$\begin{aligned} \mathrm{ch}(2\mathrm{i}\lambda) &= \frac{1}{2}(e^{2\mathrm{i}\lambda} + e^{-2\mathrm{i}\lambda}) = \cos 2\lambda \\ \mathrm{sh}(2\mathrm{i}\lambda) &= \frac{1}{2}(e^{2\mathrm{i}\lambda} - e^{-2\mathrm{i}\lambda}) = \mathrm{i}\sin 2\lambda \end{aligned}$$

式(14)、(15)成为

$$\boxed{e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_x e^{-i\lambda\sigma_z}=\sigma_x\cos 2\lambda-\sigma_y\sin 2\lambda} \tag{16}$$

$$\boxed{e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_y e^{-i\lambda\sigma_z}=\sigma_x\sin 2\lambda+\sigma_y\cos 2\lambda} \tag{17}$$

这正是上题得到的公式.

6.26 设 λ 为实数，$\boldsymbol{n}$ 为(θ,φ)方向单位矢量，证明

$$\boxed{e^{i\lambda\sigma_n}\boldsymbol{\sigma}e^{-i\lambda\sigma_n}=\boldsymbol{n}\sigma_n+(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n}\cos 2\lambda+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin 2\lambda} \tag{1}$$

证一 视 λ 为参变量(但 $\boldsymbol{n}$ 固定不变)，令

$$U(\lambda)=e^{i\lambda\sigma_n},\qquad U^{\dagger}(\lambda)=e^{i\lambda\sigma_n} \tag{2}$$

$$\boldsymbol{f}(\lambda)=U^{+}(\lambda)\boldsymbol{\sigma}U(\lambda) \tag{3}$$

注意

$$U(0)=U^{\dagger}(0)=1,\qquad \boldsymbol{f}(0)=\boldsymbol{\sigma} \tag{4}$$

对 λ 求导，可得

$$\frac{dU}{d\lambda}=-iU\sigma_n,\qquad \frac{dU^{\dagger}}{d\lambda}=iU^{\dagger}\sigma_n \tag{5}$$

$$\frac{d\boldsymbol{f}}{d\lambda}=iU^{\dagger}[\sigma_n,\boldsymbol{\sigma}]U \tag{6}$$

利用公式[见题 6.21 式(5)]

$$[\sigma_n,\boldsymbol{\sigma}]=[\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n},\boldsymbol{\sigma}]=-2i\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma} \tag{7}$$

即得

$$\frac{d\boldsymbol{f}}{d\lambda}=2\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f} \tag{6}$$

由定义式(3)，易见

$$\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{f}(\lambda)=U^{\dagger}\sigma_n U=\sigma_n \tag{8}$$

以 $\boldsymbol{n}\times$式(6′),则得

$$\boldsymbol{n}\times\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{f}}{\mathrm{d}\lambda}=2\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f})=2\boldsymbol{n}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{f})-2\boldsymbol{f}$$

$$=2\boldsymbol{n}\sigma_n-2\boldsymbol{f} \tag{9}$$

式(6′)·+i×式(9),得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}(\boldsymbol{f}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f})=-2\mathrm{i}(\boldsymbol{f}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}-\boldsymbol{n}\sigma_n)$$

亦即

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}(\boldsymbol{f}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}-\boldsymbol{n}\sigma_n)=-2\mathrm{i}(\boldsymbol{f}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}-\boldsymbol{n}\sigma_n) \tag{10}$$

上式作为 λ 的一阶微分方程,其解显然是

$$\boldsymbol{f}(\lambda)+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(\lambda)-\boldsymbol{n}\sigma_n$$

$$=[\boldsymbol{f}(0)+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(0)-\boldsymbol{n}\sigma_n]\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\lambda}$$

$$=(\boldsymbol{\sigma}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{n}\sigma_n]\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\lambda} \tag{11}$$

由于 σ_n,$\boldsymbol{f}(\lambda)$,$\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(\lambda)$均为 Hermite 算符,上式取共轭,可得

$$\boldsymbol{f}(\lambda)-\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(\lambda)-\boldsymbol{n}\sigma_n=(\boldsymbol{\sigma}-\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{n}\sigma_n)\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\lambda} \tag{11′}$$

两式相加,即得

$$\boldsymbol{f}(\lambda)=\boldsymbol{\sigma}\cos2\lambda+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin2\lambda+\boldsymbol{n}\sigma_n(1-\cos2\lambda) \tag{12}$$

由于

$$(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n}=\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{n}\sigma_n \tag{13}$$

式(12)可以化成

$$\boldsymbol{f}(\lambda)=\boldsymbol{n}\sigma_n+(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n}\cos2\lambda+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin2\lambda \tag{12′}$$

此即所要证明的式(1).

证二 利用公式(见题 6.22)

$$U^{+}(\lambda)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_n}=\cos\lambda+\mathrm{i}\sigma_n\sin\lambda \tag{14}$$

以及式(7),可得

$$[U^{+}(\lambda),\boldsymbol{\sigma}]=\mathrm{i}\sin\lambda[\sigma_n,\boldsymbol{\sigma}]=2\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin\lambda \tag{15}$$

因此,

$$\begin{aligned}U^{+}(\lambda)\boldsymbol{\sigma}U(\lambda)&=(\boldsymbol{\sigma}U^{+}+2\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin\lambda)U\\&=\boldsymbol{\sigma}+2(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})U(\lambda)\sin\lambda\end{aligned} \tag{16}$$

以

$$U(\lambda)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_n}=\cos\lambda-\mathrm{i}\sigma_n\sin\lambda \tag{14'}$$

代入式(16),得到

$$U^{+}\boldsymbol{\sigma}U=\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin2\lambda-2\mathrm{i}(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\sigma_n\sin^2\lambda \tag{17}$$

取共轭,得到

$$U^{+}\boldsymbol{\sigma}U=\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin2\lambda+2\mathrm{i}\sigma_n(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\sin^2\lambda \tag{17'}$$

两式相加,即得

$$\begin{aligned}U^{+}\boldsymbol{\sigma}U&=\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin2\lambda+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times[\sigma_n,\boldsymbol{\sigma}](\sin^2\lambda)\\&=\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin2\lambda+2\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\sin^2\lambda\\&=\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin2\lambda+(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n}(\cos2\lambda-1)\end{aligned} \tag{18}$$

再利用式(13),即得

$$U^{+}\boldsymbol{\sigma}U=\boldsymbol{n}\sigma_n+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin2\lambda+(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n}\cos2\lambda \tag{18'}$$

此即式(1).

讨论 如取 $\boldsymbol{n}$ 为 z 轴,即取 $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{e}_3$,则

$$\sigma_n=\sigma_z$$

$$\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}=\boldsymbol{e}_2\sigma_x-\boldsymbol{e}_1\sigma_y$$

$$(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n}=\boldsymbol{e}_1\sigma_x+\boldsymbol{e}_2\sigma_y$$

式(1)变成

$$e^{i\lambda\sigma_z}\sigma e^{-i\lambda\sigma_z}=\boldsymbol{e}_3\sigma_z+\boldsymbol{e}_1(\sigma_x\cos2\lambda-\sigma_y\sin2\lambda)$$
$$+\boldsymbol{e}_2(\sigma_x\sin2\lambda+\sigma_y\cos2\lambda) \tag{19}$$

此式等价于以下二式：

$$e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_x e^{-i\lambda\sigma_z}=\sigma_x\cos2\lambda-\sigma_y\sin2\lambda \tag{19a}$$

$$e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_y e^{-i\lambda\sigma_z}=\sigma_x\sin2\lambda+\sigma_y\cos2\lambda \tag{19b}$$

这正是题 6.24 所得到的公式.

6.27 有一个定域电子(作为近似模型，可以不考虑轨道运动)受到均匀磁场作用，磁场 B 指向正 x 方向. 磁作用势为

$$H=\frac{eB}{\mu c}s_x=\frac{e\hbar B}{2\mu c}\sigma_x \tag{1}$$

设 $t=0$ 时电子的自旋"向上"，即 $s_z=\frac{\hbar}{2}$，求 $t>0$ 时 s 的平均值.

解 先由 Schrödinger 方程解出自旋波函数 $\chi(t)$，再计算 s 的平均值. 在 s_z 表象中，Hamilton 算符可以表示成

$$H=\frac{e\hbar B}{2\mu c}\sigma_x=\hbar\omega\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix},\quad \omega=\frac{eB}{2\mu c} \tag{1'}$$

令

$$\chi(t)=a(t)\chi_{\frac{1}{2}}+b(t)\chi_{-\frac{1}{2}}=\begin{bmatrix}a(t)\\b(t)\end{bmatrix} \tag{2}$$

$\chi(t)$应满足 Schrödinger 方程

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\chi(t)=H\chi(t) \tag{3}$$

初始条件为

$$\chi(0)=\chi_{\frac{1}{2}}=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix},\quad \text{即 } a(0)=1,\quad b(0)=0 \tag{4}$$

将式(1′)及(2)代入式(3),得到

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{bmatrix}a\\b\end{bmatrix}=\hbar\omega\begin{bmatrix}b\\a\end{bmatrix} \tag{5}$$

上式相当于方程组

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t}&=-\mathrm{i}\omega b\\ \frac{\mathrm{d}b}{\mathrm{d}t}&=-\mathrm{i}\omega a\end{aligned} \tag{5′}$$

将两式相加、减,得到

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(a+b)&=-\mathrm{i}\omega(a+b)\\ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(a-b)&=\mathrm{i}\omega(a-b)\end{aligned} \tag{6}$$

解为

$$\begin{aligned}a(t)+b(t)&=[a(0)+b(0)]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\\ a(t)-b(t)&=[a(0)-b(0)]\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\end{aligned} \tag{7}$$

由式(7)易得

$$a(t)=\cos\omega t,\qquad b(t)=-\mathrm{i}\sin\omega t \tag{8}$$

代入式(2),即得

$$\chi(t)=\begin{bmatrix}\cos\omega t\\-\mathrm{i}\sin\omega t\end{bmatrix} \tag{9}$$

$$\chi^{+}(t)=\begin{bmatrix}\cos\omega t & \mathrm{i}\sin\omega t\end{bmatrix} \tag{9'}$$

s 的平均值为

$$\langle s_x\rangle=\frac{\hbar}{2}\chi^{+}\sigma_x\chi=\frac{\hbar}{2}\chi^{+}\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}\chi=0$$

$$\langle s_y\rangle=\frac{\hbar}{2}\chi^{+}\sigma_y\chi=\frac{\hbar}{2}\chi^{+}\begin{bmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{bmatrix}\chi$$

$$=-\frac{\hbar}{2}\sin 2\omega t \tag{10}$$

$$\langle s_z\rangle=\frac{\hbar}{2}\chi^{+}\sigma_z\chi=\frac{\hbar}{2}\chi^{+}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\chi$$

$$=\frac{\hbar}{2}\cos 2\omega t$$

6.28 有一个自旋$\hbar/2$的粒子，磁矩$\mu=\mu_0\sigma$，置于均匀磁场$\boldsymbol{B}$中，$\boldsymbol{B}$指向任意方向(θ,φ). 不考虑轨道运动. 设$t=0$时粒子沿正z方向极化，即$\sigma_z=1$，$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_{t=0}=\boldsymbol{e}_3$，求$t>0$时粒子的极化方向，即求$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_t$.

解 先求出自旋波函数，再计算$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle$. 以$\boldsymbol{n}$表示$(\theta,\varphi)$方向单位矢量，$\boldsymbol{e}_1$、$\boldsymbol{e}_2$、$\boldsymbol{e}_3$表示$x$、$y$、$z$方向单位矢量，则

$$\boldsymbol{n}=n_1\boldsymbol{e}_1+n_2\boldsymbol{e}_2+n_3\boldsymbol{e}_3$$

$$=\sin\theta\cos\varphi\,\boldsymbol{e}_1+\sin\theta\sin\varphi\,\boldsymbol{e}_2+\cos\theta\boldsymbol{e}_3 \tag{1}$$

和自旋运动有关的 Hamilton 量为

$$H=-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}=-\mu_0B\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}=-\mu_0B\sigma_n \tag{2}$$

在σ_z表象中，σ_n的矩阵表示为

$$\sigma_n = \sigma_x n_1 + \sigma_y n_2 + \sigma_z n_3 = \begin{bmatrix} n_3 & n_1 - \mathrm{i}n_2 \\ n_1 + \mathrm{i}n_2 & -n_3 \end{bmatrix} \tag{3}$$

设粒子的自旋波函数为

$$\chi(t) = \begin{bmatrix} a(t) \\ b(t) \end{bmatrix} \tag{4}$$

$\chi(t)$满足 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\chi(t) = H\chi(t) = -\mu_0 B\sigma_n \chi(t) \tag{5}$$

σ_n 的本征值为± 1，H 的本征值(即定态能级)为

$$E = \mp \mu_0 B = \mp \hbar\omega$$

$$\boxed{\omega = \mu_0 B/\hbar} \tag{6}$$

因 ω 和 μ_0 同号，如 $\mu_0 < 0$ 则 $\omega < 0$. σ_n 和 H 的本征函数(参看题 6.12)为

$$\phi_1 = \frac{1}{\sqrt{2(1+n_3)}} \begin{bmatrix} 1 + n_3 \\ n_1 + \mathrm{i}n_2 \end{bmatrix}, \quad (\sigma_n = 1, E = -\hbar\omega)$$

$$\phi_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2(1+n_3)}} \begin{bmatrix} n_1 - \mathrm{i}n_2 \\ -1 - n_3 \end{bmatrix}, \quad (\sigma_x = -1, E = \hbar\omega) \tag{7}$$

式(5)的通解为

$$\chi(t) = C_1 \phi_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} + C_{-1}\phi_{-1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \tag{8}$$

C_1、C_{-1}由初始条件决定：

$$C_1 = \phi_1^+ \chi(0), \qquad C_{-1} = \phi_{-1}^+ \chi(0) \tag{9}$$

本题初始波函数为 $\sigma_z = 1$ 的本征函数，即

$$\chi(0)=\chi_{\frac{1}{2}}=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix} \tag{10}$$

因此

$$C_1=\sqrt{\frac{1+n_3}{2}},\qquad C_{-1}=\frac{n_1+\mathrm{i}n_2}{\sqrt{2(1+n_3)}} \tag{11}$$

代入式(8),即得

$$\chi(t)=\frac{1}{\sqrt{2(1+n_3)}}\begin{bmatrix}(1+n_3)C_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}+(n_1-\mathrm{i}n_2)C_{-1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\\(n_1+\mathrm{i}n_2)C_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}-(1+n_3)C_{-1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}\cos\omega t+\mathrm{i}n_3\sin\omega t\\(\mathrm{i}n_1-n_2)\sin\omega t\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}a(t)\\b(t)\end{bmatrix} \tag{12}$$

在$\chi(t)$态下,σ的平均值为

$$\langle\sigma_x\rangle=\chi^+\sigma_x\chi=[a^*b^*]\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a\\b\end{bmatrix}=a^*b+b^*a$$

$$=n_1n_3(1-\cos2\omega t)-n_2\sin2\omega t \tag{13a}$$

$$\langle\sigma_y\rangle=\chi^+\sigma_y\chi=\mathrm{i}(b^*a-a^*b)$$

$$=n_2n_3(1-\cos2\omega t)+n_1\sin2\omega t \tag{13b}$$

$$\langle\sigma_z\rangle=\chi^+\sigma_z\chi=a^*a-b^*b$$

$$=n_3^2+(1-n_3^2)\cos2\omega t \tag{13c}$$

如磁场$\boldsymbol{B}$指向正x方向,则

$$n_1=1,\qquad n_2=n_3=0$$

这时式(13)变成

$$\langle\sigma_x\rangle=0,\quad\langle\sigma_y\rangle=\sin2\omega t,\quad\langle\sigma_z\rangle=\cos2\omega t$$

这正是上题得到的结果(注意上题中的 ω 相当于本题 $-\omega$).

6.29 某个自旋 $\hbar/2$ 体系,磁矩 $\mu=\mu_0\sigma$. $t<0$ 时处于均匀磁场 $\boldsymbol{B}_0$ 中,$\boldsymbol{B}_0$ 指向正 z 方向. $t\geqslant 0$ 时,再加上一个旋转磁场 $\boldsymbol{B}_1(t)$,其方向和 z 轴垂直,

$$\boldsymbol{B}_1(t) = B_1\cos 2\omega_0 t\boldsymbol{e}_1 - B_1\sin 2\omega_0 t\boldsymbol{e}_2 \tag{1}$$

其中 $\omega_0=\mu_0 B_0/\hbar$. 已知 $t\leqslant 0$ 时体系处于 $s_z=\hbar/2$ 的本征态 $\chi_{\frac{1}{2}}$,求 $t>0$ 时体系的自旋波函数以及自旋反向所需时间.

解 和体系的自旋运动有关的 Hamilton 量为

$$H = -\mu\cdot[\boldsymbol{B}_0 + \boldsymbol{B}_1(t)],\quad t\geqslant 0 \tag{1}$$

在 s_z 表象中,H 的矩阵表示为

$$H = -\mu_0 B_1(\sigma_x\cos 2\omega_0 t - \sigma_y\sin 2\omega_0 t) - \mu_0 B_0\sigma_z$$

$$= -\mu_0\begin{bmatrix} B_0 & B_1 e^{2i\omega_0 t} \\ B_1 e^{-2i\omega_0 t} & -B_0 \end{bmatrix} \tag{1'}$$

设 $t\geqslant 0$ 时体系的自旋波函数为

$$\chi(t) = \begin{bmatrix} a(t) \\ b(t) \end{bmatrix} \tag{2}$$

代入 Schrödinger 方程

$$i\hbar\frac{d}{dt}\chi(t) = H\chi(t) \tag{3}$$

得到

$$\frac{d}{dt}a(t) = i\omega_0 a(t) + i\omega_1 b(t)e^{2i\omega_0 t}$$

$$\frac{d}{dt}b(t) = -i\omega_0 b(t) + i\omega_1 a(t)e^{-2i\omega_0 t} \tag{4}$$

其中

$$\omega_0 = \frac{\mu_0 B_0}{\hbar}, \qquad \omega_1 = \frac{\mu_0 B_1}{\hbar} \tag{5}$$

令

$$a(t) = c_1(t)e^{i\omega_0 t}, \qquad b(t) = c_2(t)e^{-i\omega_0 t} \tag{6}$$

代入式(4),即得 c_1、c_2 满足的方程组

$$\frac{d}{dt}c_1(t) = i\omega_1 c_2(t)$$

$$\frac{d}{dt}c_2(t) = i\omega_1 c_1(t) \tag{7}$$

初始条件为

$$\chi(0) = \begin{bmatrix} a(0) \\ b(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \chi_{\frac{1}{2}}, \quad \text{即} \begin{cases} c_1(0) = 1 \\ c_2(0) = 0 \end{cases} \tag{8}$$

式(7)中两式相加、减,可得

$$\frac{d}{dt}(c_1 + c_2) = i\omega_1(c_1 + c_2)$$

$$\frac{d}{dt}(c_1 - c_2) = -i\omega_1(c_1 - c_2) \tag{9}$$

解为

$$c_1(t) + c_2(t) = [c_1(0) + c_2(0)]e^{i\omega_1 t} = e^{i\omega_1 t}$$

$$c_1(t) - c_2(t) = [c_1(0) - c_2(0)]e^{-i\omega_1 t} = e^{-i\omega_1 t} \tag{10}$$

两式相加、减,即得

$$c_1(t) = \cos\omega_1 t, \quad c_2(t) = i\sin\omega_1 t \tag{11}$$

代入式(6),得到

$$a(t)=\cos\omega_1 t e^{i\omega_0 t},\quad b(t)=i\sin\omega_1 t e^{-i\omega_0 t} \tag{12}$$

再代入式(2),即得

$$\chi(t)=\begin{bmatrix}\cos\omega_1 t e^{i\omega_0 t}\\ i\sin\omega_1 t e^{-i\omega_0 t}\end{bmatrix}$$

$$=\cos\omega_1 t e^{i\omega_0 t}\chi_{\frac{1}{2}}+i\sin\omega_1 t e^{-i\omega_0 t}\chi_{-\frac{1}{2}} \tag{13}$$

容易看出

$$t=0,\quad \chi=\chi_{\frac{1}{2}}=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix},\quad s_z=\frac{\hbar}{2}$$

$$\langle \boldsymbol{s}\rangle=\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{e}_3$$

$$t=\frac{\pi}{2\omega_1},\quad \chi=ie^{-i\omega_0 t}\chi_{-\frac{1}{2}}=ie^{-i\omega_0 t}\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$$

$$s_z=-\frac{\hbar}{2},\quad \langle \boldsymbol{s}\rangle=-\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{e}_3$$

$$t=\frac{\pi}{\omega_1},\quad \chi=-e^{-i\omega_0 t}\chi_{\frac{1}{2}}=-e^{-i\omega_0 t}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$$

$$s_z=\frac{\hbar}{2},\quad \langle \boldsymbol{s}\rangle=\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{e}_3$$

亦即,每经过 $\Delta t=\pi/2\omega_1=\pi\hbar/2\mu_0 B_1$,体系的自旋指向就改变一次方向.体系的自旋态则在 $\chi_{\frac{1}{2}}$ 和 $\chi_{-\frac{1}{2}}$ 间作周期性振荡,周期为 $T=2\Delta t=\pi\hbar/\mu_0 B_1$.

本题内容就是磁共振的基本原理.

6.30 (a) 电子作自由运动时,Hamilton 量表示成 $H=\boldsymbol{p}^2/$

$2m$，试将其推广到在均匀磁场中运动的情况，求出电子的磁矩.

(b) 设自由电子的 Hamilton 量表示成 $H=\dfrac{(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})^2}{2m}$，作类似的推广和讨论.

解 (a) 自由电子的 Hamilton 算符表示成

$$H=\boldsymbol{p}^2/2m,\qquad(\boldsymbol{p}=-\mathrm{i}\hbar\nabla) \tag{1}$$

当电子在均匀磁场 $\boldsymbol{B}$ 中运动时，Hamilton 算符应取为

$$\begin{aligned}H&=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\\&=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+\frac{e}{2mc}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p})+\frac{e^2}{2mc^2}\boldsymbol{A}^2\end{aligned} \tag{2}$$

其中 $\boldsymbol{A}$ 为磁场的矢势，$\nabla\times\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}$. 如令 $\boldsymbol{A}$ 满足“横波条件”，$\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0$，并取

$$\boldsymbol{A}=\frac{1}{2}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r} \tag{3}$$

则

$$\begin{aligned}\frac{e}{2mc}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p})&=\frac{e}{mc}(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p})=\frac{e}{2mc}(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{p}\\&=\frac{e}{2mc}\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{l}=-\boldsymbol{B}\cdot\mu_l\end{aligned} \tag{4}$$

其中

$$\boldsymbol{l}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}\qquad\text{(轨道角动量)} \tag{5}$$

$$\boxed{\mu_l=-\frac{e}{2mc}\boldsymbol{l}}\qquad\text{(轨道磁矩)} \tag{6}$$

式(2)可以表示成

$$H=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}-\mu_l\boldsymbol{B}+\frac{e^2}{2mc^2}\boldsymbol{A}^2 \tag{2'}$$

其中最后一项属于逆磁性效应，与第二项相比，常可忽略不计. 上式很好地反映了电子的轨道角动量对磁矩的贡献. 但因没有考虑自旋，所以反映不出电子的自旋角动量对磁矩的贡献.

(b) 为了在 Hamilton 量中反映出电子的自旋，设自由电子的 Hamilton 量取为

$$\boxed{H = \frac{(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})^2}{2m}} \tag{7}$$

由于

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})^2 = \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p} + \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{p}) = p^2 \tag{8}$$

式(7)和(1)是等价的. 但在存在磁场的情况下，Hamilton 算符应推广为

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m}\left[\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\right]^2 \\ &= \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 \\ &\quad + \frac{\mathrm{i}}{2m}\boldsymbol{\sigma}\cdot\left[\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\times\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\right] \end{aligned} \tag{9}$$

其中

$$\begin{aligned} \left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\times\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right) &= \frac{e}{c}(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{p}) \\ &= -\mathrm{i}\hbar\frac{e}{c}(\nabla\times\boldsymbol{A}) \\ &= -\mathrm{i}\frac{e\hbar}{c}\boldsymbol{B} \end{aligned} \tag{10}$$

代入式(9)，即得

$$H = \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + \frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}$$

$$=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2-\mu_s\cdot\boldsymbol{B} \tag{11}$$

其中

$$\boxed{\mu_s=-\frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}=-\frac{e}{mc}\boldsymbol{s}} \tag{12}$$

为电子的自旋磁矩(内禀磁矩).

和式(2)或(2′)相比,式(11)中多了一项,它代表电子的内禀磁矩和磁场的相互作用.

由此可见,自由电子 Hamilton 量改用式(7)是成功的,由此推广得出的式(9)[即式(11)]较全面地反映了电子在磁场中的运动.

6.31 以 $\boldsymbol{s}$、$\boldsymbol{l}$、$\boldsymbol{j}$ 表示电子的自旋,轨道角动量及总角动量,取 $\hbar=1$. $\boldsymbol{j}$ 和 $\boldsymbol{j}^2$ 可以表示成

$$\boldsymbol{j}=\boldsymbol{s}+\boldsymbol{l}=\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{l} \tag{1}$$

$$\boldsymbol{j}^2=\boldsymbol{s}^2+\boldsymbol{l}^2+2\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{l}=\frac{3}{4}+\boldsymbol{l}^2+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l} \tag{2}$$

(a) 计算 $[\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}]$,$[\boldsymbol{l},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}]$,$[\boldsymbol{j},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}]$,$[\boldsymbol{j},\boldsymbol{l}^2]$;

(b) 求 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}$ 和 $\boldsymbol{j}^2$ 的本征值.

解 (a) $\boldsymbol{s}=\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$,它和 $\boldsymbol{l}$ 属于不同自由度,彼此可对易.根据题 6.21 的计算,

$$[\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}]=2\mathrm{i}\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{\sigma}=-2\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{l} \tag{3}$$

其次,利用 $\boldsymbol{l}$ 本身的对易式

$$\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{l}=\mathrm{i}\boldsymbol{l}\qquad(\text{取}\hbar=1) \tag{4}$$

容易求出

$$[l_x,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}]=\sigma_y[l_x,l_y]+\sigma_z[l_x,l_z]$$

$$=\mathrm{i}(\sigma_y l_z - \sigma_z l_y) = \mathrm{i}(\boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{l})_x$$

因此

$$[\boldsymbol{l}, \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{l}] = \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{l} \tag{5}$$

利用式(3)及(5),立即得到

$$[\boldsymbol{j}, \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{l}] = [\boldsymbol{l}, \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{l}] + \frac{1}{2}[\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{l}] = 0 \tag{6}$$

另外

$$[\boldsymbol{j}, \boldsymbol{l}^2] = [\boldsymbol{l}, \boldsymbol{l}^2] + [\boldsymbol{s}, \boldsymbol{l}^2] = 0 \tag{7}$$

$$[\boldsymbol{l}^2, \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{l}] = \boldsymbol{\sigma} \cdot [\boldsymbol{l}^2, \boldsymbol{l}] + [\boldsymbol{l}^2, \boldsymbol{\sigma}] \cdot \boldsymbol{l} = 0 \tag{8}$$

因此,$\boldsymbol{j}$、$\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{l}$、$\boldsymbol{l}^2$ 互相对易. 由式(2)可知,j^2、$\boldsymbol{j}$、$\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{l}$、$\boldsymbol{l}^2$ 互相对易. 通常选取(j^2, j_z, l^2)作为力学量完全集.

(b) 利用公式

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{B}) = \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B} + \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{B}) \tag{9}$$

并取 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}=\boldsymbol{l}$,即得

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{l})^2 = \boldsymbol{l} \cdot \boldsymbol{l} + \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{l} \times \boldsymbol{l}) = \boldsymbol{l}^2 - \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{l} \tag{10}$$

对于 $\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{l}$ 和 $\boldsymbol{l}^2$ 的共同本征态(即 $\boldsymbol{j}^2$ 和 $\boldsymbol{l}^2$ 的共同本征态),

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{l})^2 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{l} - \boldsymbol{l}^2 = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{l})^2 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{l} - l(l+1)$$

$$=0$$

即

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{l} - l)(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{l} + l + 1) = 0 \tag{11}$$

因此,$\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{l}$ 的本征值为(参看下册题 3.13)

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{l} = l, \qquad -(l+1) \tag{12}$$

将 $\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{l}$ 及 $\boldsymbol{l}^2$ 的本征值代入式(2),即得 $\boldsymbol{j}^2$ 的本征值:

$$\boxed{\begin{aligned} &\boldsymbol{j}^2=j(j+1), \quad j=l\pm\frac{1}{2} \\ &\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}=l, \qquad j=l+\frac{1}{2} \\ &\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}=-(l+1), j=l-\frac{1}{2} \end{aligned}} \tag{13}$$

注意，$l=0$ 时，$\boldsymbol{l}^2=0$；$\boldsymbol{l}=0$，因此 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}=0$，$j=\frac{1}{2}$. $j=l-\frac{1}{2}$的情况只能出现于 $l\neq 0$ 的情况.

6.32 对于电子或其它自旋 1/2 粒子，$(\boldsymbol{l}^2, \boldsymbol{j}^2, j_z)$的共同本征函数记为 ϕ_{lm_j}，相应于本征值(取$\hbar=1$)

$$\boldsymbol{l}^2 = l(l+1), \qquad l = 0,1,2,\cdots$$

$$\boldsymbol{j}^2 = j(j+1), \qquad j = l+\frac{1}{2}, l-\frac{1}{2}$$

$$j_z = m_j, \qquad m_j = j, j-1, \cdots, (-j)$$

在属于同一个 l 值的态矢量子空间中，定义算符

$$\Lambda_l^{+} = \frac{1}{2l+1}(l+1+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l})$$

$$\Lambda_l^{-} = \frac{1}{2l+1}(l-\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}) \tag{1}$$

求这两个算符的主要代数关系以及它们对 ϕ_{lm_j} 的作用规则.

解 由定义式(1)立即可以看出

$$\boxed{\Lambda_l^{+}+\Lambda_l^{-}=1} \tag{2}$$

利用上题导出的公式

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l})^2+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}-l(l+1)=0 \tag{3}$$

容易证明

$$\boxed{(\Lambda_l^+)^2 = \Lambda_l^+, \quad (\Lambda_l^-)^2 = \Lambda_l^-} \tag{4}$$

$$\boxed{\Lambda_l^+ \Lambda_l^- = \Lambda_l^- \Lambda_l^+ = 0} \tag{5}$$

根据上题计算，ϕ_{ljm_j}也是$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}$的本征函数，本征值为

$$j = l + \frac{1}{2} \text{ 时}, \quad \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l} = l$$

$$j = l - \frac{1}{2} \text{ 时}, \quad \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l} = -(l+1) \tag{6}$$

因此

$$\boxed{\begin{aligned} &\Lambda_l^+ \phi_{l,l+\frac{1}{2},m_j} = \phi_{l,l+\frac{1}{2},m_j}, \quad \Lambda_l^+ \phi_{l,l-\frac{1}{2},m_j} = 0 \\ &\Lambda_l^- \phi_{l,l-\frac{1}{2},m_j} = \phi_{l,l-\frac{1}{2},m_j}, \quad \Lambda_l^- \phi_{l,l+\frac{1}{2},m_j} = 0 \end{aligned}} \tag{7}$$

由此可知，Λ_l^+ 是 $j=l+\frac{1}{2}$态的投影算符，Λ_l^- 是 $j=l-\frac{1}{2}$态的投影算符.

6.33 对于自旋 1/2 粒子，求算符 $\sigma_r=\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}/r$ 对$(\boldsymbol{l}^2, j^2, j_z)$的共同本征函数 ϕ_{ljm_j}的作用结果(取$\hbar=1$).

解 我们从 σ_r 和 j 的对易关系入手.$\boldsymbol{\sigma}$ 和 $\boldsymbol{r}/r$ 可对易，利用题 6.21 式(5)，即得

$$[\boldsymbol{\sigma}, \sigma_r] = 2\mathrm{i}\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\sigma} \tag{1}$$

$\boldsymbol{\sigma}$ 及 r 均与 $\boldsymbol{l}$ 对易，利用 $\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{l}$ 的对易式

$$[x_\alpha, l_\beta] = \mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}x_\gamma, \qquad (\text{取}\hbar = 1)$$

可得

$$[l_z, \sigma_r] = \frac{1}{r}[l_z, x\sigma_x + y\sigma_y + z\sigma_z]$$

$$=\frac{\mathrm{i}}{r}(y\sigma_x - x\sigma_y) = -\frac{\mathrm{i}}{r}(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\sigma})_z$$

亦即

$$[\boldsymbol{l},\sigma_r] = -\mathrm{i}\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\sigma} \tag{2}$$

由于

$$\boldsymbol{j} = \boldsymbol{l} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma} \tag{3}$$

利用式(1)、(2)即得

$$\boxed{[\boldsymbol{j},\sigma_r] = 0} \tag{4}$$

因此 σ_r 和 $\boldsymbol{j}^2$、j_z 对易，σ_r 作用于 ϕ_{ljm_j} 的结果，量子数 j 和 m_j 均不变.

给定 j 和 m_j 后，ϕ_{ljm_j} 有两种，相应于 $l=j\pm\frac{1}{2}$. 具体函数形式为[①](θ,φ,s_z 表象)

$$\phi^{\Lambda}_{jm_j} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}}\begin{bmatrix}\sqrt{l+m+1} & Y_{l_m}\\ \sqrt{l-m} & Y_{l_{m+1}}\end{bmatrix}$$

$$j = l + \frac{1}{2}$$

$$m_j = m + \frac{1}{2} \tag{5a}$$

$$\phi^{\Lambda}_{jm_j} = \frac{1}{\sqrt{2l'+1}}\begin{bmatrix}-\sqrt{l'-m} & Y_{l'm}\\ \sqrt{l'+m+1} & Y_{l'm+1}\end{bmatrix}$$

① 参看曾谨言，《量子力学》卷 I（科学出版社，1997），§ 8.2.

$$j = l' - \frac{1}{2}, \qquad (l' \neq 0)$$

$$m_j = m + \frac{1}{2} \tag{5b}$$

注意，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(5)中两种波函数的宇称相反.

σ_r 是奇宇称算符，受它作用后，波函数的宇称要改变正负号. 但由于量子数 j, m_j 不变，σ_r 对 ϕ_{ljm_j} 作用的结果必然是

$$\sigma_r \phi^A_{jm_j} = C\phi^B_{jm_j}, \quad \sigma_r \phi^B_{jm_j} = C'\phi^A_{jm_j} \tag{6}$$

由于 σ_r 是 Hermite 算符，而且

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{r})^2 = r^2, \quad (\sigma_r)^2 = 1 \tag{7}$$

式(5)中两个波函数又都是归一化的，所以

$$\phi^A_{jm_j} = (\sigma_r)^2 \phi^A_{jm_j} = \sigma_r C \phi^B_{jm_j} = C'C\phi^A_{jm_j}$$

因此

$$C'C = 1, \qquad C' = 1/C$$

又

$$C' = \langle \phi^A_{jm_j} | \sigma_r | \phi^B_{jm_j} \rangle = (\langle \phi^B_{jm_j} | \sigma_r | \phi^A_{jm_j} \rangle)^* = C^*$$

因此

$$C'C = C^*C = 1, \qquad |C| = 1 \tag{8}$$

如果限于利用对易关系，式(6)中系数 C 和 C' 只能确定到式(8)的程度. 如再采用 Pauli 表象中 σ_r 的矩阵表示

$$\sigma_r = \frac{1}{r}(x\sigma_x + y\sigma_y + z\sigma_z)$$

$$=\begin{bmatrix}\cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi}\\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta\end{bmatrix} \tag{9}$$

并利用球谐函数的递推公式，容易算出 $C=C'=-1$，即

$$\boxed{\begin{aligned}\sigma_r\phi^A_{jm_j} &= -\phi^B_{jm_j}\\ \sigma_r\phi^B_{jm_j} &= -\phi^A_{jm_j}\end{aligned}} \tag{10}$$

6.34 对于电子和其他自旋 1/2 粒子，s_z 的本征态常记为 α 和 β，α 即 $\chi_{\frac{1}{2}}$，β 即 $\chi_{-\frac{1}{2}}$. 已知电子的波函数为

$$\psi(r,\theta,\varphi,s_z) = \alpha Y_{l0}(\theta,\varphi)R(r) \tag{1}$$

求总角动量 j^2，j_z 的可能测值及相应概率(取$\hbar=1$).

解一 径向波函数 $R(r)$显然与问题无关，只需考虑波函数的 (θ,φ,s_z)部分，即

$$\phi(\theta,\varphi,s_z) = \alpha Y_{l0} = \begin{bmatrix}Y_{l0}\\ 0\end{bmatrix} \tag{1'}$$

显然这是 l^2、l_z、σ_z、j_z 的共同本征函数，本征值为

$$l^2 = l(l+1),\quad l_z = 0,\quad \sigma_z = 1,\quad j_z = 1/2 \tag{2}$$

所以 j_z 的测量值必然是 1/2(概率=1).

j^2 的本征值为 $j(j+1)$，$j=l\pm\frac{1}{2}$. 如将 $\phi=\alpha Y_{l0}$表示成(l^2，j^2，j_z)的共同本征态 ϕ_{ljm_j}的线性叠加，必为

$$\phi = \alpha Y_{l0} = C_1\phi_{l,l+\frac{1}{2},\frac{1}{2}} + C_2\phi_{l,l-\frac{1}{2},\frac{1}{2}} \tag{3}$$

则 $j=l+\frac{1}{2}$的概率为$|C_1|^2$，$j=l-\frac{1}{2}$的概率为$|C_2|^2$. ϕ_{ljm_j}的具体函

数形式见上题，

$$\phi_{l,l+\frac{1}{2},\frac{1}{2}}=\sqrt{\frac{l+1}{2l+1}}\,\alpha Y_{l0}+\sqrt{\frac{l}{2l+1}}\,\beta Y_{l1}$$
$$\phi_{l,l-\frac{1}{2},\frac{1}{2}}=-\sqrt{\frac{l}{2l+1}}\,\alpha Y_{l0}+\sqrt{\frac{l+1}{2l+1}}\,\beta Y_{l1} \tag{4}$$

容易求得

$$C_1=\langle\phi_{l,l+\frac{1}{2},\frac{1}{2}}|\alpha Y_{l0}\rangle=\sqrt{\frac{l+1}{2l+1}}$$

$$|C_1|^2=\frac{l+1}{2l+1}$$

$$C_2=\langle\phi_{l,l-\frac{1}{2},\frac{1}{2}}|\alpha Y_{l0}\rangle=-\sqrt{\frac{l}{2l+1}} \tag{5}$$

$$|C_2|^2=\frac{l}{2l+1}.$$

因此，测得 $j^2=\left(l+\frac{1}{2}\right)\left(l+\frac{3}{2}\right)$ 的概率为 $\frac{l+1}{2l+1}$

测得 $j^2=\left(l-\frac{1}{2}\right)\left(l+\frac{1}{2}\right)$ 的概率为 $\frac{l}{2l+1}$

解二 关于 j_z 取值的论证和结论与解一相同. j^2 的可能测值为本征值 $j(j+1)$，$j=l\pm\frac{1}{2}$. 设 $j=l+\frac{1}{2}$ 的概率为 w，则 $j=l-\frac{1}{2}$ 的概率为 $(1-w)$，j^2 的平均值应为

$$\langle j^2\rangle=\left(l+\frac{1}{2}\right)\left(l+\frac{3}{2}\right)\omega+\left(l-\frac{1}{2}\right)\left(l+\frac{1}{2}\right)(1-\omega)$$

$$=(2l+1)\omega+l^2-\frac{1}{4} \tag{6}$$

本题所给波函数中，自旋变量和轨道变量是分离的，$\langle j^2\rangle$很容易计算如下：

$$j^2 = l^2 + \frac{3}{4} + \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}$$

$$= l^2 + \frac{3}{4} + \sigma_x l_x + \sigma_y l_y + \sigma_z l_z \tag{7}$$

波函数 $\phi = \alpha Y_{l0}$ 是 l^2 的本征函数，所以

$$\langle l^2\rangle = l(l+1)$$

由于 $\phi = \alpha Y_{l0}$ 是 l_z 的本征函数，$\langle l_x\rangle$和$\langle l_y\rangle$均为 0，$\langle l_z\rangle$也为 0，因此

$$\langle \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}\rangle = \langle \alpha Y_{l0}|\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}|\alpha Y_{l0}\rangle = \langle\alpha|\boldsymbol{\sigma}|\alpha\rangle\cdot\langle Y_{l0}|\boldsymbol{l}|Y_{l0}\rangle$$

$$= \langle\boldsymbol{\sigma}\rangle\cdot\langle\boldsymbol{l}\rangle = 0 \tag{8}$$

于是

$$\langle j^2\rangle = l(l+1) + \frac{3}{4} \tag{9}$$

比较式(6)和(9)，即得

$$w = \frac{l+1}{2l+1}, \qquad 1-w = \frac{l}{2l+1} \tag{10}$$

因此，测得 $j^2 = \left(l+\frac{1}{2}\right)\left(l+\frac{3}{2}\right)$ 的概率为 $w = \frac{l+1}{2l+1}$，

测得 $j^2 = \left(l-\frac{1}{2}\right)\left(l+\frac{1}{2}\right)$ 的概率为 $(1-w) = \frac{l}{2l+1}$.

6.35 自旋 1/2 粒子，处于(l^2, j^2, j_z)的共同本征态$|ljm_j\rangle$，证明

$$\langle\sigma\rangle = \langle j\rangle\left[\frac{j(j+1) - l(l+1) + \frac{3}{4}}{j(j+1)}\right]. \qquad (\text{取}\hbar = 1)$$

证 利用题 6.21 的式(4),令 $A=l$,得到

$$\sigma(\sigma\cdot l)+(\sigma\cdot l)\sigma=2l \tag{1}$$

上式在$|ljm_j\rangle$态下求平均值,由于$|ljm_j\rangle$也是$\sigma\cdot l$的本征态,故得

$$\begin{aligned}\langle ljm_j|\sigma(\sigma\cdot l)|ljm_j\rangle &=\langle ljm_j|(\sigma\cdot l)\sigma|ljm_j\rangle\\ &=\langle ljm_j|\sigma|ljm_j\rangle(\sigma\cdot l)_{\text{本征值}}\end{aligned} \tag{2}$$

因此

$$\langle l\rangle=\langle\sigma\rangle(\sigma\cdot l)_{\text{本征值}} \tag{3}$$

$$\langle j\rangle=\langle l+\frac{1}{2}\sigma\rangle=\langle\sigma\rangle\left(\sigma\cdot l+\frac{1}{2}\right)_{\text{本征值}} \tag{4}$$

利用公式

$$(\sigma\cdot l)^2+\sigma\cdot l-l^2=0 \tag{5}$$

可得

$$j^2=l^2+\sigma\cdot l+\frac{3}{4} \tag{6}$$

$$=(\sigma\cdot l)^2+2\sigma\cdot l+\frac{3}{4}$$

$$=\left(\sigma\cdot l+\frac{1}{2}\right)\left(\sigma\cdot l+\frac{3}{2}\right) \tag{6'}$$

因此,式(4)两端各乘$\left(\sigma\cdot l+\frac{3}{2}\right)_{\text{本征值}}$,即得

$$\begin{aligned}\langle\sigma\rangle(j^2)_{\text{本征值}}&=\langle j\rangle\left(\sigma\cdot l+\frac{3}{2}\right)_{\text{本征值}}\\ &=\langle j\rangle\left(j^2-l^2+\frac{3}{4}\right)_{\text{本征值}}\end{aligned}$$

亦即

$$\boxed{\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle = \langle \boldsymbol{j} \rangle \left[\frac{j(j+1) - l(l+1) + 3/4}{j(j+1)} \right]} \tag{7}$$

在$|ljm_j\rangle$态下，$\langle j_x \rangle = \langle j_y \rangle = 0$，$\langle j_z \rangle = m_j$，上式即

$$\langle \sigma_x \rangle = 0, \qquad \langle \sigma_y \rangle = 0, \tag{7a}$$

$$\boxed{\langle \sigma_z \rangle = m_j \frac{j(j+1) - l(l+1) + 3/4}{j(j+1)}} \tag{7b}$$

以$l = j \pm \frac{1}{2}$代入上式，可得

$$\langle \sigma_z \rangle = \begin{cases} m_j/j, & j = l + \frac{1}{2} \\ -m_j/(j+1), & j = l - \frac{1}{2} \end{cases} \tag{8}$$

利用

$$\boldsymbol{l} = \boldsymbol{j} - \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$$

易得$\boldsymbol{l}$在$|ljm_j\rangle$态下的平均值为

$$\left.\begin{aligned} \langle l_x \rangle &= 0, \\ \langle l_y \rangle &= 0, \end{aligned}\right\} \tag{9a}$$

$$\begin{aligned} \langle l_z \rangle &= m_j - \frac{1}{2}\langle \sigma_z \rangle \\ &= m_j \frac{j(j+1) + l(l+1) - 3/4}{2j(j+1)} \end{aligned} \tag{9b}$$

以上数值结果也可以利用$|ljm_j\rangle$的具体波函数形式(见题 6.33)直接计算平均值而求得.

6.36 电子的磁矩(算符)为

$$\mu = \mu_l + \mu_s = -\frac{e}{2m_e c}(\boldsymbol{l} + 2\boldsymbol{s}) \tag{1}$$

试对$|ljm_j\rangle$态计算μ_z平均值.

解 如以 Bohr 磁子$\mu_B=e\hbar/2m_ec$作为磁矩单位,则电子的磁矩算符可以写成(以下取$\hbar=1$)

$$\mu=-(\boldsymbol{l}+2\boldsymbol{s})=-(\boldsymbol{j}+\boldsymbol{s})=-\left(\boldsymbol{j}+\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\right) \tag{2}$$

利用上题结果,即得

$$\langle ljm_j|\mu_z|ljm_j\rangle=-gm_j \tag{3}$$

其中

$$\boxed{g=1+\frac{j(j+1)-l(l+1)+3/4}{2j(j+1)}}$$

(Landè g 因子) (4)

通常以m_j取最大值($m_j=j$)时μ_z的平均值作为磁矩观测值的定义,记作μ.对于电子,

$$\boxed{\mu=\langle ljj|\mu_z|ljj\rangle=-gj} \tag{5}$$

即

$$\mu=\begin{cases}-\left(j+\frac{1}{2}\right), & j=l+\frac{1}{2}\\ -j(2j+1)/(2j+2), & j=l-\frac{1}{2}\end{cases} \tag{5'}$$

6.37 根据实验测定,质子(p)和中子(n)的内禀磁矩为

$$\mu_s(\mathrm{p})=2.793\mu_N,\qquad \mu_s(\mathrm{n})=-1.913\mu_N$$

其中$\mu_N=e\hbar/2m_pc$(核磁子).当质子或中子处于$|ljj\rangle$态时,求总磁矩z分量的平均值,即计算

$$\mu=\langle ljj|\mu_z|ljj\rangle \tag{1}$$

解 (a)中子.中子无电荷,轨道运动对磁矩无贡献.总磁矩即自旋磁矩,如以核磁子 μ_N 为单位,则

$$\mu = -1.913\sigma \tag{2}$$

$\langle\sigma\rangle$已在题 6.35 中求出,结果为

$$\mu = -1.913\langle ljj|\sigma_z|ljj\rangle$$

$$= \begin{cases} -1.913, & j = l + \frac{1}{2} \\ 1.913j/(j+1), & j = l - \frac{1}{2} \end{cases} \tag{3}$$

(b) 质子.质子总磁矩应为轨道磁矩及自旋磁矩之和.以核磁子 μ_N 为单位,总磁矩为

$$\mu = \mu_l + \mu_s = \boldsymbol{l} + 2.793\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{j} + 2.293\boldsymbol{\sigma} \tag{4}$$

利用题 6.35 的式(8),

$$\langle ljj|\sigma_z|ljj\rangle = \begin{cases} 1, & j = l + \frac{1}{2} \\ -\frac{j}{j+1}, & j = l - \frac{1}{2} \end{cases} \tag{5}$$

即得

$$\mu = \langle ljj|(j_z + 2.293\sigma_z)|ljj\rangle$$

$$= \begin{cases} j + 2.293, & j = l + \frac{1}{2} \\ j - 2.293\frac{j}{j+1}, & j = l - \frac{1}{2} \end{cases} \tag{6}$$

式(3)和(6)就是单核子磁矩的 Schmidt 公式.

6.38 ^{15}N 核由 7 个质子和 8 个中子组成,磁矩的实验值为

$-0.28\mu_N$. 按照原子核壳层模型，可以认为这磁矩主要来自处于 $1p_{1/2}$ 态的一个质子的贡献. 试用上题公式计算 ^{15}N 核的磁矩理论值.

解 由上题式(6)，取 $l=1, j=\frac{1}{2}=l-\frac{1}{2}$，即得

$$\mu=\frac{1}{2}-2.293\times\frac{1}{3}=-0.264\mu_N$$

这个结果和实验值大约相差 6%，可以认为基本符合.

6.39 对于两个自旋 1/2 粒子组成的体系，以 s_1、σ_1 和 s_2、σ_2 分别表示粒子 1 和 2 的自旋角动量及 Pauli 算符，

$$s_1=\frac{1}{2}\sigma_1,\quad s_2=\frac{1}{2}\sigma_2. \qquad (\text{取}\hbar=1)$$

试求 $\sigma_1\cdot\sigma_2$ 满足的最简代数方程，并用以确定 $\sigma_1\cdot\sigma_2$ 的本征值，进而再确定总自旋 S^2 的本征值.

解 σ_1 与 σ_2 分别属于粒子 1 和 2，因而互相对易. 利用公式

$$(\sigma\cdot A)(\sigma\cdot A)=A\cdot A+\mathrm{i}\sigma\cdot(A\times A) \qquad (1)$$

并令 $\sigma\to\sigma_1, A\to\sigma_2$，即得

$$(\sigma_1\cdot\sigma_2)^2=\sigma_2\cdot\sigma_2+\mathrm{i}\sigma_1\cdot(\sigma_2\times\sigma_2) \qquad (2)$$

由于

$$\sigma_2\cdot\sigma_2=3,\quad \sigma_2\times\sigma_2=2\mathrm{i}\sigma_2 \qquad (3)$$

代入式(2)，即得

$$(\sigma_1\cdot\sigma_2)^2+2\sigma_1\cdot\sigma_2-3$$

$$=(\sigma_1\cdot\sigma_2-1)(\sigma_1\cdot\sigma_2+3)=0 \qquad (4)$$

这无疑是 $\sigma_1\cdot\sigma_2$ 满足的最简单的代数方程，因此 $\sigma_1\cdot\sigma_2$ 的本征值为(参看本书下册题 3.13 证明的定理)

$$\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 = 1, -3 \tag{5}$$

总自旋为

$$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{s}_1 + \boldsymbol{s}_2 = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2) \tag{6}$$

$$\boldsymbol{S}^2 = \frac{1}{4}(\boldsymbol{\sigma}_1^2 + \boldsymbol{\sigma}_2^2 + 2\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2)$$

$$= \frac{3}{2} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 \tag{7}$$

因此 $\boldsymbol{S}^2$ 的本征值为

$$\boxed{\begin{aligned} &\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 = 1, \quad \boldsymbol{S}^2 = 2 \\ &\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 = -3, \quad \boldsymbol{S}^2 = 0 \end{aligned}} \tag{8}$$

亦即

$$\boldsymbol{S}^2 = S(S+1), \quad S = 1, 0 \tag{8'}$$

如将 $\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2$ 作用于$(\boldsymbol{S}^2, S_z)$共同本征态 χ_{SM_S}，显然有下列结果：

$$\begin{aligned} &S = 1(\text{三重态}), \quad \boxed{\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 \chi_{1M_S} = \chi_{1M_S}} \quad M_S = 1, 0, -1 \\ &S = 0(\text{单态}), \quad \boxed{\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 \chi_{00} = -3\chi_{00}} \end{aligned} \tag{9}$$

6.40 对于两个自旋 1/2 粒子组成的体系，以 P_{12}表示两粒子间的“自旋交换算符”，即定义

$$P_{12}\chi(s_{1z}, s_{2z}) = \chi(s_{2z}, s_{1z}) \tag{1}$$

取$\hbar=1$，试证明

$$\boxed{P_{12} = \frac{1}{2}(1 + \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2) = \boldsymbol{S}^2 - 1} \tag{2}$$

证 自旋三重态 χ_{1M_S}($S=1, M_S=1, 0, -1$)是交换对称的，

$$P_{12}\chi_{1M_S} = \chi_{1M_S} \tag{3}$$

自旋单态 $\chi_{00}(S=0, M_S=0)$是交换反对称的，

$$P_{12}\chi_{00} = -\chi_{00} \tag{4}$$

和上题式(9)比较，显然可见，对于 $S=1$ 和 0，均有

$$P_{12}\chi_{SM_S} = \frac{1}{2}(1+\sigma_1\cdot\sigma_2)\chi_{SM_S} = (S^2-1)\chi_{SM_S} \tag{5}$$

体系的任何自旋态 $\chi(s_{1z}, s_{2z})$总可以表示成各 χ_{SM_S}的线性叠加，因此式(2)对体系的任何自旋态成立.

6.41 对于两个自旋 1/2 粒子组成的体系，试写出由 σ_1 和 σ_2 (或 s_1 和 s_2)构成的各种可能的三重乘积，并化简(取$\hbar=1$).

解 基本关系式有(单粒子公式只对粒子 1 写出)

(a) $s_1^2=\frac{3}{4}$, $\sigma_1^2=3$; $(s_{1x})^2=\frac{1}{4}$, $(\sigma_{1x})^2=1$, 等等. (1)

(b) $s_1\times s_1 = is_1$, $\sigma_1\times\sigma_1 = 2i\sigma_1$ (2)

(c) $\sigma_{1x}\sigma_{1y} = -\sigma_{1y}\sigma_{1x} = i\sigma_{1z}$, 等等. (3)

(d) s_1 与 s_2 对易, $s_1\cdot s_2 = s_2\cdot s_1$, $s_1\times s_2 = -s_2\times s_1$ (4)

三重乘积，有以下各种：

1° $$s_1\cdot(s_1\times s_2) = (s_1\times s_1)\cdot s_2 = is_1\cdot s_2 \tag{5}$$

$$\begin{aligned} s_2\cdot(s_1\times s_2) &= -s_2\cdot(s_2\times s_1) \\ &= -(s_2\times s_2)\cdot s_1 \\ &= -is_1\cdot s_2 \end{aligned} \tag{6}$$

$$\sigma_1\cdot(\sigma_1\times\sigma_2) = 2i\sigma_1\cdot\sigma_2 \tag{7}$$

$$\sigma_2\cdot(\sigma_1\times\sigma_2) = -2i\sigma_1\cdot\sigma_2 \tag{8}$$

2° $\sigma_1(\sigma_1\cdot\sigma_2)$型. 由于 σ_1 与 σ_2 对易，利用题 6.21 证明的公式

$$\begin{aligned} \sigma(\sigma\cdot A) - A &= A - (\sigma\cdot A)\sigma \\ &= iA\times\sigma, \quad (\sigma, A \text{ 对易}) \end{aligned}$$

令 σ 和 A 一个等于 σ_1，另一个等于 σ_2，即得

$$\sigma_1(\sigma_1 \cdot \sigma_2) = \sigma_2 - \mathrm{i}\sigma_1 \times \sigma_2 \tag{9}$$

$$\sigma_2(\sigma_1 \cdot \sigma_2) = \sigma_1 + \mathrm{i}\sigma_1 \times \sigma_2 \tag{10}$$

$$(\sigma_1 \cdot \sigma_2)\sigma_1 = \sigma_2 + \mathrm{i}\sigma_1 \times \sigma_2 \tag{11}$$

$$(\sigma_1 \cdot \sigma_2)\sigma_2 = \sigma_1 - \mathrm{i}\sigma_1 \times \sigma_2 \tag{12}$$

$$s_1(s_1 \cdot s_2) = \frac{1}{4}s_2 - \frac{\mathrm{i}}{2}s_1 \times s_2, \text{等等.} \tag{13}$$

$$[s_1 \cdot s_2, s_1] = \mathrm{i}s_1 \times s_2 \tag{14}$$

$$[s_1 \cdot s_2, s_2] = -\mathrm{i}s_1 \times s_2 \tag{15}$$

3° $s_1 \times (s_1 \times s_2)$ 型. 利用矢量算符公式(见题 4.1)

$$A \times (B \times C) = \overbrace{A \cdot (BC)} - (A \cdot B)C$$

$$(A \times B) \times C = \overbrace{A \cdot (BC)} - A(B \cdot C)$$

可得

$$s_1 \times (s_1 \times s_2) = (s_1 \cdot s_2)s_1 - \frac{3}{4}s_2$$

$$= \frac{\mathrm{i}}{2}s_1 \times s_2 - \frac{1}{2}s_2 \tag{16}$$

$$(s_1 \times s_2) \times s_1 = \frac{3}{4}s_2 - s_1(s_1 \cdot s_2)$$

$$= \frac{1}{2}s_2 + \frac{\mathrm{i}}{2}s_1 \times s_2 \tag{17}$$

$$s_2 \times (s_1 \times s_2) = \frac{1}{2}s_1 + \frac{\mathrm{i}}{2}s_1 \times s_2 \tag{18}$$

$$(s_1 \times s_2) \times s_2 = \frac{\mathrm{i}}{2}s_1 \times s_2 - \frac{1}{2}s_1 \tag{19}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_1 \times (\boldsymbol{\sigma}_1 \times \boldsymbol{\sigma}_2) = \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1 \times \boldsymbol{\sigma}_2 - 2\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{20}$$

$$(\boldsymbol{\sigma}_1 \times \boldsymbol{\sigma}_2) \times \boldsymbol{\sigma}_1 = \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1 \times \boldsymbol{\sigma}_2 + 2\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{21}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_2 \times (\boldsymbol{\sigma}_1 \times \boldsymbol{\sigma}_2) = \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1 \times \boldsymbol{\sigma}_2 + 2\boldsymbol{\sigma}_1 \tag{22}$$

$$(\boldsymbol{\sigma}_1 \times \boldsymbol{\sigma}_2) \times \boldsymbol{\sigma}_2 = \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1 \times \boldsymbol{\sigma}_2 - 2\boldsymbol{\sigma}_1 \tag{23}$$

4° 总自旋 $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2$，

$$\boldsymbol{S}^2 = 2\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2 + \frac{3}{2} \tag{24}$$

$$[\boldsymbol{S}^2, \boldsymbol{s}_1] = 2[\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2, \boldsymbol{s}_1] = 2\mathrm{i}\boldsymbol{s}_1 \times \boldsymbol{s}_2 \tag{25}$$

$$[\boldsymbol{S}^2, \boldsymbol{s}_2] = -2\mathrm{i}\boldsymbol{s}_1 \times \boldsymbol{s}_2 \tag{26}$$

$$\boldsymbol{S} \cdot (\boldsymbol{s}_1 \times \boldsymbol{s}_2) = (\boldsymbol{s}_1 \times \boldsymbol{s}_2) \cdot \boldsymbol{S} = 0 \tag{27}$$

$$\boldsymbol{S}(\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2) = (\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2)\boldsymbol{S} = \frac{1}{4}\boldsymbol{S} \tag{28}$$

$$\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^2 = \boldsymbol{S}^2\boldsymbol{S} = 2\boldsymbol{S} \tag{29}$$

6.42 对于两个自旋 1/2 粒子组成的体系，令

$$\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2, \qquad \boldsymbol{n} = \boldsymbol{r}/r, \qquad (\boldsymbol{r} \text{ 方向单位矢量})$$

定义张量算符(取$\hbar=1$)

$$\boxed{S_{12} = 3(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{n})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \boldsymbol{n}) - \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2} \tag{1}$$

(a) 证明$(S_{12})^2 = 4\boldsymbol{S}^2 - 2S_{12}$，$\boldsymbol{S}$ 为总自旋. 再进而证明 S_{12}的任意正整数次幂均可表示成 S_{12}和 $\boldsymbol{S}^2$ 的线性组合；

(b) 求 S_{12}的本征值；

(c) 令 $\boldsymbol{n}$ 经历各种方向(机会均等)，求 S_{12}的平均.

解 总自旋 $\boldsymbol{S}$、$\boldsymbol{S}^2$ 以及 $\boldsymbol{S}$ 在 $\boldsymbol{n}$ 方向的投影可以表示成

$$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{s}_1 + \boldsymbol{s}_2 = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2) \tag{2}$$

$$\boldsymbol{S}^2 = \frac{3}{2} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 \tag{3}$$

$$\boldsymbol{S}_n = \boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{n} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{n} + \boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \boldsymbol{n})$$

$$= \frac{1}{2}(\sigma_{1n} + \sigma_{2n}) \tag{4}$$

利用

$$(\sigma_{1n})^2 = (\sigma_{2n})^2 = 1 \tag{5}$$

可得

$$(S_n)^2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sigma_{1n}\sigma_{2n} \tag{6}$$

因此，张量算符 S_{12} 可以表示成

$$\boxed{S_{12} = 3\sigma_{1n}\sigma_{2n} - \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 = 6S_n^2 - 2\boldsymbol{S}^2} \tag{7}$$

于是

$$(S_{12})^2 = 36S_n^4 + 4\boldsymbol{S}^4 - 12(S_n^2\boldsymbol{S}^2 + \boldsymbol{S}^2S_n^2) \tag{8}$$

由式(5)和(6)容易证明

$$S_n^4 = S_n^2 \tag{9}$$

上题已经证明

$$\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^2 = \boldsymbol{S}^2\boldsymbol{S} = 2\boldsymbol{S} \tag{10}$$

再以 $\boldsymbol{S}$ 点乘式(10)，即得

$$\boldsymbol{S}^4 = 2\boldsymbol{S}^2 \tag{11}$$

式(10)两端取 $\boldsymbol{n}$ 方向投影，得到

$$S_n\boldsymbol{S}^2 = \boldsymbol{S}^2S_n = 2S_n \tag{10'}$$

将式(9)、(10′)、(11)代入式(8)，即得

$$\boxed{(S_{12})^2 = 4\boldsymbol{S}^2 - 2S_{12}} \tag{12}$$

式(7)和(12)表明 S_{12} 及 S_n 和 $\boldsymbol{S}^2$ 均对易. 以 $\boldsymbol{S}^2$ 乘式(7)，并利用式(11)及(10′)，可得

$$S_{12}\boldsymbol{S}^2 = \boldsymbol{S}^2 S_{12} = 2S_{12} \tag{13}$$

以 S_{12} 乘式(12)，并利用式(13)，即得 S_{12} 满足的最简代数方程

$$(S_{12})^3 + 2(S_{12})^2 - 8S_{12} = 0 \tag{14}$$

由式(12)、(14)可知，S_{12} 的任何正整数次幂必可表示成 S_{12} 和 $\boldsymbol{S}^2$ 的线性组合，或表示成 S_{12}、$\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2$ 及 I(单位矩阵)的线性组合. 式(14)可以写成

$$S_{12}(S_{12} - 2)(S_{12} + 4) = 0 \tag{14′}$$

因此 S_{12} 的本征值为

$$S_{12} = 2, 0, -4 \tag{15}$$

这个结论也可以由式(7)得出，由于 $\boldsymbol{S}^2$ 与 S_n 对易，所以本征值为

$$\boxed{\begin{aligned} &\boldsymbol{S}^4 = 0\ (S = 0),\ S_n = 0, \quad S_{12} = 0 \\ &\boldsymbol{S}^2 = 2\ (S = 1),\ S_n = \pm 1,\ S_{12} = 2 \\ &\qquad\qquad\qquad S_n = 0, \quad S_{12} = -4 \end{aligned}} \tag{15′}$$

最后，如以 (n_x, n_y, n_z) 表示 $\boldsymbol{n}$ 的直角坐标分量，则

$$\begin{aligned} S_n^2 &= (n_x S_x + n_y S_y + n_z S_z)^2 \\ &= n_x^2 S_x^2 + n_y^2 S_y^2 + n_z^2 S_z^2 \\ &\quad + n_x n_y (S_x S_y + S_y S_x) + \cdots \end{aligned}$$

对 $\boldsymbol{n}$ 的各种可能取向平均，应有

$$(n_x^2)_{\text{平均}} = (n_y^2)_{\text{平均}} = (n_z^2)_{\text{平均}} = \frac{1}{3}, \quad (n_x n_y)_{\text{平均}} = 0, \text{ 等等.}$$

因此$(S_n^2)_{平均}=\frac{1}{3}S^2$，代入式(7)，即得

$$(S_{12})_{平均}=0 \tag{16}$$

6.43 对于两个自旋 1/2 粒子组成的体系，证明张量算符

$$S_{12}=\frac{3}{r^2}(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{r})-\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$$

与 S^2 和 J 对易. S 为总自旋，J 为总角动量，$J=S+l$，l 为体系的轨道角动量，在质心坐标系中，l 的算符形式为

$$l=r\times p=-\mathrm{i}\hbar r\times\nabla\ ,\qquad r=r_1-r_2.\ (\text{相对坐标})$$

解 上题已经证明

$$S_{12}=6S_n^2-2S^2 \tag{1}$$

其中

$$S_n=S\cdot\frac{r}{r} \tag{2}$$

由于 S^2 和 S_n 对易，所以 S_{12}和 S^2 对易.

S 和 S_n 并不对易，利用自旋角动量基本对易式

$$S\times S=\mathrm{i}S$$

容易证明

$$[S,S_n]=\mathrm{i}\frac{r}{r}\times S \tag{3}$$

l 和 S 对易，但 l 和 S_n 并不对易，利用基本对易式

$$[l_\alpha,x_\beta]=\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}x_\gamma$$

容易证明

$$[l,S_n]=\left[l,S\cdot\frac{r}{r}\right]=-\mathrm{i}\frac{r}{r}\times S \tag{4}$$

式(3)加式(4),即得

$$[\boldsymbol{J},S_n]=[\boldsymbol{l}+\boldsymbol{S},S_n]=0 \tag{5}$$

即 $\boldsymbol{J}$ 和 S_n 对易. $\boldsymbol{J}$ 和 $\boldsymbol{S}^2$ 显然对易,则由式(1)可知 $\boldsymbol{J}$ 和 S_{12} 也对易. 证明完毕.

6.44 某物理体系由两个自旋 1/2 的非全同粒子组成. 已知粒子 1 处于 $s_{1z}=1/2$ 的本征态,粒子 2 处于 $s_{2z}=1/2$ 的本征态,求体系总自旋 $\boldsymbol{S}^2$ 的可能测值及相应概率. (取$\hbar=1$)

解一 $s_{1z}=\pm 1/2$ 的单粒子自旋态记为 $\alpha(1),\beta(1)$,在 Pauli 表象中 $\alpha=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\beta=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$. $s_{2x}=\frac{1}{2}$的单粒子自旋态为

$$\phi(2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}_2=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(2)+\beta(2)] \tag{1}$$

因此,体系的自旋态为

$$\chi(1,2)=\alpha(1)\phi(2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\alpha(2)+\alpha(1)\beta(2)] \tag{2}$$

总自旋 $\boldsymbol{S}^2$ 共有两个本征值:0 和 2. $\boldsymbol{S}^2=0$ 的本征态为

$$\chi_{00}(1,2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)] \tag{3}$$

在体系的自旋态 χ 中测得 $\boldsymbol{S}^2=0$ 的概率为 $|\langle\chi_{00}|\chi\rangle|^2$. 根据 α、β 的正交归一性

$$\langle\alpha|\alpha\rangle=\langle\beta|\beta\rangle=1,\qquad\langle\alpha|\beta\rangle=\langle\beta|\alpha\rangle=0$$

容易求出

$$\langle\chi_{00}|\chi\rangle=\frac{1}{2} \tag{4}$$

因此，测得 $S^2=0$ 的概率为 $\frac{1}{4}$，从而测得 $S^2=2$ 的概率为

$$\left(1-\frac{1}{4}\right)=\frac{3}{4}$$

S^2 的平均值为 $\frac{3}{2}$.

解二 同上，体系的自旋态为 $\chi(1,2)=\alpha(1)\phi(2)$，而

$$S^2=(s_1+s_2)^2=\frac{3}{2}+2(s_{1x}s_{2x}+s_{1y}s_{2y}+s_{1z}s_{2z}) \tag{5}$$

如对 $\chi(1,2)$ 态计算 $\langle S^2\rangle$，由于 χ 中关于粒子 1、2 的变量是分离的，计算极易完成. 例如

$$\langle\chi|s_{1x}s_{2x}|\chi\rangle=\langle\alpha(1)|s_{1x}|\alpha(1)\rangle\langle\phi(2)|s_{2x}|\phi(2)\rangle$$

$$=0\times\frac{1}{2}=0$$

类似地，可得

$$\langle\chi|s_{1y}s_{2y}|\chi\rangle=0,\quad\langle\chi|s_{1z}s_{2z}|\chi\rangle=0$$

因此

$$\langle S^2\rangle=\frac{3}{2} \tag{6}$$

设 $S^2=0$ 的概率为 $\omega(0)$，则 $S^2=2$ 的概率为 $\omega(2)=1-\omega(0)$，

$$\langle S^2\rangle=0\times w(0)+2\times w(2)=2-2w(0)=3/2$$

容易求出

$$w(0)=1/4,\qquad w(2)=3/4 \tag{7}$$

6.45 由两个自旋 1/2 粒子组成的体系，置于均匀磁场中，如以磁场方向作为 z 轴方向，与自旋有关的体系 Hamilton 量为

$$H = a\sigma_{1z} + b\sigma_{2z} + c_0\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 \tag{1}$$

其中 a、b 项来自磁场与粒子内禀磁矩的作用，c_0 项来自两粒子的相互作用. a、b、c_0 均为实常数. (对于全同粒子，$a=b$，非全同粒子，一般 $a\neq b$.)试求体系的能级.

解 我们将在自旋态矢量空间中，用矩阵方法求解. 基矢可以取为(σ_{1z}，σ_{2z})的共同本征态

$$\alpha(1)\alpha(2),\quad \alpha(1)\beta(2),\quad \beta(1)\alpha(2),\quad \beta(1)\beta(2)$$

也可以取为总自旋算符($\boldsymbol{S}^2$，S_z)的共同本征态 χ_{SM_S}. 对于本题，从 $\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2$ 的对角化考虑，采用 χ_{SM_S} 作为基矢较为方便. 为叙述方便，基矢的编号顺序如下：

$$\left.\begin{aligned}
&\chi_1 = \chi_{11} = \alpha(1)\alpha(2)\\
&\chi_2 = \chi_{1-1} = \beta(1)\beta(2)\\
&\chi_3 = \chi_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)]\\
&\chi_4 = \chi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)]
\end{aligned}\right\} \tag{2}$$

将 Hamilton 算符改写成

$$H = c_0\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 + c_1(\sigma_{1z} + \sigma_{2z}) + c_2(\sigma_{1z} - \sigma_{2z}) \tag{1'}$$

$$c_1 = \frac{1}{2}(a + b),\quad c_2 = \frac{1}{2}(a - b) \tag{3}$$

四个基矢都是($\boldsymbol{S}^2$，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，因而 χ_1 和 χ_2 已经是 H 的本征态.

$$H\chi_1 = (c_0 + 2c_1)\chi_1 = (c_0 + a + b)\chi_1 \tag{4}$$

$$H\chi_2 = (c_0 - 2c_1)\chi_2 = (c_0 - a - b)\chi_2 \tag{5}$$

这样，我们就得到了体系的两个能级：$E=c_0\pm 2c_1$.

容易算出$(\sigma_{1z}-\sigma_{2z})$对基矢的作用结果，为

$$(\sigma_{1z}-\sigma_{2z})\chi_1=0,\quad (\sigma_{1z}-\sigma_{2z})\chi_2=0 \tag{6}$$

$$(\sigma_{1z}-\sigma_{2z})\chi_3=2\chi_4,\quad (\sigma_{1z}-\sigma_{2z})\chi_4=2\chi_3 \tag{7}$$

因此，在$\{\chi_4,\chi_4\}$子空间中，$(\sigma_{1z}-\sigma_{2z})$的矩阵元为

$$\left.\begin{aligned}(\sigma_{1z}-\sigma_{2z})_{33}&=(\sigma_{1z}-\sigma_{2z})_{44}=0\\(\sigma_{1z}-\sigma_{2z})_{34}&=(\sigma_{1z}-\sigma_{2z})_{43}=2\end{aligned}\right\} \tag{7'}$$

$(\sigma_{1z}+\sigma_{2z})$的矩阵元全部为0. H 的矩阵表示为

$$H=\begin{bmatrix}c_0 & 2c_2\\ 2c_2 & -3c_0\end{bmatrix} \tag{8}$$

设能量本征态为

$$\chi=f_3\chi_3+f_4\chi_4 \tag{9}$$

代入能量本征方程

$$H\chi=E\chi \tag{10}$$

得到

$$\begin{bmatrix}c_0-E & 2c_2\\ 2c_2 & -3c_0-E\end{bmatrix}\begin{bmatrix}f_1\\ f_2\end{bmatrix}=0 \tag{10'}$$

能级 E 由下式决定：

$$\det(H-E)=0 \tag{11}$$

即

$$\begin{vmatrix}c_0-E & 2c_2\\ 2c_2 & -3c_0-E\end{vmatrix}=(E-c_0)(E+3c_0)-4c_2^2=0 \tag{11'}$$

解得

$$E = -c_0 \pm 2\sqrt{c_0^2 + c_2^2}$$

结论：本题共有四个能级(不考虑偶然简并)，它们是

$$E = c_0 \pm 2c_1, \quad -c_0 \pm 2\sqrt{c_0^2 + c_2^2} \tag{12}$$

前两个能级的能量本征态分别为 χ_1 和 χ_2，后两个能级的能量本征态为 χ_3 和 χ_4 的线性叠加.

6.46 对于两个自旋 1/2 粒子组成的体系，取$\hbar=1$，令

$$U(\lambda) = e^{-i\lambda s_1 \cdot s_2}, \quad U^+(\lambda) = e^{i\lambda s_1 \cdot s_2} \tag{1}$$

λ 为实数. 证明

$$U^+ s_1 U = \frac{1}{2}(s_1 + s_2) + \frac{1}{2}(s_1 - s_2)\cos\lambda - s_1 \times s_2 \sin\lambda \tag{2a}$$

$$U^+ s_2 U = \frac{1}{2}(s_1 + s_2) - \frac{1}{2}(s_1 - s_2)\cos\lambda + s_1 \times s_2 \sin\lambda \tag{2b}$$

$$U^+ s_1 \times s_2 U = \frac{1}{2}(s_1 - s_2)\sin\lambda + s_1 \times s_2 \cos\lambda \tag{2c}$$

证 令

$$f_1(\lambda) = U^+ s_1 U, \quad f_2(\lambda) = U^+ s_2 U \tag{3}$$

注意到 $U(\lambda)$ 是幺正算符，即

$$U^+ U = U U^+ = 1 \tag{4}$$

显然可得

$$f_1 \cdot f_2 = U^+ s_1 \cdot s_2 U = s_1 \cdot s_2 = f_2 \cdot f_1 \tag{5}$$

$$\boldsymbol{f}_1 \cdot \boldsymbol{f}_1 = \boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_1 = \frac{3}{4}, \boldsymbol{f}_2 \cdot \boldsymbol{f}_2 = \frac{3}{4} \tag{6}$$

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{f}_1 \times \boldsymbol{f}_1 &= U^+ \boldsymbol{s}_1 \times \boldsymbol{s}_1 U = \mathrm{i}\boldsymbol{f}_1 \\ \boldsymbol{f}_2 \times \boldsymbol{f}_2 &= U^+ \boldsymbol{s}_2 \times \boldsymbol{s}_2 U = \mathrm{i}\boldsymbol{f}_2 \end{aligned}\right\} \tag{7}$$

$$\boldsymbol{f}_1 \times \boldsymbol{f}_2 = U^+ \boldsymbol{s}_1 \times \boldsymbol{s}_2 U = -\boldsymbol{f}_2 \times \boldsymbol{f}_1 \tag{8}$$

视 λ 为参变数，对 λ 求导，可得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\boldsymbol{f}_1 = \mathrm{i}U^+ [\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2, \boldsymbol{s}_1] U$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\boldsymbol{f}_2 = \mathrm{i}U^+ [\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2, \boldsymbol{s}_2] U \tag{9}$$

利用公式(见题 6.41)

$$\left.\begin{aligned} [\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2, \boldsymbol{s}_1] &= \mathrm{i}\boldsymbol{s}_1 \times \boldsymbol{s}_2 \\ [\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2, \boldsymbol{s}_2] &= -\mathrm{i}\boldsymbol{s}_1 \times \boldsymbol{s}_2 \end{aligned}\right\} \tag{10}$$

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{s}_2(\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2) &= \frac{1}{4}\boldsymbol{s}_1 + \frac{\mathrm{i}}{2}\boldsymbol{s}_1 \times \boldsymbol{s}_2 \\ (\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2)\boldsymbol{s}_1 &= \frac{1}{4}\boldsymbol{s}_2 + \frac{\mathrm{i}}{2}\boldsymbol{s}_1 \times \boldsymbol{s}_2 \end{aligned}\right\} \tag{11}$$

式(9)变成

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\boldsymbol{f}_1 = -\boldsymbol{f}_1 \times \boldsymbol{f}_2, \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\boldsymbol{f}_2 = \boldsymbol{f}_1 \times \boldsymbol{f}_2 \tag{9'}$$

如将 $\boldsymbol{f}_1 \times \boldsymbol{f}_2$ 对 λ 求导，得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}(\boldsymbol{f}_1 \times \boldsymbol{f}_2) = \boldsymbol{f}_1 \times (\boldsymbol{f}_1 \times \boldsymbol{f}_2) - (\boldsymbol{f}_1 \times \boldsymbol{f}_2) \times \boldsymbol{f}_2 \tag{12}$$

利用矢量算符公式(见题 4.1)

$$\boldsymbol{A} \times (\boldsymbol{B} \times \boldsymbol{C}) = \overbrace{\boldsymbol{A} \cdot (\boldsymbol{B}\boldsymbol{C})} - (\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B})\boldsymbol{C}$$

$$(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\times\boldsymbol{C}=\overbrace{\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{BC})}-\boldsymbol{A}(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{C}) \tag{13}$$

并注意到 $\boldsymbol{f}_1$ 与 $\boldsymbol{f}_2$ 对易(因为 $\boldsymbol{s}_1$ 与 $\boldsymbol{s}_2$ 对易),即得

$$\boldsymbol{f}_1\times(\boldsymbol{f}_1\times\boldsymbol{f}_2)=(\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2)\boldsymbol{f}_1-\frac{3}{4}\boldsymbol{f}_2$$

$$(\boldsymbol{f}_1\times\boldsymbol{f}_2)\times\boldsymbol{f}_2=\boldsymbol{f}_2(\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2)-\frac{3}{4}\boldsymbol{f}_1 \tag{14}$$

将式(14)代入式(12),并再利用式(11),即得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}(\boldsymbol{f}_1\times\boldsymbol{f}_2)=\frac{1}{2}(\boldsymbol{f}_1-\boldsymbol{f}_2) \tag{15}$$

而式(9′)中两式相加、减,可得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}(\boldsymbol{f}_1+\boldsymbol{f}_2)=0 \tag{16}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}(\boldsymbol{f}_1-\boldsymbol{f}_2)=-2\boldsymbol{f}_1\times\boldsymbol{f}_2 \tag{17}$$

式(16)积分,得到

$$\boldsymbol{f}_1(\lambda)+\boldsymbol{f}_2(\lambda)=\boldsymbol{f}_1(0)+\boldsymbol{f}_2(0)=\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2 \tag{18}$$

2i×式(15)+式(17),得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}(\boldsymbol{f}_1-\boldsymbol{f}_2+2\mathrm{i}\boldsymbol{f}_1\times\boldsymbol{f}_2)$$

$$=\mathrm{i}(\boldsymbol{f}_1-\boldsymbol{f}_2+2\mathrm{i}\boldsymbol{f}_1\times\boldsymbol{f}_2) \tag{19}$$

积分,即得

$$\boldsymbol{f}_1(\lambda)-\boldsymbol{f}_2(\lambda)+2\mathrm{i}\boldsymbol{f}_1(\lambda)\times\boldsymbol{f}_2(\lambda)$$

$$=[\boldsymbol{f}_1(0)-\boldsymbol{f}_2(0)+2\mathrm{i}\boldsymbol{f}_1(0)\times\boldsymbol{f}_2(0)]\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda}$$

$$=[\boldsymbol{s}_1-\boldsymbol{s}_2+2\mathrm{i}\boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2]\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda} \tag{20}$$

$\boldsymbol{f}_1$、$\boldsymbol{f}_2$、$\boldsymbol{f}_1\times\boldsymbol{f}_2$、$\boldsymbol{s}_1\times\boldsymbol{s}_2$ 均为 Hermite 算符,上式取共轭即得

$$\boldsymbol{f}_1(\lambda) - \boldsymbol{f}_2(\lambda) - 2\mathrm{i}\boldsymbol{f}_1(\lambda) \times \boldsymbol{f}_2(\lambda)$$

$$= [\boldsymbol{s}_1 - \boldsymbol{s}_2 - 2\mathrm{i}\boldsymbol{s}_1 \times \boldsymbol{s}_2]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda} \tag{20'}$$

两式相加、减，即得

$$\boldsymbol{f}_1(\lambda) - \boldsymbol{f}_2(\lambda) = (\boldsymbol{s}_1 - \boldsymbol{s}_2)\cos\lambda - 2\boldsymbol{s}_1 \times \boldsymbol{s}_2\sin\lambda \tag{21}$$

$$\boldsymbol{f}_1(\lambda) \times \boldsymbol{f}_2(\lambda) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{s}_1 - \boldsymbol{s}_2)\sin\lambda + \boldsymbol{s}_1 \times \boldsymbol{s}_2\cos\lambda \tag{22}$$

再将式(18)、(21)相加、减，即得

$$\boldsymbol{f}_1(\lambda) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{s}_1 + \boldsymbol{s}_2)$$

$$+ \frac{1}{2}(\boldsymbol{s}_1 - \boldsymbol{s}_2)\cos\lambda - \boldsymbol{s}_1 \times \boldsymbol{s}_2\sin\lambda \tag{23a}$$

$$\boldsymbol{f}_2(\lambda) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{s}_1 + \boldsymbol{s}_2)$$

$$- \frac{1}{2}(\boldsymbol{s}_1 - \boldsymbol{s}_2)\cos\lambda + \boldsymbol{s}_1 \times \boldsymbol{s}_2\sin\lambda \tag{23b}$$

式(23a)、(23b)即式(2a)、(2b)，式(22)即式(2c)．证明完毕．注意，指标 1、2 互换，$\boldsymbol{f}_1$ 和 $\boldsymbol{f}_2$ 就互换．

6.47 两个自旋 1/2 的定域非全同粒子(不考虑轨道运动)，相互作用能为(取$\hbar=1$)

$$H = A\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2 \tag{1}$$

$t=0$ 时，粒子 1 自旋“向上”($s_{1z}=1/2$)，粒子 2 自旋“向下”$\left(s_{2z}=-\frac{1}{2}\right)$．求任意 $t>0$ 时刻(a)粒子 1 自旋“向上”的概率；(b)粒子 1 和 2 自旋均“向上”的概率；(c)总自旋量子数 $S=1$ 和 0 的概率；(d) $\boldsymbol{s}_1$ 和 $\boldsymbol{s}_2$ 的平均值．

解 从求体系的自旋波函数入手．由于

$$H = As_1 \cdot s_2 = \frac{A}{2}\left(S^2 - \frac{3}{2}\right) \tag{1'}$$

易见总自旋 S 是守恒量，所以定态波函数可以选为 S^2、S_z 的共同本征函数. 按照总自旋量子数 S 的不同取值，本征函数和能级为

$$\left.\begin{aligned} S = 1, \quad \chi_{1M_S}, \quad E_1 = A/4 \\ S = 0, \quad \chi_{00}, \quad E_0 = -3A/4 \end{aligned}\right\} \tag{2}$$

$t=0$ 时，体系的自旋态为

$$\chi(0) = \alpha(1)\beta(2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{10} + \chi_{00}) \tag{3}$$

因此，$t>0$ 时波函数为

$$\chi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\chi_{10}e^{-iE_1t} + \frac{1}{\sqrt{2}}\chi_{00}e^{-iE_0t} \tag{4}$$

即

$$\begin{aligned} \chi(t) &= \frac{1}{2}[\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)]e^{iAt/4} \\ &\quad + \frac{1}{2}[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)]e^{3iAt/4} \\ &= \left[\alpha(1)\beta(2)\cos\frac{At}{2} - i\beta(1)\alpha(2)\sin\frac{At}{2}\right]e^{iAt/4} \end{aligned} \tag{4'}$$

(a) 由式(4')可知，在时刻 t，粒子 1 自旋“向上”[同时粒子 2 自旋“向下”，相当于 $\alpha(1)\beta(2)$ 项]的概率为 $\cos^2\left(\frac{At}{2}\right)$.

(b) 粒子 1 和 2 自旋均“向上”[相应于 $\alpha(1)\alpha(2)$，式(4')中没有这种项]的概率为 0. 这是容易理解的，因为总自旋 S_z 为守恒量，而体系初态 $S_z=0$，所以任何时刻 S_z 必为 0，不可能出现两个粒子自旋均“向上”($S_z=1$)的情形.

(c) 由式(4)可知，总自旋量子数 S 取 1 和 0 的概率相等，各

为 1/2. 由于 S^2 守恒，这个概率不随时间改变.

(d) 利用式(4′)容易算出 s_1 和 s_2 的平均值为

$$\left.\begin{aligned}&\langle s_{1x}\rangle_t = \langle s_{1y}\rangle_t = \langle s_{2x}\rangle_t = \langle s_{2y}\rangle_t = 0\\&\langle s_{1z}\rangle_t = \frac{1}{2}\left[\cos^2\frac{At}{2} - \sin^2\frac{At}{2}\right] = \frac{1}{2}\cos At\\&\langle s_{2z}\rangle_t = -\langle s_{1z}\rangle_t = -\frac{1}{2}\cos At\end{aligned}\right\} \tag{5}$$

6.48 考虑由三个自旋 1/2 的非全同粒子组成的体系，Hamilton 量为

$$H = As_1 \cdot s_2 + B(s_1 + s_2) \cdot s_3 \tag{1}$$

A、B 为实常数. 试找出体系的守恒量，确定体系的能级和简并度. (取$\hbar=1$)

解 粒子 1、2 自旋之和记为 S_{12}，总自旋记为 S_{123}，即

$$S_{12} = s_1 + s_2, S_{123} = s_1 + s_2 + s_3 = S_{12} + s_3 \tag{2}$$

显然，S_{12}和 S_{123}都具有角动量的性质，满足对易式

$$S_{12} \times S_{12} = \mathrm{i}S_{12}, \quad [S_{12}^2, S_{12}] = 0 \tag{3}$$

$$S_{123} \times S_{123} = \mathrm{i}S_{123}, \quad [S_{123}^2, S_{123}] = 0 \tag{4}$$

s_1、s_2、s_3 互相对易，而且

$$s_1^2 = s_2^2 = s_3^2 = \frac{3}{4} \tag{5}$$

因此

$$S_{12}^2 = s_1^2 + s_2^2 + 2s_1 \cdot s_2 = \frac{3}{2} + 2s_1 \cdot s_2 \tag{6}$$

$$S_{123}^2 = \frac{9}{4} + 2(s_1 \cdot s_2 + s_2 \cdot s_3 + s_3 \cdot s_1) \tag{7}$$

据此，H 可以写成

$$H = (A - B)\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2 + B(\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2 + \boldsymbol{s}_2 \cdot \boldsymbol{s}_3 + \boldsymbol{s}_3 \cdot \boldsymbol{s}_1)$$

$$= \frac{1}{2}(A - B)\boldsymbol{S}_{12}^2 + \frac{B}{2}\boldsymbol{S}_{123}^2 - \frac{3}{8}(2A + B) \qquad (1')$$

由于 $\boldsymbol{S}_{12}^2$ 和 $\boldsymbol{S}_{12}$ 对易，和 $\boldsymbol{s}_3$ 对易，所以 $\boldsymbol{S}_{12}^2$ 和 $\boldsymbol{S}_{123}$ 对易. 因此，由式(1′)显而易见，$\boldsymbol{S}_{12}^2$、$\boldsymbol{S}_{123}$，$\boldsymbol{S}_{123}^2$ 都是守恒量. 作为守恒量完全集，可取($\boldsymbol{S}_{12}^2$，$\boldsymbol{S}_{123}^2$，$(S_{123})_z$)，前二者的本征值为

$$\boldsymbol{S}_{12}^2 = S'(S' + 1), \qquad S' = 0, 1 \qquad (8)$$

$$\boldsymbol{S}_{123}^2 = \boldsymbol{S}(\boldsymbol{S} + 1), \qquad S = \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2} \qquad (9)$$

代入式(1′)，就得到能级值，可以记为 $E_{SS'}$. 由于体系能量与 $(S_{123})_z$，即总自旋 z 分量的本征值$[S, S-1, \cdots, (-S)]$无关，故能级 $E_{SS'}$ 的简并度为$(2S+1)$. 量子数 S'、S 的可能组合以及能级和简并度如下：

S'	1		0
S	3/2	1/2	1/2
$E_{SS'}$	$\frac{A}{4}+\frac{B}{2}$	$\frac{A}{4}-B$	$-\frac{3}{4}A$
简并度$(2S+1)$	4	2	2

如不出现偶然简并，体系将有三条能级. 其中 $S'=0$ 相当于

$$\boldsymbol{S}_{12} \to 0, \qquad \boldsymbol{s}_1 \sim -\boldsymbol{s}_2$$

所以

$$\boldsymbol{H} \to A\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2 \sim -A\boldsymbol{s}_1^2 = -\frac{3}{4}A$$

$S=3/2$ 相当于 $\boldsymbol{s}_1$、$\boldsymbol{s}_2$、$\boldsymbol{s}_3$ 互相“平行”，这时

$$\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2 = \boldsymbol{s}_2 \cdot \boldsymbol{s}_3 = \boldsymbol{s}_3 \cdot \boldsymbol{s}_1 = \frac{1}{4}, \quad (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 = \cdots = 1)$$

所以 $$\boldsymbol{H} \to (\boldsymbol{A} + 2\boldsymbol{B})\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2 \to \frac{1}{4}(A + 2B)$$

6.49 考虑由三个自旋 1/2 的可分辨粒子组成的体系，Hamilton 量为

$$H = A(\boldsymbol{s}_1 \cdot \boldsymbol{s}_2 + \boldsymbol{s}_2 \cdot \boldsymbol{s}_3 + \boldsymbol{s}_3 \cdot \boldsymbol{s}_1), \qquad (A \text{ 为实数}) \tag{1}$$

(a) 求体系的能级和简并度；

(b) 找一个守恒量完全集，求出其共同本征函数，从而得到一组正交完备的能量本征函数.

解 采用上题的算符及量子数记号，H 可以写成

$$H = \frac{A}{2}\left(\boldsymbol{S}_{123}^2 - 3 \times \frac{3}{4}\right) \tag{1'}$$

因此，能级为(取$\hbar=1$)

$$E_S = \frac{A}{2}\left[S(S+1) - \frac{9}{4}\right] \tag{2}$$

守恒量完全集可以取$[\boldsymbol{S}_{123}^2, (S_{123})_z, \boldsymbol{S}_{12}^2]$，本征值为

$$\left.\begin{aligned} &\boldsymbol{S}_{12}^2 = S'(S'+1), \quad S' = 1, 0 \\ &\boldsymbol{S}_{123}^2 = S(S+1), \quad S = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \\ &(S_{123})_z = M = S, S-1, \cdots, (-S) \end{aligned}\right\} \tag{3}$$

量子数 S'、S 的可能组合为 $S = S' \pm \frac{1}{2} > 0$，即

$$\left.\begin{aligned} &S = 3/2, \quad S' = 1 \\ &S = 1/2, \quad S' = 1, 0 \end{aligned}\right\} \tag{4}$$

对每组(S, S')，能级简并度为$(2S+1)$，所以

$$E_{3/2}=\frac{3}{4}A,\quad S=\frac{3}{2},\quad S'=1,\quad \text{简并度}=4$$

$$E_{1/2}=-\frac{3}{4}A,\quad S=\frac{1}{2},\quad S'=1,0,\quad \text{简并度}=4 \qquad (5)$$

下面设法确定$[\boldsymbol{S}_{123}^2,(S_{123})_z,\boldsymbol{S}_{12}^2]$的共同本征态. 第 k 个粒子($k=1,2,3$)的自旋"向上"和"向下"态记为 $\alpha(k)$、$\beta(k)$,相应于 $s_{kz}=\frac{1}{2}$、$-\frac{1}{2}$. 如所周知,$\boldsymbol{S}_{12}^2$和$(S_{12})_z$的共同本征态为

$$\chi_{11}(1,2)=\alpha(1)\alpha(2),\quad S'=1,\quad (S_{12})_z=1$$

$$\chi_{10}(1,2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)+\beta(1)\alpha(2)],$$

$$S'=1,\quad (S_{12})_z=0$$

$$\chi_{1,-1}(1,2)=\beta(1)\beta(2),\quad S'=1,\quad (S_{12})_z=-1$$

$$\chi_{00}(1,2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)]$$

$$S'=0,\quad (S_{12})_z=0$$

$\boldsymbol{S}_{12}^2$、$\boldsymbol{S}_{123}^2$、$(S_{123})_z$ 的共同本征态记为 $\chi_{S'SM}(1,2,3)$. 三个量子数均取最大值时,本征态显然是

$$\chi_{1\,\frac{3}{2}\,\frac{3}{2}}=\chi_{11}(1,2)\alpha(3)=\alpha(1)\alpha(2)\alpha(3) \qquad (6a)$$

$S=3/2$ 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阶梯算符$[(S_{123})_x-\mathrm{i}(S_{123})_y]$重复作用于 $\chi_{1\,\frac{3}{2}\,\frac{3}{2}}$而求出. 由于阶梯算符以及 $\chi_{1\,\frac{3}{2}\,\frac{3}{2}}$对于粒子间的交换是对称的,因此,由此而得到的各 $\chi_{1\,\frac{3}{2}\,M}$都是对称函数. 根据这个判断,再考虑到 M 的取值,立即可以写出这几个函数的唯一可能的结构式:

$$\chi_{1\,\frac{3}{2}\,\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{3}}[\alpha(1)\alpha(2)\beta(3)+\beta(1)\alpha(2)\alpha(3)$$

$$+\alpha(1)\beta(2)\alpha(3)] \tag{6b}$$

$$\chi_{1\,\frac{3}{2},-\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{3}}[\alpha(1)\beta(2)\beta(3)+\beta(1)\alpha(2)\beta(3)$$

$$+\beta(1)\beta(2)\alpha(3)] \tag{6c}$$

$$\chi_{1\,\frac{3}{2},-\frac{3}{2}}=\beta(1)\beta(2)\beta(3) \tag{6d}$$

$S'=0$ 时体系波函数中关于粒子 1、2 的部分只能是 χ_{00}，再考虑到 M 的取值，立即可以断定

$$\chi_{0\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}}=\chi_{00}(1,2)\alpha(3)$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)\alpha(3)-\beta(1)\alpha(2)\alpha(3)] \tag{7a}$$

$$\chi_{0\,\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}=\chi_{00}(1,2)\beta(3)$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)\beta(3)-\beta(1)\alpha(2)\beta(3)] \tag{7b}$$

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. $\chi_{1\,\frac{3}{2}\,\frac{1}{2}}$ 即式(6b)，可以表示成

$$\chi_{1\,\frac{3}{2}\,\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{3}}[\chi_{11}(1,2)\beta(3)+\sqrt{2}\,\chi_{10}(1,2)\alpha(3)] \tag{6b'}$$

因此，$\chi_{1\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}}$ 的构造式只能是

$$\chi_{1\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{3}}[\sqrt{2}\,\chi_{11}(1,2)\beta(3)-\chi_{10}(1,2)\alpha(3)]$$

$$=\frac{1}{\sqrt{6}}[2\alpha(1)\alpha(2)\beta(3)-\alpha(1)\beta(2)\alpha(3)$$

$$-\beta(1)\alpha(2)\beta(3)] \tag{8a}$$

类似地，式(6c)可以表示成

$$\chi_{1\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{3}}[\sqrt{2}\chi_{10}(1,2)\beta(3)+\chi_{1-1}(1,2)\alpha(3)] \tag{6c'}$$

$\chi_{1\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}$应该用同样的项叠加而成，但和上式正交，所以

$$\chi_{1\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{3}}[\chi_{10}(1,2)\beta(3)-\sqrt{2}\chi_{1,-1}(1,2)\alpha(3)]$$

$$=\frac{1}{\sqrt{6}}[\alpha(1)\beta(2)\beta(3)+\beta(1)\alpha(2)\beta(3)$$

$$-2\beta(1)\beta(2)\alpha(3)] \tag{8b}$$

以上式(6)、(7)、(8)就是$\boldsymbol{S}_{12}^2$、$\boldsymbol{S}_{123}^2$、$(S_{123})_z$的全部共同本征函数. 容易验证它们的确互相正交. 由于每个粒子有2种自旋态α和β，三粒子的体系共有8个独立状态，因此式(6)至(8)正是所求的一组正交完备的能量本征态.

读者不难自行验证，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.

6.50 设两个电子处于自旋单态，$\boldsymbol{a}$和$\boldsymbol{b}$表示空间任意两个方的单位矢. 证明在自旋单态下$\langle(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{a})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{b})\rangle=-(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})$.

证

在(s_{1z},s_{2z})表象中，两个电子的自旋单态可以表示成

$$\chi_0(s_{1z},s_{2z})=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)]$$

α和β表示σ_z的本征态，本征值分别为±1. 考虑到自旋单态($S=0$)的各向同性、不妨取z轴方向即$\boldsymbol{a}$方向. 设$\boldsymbol{a}$与$\boldsymbol{b}$夹角为θ，$(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})=\cos\theta$，而$((\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{a})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{b})=\sigma_{1z}\sigma_{2z}\cos\theta$，因此

$$\langle\chi_0|(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{a})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{b})|\chi_0\rangle$$

$$=\frac{1}{2}\cos\theta\{[\alpha^{1}(1)\beta^{+}(2)-\beta^{1}(1)\alpha^{+}(2)]\sigma_{1z}\sigma_{2z}$$

$$\cdot[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)]\}$$

$$=\frac{1}{2}\cos\theta\{\alpha^{+}(1)\sigma_{1z}\alpha(1)\cdot\beta^{+}(2)\sigma_{2z}\beta(2)$$

$$+\beta^{-}(1)\sigma_{1z}\beta(1)\cdot\alpha^{\cdot}(2)\sigma_{2z}\alpha(2)\}$$

$$=\frac{1}{2}\cos\theta(-1-1)=-\cos\theta=-(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})$$

第七章　磁场中粒子的运动

7.1　质量为 μ，电荷为 q 的非相对论性粒子在电磁场中运动时，Hamilton 算符为

$$H=\frac{1}{2\mu}\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+q\phi \tag{1}$$

其中 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$ 和 $\phi(\boldsymbol{r},t)$ 是电磁场的矢势和标势，$\boldsymbol{p}$ 是正则动量算符，

$$\boldsymbol{p}=-\mathrm{i}\hbar\nabla \tag{2}$$

定义速度算符

$$\boldsymbol{v}=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{r},\hat{H}] \tag{3}$$

求 $\boldsymbol{v}$ 的具体表示式以及 $\boldsymbol{v}$ 各分量间的对易式．

解　以 $\boldsymbol{v}$ 的一个分量为例，

$$\begin{aligned}v_x&=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[x,H]=\frac{1}{2\mathrm{i}\hbar\,\mu}\left[x,\left(\mathbf{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\right]\\&=\frac{1}{2\mathrm{i}\hbar\,\mu}\left\{\left[x,\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right]\cdot\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\right.\\&\quad\left.+\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\cdot\left[x,\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right]\right\}\end{aligned}$$

x 和 $\boldsymbol{A}$ 对易．利用基本对易式

$$[x_\alpha,p_\beta]=\mathrm{i}\hbar\,\delta_{\alpha\beta}$$

即得

$$v_x=\frac{1}{\mu}\left(p_x-\frac{q}{c}A_x\right)$$

$$\boxed{\boldsymbol{v}=\frac{1}{\mu}\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)} \tag{4}$$

计算 $\boldsymbol{v}$ 各分量间对易式时，可利用公式

$$[\boldsymbol{p},F(\boldsymbol{r})]=-\mathrm{i}\hbar\nabla F(\boldsymbol{r})$$

易得

$$[v_x,v_y]=-\frac{q}{\mu^2c}\{[p_x,A_y]+[A_x,p_y]\}$$

$$=\frac{\mathrm{i}\hbar q}{\mu^2c}\left(\frac{\partial A_y}{\partial x}-\frac{\partial A_x}{\partial y}\right)$$

$$=\frac{\mathrm{i}\hbar q}{\mu^2c}(\nabla\times\boldsymbol{A})_z$$

$$=\frac{\mathrm{i}\hbar q}{\mu^2c}B_z \tag{5}$$

写成矢量形式,就是

$$\boxed{\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{v}=\mathrm{i}\hbar\frac{q}{\mu^2c}\boldsymbol{B}} \tag{6}$$

其中 $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$ 是磁场,利用上式,容易证明

$$[\boldsymbol{v},v^2]=\mathrm{i}\hbar\frac{q}{\mu^2c}(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}-\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v}) \tag{7}$$

7.2 质量 μ,电荷 q 的粒子在磁场 $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$ 中运动,定义机械角动量算符

$$\boldsymbol{L}=\mu\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{v} \tag{1}$$

其中$\boldsymbol{v}$ 为速度算符. 计算 $\mathrm{d}\boldsymbol{v}/\mathrm{d}t$ 和 $\mathrm{d}\boldsymbol{L}/\mathrm{d}t$.

解 Hamilton 算符可以写成

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

利用上题求得的$\boldsymbol{v}$ 和$\boldsymbol{v}^2$ 的对易式(7),容易证明

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{v}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{v},H]=\frac{q}{2\mu c}(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}-\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v}) \tag{3}$$

在经典电动力学中,Lorentz 力为

$$\boldsymbol{f}=\frac{q}{c}\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}$$

运动方程为

$$\mu\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{v}=\boldsymbol{f}=\frac{q}{c}\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B} \tag{3'}$$

式(3)是经典运动方程(3′)的量子力学推广.式(3)中,

$$\begin{aligned} \boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B} &= \frac{1}{\mu}\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\times\boldsymbol{B} \\ &= -\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v}-\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu}\nabla\times\boldsymbol{B} \end{aligned} \tag{4}$$

由电动力学

$$\nabla\times\boldsymbol{B}=\frac{4\pi}{c}\boldsymbol{j}$$

$\boldsymbol{j}$ 为产生磁场的源电流.因此,如在粒子运动的空间,源电流$\boldsymbol{j}=0$,就有

$$\frac{q}{c}\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}=-\frac{q}{c}\times\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v}=\boldsymbol{f} \tag{5}$$

这时式(3)仍可写成式(3′).对于均匀场,很明显式(3)和(3′)是等价的.

机械角动量也可以写成

$$\boldsymbol{L}=\mu\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{v}=\frac{1}{2}\mu(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{v}-\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{r}) \tag{1′}$$

(注意在$\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{v}$中,$\boldsymbol{r}$和$\boldsymbol{v}$的有关分量是对易的.)$\boldsymbol{L}$的时间微商为

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{L}}{\mathrm{d}t}=\frac{\mu}{2}\Big\{&\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\times\boldsymbol{v}+\boldsymbol{r}\times\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} \\ &-\frac{d\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}\times\boldsymbol{r}-\boldsymbol{v}\times\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\Big\} \end{aligned}$$

利用式(3)及$\mathrm{d}\boldsymbol{r}/\mathrm{d}t=\boldsymbol{v}$,即得

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{L}}{\mathrm{d}t}=\frac{q}{4c}[&\boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B})+(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v})\times\boldsymbol{r} \\ &-\boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v})-(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B})\times\boldsymbol{r}] \end{aligned} \tag{6}$$

在式(5)成立的条件下,式(6)可以简化成

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{L}}{\mathrm{d}t}&=\frac{q}{2c}[\boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B})+(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v})\times\boldsymbol{r}] \\ &=\frac{1}{2}(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{f}-\boldsymbol{f}\times\boldsymbol{r}) \end{aligned} \tag{7}$$

注意,$\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{f}$中,$\boldsymbol{r}$和$\boldsymbol{f}$的有关分量是不对易的,$\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{f}\neq-\boldsymbol{f}\times\boldsymbol{r}$,故式(7)右端和$\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{f}$并不等价.

7.3 质量 μ，电荷 q 的粒子，在沿 z 轴方向的均匀磁场 B 作用下，在 xy 平面内运动($p_z=0$)．定义“轨道中心算符”

$$\hat{x}_0=x+\frac{1}{\omega}\hat{v}_y$$
$$\hat{y}_0=y-\frac{1}{\omega}\hat{v}_x \tag{1}$$

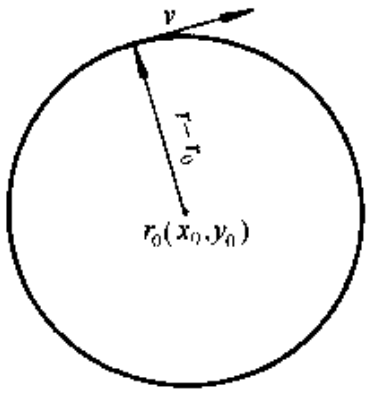


图 7.3

其中 $\omega=qB/\mu c$．试说明 x_0、y_0的经典力学意义，并证明它们是运动常数．

解 在经典力学中，粒子受 Lorentz 力作用，将作匀速圆周运动，如图所示($q>0$)．设 $\boldsymbol{r}_0(x_0,y_0)$ 为轨道中心，则轨道半径为 $(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)$，角速度和速度为

$$\boldsymbol{\omega}=(0,0,-\omega),\qquad \boldsymbol{v}=\boldsymbol{\omega}\times(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)$$

因此

$$v_x=\omega_y(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)_z-\omega_z(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)_y=\omega(y-y_0)$$
$$v_y=\omega_z(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)_x-\omega_x(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)_z=-\omega(x-x_0)$$

亦即

$$x_0=x+\frac{1}{\omega}v_y,\qquad y_0=y-\frac{1}{\omega}v_x \tag{1'}$$

将$\boldsymbol{v}$ 换成算符，即得式(1)．ω 的构造式可以利用“Lorentz 力等于向心力”这个条件导出，从略．

根据题7.1和7.2的计算，有下列对易式：

$$[x,\hat{v}_x]=\left[x,\frac{1}{\mu}\left(p_x-\frac{q}{c}A_x\right)\right]$$

$$=\frac{1}{\mu}[x,p_x]=\mathrm{i}\hbar/\mu$$

$$[y,\hat{v}_y]=\mathrm{i}\hbar/\mu \tag{2}$$

$$[x,\hat{v}_y]=[y,\hat{v}_x]=0$$

$$[\hat{v}_x,\hat{v}_y]=\mathrm{i}\hbar\frac{q}{\mu^2c}B_z=\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu}\frac{qB}{\mu c}=\frac{\mathrm{i}\hbar\omega}{\mu} \tag{3}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{v}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{v},H]=\frac{q}{\mu c}\hat{v}\times\boldsymbol{B} \tag{4}$$

因此

$$[\hat{x}_0,\hat{y}_0]=\frac{1}{\omega}[\hat{v}_y,\hat{y}]-\frac{1}{\omega}[x,\hat{v}_x]$$

$$-\frac{1}{\omega^2}[\hat{v}_y,\hat{v}_x]=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu\omega} \tag{5}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{x}_0=\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}+\frac{1}{\omega}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{v}_y$$

$$=\hat{v}_x+\frac{q}{\mu c\omega}(\hat{v}\times\boldsymbol{B})_y$$

$$=\hat{v}_x+\frac{1}{B}(\hat{v}\times B)_y=\hat{v}_x-\hat{v}_x=0 \tag{6}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{y}_0=\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t}-\frac{1}{\omega}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{v}_x=\hat{v}_y-\frac{1}{B}(\hat{v}\times\boldsymbol{B})_x$$

$$=\hat{v}_y-\hat{v}_y=0 \tag{7}$$

式(6)和(7)表明，轨道中心算符 $\hat{x}_0$ 和 $\hat{y}_0$ 均为运动常数(守恒量)，这一点和经典力学一致. 式(5)则表明，$\hat{x}_0$ 和 $\hat{y}_0$ 是不对易的，不能同时取确定值. 由测不准关系

$$\Delta A\cdot\Delta B\geqslant\frac{1}{2}|\overline{[A,B]}|$$

可知

$$\Delta x_0\cdot\Delta y_0\geqslant\hbar/2\mu|\omega|=\hbar c/2|q|B \tag{8}$$

在经典物理学中，轨道中心当然是可以精确确定的.

7.4 关于磁通量量子化[1].

采用柱坐标(ρ,φ,z)，设磁场$\boldsymbol{B}$仅存在于很小的柱形区域$\rho<a$内，通量为Φ，$\rho>a$处无磁场. 令$a\longrightarrow 0$，但保持通量Φ不变. (a) 证明矢势可以表示成

$$\boldsymbol{A}=\nabla f,\qquad f=\frac{1}{2\pi}\Phi\varphi. \tag{1}$$

(b) 讨论机械角动量$L_z=\mu(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{v})_z$的本征值，导出磁通量量子化.

解 (a) 当矢势$\boldsymbol{A}$取式(1)时，在$\rho\neq 0$处，显然有

$$\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}=\nabla\times\nabla f=0 \tag{2}$$

梯度算符的柱坐标表示式为

$$\nabla=\hat{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}+\hat{\varphi}\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\varphi}+\hat{z}\frac{\partial}{\partial z} \tag{3}$$

$\hat{\rho}$、$\hat{\varphi}$、$\hat{z}$分别为ρ、φ、z方向的单位矢量. 由式(1)，得到

$$\boldsymbol{A}=\hat{\varphi}\Phi/2\pi\rho \tag{4}$$

对于任何一个垂直于z轴的圆形截面，均有

$$\begin{aligned}\oiint\boldsymbol{B}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{s}&=\oiint(\nabla\times\boldsymbol{A})\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{s}=\oint\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r}\\&=\frac{1}{2\pi}\Phi\oint\frac{\hat{\varphi}}{\rho}\cdot\rho\mathrm{d}\varphi\hat{\varphi}\\&=\frac{1}{2\pi}\Phi\oint\mathrm{d}\varphi=\Phi\end{aligned} \tag{5}$$

Φ为磁通量. 可见表示式(1)是正确的.

(b) 位置矢量$\boldsymbol{r}$的柱坐标表示式为

$$\boldsymbol{r}=\rho\hat{\rho}+z\hat{z} \tag{6}$$

因此

$$\begin{aligned}\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{A}&=\frac{1}{2\pi}\Phi\left(\hat{\rho}\times\hat{\varphi}+\frac{z}{\rho}\hat{z}\times\hat{\varphi}\right)\\&=\frac{1}{2\pi}\Phi\left(\hat{z}-\frac{z}{\rho}\hat{\rho}\right)\end{aligned} \tag{7}$$

机械角动量的z分量为

---

[1] 此题取自 Stephen Casiorowicz, "Quantum Physics" (1977)，第13章题5.

$$L_z=\mu[\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{v}]_z=\left[\boldsymbol{r}\times\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\right]_z$$

$$=l_z-\frac{q}{c}(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{A})$$

$$=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}-\frac{q}{2\pi c}\Phi \tag{8}$$

只需波函数满足周期性条件

$$\psi(\rho,\varphi,z)=\psi(\rho,\varphi+2\pi,z)$$

即可保证 L_z 为 Hermite 算符(参看题4.17),从而求得 L_z 的本征值为

$$L_z=m\hbar-\frac{q}{2\pi c}\Phi. \qquad m=0,\pm1,\pm2,\cdots \tag{9}$$

但如选择 $\rho\longrightarrow0$处 $\psi=0$,因 $\rho\neq0$处磁场为0,粒子的运动应不受场的影响,L_z 的本征值谱理应和 l_z 的相同,由此可知式(9)中第二项必为 $\hbar$之整数倍,即

$$q\Phi/2\pi\hbar c=n=0,\pm1,\pm2,\cdots \tag{10}$$

这就是磁通量的量子化.

7.5 众所周知,质量 m,电荷 q 的粒子处于状态 $\psi(\boldsymbol{r})$时,空间各处的电荷密度及电流密度为

$$\rho(\boldsymbol{r})=q\psi^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}) \tag{1}$$

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

今引入电荷密度算符及电流密度算符

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{r}')=q\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \tag{3}$$

$$\hat{\boldsymbol{j}}(\boldsymbol{r}')=\frac{q}{2m}[\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\hat{\boldsymbol{p}}+\hat{\boldsymbol{p}}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')] \tag{4}$$

其中 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 为动量算符,

$$\hat{\boldsymbol{p}}=-\mathrm{i}\hbar\nabla=-\mathrm{i}\hbar\partial/\partial\boldsymbol{r} \tag{5}$$

试解释算符 $\hat{\rho}$ 和 $\hat{\boldsymbol{j}}$ 的意义,并证明它们的平均值就是式(1)和(2).再将结果推广到有磁场的情形.

解 在量子力学中,"带电粒子"是当作点电荷对待的.因此,当粒子的位置是 r 时,r' 处电荷密度为

$$\hat{\rho}(r')=q\delta(r-r')$$

此即式(3)的意义.如描写粒子状态的归一化波函数为 $\psi(r)$,则粒子在 r 附近 $d\tau$ 体积中出现概率为 $\psi^*(r)\psi(r)d\tau$,由此而造成 r' 处平均电荷密度为

$$\begin{aligned}\langle\hat{\rho}(r')\rangle &= \int\psi^*(r)q\delta(r-r')\psi(r)d\tau \\ &= q\psi^*(r')\psi(r') = \rho(r')\end{aligned} \tag{6}$$

将 r' 换成 r,即得式(1).

在经典物理中,电流密度等于电荷密度乘速度,即

$$j=\rho v=\frac{1}{m}\rho p,$$

换成量子力学算符,并使其成为 Hermite 算符,即得

$$\hat{j}=\frac{1}{2m}(\hat{\rho}\hat{p}+\hat{p}\hat{\rho}) \tag{7}$$

将 $\hat{\rho}$ 具体写出来,就成为式(4).

当粒子处于 $\psi(r)$ 状态,r' 处平均电流密度为

$$\begin{aligned}\langle\hat{j}(r')\rangle &= \frac{q}{2m}\int\psi^*(r)[\delta(r-r')\hat{p} \\ &\quad +\hat{p}\delta(r-r')]\psi(r)d\tau \\ &= -\frac{i\hbar q}{2m}\int\psi^*(r)[\delta(r-r')\nabla\psi(r) \\ &\quad +\nabla\delta(r-r')\psi(r)]d\tau\end{aligned} \tag{8}$$

其中第一项可以直接积分,第二项可用分部积分法算出,结果为

$$\int\psi^*(r)\delta(r-r')\nabla\psi(r)d\tau=\psi^*(r')\nabla'\psi(r')$$

$$\begin{aligned}\int\psi^*(r)\nabla\delta(r-r')\psi(r)d\tau &= -\int\delta(r-r')\psi(r)\nabla\psi^*(r)d\tau \\ &= -\psi(r')\nabla'\psi^*(r')\end{aligned}$$

代入式(8),即得

$$\langle\hat{j}(r')\rangle=-\frac{i\hbar q}{2m}[\psi^*(r')\nabla'\psi(r')-\psi(r')\nabla'\psi^*(r')] \tag{9}$$

其中

$$\nabla' = \left(\frac{\partial}{\partial x'}, \frac{\partial}{\partial y'}, \frac{\partial}{\partial z'} \right)$$

式(9)中 r' 换成 r，即得式(2).

以上结果限于势能仅为 $V(r)$ 的情形. 如果存在磁场，则式(4)中 p/m 应换成速度算符 v，而成为

$$\hat{j}(r') = \frac{q}{2m}\left[\delta(r-r')\left(\hat{p}-\frac{q}{c}A\right) + \left(\hat{p}-\frac{q}{c}A\right)\delta(r-r')\right] \tag{10}$$

在 $\psi(r)$ 态中的平均值为(结果中 r' 换成 r)

$$\langle \hat{j} \rangle = -\frac{i\hbar q}{2m}[\psi^* \nabla\psi - \psi \nabla\psi^*] - \frac{q^2}{mc}A\psi^*\psi \tag{11}$$

电荷密度算符及其平均值仍由式(3)及(1)表示.

第八章　定态微扰论

8.1　求非简并态能级的三级微扰修正公式.

解　设 $H=H_0+H'$，H' 为微扰. H 的本征函数、本征值表示成

$$\begin{aligned}\psi_n&=\psi_n^{(0)}+\psi_n^{(1)}+\psi_n^{(2)}+\psi_n^{(3)}+\cdots\\E_n&=E_n^{(0)}+E_n^{(1)}+E_n^{(2)}+E_n^{(3)}+\cdots\end{aligned}\tag{1}$$

式中右边各项分别表示零级近似、一级修正、二级修正、三级修正、…，规定 $\psi_n^{(0)}$ 是归一化的(ψ_n 未归一化)，并规定波函数的各修正项中不再包含 $\psi_n^{(0)}$，即各修正项均和 $\psi_n^{(0)}$ 正交：

$$\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(s)}\rangle=0.\qquad s=1,2,3,\cdots\tag{2}$$

将展开式(1)代入能量本征方程

$$H\psi_n=(H_0+H')\psi_n=E_n\psi_n\tag{3}$$

得到(下标 n 暂时省略)

$$\begin{aligned}&(H_0+H')[\psi^{(0)}+\psi^{(1)}+\psi^{(2)}+\cdots]\\&=[E^{(0)}+E^{(1)}+E^{(2)}+\cdots][\psi^{(0)}+\psi^{(1)}\\&\quad+\psi^{(2)}+\cdots]\end{aligned}$$

按量级分开，有下列各式：

零级项　$(H_0-E^{(0)})\psi^{(0)}=0$　(4)

一级项　$(H_0-E^{(0)})\psi^{(1)}=(E^{(1)}-H')\psi^{(0)}$　(5)

二级项　$(H_0-E^{(0)})\psi^{(2)}=(E^{(1)}-H')\psi^{(1)}+E^{(2)}\psi^{(0)}$　(6)

三级项　$(H_0-E^{(0)})\psi^{(3)}=(E^{(1)}-H')\psi^{(2)}+E^{(2)}\psi^{(1)}+E^{(3)}\psi^{(0)}$　(7)

等等，其中式(4)表示 $\psi^{(0)}$、$E^{(0)}$ 是 H_0 的本征函数、本征值. 以 $\psi^{(0)*}$ 左乘各式，并对全空间积分，利用正交条件(2)，即得

$$\boxed{E^{(1)}=\langle\psi^{(0)}|H'|\psi^{(0)}\rangle}\tag{8}$$

$$E^{(2)}=\langle\psi^{(0)}|H'|\psi^{(1)}\rangle\tag{9}$$

$$E^{(3)}=\langle\psi^{(0)}|H'|\psi^{(2)}\rangle \tag{10}$$

在许多场合，ψ 总是计算到一级修正项，因此式(10)不便于具体应用. 下面变化 $E^{(3)}$ 的表示式.

以 $\psi^{(1)*}$ 左乘式(6)，积分，得到

$$\langle\psi^{(1)}|(H_0-E^{(0)})|\psi^{(2)}\rangle=\langle\psi^{(1)}|(E^{(1)}-H')|\psi^{(1)}\rangle \tag{11}$$

以 $\psi^{(2)*}$ 左乘式(5)，并积分，则得

$$\langle\psi^{(2)}|(H_0-E^{(0)})|\psi^{(1)}\rangle=-\langle\psi^{(2)}|H'|\psi^{(0)}\rangle=-E^{(3)} \tag{12}$$

因 H' 为 Hermite 算符，式(11)两端均应为实数，则式(11)与(12)左端相等，由此得到

$$\boxed{E^{(3)}=\langle\psi^{(1)}|(H'-E^{(1)})|\psi^{(1)}\rangle} \tag{13}$$

此式便于应用. 如所周知，ψ 的一级修正为(以下添回下标 n)

$$\boxed{\psi_n^{(1)}=\sum_k{}'\frac{H'_{kn}}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}\psi_k^{(0)}} \qquad (k\neq n) \tag{14}$$

其中

$$H'_{kn}\equiv\langle\psi_k^{(0)}|H'|\psi_n^{(0)}\rangle \tag{15}$$

代入式(9)和(13)，即得

$$\boxed{E_n^{(2)}=\sum_k{}'\frac{|H'_{kn}|^2}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}} \qquad (k\neq n) \tag{16}$$

$$E_n^{(3)}=\sum_l{}'\sum_k{}'\frac{H'_{nl}H'_{lk}H'_{kn}}{(E_n^{(0)}-E_l^{(0)})(E_n^{(0)}-E_k^{(0)})}-H'_{nn}\sum_k{}'\frac{|H'_{kn}|^2}{(E_n^{(0)}-E_k^{(0)})^2} \tag{17}$$

其中 $\sum_k{}'$ 表示求和时不包含 $k=n$ 项①.

8.2 有一个量子力学体系，其 Hamilton 算符为

---

① 参考：曾谨言，《量子力学》卷 I (科学出版社，1997)，§ 10.1；Schiff，《量子力学》(高等教育出版社，1981)，§ 31；Landau 等，《量子力学》(高等教育出版社，1980)，§ 38.

$$H=H_0+H' \tag{1}$$

H_0为零级 Hamilton 量，H'为微扰. H_0的本征函数和本征值记为

$$\psi_k^{(0)},\quad E_k^{(0)},\qquad k=1,2,\cdots,n,\cdots$$

设能级 $E_n^{(0)}$ 是二重简并的，相应的正交归一化的本征态记为 $\psi_{n\alpha}^{(0)}$、$\psi_{n\beta}^{(0)}$，简记为 ψ_α、ψ_β. 在 H_0表象中，微扰矩阵元记为

$$\langle\psi_{n\alpha}^{(0)}|H'|\psi_k^{(0)}\rangle=H'_{\alpha k}$$

$$\langle\psi_{n\beta}^{(0)}|H'|\psi_k^{(0)}\rangle=H'_{\beta k}$$

$$\langle\psi_{n\alpha}^{(0)}|H'|\psi_{n\beta}^{(0)}\rangle=H'_{\alpha\beta}$$

$$\langle\psi_{n\alpha}^{(0)}|H'|\psi_{n\alpha}^{(0)}\rangle=H'_{\alpha\alpha}=\varepsilon_\alpha$$

$$\langle\psi_{n\beta}^{(0)}|H'|\psi_{n\beta}^{(0)}\rangle=H'_{\beta\beta}=\varepsilon_\beta$$

等等. 试导出能级 $E_n^{(0)}$ 的微扰修正公式(二级近似)，并讨论所得结果.

解 设微扰作用后，能级 $E_n^{(0)}$ 变成

$$E_n=E_n^{(0)}+E_n^{(1)}+E_n^{(2)}+\cdots \tag{2}$$

H 的相应本征态为

$$\psi_n=\psi^{(0)}+\psi^{(1)}+\psi^{(2)}+\cdots \tag{3}$$

零级近似 $\psi^{(0)}$由两个简并态 ψ_α、ψ_β 组成：

$$\psi^{(0)}=C_\alpha\psi_\alpha+C_\beta\psi_\beta \tag{4}$$

和题8.1相同，仍规定波函数的各修正项和 $\psi^{(0)}$正交：

$$\langle\psi^{(0)}|\psi^{(1)}\rangle=0,\qquad \langle\psi^{(0)}|\psi^{(2)}\rangle=0 \tag{5}$$

因此

$$\psi^{(1)}=\sum_k{}' C_k\psi_k^{(0)},\qquad (k\neq n) \tag{6}$$

将式(2)、(3)代入能量本征方程

$$H\psi_n=(H_0+H')\psi_n=E_n\psi_n \tag{7}$$

并按量级分开，可得(参看题8.1)

零级项 $\quad[H_0-E_n^{(0)}]\psi^{(0)}=0$ (8)

一级项　$[H_0-E_n^{(0)}]\psi^{(1)}=[E_n^{(1)}-H']\psi^{(0)}$　　(9)

二级项　$[H_0-E_n^{(0)}]\psi^{(2)}=[E_n^{(1)}-H']\psi^{(1)}+E_n^{(2)}\psi^{(0)}$　　(10)

其中式(8)已自动满足.以 ψ_α^* 和 ψ_β^* 分别左乘式(9),并对全空间积分,由于 ψ_α 和 ψ_β 均与 $\psi^{(1)}$ 正交,故得

$$\begin{cases}[\varepsilon_\alpha-E_n^{(1)}]C_\alpha+H'_{\alpha\beta}C_\beta=0\\ H'_{\beta\alpha}C_\alpha+[\varepsilon_\beta-E_n^{(1)}]C_\beta=0\end{cases}\tag{11}$$

上式相当于$\{\psi_\alpha,\psi_\beta\}$子空间中 H'的本征方程,即

$$H'\psi^{(0)}=\begin{bmatrix}\varepsilon_\alpha & H'_{\alpha\beta}\\ H'_{\beta\alpha} & \varepsilon_\beta\end{bmatrix}\begin{bmatrix}C_\alpha\\ C_\beta\end{bmatrix}$$

$$=E_n^{(1)}\begin{bmatrix}C_\alpha\\ C_\beta\end{bmatrix}=E_n^{(1)}\psi^{(0)}\tag{11'}$$

方程组(11)存在非平庸解的必要条件为

$$\begin{bmatrix}\varepsilon_\alpha-E_n^{(1)} & H'_{\alpha\beta}\\ H'_{\beta\alpha} & \varepsilon_\beta-E_n^{(1)}\end{bmatrix}=0\tag{12}$$

这是 $E_n^{(1)}$ 的二次方程,其解为

$$\boxed{E_n^{(1)}=\frac{1}{2}\left[(\varepsilon_\alpha+\varepsilon_\beta)\pm\sqrt{(\varepsilon_\alpha-\varepsilon_\beta)^2+4H'_{\alpha\beta}H'_{\beta\alpha}}\right]=E_\pm^{(1)}}\tag{13}$$

这结果表明,一般而言,在一级微扰近似中能级 $E_n^{(0)}$ 已发生分裂.

将 $E_n^{(1)}=E_+^{(1)}$和 $E_-^{(1)}$分别代回式(11),就可求出相应的零级波函数 $\psi^{(0)}$,记为 $\psi_+^{(0)}$和 $\psi_-^{(0)}$.

将 $E_+^{(1)}$、$\psi_+^{(0)}$或 $E_-^{(1)}$、$\psi_-^{(0)}$代入式(9),(10),可以求出相应的 $\psi^{(1)}$和 $E_n^{(2)}$,如下:

以 $\psi_k^{(0)*}$ 左乘式(9),利用式(6)并对全空间积分,即得

$$C_k=\frac{1}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}\langle\psi_k^{(0)}|H'|\psi^{(0)}\rangle\tag{14}$$

$$=\frac{1}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}(H'_{k\alpha}C_\alpha+H'_{k\beta}C_\beta)\tag{14'}$$

代入式(6),即得

$$\boxed{\psi^{(1)}=\sum_k{}'\frac{1}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}\langle\psi_k^{(0)}|H'|\psi^{(0)}\rangle\psi_k^{(0)}} \tag{15}$$

$$=\sum_k{}'\frac{1}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}(H'_{k\alpha}C_\alpha+H'_{k\beta}C_\beta)\psi_k^{(0)} \tag{15'}$$

以 $\psi^{(0)*}$ 左乘式(10)，并对全空间积分，即得

$$\boxed{E_n^{(2)}=\langle\psi^{(0)}|H'|\psi^{(1)}\rangle} \tag{16}$$

亦即

$$E_n^{(2)}=\sum_k{}'\frac{1}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}|\langle\psi_k^{(0)}|H'|\psi^{(0)}\rangle|^2 \tag{16'}$$

$$=\sum_k{}'\frac{1}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}[|C_\alpha|^2|H'_{k\alpha}|^2$$
$$+|C_\beta|^2|H'_{k\beta}|^2+C_\alpha^*C_\beta H'_{\alpha k}H'_{k\beta}$$
$$+C_\beta^*C_\alpha H'_{\beta k}H'_{k\alpha}] \tag{16''}$$

式(14)、(15)、(16)形式上和非简并态微扰论公式相同. 但现在 $\psi^{(0)}$ 系由两个简并态 ψ_α 和 ψ_β 叠加而成，而在非简并态公式中 $\psi^{(0)}$ 即 $\psi_n^{(0)}$.

式(16″)表明，能级的二级修正相应于由 H' 造成的下列耦合：ψ_α-$\psi_k^{(0)}$-ψ_α，ψ_α-$\psi_k^{(0)}$-ψ_β，ψ_β-$\psi_k^{(0)}$-ψ_β 公式中 H' 的矩阵元就代表这种耦合.

讨论 1° 如在 $\{\psi_\alpha,\psi_\beta\}$ 子空间中 H' 的对角元不相等，而非对角元为零，即

$$\varepsilon_\alpha>\varepsilon_\beta,\qquad H'_{\alpha\beta}=H'_{\beta\alpha}=0 \tag{17}$$

这时式(13)给出

$$E_+^{(1)}=\varepsilon_\alpha=H'_{\alpha\alpha},\qquad E_-^{(1)}=\varepsilon_\beta=H'_{\beta\beta} \tag{18}$$

而式(11)给出

$$\begin{aligned}&E_n^{(1)}=E_+^{(1)}=\varepsilon_\alpha,\quad C_\alpha=1,\quad C_\beta=0,\quad \psi_+^{(0)}=\psi_\alpha\\&E_n^{(1)}=E_-^{(1)}=\varepsilon_\beta,\quad C_\alpha=0,\quad C_\beta=1,\quad \psi_-^{(0)}=\psi_\beta\end{aligned} \tag{19}$$

即两个简并态并不发生耦合. 式(14)至(16″)形式上均和非简并态微扰论公式相同. 简言之，这种情况可按非简并态处理.

2° 如

$$\varepsilon_\alpha=\varepsilon_\beta=\varepsilon,\qquad H'_{\alpha\beta}=|H'_{\alpha\beta}|e^{i\delta}\neq 0 \tag{20}$$

这时式(13)给出

$$E_\pm^{(1)}=\varepsilon\pm|H'_{\alpha\beta}| \tag{21}$$

而式(11)给出

$$\begin{aligned}
&E_n^{(1)}=E_+^{(1)},\qquad C_\alpha=C_\beta e^{i\delta}\\
&\psi_+^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_\alpha+e^{-i\delta}\psi_\beta]\\
&E_n^{(1)}=E_-^{(1)},\qquad C_\alpha=-C_\beta e^{i\delta}\\
&\psi_-^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_\alpha-e^{-i\delta}\psi_\beta]
\end{aligned} \tag{22}$$

在 $\psi_\pm^{(0)}$ 中 ψ_α 和 ψ_β 的成分各占一半.

如选择 ψ_α 和 ψ_β 的相因子,使 $H'_{\alpha\beta}=H'_{\beta\alpha}=$实数,则

$$E_n^{(1)}=\varepsilon\pm H'_{\alpha\beta},\qquad C_\alpha=\pm C_\beta \tag{22'}$$

$$\psi^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_\alpha\pm\psi_\beta]$$

3° 如

$$\varepsilon_\alpha=\varepsilon_\beta=\varepsilon,\qquad H'_{\alpha\beta}=H'_{\beta\alpha}=0 \tag{23}$$

这种情况下,在$\{\psi_\alpha,\psi_\beta\}$子空间中 H'的作用和常数 ε 相同. 这时 $E_n^{(1)}=\varepsilon$,在一级近似下能级并不分裂,$\psi^{(0)}$也因此而未能完全确定. 这种情况下,确定 $\psi^{(0)}$(即求 C_α,C_β)和计算 $E_n^{(2)}$ 将同时进行,亦即能级分裂将发生在二级修正中. 请参看下题.

8.3 同上题,设 $H'_{\alpha\alpha}=H'_{\beta\beta}=\varepsilon,H'_{\alpha\beta}=0$,求能级 $E_n^{(0)}$ 的微扰修正公式(二级近似).

解 上题中,到式(16″)为止仍然成立. 其中式(12)或(13)给出

$$E_n^{(1)}=\varepsilon \tag{1}$$

因此无法利用式(11)确定 C_α、C_β.

以 ψ_α^* 和 ψ_β^* 分别左乘上题式(10),并对全空间积分,由于 ψ_α 和 ψ_β 均与 $\psi^{(1)}$、$\psi^{(2)}$正交,故得

$$E_n^{(2)}C_\alpha=\sum_k{}' H'_{\alpha k}C_k$$
$$E_n^{(2)}C_\beta=\sum_k{}' H'_{\beta k}C_k \tag{2}$$

而上题式(14′)已得

$$C_k=\frac{1}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}(H'_{k\alpha}C_\alpha+H'_{k\beta}C_\beta) \tag{3}$$

代入式(2),即得

$$\begin{cases}\left[-E_n^{(2)}+\sum_k{}'\dfrac{H'_{\alpha k}H'_{k\alpha}}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}\right]C_\alpha \\ \quad+\sum_k{}'\dfrac{H'_{\alpha k}H'_{k\beta}}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}C_\beta=0 \\ \sum_k{}'\dfrac{H'_{\beta k}H'_{k\alpha}}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}C_\alpha+\left[-E_n^{(2)}\right. \\ \quad\left.+\sum_k{}'\dfrac{H'_{\beta k}H'_{k\beta}}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}\right]C_\beta=0\end{cases} \tag{4}$$

存在非平庸解的条件为 C_α、C_β 的系数行列式等于0,即

$$\begin{vmatrix}A-E_n^{(2)} & D^* \\ D & B-E_n^{(2)}\end{vmatrix}=0 \tag{5}$$

其中

$$A=\sum_k{}'=\frac{|H'_{k\alpha}|^2}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}$$
$$B=\sum_k{}'=\frac{|H'_{k\beta}|^2}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}} \tag{6}$$
$$D=\sum_k{}'=\frac{H'_{\beta k}H'_{k\alpha}}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}$$

由式(5)解出 $E_n^{(2)}$,再代回式(4),即可求出 C_α、C_β,即求得 $\psi^{(0)}$;再代入式(3),即可求出各 C_k,即求得 $\psi^{(1)}$.

讨论 1° 如果对于所有 $\psi_k^{(0)}$,均有 $H'_{\beta k}H'_{k\alpha}=0$,则在二级微扰近似中,不发生 ψ_α 和 ψ_β 态的耦合,这种情况下,$D=0$,式(5)和(4)给出

$$E_n^{(2)}=A,\quad C_\alpha=1,\quad C_\beta=0,\quad \psi^{(0)}=\psi_\alpha$$
$$E_n^{(2)}=B,\quad C_\alpha=0,\quad C_\beta=1,\quad \psi^{(0)}=\psi_\beta \tag{7}$$

这些结果和非简并态微扰论的结果一样.

但是,如 $D=0$而 $A=B$,则在二级微扰近似下,能级简并仍未消除,因此 $\psi^{(0)}$也不能完全确定.这种情况下,$\psi^{(0)}$的确定将和计算 $E_n^{(3)}$ 同时进行,亦即能级分裂将发生在三级近似中.

2° 如果由于 ψ_α、ψ_β 的对称性,使 $A=B$ 而且 D 为实数,则式(4)、(5)给出

$$E_n^{(2)}=A\pm D,\quad C_\alpha=\pm C_\beta$$
$$\psi^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_\alpha\pm\psi_\beta) \tag{8}$$

3° 如果只有一个 $\psi_k^{(0)}$ 使 $H'_{k\alpha}$及 $H'_{k\beta}$不等于0,这时选择 ψ_α、ψ_β 及 $\psi_k^{(0)}$ 的相因子,总可以使这两个矩阵元为实数,令

$$H'_{k\alpha}=a,\qquad H'_{k\beta}=b$$

则式(4)、(5)给出

$$E_n^{(2)}=0,\qquad C_\alpha=-\frac{b}{a}C_\beta$$
$$\psi^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{a^2+b^2}}(b\psi_\alpha-a\psi_\beta)$$
$$E_n^{(2)}=\frac{a^2+b^2}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}},\qquad C_\alpha=\frac{a}{b}C_\beta \tag{9}$$
$$\psi^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{a^2+b^2}}(a\psi_\alpha+b\psi_\beta)$$

8.4 粒子在一维势场 $V(x)$中运动,能级为 $E_n^{(0)}$,$n=1,2,3,\cdots$.如受到微扰 $H'=\frac{\lambda}{m}p$ 作用,求能级修正(三级近似),并和能级的精确值比较.

解 微扰前能量算符为

$$H_0=p^2/2m+V(x) \tag{1}$$

H_0的本征函数记为 $\psi_n^{(0)}$ 或$|n\rangle$.利用对易式

$$[x,p]=\mathrm{i}\hbar \tag{2}$$

易得

$$\frac{m}{\mathrm{i}\hbar}[x,H_0]=\frac{m}{\mathrm{i}\hbar}(xH_0-H_0x)=p \tag{3}$$

因此在 H_0 表象中(以 $|n\rangle$ 为基矢)有矩阵元关系

$$\langle k|p|n\rangle=\mathrm{i}m\omega_{kn}\langle k|x|n\rangle \tag{4}$$

其中

$$\omega_{kn}=(E_k^{(0)}-E_n^{(0)})/\hbar$$

一维束缚态是非简并的.按照微扰论公式,能级的一级修正为

$$\begin{aligned}E_n^{(1)}&=\langle n|H'|n\rangle=\frac{\lambda}{m}\langle n|p|n\rangle\\&=\mathrm{i}\lambda\omega_{nn}\langle n|x|n\rangle=0\end{aligned} \tag{5}$$

二级修正为

$$\begin{aligned}E_n^{(2)}&=\sum_k{}'\frac{|H'_{kn}|^2}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}\\&=\frac{\lambda^2}{\hbar}\sum_k{}'\frac{\omega_{kn}^2|x_{kn}|^2}{\omega_{nk}}\\&=\frac{\lambda^2}{\hbar^2}\sum_k{}'(E_k^{(0)}-E_n^{(0)})|x_{kn}|^2\\&=-\frac{\lambda^2}{2m}\end{aligned} \tag{6}$$

最后一步利用了求和规则(见题 2.2)

$$\sum_k{}'(E_k^{(0)}-E_n^{(0)})|x_{kn}|^2=\frac{\hbar^2}{2m} \tag{7}$$

三级微扰能为[见题 8.1 的式(17),注意 $H'_{nn}=0$]

$$\begin{aligned}E_n^{(3)}&=\sum_l{}'\sum_k{}'\frac{H'_{nl}H'_{lk}H'_{kn}}{(E_n^{(0)}-E_l^{(0)})(E_n^{(0)}-E_k^{(0)})}\\&=\frac{\lambda^3}{m^3\hbar^3}\sum_l{}'\sum_k{}'\frac{p_{nl}p_{lk}p_{kn}}{\omega_{nl}\omega_{nk}}\end{aligned}$$

以式(4)代入上式,得到

$$E_n^{(3)}=\mathrm{i}\frac{\lambda^3}{\hbar^2}\sum_l{}'\sum_k{}'\omega_{lk}x_{nl}x_{lk}x_{kn} \tag{8}$$

因一维束缚态波函数为实函数，x_{nl} 等均为实数，$x_{nl}=x_{ln}$，故上式又可写成

$$E_n^{(3)}=\mathrm{i}\frac{\lambda^3}{\hbar^2}\sum_l{}'\sum_k{}'(-\omega_{kl})x_{nk}x_{kl}x_{ln} \tag{8'}$$

易见式(8)和(8')右端刚好相差一个因子(−1)，因此

$$E_n^{(3)}=-E_n^{(3)},\qquad E_n^{(3)}=0 \tag{9}$$

也可以这样推理：$E_n^{(3)}$ 应为实数，而式(8)右端如不为0，只能是纯虚数，所以 $E_n^{(3)}=0$.

本题能级可以利用 F-H 定理或 p 表象精确求解(见下册题5.7)，结果为

$$E_n=E_n^{(0)}-\frac{\lambda^2}{2m} \tag{10}$$

和上述微扰论三级近似相符合.

8.5 有一量子力学体系、能量算符 H_0，本征态 ψ_0、ψ_1、…、ψ_n、…记为$|0\rangle$、$|1\rangle$、…、$|n\rangle$、….给定 Hermite 算符 A、B，以及 $C=\mathrm{i}[B,A]$. 设体系受到微扰作用，微扰算符可以表示成

$$\boxed{H'=\mathrm{i}\lambda[A,H_0]},\qquad (\lambda\text{为实数}) \tag{1}$$

如在微扰作用前的基态 ψ_0 下，A、B、C 的平均值为已知，记为 A_0、B_0、C_0，试对微扰后的基态(非简并)计算$\langle B\rangle$，准确到量级 λ.

解 根据题设，已知

$$\langle 0|A|0\rangle=A_0,\qquad \langle 0|B|0\rangle=B_0,\qquad \langle 0|C|0\rangle=C_0 \tag{2}$$

按照微扰论公式，微扰作用后的基态为

$$\varphi_0=\psi_0+\sum_n{}'\frac{H'_{n0}}{E_0^{(0)}-E_n^{(0)}}\psi_n \tag{3}$$

即

$$|\varphi_0\rangle=|0\rangle+\sum_n{}'\frac{H'_{n0}}{E_0^{(0)}-E_n^{(0)}}|n\rangle \tag{3'}$$

其中

$$H'_{n0}=\langle n|H'|0\rangle=\mathrm{i}\lambda\langle n|(AH_0-H_0A)|0\rangle$$

$$= i\lambda(E_n^{(0)} - E_n^{(0)})\langle n|A|0\rangle \tag{4}$$

所以

$$|\varphi_n\rangle = |0\rangle + i\lambda\sum_n |n\rangle\langle n|A|0\rangle$$

$$= |0\rangle + i\lambda\sum_n |n\rangle\langle n|A|0\rangle - i\lambda A_0|0\rangle$$

即

$$|\varphi_n\rangle = |0\rangle + i\lambda(A - A_0)|0\rangle \tag{5}$$

计算中利用了公式

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$$

由式(5)易得

$$\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle = 1 + \lambda^2(\langle 0|A^2|0\rangle - A_0^2) \tag{6}$$

所以式(5)已经归一化至量级 λ.

在 φ_n 态下，算符 B 的平均值(准至量级 λ)为

$$\langle\varphi_n|B|\varphi_n\rangle = \langle 0|B|0\rangle + i\lambda\langle 0|B(A - A_0)|0\rangle$$

$$-i\lambda\langle 0|(A - A_0)B|0\rangle + \lambda^2\text{项}$$

略去 λ^2 项，即得

$$\langle\varphi_n|B|\varphi_n\rangle = B_0 + i\lambda\langle 0|(BA - AB)|0\rangle = B_1 + \lambda C_0 \tag{7}$$

从以上整个推导过程来看，如将 φ_n(即$|0\rangle$)换成 H_0的任何一个非简并的本征态，φ_n换成 H 的相应本征态，结果显然仍成立，因此式(5)和(7)适用于任何非简并的能量本征态.

8.6 (a) 质量为 m 的粒子在一维区域

$$-\frac{L}{2} \leqslant x \leqslant \frac{L}{2}$$

中自由运动，波函数满足周期性边界条件

$$\psi\left(-\frac{L}{2}\right) = \psi\left(\frac{L}{2}\right)$$

试写出能级和能量本征函数. (b)如粒子还受到一个"陷阱"的作

用，作用势为

$$H'=-V_0e^{-x^2/a^2},\qquad a\ll L \tag{1}$$

试用微扰论计算能级修正(一级近似).

解 (a) 作自由运动的粒子，能量本征函数为

$$\psi^{(0)}\sim e^{ikx},\quad e^{-ikx}\quad 或\quad \cos kx,\quad \sin kx \tag{2}$$

由周期性边界条件，求得

$$k=2\pi n/L,\qquad n=0,1,2,\cdots \tag{3}$$

能级为

$$E_n^{(0)}=\frac{\hbar^2k^2}{2m}=\frac{(2\pi n\hbar)^2}{2mL^2} \tag{4}$$

除基态($n=0$)外，其他能级都是二重简并的. 考虑到微扰的特点，我们取式(2)中后两种函数作为"基矢"，它们具有确定的宇称，而且互相正交. 这两个函数经归一化后，记为

$$\psi_{n+}^{(0)}=\sqrt{\frac{2}{L}}\cos\frac{2n\pi x}{L},\qquad \psi_{n-}^{(0)}=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{2n\pi x}{L} \tag{5}$$

下标"+，−"标明了波函数的宇称.

(b) 微扰 H' 为偶宇称，因此

$$H'_{n+,n-}=\langle\psi_{n+}^{(0)}|H'|\psi_{n-}^{(0)}\rangle=0 \tag{6}$$

亦即 $\psi_{n+}^{(0)}$ 和 $\psi_{n-}^{(0)}$ 已经是正确的零级波函数. 能级的一级微扰修正等于 H' 的平均值，即

$$\begin{aligned}E_{n+}^{(1)}&=H'_{n+,n+}=-\frac{2V_0}{L}\int_{-L/2}^{L/2}dx e^{-x^2/a^2}\cos^2\frac{2n\pi x}{L}\\&=-\frac{2V_0}{L}\int_0^{L/2}dx\left(1+\cos\frac{4n\pi x}{L}\right)e^{-x^2/a^2}\\&\approx-\frac{2V_0}{L}\int_0^{\infty}dx\left(1+\cos\frac{4n\pi x}{L}\right)e^{-x^2/a^2}\\&=-\sqrt{\pi}\,\frac{V_0a}{L}(1+e^{-4\pi^2n^2a^2/L^2})\end{aligned} \tag{7}$$

$$\begin{aligned}E_n^{(1)}&=H'_{n-,n-}=-\frac{2V_0}{L}\int_{-L/2}^{L/2}dx e^{-x^2/a^2}\sin^2\frac{2n\pi x}{L}\\&\approx-\frac{2V_0}{L}\int_0^{\infty}dx\left(1-\cos\frac{4n\pi x}{L}\right)e^{-x^2/a^2}\end{aligned}$$

$$= -\sqrt{\pi}\frac{V_0 a}{L}(1-\mathrm{e}^{-\pi^2 n^2 a^2/L^2}) \tag{8}$$

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

$$\Delta E_n = E_{n-}^{(1)} - E_{n+}^{(1)} \approx 2\sqrt{\pi}\frac{V_0 a}{L}\mathrm{e}^{-\pi^2 n^2 a^2/L^2} \tag{9}$$

n 越小，裂距越大. 最大裂距为

$$\Delta E_1 \approx 2\sqrt{\pi}\frac{V_0 a}{L}\mathrm{e}^{-\pi^2 a^2/L^2} \sim 2\sqrt{\pi}V_0 a/L \tag{10}$$

基态($n=0, k=0$)能级无简并，零级波函数为

$$\psi_0^{(0)} = 1/\sqrt{L} \tag{11}$$

在"陷阱"作用下，能级移动

$$\Delta E_0 = E_0^{(1)} = \langle \psi_0^{(0)} | H' | \psi_0^{(0)} \rangle$$
$$= -\frac{V_0}{L}\int_{-L/2}^{L/2} \mathrm{d}x \mathrm{e}^{-x^2/a^2} \approx -\sqrt{\pi}V_0 a/L \tag{12}$$

8.7 (a) 电子在一维区域

$$-\frac{L}{2} \leqslant x \leqslant \frac{L}{2}$$

自由运动，波函数满足周期性边界条件 $\psi(x)=\psi(x+L)$. 试写出动量和 Hamilton 量的共同本征函数(不考虑自旋)；

(b) 加上微扰 $H'=\varepsilon\cos qx$，其中 $Lq=4\pi N$(N 为大的正整数). 试就电子动量 $|p|=q\hbar/2$ 的情况求能级和定态波函数，准确到 ε 量级；

(c) 再计算情况(b)的能级修正，至 ε^2 量级；

(d) 对于 $|p|$ 接近(但不等于)$q\hbar/2$ 的情况，重复(b)和(c)的能级计算.

解 (a) 对于自由粒子，满足周期性条件的能量(H_0)和动量(p)的共同本征函数为

$$\psi_n^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{L}}\mathrm{e}^{i2\pi nx/L}, \qquad n=0, \pm 1, \pm 2, \cdots \tag{1}$$

本征值为

$$p_n=\hbar k_n=2\pi n\hbar/L$$
$$E_n^{(0)}=p_n^2/2m=(2\pi n\hbar)^2/2mL^2 \tag{2}$$

(b) 微扰算符为

$$H'=\varepsilon\cos qx=\frac{\varepsilon}{2}(e^{i2\pi Nx/L}+e^{-i2\pi Nx/L}) \tag{3}$$

对于 $|p|=q\hbar/2=2\pi N\hbar/L$，相应的零级波函数为

$$\psi^{(0)}=C_N\psi_N^{(0)}+C_{-N}\psi_{-N}^{(0)} \tag{4}$$

容易算出

$$H'_{NN}=H'_{-N,-N}=0,\qquad H'_{N,-N}=H'_{-N,N}=\frac{\varepsilon}{2} \tag{5}$$

因此在 $\{\psi_N^{(0)},\psi_{-N}^{(0)}\}$ 子空间中，H' 的矩阵表示为

$$H'=\frac{\varepsilon}{2}\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix} \tag{5'}$$

在这子空间中，$\psi^{(0)}$ 应满足本征方程(参看题8.2)

$$H'\psi^{(0)}=E_N^{(1)}\psi^{(0)}$$

即

$$\frac{\varepsilon}{2}\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}C_N\\ C_{-N}\end{bmatrix}=E_N^{(1)}\begin{bmatrix}C_N\\ C_{-N}\end{bmatrix} \tag{6}$$

容易解出

$$\boxed{\begin{aligned}&E_{N+}^{(1)}=\varepsilon/2\\ &\psi^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_N^{(0)}+\psi_{-N}^{(0)}]=\psi_{N+}^{(0)}\\ &E_{N-}^{(1)}=-\varepsilon/2\\ &\psi^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_N^{(0)}-\psi_{-N}^{(0)}]=\psi_{N-}^{(0)}\end{aligned}} \tag{7}$$

波函数的一级修正为[见题8.2式(15)]

$$\psi^{(1)}=\sum_n{}'\frac{1}{E_N^{(0)}-E_n^{(0)}}\langle\psi_n^{(0)}|H'|\psi^{(0)}\rangle\psi_n^{(0)},\qquad(n\neq\pm N) \tag{8}$$

对 $\psi^{(1)}$ 有贡献的矩阵元为(相应于 $n=\pm 3N$)

$$H'_{3N,3N}=H'_{-3N,-3N}=\varepsilon/2$$

相应能级差为

$$E_N^{(0)}-E_{3N}^{(0)}=-8E_N^{(0)}=-8(2\pi N\hbar)^2/2mL^2$$

因此波函数一级修正为

$$\psi^{(1)}=-\frac{\varepsilon}{2}\frac{2mL^2}{8(2\pi N\hbar)^2}\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{3N}^{(0)}+\psi_{-3N}^{(0)}]$$

$$E^{(1)}=E_N^{(1)}=-\frac{\varepsilon}{2}$$

$$\psi^{(1)}=-\frac{\varepsilon}{2}\frac{2mL^2}{8(2\pi N\hbar)^2}\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{3N}^{(0)}-\psi_{-3N}^{(0)}] \tag{9}$$

(c) 能级的二级修正为

$$E_N^{(2)}=\langle\psi^{(0)}|H'|\psi^{(1)}\rangle \tag{10}$$

以式(7)和(9)代入上式，即得

$$E_N^{(2)}=-\frac{\varepsilon^2}{32}\frac{2mL^2}{(2\pi N\hbar)^2}=-\frac{\varepsilon^2}{32E_N^{(0)}} \tag{11}$$

综合式(7)、(11)，可得能级的结论如下(准确到 ε^2 量级)：

$$\boxed{\begin{aligned}E_N&=E_N^{(0)}+E_N^{(1)}+E_N^{(2)}\\&=E_N^{(0)}\pm\frac{\varepsilon}{2}-\frac{\varepsilon^2}{32E_N^{(0)}}\end{aligned}} \tag{12}$$

相应于

$$\psi^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_N^{(0)}\pm\psi_{-N}^{(0)}]$$

(d) 对于 $|p|$ 接近但不等于 $q\hbar/2$ 的情况，由于微扰 H' 的作用而能发生一级耦合的动量本征态为

$$\psi_{N+s}^{(0)},\ \psi_{-N+s}^{(0)},\qquad |s|\ll N$$

这是两个近似简并的状态，相应于 H_0 的本征值 $E_{N+s}^{(0)}$，作为能级的一种近似计算，可取

$$\psi\approx C_{N+s}\psi_{N+s}^{(0)}+C_{-N+s}\psi_{-N+s}^{(0)} \tag{13}$$

而令 ψ 满足能量本征方程

$$H\psi=(H_0+H')\psi\approx E\psi \tag{14}$$

在 $\{\psi^{(0)}_{N+,-},\psi^{(0)}_{N+,+}\}$ 子空间内，H_0、H'、H 的矩阵表示为

$$H_0=\begin{bmatrix} E^{(0)}_{N+,-} & 0 \\ 0 & E^{(0)}_{N-,+} \end{bmatrix}$$

$$H'=\frac{\varepsilon}{2}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{15}$$

$$H=\begin{bmatrix} E^{(0)}_{N+,-} & \dfrac{\varepsilon}{2} \\ \dfrac{\varepsilon}{2} & E^{(0)}_{N-,+} \end{bmatrix}$$

代入式(14)，成为

$$\begin{bmatrix} E^{(0)}_{N+,-} & \dfrac{\varepsilon}{2} \\ \dfrac{\varepsilon}{2} & E^{(0)}_{N-,+} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} C_{N+,-} \\ C_{-N+,+} \end{bmatrix}=E\begin{bmatrix} C_{N+,-} \\ C_{-N+,+} \end{bmatrix} \tag{14'}$$

上式有非平庸解的条件为

$$\det(H-E)=\begin{vmatrix} E^{(0)}_{N+,-}-E & \dfrac{\varepsilon}{2} \\ \dfrac{\varepsilon}{2} & E^{(0)}_{N-,+}-E \end{vmatrix}=0 \tag{16}$$

由此解出

$$E=\frac{1}{2}\left[E^{(0)}_{N+,-}+E^{(0)}_{N-,+}\pm\sqrt{(E^{(0)}_{N+,-}-E^{(0)}_{N-,+})^2+\varepsilon^2}\right] \tag{17}$$

当 $E^{(0)}_{N+,-}-E^{(0)}_{N-,+}\ll\varepsilon^2$，上式成为

$$E\approx\frac{1}{2}\left[E^{(0)}_{N+,-}+E^{(0)}_{N-,+}\right]\pm\frac{\varepsilon}{2}\left[1+\frac{1}{2\varepsilon^2}(E^{(0)}_{N+,-}-E^{(0)}_{N-,+})^2\right] \tag{18}$$

其中

$$E^{(0)}_{N+,-}+E^{(0)}_{N-,+}=2E_N\left(1+\frac{s^2}{N^2}\right)$$

$$E^{(0)}_{N+,-}-E^{(0)}_{N-,+}=4E_N\frac{s}{N}$$

因此

$$\boxed{E\approx E_N^{(0)}\pm\frac{\varepsilon}{2}+\frac{s^2}{N^2}E_N^{(0)}\left(1\pm\frac{4}{\varepsilon}E_N^{(0)}\right)} \tag{18'}$$

当 $\varepsilon^2\ll E_{N+1}^{(0)}-E_N^{(0)}$，式(17)给出

$$\begin{aligned}E&\approx\frac{1}{2}[E_{N-1}^{(0)}+E_N^{(0)}]\\&\quad\pm\frac{1}{2}[E_{N-1}^{(0)}-E_N^{(0)}]\left[1+\frac{\varepsilon^2}{2(E_{N+1}^{(0)}-E_{N-1}^{(0)})^2}\right]\\&=E_{N+1}^{(0)}\pm\frac{\varepsilon^2}{4(E_{N+1}^{(0)}-E_{N-1}^{(0)})}\end{aligned} \tag{19}$$

$$=E_{N+1}^{(0)}\pm\frac{N}{16s}\frac{\varepsilon^2}{E_N^{(0)}} \tag{19'}$$

这个结果相当于 $\psi^{(0)}$ 取 $\psi_N^{(0)}$ 或 $\psi_{N+1}^{(0)}$ 时非简并态微扰论给出的能级公式(二级近似).

讨论 当 L 很大时，自由电子的能级 $E_n^{(0)}$ 可以认为是接近于连续变化的. 受到周期性势场 H' 作用后，在 $E_n^{(0)}$ 附近形成一个"能隙"(禁带)，其宽度大致为 ε[见式(12)和(18')]. 这个结论是固体能带论的理论基础[1].

8.8 (a) 粒子在二维无限深方势阱中运动，

$$V=\begin{cases}0, & 0<x<a, \quad 0<y<a\\ \infty, & \text{其他区域.}\end{cases} \tag{1}$$

试写出能级和能量本征函数. (b) 加上微扰

$$H'=\lambda xy \tag{2}$$

求最低的两个能级的一级微扰修正.

解 (a) 能级和能量本征函数为

$$E_{n_1n_2}^{(0)}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n_1^2+n_2^2), \qquad n_1,n_2=1,2,3,\cdots \tag{3}$$

$$\psi_{n_1n_2}^{(0)}=\frac{2}{a}\sin\frac{n_1\pi x}{a}\sin\frac{n_2\pi y}{a}, \qquad \text{(阱内，下同)} \tag{4}$$

[1] 参考：曾谨言，《量子力学》卷 I (科学出版社，1997)，§ 10.2. 谢希德，方俊鑫，《固体物理学》上册(上海科学技术出版社，1980)，§ 8-3.

基态是非简并的，能级为 $E_{11}^{(0)}$，本征函数为

$$\psi_{11}^{(0)}=\frac{2}{a}\sin\frac{\pi x}{a}\sin\frac{\pi y}{a} \tag{5}$$

第一激发态是二重简并的，能级为 $E_{12}^{(0)}$，本征函数为

$$\begin{aligned}\psi_{12}^{(0)}&=\frac{2}{a}\sin\frac{\pi x}{a}\sin\frac{2\pi y}{a}=\psi_\alpha\\ \psi_{21}^{(0)}&=\frac{2}{a}\sin\frac{2\pi x}{a}\sin\frac{\pi y}{a}=\psi_\beta\end{aligned} \tag{6}$$

(b) 基态能级的一级修正等于 H' 的平均值，即

$$\begin{aligned}E_{11}^{(1)}&=\langle\psi_{11}^{(0)}|H'|\psi_{11}^{(0)}\rangle=\frac{4\lambda}{a^2}\int_0^a\int_0^a xy\sin^2\frac{\pi x}{a}\\ &\times\sin^2\frac{\pi y}{a}\mathrm{d}x\mathrm{d}y=\frac{\lambda}{4}a^2\end{aligned} \tag{7}$$

对于 ψ_α 和 ψ_β，容易算出 H' 的矩阵元为

$$\begin{aligned}H'_{\alpha\alpha}&=H'_{\beta\beta}=\frac{\lambda}{4}a^2\\ H'_{\alpha\beta}&=H'_{\beta\alpha}=\frac{256}{81\pi^4}\lambda a^2\end{aligned} \tag{8}$$

在 $\{\psi_\alpha,\psi_\beta\}$ 子空间中，H' 的矩阵表示为

$$H'=\frac{\lambda}{4}a^2\begin{bmatrix}1 & \dfrac{1024}{81\pi^4}\\ \dfrac{1024}{81\pi^4} & 1\end{bmatrix} \tag{9}$$

能级的一级修正为[参看题8.2式(21)]

$$\begin{aligned}E_{12}^{(1)}&=H'_{\alpha\alpha}\pm H'_{\alpha\beta}=\frac{\lambda}{4}a^2\left(1\pm\frac{1024}{81\pi^4}\right)\\ &=\frac{\lambda}{4}a^2(1\pm0.13)=\lambda a^2\times\begin{cases}0.2824\\ 0.2176\end{cases}\end{aligned} \tag{10}$$

结论：在微扰作用下，基态能级升高 $\lambda a^2/4$，第一激发能级的重心升高 $\lambda a^2/4$，同时分裂为二，裂距为0.065(λa^2).

8.9 三维谐振子，能量算符为

$$H_0=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2+z^2) \tag{1}$$

试写出能级和能量本征函数. 如这振子又受到微扰

$$H'=\frac{\lambda}{2}m\omega^2xy,\qquad |\lambda|\ll 1 \tag{2}$$

的作用，求最低的两个能级的微扰修正，并和精确值比较.

解 H_0的本征值和本征函数为

$$E_N^{(0)}=\left(N+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega \tag{3}$$

$$\psi_{n_1,n_2,n_3}^{(0)}=\psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)\psi_{n_3}(z)$$

$$N=n_1+n_2+n_3$$

$$N,n_1,n_2,n_3=0,1,2,3,\cdots \tag{4}$$

其中$\psi_n(x)$为一维(x)谐振子能量本征态.

(a) 基态能级的微扰修正(二级近似).

利用一维谐振子的矩阵元公式

$$x_{nn'}=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{n+1}\,\delta_{n+1,n'}+\sqrt{n}\,\delta_{n-1,n'}) \tag{5}$$

易知对于任何$\psi_{n_1n_2n_3}^{(0)}$，H'的平均值为0. 所以基态能级($N=n_1=n_2=n_3=0$)的一级微扰修正为0. 与基态有关的微扰矩阵元中，唯一不等于0的是

$$\langle\psi_{110}^{(0)}|H'|\psi_{000}^{(0)}\rangle=\frac{\lambda}{2}m\omega^2x_{10}y_{10}=\frac{\lambda}{4}\hbar\omega \tag{6}$$

因此，基态能级的二级微扰修正为

$$E_0^{(2)}=\frac{1}{E_0^{(0)}-E_2^{(0)}}|\langle\psi_{110}^{(0)}|H'|\psi_{000}^{(0)}\rangle|^2=-\frac{\lambda^2}{32}\hbar\omega \tag{7}$$

(b) 第一激发能级的微扰分裂(一级近似).

第一激发能级

$$E_1^{(0)}=\frac{5}{2}\hbar\omega$$

是三重简并，相应的本征态为$\psi_{100}^{(0)}$、$\psi_{010}^{(0)}$、$\psi_{001}^{(0)}$，其中前二种在一级微扰下能够发生耦合，微扰矩阵元为

$$H'_{100,010}=H'_{010,100}=\frac{\lambda}{2}m\omega^2x_{10}y_{01}=\frac{\lambda}{4}\hbar\omega \tag{8}$$

因此，在$\{\psi_{100}^{(0)},\psi_{010}^{(0)}\}$子空间中，$H'$的矩阵表示为

$$H'=\frac{\lambda}{4}\hbar\omega\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix} \tag{9}$$

按照题8.2讨论的第2°种情况，即可写出能级修正和相应的零级波函数：

$$\begin{aligned} E_1^{(1)}&=\frac{\lambda}{4}\hbar\omega, & \psi^{(0)}&=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{100}^{(0)}+\psi_{010}^{(0)}]\\ E_1^{(1)}&=-\frac{\lambda}{4}\hbar\omega, & \psi^{(0)}&=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{100}^{(0)}-\psi_{010}^{(0)}] \end{aligned} \tag{10}$$

另外，$\psi_{001}^{(0)}$也是正确的零级波函数，相应于 $E_1^{(1)}=0$.

结论是，在微扰作用下，$E_1^{(0)}$分裂成三条等距离的能级：

$$E_1^{(0)}\longrightarrow E_1^{(0)}+\frac{\lambda}{4}\hbar\omega,\quad E_1^{(0)},\quad E_1^{(0)}-\frac{\lambda}{4}\hbar\omega \tag{11}$$

(c) 能级的精确值.

总能量算符为

$$H=H_0+H'=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2+\lambda xy+z^2) \tag{12}$$

利用题3.5结果，就可以得出能级的精确值：

$$\begin{aligned} E_{n_1n_2n_3}=&\left(n_1+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_1+\left(n_2+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_2\\ &+\left(n_3+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \end{aligned} \tag{13}$$

其中

$$\omega_1=\omega\sqrt{1+\frac{\lambda}{2}},\qquad \omega_2=\omega\sqrt{1-\frac{\lambda}{2}} \tag{14}$$

由于$|\lambda|\ll 1$，可将ω_1、ω_2展开成λ的级数：

$$\begin{aligned} \omega_1&=\omega\left(1+\frac{\lambda}{2}\right)^{1/2}\\ &=\omega\left(1+\frac{\lambda}{4}-\frac{\lambda^2}{32}+\cdots\right)\\ \omega_2&=\omega\left(1-\frac{\lambda}{2}\right)^{1/2} \end{aligned}$$

$$=\omega\left(1-\frac{\lambda}{4}-\frac{\lambda^2}{32}-\cdots\right) \tag{15}$$

基态能级为

$$E_{000}=\frac{\hbar}{2}(\omega_1+\omega_2+\omega)\approx\frac{3}{2}\hbar\omega-\frac{\lambda^2}{32}\hbar\omega \tag{16}$$

其中第一项相当于 $E_0^{(0)}$，第二项相当于微扰修正 $E_0^{(2)}$.

和微扰前第一激发能级相应的是下列三个能级：

$$\begin{aligned}
E_{100}&=\frac{\hbar}{2}(3\omega_1+\omega_2+\omega)\\
&\approx\frac{5}{2}\hbar\omega+\left(\frac{\lambda}{4}-\frac{\lambda^2}{16}\right)\hbar\omega\\
E_{001}&=\frac{\hbar}{2}(\omega_1+\omega_2+3\omega)\\
&\approx\frac{5}{2}\hbar\omega-\frac{\lambda^2}{32}\hbar\omega\\
E_{010}&=\frac{\hbar}{2}(\omega_1+3\omega_2+\omega)\\
&\approx\frac{5}{2}\hbar\omega-\left(\frac{\lambda}{4}+\frac{\lambda^2}{16}\right)\hbar\omega
\end{aligned} \tag{17}$$

如仅保留 λ 项，刚好和微扰论一级近似式(11)一致[1].

8.10 一维谐振子，其能量算符为

$$H_0=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2 \tag{1}$$

设此谐振子受到微扰作用

$$H'=\frac{\lambda}{2}m\omega^2x^2,\qquad |\lambda|\ll 1 \tag{2}$$

试求各能级的微扰修正(三级近似)，并和精确解比较.

解 H_0的本征函数、本征值记为 $\psi_n^{(0)}$、$E_n^{(0)}$. 如所周知

$$E_n^{(0)}=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\qquad n=0,1,2,\cdots \tag{3}$$

---

[1] 参考曾谨言，《量子力学》卷Ⅰ(科学出版社，1997)，§10.2.3.

在 H_0 表象(以 $\psi_n^{(0)}$ 为基矢)中,x 的矩阵元中不等于0的类型为

$$x_{n+1,n}=x_{n,n+1}=\left(\frac{n+1}{2}\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2} \tag{4}$$

因此,不等于0的微扰矩阵元有下列类型:

$$H'_{nn}=\frac{\lambda}{2}m\omega^2\sum_k x_{nk}x_{kn}$$

$$=\frac{\lambda}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega=\frac{\lambda}{2}E_n^{(0)} \tag{5}$$

$$H'_{n,n+2}=H'_{n+2,n}=\frac{\lambda}{2}m\omega^2 x_{n,n+1}x_{n+1,n+2}$$

$$=\frac{\lambda}{4}\sqrt{(n+1)(n+2)}\hbar\omega \tag{6}$$

按照上题所得公式,能级 $E_n^{(0)}$ 的各级微扰修正为

$$E_n^{(1)}=H'_{nn}=\frac{\lambda}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{7}$$

$$E_n^{(2)}=\frac{1}{2\hbar\omega}[|H'_{n,n+2}|^2-|H'_{n,n-2}|^2]$$

$$=-\frac{\lambda^2}{8}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{8}$$

$$E_n^{(3)}=-\frac{1}{(2\hbar\omega)^2}[H'_{n+2,n+2}(H'_{n,n+2})^2+H'_{n-2,n-2}(H'_{n-2,n})^2$$

$$-H'_{nn}(|H'_{n+2,n}|^2+|H'_{n-2,n}|^2)]$$

$$=\frac{\lambda^3}{16}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{9}$$

本题显然可以精确求解,因为

$$H=H_0+H'=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}(1+\lambda)m\omega^2x^2$$

令

$$\omega'=\omega\sqrt{1+\lambda}$$

H 可以写成

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega'^2x^2 \tag{10}$$

和式(1)比较,差别在于 $\omega\longrightarrow\omega'$,因此 H 的本征值为

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega'=\left(n+\frac{1}{2}\right)\sqrt{1+\lambda}\,\hbar\omega \tag{11}$$

因为$|\lambda|\ll1$，将$\sqrt{1+\lambda}$作二项式展开，即得

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\left(1+\frac{\lambda}{2}-\frac{\lambda^2}{8}+\frac{\lambda^3}{16}-\cdots\right)\hbar\omega \tag{12}$$

和微扰论结果完全一致.

8.11 在球对称谐振子势阱

$$V(r)=\frac{1}{2}m\omega^2r^2$$

中运动的粒子，受到微扰作用为

$$H'=\lambda xyz+\frac{\lambda^2}{\hbar\omega}x^2y^2z^2$$

λ为小常数.

(a) 计算基态能级的移动(准确到λ^2)；

(b) 对于微扰后的基态(一级近似)，计算$\langle r\rangle$；

(c) 试用不依赖于微扰论的论据，解释(b)的结果.

解 (a) 以ψ_n表示一维谐振子能量本征态，则微扰前的能量本征态和能级为

$$\psi^{(0)}_{n_1n_2n_3}=\psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)\psi_{n_3}(z),\qquad (\text{记为}|n_1n_2n_3\rangle)$$

$$E^{(0)}_{n_1n_2n_3}=\left(n_1+n_2+n_3+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega. \tag{1}$$

基态为

$$\psi^{(0)}_{000}=\psi_0(x)\psi_0(y)\psi_0(z),\qquad (\text{记为}|000\rangle) \tag{2}$$

对于这状态，显然

$$\langle xyz\rangle=0,\qquad \langle x^2y^2z^2\rangle=(\langle0|x^2|0\rangle)^3=\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^3 \tag{3}$$

因此，基态能级的一级微扰修正为

$$E^{(1)}_{000}=\langle000|H'|000\rangle=\frac{\lambda^2}{8}\frac{\hbar^2}{m^3\omega^4} \tag{4}$$

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

$$\langle 111|H'|000\rangle=\lambda(x_{10})(y_{10})(z_{10})=\lambda\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2} \tag{5}$$

因此，基态能级的二级微扰修正中，λ^2量级的项为

$$E_{000}^{(2)}\longrightarrow-\frac{|\langle 111|H'|000\rangle|^2}{3\hbar\omega}=-\frac{\lambda^2}{24}\frac{\hbar^2}{m^3\omega^4} \tag{6}$$

准确到 λ^2，基态能级移动为

$$\Delta E_{000}=\left(\frac{1}{8}-\frac{1}{24}\right)\frac{\lambda^2\hbar^2}{m^3\omega^4}=\frac{\lambda^2}{12}\frac{\hbar^2}{m^3\omega^4} \tag{7}$$

(b) 微扰后的基态波函数(准至 λ)为

$$\begin{aligned}\psi_0&=\psi_{000}^{(0)}-\frac{\langle 111|H'|000\rangle}{3\hbar\omega}\psi_{111}^{(0)}\\&=\psi_0(x)\psi_0(y)\psi_0(z)\\&\quad-\frac{\lambda}{3\hbar\omega}\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/2}\psi_1(x)\psi_1(y)\psi_1(z)\end{aligned} \tag{8}$$

在 ψ_0态下计算 r 的平均值，可得

$$\langle\psi_0|r|\psi_0\rangle=0 \tag{9}$$

(c) 受微扰作用后，势能变成

$$\begin{aligned}V(x,y,z)&=\frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2+z^2)+\lambda xyz\\&\quad+\frac{\lambda^2}{\hbar\omega}x^2y^2z^2\end{aligned} \tag{10}$$

由极值条件

$$\frac{\partial V}{\partial x}=0,\qquad\frac{\partial V}{\partial y}=0,\qquad\frac{\partial V}{\partial z}=0$$

容易求得粒子的“平衡位置”(即 V 取极小值的位置)为

$$x=y=z=0$$

基态下$\langle r\rangle=0$的根源即在于此.

8.12 在势场中作低速运动的粒子，计及相对论质能关系后，Hamilton 量可以近似取为

$$H=\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2-\frac{1}{8m^3c^2}\boldsymbol{p}^4+V(\boldsymbol{r}) \tag{1}$$

其中第二项为动能的相对论修正，可以作为微扰处理.（这里没有考虑与自旋有关的相对论修正项.）试对谐振子和类氢离子，计算这个修正项对能级的影响.

解 将式(1)写成

$$H=H_0+H' \tag{1'}$$

其中

$$H_0=\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2+V(\boldsymbol{r}),\quad H'=-\frac{1}{8m^3c^2}\boldsymbol{p}^4 \tag{2}$$

微扰 H' 可以表示成

$$\begin{aligned}H'&=-\frac{1}{2mc^2}\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\right)^2=-\frac{1}{2mc^2}(H_0-V)^2\\&=-\frac{1}{2mc^2}(H_0^2+V^2-H_0V-VH_0)\end{aligned} \tag{3}$$

(a) 一维谐振子. H_0的本征函数和本征值为 $\psi_n^{(0)}$、$E_n^{(0)}$，势能

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

根据位力定理，在 $\psi_n^{(0)}$ 态中 V 的平均值为

$$\langle\psi_n^{(0)}|V|\psi_n^{(0)}\rangle=\frac{1}{2}E_n^{(0)}=\frac{1}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{4}$$

按照非简并态微扰论，能级的一级微扰修正为

$$\begin{aligned}E_n^{(1)}&=\langle\psi_n^{(0)}|H'|\psi_n^{(0)}\rangle\\&=-\frac{1}{2mc^2}\langle\psi_n^{(0)}|(H_0^2+V^2-H_0V-VH_0)|\psi_n^{(0)}\rangle\\&=-\frac{1}{2mc^2}[(E_n^{(0)})^2-2E_n^{(0)}\langle V\rangle_n+\langle V^2\rangle_n]\\&=-\frac{1}{2mc^2}\langle V^2\rangle_n=-\frac{1}{2mc^2}\left(\frac{1}{2}m\omega^2\right)^2\langle x^4\rangle_n\end{aligned} \tag{5}$$

利用 x 的矩阵元公式(见题8.10)容易算出

$$\begin{aligned}\langle x^4\rangle_n&=(x^2)_{nn}^2+(x^2)_{n,n+2}^2+(x^2)_{n,n-2}^2\\&=\frac{3}{4}(2n^2+2n+1)\frac{\hbar^2}{m^2\omega^2}\end{aligned} \tag{6}$$

代入式(5),即得

$$\boxed{E_n^{(1)}=-\frac{3}{16}\left(n^2+n+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar^2\omega^2}{mc^2}} \tag{7}$$

(b) 类氢离子. $V(r)=-Ze^2/r$, H_0的本征函数和本征值为

$$\psi_{nlm}^{(0)}=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{8}$$

$$E_n^{(0)}=-\frac{Z^2e^2}{2n^2a_0},\qquad a_0=\frac{\hbar^2}{m_ee^2} \tag{9}$$

由于 $\boldsymbol{p}^4$和 l^2、l_z 对易,H'作用于 $\psi_{nlm}^{(0)}$不改变量子数 l、m,因此在属于同一个 $E_n^{(0)}$的各个简并态(l,m 取不同值)之间,H'的非对角矩阵元全部为0,即

$$\langle nlm|H'|nl'm'\rangle=\langle H'\rangle_{nlm}\delta_{ll'}\delta_{mm'} \tag{10}$$

从而在计算能级的一级微扰修正时,可以利用非简并态微扰论公式,即

$$\begin{aligned}E_{nlm}^{(1)}&=\langle H'\rangle_{nlm}=-\frac{1}{2mc^2}\langle H_0^2+V^2-H_0V-VH_0\rangle_{nlm}\\&=-\frac{1}{2mc^2}\left[(E_n^{(0)})^2-2E_n^{(0)}\langle V\rangle_{nlm}+\langle V^2\rangle_{nlm}\right]\end{aligned} \tag{11}$$

按照位力定理,

$$\langle V\rangle_{nlm}=2E_n^{(0)} \tag{12}$$

利用公式(见题5.8)

$$\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle_{nlm}=\frac{Z^2}{\left(l+\frac{1}{2}\right)n^3a_0^2} \tag{13}$$

可得

$$\langle V^2\rangle_{nlm}=\left\langle\frac{Z^2e^4}{r^2}\right\rangle_{nlm}=\frac{1}{n^3\left(l+\frac{1}{2}\right)}\left(\frac{Z^2e^2}{a_0}\right)^2 \tag{14}$$

将式(12)、(14)代入式(11),即得能级的一级微扰修正,为

$$\boxed{E_{nlm}^{(1)}=-m_ec^2\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^4\frac{Z^4}{2n^4}\left(\frac{n}{l+\frac{1}{2}}-\frac{3}{4}\right)} \tag{15}$$

能级的"l 简并"已经消除. 对于氢原子($Z=1$)的基态，修正为

$$E_{100}^{(1)}(Z=1)=-\frac{5}{8}\left(\frac{1}{137}\right)^4 m_e c^2=-9.1\times10^{-4}\ \mathrm{eV}$$

和自旋-轨道耦合能的量级相同.

8.13 三维各向同性谐振子，能量算符为

$$H_0=\sum_{i=1}^{3}\left(\frac{1}{2m}p_i^2+\frac{1}{2}m\omega^2x_i^2\right) \tag{1}$$

(x_1,x_2,x_3即 x,y,z)，设此振子又受到 x_3 方向均匀力场作用，总能量算符变成

$$H=H_0+H',\qquad H'=\lambda x_3 \tag{2}$$

视 H' 为微扰，试利用题8.5建立的公式计算微扰作用后的基态平均值$\langle x_i\rangle$，$i=1,2,3$，并和精确值比较.

解 利用基本对易式

$$[x_\alpha,p_\beta]=\mathrm{i}\hbar\,\delta_{\alpha\beta} \tag{3}$$

易得

$$[p_3,H_0]=\frac{1}{2}m\omega^2[p_3,x_3^2]=-\mathrm{i}\hbar\,m\omega^2x_3 \tag{4}$$

因此

$$H'=\lambda x_3=\mathrm{i}\lambda\frac{1}{\hbar\,m\omega^2}[p_3,H_0] \tag{5}$$

相当于题8.5中取

$$A=p_3/\hbar\,m\omega^2$$

(a) 如取 $B=x_3$，则

$$C=\mathrm{i}[B,A]=-\frac{1}{m\omega^2}$$

微扰前的基态为$|0\rangle\sim\psi_0(x_1)\psi_0(x_2)\psi_0(x_3)$，根据宇称性显然可得

$$\langle0|x_3|0\rangle=0,\qquad\langle0|p_3|0\rangle=0 \tag{6}$$

亦即

$$A_0=0,\ B_0=0,\ C_0=C=-1/m\omega^2$$

根据题8.5最后所得式(7)，对于微扰后的基态 φ_0，应有

$$\langle\varphi_0|B|\varphi_0\rangle=\langle\varphi_0|x_3|\varphi_0\rangle=B_0+\lambda C_0=-\lambda/m\omega^2 \tag{7}$$

(b) 如取 $B=x_2$，则 $C=\mathrm{i}[x_2,A]=0$

现在，对于微扰前的基态$|0\rangle$，显然有

$$B_0=\langle 0|x_2|0\rangle=0,\qquad C_0=\langle 0|C|0\rangle=0$$

则由题8.5式(7)，对于微扰后的基态 φ_0，应有

$$\langle\varphi_0|x_2|\varphi_0\rangle=B_0+\lambda C_0=0 \tag{8}$$

(c) 如取 $B=x_1$，同样可证

$$\langle\varphi_0|x_1|\varphi_0\rangle=0 \tag{9}$$

结论：对于微扰后的基态，x_i 的平均值为

$$\boxed{\langle x_1\rangle=\langle x_2\rangle=0,\quad \langle x_3\rangle=-\lambda/m\omega^2}$$

本题的精确解可参看3.7题. 微扰后 H 中势能的 x_3 部分为

$$\frac{1}{2}m\omega^2x_3^2+\lambda x_3=\frac{1}{2}m\omega^2\left(x_3+\frac{\lambda}{m\omega^2}\right)^2-\frac{\lambda^2}{2m\omega^2} \tag{10}$$

基态波函数为

$$\varphi_0=\psi_0(x_1)\psi_0(x_2)\psi_0\left(x_3+\frac{\lambda}{m\omega^2}\right) \tag{11}$$

其中 ψ_0 为一维谐振子基态波函数. 由 ψ_0 的宇称性易知

$$\begin{gathered}\langle\varphi_0|x_1|\varphi_0\rangle=0,\qquad \langle\varphi_0|x_2|\varphi_0\rangle=0\\ \langle\varphi_0\left|\left(x_3+\frac{\lambda}{m\omega^2}\right)\right|\varphi_0\rangle=0\\ \langle\varphi_0|x_3|\varphi_0\rangle=-\frac{\lambda}{m\omega^2}\end{gathered} \tag{12}$$

和微扰论结果一致.

8.14 自旋为0的两个全同粒子在谐振子势场

$$V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

中作一维运动. 粒子间有相互作用

$$V_{\mathrm{int}}(x_1,x_2)=V_0\mathrm{e}^{-\beta^2(x_1-x_2)^2} \tag{1}$$

视 V_{int} 为微扰，求体系的基态能级(一级近似).

解 粒子1、2的坐标记为 x_1、x_2，体系 Hamilton 量为

$$H = H_0 + V_{\text{int}}(x_1, x_2) \tag{2}$$

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right) + \frac{1}{2}m\omega^2(x_1^2 + x_2^2) \tag{3}$$

体系基态波函数的零级近似为

$$\Psi_0^{(0)}(x_1, x_2) = \psi_0(x_1)\psi_0(x_2) \tag{1}$$

其中 $\psi_0(x)$ 为一维谐振子基态波函数，即

$$\psi_0(x) = \frac{\sqrt{\alpha}}{\pi^{1/4}}e^{-\alpha^2x^2/2}, \qquad \alpha = \sqrt{m\omega/\hbar} \tag{5}$$

基态能级的零级近似为

$$E_0^{(0)} = 2 \times \frac{1}{2}\hbar\omega = \hbar\omega \tag{6}$$

微扰论一级修正为

$$E_0^{(1)} = \langle \Psi_0^{(0)} | V_{\text{int}} | \Psi_0^{(0)} \rangle \tag{7}$$

计算 $E_0^{(1)}$ 有两种方法

(a) 直接积分. 将式(1)、(4)、(5)直接代入式(7)，得到

$$E_0^{(1)} = V_0\frac{\alpha^2}{\pi}\iint_{-\infty}^{\infty} dx_1 dx_2 e^{-\alpha^2(x_1^2+x_2^2)}e^{-\beta^2(x_1-x_2)^2}$$

$$= V_0\frac{\alpha^2}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dx_2 e^{-(\alpha^2+\beta^2)x_2^2}I(x_2) \tag{8}$$

其中

$$I(x_2) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 e^{-(\alpha^2+\beta^2)x_1^2+2\beta^2x_2x_1}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \exp\left[-(\alpha^2+\beta^2)\left(x_1 - \frac{\beta^2}{\alpha^2+\beta^2}x_2\right)^2 + \frac{\beta^2}{\alpha^2+\beta^2}x_2^2\right]$$

$$= \left(\frac{\pi}{\alpha^2+\beta^2}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left(\frac{\beta^2}{\alpha^2+\beta^2}x_2^2\right) \tag{9}$$

代入式(8)，就可求出

$$E_0^{(1)} = V_0\Big/\left(1+\frac{2\beta^2}{\alpha^2}\right)^{1/2} \tag{10}$$

计算中利用了定积分公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\lambda x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}. \qquad (\lambda > 0) \tag{11}$$

(b) 引入质心坐标 X 和相对坐标 x,即

$$X = \frac{1}{2}(x_1 + x_2), \qquad x = x_1 - x_2 \tag{12}$$

利用

$$x_1^2 + x_2^2 = 2X^2 + \frac{1}{2}x^2 \tag{13}$$

可以将 $\Psi_0^{(0)}$ 表示成

$$\begin{aligned}\Psi_0^{(0)} &= \psi_0(x_1)\psi_0(x_2) \\ &= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha^2 X^2} e^{-\alpha^2 x^2/4} = \psi_0(X)\psi_0(x)\end{aligned} \tag{14}$$

其中

$$\begin{aligned}\psi_0(X) &= \left(\frac{2\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\alpha^2 X^2} \\ \psi_0(x) &= \left(\frac{\alpha^2}{2\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\alpha^2 x^2/4}\end{aligned} \tag{15}$$

二者均已归一化,分别代表体系质心运动和相对运动(均为谐振动)的基态. 利用式(14),(15)以及式(11),容易算出

$$\begin{aligned}E_0^{(1)} &= \langle \Psi_0^{(0)} | V_{\text{int}} | \Psi_0^{(0)} \rangle \\ &= \langle \psi_0(x) | V_0 e^{-\beta^2 x^2} | \psi_0(x) \rangle \\ &= V_0 \Big/ \left(1 + \frac{2\beta^2}{\alpha^2}\right)^{1/2}\end{aligned}$$

这正是式(10).

8.15 (a) 质量为 m 的粒子,限制在半径为 R 的环上自由运动,求能级和能量本征函数. (b) 加上微扰

$$H' = V(\varphi) = \begin{cases} V_1, & -\alpha < \varphi < 0 \\ V_2, & 0 < \varphi < \alpha \\ 0, & \text{其他角度} \end{cases} \qquad (\alpha < \pi) \tag{1}$$

求最低的三条能级的一级微扰修正.

解 (a) 同上题,粒子在环上自由运动时能级和能量本征函数为

$$E_n^{(0)}=\frac{n^2\hbar^2}{2mR^2},\qquad \psi_n^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{in\varphi} \tag{2}$$

$$n=0,\pm1,\pm2,\cdots$$

基态($n=0$)不简并,其他能级都是二重简并.

(b) 对于任何 $\psi_n^{(0)}$,显然 H' 平均值为

$$H'_{nn}=\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}V(\varphi)d\varphi=\frac{\alpha}{2\pi}(V_1+V_2)\equiv a \tag{3}$$

因此基态能级 $E_0^{(0)}$ 的一级微扰修正为

$$E_0^{(1)}=H'_{00}=a=\frac{\alpha}{2\pi}(V_1+V_2) \tag{4}$$

第一激发态 $n=\pm1$,微扰矩阵元为

$$H'_{1,1}=\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}V(\varphi)e^{2i\varphi}d\varphi$$

$$=\frac{1}{2\pi}(V_1e^{-i\alpha}+V_2e^{i\alpha})\sin\alpha\equiv b_1 \tag{5}$$

在 $\{\psi_1^{(0)},\psi_{-1}^{(0)}\}$ 子空间中,H' 的矩阵表示为

$$H'=\begin{bmatrix}a & b_1^*\\ b_1 & a\end{bmatrix} \tag{6}$$

能级的一级修正为[参看题8.2式(21)]

$$E_1^{(1)}=a\pm|b_1|=\frac{\alpha}{2\pi}(V_1+V_2)$$

$$\pm\frac{\sin\alpha}{2\pi}\sqrt{V_1^2+V_2^2+2V_1V_2\cos2\alpha} \tag{7}$$

对于第二激发态($n=\pm2$),类似的计算给出

$$H'_{-2,2}=\frac{1}{4\pi}(V_1e^{-2i\alpha}+V_2e^{2i\alpha})\sin2\alpha\equiv b_2 \tag{8}$$

$$E_2^{(1)}=a\pm|b_2|=\frac{\alpha}{2\pi}(V_1+V_2)$$

$$\pm\frac{|\sin2\alpha|}{4\pi}\sqrt{V_1^2+V_2^2+2V_1V_2\cos4\alpha} \tag{9}$$

8.16 在原子结构的计算中，通常将原子核当作点电荷处理. 实际上原子核不是点电荷，它有一定的大小.

(a) 以 R 表示原子核半径. 设核电荷(Ze)均匀分布于半径为 R 的球内，试用微扰论(一级近似)估算这种核的有限大小效应对原子的1s 电子能级的影响. (1s 电子波函数取为类氢离子波函数.)(b) 设核电荷分布于半径为 R 的球壳上，1s 电子的能级修正又如何?

解 (a) 用 Gauss 定理不难求出球形电荷分布的静电势为

$$\phi(r)=\begin{cases}\dfrac{Ze}{R}\left(\dfrac{3}{2}-\dfrac{1}{2}\dfrac{r^2}{R^2}\right), & r<R\\ \dfrac{Ze}{r}, & r>R\end{cases} \tag{1}$$

电子的势能为 $V(r)=-e\phi(r)$. 而视核为点电荷时电子的势能为 $\left(-\dfrac{Ze^2}{r}\right)$，二者之差

$$\begin{aligned}H'&=-e\phi(r)-\left(-\frac{Ze^2}{r}\right)\\&=\begin{cases}Ze^2\left(\dfrac{1}{r}+\dfrac{r^2}{2R^3}-\dfrac{3}{2R}\right), & r<R\\ 0, & r>R\end{cases}\end{aligned} \tag{2}$$

可以视为微扰. 类氢离子中1s 轨道电子波函数为

$$\psi_{1s}=\left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-Zr/a_0} \tag{3}$$

a_0为 Bohr 半径. 1s 能级的微扰论一级修正为

$$E_{1s}^{(1)}=\langle\psi_{1s}|H'|\psi_{1s}\rangle=\int_0^R\psi_{1s}^2H'4\pi r^2\mathrm{d}r \tag{4}$$

由于核半径 R 远小于原子半径 a_0/Z，积分时可取

$$\mathrm{e}^{-2Zr/a_0}\approx 1$$

从而求出

$$\begin{aligned}E_{1s}^{(1)}&\approx\frac{4Z^4e^2}{a_0^3}\int_0^R\left(r+\frac{r^4}{2R^3}-\frac{3r^2}{2R}\right)\mathrm{d}r\\&=\frac{2}{5}\frac{Z^4e^2R^2}{a_0^3}=\frac{4}{5}\left(\frac{ZR}{a_0}\right)^2|E_{1s}^{(0)}|\end{aligned} \tag{5}$$

其中

$$E_{1s}^{(0)}=-\frac{Z^2e^2}{2a_0}$$

为类氢离子基态能级.

(b) 视核电荷 Ze 为球壳电荷分布,容易求出静电势为

$$\phi(r)=\begin{cases}Ze/R, & r<R\\ Ze/r, & r>R\end{cases} \tag{6}$$

因此,微扰作用势为

$$\begin{aligned}H'&=-e\phi(r)-(-Ze^2/r)\\&=\begin{cases}Ze^2\left(\frac{1}{r}-\frac{1}{R}\right), & r<R\\ 0, & r>R\end{cases}\end{aligned} \tag{7}$$

类似于(a)的计算,给出能级修正为

$$E_{1s}^{(1)}\approx\frac{2}{3}\frac{Z^4e^2R^2}{a_0^3}=\frac{4}{3}\left(\frac{ZR}{a_0}\right)^2|E_{1s}^{(0)}| \tag{8}$$

讨论 (a),(b)两种情况的能级修正,数量级相同,和 E_{1s} 本身相比,约为

$$|E_{1s}^{(1)}/E_{1s}|\sim Z^2R^2/a_0^2 \tag{9}$$

由于核半径 $R<10^{-12}$cm,而 $a_0=0.53\times10^{-8}$cm,故上式右端不超过10^{-4}.如换成 μ 原子(以 μ^- 子代替电子),情况将大不一样.如 Z 很大,μ^- 子的轨道半径可以接近甚至小于核半径,这时核的有限大小将对 μ 原子的1s 能级产生巨大影响(参看下题).

8.17 如类氢离子中电子换成 μ^- 子,即成 μ 原子.μ^- 和质子间的作用力为 Coulomb 力,和中子无作用.$m_\mu=207m_e$.

(a) 视核为点电荷,写出 μ 原子的能级和轨道(取 $l=n-1$,即 Bohr 量子论中圆形轨道)半径公式;

(b) 视核为电荷均匀分布的球体.核半径的经验公式为

$$R=r_{0p}Z^{1/3},\qquad r_{0p}=1.635\ \text{fm}=1.635\times10^{-13}\text{cm} \tag{1}$$

对于较大的原子序数 Z,核半径 R 有可能大于 μ 的轨道半径.求出现这种情况的 Z 的临界值 Z_0;

(c) 对于 $Z\ll Z_0$,求核的有限大小效应对 μ 原子基态能级的影

响，并和相对论-自旋效应作比较.

解 类氢离子的电子能级和轨道半径($l=n-1$)公式为

$$E_n=-Z^2e^4m_e/2n^2\hbar^2=-Z^2e^2/2n^2a_0 \tag{2}$$

$$r_n=n^2\hbar^2/m_eZe^2=n^2a_0/Z, \quad \text{(轨道半径)} \tag{3}$$

$$a_0=\hbar^2/m_ee^2=0.53\times10^{-8}\text{cm}, \quad \text{(Bohr 半径)} \tag{4}$$

将 m_e 换成 m_μ(核质量视为无限大. 否则 m_e 或 m_μ 均应改用约化质量)，即得 μ 原子的相应公式：

$$E_n=-Z^2e^4m\mu/2n^2\hbar^2=-\frac{Z^2}{n^2}\times2.82\times10^{-3}\text{ MeV} \tag{5}$$

$$r_n=n^2\hbar^2/m_\mu Ze^2=n^2r_0/Z, \quad \text{(轨道半径)} \tag{6}$$

其中

$$r_0=\hbar^2/m_\mu e^2=a_0/207=256\text{ fm}. \quad (\mu^- \text{ 的“Bohr 半径”})$$

核半径 R 约为几个 fm. 由式(6)可知，当 $n=1$(基态)，轨道半径 r_1 确有可能与核半径相等. Z 的临界值 Z_0 由下式决定：

$$r_1=r_0/Z_0=R=r_{0p}Z_0^{1/3}$$

易得

$$\boxed{Z_0=\left(\frac{r_0}{r_{0p}}\right)^{3/4}\approx44} \tag{7}$$

当 $Z<Z_0$，μ 原子的基态轨道半径大于核半径，μ^- 主要是在核外运动；当 $Z>Z_0$，轨道半径小于核半径，μ^- 基本上是在核内运动.

当 $Z\ll Z_0$，核的有限大小对 μ 原子基态能级的影响约为[见上题式(5)]

$$\Delta E_{1s}\approx\frac{2}{5}\pi Ze^2R^2|\psi_{1s}(0)|^2$$

$$=\frac{2}{5}Z^4e^2R^2/r_0^3 \tag{8}$$

基态能级的相对论-自旋修正(参看下册题10.9)为

$$\delta E_{1s}=-\frac{1}{8}m_\mu c^2Z^4\alpha^4 \tag{9}$$

其中 $\alpha=e^2/\hbar c\approx1/137$ 为精细结构常数.

两种效应的具体数值如下表(能量单位：eV)

Z	E_{1s}	ΔE_{1s}	$\lvert\delta E_{1s}\rvert$
2	1.1×10^{4}	2.3	0.60
10	2.8×10^{6}	4.3×10^{3}	375
20	1.1×10^{6}	1.1×10^{5}	6.0×10^{3}
30	2.5×10^{6}	7.2×10^{5}	3.0×10^{4}

其中 ΔE_{1s} 系按式(8)计算，其中核半径 R 按式(1)计算. 由表可见，对于 μ 原子来说，原子核的"体积效应"引起的基态能级修正大于相对论-自旋修正.

注意，$\Delta E_{1s}\propto Z^{4.67}$，$\delta E_{1s}\propto Z^{4}$. ①

8.18 对于 μ^- 粒子和铅($Z=82$)原子核构成的原子，试估算其1s 和2p 能级之值，并和实验结果(自发跃迁2p $\longrightarrow$ 1s 放出能量 6 MeV)比较.

解 如取点电荷核模型，能级为[见上题式(5)]

$$E_n=-Z^2e^4m_\mu/2n^2\hbar^2=-\frac{Z^2}{n^2}\times2.82\times10^{-3}\ \text{MeV} \tag{1}$$

则

$$E_1=-18.9\ \text{MeV},\qquad E_2=-4.7\ \text{MeV}$$

$$E_2-E_1=14.2\ \text{MeV} \tag{2}$$

如再考虑基态的相对论自旋修正

$$\delta E_1=-\frac{1}{8}m_\mu c^2Z^4\alpha^4=-1.7\ \text{MeV} \tag{3}$$

(对激发态，这种修正不重要，因为 $\delta E_n\propto n^{-1}$，)则(E_2-E_1)将达16 MeV，与实验值6 MeV 相差甚远. 究其原因，在于基态轨道半径太小，仅为[见上题式(6)]

① 参考：本题及下题参考 A. A. Соколов，《量子力学原理及其应用》(上海科学技术出版社，1983)，§ 21.

$$r_1=\hbar^2/Ze^2m_\mu=\frac{1}{82}\times 256\ \text{fm}=3.1\ \text{fm} \tag{4}$$

而核半径为

$$R=1.635\times(82)^{1/3}\ \text{fm}=7.1\ \text{fm} \tag{5}$$

r_1尚不足 R 之半.(2p 态轨道半径 $r_2=4r_1=12.5\ \text{fm}>R$.)处于基态(1s)的 μ 基本上是在核内运动,μ^-和核的静电作用势应取为(参看题8.16)

$$V(r)=\frac{Ze^2}{2R^3}r^2-\frac{3Ze^2}{2R},\qquad r<R \tag{6}$$

这是一个谐振子势阱,写成标准形式,就是

$$V(r)=\frac{1}{2}m_\mu\omega^2r^2+V_0 \tag{6'}$$

其中

$$V_0=-\frac{3Ze^2}{2R}=-24.9\ \text{MeV}$$

$$\hbar\omega=\hbar\left(\frac{Ze^2}{m_\mu R^3}\right)^{\frac{1}{2}}=11.0\ \text{MeV}$$

谐振子势阱式(6')的基态能级为

$$V_0+\frac{3}{2}\hbar\omega=-8.4\ \text{MeV} \tag{7}$$

相对论自旋修正为(参看下册题10.9)

$$\delta E=-\frac{3}{32}\frac{\hbar^2\omega^2}{m_\mu c^2}\approx-0.1\ \text{MeV}$$

因此 μ 原子的基态能级为

$$E_1\sim V_0+\frac{3}{2}\hbar\omega+\delta E\approx-8.5\ \text{MeV} \tag{8}$$

如2p 态能级仍取式(1)给出的 $E_2=-4.7$ MeV,则自发跃迁2p$\longrightarrow$1s 释放能量的理论值为3.8 MeV,和实验值尚有相当差距.

事实上,谐振子势式(6)仅适用于核内($r<R$),当 μ^-在核外出现时,作用势仍应取($-Ze^2/r$),低于式(6),这当然会导致能级降低.因此,真正的基态能级将略低于式(8).同样,由于原子核的"体

积效应”，2p 能级也应略高于式(1)给出的值(−4.7 MeV)．考虑了这些修正后，能级的理论值和实验值符合得相当好．

8.19 很小的均匀带电球在外来静电场中获得势能

$$U(\boldsymbol{r})=V(\boldsymbol{r})+\frac{1}{6}r_0^2\nabla^2V(\boldsymbol{r})+\cdots \tag{1}$$

其中 r_0 是小球半径，$\boldsymbol{r}$ 是球心位置，$V(\boldsymbol{r})$ 是带电小球换成点电荷时获得的静电势能．氢原子中，视电子为点电荷时，电子和原子核之间的库仑势能为

$$V(\boldsymbol{r})=\frac{e^2}{r} \tag{2}$$

如视电子为带电 $(-e)$ 小球，取 $r_0=e^2/m_ec^2$(经典电子半径)，势能改用式(1)，并视 r_0^2 项为微扰，求1s 和2p 能级的微扰修正[相当于 Lamb 移位(shift)]．

解 将式(2)代入式(1)，并写成

$$U(\boldsymbol{r})=-\frac{e^2}{r}+H' \tag{1'}$$

利用公式

$$\nabla^2\frac{1}{r}=-4\pi\delta(\boldsymbol{r}) \tag{3}$$

即得

$$\boxed{H'=\frac{2\pi}{3}e^2r_0^2\delta(\boldsymbol{r})} \tag{4}$$

能级的一级微扰修正等于 H' 的平均值，即

$$\boxed{E^{(1)}=\int|\psi|^2H'\mathrm{d}^3x=\frac{2\pi}{3}e^2r_0^2|\psi(0)|^2} \tag{5}$$

对于2p 态，

$$\psi_{2p}(0)=0,\qquad E_{2p}^{(1)}=0$$

对于1s 态，

$$|\psi_{1s}(0)|^2=\frac{1}{\pi a_0^3}=\frac{1}{\pi}\left(\frac{m_ee^2}{\hbar^2}\right)^3 \tag{6}$$

因此

$$\boxed{E_{1s}^{(1)}=\frac{2}{3}\frac{e^2r_0^2}{a_0^3}=\frac{2}{3}\alpha^6m_ec^2\approx5.1\times10^{-8}\text{ eV}} \tag{7}$$

其中 $\alpha=e^2/\hbar c\approx1/137$ 为精细结构常数.

和电子静质量 m_ec^2 相比，氢原子能级、能级的精细结构，Lamb 移位的数量级分别为 α^2、α^4、α^6.

8.20 氢原子处于基态. 沿 z 方向加一个均匀弱电场 $\mathscr{E}$，视电场为微扰. 求电场作用后的基态波函数(一级近似)，能级(二级近似)，平均电矩和电极化系数(不考虑自旋).

解 加电场前，基态波函数为

$$\psi^{(0)}=(\pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}}e^{-r/a_0},\qquad a_0=\frac{\hbar^2}{\mu e^2}\quad(\text{Bohr 半径}) \tag{1}$$

满足能量本征方程

$$H_0\psi^{(0)}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi^{(0)}-\frac{e^2}{r}\psi^{(0)}=E^{(0)}\psi^{(0)} \tag{2}$$

其中

$$E^{(0)}=-e^2/2a_0$$

视外电场为微扰，微扰作用势为

$$H'=e\mathscr{E}z=e\mathscr{E}r\cos\theta \tag{3}$$

由于 $\psi^{(0)}$ 为偶宇称，H' 为奇宇称，所以一级能量修正为0，

$$E^{(1)}=\langle\psi^{(0)}|e\mathscr{E}z|\psi^{(0)}\rangle=0 \tag{4}$$

波函数的一级微扰修正 $\psi^{(1)}$ 满足方程(参看题8.1)

$$[H_0-E^{(0)}]\psi^{(1)}=[E^{(1)}-H']\psi^{(0)}=-e\mathscr{E}r\cos\theta\psi^{(0)} \tag{5}$$

除了一个常系数外，$\cos\theta$ 即球谐函数 Y_{10}，考虑到 H_0 和 $\psi^{(0)}$ 都是球对称的，易知 $\psi^{(1)}$ 必可表示成

$$\psi^{(1)}=\psi^{(0)}f(r)\cos\theta \tag{6}$$

代入式(5)，并计及

$$\nabla^2\psi^{(1)}=f(r)\cos\theta\,\nabla^2\psi^{(0)}+\psi^{(0)}\nabla^2[f(r)\cos\theta]$$
$$+2[\nabla\cos\theta f(r)]\cdot\nabla\psi^{(0)}$$

其中

$$\nabla^2[f(r)\cos\theta]=\cos\theta\left[\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(rf)-\frac{2}{r^2}f\right]$$

$$[\nabla\cos\theta f(r)]\cdot\nabla\psi^{(0)}=\cos\theta\frac{df}{dr}\frac{d\psi^{(0)}}{dr}$$

$$=-\frac{1}{a_0}\cos\theta\frac{df}{dr}\psi^{(0)}$$

由式(5)可得 $f(r)$ 满足的方程为

$$\frac{1}{2r}\frac{d^2}{dr^2}(rf)-\frac{1}{a_0}\frac{df}{dr}-\frac{f}{r^2}=\frac{\mathscr{E}}{ea_0}r \tag{7}$$

边界条件为 $r\to 0$ 处，$f(r)\longrightarrow 0$.

用级数解法或试探法，不难求出式(7)的解为

$$f(r)=-\frac{\mathscr{E}}{e}a_0^2\left[\frac{r}{a_0}+\frac{1}{2}\left(\frac{r}{a_0}\right)^2\right] \tag{8}$$

因此

$$\boxed{\psi^{(1)}=-\frac{\mathscr{E}}{e}a_0^2\left[\frac{r}{a_0}+\frac{1}{2}\left(\frac{r}{a_0}\right)^2\right]\psi^{(0)}\cos\theta} \tag{9}$$

按照微扰论公式，能级的二级修正(参看题8.1)为

$$E^{(2)}=\langle\psi^{(0)}|H'|\psi^{(1)}\rangle \tag{10}$$

以式(3)、(9)代入上式，即得

$$E^{(2)}=-e\mathscr{E}\langle\psi^{(0)}|z^2f(r)/r|\psi^{(0)}\rangle$$

$$=-\frac{1}{3}e\mathscr{E}\langle\psi^{(0)}|rf(r)|\psi^{(0)}\rangle$$

$$=-\frac{1}{3}\mathscr{E}^2a_0^3\langle\psi^{(0)}|\left(\frac{r}{a_0}\right)^2+\frac{1}{2}\left(\frac{r}{a_0}\right)^3|\psi^{(0)}\rangle \tag{11}$$

利用 $\psi^{(0)}$ 的具体表示式(1)，容易算出

$$\langle\psi^{(0)}|\left(\frac{r}{a_0}\right)^2|\psi^{(0)}\rangle=3$$

$$\langle\psi^{(0)}|\left(\frac{r}{a_0}\right)^3|\psi^{(0)}\rangle=\frac{15}{2}$$

因此

$$\boxed{E^{(2)}=-\frac{9}{4}\mathscr{E}^2a_0^3} \tag{12}$$

此即外电场引起的基态能级移动，它和 $\mathscr{E}^2$ 成正比.

电偶极矩算符为 $\boldsymbol{D}=-e\boldsymbol{r}$，其平均值为

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{D}\rangle &= -e\langle\psi|\boldsymbol{r}|\psi\rangle \\ &= -e\langle\psi^{(0)}+\psi^{(1)}|\boldsymbol{r}|\psi^{(0)}+\psi^{(1)}\rangle \end{aligned} \tag{13}$$

根据 $\psi^{(0)}$ 和 $\psi^{(1)}$ 的对称性，易得

$$\langle D_x\rangle=0, \qquad \langle D_y\rangle=0$$

$$\langle D_z\rangle=-2e\langle\psi^{(0)}|z|\psi^{(1)}\rangle=-\frac{2}{\mathscr{E}}E^{(2)}$$

$$=\frac{9}{2}\mathscr{E}a_0^3 \tag{14}$$

原子的极化系数 α 由下式确定：

$$\langle D_z\rangle=\alpha\mathscr{E}, \qquad \text{或} \qquad E^{(2)}=-\frac{1}{2}\alpha\mathscr{E}^2 \tag{15}$$

由此容易求得

$$\alpha=9a_0^3/2. \tag{16}$$

8.21 求氦原子的基态磁化率.

解 处于基态的氦原子，两个电子自旋反平行，总自旋为0，因此基态能级没有超精细结构. 又因为电子的轨道角动量也为0，故外磁场(沿 z 方向)$\boldsymbol{B}$ 引起的磁作用能量为[①]

$$H'=\frac{e^2B^2}{8m_ec^2}(x_1^2+y_1^2+x_2^2+y_2^2) \tag{1}$$

下标1，2表示该量属于电子1，2. 如取基态波函数为[②]

$$\psi_0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=\psi_0(r_1)\psi_0(r_2)$$

其中

$$\psi_0(r)=\left(\frac{\lambda^3}{\pi a_0^3}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-\lambda r/a_0}, \qquad a_0=\hbar^2/m_ee^2 \tag{2}$$

容易求得

---

① 参看曾谨言，《量子力学》卷 I (科学出版社，1997)，§ 7.2.

② 参看曾谨言，《量子力学》卷 I (科学出版社，1997)，§ 13.1.

$$\langle x_1^2\rangle = \frac{1}{3}\langle r_1^2\rangle = \frac{1}{3}\int \psi_0^2(r) r^2 \mathrm{d}\tau = \left(\frac{a_0}{\lambda}\right)^2 \tag{3}$$

基态能级的一级微扰修正为

$$E^{(1)} = \langle H'\rangle = \frac{e^2B^2}{8m_e c^2} 4\langle x_1^2\rangle$$

$$= \frac{1}{2\lambda^2}\frac{e^2B^2}{m_e c^2} a_0^2 = E(B) \tag{4}$$

磁化率为

$$\alpha_\beta = -\frac{\partial^2 E(B)}{\partial B^2} = -\frac{1}{\lambda^2}\frac{e^2 a_0^2}{m_e c^2}$$

$$= -\frac{4}{\lambda^2}\left(\frac{\hbar c}{e^2}\right)^2 \frac{(\mu_B)^2}{m_e c^2} \tag{5}$$

$\alpha_B < 0$为抗磁性. 上式中

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c} = 5.79\times 10^{-9}\ \mathrm{eV/Gs}$$

$$m_e c^2 = 5.11\times 10^5\ \mathrm{eV}, \qquad \hbar c/e^2 = 137$$

因此

$$\alpha_B = -\frac{1}{\lambda^2} 4.93\times 10^{-18}\ \mathrm{eV/(Gs)^2} \tag{5'}$$

如取 $\lambda = Z = 2$，则得 $\alpha_B = -1.23\times 10^{-18}\ \mathrm{eV/(Gs)}$，如取 $\lambda = Z - 5/16 = 27/16$(变分法最佳值)，则得

$$\alpha_B = -1.73\times 10^{-18}\ \mathrm{eV/(Gs)^2}$$

8.22 对于类氢离子的第二个能级($n=2$，忽略自旋和相对论效应)，讨论在微扰 H' 作用下造成的能级分裂. 设

$$H' = xyf(r) \tag{1}$$

$f(r)$有良好的积分收敛性，无其他特殊要求.

解 在微扰作用前，能级 $E_2^{(0)}$是四重简并的，相应状态为

$$\psi_{200} = R_{20}(r)Y_{00}, \qquad \psi_{211} = R_{21}(r)Y_{11}$$
$$\psi_{210} = R_{21}(r)Y_{10}, \qquad \psi_{21-1} = R_{21}(r)Y_{1-1} \tag{2}$$

其中

$$
\begin{aligned}
Y_{00}&=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\\
Y_{10}&=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{z}{r}\\
Y_{11}&=-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{i\varphi}=-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{x+iy}{r}\\
Y_{1,-1}&=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{-i\varphi}=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{x-iy}{r}
\end{aligned}
\tag{3}
$$

由波函数和 H' 的对称性容易看出，在这四个简并态构成的子空间中，微扰 H' 的不等于0的矩阵元只有 $H'_{211,21-1}$ 和 $H'_{21\ -1,211}$，经过简单的计算，可得

$$
H'_{211,21-1}=iA,\qquad H'_{21\ -1,211}=-iA \tag{4}
$$

其中

$$
A=\frac{1}{5}\int_0^\infty (R_{21})^2 f(r) r^4 dr. \quad (\text{实数}) \tag{5}
$$

在这子空间中，在一级微扰近似下，ψ_{200} 并不和其他态发生耦合，能级也不变．ψ_{210} 也是这样．ψ_{211} 和 ψ_{21-1} 则将发生耦合，与此相应，能级发生分裂．

在 $\{\psi_{211},\psi_{21-1}\}$ 子空间中，H' 的矩阵表示为

$$
H'=\begin{bmatrix} 0 & iA \\ -iA & 0 \end{bmatrix} \tag{6}
$$

按照题8.2讨论过的第**2°**种情形，即得能级修正和相应的零级波函数为

$$
\begin{aligned}
E_2^{(1)}&=A,\quad \psi^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{211}-i\psi_{21\ -1})\\
E_2^{(1)}&=-A,\psi^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{211}+i\psi_{21\ -1})
\end{aligned}
\tag{7}
$$

结论：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

$$
E_2^{(0)}\longrightarrow E_2^{(0)},\qquad E_2^{(0)}\pm A
$$

前一条仍为二重简并(相应于 ψ_{200} 及 ψ_{210}),后二条不简并.

8.23 将类氢离子(核电荷 Ze)放在电场 $\mathscr{E}$(沿 z 方向)中,求第三条能级($n=3$,不考虑自旋和相对论效应)的 Slark 分裂.

解 加电场前,能级 $E_3^{(0)}$ 共对应9个状态,量子数(nlm)的取值分别为

(300);(311),(310),(31−1);(322),(321),(320),(32−1),(32−2)

视外电场为微扰,微扰作用势为

$$H'=e\mathscr{E}\cdot\boldsymbol{r}=e\mathscr{E}z=e\mathscr{E}r\cos\theta \tag{1}$$

零级波函数 ψ_{nlm} 的函数形式为

$$\psi_{nlm}=R_{nl}(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$$

由于 H' 和 l_z 对易,H' 作用于 ψ_{nlm} 的结果,磁量子数 m 不变.又因为

$$\cos\theta\mathrm{Y}_{lm}=a_{lm}\mathrm{Y}_{l+1m}+a_{l-1m}\mathrm{Y}_{l-1m} \tag{2}$$

$$a_{lm}=\left[\frac{(l+1)^2-m^2}{(2l+1)(2l+3)}\right]^{\frac{1}{2}}$$

H' 作用于 ψ_{nlm} 的结果,量子数 l 将改变±1.因此,在这9个简并态之间,在一级微扰作用下能够发生耦合的状态有下列各组:

(300)-(310)-(320),(311)-(321),(31−1)-(32−1)

至于(322)态和(32−2)态,与之有关的 H' 矩阵元均为0,在一级微扰作用下,这两个态并不和其他态发生耦合,即 ψ_{322}、ψ_{32-2} 都是正确的(稳定的)零级波函数,能级的一级微扰修正等于0.以下三种耦合均将导致能级分裂.

1° (300)-(310)-(320),零级波函数为

$$\psi^{(0)}=C_0\psi_{300}+C_1\psi_{310}+C_2\psi_{320} \tag{3}$$

由于

$$\langle\mathrm{Y}_{10}|\cos\theta|\mathrm{Y}_{00}\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}},\qquad\langle\mathrm{Y}_{20}|\cos\theta|\mathrm{Y}_{10}\rangle=-\frac{2}{\sqrt{15}}$$

如令

$$\frac{1}{\sqrt{3}}\int_0^\infty R_{31}R_{30}r^3\mathrm{d}r = A, \qquad \frac{2}{\sqrt{15}}\int_0^\infty R_{32}R_{31}r^3\mathrm{d}r = B$$

就有

$$H'_{310,300}=e\mathscr{E}A, \qquad H'_{320,310}=e\mathscr{E}B$$

在$\{\psi_{300},\psi_{310},\psi_{320}\}$子空间中，$H'$的矩阵表示为

$$H'=e\mathscr{E}\begin{bmatrix}0 & A & 0\\ A & 0 & B\\ 0 & B & 0\end{bmatrix} \tag{4}$$

$\psi^{(0)}$应满足本征方程

$$H'\psi^{(0)}=E^{(1)}\psi^{(0)} \tag{5}$$

即

$$e\mathscr{E}\begin{bmatrix}0 & A & 0\\ A & 0 & B\\ 0 & B & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}C_0\\ C_1\\ C_2\end{bmatrix}=E^{(1)}\begin{bmatrix}C_0\\ C_1\\ C_2\end{bmatrix} \tag{5'}$$

$E^{(1)}$由下式决定：

$$\det(H'-E^{(1)})=\begin{vmatrix}-E^{(1)} & e\mathscr{E}A & 0\\ e\mathscr{E}A & -E^{(1)} & e\mathscr{E}B\\ 0 & e\mathscr{E}B & -E^{(1)}\end{vmatrix}=0 \tag{6}$$

其解为

$$E^{(1)}=0, \qquad \pm e\mathscr{E}\sqrt{A^2+B^2} \tag{7}$$

再代入式(5')，就可求出C_0、C_1、C_2，即求出$\psi^{(0)}$. 结果为

$$\begin{aligned}&E^{(1)}=0\\ &\psi^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{A^2+B^2}}(B\psi_{300}-A\psi_{320})\\ &E^{(1)}=\pm e\mathscr{E}\sqrt{A^2+B^2}\\ &\psi^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{2(A^2+B^2)}}(A\psi_{300}\pm\sqrt{A^2+B^2}\psi_{310}+B\psi_{320})\end{aligned} \tag{8}$$

2° (311)-(321)，零级波函数为

$$\psi^{(0)}=C_1\psi_{311}+C_2\psi_{321}$$

容易算出

$$\langle Y_{21}|\cos\theta|Y_{11}\rangle=\frac{1}{\sqrt{5}}$$

$$H'_{321,311}=\frac{\sqrt{3}}{2}e\mathscr{E}B$$

在$\{\psi_{311},\psi_{321}\}$子空间中，$H'$的矩阵表示为

$$H'=\frac{\sqrt{3}}{2}e\mathscr{E}B\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix} \tag{9}$$

按照题8.2讨论的第2°种情形，即可得到能级修正和零级波函数为

$$E^{(1)}=\pm\frac{\sqrt{3}}{2}e\mathscr{E}B$$

$$\psi^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{311}\pm\psi_{321}) \tag{10}$$

3° (31−1)-(32−1)，类似的计算给出

$$H'_{32\text{-}1,31\text{-}1}=\frac{\sqrt{3}}{2}e\mathscr{E}B$$

$$E^{(1)}=\pm\frac{\sqrt{3}}{2}e\mathscr{E}B \tag{11}$$

$$\psi^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{31\text{-}1}\pm\psi_{32\text{-}1})$$

数值A、B可以利用径向波函数的具体函数形式[1]算出．如令$\xi=2Zr/3a_0(a_0=\hbar^2/m_e e^2$，为 Bohr 半径)，则

$$R_{30}=\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{2\sqrt{3}}{9}\left(1-\xi+\frac{1}{6}\xi^2\right)e^{-\xi/2}$$

$$R_{31}=\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{2\sqrt{6}}{27}\left(\xi-\frac{1}{4}\xi^2\right)e^{-\xi/2}$$

$$R_{32}=\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{\sqrt{30}}{270}\xi^2e^{-\xi/2}$$

$$r^3dr=\left(\frac{a_0}{Z}\right)^4\frac{81}{16}\xi^4d\xi$$

---

[1] 参看曾谨言，《量子力学》卷1（科学出版社，1997），§6.3.

$$\int_0^\infty R_{31}R_{30}r^3\mathrm{d}r = -9\sqrt{2}\,\frac{a_0}{Z}$$

$$\int_0^\infty R_{32}R_{31}r^3\mathrm{d}r = -\frac{9}{2}\sqrt{5}\,\frac{a_0}{Z}$$

因此

$$A=-3\sqrt{6}\,\frac{a_0}{Z}$$

$$B=-3\sqrt{3}\,\frac{a_0}{Z}=A/\sqrt{2}$$

$$\sqrt{A^2+B^2}=9a_0/Z \tag{12}$$

由式(7)、(10)、(11)可知，$E_3^{(0)}$共分裂成5个等距离的能级，

$$\Delta E=E^{(1)}=0,\quad \pm e\mathscr{E}\sqrt{A^2+B^2},\quad \pm\frac{\sqrt{3}}{2}e\mathscr{E}B$$

$$=0,\quad \pm 9e\mathscr{E}a_0/Z,\quad \mp\frac{9}{2}e\mathscr{E}a_0/Z \tag{13}$$

如图8.23所示.

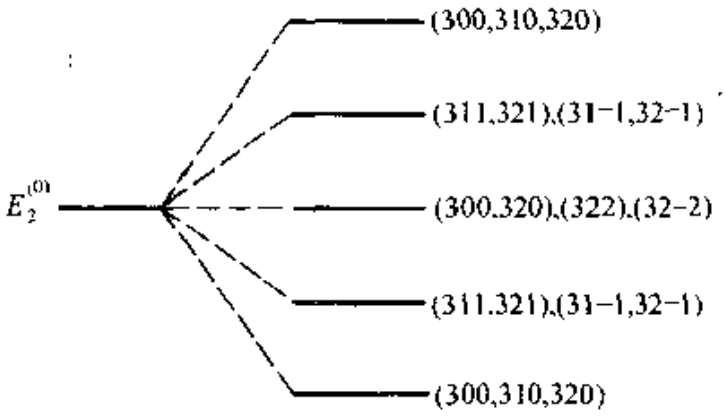


图 8.23

8.24 一个氢原子处于某种离子点阵中，周围离子对氢原子中电子的作用势可以近似表示为

$$H'=V_0\left\{x^4+y^4+z^4-\frac{3}{5}r^4\right\} \tag{1}$$

H' 可以视为微扰. 如氢原子的3d 态波函数(正交归一的)取为

$$\begin{aligned}
\psi_1 &= \frac{1}{2}(y^2-z^2)f(r)\\
\psi_2 &= \frac{1}{2\sqrt{3}}(2x^2-y^2-z^2)f(r)\\
\psi_3 &= yzf(r)\\
\psi_4 &= zxf(r)\\
\psi_5 &= xyf(r)
\end{aligned} \tag{2}$$

设分析在 H' 作用下3d 能级的分裂以及分裂后各能级的简并度.

解 由各波函数在直角坐标系中的奇偶性容易看出

$$H'_{31}=0,\quad H'_{32}=0,\quad H'_{34}=0,\quad H'_{35}=0 \tag{3}$$

因此,在一级微扰作用下,ψ_3态不会和其它各态发生耦合,即 ψ_3是正确的(稳定的)零级波函数,能级的一级微扰修正等于 H' 的平均值 H'_{33}. ψ_4和 ψ_5也有同样的结论,而且显然有

$$H'_{33}=H'_{44}=H'_{55} \tag{4}$$

因此,微扰作用后,ψ_3、ψ_4、ψ_5仍是独立的定态,属于同一个能级.

对于 ψ_1和 ψ_2,有三种 H' 矩阵元,即 H'_{11}、H'_{22}、H'_{12},其中

$$H'_{12}=\iiint f^2(r)H'\frac{1}{4\sqrt{3}}(z^4-y^4+2x^2y^2-2x^2z^2)\mathrm{d}\tau=0 \tag{5}$$

(其中 z^4项和 y^4项贡献相同,互相抵消;x^2y^2项和 x^2z^2项贡献相同,互相抵消.)

$$H'_{11}=\frac{1}{4}\iiint f^2(r)H'(y^4+z^4-2y^2z^2)\mathrm{d}\tau$$

$$H'_{22}=\frac{1}{12}\iiint f^2(r)H'(4x^4+y^4+z^4+2y^2z^2-4x^2y^2-4x^2z^2)\mathrm{d}\tau$$

其中 x^4项、y^4项、z^4项贡献相等;x^2y^2项、y^2z^2项、z^2x^2项贡献相等;因此 $H'_{11}=H'_{22}$. 这样 ψ_1和 ψ_2仍是微扰作用后独立的定态,属于同

一个能级.

结论：在微扰作用下，3d 能级分裂为二，即

$$E_{3d}^{(0)} \longrightarrow E_{3d}^{(0)}+H'_{11} \qquad E_{3d}^{(0)}+H'_{33} \tag{6}$$

前者为二重简并，对应于 ψ_1 和 ψ_2；后者为三重简并，对应于 ψ_3、ψ_4、ψ_5. 所有这5个状态，在一级微扰下，彼此不发生耦合，都仍是定态.

8.25 氢原子的 $n=2$ 能级的精细结构(计及相对论自旋效应，但忽略 Lamb 移位)如图8.25所示，其中

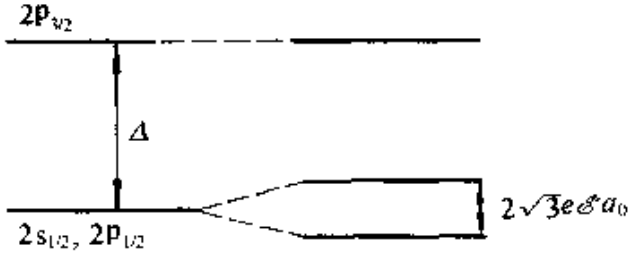


图 8.25

$$\Delta = E(2p_{3/2}) - E(2p_{1/2})$$
$$= \frac{1}{32}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^4 m_e c^2 = 4.5\times10^{-5}\ \text{eV}$$

现将氢原子置于弱电场 $\mathscr{E}$ 中，求这组能级的分裂(一级近似). 解释"弱"电场的含义是什么?

解 以电场 $\mathscr{E}$ 的方向为 z 轴，电场对电子的作用能为

$$H' = e\boldsymbol{r}\cdot\mathscr{E} = e\mathscr{E}z = e\mathscr{E}r\cos\theta \tag{1}$$

引起的能级变化约为 $\Delta E \sim e\mathscr{E}a_0$ (a_0 为 Bohr 半径)，如 $\Delta E \ll \Delta$，即 $e\mathscr{E}a_0 \ll 4.5\times10^{-5}$ eV，就可以认为是"弱"电场，条件为

$$\mathscr{E} \ll 4.5\times10^{-5}\ \text{eV}/ea_0 \sim 8.5\times10^{3}\ \text{V/cm} \tag{2}$$

以下将视 H' 为微扰.

氢原子的(能量，$\boldsymbol{l}^2$，$\boldsymbol{J}^2$，J_z)共同本征态可以表示成

$$\psi_{nlj m_j} = R_{nl}(r)\phi_{ljm_j}(\theta,\varphi,s_z) \tag{3}$$

本题涉及的各能级，量子数取值如下：

$2s_{1/2}$——$n=2$，　　$l=0$，　　$j=\frac{1}{2}$，　　$m_j=\pm\frac{1}{2}$

$2p_{1/2}$——$n=2$，　　$l=1$，　　$j=\frac{1}{2}$，　　$m_j=\pm\frac{1}{2}$

$2p_{3/2}$——$n=2$，　　$l=1$，　　$j=\frac{3}{2}$，　　$m_j=\pm\frac{1}{2},\pm\frac{3}{2}$

微扰算符 H' 和 J_z 对易，因此 H' 的作用不会改变 m_j 值，在 m_j 不同的状态之间，H' 的矩阵元为0. H' 为奇宇称，因此在任何 ψ_{nljm_j} 态下 H' 的平均值为0.

能级 $2p_{3/2}$ 共对应四种状态，它们的 m_j 值互不相同，因此在 $2p_{3/2}$ 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.

微扰作用前，能级 $2s_{1/2}$ 和 $2p_{1/2}$ 重合，它们各对应两个状态，共有四个简并态. 其中 s 态和 p 态各有一个 $m_j=1/2$ 态，它们在一级微扰作用下将发生耦合，产生电偶极矩，从而导致能级分裂. 两个 $m_j=-1/2$ 态，也产生同样的结果. 以 $m_j=1/2$ 为例作具体计算. 有关波函数为

$$\psi_{20\frac{1}{2}\frac{1}{2}}=R_{20}(r)Y_{00}\alpha$$

$$\psi_{21\frac{1}{2}\frac{1}{2}}=R_{21}(r)\left[\frac{1}{\sqrt{3}}Y_{10}\alpha+\sqrt{\frac{2}{3}}Y_{11}\beta\right] \tag{4}$$

其中 α、β 为 σ_z 的本征态，分别属于本征值1和−1. 在 σ_z 表象中，

$$\alpha=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix},\qquad \beta=\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$$

利用 R_{20}、R_{21} 的具体函数形式，容易算出

$$\langle\psi_{20\frac{1}{2}\frac{1}{2}}|H'|\psi_{21\frac{1}{2}\frac{1}{2}}\rangle$$

$$=-eE\int Y_{00}Y_{10}\frac{1}{\sqrt{3}}\cos\theta d\Omega\int_0^\infty R_{20}R_{21}r^3dr$$

$$=-\frac{1}{3}(-3\sqrt{3})eEa_0=\sqrt{3}eEa_0 \tag{5}$$

因此，在 $\{\psi_{20\frac{1}{2}\frac{1}{2}},\psi_{21\frac{1}{2}\frac{1}{2}}\}$ 子空间中，H' 的矩阵表示为

$$H'=\sqrt{3}\,e\mathscr{E}a_0\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix} \tag{6}$$

由此导致能级的一级微扰修正和零级波函数为(参看图8.2)

$$\boxed{E^{(1)}=\pm\sqrt{3}\,e\mathscr{E}a_0} \tag{7}$$

$$\psi^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{20\frac{1}{2}\frac{1}{2}}\pm\psi_{21\frac{1}{2}\frac{1}{2}})$$

两个 $m_j=-1/2$态也产生类似的耦合,并导致相同的能级分裂.能级分裂的示意图如图8.25所示.

8.26 有一种简化的"一维氢原子"模型,原子核-电子以及电子-电子间的作用势均用 δ 势阱(垒)表示,总能量算符取为

$$H=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right)$$
$$-Ze^2[\delta(x_1)+\delta(x_2)]+e^2\delta(x_1-x_2) \tag{1}$$

其中 x_1、x_2表示电子1和2的坐标,Ze 是原子核电荷.如采用自然单位,即距离以 a_0/Z 为单位(a_0是 Bohr 半径),能量以 Z^2e^2/a_0为单位,则 H 可以简化成

$$H=-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right)-\delta(x_1)$$
$$-\delta(x_2)+\frac{1}{Z}\delta(x_1-x_2) \tag{2}$$

如视电子-电子作用势(上式中最后一项)为微扰,试求体系的能级(一级近似),并和三维氦原子的微扰论结果比较.

解 将式(2)写成

$$H=H_0(1)+H_0(2)+H' \tag{2'}$$

其中

$$H_0(i)=-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}-\delta(x_i),\qquad i=1,2 \tag{3}$$

$$H'=\frac{1}{Z}\delta(x_1-x_2) \tag{4}$$

$H_0(i)$的本征函数和本征值见题2.1,它们是

$$\psi(x_i)=e^{-|x_i|},\qquad E(i)=-\frac{1}{2} \tag{5}$$

(相当于题2.1中 $m=\hbar=V_0=1,k=1$). 因此，作为微扰论的零级近似波函数，应取

$$\psi^{(0)}(x_1,x_2)=e^{-|x_1|}e^{-|x_2|} \tag{6}$$

体系能量的零级近似为

$$E^{(0)}=E(1)+E(2)=-1 \tag{7}$$

能级的一级微扰修正为

$$E^{(1)}=\langle\psi^{(0)}|H'|\psi^{(0)}\rangle$$

将式(4)及(6)代入上式，容易算出

$$\begin{aligned}E^{(1)}&=\frac{1}{Z}\iint_{-\infty}^{\infty}dx_1dx_2\delta(x_1-x_2)e^{-2|x_1|-2|x_2|}\\&=\frac{1}{Z}\int_{-\infty}^{\infty}dx_1e^{-4|x_1|}=\frac{1}{2Z}\end{aligned} \tag{8}$$

因此，准确到微扰论一级近似，体系能级为

$$E=E^{(0)}+E^{(1)}=\frac{1}{2Z}-1 \tag{9}$$

换成普通单位，即

$$E=\left(\frac{1}{2Z}-1\right)\frac{Z^2e^2}{a_0}=\left(\frac{Z}{2}-Z^2\right)\frac{e^2}{a_0} \tag{10}$$

如所周知，三维氢原子(核电荷 Ze)基态能级的普通微扰论结果为

$$E_0=\left(\frac{5}{8}Z-Z^2\right)\frac{e^2}{a_0}$$

二者仅相差 $\frac{1}{8}Z\frac{e^2}{a_0}$.

8.27 某分子由三个相同的原子构成，三个原子位于正三角形之顶点，如图8.27所示，分别记为 α、β、γ. 有一个价电子可以在三个原子间流动. 以 H_0 表示此价电子的 Hamilton 量，以 $|\alpha\rangle$、$|\beta\rangle$、$|\gamma\rangle$ 表示电子的原子轨道(分别属于原子 α,β,γ)，设电子的原子能级为

$$\langle\alpha|H_0|\alpha\rangle=\langle\beta|H_0|\beta\rangle=\langle\gamma|H_0|\gamma\rangle=E_0 \tag{1}$$

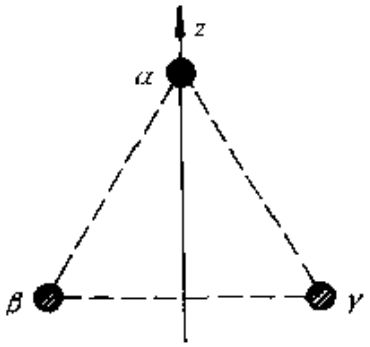


图 8.27

在任何两个原子之间，H_0的矩阵元为

$$\langle\alpha|H_0|\beta\rangle=\langle\beta|H_0|r\rangle=\langle r|H_0|\alpha\rangle=-a,\qquad a>0 \tag{2}$$

设$|\alpha\rangle$、$|\beta\rangle$、$|r\rangle$互相正交，而且是归一化的。

(a) 计算能级分裂，即求分子能级；

(b) 沿 z 方向加均匀弱电场，视为微扰，这时(由于微扰的影响)原子 α 处的电子能级下降 b，即由 $E_0\longrightarrow E_0-b$，设 $b\ll a$. 原子 β、r 处的电子能级不变，仍为 E_0. 在任何两个原子之间，微扰矩阵元为0. 求分子能级的变化(一级修正)；

(c) 加电场后，设电子处于基态. 如突然将电场旋转$\frac{2\pi}{3}$(指向原子 β)，求电子仍然处于基态的概率.

解 (a) 电子的分子轨道波函数可以表示成

$$|\psi\rangle=C_\alpha|\alpha\rangle+C_\beta|\beta\rangle+C_r|r\rangle \tag{3}$$

满足能量本征方程

$$H_0|\psi\rangle=E|\psi\rangle \tag{4}$$

在以$|\alpha\rangle$、$|\beta\rangle$、$|r\rangle$为基矢的态空间中，H_0的矩阵表示为

$$H_0=\begin{bmatrix} E_0 & -a & -a \\ -a & E_0 & -a \\ -a & -a & E_0 \end{bmatrix} \tag{5}$$

本征方程(4)的矩阵表示为

$$(E-H_1)\psi=\begin{bmatrix}E & E & a & a\\ -a & E-E_1 & a & \\ a & a & E & E_0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}C_\alpha\\ C_\beta\\ C_\gamma\end{bmatrix}$$

$$=0 \tag{1'}$$

能级 E 由下式决定：

$$\det(E-H_1)=0$$

即

$$\begin{vmatrix}E-E_0 & a & a\\ a & E-E_1 & a\\ a & a & E-E_0\end{vmatrix}=0 \tag{6}$$

解为

$$E=E_0-2a,\qquad E_0+a,\qquad E_0+a \tag{7}$$

此即分子能级.

(b) 加电场后，以 H' 表示微扰算符. 按照题意，H' 的矩阵元中仅 $\langle\alpha|H'|\alpha\rangle=-b$，其余均为0，因此总能量算符的矩阵表示变成

$$H=H_0+H'=\begin{bmatrix}E_0-b & -a & -a\\ -a & E_0 & -a\\ -a & -a & E_0\end{bmatrix} \tag{8}$$

如 H 的本征态仍用式(3)表示，则本征方程为

$$(E-H)\psi=\begin{bmatrix}E-E_0+b & a & a\\ a & E-E_0 & a\\ a & a & E & E_0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}C_\alpha\\ C_\beta\\ C_\gamma\end{bmatrix}$$

$$=0 \tag{9}$$

能级方程为

$$\det(E-H)=0$$

即

$$\begin{vmatrix}E-E_0+b & a & a\\ a & E-E_0 & a\\ a & a & E-E_0\end{vmatrix}=0 \tag{10}$$

解为

$$E=E_0+a,\qquad E_0-\frac{a+b}{2}\pm\frac{1}{2}\sqrt{9a^2-2ab+b^2}\tag{11}$$

利用条件 $b\ll a$，对上式作近似展开，可得

$$E=E_0+a,\qquad E_0+a-\frac{2}{3}b,\qquad E_0-2a-\frac{1}{3}b\tag{12}$$

其中后者为基态能级，比加电场前下降 $b/3$. 原来的简并能级 (E_0+a) 在电场作用下已经分裂成两条.

(c) 加电场前，基态能级为 (E_0-2a)，由式(4′)容易求得

$$C_\alpha=C_\beta=C_\gamma$$

即基态波函数为

$$|\psi\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}(|\alpha\rangle+|\beta\rangle+|\gamma\rangle)\tag{13}$$

对于三个原子完全对称.

加电场后，对称性遭到一定程度的破坏，因 $|\alpha\rangle$ 态能量降低，其成分应有所增加. 以微扰后的基态能级

$$\left(E_0-2a-\frac{b}{3}\right)$$

代入式(9)，即得

$$\begin{aligned}&\left(\frac{2b}{3a}-2\right)C_\alpha+C_\beta+C_\gamma=0\\&-\left(2+\frac{b}{3a}\right)C_\beta+C_\alpha+C_\gamma=0\\&-\left(2+\frac{b}{3a}\right)C_\gamma+C_\alpha+C_\beta=0\end{aligned}\tag{14}$$

由后二式可见 $C_\beta=C_\gamma$，代入第一式即得

$$C_\beta=C_\gamma=\left(1-\frac{b}{3a}\right)C_\alpha\tag{15}$$

再利用归一化条件

$$\langle\psi|\psi\rangle=C_\alpha^2+C_\beta^2+C_\gamma^2=1$$

即得

$$C_\alpha=\frac{1}{\sqrt{3}}\left(1+\frac{2b}{9a}\right) \tag{16}$$

$$C_\beta=C_\gamma=-\frac{1}{\sqrt{3}}\left(1-\frac{b}{9a}\right) \tag{16'}$$

(略去 b^2/a^2 项). $|\alpha\rangle$ 态成分 C_α^2 略高于1/3

电场旋转2π/3(转向原子 β)后,新的基态应为

$$|\psi'\rangle=C_\alpha|\alpha\rangle+C_\beta|\beta\rangle+C_\gamma|\gamma\rangle \tag{17}$$

其中

$$C'_\beta=C_\alpha \qquad C'_\gamma=C'_\alpha=C_\beta$$

新、旧基态波函数的标积为

$$\begin{aligned}\langle\psi'|\psi\rangle&=C'_\alpha C_\alpha+C'_\beta C_\beta+C'_\gamma C_\gamma\\&=2C_\alpha C_\beta+C_\beta^2\end{aligned}$$

电场突然旋转时,电子波函数仍为 ψ,则处于新的基态 ψ' 的概率为

$$|\langle\psi'|\psi\rangle|^2=(2C_\alpha C_\beta+C_\beta^2)^2=1-O(b^2/a^2) \tag{18}$$

8.28 某量子力学体系,能量算符 H_0 的本征值和正交归一化本征函数为

$$E_1\text{——}\psi_1, \qquad E_2\text{——}(\psi_2,\psi_3)$$

设此体系受到微扰作用,在 H_0 表象中微扰算符的矩阵表示为

$$H'=\begin{bmatrix}0 & b & c\\ b & -a & 0\\ c & 0 & a\end{bmatrix} \tag{1}$$

试求微扰作用后体系的能级(三级近似).

解 能级 E_1 是非简并的,其微扰修正可以按标准公式立即写出. 能级 E_2 是简并的,应按简并态微扰论处理. 鉴于本题只有三个能级,便于用矩阵对角化方法直接求解. 总能量算符为(H_0 表象)

$$H=H_0+H'=\begin{bmatrix}E_1 & b & c\\ b & E_2-a & 0\\ c & 0 & E_2+a\end{bmatrix} \tag{2}$$

能级方程为

$$\det(H-E)=\begin{vmatrix} E_1-E & b & c \\ b & E_2-a-E & 0 \\ c & 0 & E_2+a-E \end{vmatrix}=0 \quad (3)$$

即

$$(E-E_1)(E-E_2+a)(E-E_2-a)$$
$$-(E-E_2+a)c^2-(E-E_2-a)b^2=0 \quad (3')$$

其中 E 为待定的体系能级，E_1 和 E_2 为零级能量，a,b,c 为一级小量

1° 一级近似

如略去式(3)中二级以上(含二级，下同)小量，即得

$$(E-E_1)(E-E_2+a)(E-E_2-a)=0$$

解为

$$E=E_1, \qquad E_2-a, \qquad E_2+a \quad (4)$$

这个结果可以从 H 的矩阵表示式(2)直接看出.

2° 能级 E_1 的二级修正和三级修正.

令 $E=E_1+\Delta$，代入式(3)，得到

$$\Delta(E_1-E_2+a+\Delta)(E_1-E_2-a+\Delta)$$
$$=(E_1-E_2+a+\Delta)c^2$$
$$+(E_1-E_2-a+\Delta)b^2$$

Δ 中包含二级和三级小量. 上式中略去四级以上小量，即得

$$(E_1-E_2)^2\Delta=(E_1-E_2)(c^2+b^2)$$
$$+a(c^2-b^2)$$

即

$$\Delta=\frac{c^2+b^2}{E_1-E_2}+\frac{a(c^2-b^2)}{(E_1-E_2)^2} \quad (5)$$

其中第一项为二级修正，第二项为三级修正. 上式也可以直接套用非简并态微扰论公式(参看题8.1)而得出.

3° 能级 E_2 的二级修正和三级修正.

计及一级修正后，E_2 已经分裂为二，即 $E_2\pm a$，下面分别计算其二级和三级修正.

(i) $E=E_2+a+\Delta$，代入式(3)，得到

$$(E_2-E_1+a+\Delta)(2a+\Delta)\Delta=(2a+\Delta)c^2+b^2\Delta$$

Δ 中包含二级和三级小量．上式中保留最低的两个量级，即三级和四级，而略去五级以上小量，即得

$$2a(E_2-E_1)\Delta-2ac^2=(c^2+b^2-2a^2)\Delta-(E_2-E_1)\Delta^2 \tag{6}$$

作为二级修正，只需保留 Δ 中二级项，这时上式右端全为四级项，可以略去，故得

$$\Delta\approx c^2/(E_2-E_1) \tag{7}$$

此即能级的二级修正．在三级近似中，可将式(7)代入式(6)右端，即保留式(6)中四级项，得到

$$\Delta=\frac{c^2}{E_2-E_1}+\frac{\frac{b^2c^2}{2a}-ac^2}{(E_2-E_1)^2} \tag{8}$$

(ii) $E=E_2-a+\Delta$，完全类似的计算可得

$$\Delta=\frac{b^2}{E_2-E_1}+\frac{ab^2-\frac{b^2c^2}{2a}}{(E_2-E_1)^2} \tag{9}$$

综合式(5)、(8)、(9)，可得体系的全部能级(三级近似)为

$$\begin{aligned}E=&E_1+\frac{c^2+b^2}{E_1-E_2}+\frac{a(c^2-b^2)}{(E_1-E_2)^2}\\&E_2+a+\frac{c^2}{E_2-E_1}+\frac{\frac{b^2c^2}{2a}-ac^2}{(E_2-E_1)^2}\\&E_2-a+\frac{b^2}{E_2-E_1}+\frac{ab^2-\frac{b^2c^2}{2a}}{(E_2-E_1)^2}\end{aligned} \tag{10}$$

三个能量的总和为 (E_1+2E_2)，和微扰前相同．三条能级的一级修正总和，二级修正总和，三级修正总和均为0．其根源在于 H' 的迹为0，H_0 和 H 的迹相等．

8.29 有一个量子力学体系，Hamilton 量记为 H_0，能级和正

交归一化的本征函数为

$$E_1^{(0)}\longrightarrow\psi_\alpha,\psi_\beta;\qquad E_2^{(0)}\longrightarrow\psi_\gamma,\psi_\delta$$

设体系受到微扰作用，微扰后的 Hamilton 量可以表示成下列矩阵形式（H_0表象）：

$$H=H_0+H'=\begin{bmatrix}E_1^{(0)} & a & d & 0\\ a & E_1^{(0)} & b & 0\\ d & b & E_2^{(0)} & c\\ 0 & 0 & c & E_2^{(0)}\end{bmatrix}\tag{1}$$

设无偶然简并，试用二级微扰论计算体系能级.

解 （a）一级近似.

在和 $E_1^{(0)}$相应的$\{\psi_\alpha,\psi_\beta\}$子空间中，微扰的矩阵表示为

$$H'=\begin{bmatrix}0 & a\\ a & 0\end{bmatrix}\tag{2}$$

按照题8.2讨论过的第2°种情况，即得能级的一级近似和零级波函数为

$$E=E_1^{(0)}\pm a\qquad\psi^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_\alpha\pm\psi_\beta)\tag{3}$$

在$\{\psi_\gamma,\psi_\delta\}$子空间中，微扰的矩阵表示为

$$H'=\begin{bmatrix}0 & c\\ c & 0\end{bmatrix}\tag{4}$$

能级的一级近似和零级波函数为

$$E=E_2^{(0)}\pm c,\qquad\psi^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_\gamma\pm\psi_\delta)\tag{5}$$

（b）能级的二级修正.

由式(1)可知微扰矩阵元为

$$H'_{\alpha\beta}=a,\qquad H'_{\alpha\gamma}=d,\qquad H'_{\alpha\delta}=0$$

$$H'_{\beta\gamma}=b,\qquad H'_{\beta\delta}=0,\qquad H'_{\gamma\delta}=c$$

$$H'_{\alpha\alpha}=H'_{\beta\beta}=H'_{\gamma\gamma}=H'_{\delta\delta}=0$$

题8.2已经得到能级二级修正公式

$$E_n^{(2)}=\sum_k{}'\frac{1}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}|\langle\psi_k^{(0)}|H'|\psi^{(0)}\rangle|^2 \tag{6}$$

对于本题，即

$$E_1^{(2)}=\frac{1}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}|\langle\psi_r|H'|\psi^{(0)}\rangle|^2$$

$$=\frac{1}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}\frac{1}{2}(d\pm b)^2 \tag{7}$$

$$E_2^{(2)}=\frac{1}{E_2^{(0)}-E_1^{(0)}}[|\langle\psi_\alpha|H'|\psi^{(0)}\rangle|^2+|\langle\psi_\beta|H'|\psi^{(0)}\rangle|^2]$$

$$=\frac{1}{E_2^{(0)}-E_1^{(0)}}\frac{1}{2}(d^2+b^2) \tag{8}$$

综合式(3)、(7)以及式(5)、(8)，即得体系能级公式(二级近似)

$$E=E_1^{(0)}\pm a+\frac{1}{2}\frac{(d\pm b)^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}$$

$$E_2^{(0)}\pm c+\frac{1}{2}\frac{d^2+b^2}{E_2^{(0)}-E_1^{(0)}} \tag{9}$$

8.30 已知体系的能量算符为

$$H=Kl^2+\omega l_z+\lambda l_y, \tag{1}$$

其中 K、$\omega\gg\lambda>0$，$\boldsymbol{l}$ 为轨道角动量算符.

(a) 求体系能级的精确值；

(b) 视 λ 项为微扰，求能级(二级近似，不考虑偶然简并)；

(c) 对于每一个能级，求 l_y、l_z 的平均值. 用精确解法和微扰论(准确到 λ 量级)分别计算，并作比较.

解 (a) 精确解. 令 $\lambda/\omega=\tan\theta$，并在 yz 平面上取方向 $\boldsymbol{n}$，$\boldsymbol{n}$ 和 z 轴夹角 θ. 则

$$\cos\theta=\omega/\sqrt{\omega^2+\lambda^2},\qquad \sin\theta=\lambda/\sqrt{\omega^2+\lambda^2}$$

$$\omega l_z+\lambda l_y=\sqrt{\omega^2+\lambda^2}(l_z\cos\theta+l_y\sin\theta)$$

$$=\sqrt{\omega^2+\lambda^2}\,l_n \tag{2}$$

l_n 为 $\boldsymbol{l}$ 在 $\boldsymbol{n}$ 方向的投影. 总能量算符可以表示成

$$H=Kl^2+\sqrt{\omega^2+\lambda^2}\,l_n \tag{1'}$$

l^2、l_n 可对易，它们的本征值分别为

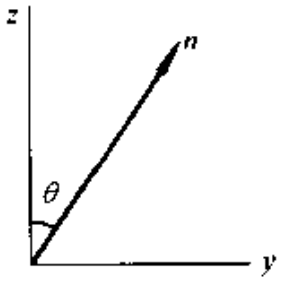


图 8.30

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{l}^2=l(l+1)\hbar^2, && l=0,1,2,\cdots \\ &l_n=m\hbar, && m=0,\pm1,\pm2,\cdots,\pm l \end{aligned} \tag{3}$$

因此，体系能级为

$$E_{lm}=l(l+1)K\hbar^2+m\hbar\sqrt{\omega^2+\lambda^2} \tag{4}$$

如将上式展开成 λ 的幂级数，可得

$$E_{lm}=l(l+1)K\hbar^2+m\omega\hbar\left(1+\frac{\lambda^2}{2\omega^2}+\cdots\right) \tag{4'}$$

(b) 微扰论. 将 H 写成

$$H=H_0+H'$$

$$H_0=K\boldsymbol{l}^2+\omega l_z, \qquad H'=\lambda l_y \tag{5}$$

视 H' 为微扰. H_0 的本征态即 $(\boldsymbol{l}^2,l_z)$ 的共同本征态 $|lm\rangle$，能级的零级近似为

$$E_{lm}^{(0)}=l(l+1)K\hbar^2+m\omega\hbar \tag{6}$$

一级修正为

$$E_{lm}^{(1)}=\langle lm|H'|lm\rangle=\lambda\langle lm|l_y|lm\rangle=0 \tag{7}$$

二级修正为

$$E_{lm}^{(2)}=\lambda^2\sum_{l'm'}{}'\frac{|\langle l'm'|l_y|lm\rangle|^2}{E_{lm}^{(0)}-E_{l'm'}^{(0)}} \tag{8}$$

利用 l_y 的矩阵元公式

$$\begin{aligned} \langle l'm'|l_y|lm\rangle=&\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\,\delta_{ll'}\delta_{m-1,m'} \\ &-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\delta_{ll'}\,\delta_{m+1,m'} \end{aligned} \tag{9}$$

可见对 $E_{lm}^{(2)}$ 有贡献的是 $l'=l, m'=m\pm1$，从而得到

$$E_{lm}^{(2)}=\frac{\lambda^2}{\omega\hbar}\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2[(l+m)(l-m+1)$$
$$-(l-m)(l+m+1)]$$
$$=\frac{1}{2}m\lambda^2\frac{\hbar}{\omega} \tag{10}$$

因此，体系的能级（微扰论二级近似）为

$$E_{lm}\approx E_{lm}^{(0)}+E_{lm}^{(1)}+E_{lm}^{(2)}$$
$$=l(l+1)K\hbar^2+m\omega\hbar+\frac{1}{2}m\lambda^2\frac{\hbar}{\omega} \tag{11}$$

和精确解的级数展开式(4′)完全一致.

(c) 精确解中，对于(l^2, l_z)的共同本征态$|l, l_z=m\hbar\rangle$，l_x 和 l_y 的平均值为

$$\langle l_x\rangle=m\hbar\cos\theta=m\hbar\,\omega/\sqrt{\omega^2+\lambda^2} \tag{12}$$

$$\langle l_y\rangle=m\hbar\sin\theta=m\hbar\,\lambda/\sqrt{\omega^2+\lambda^2} \tag{13}$$

用微扰论方法计算$\langle l_x\rangle$、$\langle l_y\rangle$时，可以利用题8.5建立的公式. 由于

$$H'=\lambda l_y=i\lambda\left[\frac{1}{\omega\hbar}l_x, H_0\right] \tag{14}$$

相当于题8.5中取

$$A=\frac{1}{\omega\hbar}l_x$$

如再取 $B=l_y$，就有

$$C=i[B,A]=\frac{i}{\omega\hbar}[l_y, l_x]=\frac{1}{\omega}l_z$$

在微扰前 H_0 的本征态$|lm\rangle$下，显然有

$$B_0=\langle lm|l_y|lm\rangle=0$$

$$C_0=\frac{1}{\omega}\langle lm|l_z|lm\rangle=m\hbar/\omega$$

因此，对于微扰后的能量本征态（能级 E_{lm}），应有

$$\langle l_y\rangle=B_0+\lambda C_0=m\lambda\hbar/\omega \tag{15}$$

类似地，如改取 $B=l_z$，就有

$$C=\mathrm{i}[B,A]=\frac{\mathrm{i}}{\omega\hbar}[l_z,l_x]=-\frac{1}{\omega}l_y$$

对于微扰前的 H_0 本征态 $|lm\rangle$，有

$$B_0=\langle lm|l_z|lm\rangle=m\hbar$$

$$C_0=-\frac{1}{\omega}\langle lm|l_y|lm\rangle=0$$

因此，对于微扰后的能量本征态(能级 E_{lm})，应有

$$\langle l_z\rangle=B_0+\lambda C_0=m\hbar \tag{16}$$

式(15)、(16)均准确到量级 λ，它们和精确的式(12)、(13)是符合的.

8.31 转动惯量为 I，电偶极矩为 D，可以在 xy 平面内自由转动的平面转子，其能量算符为

$$H_0=l_z^2/2I=-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varphi^2} \tag{1}$$

φ 为旋转角. 如沿 x 方向加上均匀外电场 $\mathscr{E}$，转子将受到作用能

$$H'=-D\cdot\mathscr{E}=-D\mathscr{E}\cos\varphi \tag{2}$$

而总能量算符变成 $H=H_0+H'$.

(a) 写出 H_0 的本征函数，本征值，说明能级的简并度；

(b) 视 H' 为微扰，求能级(二级近似).

解 (a) H_0 是 l_z 的函数，l_z 的本征函数显然就是 H_0 的本征函数，故 H_0 的本征函数、本征值为

$$\psi_m^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi},\quad E_m^{(0)}=m^2\frac{\hbar^2}{2I},\quad m=0,\pm1,\pm2,\cdots \tag{3}$$

除基态($m=0$)外，其他能级都是二重简并的.

(b) 微扰 H' 可以写成

$$H'=-D\mathscr{E}\cos\varphi=-\frac{1}{2}D\mathscr{E}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}) \tag{2'}$$

易见，在 H_0 表象中[以 $\psi_m^{(0)}$ 为基矢]，H' 的矩阵元中不等于0的类型为

$$H'_{m,m\pm1}=\langle\psi_m^{(0)}|H'|\psi_{m+1}^{(0)}\rangle=-\frac{1}{2}D\mathscr{E} \tag{4}$$

除 $m=\pm1$以外，对于任何能级 $E_m^{(0)}$，在二级微扰近似下，不可能发生简并态 $\psi_m^{(0)}$和 $\psi_m^{(0)}$的耦合，亦即

$$H'_{m,-m}=0,\qquad H_{mk}H'_{k,-m}=0,\quad (m\neq\pm1) \tag{5}$$

这正是题8.3讨论过的第1°种情形，即可按非简并态微扰论处理的情形. 因此能级为

$$\begin{aligned}E_m&=E_m^{(0)}+H'_{mm}+\sum_k{}'\frac{|H'_{km}|^2}{E_m^{(0)}-E_k^{(0)}}\\&=E_m^{(0)}+\frac{1}{4}D^2\mathscr{E}^2\left(\frac{1}{E_m^{(0)}-E_{m-1}^{(0)}}+\frac{1}{E_m^{(0)}-E_{m+1}^{(0)}}\right)\\&=E_m^{(0)}+\frac{1}{4m^2-1}ID^2\mathscr{E}^2/\hbar^2.\quad (m\neq\pm1)\end{aligned} \tag{6}$$

注意，和微扰前相比，基态能级有所降低，各激发态能级则略有升高. 能级简并并未消除.

以下着重讨论 $m=\pm1$ 的情形. 由于

$$H'_{11}=H'_{-1,-1}=H'_{1,-1}=H'_{-1,1}=0 \tag{7}$$

因此在一级近似下，能级修正 $E_m^{(1)}=0$，能级简并依然存在.

在二级微扰近似中，两个简并态之间存在下列耦合方式：

$$\psi_1\text{-}\psi_0\text{-}\psi_{-1}$$

本例相当于题8.3中 $\alpha=1,\beta=-1,k=0,\pm2$(以下符号 A、B、D 的意义均同题8.3). 容易算出

$$\sum_k{}'\frac{|H'_{k1}|^2}{E_1^{(0)}-E_k^{(0)}}=\frac{1}{4}D^2\mathscr{E}^2\left(\frac{1}{E_1^{(0)}-E_0^{(0)}}+\frac{1}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}\right)$$

$$=\frac{1}{3}\frac{ID^2\mathscr{E}^2}{\hbar^2}=A$$

$$\sum_k{}'\frac{|H'_{k,-1}|^2}{E_{-1}^{(0)}-E_k^{(0)}}=\frac{1}{3}\frac{ID^2\mathscr{E}^2}{\hbar^2}=B$$

$$\frac{H'_{-1,0}H'_{01}}{E_1^{(0)}-E_0^{(0)}}=\frac{D^2\mathscr{E}^2}{4E_1^{(0)}}=\frac{1}{2}=\frac{ID^2\mathscr{E}^2}{\hbar^2}=\text{(题8.3之 }D\text{)}$$

这正是题8.3讨论过的第2°种情况，因此能级的二级微扰修正为

$$E_1^{(2)}=\left(\frac{1}{3}\pm\frac{1}{2}\right)\frac{ID^2\mathscr{E}^2}{\hbar^2}=\frac{ID^2\mathscr{E}^2}{\hbar^2}\times\begin{cases}5/6\\-1/6\end{cases}\tag{8}$$

即在二级近似中能级 E_1 分裂为二：

$$\begin{aligned}E_{1+}&=E_1^{(1)}+\frac{5}{6}ID^2\mathscr{E}^2/\hbar^2\\E_{1-}&=E_1^{(0)}-\frac{1}{6}ID^2\mathscr{E}^2/\hbar^2\end{aligned}\tag{9}$$

二者"重心"为

$$\frac{1}{2}(E_{1+}+E_{1-})=E_1^{(0)}+\frac{1}{3}ID^2\mathscr{E}^2/\hbar^2\tag{10}$$

这相当于式(6)中 $m=\pm1$ 的情形，当然这并非实际存在的能级.

按照题8.3式(8)和(3)，容易求出和能级(9)相应的能量本征函数为(准确到一级近似)

$$\begin{aligned}E=E_{1+},\qquad \psi&=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1^{(0)}+\psi_{-1}^{(0)})\\&\quad+\frac{ID\mathscr{E}}{\hbar^2}\left[\frac{\sqrt{2}}{6}(\psi_2^{(0)}+\psi_{-2}^{(0)})-\sqrt{2}\,\psi_0^{(0)}\right]\\E=E_{1-},\qquad \psi&=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1^{(0)}-\psi_{-1}^{(0)})+\frac{ID\mathscr{E}}{\hbar^2}\\&\quad\times\frac{\sqrt{2}}{6}(\psi_2^{(0)}-\psi_{-2}^{(0)})\end{aligned}\tag{11}$$

与能级 $E_m(m\neq\pm1)$ 即式(6)相应的能量本征函数(一级近似)，可按照非简并态微扰论公式写出，为

$$\psi_m=\psi_m^{(0)}+\frac{ID\mathscr{E}}{\hbar^2}\left[\frac{1}{2m+1}\psi_{m+1}^{(0)}-\frac{1}{2m-1}\psi_{m-1}^{(0)}\right]\tag{12}$$

讨论 由于 $H'_{mm'}\neq0$ 的条件(选择定则)为

$$\Delta m=m'-m=\pm1$$

属于能级 $E_m^{(0)}$ 的两个简并态 $\psi_m^{(0)}$ 和 $\psi_{-m}^{(0)}$ 至少要在 $2|m|$ 级微扰近似下才能发生耦合，例如 $\psi_2^{(0)}$ 和 $\psi_{-2}^{(0)}$，其耦合方式为

$$\psi_2^{(0)}\text{-}\psi_1^{(0)}\text{-}\psi_0^{(0)}\text{-}\psi_{-1}^{(0)}\text{-}\psi_{-2}^{(0)}$$

因此要在 $2|m|$ 级近似下，能级 E_m 的简并才能得到解除.

8.32 由两个自旋1/2粒子组成的体系，置于沿 z 方向的均匀磁场中，与自旋有关的体系 Hamilton 量为

$$H=a\sigma_{1z}+b\sigma_{2z}+c_0\sigma_1\cdot\sigma_2 \tag{1}$$

其中 a、b 项表示磁场对粒子内禀磁矩的作用，c_0项代表两粒子的相互作用. 设 $a\neq b$，试就弱磁场($|c_0|\gg|a|,|b|$)和强磁场($|a|,|b|\gg|c_0|$)两种情形，用微扰论计算体系的能级(二级近似)，并和精确解比较.

解 (a) 弱磁场($|c_0|\gg|a|,|b|$)，将式(1)写成

$$\begin{aligned}H&=c_0\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2+c_1(\sigma_{1z}+\sigma_{2z})+c_2(\sigma_{1z}-\sigma_{2z})\\&=H_0+H'\end{aligned} \tag{2}$$

其中

$$c_1=\frac{1}{2}(a+b),\qquad c_2=\frac{1}{2}(a-b) \tag{3}$$

$$H_0=c_0\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2+c_1(\sigma_{1z}+\sigma_{2z}) \tag{4}$$

$$H'=c_2(\sigma_{1z}-\sigma_{2z}) \tag{5}$$

由于$|c_0|\gg|c_2|$，所以$|H_0|\gg|H'|$，可以视 H' 为微扰.

H_0的本征态可以取为 $\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$和$(\sigma_{1z}+\sigma_{2z})$的共同本征态，亦即总自旋 $\boldsymbol{S}^2$、S_z 的共同本征态 χ_{SM_S}. 为计算方便，作如下编号：

H_0的本征态	H_0的本征值
$\psi_1^{(0)}=\chi_{11}=\alpha(1)\alpha(2)$,	$E_1^{(0)}=c_0+2c_1$
$\psi_2^{(0)}=\chi_{10}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)+\beta(1)\alpha(2)]$,	$E_2^{(0)}=c_0$
$\psi_3^{(0)}=\chi_{1,-1}=\beta(1)\beta(2)$,	$E_3^{(0)}=c_0-2c_1$
$\psi_4^{(0)}=\chi_{00}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)]$,	$E_4^{(0)}=-3c_0$

(6)

全部能级都是非简并的. 注意，$\psi_1^{(0)}$和 $\psi_3^{(0)}$已经是 H'的本征态.

容易算出 H'的矩阵元中不等于0的只有

$$H'_{21}=H'_{12}=2c_2 \tag{7}$$

因此，准确到二级近似，体系能级如下：

$$
\begin{aligned}
E_1 &= E_1^{(0)} = c_0 + 2c_1 \\
E_2 &= E_2^{(0)} + \frac{|H'_{12}|^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} = c_0 + \frac{c_2^2}{c_0} \\
E_3 &= E_3^{(0)} = c_0 - 2c_1 \\
E_4 &= E_4^{(0)} + \frac{|H'_{24}|^2}{E_4^{(0)} - E_2^{(0)}} = -3c_0 - \frac{c_2^2}{c_0}
\end{aligned} \tag{8}
$$

注意，H'引起的能级移动的总和为0，其原因为矩阵 H' 的迹为0.

(b) 强磁场($|a|, |b| \gg |c_0|$). 式(1)中应视 c_0项为微扰，即取

$$
H_0 = a\sigma_{1z} + b\sigma_{2z}, \qquad H' = c_0 \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 \tag{9}
$$

H_0的本征态应取为 σ_{1z}的本征态和 σ_{2z}的本征态的直积. 规定波函数和能级的编号如下：

H_0的本征态	H_0的本征值
$\psi_1^{(0)} = \alpha(1)\alpha(2)$,	$E_1^{(0)} = a + b$
$\psi_2^{(0)} = \alpha(1)\beta(2)$,	$E_2^{(0)} = a - b$
$\psi_3^{(0)} = \beta(1)\alpha(2)$,	$E_3^{(0)} = -a + b$
$\psi_4^{(0)} = \beta(1)\beta(2)$,	$E_4^{(0)} = -a - b$

(10)

其中 $\psi_1^{(0)}$和 $\psi_4^{(0)}$已经是 H'的本征态，本征值 $H' = c_0$. H'的矩阵元中不等于0的是

$$
H'_{11} = H'_{44} = c_0, \quad H'_{22} = H'_{33} = -c_0, \quad H'_{23} = H'_{32} = 2c_0
$$

因此，准确到二级近似，体系能级为

$$
\begin{aligned}
E_1 &= E_1^{(0)} + c_0 = a + b + c_0 = 2c_1 + c_0 \\
E_2 &= E^{(0)} + H'_{22} + \frac{|H'_{32}|^2}{E_2^{(0)} - E_3^{(0)}} \\
&= a - b - c_0 + \frac{2c_0^2}{a - b} \\
&= 2c_2 - c_0 + \frac{c_0^2}{c_2} \\
E_3 &= E_3^{(0)} + H'_{33} + \frac{|H'_{23}|^3}{E_3^{(0)} - E_2^{(0)}} \\
&= b - a - c_0 + \frac{2c_0^2}{b - a}
\end{aligned} \tag{11}
$$

$$= -2c_2 - c_0 - \frac{c_0^2}{c_2}$$

$$E_1 - E_1^{(0)} + c_0 = -(a+b) + c_0$$

$$= -2c_1 + c_0$$

(c) 精确解(见题6.45)结果为

$$E = c_0 \pm 2c_1, \qquad -c_0 \pm 2\sqrt{c_0^2 + c_2^2} \tag{12}$$

其中前两个能级即为式(8)中的 E_1、E_3以及式(11)中的 E_1、E_4. 对于弱磁场,$c_0^2 \gg c_2^2$,式(12)中$\sqrt{c_0^2+c_2^2}$可以近似展开成

$$\sqrt{c_0^2+c_2^2} \approx |c_0|\left(1+\frac{c_2^2}{2c_0^2}\right) = |c_0| + \frac{c_2^2}{2|c_0|}$$

这时式(12)中后两个能级的近似展开即为式(8)中的 E_2、E_4. 对于强磁场,$c_2^2 \gg c_0^2$,可将$\sqrt{c_0^2+c_2^2}$近似展开为

$$\sqrt{c_0^2+c_2^2} \approx |c_2|\left(1+\frac{c_0^2}{2c_2^2}\right) = |c_2| + \frac{c_0^2}{2|c_2|}$$

这时式(12)中后两个能级的近似展开即为式(11)中的 E_2、E_3.

8.33 对于氢原子的 s 态($l=0$),原子核(质子)与电子间的超精细相互作用势(和内禀磁矩有关)为

$$H' = -\frac{8\pi}{3}\boldsymbol{\mu}_p \cdot \boldsymbol{\mu}_e \delta(\boldsymbol{r}) \tag{1}$$

其中 $\boldsymbol{r}$ 为核至电子的相对距离,$\boldsymbol{\mu}_p$ 和 $\boldsymbol{\mu}_e$ 为质子和电子的内禀磁矩,即

$$\boldsymbol{\mu}_e = -2\frac{e}{2m_e c}\boldsymbol{s}_e$$

$$\boldsymbol{\mu}_p = g_p \frac{e}{2m_p c}\boldsymbol{s}_p, \qquad g_p = 5.586 \tag{2}$$

$\boldsymbol{s}_p$ 和 $\boldsymbol{s}_e$ 为质子和电子的自旋角动量.

试计算由 H'引起的基态能级的"超精细结构"。

解 氢原子的基态轨道波函数为

$$\psi_{100}(r) = (\pi a_0^3)^{-1/2} e^{-r/a_0} \tag{3}$$

a_0为 Bohr 半径. 如以 $\chi(e,p)$表示体系的自旋态,则体系的总状态(基态)可以表示成

$$\Psi_0=\psi_{100}(r)\chi(e,p) \tag{4}$$

以 F 表示质子-电子体系总自旋平方的量子数,即

$$(\boldsymbol{s}_p+\boldsymbol{s}_e)^2=F(F+1)\hbar^2 \tag{5}$$

对于自旋三重态 χ_{11}、χ_{10}、χ_{1-1},$F=1$;对于自旋单态 χ_{00},$F=0$. 这4种自旋态都是 $\boldsymbol{s}_p\cdot\boldsymbol{s}_e$ 的本征态,对于三重态,$\boldsymbol{s}_p\cdot\boldsymbol{s}_e=\hbar^2/4$;对于单态,$\boldsymbol{s}_p\cdot\boldsymbol{s}_e=-3\hbar^2/4$. 如以这4种自旋态作为自旋空间的基矢,则虽然体系的基态式(4)是4重简并的,但 H' 已经对角化,H'的平均值就是基态能级的一级微扰修正,即

$$\begin{aligned}E^{(1)}&=\langle\Psi_0|H'|\Psi_0\rangle\\&=\frac{8\pi}{3}\frac{g_p}{2}\frac{g_e}{m_p}\left(\frac{e}{m_ec}\right)^2\langle\chi|\boldsymbol{s}_p\cdot\boldsymbol{s}_e|\chi\rangle\int\psi_{100}^2(r)\delta(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3x\\&=\frac{4\pi}{3}g_p\frac{m_e}{m_p}\left(\frac{e}{m_ec}\right)^2\psi_{100}^2(0)(\boldsymbol{s}_p\cdot\boldsymbol{s}_e)_{\text{本征值}}\end{aligned} \tag{6}$$

其中

$$\psi_{100}^2(0)=\frac{1}{\pi a_0^3}=\frac{1}{\pi}\left(\frac{m_ee^2}{\hbar^2}\right)^3 \tag{7}$$

将 $\boldsymbol{s}_p\cdot\boldsymbol{s}_e$ 的本征值以及式(7)代入式(6),即得

自旋单态: $\chi_{00}(e,p)$, $F=0$

$$\boldsymbol{s}_p\cdot\boldsymbol{s}_e=-\frac{3}{4}\hbar^2$$

$$E^{(1)}=-g_p\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^4\frac{m_e}{m_p}m_ec^2 \tag{8}$$

自旋三重态: $\chi_{1M_s}(e,p)$, $M_s=1,0,-1$, $F=1$

$$\boldsymbol{s}_p\cdot\boldsymbol{s}_e=\frac{1}{4}\hbar^2$$

$$E^{(1)}=\frac{1}{3}g_p\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^4\frac{m_e}{m_p}m_ec^2 \tag{9}$$

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二,$F=1$者较高,$F=0$者较低,裂距为

$$\Delta E = E^{(1)}(F=1) - E^{(1)}(F=0)$$
$$= \frac{4}{3}\alpha_p^4 \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 \frac{m_e}{m_p} m_e c^2 = 5.88\times 10^{-6}\ \text{eV} \quad (10)$$

和能级的精细结构相比，超精细结构的数量级约为前者的10^{-3}. 图8.33为超精细结构的示意图.

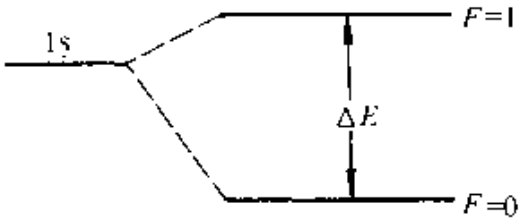


图 8.33

8.34 将处于超精细结构基态$(1s, F=0)$的氢原子置于沿z方向的均匀弱磁场$\boldsymbol{B}$中，外场引起的作用势的主要部分为

$$H' = -\boldsymbol{B}\cdot(\mu_e+\mu_p) = -B(\mu_e+\mu_p)_z \quad (1)$$

设由此而造成的能级移动为$E(B)$，定义原子的磁化率

$$\alpha_B = -\left[\frac{\partial^2 E(B)}{\partial B^2}\right]_{B=0} \quad (2)$$

试用微扰论计算$E(B)$及α_B.

解 质子磁矩μ_p约为电子磁矩μ_e的千分之一，因此式(1)中可以略去μ_p. 以1表示电子，2表示质子，则H'可以表示成

$$H' \approx -B(\mu_e)_z = B\mu_B\sigma_{1z} \quad (1')$$

其中$\mu_B = e\hbar/2m_e c$是Bohr磁子.

氢原子的超精细结构基态(参看上题)为

$$\Psi_{1s,F=0} = \psi_{100}(r)\chi_{00}(1,2) \quad (3)$$

是非简并的. 能级的一级微扰修正等于H'的平均值，

$$E^{(1)}_{1s,F=0} = \langle\Psi_{1s,F=0}|H'|\Psi_{1s,F=0}\rangle = B\mu_B\langle\chi_{00}|\sigma_{1z}|\chi_{00}\rangle = 0 \quad (4)$$

计算能级的二级微扰修正时，只需考虑近邻的另一超精细结构能

级(1s,$F=1$),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.

能级 $E_{1s,F=1}$ 共有三个简并态,即

$$\Psi_{1s,F=1}=\phi_{100}(r)\chi_{1M_s}, \qquad M_s=1,0,-1$$

其中能使微扰矩阵元 $\langle\Psi_{1s,F=1}|\sigma_{1z}|\Psi_{1s,F=0}\rangle\neq 0$ 的是 $\phi_{100}\chi_{10}$,矩阵元为

$$\langle\phi_{100}\chi_{10}|H'|\Psi_{1s,F=0}\rangle=B\mu_B\langle\chi_{10}|\sigma_{1z}|\chi_{00}\rangle=B\mu_B \tag{5}$$

因此,能级 $E_{1s,F=0}$ 的二级微扰修正为

$$E^{(2)}_{1s,F=0}=\frac{(B\mu_B)^2}{E_{1s,F=0}-E_{1s,F=1}}=E(B) \tag{6}$$

此即外磁场引起的能级移动.磁化率为

$$\alpha_B=-\left[\frac{\partial^2 E(B)}{\partial B^2}\right]_{B=0}=\frac{2(\mu_B)^2}{E_{1s,F=1}-E_{1s,F=0}} \tag{7}$$

上题已经算出

$$E_{1s,F=1}-E_{1s,F=0}=5.88\times10^{-6}\ \text{eV}$$

而

$$\mu_B=\frac{e\hbar}{2m_ec}=5.79\times10^{-9}\ \text{eV/Gs}$$

代入式(7),即得

$$\alpha_B(1s,F=0)=1.14\times10^{-11}\ \text{eV/(Gs)}^2$$

8.35 考虑两个自旋1/2的非全同粒子组成的体系,粒子间作用势为中心势,$V=V(r)$,$r=|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|$.在质心坐标系中体系的总能量算符可以表示成

$$H_0=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(r) \tag{1}$$

μ 为约化质量.体系的相对运动轨道角动量算符为

$$\boldsymbol{l}=-\mathrm{i}\hbar\,\boldsymbol{r}\times\nabla$$

体系的轨道状态($H,\boldsymbol{l}^2,l_z$ 的共同本征态)记为 $\phi_{nlm}(r,\theta,\varphi)$.单粒子自旋、总自旋、总角动量及相应本征值记为(取 $\hbar=1$)

$$\boldsymbol{s}_1=\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_1,\qquad \boldsymbol{s}_2=\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_2$$

$$\boldsymbol{s}=\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2=\frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2) \tag{2}$$

$$s^2=s(s+1),\qquad s=1,0$$

$$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{l}+\boldsymbol{s},\qquad J^2=j(j+1),\qquad J_z=m_j$$

设两粒子的相互作用能中还包含微弱的张量力成分：

$$H'=\lambda[3(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{r})/r^2-\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2] \tag{3}$$

视 H' 为微扰，试计算 $^1p_2$ 及 $^3p_1$ 能级的微扰修正（一级近似）.

解 以 ψ_{nsljm_j} 表示 (H_0,s^2,l^2,J^2,J_z) 的共同本征态. 6.43题已经证明 H' 和 $\boldsymbol{J}$ 对易，和 s^2 对易，因此 H' 作用于 ψ_{nsljm_j} 的结果，量子数 s、j、m_j 均不变. 给定 n、s、l、j 后，对于不同的 m_j、H' 表现为对角化的常数矩阵（参看题6.53）. 因此，能级 $n^{2s+1}l_j$ 的一级微扰修正等于 ψ_{nsljm_j} 态下 H' 的平均值. 计算时 m_j 可在 $(j,j-1,\cdots,-j)$ 中任取一个便于计算的值，一般可取 $m_j=j$.

(a) 能级 n^3p_2，$s=1$，$l=1$，$j=2$. 取 $m_j=j=2$，波函数为

$$\psi_{n1122}=R_{nl}(r)Y_{11}(\theta,\varphi)\alpha(1)\alpha(2) \tag{4}$$

(α,β 为单粒子自旋态，分别代表自旋"向上"及"向下"). 由于 ψ 中轨道变量和自旋变量是分离的，计算 $\langle H'\rangle$ 时各 Pauli 自旋算符均可独自进行平均，结果为

$$\langle\sigma_{1x}\rangle=\langle\sigma_{1y}\rangle=\langle\sigma_{2x}\rangle=\langle\sigma_{2y}\rangle=0,\qquad \langle\sigma_{1z}\rangle=\langle\sigma_{2z}\rangle=1$$

因此

$$\langle\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2\rangle=1,\qquad \langle(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{r})/r^2\rangle=\langle z^2/r^2\rangle \tag{5}$$

$$E^{(1)}=\langle H'\rangle=\lambda(3\langle z^2/r^2\rangle-1)=-2\lambda/5 \tag{6}$$

其中

$$\langle z^2/r^2\rangle=\int|Y_{11}|^2\cos^2\theta\,d\Omega$$

$$=\frac{3}{8\pi}\int\sin^2\theta\cos^2\theta\,d\Omega=\frac{1}{5} \tag{7}$$

(b) 能级 n^1p_1，$s=0$，$l=j=1$，为自旋单态. 取 $m_j=1$，波函数为

$$\psi_{n011}=R_{nl}(r)Y_{11}(\theta,\varphi)\chi_{00}(1,2) \tag{8}$$

其中

$$\chi_{00}(1,2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)] \tag{9}$$

容易证明(参看题6.42)

$$H'=\lambda\left[6\left(s\cdot\frac{r}{r}\right)^2-2s^2\right],\qquad (s\text{ 为总自旋})$$

对于自旋单态 χ_{00}，$s\chi_{00}=0$，因此，$H'\chi_{00}=0$，从而$\langle H'\rangle=0$. 因此能级 n^1p_1的一级微扰修正为0.

讨论 不考虑张量力时，体系能级取决于量子数 n、l，即 $E=E_{nl}$，而和 s、j 无直接关系. 计及张量力后，则能级值和 s 及 j 也有关，亦即发生能级分裂. 另外，由于 H'和 l^2不对易，在张量力作用下，l 不同的状态将发生混合(其后果将体现在波函数的一级修正和能级的二级修正中). 由于 H'为偶宇称，这种混合只能发生在 l 相差偶数的状态间. 典型的例子为氘核(n-p 结合态)，由于张量力的影响，氘核的基态并非纯粹的 S 态($l=0$)，而是含有约4%的 D 态($l=2$).

8.36 自旋1/2的三维各向同性谐振子，处于基态. 设此粒子受到微扰 $H'=\lambda\sigma\cdot r$ 作用(σ 是 Pauli 自旋算符)，求能级修正(二级近似).

解 能量算符、能级和波函数的零级近似为

$$H_0=\frac{1}{2m}p^2+\frac{1}{2}m\omega^2r^2 \tag{1}$$

$$E_n^{(0)}=\left(n+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega \tag{2}$$

$$n=n_1+n_2+n_3,\qquad n_1,n_2,n_3=0,1,2,3,\cdots$$

$$\Psi_n^{(0)}=\psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)\psi_{n_3}(z)\alpha,\qquad \psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)\psi_{n_3}(z)\beta \tag{3}$$

其中 $\psi_{n_1}(x)$为一维谐振子能量本征函数，α、β 为 σ_z 的本征函数，在 σ_z 表象中

$$\alpha=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix},\qquad \beta=\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix} \tag{4}$$

微扰作用前，基态波函数为

$$\Psi_{0\alpha}^{(0)}=\psi_0(x)\psi_0(y)\psi_0(z)\alpha,\qquad \Psi_{0\beta}^{(0)}=\psi_0(x)\psi_0(y)\psi_0(z)\beta \tag{5}$$

二者均为偶宇称. 微扰算符可以表示成

$$H'=\lambda\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}=\lambda(\sigma_x x+\sigma_y y+\sigma_z z) \tag{6}$$

H' 为奇宇称. 在两个基态波函数之间，H' 的矩阵元(包括平均值)显然全部为0，因此基态能级的一级微扰修正等于0.

H' 与总角动量算符

$$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{l}+\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$$

对易(参看题6.33)，因此 H' 作用的结果不改变量子数 j 和 m_j 的值. $\Psi_{0\alpha}^{(0)}$ 和 $\Psi_{0\beta}^{(0)}$ 分别属于

$$j=\frac{1}{2},\qquad m_j=\pm\frac{1}{2}$$

在任何级微扰近似中不可能因 H' 的作用而使它们混合. 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(α，"向上"；β，"向下")显然给出同样的能量修正值.

H' 为 $\boldsymbol{r}$ 的线性齐次函数，作用于基态的结果，量子数 n 将变成1，即变成第一激发态，能量差为

$$E_0^{(0)}-E_1^{(0)}=-\hbar\omega$$

按照微扰论公式，基态能级的二级微扰修正为

$$E_0^{(2)}=\sum_n{}'\frac{1}{E_0^{(0)}-E_n^{(0)}}|\langle n|H'|0\rangle|^2 \tag{7}$$

由于 $n\neq1$ 时，$\langle n|H'|0\rangle=0$，所以上式可以写成

$$E_0^{(2)}=-\frac{1}{\hbar\omega}\sum_n\langle 0|H'|n\rangle\langle n|H'|0\rangle$$

利用公式

$$\sum_n|n\rangle\langle n|=1$$

即得

$$E_0^{(2)}=-\frac{1}{\hbar\omega}\langle 0|H'^2|0\rangle=-\frac{\lambda^2}{\hbar\omega}\langle 0|(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})^2|0\rangle$$

$$=-\frac{\lambda^2}{\hbar\omega}\langle 0|r^2|0\rangle=-\frac{3\lambda^2}{2m\omega^2} \tag{8}$$

计算中利用了$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})^2=r^2$以及位力定理的结果

$$\frac{1}{2}m\omega^2\langle 0|r^2|0\rangle=\frac{1}{2}E_0^{(0)}=\frac{3}{4}\hbar\omega \tag{9}$$

结论：基态能级的微扰修正(二级近似)为

$$\Delta E=E_0^{(2)}=-3\lambda^2/2m\omega^2$$

$E_0^{(2)}$也可以换一种方法计算出来. 如取基态为

$$|0\rangle\Rightarrow\Psi_{0\alpha}^{(0)}\Rightarrow|000\alpha\rangle$$

式(7)中不等于0的矩阵元共有三个：

$$\langle 001\alpha|H'|000\alpha\rangle=\langle 100\beta|H'|000\alpha\rangle=\lambda\sqrt{\hbar/2m\omega}$$

$$\langle 010\beta|H'|000\alpha\rangle=\mathrm{i}\lambda\sqrt{\hbar/2m\omega}$$

三者绝对值平方之和等于$3\lambda^2\hbar/2m\omega$，代入式(7)，仍得

$$E_0^{(2)}=-3\lambda^2/2m\omega^2 \tag{8}$$

8.37 苯的“自由电子模型”把电子看成在一个环形势场中运动，并受到具有C_6对称性的微扰作用.

(a) 在不计及微扰的作用时，可以看作电子是在半径为R的环上自由运动，试写出能量本征值与本征函数；

(b) 设微扰势可以表示成

$$H'=V(\varphi)=-V_0\cos 6\varphi \tag{1}$$

在一级微扰下计算能量及相应的本征函数.

解 (a) 自由电子的 Hamilton 算符为

$$H_0=\boldsymbol{p}^2/2m=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$$

取∇^2的球坐标(r,θ,φ)表示，并取$r=R,\theta=\pi/2$，即得

$$H_0=-\frac{\hbar^2}{2mR^2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varphi^2} \tag{2}$$

这就是在环上自由运动粒子的能量算符，其本征函数和本征值为

$$\psi_n^{(0)}(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{in\varphi},\qquad n=0,\pm1,\pm2,\cdots \tag{3}$$

$$E_n^{(0)}=\frac{n^2\hbar^2}{2mR^2} \tag{4}$$

除基态($n=0$)外，所有能级都是二重简并的.

(b) 微扰算符可以写成

$$H'=-V_0\cos6\varphi=-\frac{V_0}{2}(e^{i6\varphi}+e^{-i6\varphi}) \tag{1'}$$

对于任何 n，显然

$$H'_{nn}=\langle\psi_n^{(0)}|H'|\psi_n^{(0)}\rangle=0 \tag{5}$$

在一级微扰作用下，属于同一个能级的两个简并态能够发生耦合的只有 $n=\pm3$，即

$$H'_{3,3}=H'_{3,-3}=-\frac{V_0}{2} \tag{6}$$

因此，在$\{\psi_3^{(0)},\psi_{-3}^{(0)}\}$子空间，$H'$的矩阵表示为

$$H'=-\frac{V_0}{2}\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix} \tag{7}$$

能级的一级微扰修正为(参看题8.2)

$$E_3^{(1)}=\pm\frac{V_0}{2} \tag{8}$$

相应的零级波函数为

$$\psi^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_3^{(0)}\mp\psi_{-3}^{(0)}] \tag{9}$$

其他能级($n\neq\pm3$)的一级微扰修正为0，在一级微扰下能级不分裂，简并没有消除.

8.38 氢原子处于基态(1s). 设受到微扰作用，微扰算符为

$$H'=\phi(r)\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\phi(r) \tag{1}$$

$\phi(r)$为实函数，在 $r\ll b$ 处有显著的值，$r>b$ 处迅速衰减而趋于0，$b\ll a_0$(Bohr 半径)，$\boldsymbol{\sigma}$ 为 Pauli 自旋算符. 试证明，微扰后的基态并

非纯粹的1s 态，而是1s 态中混杂着少量2p 态. 试给出一级微扰近似下基态波函数的公式.

解 以 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{l}+\boldsymbol{s}$ 表示电子的总角动量. 容易证明

$$[\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p},\boldsymbol{l}]=-\mathrm{i}\hbar\,\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{p}$$

$$[\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p},\boldsymbol{s}]=\mathrm{i}\hbar\,\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{p} \tag{2}$$

$$[\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p},\boldsymbol{J}]=0 \tag{3}$$

因此，$\boldsymbol{H}'$ 和 $\boldsymbol{J}$ 对易. 如取微扰作用前的能量本征函数为($H_0,\boldsymbol{l}^2,\boldsymbol{J}^2,J_z$)的共同本征函数

$$\psi_{nljm_j}=R_{nl}(r)\phi_{ljm_j}(\theta,\varphi,s_z) \tag{4}$$

由 H' 作用于 ψ_{nljm_j} 的结果，j 和 m_j 不变. 又因 H' 为奇宇称，作用后量子数 l 将改变±1. 所以，微扰作用后的基态将是1s 态和各 np 态的混合. 又因 H' 起作用的有效范围是 $r\leqslant b$，而 $b\ll a_0$，各 p 态中以 n 最小的2p 态贡献最大，其他 np 态的贡献可以忽略. 因此一级近似下基态波函数为

$$\psi_0\approx\psi_{1s}+\frac{1}{E_1-E_2}\langle 2\mathrm{p}|H'|1\mathrm{s}\rangle\psi_{2p} \tag{5}$$

其中

$$\psi_{1s}=\psi_{10\frac{1}{2}m_j},\qquad \psi_{2p}=\psi_{21\frac{1}{2}m_j},\qquad m_j=\pm\frac{1}{2}$$

以 $m_j=\frac{1}{2}$ 为例，

$$\psi_{1s}=R_{10}\phi_{0\frac{1}{2}\frac{1}{2}}=R_{10}(r)\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix} \tag{6}$$

$$\psi_{2p}=R_{21}\phi_{1\frac{1}{2}\frac{1}{2}}=R_{21}(r)\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{bmatrix}-\mathrm{Y}_{10}\\\sqrt{2}\,\mathrm{Y}_{11}\end{bmatrix} \tag{7}$$

计算$\langle 2\mathrm{p}|H'|1\mathrm{s}\rangle$时，可以利用公式

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\psi_{1s}=-\mathrm{i}\hbar\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)\frac{\mathrm{d}R_{10}}{\mathrm{d}r}\phi_{0\frac{1}{2}\frac{1}{2}}=-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}R_{10}}{\mathrm{d}r}\sigma_r\phi_{0\frac{1}{2}\frac{1}{2}}$$

$$=\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}R_{10}}{\mathrm{d}r}\phi_{1\frac{1}{2}\frac{1}{2}} \tag{8}$$

(参看题6.33)，因此

$$\langle 2\mathrm{p}|\phi(r)\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}|1\mathrm{s}\rangle = \mathrm{i}\hbar\int_0^\infty \phi(r)R_{21}\frac{\mathrm{d}R_{10}}{\mathrm{d}r}r^2\mathrm{d}r$$
$$= \mathrm{i}A \tag{9}$$

另外，

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\phi(r)\psi_{1s} = -\mathrm{i}\hbar\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}[\phi(r)R_{10}(r)]\phi_{0\frac{1}{2}\frac{1}{2}}$$
$$= \mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}[\phi(r)R_{10}(r)]\phi_{1\frac{1}{2}\frac{1}{2}} \tag{10}$$

$$\langle 2\mathrm{p}|\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\phi(r)|1\mathrm{s}\rangle = \mathrm{i}\hbar\int_0^\infty R_{21}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}[\phi(r)R_{10}(r)]r^2\mathrm{d}r$$
$$= \mathrm{i}B \tag{11}$$

因此

$$\langle 2\mathrm{p}|H'|1\mathrm{s}\rangle = \mathrm{i}(A+B) \tag{12}$$

对于 $m_j=-\frac{1}{2}$，结果相同.

将式(12)代入式(5)，即得基态波函数公式

$$\boxed{\psi_0 \approx \psi_{1s} + \frac{\mathrm{i}(A+B)}{E_1-E_2}\psi_{2p}} \tag{13}$$

其中 E_1、E_2为氢原子能级，A 和 B 可按式(9)和(11)算出. 其中2p态取 $j=\frac{1}{2}$，1s 态和2p 态均取 $m_j=\frac{1}{2}$或 $m_j=-\frac{1}{2}$.

8.39 有两个粒子，在中心力场中运动，并且均处于 s 态($l_1=l_2=0$). 粒子1自旋为1，内禀磁矩 $\mu_1=-\mu s_1$；粒子2自旋为1/2，无内禀磁矩. 两粒子间有相互作用 $As_1\cdot s_2$，$A>0$. 此二粒子体系置于均匀磁场 B 中. 粒子的轨道运动不予考虑.

(a) 求 $B=0$时体系的能级和本征态；

(b) 求强磁场下体系的能级(略去自旋-自旋作用)；

(c) 求体系能级的精确解，并分别就强磁场和弱磁场两种条件给出能级的近似公式，和微扰论结果比较；

(d) 设 μ，$A>0$，画出能级随 B 的变化示意图.

解 两粒子的轨道角动量均为0，总角动量即总自旋 $S=s_1+$

s_2. 取 $\hbar=1$，并取磁场方向为 z 轴，则体系的能量算符为

$$H=A\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2+B\,\mu s_{1z} \tag{1}$$

(a) $B=0$. 这时 $H=A\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2$，而

$$\begin{aligned}\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2&=\frac{1}{2}[S^2-s_1^2-s_2^2]\\&=\frac{1}{2}[S(S+1)-s_1(s_1+1)-s_2(s_2+1)]\\&=\frac{1}{2}[S(S+1)-2-3/4]\end{aligned} \tag{2}$$

其中 $S=3/2、1/2$，为总自旋平方的量子数. 能级取决于 S，而与 S_z 的取值无关.

$S=3/2$，　能级　$A\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2=A/2$

4重简并 $\left(S_z=\pm\frac{1}{2},\pm\frac{3}{2}\right)$

$S=1/2$，　$A\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2=-A$

2重简并 $\left(S_z=\pm\frac{1}{2}\right)$

能量本征态可以取为$(\boldsymbol{S}^2,S_z)$的共同本征态，记为$|SS_z\rangle$.

如以(s_{1z},s_{2z})的共同本征态$|s_{1z},s_{2z}\rangle$作为基矢，则

$$|SS_z\rangle=\sum_{s_{1z}s_{2z}}\langle s_{1z}s_{2z}|SS_z\rangle|s_{1z}s_{2z}\rangle \tag{3}$$

其中$\langle s_{1z}s_{2z}|SS_z\rangle$之值可利用 C.G. 系数表而写出. 结果为

(SS_z)表象　　$(s_{1z}s_{2z})$表象

$$\left|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle=\left|1,\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}\left|1,-\frac{1}{2}\right\rangle+\sqrt{\frac{2}{3}}\left|0,\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$\left|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle=\sqrt{\frac{2}{3}}\left|0,-\frac{1}{2}\right\rangle+\frac{1}{\sqrt{3}}\left|-1,\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$\left|\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\right\rangle=\left|-1,-\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle=\sqrt{\frac{2}{3}}\left|1,-\frac{1}{2}\right\rangle-\frac{1}{\sqrt{3}}\left|0,\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}\left|0,-\frac{1}{2}\right\rangle-\sqrt{\frac{2}{3}}\left|-1,\frac{1}{2}\right\rangle \tag{4}$$

(b) 磁场很强时，粒子间相互作用 $As_1\cdot s_2$ 可以略去，

$$H\approx B\,\mu s_{1z}=B\mu,\quad 0,\quad -B\mu \tag{5}$$

能级取决于 s_{1z} 的本征值，而与 s_{2z} 无关，每条能级都是二重简并，相应于 $s_{2z}=\pm 1/2$.

能级	本征态 $\lvert s_{1z},s_{2z}\rangle$
$B\mu$	$\left\lvert 1,\frac{1}{2}\right\rangle,\left\lvert 1,-\frac{1}{2}\right\rangle$
0	$\left\lvert 0,\frac{1}{2}\right\rangle,\left\lvert 0,-\frac{1}{2}\right\rangle$
$-B\mu$	$\left\lvert -1,\frac{1}{2}\right\rangle,\left\lvert -1,-\frac{1}{2}\right\rangle$

(c) 以 $|s_{1z},s_{2z}\rangle$ 为基矢，H 的矩阵表示如下：

	$\left\lvert 1,\frac{1}{2}\right\rangle$	$\left\lvert 1,-\frac{1}{2}\right\rangle$	$\left\lvert 0,\frac{1}{2}\right\rangle$	$\left\lvert 0,-\frac{1}{2}\right\rangle$	$\left\lvert -1,\frac{1}{2}\right\rangle$	$\left\lvert -1,-\frac{1}{2}\right\rangle$
$\left\lvert 1,\frac{1}{2}\right\rangle$	$B\mu+\frac{A}{2}$					
$\left\lvert 1,-\frac{1}{2}\right\rangle$		$B\mu-\frac{A}{2}$	$A/\sqrt{2}$			
$\left\lvert 0,\frac{1}{2}\right\rangle$		$A/\sqrt{2}$	0			
$\left\lvert 0,-\frac{1}{2}\right\rangle$				0	$A/\sqrt{2}$	
$\left\lvert 1,\frac{1}{2}\right\rangle$				$A/\sqrt{2}$	$-B\mu-\frac{A}{2}$	
$\left\lvert 1,-\frac{1}{2}\right\rangle$						$-B\mu+\frac{A}{2}$

表中空白处矩阵元为0. 计算 $As_1\cdot s_2$ 的矩阵元时利用了式(4)，例如

(s_{1z},s_{2z}) 表象　　(SS_z) 表象

$$\left|0,\frac{1}{2}\right\rangle=\sqrt{\frac{2}{3}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle-\frac{1}{\sqrt{3}}\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$\left|1,-\frac{1}{2}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle+\sqrt{\frac{2}{3}}\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$$

所以

$$\left\langle 1,-\frac{1}{2}\left|As_1\cdot s_2\right|0,\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$=\left\{\frac{1}{\sqrt{3}}\left\langle\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right|+\sqrt{\frac{2}{3}}\left\langle\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right|\right\}$$

$$\cdot As_1\cdot s_2\left\{\sqrt{\frac{2}{3}}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle-\frac{1}{\sqrt{3}}\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\right\}$$

$$=\frac{\sqrt{2}}{3}\cdot\frac{A}{2}-\frac{\sqrt{2}}{3}(-A)=\frac{A}{\sqrt{2}}$$

注意，$As_1\cdot s_2$的对角矩阵元等于 $As_{1z}s_{2z}$(本征值相乘).

H 的本征值即体系的能级，有两个能级已经直接出现在左上角和右下角对角元的位置，即

$$E_1=B\mu+\frac{A}{2}$$

$$\text{本征态}\quad|s_{1z},s_{2z}\rangle=\left|1,\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$\text{即}\quad|S,S_z\rangle=\left|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle \tag{6}$$

$$E_6=-B\mu+\frac{A}{2}$$

$$\text{本征态}\quad|s_{1z},s_{2z}\rangle=\left|-1,-\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$\text{即}\quad|S,S_z\rangle=\left|\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\right\rangle \tag{7}$$

将表中两个二维矩阵分别对角化，即可得到其他四条能级. 由

$$\begin{vmatrix} B\mu-\frac{A}{2}-E & A/\sqrt{2} \\ A/\sqrt{2} & -E \end{vmatrix}=0$$

解出

$$E_{\frac{2}{3}}=\frac{1}{2}\left[\left(B\mu-\frac{A}{2}\right)\pm\sqrt{\left(B\mu-\frac{A}{2}\right)^2+2A^2}\right] \tag{8}$$

由

$$\begin{vmatrix} -E & A/\sqrt{2} \\ A/\sqrt{2} & -B\mu-\frac{A}{2}-E \end{vmatrix}=0$$

解出

$$E_{\frac{4}{5}}=\frac{1}{2}\left[\left(-B\mu+\frac{A}{2}\right)\pm\sqrt{\left(B\mu+\frac{A}{2}\right)^2+2A^2}\right] \tag{9}$$

1° 强磁场，$B\mu\gg A$，式(8)、(9)作近似展开，得到

$$E_2\approx B\mu-\frac{A}{2}+\frac{A^2}{2B\mu} \tag{10}$$

$$\begin{aligned} E_3&\approx -A^2/2B\mu \\ E_4&\approx A^2/2B\mu \end{aligned} \tag{11}$$

$$E_5\approx -B\mu-\frac{A}{2}-\frac{A^2}{2B\mu}$$

这些结果与按照二级微扰论公式所得结果一致.

2° 弱磁场，$B\mu\ll A$，式(8)、(9)作近似展开后，得到

$$E_2\approx\frac{A}{2}+\frac{1}{3}B\mu$$

$$E_4\approx\frac{A}{2}-\frac{1}{3}B\mu \tag{12}$$

$$E_3\approx -A+\frac{2}{3}B\mu$$

$$E_5\approx -A-\frac{2}{3}B\mu \tag{13}$$

这些结果相当于简并态微扰论一级近似.

讨论 在弱磁场条件下，如忽略磁场的作用，则 $H\longrightarrow As_1\cdot s_2$，总自旋 S 为守恒量，s_1 和 s_2 则不守恒. 如取(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(a)情况. 在强磁场条件下，如忽略两粒子相互作用，则 $H\longrightarrow B\mu s_{1z}$，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(b)情况. 在一般情况下，即 H 取式(1)时，仅 S_z 为守恒量，s_{1z}，s_{2z}及 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(c)情况。但是，当 $S_z=\pm\frac{3}{2}$，S 必为$\frac{3}{2}$，(s_{1z},s_{2z})也只有唯一的取值，故相应的能量本征态

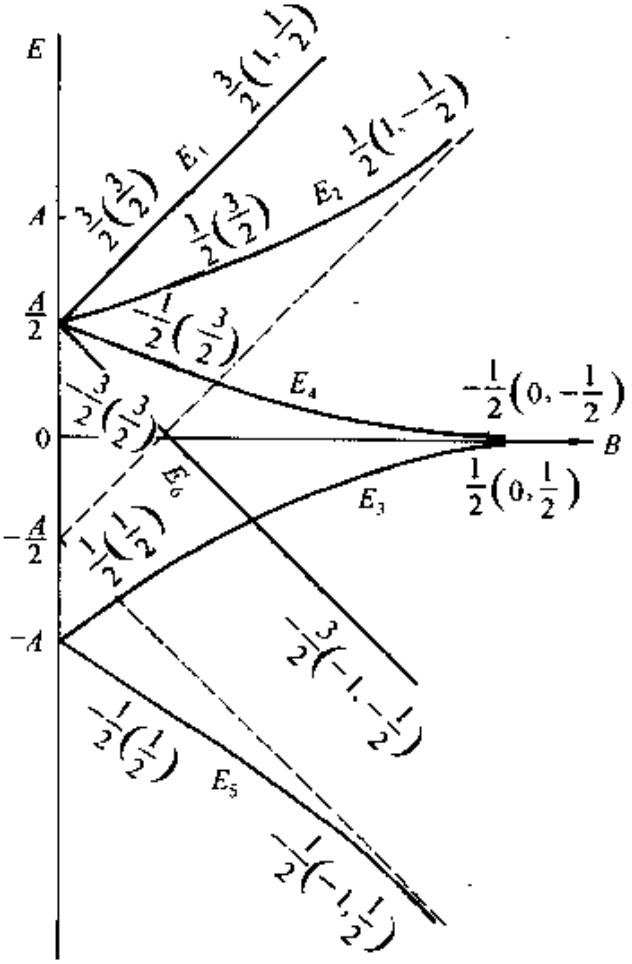


图 8.39　能级随磁场的变化. 在能级曲线的弱磁场区标出了量子数 $S_z(S)$，在强磁场区标出了量子数 $S_z(s_{1z},s_{2z})$. 括号外的 S_z 是好量子数，括号内是近似量子数，即波函数中占主要成分的项的量子数. E_1和 E_6能级曲线为直线，所有量子数都是好量子数

为 S^2, S_z, s_{1z}, s_{2z} 的共同本征态，虽然 (s_{1z}, s_{2z}) 和 S^2 不对易. 能级 E_1 和 E_6 就是这种情况，4个量子数 (S, S_z, s_{1z}, s_{2z}) 同时都是好量子数. 虽然 S_z 总是守恒量和好量子数，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"所示.(见图8.39)

8.40 有一个两能级体系，Hamilton 量为

$$H=H_0+H' \tag{1}$$

在 H_0 表象中，H_0 和 H' 的矩阵表示为

$$H_0=\begin{bmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{bmatrix}$$

$$H'=\begin{bmatrix} 0 & b \\ b & 0 \end{bmatrix}=b\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{2}$$

H' 视为微扰，b 表征微扰强度. 试求 H 的本征值和本征态. 讨论所得结果.

解 H 的本征值记为 E，本征态记为

$$\psi=\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$$

本征方程为

$$(H-E)\psi=\begin{bmatrix} E_1-E & b \\ b & E_2-E \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}=0 \tag{3}$$

有非平庸解的条件为

$$\det(H-E)=\begin{vmatrix} E_1-E & b \\ b & E_2-E \end{vmatrix}=0 \tag{4}$$

解得

$$E=E_{\pm}=\frac{1}{2}\left[(E_1+E_2)\pm\sqrt{(E_1-E_2)^2+4b^2}\right] \tag{5}$$

易见

$$E_++E_-=E_1+E_2 \tag{6}$$

其原因为 H'的对角矩阵元为0，H 和 H_0的迹相等. 如以 E_c 表示能级 E_1和 E_2的“重心”，即令

$$E_c=\frac{1}{2}(E_1+E_2) \tag{7}$$

则式(6)表明，考虑微扰 H'后，原来的(H_0的)两条能级有升有降，但重心不变，如图8.40(a)所示. 规定能级次序为 $E_1\geqslant E_2$，令

$$R=(E_1-E_2)/2b \tag{8}$$

$\frac{1}{R}$表示微扰 H'的相对重要性.

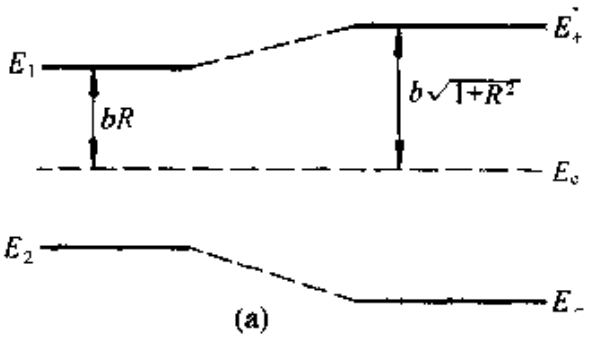


图 8.40 (a)

微扰后的能级间距可以表示成

$$\begin{aligned}\Delta E=E_+-E_-&=\sqrt{(E_1-E_2)^2+4b^2}\\&=2b\sqrt{1+R^2}\end{aligned} \tag{9}$$

由微扰 H'引起的能级移动为

$$E_+-E_1=E_2-E_-=b[\sqrt{1+R^2}-R] \tag{10}$$

能级 $E_\pm$可以表示成

$$E_\pm=E_c\pm b\sqrt{1+R^2} \tag{11}$$

将 $E=E_\pm$代入式(3)，并利用归一化条件

$$\langle\psi|\psi\rangle=|\alpha|^2+|\beta|^2=1 \tag{12}$$

就可以求出体系的两个能量本征态. 结果为

$$\begin{aligned}&E=E_+,\qquad \beta_+/\alpha_+=\sqrt{1+R^2}-R\\&\alpha_+=[1+(\sqrt{1+R^2}-R)^2]^{-1/2}\end{aligned} \tag{13}$$

$$\beta_+=[1+(\sqrt{1+R^2}+R)^2]^{-1/2}$$

$$E=E_-,\qquad \beta_-/\alpha_-=-[\sqrt{R^2+1}+R]=-\alpha_-/\beta_+ \tag{14}$$

$$\alpha_-=\beta_+,\qquad \beta_-=-\alpha_+$$

讨论 如以 ψ_1、ψ_2表示 H_0的本征态，分别属于能级 E_1、E_2，则 H 的本征态可以表示成

$$\begin{aligned} &E=E_+, && \psi_+=\alpha_+\psi_1+\beta_+\psi_2\\ &E=E_-, && \psi_-=\alpha_-\psi_1+\beta_-\psi_2 \end{aligned} \tag{15}$$

1° 设 $R\gg1$，即 $b\ll(E_1-E_2)$，即微扰很弱的情形. 这时可取

$$\sqrt{1+R^2}=R\left(1+\frac{1}{R^2}\right)^{1/2}\approx R+\frac{1}{2R}$$

由式(10)可得

$$\begin{aligned} E_+&=E_1+b[\sqrt{1+R^2}-R]\\ &\approx E_1+\frac{b}{2R}=E_1+\frac{b^2}{E_1-E_2}\\ E_-&=E_2-b[\sqrt{1+R^2}-R]\\ &\approx E_2-\frac{b}{2R}=E_2+\frac{b^2}{E_2-E_1} \end{aligned} \tag{16}$$

由式(13)、(14)可得

$$\alpha_+=-\beta_-\approx1,\qquad \beta_+=\alpha_-\approx1/2R=b/(E_1-E_2)$$

因此

$$\begin{aligned} \psi_+&\approx\psi_1+\frac{1}{2R}\psi_2=\psi_1+\frac{b}{E_1-E_2}\psi_2\\ \psi_-&\approx\frac{1}{2R}\psi_1-\psi_2=-\left(\psi_2+\frac{b}{E_2-E_1}\psi_1\right) \end{aligned} \tag{17}$$

式(16)、(17)和非简并态微扰论的结果完全一致.

2° 如 H'对角元不为零，即 H'改取

$$H'=\begin{bmatrix} H'_{11} & b\\ b & H'_{22} \end{bmatrix} \tag{18}$$

则只需在所有公式中作代换

$$E_1\longrightarrow E_1+H'_{11},\qquad E_2\longrightarrow E_2+H'_{22}$$

例如

$$E_c=\frac{1}{2}(E_1+E_2+H'_{11}+H'_{22}) \tag{7'}$$

$$R=\frac{1}{2b}(E_1+H'_{11}-E_2-H'_{22}) \tag{8'}$$

$$\begin{aligned}E_+-(E_1+H'_{11})&=(E_2+H'_{22})-E_-\\&=b[\sqrt{1+R^2}-R]\end{aligned} \tag{10'}$$

公式(9)、(11)、(13)、(14)等仍可成立. H'对能级的影响如图8.40(b)所示.

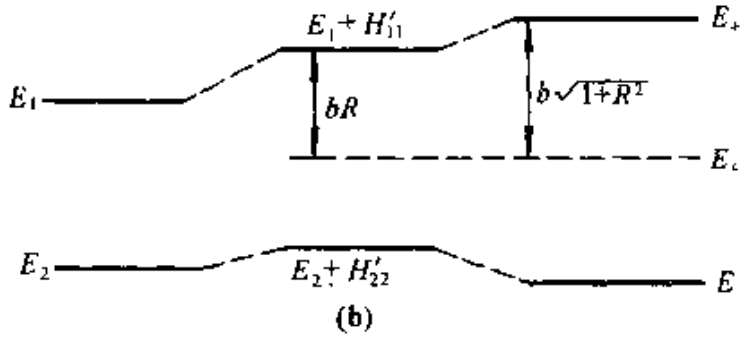


图 8.40 (b)

3° 如 $E_1=E_2$(简并),则 $R=0$,这时

$$\begin{aligned}&E_c=E_1=E_2=\frac{1}{2}(E_++E_-)\\&E_\pm=E_c\pm b\end{aligned} \tag{19}$$

由式(13)、(14)可得

$$\alpha_+=\beta_+=1/\sqrt{2}\,,\qquad \alpha_-=-\beta_-=1/\sqrt{2}$$

即

$$\psi_+=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1+\psi_2),\qquad \psi_-=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1-\psi_2) \tag{20}$$

4° $E_1=E_2$(简并),但 H'存在对角元,且 $H'_{11}\neq H'_{22}$,这时式(7')、(8')给出

$$E_c=E_1+\frac{1}{2}(H'_{11}+H'_{22}) \tag{21}$$

$$R=\frac{1}{2b}(H'_{11}-H'_{22}) \tag{22}$$

而(11)式给出

$$E_{\perp}=E_{\cdot}\pm b\sqrt{1+R^2}$$
$$=E_1+\frac{1}{2}(H'_{11}+H'_{22})\pm b\sqrt{1+R^2} \tag{23}$$

波函数仍由式(13)至(15)表示. 如 H'_{11}、H'_{22}、b 数量级相同，则 $\psi_{\perp}$ 中 ψ_1 和 ψ_2 所占比例一般说将具有相同的数量级，亦即微扰 H' 在 ψ_1、ψ_2 间起着强耦合的作用. 情况3°也是这样. 情况1°则是弱耦合.

8.41 某体系能量算符为 H_0，有两个能级，$E_1^{(0)}$ 二重简并，$E_2^{(0)}$ 无简并，受微扰 H' 作用后，能量算符(H_0表象)变成

$$H=H_0+H'=\begin{bmatrix} E_1^{(0)} & 0 & a \\ 0 & E_1^{(0)} & b \\ a & b & E_2^{(0)} \end{bmatrix} \tag{1}$$

(a) 用微扰论公式求能级(二级近似)；

(b) 求能级的精确值，再作近似展开，和微扰论结果比较.

解 (a) 以 ψ_α、ψ_β、$\psi_2^{(0)}$ 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 $E_2^{(0)}$. 由式(1)可知微扰矩阵元为

$$\begin{aligned} &H'_{\alpha\alpha}=H'_{\beta\beta}=H'_{\alpha\beta}=0, && H'_{22}=0 \\ &H'_{\alpha 2}=H'_{2\alpha}=a, && H'_{\beta 2}=H'_{2\beta}=b \end{aligned} \tag{2}$$

能级 E_2 无简并，可按非简并态微扰论公式直接写出结果：

$$E_2=E_2^{(0)}+H'_{22}+\frac{1}{E_2^{(0)}-E_1^{(0)}}(|H'_{\alpha 2}|^2+|H'_{\beta 2}|^2)$$
$$=E_2^{(0)}+\frac{a^2+b^2}{E_2^{(0)}-E_1^{(0)}} \tag{3}$$

能级 $E_1^{(0)}$ 为二重简并，相当于题8.3讨论的第3°种情况，所以

$$E_1^{(1)}=0; \qquad E_1^{(2)}=0, \qquad \frac{a^2+b^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}} \tag{4}$$

亦即 $E_1^{(0)}$ 分裂为二：

$$E_1=E_1^{(0)}, \qquad E_1^{(0)}+\frac{a^2+b^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}} \tag{4'}$$

注意三条能级的总和为 $(2E_1^{(0)}+E_2^{(0)})$，和微扰前一样. 其原因为

H'的迹(对角元之和)为0,H_0和 H 的迹相等;

(b) H 的精确本征值由下式决定:

$$\det(H-E)=\begin{vmatrix} E_1^{(0)}-E & 0 & a \\ 0 & E_1^{(0)}-E & b \\ a & b & E_2^{(0)}-E \end{vmatrix}=0 \qquad (5)$$

即

$$(E_1^{(0)}-E)[(E_1^{(0)}-E)(E_2^{(0)}-E)-(a^2+b^2)]=0 \qquad (5')$$

解为

$$E=E_1^{(0)}$$

和

$$\frac{1}{2}[E_1^{(0)}+E_2^{(0)}\pm\sqrt{(E_1^{(0)}-E_2^{(0)})^2+4(a^2+b^2)}] \qquad (6)$$

如果 $4(a^2+b^2)\ll(E_1^{(0)}-E_2^{(0)})^2$,可作近似展开

$$\sqrt{(E_1^{(0)}-E_2^{(0)})^2+4(a^2+b^2)} \approx |E_1^{(0)}-E_2^{(0)}|+\frac{2(a^2+b^2)}{|E_1^{(0)}-E_2^{(0)}|}$$

代入式(6),即得

$$E=E_1^{(0)}, \qquad E_1^{(0)}+\frac{a^2+b^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}, \qquad E_2^{(0)}+\frac{a^2+b^2}{E_2^{(0)}-E_1^{(0)}} \qquad (7)$$

和微扰论结果式(3)、(4')一致.

第九章　变分法

9.1　设 ψ 为基态试探波函数，ψ_1 为真正的基态波函数二者都是归一化的. 令

$$\varepsilon=1-|\langle\psi_1|\psi|\rangle^2 \tag{1}$$

ε 表示 ψ 偏离 ψ_1 的程度. 令 $E=\langle\psi|H|\psi\rangle$，证明

$$\boxed{E-E_1\geqslant(E_2-E_1)\varepsilon} \tag{2}$$

E_1 和 E_2 分别表示 H 的基态和第一激发态的能量。

证　以 ψ_n 表示 H 的归一化本征函数，令

$$\psi=\sum_n C_n\psi_n \tag{3}$$

则

$$\varepsilon=1-|\langle\psi_1|\psi\rangle|^2=1-C_1^*C_1 \tag{4}$$

而

$$E-E_1=\langle\psi|(H-E_1)|\psi\rangle=\sum_n C_n^*C_n(E_n-E_1)$$

$$=C_2^*C_2(E_2-E_1)+C_3^*C_3(E_3-E_1)+\cdots$$

$$\geqslant(E_2-E_1)(1-C_1^*C_1)$$

此即式(2).

讨论　如从宇称性等方面可以断定 ψ 中没有 ψ_2 的成分，即 $\langle\psi_2|\psi\rangle=0$，亦即 $C_2=0$，则式(2)变成

$$E-E_1\geqslant(E_3-E_1)\varepsilon \tag{5}$$

如可以断定 ψ 中既没有 ψ_2，也没有 ψ_3 的成分，即 $C_2=C_3=0$，则

$$E-E_1\geqslant(E_1-E_1)\epsilon$$

依此类推.

9.2 粒子在无限深势阱($-a<x<a$)中运动. 试用多项式近似结合变分法求基态能量和波函数,并和精确解比较.

解 任何能量本征函数,均需满足边界条件

$$\psi(x)=0,\ |x|\geqslant a \tag{1}$$

精确的基态波函数和能级为

$$\psi_1(x)=\frac{1}{\sqrt{a}}\cos\frac{\pi x}{2a},\ -a<x<a \tag{2}$$

$$E_1=\pi^2\hbar^2/8ma^2=1.233701\hbar^2/ma^2 \tag{3}$$

如将基态波函数近似地用多项式表示,考虑到基态是偶宇称,可取

$$\psi=C_0+C_2\left(\frac{x}{a}\right)^2+C_4\left(\frac{x}{a}\right)^4+\cdots,\ |x|<a \tag{4}$$

如只取前二项,为了满足边界条件,必须取 $C_2=-C_0$,归一化后,即得

$$\psi=C_0\left[1-\frac{x^2}{a^2}\right]=\sqrt{\frac{15}{16a}}\left[1-\frac{x^2}{a^2}\right] \tag{5}$$

ψ 已经完全被限定,没有任何选择余地. 能量平均值为

$$E=-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-a}^{a}\psi\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}\mathrm{d}x=\frac{5}{4}\frac{\hbar^2}{ma^2} \tag{6}$$

和精确基态能级的比值为

$$E/E_1=10/\pi^2=1.0132 \tag{7}$$

式(5)和基态波函数的偏离度为

$$\varepsilon=1-|\langle\psi_1|\psi\rangle|^2=1-\frac{960}{\pi^6}=1.445\times10^{-3} \tag{8}$$

作为基态波函数的更好的近似，可取式(4)中前三项，为了满足边界条件，必须取 $C_4=-(C_0+C_2)$，因此试探波函数可以表成

$$\psi(\lambda,x)=N\left[1+\lambda\left(\frac{x}{a}\right)^2-(1+\lambda)\left(\frac{x}{a}\right)^4\right]$$
$$|x|<a \tag{9}$$

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

$$N^2a=315/16(\lambda^2+8\lambda+28) \tag{10}$$

由公式

$$E=-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-a}^{a}\psi\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}\mathrm{d}x$$

求得

$$E(\lambda)=\frac{3}{4}\,\frac{11\lambda^2+36\lambda+60}{\lambda^2+8\lambda+28}\,\frac{\hbar^2}{ma^2} \tag{11}$$

λ 的最佳值由极小值条件 $\partial E(\lambda)/\partial\lambda=0$ 决定，求得两个根

$$\lambda_1=-1.2207500,\quad \lambda_2=-8.317712$$

而
$$E(\lambda_1)=1.233719\,\hbar^2/ma^2=1.0000147E_1 \tag{12}$$

$$E(\lambda_2)=12.7663\,\hbar^2/ma^2 \tag{13}$$

$E(\lambda_1)$ 和基态能级的精确值几乎完全一样，$E(\lambda_2)$ 则接近于第一激发能级 E_3.

$\psi(\lambda_1, x)$ 和基态的偏离度为

$$\varepsilon=1-|\langle\psi_1|\psi\rangle|^2=6.8\times10^{-7} \tag{14}$$

而由不等式(参看题 9.1)

$$E(\lambda_1)-E_1>(E_3-E_1)\varepsilon$$

则给出 $\varepsilon<1.8\times10^{-6}$，和式(14)一致.

9.3 同上题，求第一激发态波函数的多项式近似，及能级近似值，和精确解比较.

解 第一激发态波函数和能级为

$$\psi_2(x)=\frac{1}{\sqrt{a}}\sin\frac{\pi x}{a},\ -a<x<a \tag{1}$$

$$E_2=\frac{\pi^2}{2}\frac{\hbar^2}{ma^2}=4.934802\frac{\hbar^2}{ma^2} \tag{2}$$

边界条件为

$$\psi(x)=0,\ |x|\geqslant a \tag{3}$$

ψ_2 为奇宇称，因此其多项式近似应取

$$\psi=C_1\frac{x}{a}+C_3\left(\frac{x}{a}\right)^3+C_5\left(\frac{x}{a}\right)^5+\cdots,\ |x|<a$$

如取前三项，并满足边界条件，则应取

$$C_5=-(C_1+C_3)$$

因此

$$\psi=N\left[\frac{x}{a}+\lambda\left(\frac{x}{a}\right)^3-(1+\lambda)\left(\frac{x}{a}\right)^5\right],\ -a<x<a \tag{4}$$

其中 λ 为变分参数，N 为归一化常数. 利用归一化条件可得

$$N^2a=3465/16(5\lambda^2+32\lambda+60) \tag{5}$$

由平均值公式

$$E=-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-a}^{a}\psi\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}\mathrm{d}x$$

可得

$$E(\lambda)=\frac{1}{4}\ \frac{253\lambda^2+1100\lambda+1540}{5\lambda^2+32\lambda+60}\ \frac{\hbar^2}{ma^2} \tag{6}$$

由极值条件 $\partial E(\lambda)/\partial\lambda=0$ 求得 λ 的最佳值为

$$\lambda=-1.5169755$$

代入式(6),即得

$$E=4.937694\ \frac{\hbar^2}{ma^2}=1.000586E_2 \tag{7}$$

ψ 偏离 ψ_2 的程度为

$$\varepsilon=1-|\langle\psi_2|\psi\rangle|^2=0.00269 \tag{8}$$

而由不等式(参看 9.1 题,注意 ψ 和 ψ_1,ψ_3 正交)

$$E-E_2>(E_4-E_2)\varepsilon$$

则给出 $\varepsilon<0.019$,这表明 ψ 中所含高激发态成分较多.

试探波函数 ψ 和第一激发态 ψ_2 的差别主要在于其极值位置不完全一致.对于 ψ_2,极值位置为 $x=\pm\frac{a}{2}$,而对于 ψ,由极值条件 $\mathrm{d}\psi/\mathrm{d}x=0$ 求得极值位置为

$$x=\pm0.5073a$$

9.4 粒子在无限深势阱($-a<x<a$)中运动,取试探波函数(作为基态波函数的近似)为

$$\psi(x)=\begin{cases}N(a^2-x^2)(a^2-\lambda x^2) & |x|<a\\ 0, & |x|\geqslant a\end{cases} \tag{1}$$

试求能级近似值.

解 式(1)中 λ 为变分参数，N 为归一化常数. 归一化条件为

$$\int_{-a}^{a}\psi^{2}\mathrm{d}x=1$$

容易求出

$$N^{2}=315/16(\lambda^{2}-6\lambda+21)a \tag{2}$$

由平均值公式

$$E=-\frac{\hbar^{2}}{2m}\int_{-a}^{a}\psi\frac{\mathrm{d}^{2}\psi}{\mathrm{d}x^{2}}\mathrm{d}x \tag{3}$$

求得

$$E(\lambda)=\frac{3}{4}\frac{11\lambda^{2}-14\lambda+35}{\lambda^{2}-6\lambda+21}\frac{\hbar^{2}}{ma^{2}} \tag{4}$$

由极值条件 $\partial E(\lambda)/\partial\lambda=0$，求得 λ 的最佳值为

$$\lambda_{1}=0.2207500,\ \lambda_{2}=7.317712$$

代入式(4)即得

$$E(\lambda_{1})=1.233719\frac{\hbar^{2}}{ma^{2}}=1.000015E_{1} \tag{5}$$

$$E(\lambda_{2})=12.76628\frac{\hbar^{2}}{ma^{2}} \tag{6}$$

$E(\lambda_1)$ 和基态能级很接近，$E(\lambda_2)$ 则比 E_3 稍大.

本题和 9.2 题等价，试探波函数的表面形式不同而已，实质上两题没有任何差异.

9.5 转动惯量为 I，电偶极矩为 D 的平面转子，置于均匀电场$\mathscr{E}$（沿 x 方向）中，总能量算符成为

$$H=-\frac{\hbar^{2}}{2I}\frac{\mathrm{d}^{2}}{\mathrm{d}\varphi^{2}}-D\mathscr{E}\cos\varphi \tag{1}$$

φ为旋转角(从 x 轴算起). 如电场很强,$D\mathscr{E} \gg \hbar^2/I$, 求基态能量的近似值.

解一 能量本征方程为

$$H\psi = -\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varphi^2}\psi - D\mathscr{E}\cos\varphi \cdot \psi = E\psi \tag{2}$$

在强电场作用下,转子(基态)只能在 $\varphi=0$ 附近作小振动,因此可将 $\cos\varphi$ 作近似展开:

$$\cos\varphi \approx 1 - \frac{1}{2}\varphi^2 \tag{3}$$

代入本征方程,成为

$$-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varphi^2}\psi + \frac{1}{2}D\mathscr{E}\varphi^2\psi = (E + D\mathscr{E})\psi \tag{4}$$

这方程类似于一维谐振子的能量本征方程,后者为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi = E\psi \tag{5}$$

式(4)、(5)有如下对应关系:

$$x\text{-}\varphi,\ m\text{-}I,\ m\omega^2\text{-}D\mathscr{E},\ E\text{-}E + D\mathscr{E} \tag{6}$$

谐振子的基态波函数和能级为

$$\psi_0(x) = N\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2/2},\ \alpha^2 = m\omega/\hbar$$

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

由对应关系式(6)易见,谐振子的 ω^2 对应于转子的 $D\mathscr{E}/I$,谐振子的 α^2 对应于转子的 $\sqrt{ID\mathscr{E}}/\hbar$,因此转子的基态波函数和能级为

$$\psi_0(\varphi) \approx N\mathrm{e}^{-\beta^2\varphi^2/2},\ \beta^2 = \sqrt{ID\mathscr{E}}/\hbar \tag{7}$$

$$E_0 \approx \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{D\mathscr{E}}{I}} - D\mathscr{E} \tag{8}$$

由于 $D\mathscr{E}\gg\hbar^2/I$，所以 $\beta^2\gg1$，仅当 $|\varphi|\ll1$ 波函数才有显著的值，即转子主要出现在 $\varphi=0$（电场的方向）附近.

解二 用变分法，取试探波函数（归一化的）为

$$\psi(\lambda,\varphi)=\frac{\sqrt{\lambda}}{\pi^{1/4}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\lambda^2\varphi^2},\quad -\pi\leqslant\varphi\leqslant\pi \tag{9}$$

λ 为变分参数. 从量级看，$\lambda^2\sim\sqrt{ID\mathscr{E}}/\hbar\gg1$，动能平均值为

$$\begin{aligned}\langle T\rangle&=-\frac{\hbar^2}{2I}\int_{-\pi}^{\pi}\psi\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varphi^2}\psi\mathrm{d}\varphi\\&=-\frac{\hbar^2}{2I}\int_{-\pi}^{\pi}(\lambda^4\varphi^2-\lambda^2)\psi^2\mathrm{d}\varphi\\&=\frac{\hbar^2\lambda^2}{2I}-\frac{\hbar^2\lambda^5}{2I\sqrt{\pi}}\int_{-\pi}^{\pi}\varphi^2\mathrm{e}^{-\lambda^2\varphi^2}\mathrm{d}\varphi\end{aligned} \tag{10}$$

其中

$$\int_{-\pi}^{\pi}\varphi^2\mathrm{e}^{-\lambda^2\varphi^2}\mathrm{d}\varphi\approx\int_{-\infty}^{\infty}\varphi^2\mathrm{e}^{-\lambda^2\varphi^2}\mathrm{d}\varphi=\frac{\sqrt{\pi}}{2\lambda^3} \tag{11}$$

因此

$$\langle T\rangle\approx\frac{\hbar^2\lambda^2}{4I} \tag{12}$$

势能平均值为

$$\begin{aligned}\langle V\rangle&=-D\mathscr{E}\langle\cos\varphi\rangle=-D\mathscr{E}\frac{\lambda}{\sqrt{\pi}}\int_{-\pi}^{\pi}\cos\varphi\,\mathrm{e}^{-\lambda^2\varphi^2}\mathrm{d}\varphi\\&\approx-D\mathscr{E}\frac{\lambda}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\cos\varphi\,\mathrm{e}^{-\lambda^2\varphi^2}\mathrm{d}\varphi\\&=-D\mathscr{E}\mathrm{e}^{-1/4\lambda^2}\approx-D\mathscr{E}\left(1-\frac{1}{4\lambda^2}\right)\end{aligned} \tag{13}$$

合起来，就得到

$$E(\lambda)=\langle H\rangle=\langle T+V\rangle=\frac{\hbar^2\lambda^2}{4I}+\frac{D\mathscr{E}^2}{4\lambda^2}-D\mathscr{E} \tag{14}$$

λ 的最佳值由极值条件 $\partial E(\lambda)/\partial\lambda=0$ 决定，求得

$$\lambda^2=\sqrt{ID\mathscr{E}^2}/\hbar \tag{15}$$

代入式(14)，即得 $E(\lambda)$之极小值

$$E=-D\mathscr{E}+\frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{D\mathscr{E}^2}{I}} \tag{16}$$

以及

$$\psi=\frac{\sqrt{\lambda}}{\pi^{1/4}}\mathrm{e}^{-\sqrt{ID\mathscr{E}^2}\varphi^2/2\hbar} \tag{17}$$

这些结果均和解一所得结果式(7)、(8)一致.

9.6 一维谐振子，取自然单位($\hbar=m=\omega=1$)，能量算符可以表示成

$$H=-\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}x^2 \tag{1}$$

取基态试探波函数为

$$\psi=\begin{cases}N\left(1-\dfrac{|x|}{a}\right), & |x|<a\\ 0, & |x|>a\end{cases} \tag{2}$$

其中 a 为变分参数，N 为归一化常数. 求基态能级的上限，和精确值 $E_0=1/2$ 比较.

解 由归一化条件$\langle\psi|\psi\rangle=1$ 可得

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^2\mathrm{d}x=N^2\int_{-a}^{a}\left(1-\frac{|x|}{a}\right)^2\mathrm{d}x$$

$$=2N^2a\int_0^1(1-\xi)^2\mathrm{d}\xi$$

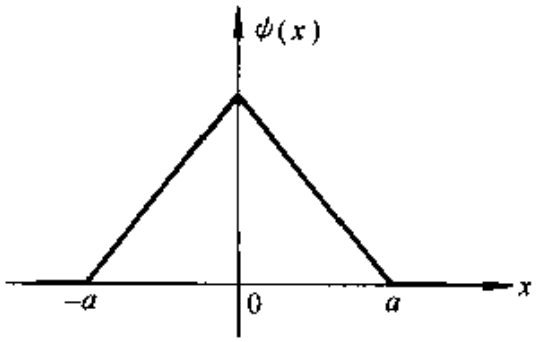


图 9.6

$$=\frac{2}{3}N^2a=1$$

所以

$$N^2=3/2a \tag{3}$$

势能平均值为

$$\langle V\rangle=\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}x^2\psi^2\mathrm{d}x=N^2a^3\int_0^1\xi^2(1-\xi)^2\mathrm{d}\xi$$

$$=N^2a^3/30=a^2/20 \tag{4}$$

动能平均值为

$$\langle T\rangle=-\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\psi\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}\mathrm{d}x \tag{5}$$

由式(2)易得

$$\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}=\begin{cases}0, & |x|>a\\ N/a, & -a<x<0\\ -N/a & 0<x<a\end{cases} \tag{6}$$

因此

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}=\frac{N}{a}\delta(x+a)-\frac{2N}{a}\delta(x)$$

$$+\frac{N}{a}\delta(x-a) \tag{7}$$

代入式(5),即得

$$\langle T\rangle = \frac{N}{a}\psi(0) = \frac{N^2}{a} = \frac{3}{2a^2} \tag{8}$$

$\langle T\rangle$也可以按下式计算:

$$\langle T\rangle = \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\left|\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right|^2\mathrm{d}x = \frac{1}{2}\int_{-a}^{a}\left(\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right)^2\mathrm{d}x$$

$$= \frac{1}{2}\left(\frac{N}{2}\right)^2\int_{-a}^{a}\mathrm{d}x = \frac{N^2}{a} = \frac{3}{2a^2} \tag{8'}$$

式(4)加式(8),即得

$$E(a) = \langle T + V\rangle = \frac{3}{2a^2} + \frac{a^2}{20} \tag{9}$$

由极值条件$\partial E/\partial a = 0$,求得$a$的最佳值为

$$a = (30)^{1/4} = 2.3403 \tag{10}$$

代入式(9)即得

$$E = \frac{3}{2\sqrt{30}} + \frac{\sqrt{30}}{20} = 0.5477 \tag{11}$$

这个结果作为基态能级($E_0 = 0.5$)的上限,不太理想,其原因是试探波函数在$x=0$附近变化太快,而真正的基态波函数(Gauss 型)在$x=0$附近变化平缓.

9.7 质量为m的粒子在势场$V(x) = kx^4 (k>0)$中运动. 用数值积分法求得基态能级$E_0 = 1.060(\hbar^2/2m)^{2/3}k^{1/3}$. (a)取试探波函数

$$\psi(\lambda, x) = \frac{\sqrt{\lambda}}{\pi^{1/4}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\lambda^2x^2} \tag{1}$$

求基态能级的上限;(b)对结果加以改进.

解 (a)以式(1)作为基态的试探波函数,可得

$$\langle T\rangle = \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right)^2\mathrm{d}x = \frac{\hbar^2\lambda^2}{4m} \tag{2}$$

$$\langle V\rangle = k\int_{-\infty}^{\infty}x^4\psi^2\mathrm{d}x = \frac{3k}{4\lambda^4} \tag{3}$$

相加，即得

$$E(\lambda) = \langle T+V\rangle = \frac{\hbar^2\lambda^2}{4m} + \frac{3k}{4\lambda^4} \tag{4}$$

由极值条件 $\partial E/\partial\lambda=0$ 求得 λ^2 的最佳值为

$$\lambda^2 = (6mk/\hbar^2)^{1/3} \tag{5}$$

代入式(4)，即得

$$E = \frac{3}{4}3^{1/3}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{2/3}k^{1/3} = 1.0817\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{2/3}k^{1/3} \tag{6}$$

比基态能级的精确值高 2%.

(b) 作为一种改进，可在试探波函数中添一个多项式因子，例如取

$$\psi(\lambda,\nu,x) = N[1+\nu(\lambda x)^2]\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\lambda^2x^2} \tag{7}$$

λ、ν 为变分参数，N 为归一化常数. 由归一化条件

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^2\mathrm{d}x = 1$$

求得

$$N^2 = \lambda/\left(1+\nu+\frac{3}{4}\nu^2\right)\sqrt{\pi} \tag{8}$$

经过计算，可得

$$\langle T\rangle = \frac{\lambda^2\hbar^2C(\nu)}{4mB(\nu)} \tag{9}$$

$$\langle V\rangle = \frac{3kA(\nu)}{4\lambda^4 B(\nu)} \tag{10}$$

$$E(\lambda,\nu) = \langle T+V\rangle = \frac{\lambda^2\hbar^2 C(\nu)}{4mB(\nu)} + \frac{3kA(\nu)}{4\lambda^4 B(\nu)} \tag{11}$$

其中

$$A(\nu) = 1 + 5\nu + \frac{35}{4}\nu^2$$

$$B(\nu) = 1 + \nu + \frac{3}{4}\nu^2$$

$$C(\nu) = 1 - \nu + \frac{7}{4}\nu^2 \tag{12}$$

由极值条件 $\partial E/\partial\lambda = 0$ 求得 λ 和 ν 的最佳配合为

$$\lambda^2 = \left(\frac{6mk}{\hbar^2}\right)^{1/3}\left[\frac{A(\nu)}{C(\nu)}\right]^{1/3} \tag{13}$$

代入式(11)即得

$$E(\nu) = \frac{3}{4}3^{1/3}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{2/3} k^{1/3}\,\frac{[A(\nu)]^{1/3}[C(\nu)]^{2/3}}{B(\nu)} \tag{14}$$

注意，如取 $\nu=0$，则 $A=B=C=1$，式(14)就是式(6).

经过数值计算，当 $\nu=0.28$，式(14)有极小值，即.

$\nu=0.28$，$A=3.0860$，$B=1.3388$，$C=0.8572$

$$A^{1/3}C^{2/3}/B = 0.98131$$

$$\lambda^2 = 1.5326(6mk/\hbar^2)^{1/3}$$

$$E = \frac{3}{4}3^{1/3}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{2/3} k^{1/3} \times 0.98131$$

$$= 1.0615\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{2/3} k^{1/3} \tag{15}$$

比基态能级的精确值仅高 0.14%.

9.8 粒子在势场

$$V(x)=g|x|,\ g>0 \tag{1}$$

中运动，试用变分法求基态能级的上限，并和精确值比较. 试探波函数取下列几种类型：

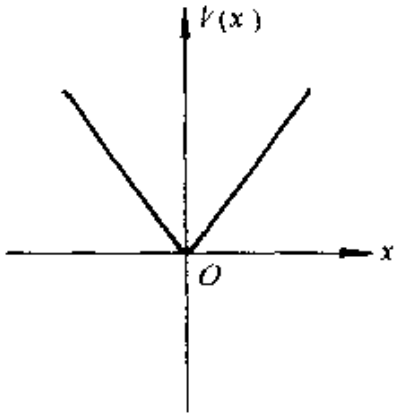


图 9.8

(a) $\psi(\lambda,x)=\sqrt{\lambda}\,\mathrm{e}^{-\lambda|x|}$

(b) $\psi(a,x)=N\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}a^2x^2}$

(c) $\psi(a,x)=\begin{cases}N\left(1-\dfrac{|x|}{a}\right), & |x|<a\\ 0, & |x|\geqslant a\end{cases}$

解 基态应该是偶宇称，三种试探波函数显然都符合这个条件. 下面分别进行计算.

(a) 取 $\psi(\lambda,x)=\sqrt{\lambda}\,\mathrm{e}^{-\lambda|x|}$，$\lambda$ 为变分参数，容易求得

$$\langle T\rangle=\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right)^2\mathrm{d}x=\frac{\hbar^2\lambda^2}{2m}$$

$$\langle V\rangle=g\int_{-\infty}^{\infty}|x|\psi^2\mathrm{d}x$$

$$=2g\lambda\int_0^{\infty}x\mathrm{e}^{-2\lambda x}\mathrm{d}x=\frac{g}{2\lambda}$$

$$E(\lambda)=\langle T+V\rangle=\frac{\hbar^2\lambda^2}{2m}+\frac{g}{2\lambda}$$

由极值条件 $\partial E/\partial\lambda=0$ 求得 λ 的最佳值为

$$\lambda=(mg/2\hbar^2)^{1/3} \tag{2}$$

代入式(1)，即得基态能级的上限为

$$E=\frac{3}{2}\left(\frac{1}{2}\right)^{2/3}\left(\frac{\hbar^2g^2}{m}\right)^{1/3}=0.94494\left(\frac{\hbar^2g^2}{m}\right)^{1/3} \tag{3}$$

(b) 取 $\psi=(a,x)=\frac{\sqrt{a}}{\pi^{1/4}}e^{-\frac{1}{2}a^2x^2}$，$a$ 为变分参数. 求得

$$\langle T\rangle=\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{d\psi}{dx}\right)^2dx=\frac{\hbar^2a^2}{4m}$$

$$\langle V\rangle=\frac{2ga}{\sqrt{\pi}}\int_0^{\infty}xe^{-a^2x^2}dx=\frac{g}{\sqrt{\pi}a}$$

$$E(a)=\langle T+V\rangle=\frac{\hbar^2a^2}{4m}+\frac{g}{\sqrt{\pi}a} \tag{4}$$

由极值条件 $\partial E/\partial a=0$，求得最佳 a 及 $E(a)$最小值为

$$a=(2mg/\sqrt{\pi}\,\hbar^2)^{1/3} \tag{5}$$

$$E=\frac{3}{2}\left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/3}\left(\frac{\hbar^2g^2}{m}\right)^{1/3}=0.81289\left(\frac{\hbar^2g^2}{m}\right)^{1/3} \tag{6}$$

(c) 取 $\psi(a,x)=\begin{cases}N(1-|x|/a), & |x|<a\\ 0, & |x|>a\end{cases}$

a 为变分参数，N 为归一化常数，容易求出 $N^2=\frac{3}{2a}$，

$$\langle T\rangle=\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-a}^{a}\left(\frac{d\psi}{dx}\right)^2dx=\frac{3\hbar^2}{2ma^2}$$

$$\langle V\rangle=2gN^2\int_0^a x\left(1-\frac{x}{a}\right)^2dx=\frac{ga}{4}$$

$$E(a)=\frac{3\hbar^2}{2ma^2}+\frac{ga}{4} \tag{7}$$

由极值条件 $\partial E/\partial a=0$ 求得最佳 a 及 $E(a)$最小值为

$$a=(12\hbar^2/mg)^{1/3} \tag{8}$$

$$E=\frac{3}{8}(12)^{1/3}\left(\frac{\hbar^2g^2}{m}\right)^{1/3}=0.85854\left(\frac{\hbar^2g^2}{m}\right)^{1/3} \tag{9}$$

基态能级的精确值为

$$\boxed{E_0=0.80862\left(\frac{\hbar^2g^2}{m}\right)^{1/3}} \tag{10}$$

三种变分法结果以(b)结果即式(6)为最好，比式(10)高 0.5%；(c)结果即式(9)比精确值式(10)高 6%；(a)结果即式(3)最差，比精确值高 17%. 究其原因，主要在于：真正的基态波函数，在 $x=0$ 处 ψ 及 $\mathrm{d}\psi/\mathrm{d}x$ 均应连续，而且由于 ψ 为偶宇称，$\psi'(0)=0$. 三种试探波函数中只有(b)满足这些条件，在 $x\sim0$ 处(概率最大的区域) ψ 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.

基态能级精确解的解法和下册题 1.1 相似. 能量本征函数可以表示成 Airy 函数. 在经典允许区($|x|<E/g$)，能量本征函数为

$$\psi(x)=\sqrt{|\xi|}\left[J_{\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}|\xi|^{3/2}\right)+J_{-\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}|\xi|^{3/2}\right)\right] \tag{11}$$

其中

$$\xi=\left(|x|-\frac{E}{g}\right)(2mg/\hbar^2)^{1/3} \tag{12}$$

当

$$x=0,\ |\xi|=E(2m/\hbar^2g^2)^{1/3} \tag{13}$$

能级取决于 $x=0$ 处 ψ 的边界条件. 奇宇称态边界条件为

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

偶宇称态边界条件为

$$\left.\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right|_{x=0}=0 \tag{14}$$

如令 $z=\frac{2}{3}|\xi|^{3/2}$，除一个常数因子外，式(11)可以写成

$$\psi(x)=z^{1/3}\left[J_{\frac{1}{3}}(z)+J_{-\frac{1}{3}}(z)\right] \tag{11'}$$

$\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}=0$ 相当于 $\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}z}=0$. 利用 Bessel 函数的递推公式[①]

① 参考郭敦仁，《数学物理方法》(高等教育出版社，1978)，§17.3.

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}[z^{\nu}J_{\nu}(z)] = z^{\nu}J_{\nu-1}(z)$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}[z^{-\nu}J_{\nu}(z)] = -z^{-\nu}J_{\nu+1}(z)$$

可得

$$\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}z} = z^{1/3}[J_{-2/3}(z) - J_{2/3}(z)]$$

因此 $x=0$ 处边界条件可以表示成

$$J_{2/3}(z) - J_{-3/2}(z) = 0$$

$$z = \frac{2}{3}|\xi|^{3/2}$$

$$|\xi| = E(2m/\hbar^2 g^2)^{1/3}$$

由 Bessel 函数表[①]查得上式的第一个根(相当于基态)为

$$z = 0.68555, \qquad |\xi| = 1.0188$$

因此

$$E_0 = 1.0188\left(\frac{\hbar^2 g^2}{2m}\right)^{1/3} = 0.80862\left(\frac{\hbar^2 g^2}{m}\right)^{1/3} \tag{15}$$

9.9 设体系的 Hamilton 量为 H,能级为 $E_1, E_2, \cdots, E_n, \cdots$. 设 ψ 为归一化的试探波函数(作为基态波函数的近似). 令

$$K_n = \langle\psi|H^n|\psi\rangle, \qquad n = 1, 2, \cdots \tag{1}$$

证明

① 参考郭敦仁《数学物理方法》(高等教育出版社,1978),§17.3.

$$K_1 - \sqrt{K_2 - K_1^2} \leqslant E_1 \leqslant K_1 \tag{2}$$

此式给出了基态能级 E_1 的上限和下限.

证 设 ψ_n 为体系的真正的归一化的能量本征函数,满足本征方程

$$H\psi_n = E_n\psi_n, \quad n = 1,2,\cdots \tag{3}$$

作为基态波函数的近似的试探波函数 ψ,必可表示成

$$\psi = \sum_n C_n\psi_n \tag{4}$$

其中

$$\sum_n C_n^* C_n = 1. \qquad \text{(归一化条件)} \tag{5}$$

因此

$$\begin{aligned} K_1 &= \langle\psi|H|\psi\rangle \\ &= \sum_{n,n'} C_n^* C_{n'} \langle\psi_n|H|\psi_{n'}\rangle \\ &= \sum_{n,n'} C_n^* C_{n'} E_n \delta_{nn'} \\ &= \sum_n C_n^* C_n E_n \geqslant E_1 \end{aligned} \tag{6}$$

令

$$I = \langle\psi|H - K_1)^2|\psi\rangle \geqslant 0 \tag{7}$$

将式(4)代入上式,并利用式(3)及(5),可得

$$I = \sum_{n,n'} C_n^* C_{n'} \langle\psi_n|(H - K_1)^2|\psi_{n'}\rangle$$

$$= \sum_n C_n^* C_n (E_n - K_1)^2 \geqslant (K_1 - E_1)^2 \tag{8}$$

(这里假定 ψ 是基态的良好近似，K_1 接近于 E_1，$|E_n - K_1| \geqslant K_1 - E_1$.) 另外，根据定义(1)，可得

$$I = \langle \psi | (H^2 - 2K_1 H + K_1^2) | \psi \rangle = K_2 - K_1^2 \tag{9}$$

联合式(8)、(9)，即得

$$I = K_2 - K_1^2 \geqslant (K_1 - E_1)^2 \geqslant 0$$

开方，即得

$$\sqrt{K_2 - K_1^2} \geqslant K_1 - E_1 \geqslant 0 \tag{10}$$

亦即

$$\boxed{K_1 - \sqrt{K_2 - K_1^2} \leqslant E_1 \leqslant K_1} \tag{2}$$

通常以 K_1 作为基态能级 E_1 的近似值

9.10 粒子在一维势场中运动，$V(x)<0$，[当 $x \to \pm\infty$，$V(x) \to 0$]试证明，至少存在一个束缚态($E<0$).

证 粒子的总能量算符为

$$H = T + V = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x) \tag{1}$$

取变分试探波函数(已归一化)为

$$\psi(\lambda, x) = \frac{\sqrt{\lambda}}{\pi^{1/4}} \mathrm{e}^{-\lambda^2 x^2/2}, \quad \lambda > 0 \tag{2}$$

λ 为变分参数. 动能和势能的平均值为

$$\langle T \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x} \right|^2 \mathrm{d}x = \frac{\hbar^2 \lambda^5}{2m\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \mathrm{e}^{-\lambda^2 x^2} \mathrm{d}x$$

$$=\hbar^2\lambda^2/4m \tag{3}$$

$$\langle V\rangle=\frac{\lambda}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}V(x)\mathrm{e}^{-\lambda^2x^2}\mathrm{d}x$$

$$=\frac{\lambda}{\sqrt{\pi}}U(\lambda) \tag{4}$$

其中

$$U(\lambda)=\int_{-\infty}^{+\infty}V(x)\mathrm{e}^{-\lambda^2x^2}\mathrm{d}x \tag{5}$$

能量平均值为

$$E(\lambda)=\langle T+V\rangle=\frac{\hbar^2\lambda^2}{4m}+\frac{\lambda}{\sqrt{\pi}}U(\lambda) \tag{6}$$

由于

$$\lambda\to 0,\quad U(\lambda)\to U(0)=\int_{-\infty}^{+\infty}V(x)\mathrm{d}x<0 \tag{7}$$

当 λ 充分小时，式(6)中第二项是主要的，从而

$$E(\lambda)\to\frac{1}{\sqrt{\pi}}\lambda U(0)<0$$

亦即存在束缚能级.①

9.11 质量为 m 的粒子在线性中心力场

$$V(r)=kr,\quad k>0 \tag{1}$$

中运动，(a)粗略估算基态能级的数量级；(b)用 Bohr 量子化条件求基态(圆轨道)能级之值；(c)用变分法求基态能级的上限，并和

① 参考 Tables of Bessel Functions of Fractional Order, Vol. 1, New York, Columbia University Press. (1948), 俄译本(1959).

精确解比较. 变分试探波函数取为

$$\text{(i)}\ \psi \sim \mathrm{e}^{-\lambda r}, \quad \text{(ii)}\ \psi \sim \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\lambda^2 r^2}$$

解 (a)总能量算符为

$$H = T + V = \frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2 + kr \tag{2}$$

根据位力定理,对于任何能量本征态,有关系

$$\langle T\rangle = \frac{1}{2}\langle r\frac{dV}{dr}\rangle = \frac{1}{2}k\langle r\rangle$$

$$E = \langle T + V\rangle = \frac{3}{2}k\langle r\rangle \tag{3}$$

本题中,特征长度应该由$\hbar$、m、k 构成,唯一的构造方式是

$$\boxed{r_0 = (\hbar^2/mk)^{1/3}} \tag{4}$$

对于基态,可以估计为$\langle r\rangle \sim r_0$, 因此基态能级约为

$$E_0 \sim \frac{3}{2}kr_0 = \frac{3}{2}(\hbar^2k^2/m)^{1/3} \tag{5}$$

(b) 对于 Bohr 圆轨道,位力定理仍可成立,如以 r 表示轨道半径,应有关系

$$p^2 = mkr, \quad E = \frac{3}{2}kr \tag{6}$$

量子化条件为

$$|\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}| = rp \doteq n\hbar, \quad n = 1,2,3,\cdots \tag{7}$$

对于基态,$n=1$,由量子化条件得到

$$r^2p^2 = \hbar^2$$

而由式(6)得到

$$r^2p^2 = mkr^3$$

因此

$$r=(\hbar^2/mk)^{1/3}=r_0$$

$$E_0=\frac{3}{2}kr_0=\frac{3}{2}(\hbar^2k^2/m)^{1/3} \tag{8}$$

刚好和粗略估算结果式(5)一致.

(c) 用变分法求基态能级上限,因基态为 s 态($l=0$),应取试探波函数为径向函数 $\psi=\psi(r)$.

(i) 取 $$\psi(\lambda,r)=\left(\frac{\lambda^3}{\pi}\right)^{1/2}e^{-\lambda r},\quad \lambda>0 \tag{9}$$

λ 为变分参数. 容易算出

$$\langle T\rangle=\frac{\hbar^2}{2m}\int|\nabla\psi|^2d\tau=\frac{\hbar^2}{2m}\int\left(\frac{d\psi}{dr}\right)d\tau=\frac{\hbar^2}{2m}\lambda^2$$

$$\langle V\rangle=k\int_0^\infty r\psi^2 4\pi r^2dr=\frac{3k}{2\lambda}$$

$$E(\lambda)=\langle T+V\rangle=\frac{\hbar^2\lambda^2}{2m}+\frac{3k}{2\lambda} \tag{10}$$

由极值条件 $\partial E/\partial\lambda=0$ 求得 λ 最佳值及 $E(\lambda)$最小值为

$$\lambda=\left(\frac{3}{2}\frac{mk}{\hbar^2}\right)^{1/3}=\left(\frac{3}{2}\right)^{1/3}\frac{1}{r_0} \tag{11}$$

$$E=\left(\frac{3}{2}\right)^{5/3}\left(\frac{\hbar^2k^2}{m}\right)^{1/3}=1.9656\left(\frac{\hbar^2k^2}{m}\right)^{1.3} \tag{12}$$

(ii) 取

$$\psi(\lambda,r)=\frac{\lambda^{3/2}}{\pi^{3/4}}e^{-\frac{1}{2}\lambda^2r^2},\qquad \lambda>0 \tag{13}$$

(已归一化)λ 为变分参数. 容易算出

$$\langle T\rangle=\frac{\hbar^2}{2m}\int\left(\frac{d\psi}{dr}\right)^2d\tau=\frac{3\hbar^2\lambda^2}{4m}$$

$$\langle V\rangle=k\int_0^\infty r\psi^2 4\pi r^2dr=\frac{2k}{\sqrt{\pi}\lambda}$$

$$E(\lambda)=\langle T+V\rangle=\frac{3\hbar^2\lambda^2}{4m}+\frac{2k}{\sqrt{\pi}\lambda} \tag{14}$$

由极值条件 $\partial E/\partial\lambda=0$ 求得 λ 最佳值及 $E(\lambda)$最小值为

$$\lambda=\left(\frac{4mk}{3\sqrt{\pi}\hbar^2}\right)^{1/3}=\left(\frac{4}{3\sqrt{\pi}}\right)^{1/3}\frac{1}{r_0} \tag{15}$$

$$E=3\left(\frac{3\hbar^2k^2}{4\pi m}\right)^{1/3}=1.8611\left(\frac{\hbar^2k^2}{m}\right)^{1/3} \tag{16}$$

基态能级的精确值可以利用下册题 1.1 的结果而写出. 中心力场中 s 态($l=0$)能级和相应的一维问题结果相同,即相当于

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

边界条件:

$$x\to 0,\infty \text{ 处},\quad \psi(x)\to 0$$

根据下册题 1.1 结果,基态能级为

$$\boxed{E_0=1.8558\left(\frac{\hbar^2k^2}{m}\right)^{1/3}} \tag{17}$$

作为变分法给出的基态能级上限,式(16)比 E_0 高 0.29%,式(12)则比 E_0 高 5.9%. 这表明式(13)比式(9)更接近于真正的基态波函数.

式(13)和(9)的优劣还可从波函数在原点的数值来鉴别.

对于式(13),
$$|\psi(0)|^2=\left(\frac{\lambda}{\sqrt{\pi}}\right)^3=\frac{4}{3\pi^2r_0^3} \tag{18}$$

对于式(9),
$$|\psi(0)|^2=\frac{\lambda^3}{\pi}=\frac{3}{2\pi^2r_0^3} \tag{19}$$

$|\psi(0)|^2$的精确值为(参看题 5.7)

$$|\psi(0)|^2=\frac{m}{2\pi\hbar^2}\left\langle\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right\rangle \tag{20}$$

对于本题,$\mathrm{d}V/\mathrm{d}r=k$,因此

$$\boxed{|\psi(0)|^2 = \frac{mk}{2\pi\hbar^2} = \frac{1}{2\pi r_0^3}} \tag{21}$$

式(18)为精确值的 $8/3\pi$ 倍，式(19)则为精确值的 3 倍！由于基态波形为钟形，$\psi(0)$的值在相当大程度上反映出试探波函数的优劣程度，可见式(13)远比式(9)为佳.

9.12 设在氘核中，质子与中子的作用势表示成

$$V(r) = -V_0 e^{-r/a} \tag{1}$$

取 $V_0 = 32.7\text{MeV}$，$a = 2.16\text{fm}$(力程). 试用变分法求氘核的基态能级及基态半径.

解 基态为 s 态($l=0$)，波函数为径向函数，为了计算方便，取试探函数为

$$\psi(\lambda, r) = Ne^{-\lambda r/2a} \tag{2}$$

λ 为变分参数，N 为归一化常数. 由归一化条件

$$\int |\psi|^2 d\tau = 4\pi \int_0^\infty \psi^2 r^2 dr = 1$$

求得

$$N^2 = \lambda^3/8\pi a^3 \tag{3}$$

动能和势能平均值分别为

$$\langle T \rangle = \frac{\hbar^2}{2\mu} \int \left(\frac{d\psi}{dr}\right)^2 d\tau = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\lambda}{2a}\right)^2$$

$$\langle V \rangle = -V_0 N^2 4\pi \int_0^\infty e^{-r/a} e^{-\lambda r/a} r^2 dr$$

$$= -V_0 \left(\frac{\lambda}{1+\lambda}\right)^3$$

因此

$$E(\lambda) = \langle T + V \rangle = \frac{\hbar^2\lambda^2}{8\mu a^2} - V_0\left(\frac{\lambda}{1+\lambda}\right)^3 \tag{4}$$

其中 μ 为质子-中子体系约化质量，即

$$\mu = m_p m_n/(m_p + m_n) = 469.45\text{MeV}/c^2$$

由极值条件 $\partial E/\partial\lambda = 0$ 求得 λ 最佳值满足的方程：

$$\frac{\lambda}{(1+\lambda)^4} = \frac{\hbar^2}{12\mu a^2 V_0} \tag{5}$$

给定了上式右端各参数之值后，可用数值解法求出 λ 的最佳值. 相应的 $E(\lambda)$最小值可以表示成

$$E = \frac{\hbar^2}{4\mu a^2}\lambda^2\left[\frac{1}{2} - \frac{1}{3}(1+\lambda)\right] \tag{6}$$

式(5)中，

$$\frac{\hbar^2}{12\mu a^2 V_0} = \frac{(\hbar c)^2}{12\mu c^2 a^2 V_0} = 0.04531$$

由式(5)求得 λ 最佳值为

$$\lambda = 1.326 \tag{7}$$

代入式(6)，即得

$$E = -2.15\text{MeV} \tag{8}$$

氘核基态能级的实验值为 $E = -2.23$MeV，二者相差约 3.6%.

式(2)作为基态波函数的近似表达式，虽不十分准确，但简明易算. 例如，由式(2)易得基态最概然半径为

$$r_0 = 2a/\lambda = 3.26\text{fm} \tag{9}$$

和公认的数值基本一致. 最概然半径由径向概率密度的极值条件决定，即满足

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}(r^2\psi^2)|_{r=r_0}=0 \tag{10}$$

由式(2)还可求出基态平均半径为

$$\langle r\rangle=\int r\psi^2\mathrm{d}\tau=3a/\lambda=4.89\mathrm{fm} \tag{11}$$

9.13 质量为 m 的粒子在汤川势阱中运动，

$$V(r)=-V_0\mathrm{e}^{-r/a}/\frac{r}{a},\quad V_0,a>0 \tag{1}$$

试估算形成束缚态所需临界 V_0 值，(a)利用测不准关系作粗略估算，(b)用变分法作较为精确的估算.

解 (a) 设基态半径为 R，即粒子主要出现在 $r\sim R$ 附近. 利用测不准关系 $\Delta p\Delta x\sim\hbar$，并取 $\Delta x\sim R$，即得

$$\langle T\rangle\sim\frac{1}{2m}(\Delta p)^2\sim\hbar^2/2mR^2$$

势能平均值可以取为

$$\langle V\rangle\sim-V_0\mathrm{e}^{-R/a}/\frac{R}{a}$$

因此，基态能量可以估计为

$$E=\langle T+V\rangle\sim\frac{\hbar^2}{2mR^2}-V_0\frac{\mathrm{e}^{-R/a}}{R/a} \tag{2}$$

束缚态 $E<0$，因此必须

$$V_0>\frac{\hbar^2}{2maR}\mathrm{e}^{R/a} \tag{3}$$

当 $R=a$，上式右端为极小，故得

$$V_0>\frac{e}{2}\frac{\hbar^2}{ma^2}=1.36\frac{\hbar^2}{ma^2} \tag{4}$$

当然，数字 1.36 仅有数量级的意义.

(b) 用变分法，取试探波函数为(已归一化)

$$\psi(\lambda,r)=\left(\frac{\lambda^3}{8\pi a^3}\right)^{1/2}e^{-\lambda r/2a} \tag{5}$$

λ 为变分参数，容易求得

$$\langle T\rangle=\frac{\hbar^2}{2m}\int\left(\frac{d\psi}{dr}\right)^2d\tau=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\lambda}{2a}\right)^2=\frac{\hbar^2\lambda^2}{8ma^2}$$

$$\langle V\rangle=-V_0a4\pi\int_0^\infty\psi^2e^{-r/a}rdr=-\frac{V_0}{2}\frac{\lambda^3}{(1+\lambda)^2}$$

$$E(\lambda)=\langle T+V\rangle=\frac{\hbar^2\lambda^2}{8ma^2}-\frac{V_0\lambda^3}{2(1+\lambda)^2} \tag{6}$$

束缚态 $E\leqslant0$，因此必须

$$V_0\geqslant\frac{(1+\lambda)^2}{\lambda}\frac{\hbar^2}{4ma^2} \tag{7}$$

当 $\lambda=1$，上式右端为极小，故得 V_0 的临界值为

$$V_0\geqslant\hbar^2/ma^2 \tag{8}$$

这和式(4)基本一致，考虑到式(5)并非真正的基态波函数，所以实际上 V_0 的临界值还可以比式(8)稍小一些.

9.14 设氘核中质子与中子间作用势为汤川势：

$$V(r)=-V_0e^{-\frac{r}{a}}/\frac{r}{a},\quad V_0,a>0 \tag{1}$$

取试探波函数 $\psi\sim e^{-\lambda r/2a}$，用变分法求基态能级公式，并利用能级的实验值求作用强度 V_0 与力程 a 的关系.

解 能级公式见上题式(6)，为

$$E(\lambda)=\frac{\hbar^2\lambda^2}{8\mu a^2}-\frac{V_0\lambda^3}{2(1+\lambda)^2} \tag{2}$$

其中 λ 为变分参数，μ 为约化质量($2\mu=938.9\text{MeV}/c^2$).

由极值条件 $\partial E/\partial\lambda=0$ 可得最佳 λ 满足的方程：

$$\frac{\lambda(3+\lambda)}{(1+\lambda)^3}=\frac{\hbar^2}{2\mu a^2 V_0}\equiv\eta \tag{3}$$

相应的 $E(\lambda)$最小值为

$$E=\frac{V_0}{4}\frac{(1-\lambda)\lambda^3}{(1+\lambda)^3} \tag{4}$$

给定 V_0 和 a 后，由式(3)即可解出 λ，代入式(4)即得 E(基态能级的近似值).

反之，如式(4)中 E 取实验值(−2.23MeV)，则给定 V_0 后，由式(4)即可定出 λ，代入式(3)即可求出相应 a 值. 数值计算结果如下表，其中第三、四组数据接近公认的数值.

$E=-2.23\text{MeV}$					
$V_0(\text{MeV})$	40	35	30	25	20
λ	1.8265	1.9042	2.0023	2.1315	2.3114
$\eta=\frac{\lambda(3+\lambda)}{(1+\lambda)^3}$	0.3904	0.3812	0.3701	0.3562	0.3381
$a(10^{-13}\text{cm})$	1.63	1.76	1.93	2.16	2.48

9.15 粒子在吸引的中心力场中运动，

$$V(r)=Ar^\nu,\qquad \nu>-2,\qquad A\nu>0 \tag{1}$$

试用变分法求基态能级的上限，并讨论所得结果. (a)取试探波函数 $\psi\sim e^{-\lambda r/2}$；(b) 取 $\psi\sim e^{-\lambda^2 r^2/2}$；(c) 比较这两种波函数的优劣.

解 (a) 试探波函数取为(已归一化)

$$\psi(\lambda,r)=\left(\frac{\lambda^3}{8\pi}\right)^{1/2}\mathrm{e}^{-\lambda r/2},\qquad \lambda>0 \tag{2}$$

容易算出

$$\langle T\rangle=\frac{\hbar^2}{2m}\int\left(\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}r}\right)^2\mathrm{d}\tau=\frac{\hbar^2\lambda^2}{8m}$$

$$\langle V\rangle=4\pi A\int_0^\infty\psi^2r^{\nu+2}\mathrm{d}r$$

$$=\frac{A}{2}\lambda^{-\nu}\Gamma(3+\nu)$$

$$E(\lambda)=\langle T+V\rangle=\frac{\hbar^2\lambda^2}{8m}+\frac{A}{2}\lambda^{-\nu}\Gamma(3+\nu) \tag{3}$$

计算中利用了公式

$$\int_0^\infty x^{\alpha-1}\mathrm{e}^{-x}\mathrm{d}x=\Gamma(\alpha),\qquad \alpha>0 \tag{4}$$

由极值条件 $\partial E/\partial\lambda=0$ 求得 λ 的最佳值为

$$\lambda=\left[\frac{2m}{\hbar^2}A\nu\Gamma(3+\nu)\right]^{1/(2+\nu)} \tag{5}$$

代入(3)式,即得 $E(\lambda)$最小值为

$$E=\frac{A}{4}(2+\nu)\Gamma(3+\nu)$$

$$\cdot\left[\frac{2m}{\hbar^2}A\nu\Gamma(3+\nu)\right]^{-\nu/(2+\nu)} \tag{6}$$

特例:(i) $\nu=-1$, $A=-e^2$, 相当于氢原子问题.

$$E=\frac{A}{4}\Gamma(2)\left[-\frac{2m}{\hbar^2}A\Gamma(2)\right]$$

$$=-\frac{mA^2}{2\hbar^2}=-\frac{e^2}{2a_0} \tag{7}$$

其中 $a_0=\hbar^2/me^2$,为 Bohr 半径. 式(7)正好是氢原子的基态能级精

确值. 所以能得到这样好的结果，是因为所选试探波函数的函数形式与真正的基态波函数相同.

(ii) $\nu=2$, $A=\frac{1}{2}m\omega^2$, 相当于二维谐振子.

$$E = A\Gamma(5)\left[\frac{4m}{\hbar^2}A\Gamma(5)\right]^{-1/2} = \sqrt{3}\,\hbar\omega \tag{8}$$

基态能级的精确值为 $3\hbar\omega/2$, 式(8)比精确值高 15.5%.

(iii) $\nu=1$, $A>0$, $V=Ar$, 式(6)给出

$$E = \frac{3}{4}A\Gamma(4)\left[\frac{2m}{\hbar^2}A\Gamma(4)\right]^{-1/3}$$

$$= \left(\frac{3}{2}\right)^{5/3}\left(\frac{\hbar^2A^2}{m}\right)^{1/3} \tag{9}$$

和题 9.11 的式(12)一致.

(b) 试探波函数取为(已归一化)

$$\psi(\lambda,r) = \lambda^{3/2}\pi^{-3/4}e^{-\lambda^2r^2/2} \tag{10}$$

容易算出

$$\langle T\rangle = \frac{\hbar^2}{2m}\int\left(\frac{d\psi}{dr}\right)^2 d\tau = \frac{3\hbar^2\lambda^2}{4m}$$

$$\langle V\rangle = 4\pi A\int_0^\infty \psi^2 r^{\nu+2}dr$$

$$= \frac{4}{\sqrt{\pi}}A\lambda^3\int_0^\infty e^{-\lambda^2r^2}r^{\nu+2}dr$$

$$= \frac{2}{\sqrt{\pi}}A\lambda^{-\nu}\int_0^\infty e^{-x}x^{\frac{\nu}{2}+\frac{1}{2}}dx$$

$$= \frac{2}{\sqrt{\pi}}A\lambda^{-\nu}\Gamma\left(\frac{\nu}{2}+\frac{3}{2}\right)$$

$$E(\lambda) = \langle T+V\rangle$$

$$=\frac{3\hbar^2\lambda^2}{4m}+\frac{2}{\sqrt{\pi}}A\Gamma\left(\frac{\nu}{2}+\frac{3}{2}\right)\lambda^{-\nu} \tag{11}$$

由极值条件 $\partial E/\partial\lambda=0$ 求得 λ 最佳值为

$$\lambda=\left[\frac{4}{3\sqrt{\pi}}\frac{mA}{\hbar^2}\nu\Gamma\left(\frac{\nu}{2}+\frac{3}{2}\right)\right]^{1/(2+\nu)} \tag{12}$$

代入式(11)，即得 $E(\lambda)$最小值为

$$E=\frac{A}{\sqrt{\pi}}(2+\nu)\Gamma\left(\frac{\nu}{2}+\frac{3}{2}\right)$$

$$\times\left[\frac{2}{3\sqrt{\pi}}\frac{2m}{\hbar^2}A\nu\Gamma\left(\frac{\nu}{2}+\frac{3}{2}\right)\right]^{-\nu/(2+\nu)} \tag{13}$$

特例：(i) $\nu=-1$，$A=-e^2$，相当于氢原子问题.

$$E=-\frac{4}{3\pi}\frac{mA^2}{\hbar^2}=-\frac{4e^2}{3\pi a_0} \tag{14}$$

比基态能级精确值($E_1=-e^2/2a_0$)高 15.1%.

(ii) $\nu=2$，$A=\frac{1}{2}m\omega^2$，相当于三维谐振子.

$$E=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)m\omega^2\left[\frac{4}{3\sqrt{\pi}}\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}\right]^{-\frac{1}{2}}$$

$$=\frac{3}{2}\hbar\omega \tag{15}$$

其中

$$\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)=\frac{3}{2}\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)=\frac{3}{2}\cdot\frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)$$

$$=\frac{3}{4}\sqrt{\pi}$$

由于试探波函数的函数形式和真正的基态波函数相同，所以变分法所得能级等于基态能级的准确值.

(iii) $\nu=1$，$A>0$，$V=Ar$，式(13)给出

$$E=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\,3A\Gamma(2)\left[\frac{4}{3\sqrt{\pi}}\,\Gamma(2)\,\frac{mA}{\hbar^2}\right]^{-1/3}$$

$$=3\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/3}\left(\frac{\hbar^2A^2}{m}\right)^{1/3} \tag{16}$$

和题 9.11 的式(16) 一致.

(c) 将(a)中所得能级近似值式(6)记为 E_a,(b)中所得能级近似值式(13)记为 E_b,利用公式

$$\Gamma(2z)=2^{2z-1}\pi^{-1/2}\Gamma\left(z+\frac{1}{2}\right)\Gamma(z)$$

可得

$$\frac{E_a}{E_b}=\frac{\sqrt{\pi}}{4}\left(\frac{2}{3\sqrt{\pi}}\right)^{\nu/(2+\nu)}\left[\frac{\Gamma(3+\nu)}{\Gamma\left(\frac{3+\nu}{2}\right)}\right]^{2/(2+\nu)}$$

$$=\left[\left(\frac{2}{3}\right)^{\nu/2}\Gamma\left(2+\frac{\nu}{2}\right)\right]^{2/(2+\nu)} \tag{17}$$

当 $\nu\to0$,$E_a/E_b\to1$;

当 $\nu\neq0(\nu>-2)$,$\Gamma\left(2+\frac{\nu}{2}\right)$ 总是大于 $\left(\frac{3}{2}\right)^{\frac{\nu}{2}}$,因此

$$E_a/E_b>1;$$

当 $\nu<0$,$A<0$,E_a,E_b 均为负数,所以 $E_a<E_b$;

当 $\nu>0$,$A>0$,E_a,E_b 均为正数,所以 $E_a>E_b$.

由此可得结论如下:

当 $-2<\nu<0$,试探波函数(a)型优于(b)型;

当 $\nu>0$,试探波函数(b)型优于(a)型.

9.16 设体系的 Hamilton 量为 H_0 时,基态能级和波函数为 E_0,ψ_0. 设体系受到微扰 H' 作用,Hamilton 量变成 $H=H_0+H'$. 取基态试探波函数为

$$\boxed{\psi(\lambda) = N(1 + \lambda H')\psi_0} \tag{1}$$

λ 为变分参数. 试用变分法求 H 的基态能级上限. 计算中保留二级小量. 略去三级小量.

解 微扰前的基态 ψ_0 下的平均值记为$\langle\rangle_0$,即

$$\langle\psi_0|H'|\psi_0\rangle = \langle H'\rangle_0, \quad \langle\psi_0|H'^2|\psi_0\rangle = \langle H'^2\rangle_0$$

等等. 令试探波函数 $\psi(\lambda)$满足归一化条件

$$\langle\psi(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle = 1 \tag{2}$$

即得

$$N^2 = 1/(1 + 2\lambda\langle H'\rangle_0 + \lambda^2\langle H'^2\rangle_0) \tag{3}$$

在 $\psi(\lambda)$中,能量平均值为

$$\begin{aligned} E(\lambda) =& \langle\psi|H|\psi\rangle \\ =& N^2\langle(1 + \lambda H')(H_0 + H')(1 + \lambda H')\rangle_0 \\ =& N^2(E_0 + \langle H'\rangle_0 + 2\lambda E_0\langle H'\rangle_0 \\ &+ 2\lambda\langle H'^2\rangle_0 + \lambda^2\langle H'H_0H'\rangle_0 + \lambda^2\langle H'^3\rangle_0) \end{aligned} \tag{4}$$

其中

$$\begin{aligned} 2H'H_0H' =& H'[H_0, H'] + H'^2H_0 \\ &+ H_0H'^2 - [H_0, H']H' \\ \langle H'H_0H'\rangle_0 =& E_0\langle H'^2\rangle_0 \\ &+ \frac{1}{2}\langle[H', [H_0, H']]\rangle_0 \end{aligned} \tag{5}$$

代入式(4),得到

$$\begin{aligned} E(\lambda) =& E_0 + \langle H'\rangle_0 + N^2\{2\lambda\langle H'^2\rangle_0 - 2\lambda(\langle H'\rangle_0)^2 \\ &+ \lambda^2\langle H'^3\rangle_0 + \frac{\lambda^2}{2}\langle[H', [H_0, H']]\rangle_0 \\ &- \lambda^2\langle H'\rangle_0\langle H'^2\rangle_0\} \end{aligned}$$

略去三级小量($\langle H'^3\rangle_0$, $\langle H'\rangle_0\langle H'^2\rangle_0$ 等等),即得

$$E(\lambda)=E_0+\langle H'\rangle_0+2\lambda\langle H'^2\rangle_0-2\lambda(\langle H'\rangle_0)^2$$

$$+\frac{\lambda^2}{2}\langle[H',[H_0,H']]\rangle_0 \tag{6}$$

由极值条件 $\partial E/\partial\lambda=0$,求得最佳 λ 为

$$\lambda=-\frac{\langle H'^2\rangle_0-(\langle H'\rangle_0)^2}{\frac{1}{2}\langle[H',[H_0,H']]\rangle_0}$$

$$=\frac{\langle H'^2\rangle_0-(\langle H'\rangle_0)^2}{E_0\langle H'^2\rangle_0-\langle H'H_0H'\rangle_0} \tag{7}$$

代入式(6),即得 $E(\lambda)$极小值为

$$E=E_0+\langle H'\rangle_0-\frac{2[\langle H'^2\rangle_0-(\langle H'\rangle_0)^2]^2}{\langle[H',[H_0,H']]\rangle} \tag{8}$$

$$=E_0+\langle H'\rangle_0+\frac{[\langle H'^2\rangle_0-(\langle H'\rangle_0)^2]^2}{E_0\langle H'^2\rangle_0-\langle H'H_0H'\rangle_0} \tag{8'}$$

此即以式(1)为试探波函数时,基态能级的上限. 公式中各项平均值,均系对微扰前的基态(非简并)ψ_0 而言.

9.17 转动惯量为 I,电偶极矩为 D 的空间转子,自由转动时,能量算符为 $H_0=l^2/2I$. 当此转子受到均匀电场(沿 z 方向)$\mathscr{E}$ 作用后,能量算符变成

$$H=H_0+H'=\frac{l^2}{2I}-D\mathscr{E}\cos\theta \tag{1}$$

(a) 写出 H_0 的本征值和本征函数,说明能级的简并度;

(b) 视 H' 为微扰,求基态能级的微扰修正(二级近似);

(c) 取试探波函数为

$$\psi(\lambda)=N(1+\lambda H')\psi_0 \tag{2}$$

其中 ψ_0 为自由转动时的基态波函数. 用变分法求基态能级近似值(准确到 $\mathscr{E}^2$量级),并和微扰论结果比较.

解 (a) H_0 的本征函数为 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$，记成 $|lm\rangle$. 能级为

$$E_l = l(l+1)\hbar^2/2I, \quad l = 0,1,2,\cdots \tag{3}$$

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 $E_0=0$，$\psi_0=Y_{00}=1/\sqrt{4\pi}$，是非简并的.

(b) 微扰 $H'=-D\mathscr{E}\cos\theta$，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

$$E_0^{(1)} = \langle H'\rangle_0 = -D\mathscr{E}\langle\cos\theta\rangle_0 = 0 \tag{4}$$

$$E_0^{(2)} = \sum_{l,m}{}' |\langle lm|H'|00\rangle|^2/(E_0 - E_l) \tag{5}$$

由于

$$\cos\theta Y_{00} = \frac{\cos\theta}{\sqrt{4\pi}} = \frac{1}{\sqrt{3}}Y_{10} \tag{6}$$

式(5)中有贡献的项为 $(l,m)=(1,0)$，因此

$$E_0^{(2)} = -\frac{|D\mathscr{E}\langle 10|\cos\theta|00\rangle|^2}{E_1} = -\frac{1}{3}\frac{\mathscr{E}^2D^2I}{\hbar^2} \tag{7}$$

基态能级为

$$E = E_0 + E_0^{(1)} + E_0^{(2)} = -\frac{1}{3}\frac{\mathscr{E}^2D^2I}{\hbar^2} \tag{8}$$

(c) 取式(2)为试探波函数. 用变分法求基态能级近似值，可以利用上题的式(8′)，其中 $\langle H'\rangle_0=0$，

$$\langle H'^2\rangle_0 = D^2\mathscr{E}^2\langle 00|\cos^2\theta|00\rangle$$

$$= D^2\mathscr{E}^2\frac{1}{3}\langle 10|10\rangle = \frac{1}{3}D^2\mathscr{E}^2$$

$$\langle H'H_0H'\rangle_0 = D^2\mathscr{E}^2\langle 00|\cos\theta\cdot H_0\cdot\cos\theta|00\rangle$$

$$= \frac{1}{3}D^2\mathscr{E}^2\langle 10|H_0|10\rangle$$

$$=\frac{1}{3}D^2\mathscr{E}^2E_1=\frac{1}{3}D^2\mathscr{E}^2\frac{\hbar^2}{I}$$

代入上题的式(8′),即得

$$E=E_0-\frac{1}{3}\frac{\mathscr{E}^2D^2I}{\hbar^2}=-\frac{1}{3}\frac{\mathscr{E}^2D^2I}{\hbar^2} \tag{9}$$

和微扰论结果一致. 另外,利用上题式(7),λ 最佳值为

$$\lambda=-I/\hbar^2 \tag{10}$$

代入式(2),即得

$$\psi=N\left(1+\frac{ID}{\hbar^2}\mathscr{E}\cos\theta\right)\mathrm{Y}_{00}$$

$$\approx\mathrm{Y}_{00}+\frac{1}{\sqrt{3}}\frac{ID\mathscr{E}}{\hbar^2}\mathrm{Y}_{10}.\ (\text{取 } N\sim 1) \tag{11}$$

按照微扰论一级近似,基态波函数为

$$\psi\approx\psi_0+\sum_{l,m}{}'\frac{\langle lm|H'|00\rangle}{E_0-E_1}\mathrm{Y}_{lm}$$

$$=\mathrm{Y}_{00}-\frac{\langle 10|H'|00\rangle}{E_1}\mathrm{Y}_{10}$$

$$=\mathrm{Y}_{00}+\frac{ID\mathscr{E}}{\sqrt{3}\,\hbar^2}\mathrm{Y}_{10} \tag{12}$$

式(11)与(12)完全一致. 正因为所取试探波函数的函数形式刚好是微扰论的一级近似波函数,所以变分法求得的能级等于微扰论二级近似.

9.18 氢原子的 Hamilton 量为

$$H_0=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2-\frac{e^2}{r}=\frac{p^2}{2\mu}-\frac{e^2}{r} \tag{1}$$

如沿 z 方向加上均匀电场 $\mathscr{E}$(当作微扰),能量算符变成

$$H = H_0 + H' = H_0 + e\mathscr{E}z \tag{2}$$

如取试探波函数为

$$\psi(\lambda, r) = N(1 + \lambda e\mathscr{E}z)\psi_0(r) \tag{3}$$

其中 ψ_0 为微扰前的基态波函数，即 $\psi_0 = \psi_{100}$. 试用变分法求基态能级的上限和电极化率，并和微扰论结果比较.

解 微扰前，基态能级和基态波函数为

$$E_0 = -\frac{e^2}{2a_0} = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \tag{4}$$

$$\psi_0 = \psi_{100} = (\pi a_0^3)^{-1/2} e^{-r/a_0}$$

$$a_0 = \hbar^2/\mu e^2 (\text{Bohr 半径}) \tag{5}$$

试探波函数式(3)即

$$\psi(\lambda, r) = N(1 + \lambda H')\psi_0 \tag{3'}$$

这正是题 9.16 所取的试探函数，因此准确到 $\mathscr{E}^2$ 量级的基态能级上限，可以按题 9.16 式(8)或(8′)算出. 对于本题，以式(8)较容易. 有关对易式为

$$[H_0, H'] = \frac{e\mathscr{E}}{2\mu}[p^2, z] = -\mathrm{i}\hbar\frac{e\mathscr{E}}{\mu}p_z$$

$$[H', [H_0, H']] = -\mathrm{i}\hbar\frac{e^2\mathscr{E}^2}{\mu}[z, p_z] = \hbar^2 e^2\mathscr{E}^2/\mu$$

因此

$$\langle [H', [H_0, H']] \rangle_0 = \hbar^2 e^2 \mathscr{E}^2/\mu \tag{6}$$

另外，容易算出

$$\langle H' \rangle_0 = e\mathscr{E}\langle z \rangle_0 = 0 \tag{7}$$

$$\langle H'^2 \rangle_0 = e^2\mathscr{E}^2\langle z^2 \rangle_0$$

$$= \frac{1}{3}e^2\mathscr{E}^2\langle r^2 \rangle_0 = e^2\mathscr{E}^2 a_0^2 \tag{8}$$

代入题 9.16 式(7)、(8)，即得

$$\lambda = -2a_0/e^2 = 1/E_0 \tag{9}$$

$$E = E_0 - 2\mathscr{E}^2 a_0^3 \tag{10}$$

$$\psi = N\left(1 - \frac{2a_0}{e^2}e\mathscr{E}z\right)\psi_0 \tag{11}$$

式(11)作为近似的基态波函数，已不再是球对称的. 电偶极矩平均值为(取 $N\sim 1$)

$$\langle D_z\rangle = \langle\psi|(-ez)|\psi\rangle = 4\mathscr{E}a_0\langle z^2\rangle_0 = 4\mathscr{E}a_0^3 \tag{12}$$

极化率为

$$\alpha = \frac{\langle D_z\rangle}{\mathscr{E}} = -\frac{\partial^2 E}{\partial\mathscr{E}^2} = 4a_0^3 \tag{13}$$

微扰论的计算结果(参看题 8.20)为

$$E = E_0 - \frac{9}{4}\mathscr{E}^2 a_0^3$$

$$\langle D_z\rangle = \frac{9}{2}\mathscr{E}a_0^3$$

$$\alpha = \frac{9}{2}a_0^3$$

变分法所得能级略高于微扰论结果，$\langle D_z\rangle$ 及 α 则略小于后者.

9.19 题 8.26 曾用微扰论方法处理“一维氦原子”问题. 试用变分法处理同样的问题.

解 采用自然单位后，体系 Hamilton 量可以表示成

$$H = -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right) - \delta(x_1) - \delta(x_2)$$

$$+ \frac{1}{Z}\delta(x_1 - x_2)$$

$$= T_1 + T_2 + V_1 + V_2 + V_{12} \tag{1}$$

取试探波函数为

$$\psi(\lambda, x_1, x_2) = \lambda e^{-\lambda|x_1| - \lambda|x_2|} \tag{2}$$

(已归一化),H 中各项的平均值为

$$\langle T_1 \rangle = \langle T_2 \rangle = \frac{\lambda}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} e^{-\lambda|x|} \right|^2 \mathrm{d}x = \frac{\lambda^2}{2} \tag{3}$$

$$\langle V_1 \rangle = \langle V_2 \rangle = -\lambda \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\lambda|x|} \delta(x) \mathrm{d}x = -\lambda \tag{4}$$

$$\langle V_{12} \rangle = \frac{\lambda^2}{Z} \int_{-\infty}^{\infty} \int e^{-2\lambda|x_1| - 2\lambda|x_2|} \delta(x_1 - x_2) \mathrm{d}x_1 \mathrm{d}x_2$$

$$= \frac{2\lambda^2}{Z} \int_0^{\infty} e^{-4\lambda x_1} \mathrm{d}x_1 = \frac{\lambda}{2Z} \tag{5}$$

合起来,即得

$$E(\lambda) = \langle H \rangle = \lambda^2 - 2\lambda + \frac{\lambda}{2Z} \tag{6}$$

由极值条件求得 λ 的最佳值为

$$\lambda = 1 - \frac{1}{4Z} \tag{7}$$

相应的能量值为

$$E = -\left(1 - \frac{1}{4Z}\right)^2 \tag{8}$$

换到普通单位,为

$$E = -\frac{Z^2 e^2}{a_0} \left(1 - \frac{1}{4Z}\right)^2 = -\frac{e^2}{a_0} \left(Z - \frac{1}{4}\right)^2 \tag{9}$$

微扰论结果(参看题 8.26)为

$$E' = -\frac{e^2}{a_0} \left(Z^2 - \frac{Z}{2}\right)$$

变分法结果比微扰论结果低$\frac{1}{16}e^2/a_0$.

如所周知,三维氦原子(核电荷 Ze)的简单变分法结果是

$$E=-\frac{e^2}{a_0}\left(Z-\frac{5}{16}\right)^2$$

和式(9)只有微小的差别.①

9.20 质量 m,电荷 q 的粒子在中心力场 $V(r)$ 中运动,$r\to\infty$ 处 $V(r)\to 0$. 已知粒子处于能量本征态

$$\psi_0=Are^{-r/a},\qquad a>0 \tag{1}$$

A 为归一化常数.

(a) 求能量 E_0,角动量 l 以及势能 $V(r)$;

(b) 沿 z 方向加弱电场 $\mathscr{E}$,取试探波函数为

$$\psi=(C_1+C_2z)\psi_0 \tag{2}$$

用变分法求能量本征值(准确到 $\mathscr{E}^2$ 量级);

(c) 求诱导电偶极矩和电极化率.

解 (a) ψ_0 为径向函数,与 θ、φ 无关,所以角动量 $l=0$. 将式(1)代入能量本征方程

$$H_0\psi_0=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(r)\right]\psi_0=E_0\psi_0 \tag{3}$$

得到

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}(r\psi_0)+V(r)\psi_0=E_0\psi_0 \tag{3'}$$

化简后,得到

① 参考曾谨言,《量子力学》卷 I(科学出版社,1997),§ 13.2.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2}{r^2}-\frac{4}{ar}+\frac{1}{a^2}\right)+V(r)=E_0 \tag{4}$$

令 $r\to\infty$，由于 $V(\infty)=0$，即得

$$E_0=-\hbar^2/2ma^2 \tag{5}$$

代入式(4)，即得

$$V(r)=\frac{\hbar^2}{m}\left(\frac{1}{r^2}-\frac{2}{ar}\right) \tag{6}$$

另外，由归一化条件

$$\int\psi_0^2\mathrm{d}\tau=4\pi\int_0^\infty\psi_0^2r^2\mathrm{d}r=1$$

容易求出

$$A^2=1/3\pi a^5 \tag{7}$$

除 $r=0$ 外，ψ_0 没有节点，所以 ψ_0 应该就是基态波函数.

(b) 视外电场 $\mathscr{E}$ 为微扰，总能量算符可以写成

$$H=H_0+H' \tag{8}$$

其中

$$H_0=T+V=\frac{p^2}{2m}+V(r) \tag{9}$$

$$H'=-\boldsymbol{D}\cdot\mathscr{E}=-q\mathscr{E}z \tag{10}$$

试探波函数式(2)亦即为

$$\psi(\lambda,r)=N(1+\lambda H')\psi_0 \tag{11}$$

这正是题 9.16 的试探波函数类型. 容易算出

$$\langle H'\rangle_0=\langle\psi_0|H'|\psi_0\rangle=0$$

$$\langle H'^2\rangle_0=q^2\mathscr{E}^2\langle\psi_0|z^2|\psi_0\rangle=\frac{5}{2}\mathscr{E}^2q^2a^2 \tag{12}$$

$$[H', [H_0, H']] = \mathscr{E}^2 q^2 \hbar^2 / m$$

利用题 9.16 式(7)和(8),即得

$$\lambda = -5ma^2/\hbar^2 \tag{13}$$

$$E = E_0 - \frac{25}{2}\frac{\mathscr{E}^2 q^2 ma^4}{\hbar^2}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2ma^2} - \frac{25}{2}\frac{\mathscr{E}^2 q^2 ma^4}{\hbar^2} \tag{14}$$

将 λ 值代入式(11),即得(取 $N \approx 1$)

$$\psi \approx \left(1 + 5\frac{\mathscr{E} qma^2}{\hbar^2} z\right)\psi_0 \tag{15}$$

(c) 诱导电偶极矩为

$$\langle D_z \rangle = \langle \psi | qz | \psi \rangle$$

$$= 10\frac{\mathscr{E} q^2 ma^2}{\hbar^2}\langle z^2 \rangle_0 = 25\mathscr{E}\frac{mq^2 a^4}{\hbar^2} \tag{16}$$

极化率为

$$\alpha = \frac{\langle D_z \rangle}{\mathscr{E}} = -\frac{\partial^2 E}{\partial \mathscr{E}^2} = 25\frac{mq^2 a^4}{\hbar^2} \tag{17}$$

9.21 考虑一个多电子原子或分子,总能量包括各电子和原子核的动能以及粒子间的 Coulomb 势能(忽略自旋和相对论效应). 以 E_0 和 ψ_0 表示体系的基态能级和基态波函数.

(a) 设 $\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N)$ 为 ψ_0 的某种近似,并已求出在 ψ 态下动能平均值为 T,势能平均值为 $-U$ ($U>0$). 取试探波函数为

$$\psi(\lambda, \boldsymbol{r}) = \lambda^{3N/2}\psi(\lambda \boldsymbol{r}_1, \lambda \boldsymbol{r}_2, \cdots, \lambda \boldsymbol{r}_N) \tag{1}$$

($\lambda^{3N/2}$ 为归一化常数,λ 为变分参数.)求 λ 及基态能级的上限,用 T 及 U 表示.

(b) 如 $\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N)$即真正的基态波函数 ψ_0，求 T、U 及 E_0 的关系.

解 (a) 动能算符为

$$\sum_i \frac{1}{2m_i} \boldsymbol{p}_i^2 = -\hbar^2 \sum_i \frac{1}{2m_i} \nabla_i^2 \tag{2}$$

根据定义，

$$T(\lambda) = -\hbar^2 \sum_i \frac{1}{2m_i} \int \psi^* (\boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_N)$$

$$\cdot \nabla_i^2 \psi(\boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_N) \mathrm{d}^3 x_1 \cdots \mathrm{d}^3 x_N$$

因此，对于 $\psi(\lambda, \boldsymbol{r})$，动能平均值为

$$T = -\hbar^2 \sum_i \frac{1}{2m_i} \lambda^{3N} \int \psi^* (\lambda \boldsymbol{r}_1, \cdots, \lambda \boldsymbol{r}_N)$$

$$\cdot \nabla_i^2 \psi(\lambda \boldsymbol{r}_1, \cdots, \lambda \boldsymbol{r}_N) \mathrm{d}^3 x_1 \cdots \mathrm{d}^3 x_N$$

$$= -\lambda^2 \hbar^2 \sum_i \frac{1}{2m_i} \int \psi^* (\xi_1, \cdots, \xi_N)$$

$$\cdot \nabla_{\xi_i}^2 \psi(\xi_1, \cdots, \xi_N) \mathrm{d}^3 \xi_1 \cdots \mathrm{d}^3 \xi_N = \lambda^2 T \tag{3}$$

其中

$$\xi_i = \lambda \boldsymbol{r}_i, \quad \nabla_{\xi_i}^2 = \frac{1}{\lambda^2} \nabla_i^2, \quad \mathrm{d}^3 \xi_i = \lambda^3 \mathrm{d}^3 x_i$$

类似地，由于 Coulomb 势能 V 和粒子间距离成反比，可得 $\psi(\lambda, \boldsymbol{r})$ 态下势能平均值为

$$-U(\lambda) = \int V |\psi(\lambda, \boldsymbol{r})|^2 \mathrm{d}^3 x_1 \cdots \mathrm{d}^3 x_N = -\lambda U \tag{4}$$

因此，$\psi(\lambda, \boldsymbol{r})$态下总能平均值为

$$E(\lambda) = T(\lambda) - U(\lambda) = \lambda^2 T - \lambda U \tag{5}$$

由极值条件 $\partial E / \partial \lambda = 0$ 可得 λ 最佳值为

$$\lambda_0 = U/2T \tag{6}$$

$E(\lambda)$最小值为

$$E(\lambda_0) = -U^2/4T \tag{7}$$

此即所求基态能级的上限.

(b) 如 $\psi(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N)$即真正的基态 ψ_0,应有 $\lambda_0=1$,因此

$$U = 2T \tag{8}$$

$$E_0 = T - U$$

$$= -T = \frac{1}{2}U \tag{9}$$

亦即

$$T = -E_0,\ U = -2E_0 \tag{9'}$$

这就是位力定理的结果.

9.22 类氦离子由原子核(电荷 Ze)和两个电子组成. 如略去原子核的动能,体系的总能量算符可以写成

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - Ze^2\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right)$$

$$+ \frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|} \tag{1}$$

其中最后一项为两电子间的 Coulomb 作用势,记为 V_{12}.

(a) 视 V_{12}为微扰,用微扰论(一级近似)求基态能级的粗略近似. (b) 用变分法求基态能级上限.

解 将总能量算符写成

$$H = H_0(1) + H_0(2) + V_{12} \tag{1'}$$

其中

$$H_0(i) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2 - \frac{Ze^2}{r_i},\quad i = 1,2 \tag{2}$$

H_0 相当于类氢离子的能量算符，其本征函数记为 ψ_{nlm}.

忽略 V_{12} 时，$H_0(1)+H_0(2)$ 的基态波函数为

$$\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \psi_{100}(\boldsymbol{r}_1)\psi_{100}(\boldsymbol{r}_2)$$

$$= \frac{Z^3}{\pi a_0^3} \mathrm{e}^{-(r_1+r_2)Z/a_0} \tag{3}$$

其中 $a_0=\hbar^2/me^2$ 为 Bohr 半径. 容易算出

$$\langle \frac{1}{r_1} \rangle = \langle \frac{1}{r_2} \rangle = \frac{Z}{a_0} \tag{4}$$

$$\langle V_{12} \rangle = \frac{5}{8} Z \frac{e^2}{a_0} \tag{5}$$

$$\langle \frac{p_1^2}{2m} \rangle = \langle \frac{p_2^2}{2m} \rangle = \frac{Z^2 e^2}{2a_0} \tag{6}$$

因此，动能及势能平均值为

$$T = \frac{1}{2m} \langle p_1^2 + p_2^2 \rangle = \frac{Z^2 e^2}{a_0} \tag{7}$$

$$-U = -Ze^2 \langle \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \rangle + \langle V_{12} \rangle$$

$$= \left(-2Z^2 + \frac{5}{8} Z \right) \frac{e^4}{a_0} \tag{8}$$

基态能级的微扰论一级近似为

$$E_0 = \langle H \rangle = T - U = \left(-Z^2 + \frac{5}{8} Z \right) \frac{e^2}{a_0} \tag{9}$$

对于氦原子，$Z=2$，上式给出 $E_0=-2.75e^2/a_0$.

(b) 用变分法求基态能级上限，取归一化的试探波函数为

$$\psi(\lambda, \boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \lambda^3 \psi_{100}(\lambda \boldsymbol{r}_1)\psi_{100}(\lambda \boldsymbol{r}_2)$$

$$= \frac{\lambda^3 Z^3}{\pi a_0^3} \mathrm{e}^{-(r_1+r_2)\lambda Z/a_0} \tag{10}$$

根据上题式(6)、(7)，最佳 λ 及相应能量平均值为

$$\lambda_0 = U/2T = 1 - \frac{5}{16Z} \tag{11}$$

$$E(\lambda_0) = -U^2/4T = -\left(Z - \frac{5}{16}\right)^2 \frac{e^2}{a_0} \tag{12}$$

对于氦原子，$Z=2$，$\lambda_0=27/32$，$E(\lambda_0)=-2.8477e^2/a_0$.[①]

9.23 对于核电荷为 Ze 的中性原子，在 Thomas-Fermi 模型下，(a) 用电子密度 $\rho(r)$表达原子的总能量；(b) 证明位力定理成立.

解 (a) 在 Thomas-Fermi 模型下，如以 $\rho(r)$表示电子数密度，即在体积元 $d\tau$ 中的平均电子数记为 $\rho(r)d\tau$，则核和电子间的 Coulomb 势能为

$$V_{N-e} = -Ze^2\int \frac{1}{r}\rho(r)d\tau \tag{1}$$

电子和电子间的 Coulomb 势能为

$$V_{e-e} = \frac{e^2}{2}\int \frac{1}{|r-r'|}\rho(r)\rho(r')d\tau d\tau' \tag{2}$$

总 Coulomb 势能为

$$V = V_{N-e} + V_{e-e} \tag{3}$$

按照 Fermi 气体模型，在体积元 $d\tau$ 中，动量值在 $p-(p+dp)$ 范围内的电子数为

$$dn = 4\pi p^2 dp d\tau \frac{2}{h^3} \tag{4}$$

这些电子每一个具有动能 $p^2/2m$. 设 $d\tau$ 中作为 Fermi 气体的电子最大动量为 p_0，则 $d\tau$ 中电子数为

---

① 参考曾谨言，《量子力学》卷 I（科学出版社，1997），§ 13.1，13.2.

$$\rho d\tau = \frac{8\pi}{h^3} d\tau \int_0^{p_0} p^2 dp = \frac{p_0^3}{3\pi^2 \hbar^3} d\tau \tag{5}$$

$d\tau$ 中电子总动能为

$$dT = \frac{8\pi}{h^3} d\tau \int_0^{p_0} \frac{p^2}{2m} p^2 dp = \frac{p_0^5}{10\pi^2 \hbar^3 m} d\tau \tag{6}$$

原子中电子总动能为

$$T = \int dT = \frac{3}{10}(3\pi^2)^{2/3} \frac{\hbar^2}{m} \int [\rho(r)]^{5/3} d\tau \tag{7}$$

原子的总能量为

$$\begin{aligned} E &= T + V = T + V_{e-e} + V_{N-e} \\ &= C \int \rho^{5/3} d\tau + \frac{e^2}{2} \int \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r - r'|} d\tau d\tau' \\ &\quad - Ze^2 \int \frac{\rho(r)}{r} d\tau \end{aligned} \tag{8}$$

其中

$$C = \frac{3}{10}(3\pi^2)^{2/3} \frac{\hbar^2}{m}$$

（b）电子密度 ρ 满足“归一化条件”

$$\int \rho(r) d\tau = Z \tag{9}$$

对于原子的基态，E 应该取极小值. 如在式(8)中用试探函数 $\lambda^3 \rho(\lambda r)$ 代替 $\rho(r)$，则试探函数仍满足归一化条件(9)，而总能量则变成

$$\begin{aligned} E(\lambda) &= C\lambda^5 \int [\rho(\lambda r)]^{5/3} d\tau \\ &\quad + \frac{e^2}{2} \lambda^6 \int \frac{1}{|r - r'|} \rho(\lambda r)\rho(\lambda r') d\tau d\tau' \end{aligned}$$

$$-Ze^2\lambda^3\int\frac{1}{r}\rho(\lambda r)\mathrm{d}\tau$$

$$=\lambda^2 T+\lambda V \tag{10}$$

当 $\lambda=1$，E 应取极小值，因此

$$\left.\frac{\partial E(\lambda)}{\partial\lambda}\right|_{\lambda=1}=2T+V=0$$

亦即

$$T=-\frac{1}{2}V \tag{11}$$

此即位力定理.

9.24 利用位力定理，证明：在中性原子的 Thomas-Fermi 模型中，电子电子间的 Coulomb 能等于原子核-电子间 Coulomb 能的(−1/7)倍.

证 以 $\phi(r)$表示静电势，则

$$\phi(r)=\frac{Ze}{r}-e\int\frac{\rho(r')}{|r-r'|}\mathrm{d}\tau'=\phi_N+\phi_e \tag{1}$$

原子的总 Coulomb 势能(参看上题)可以表示成

$$V=V_{N-e}+V_{e-e}$$

$$=-\int\frac{Ze^2}{r}\rho(r)\mathrm{d}\tau+\frac{1}{2}\int\frac{e^2}{|r-r'|}\rho(r)\rho(r')\mathrm{d}\tau\mathrm{d}\tau'$$

$$=-e\int\left(\phi_N+\frac{1}{2}\phi_e\right)\rho(r)\mathrm{d}\tau \tag{2}$$

在中性原子的 Thomas-Fermi 模型中，r 处 $\mathrm{d}\tau$ 中电子的最大动能为

$$\frac{p_0^2}{2m}=e\phi(r) \tag{3}$$

因此，利用上题式(5)、(6)，可得 $\mathrm{d}\tau$ 中电子动能为

$$dT = \frac{p_0^5}{10\pi^2 \hbar^3 m} d\tau = \frac{3}{5} [e\phi(r)]\rho(r)d\tau \tag{4}$$

原子中电子总动能为

$$T = \frac{3}{5} e \int \phi(r)\rho(r)d\tau \tag{5}$$

$$= -\left(\frac{3}{5} V_{N-e} + \frac{6}{5} V_{e-e}\right) \tag{5'}$$

由位力定理，应有

$$T = -\frac{1}{2} V = -\frac{1}{2}(V_{N-e} + V_{e-e}) \tag{6}$$

联合式(5')及(6)，即得

$$V_{e-e} = -\frac{1}{7} V_{N-e} \tag{7}$$

证明完毕.①

① 本题及上题，参考曾谨言，《量子力学》卷 I（科学出版社，1997），§ 13.3，Landau 等，《量子力学》上册（高等教育出版社，1980），§ 70.

第十章　量子跃迁

10.1　有一量子力学体系，能级和能量本征态记为 E_n，ψ_n，$n=0,1,2,\cdots$. $t\leqslant 0$ 时，体系处于基态 ψ_0. $t\geqslant 0$ 时受到微扰 $H'(x,t)=F(x)e^{-t/\tau}$ 作用. 试用一级微扰论计算微扰作用后($t\gg\tau$)体系处于激发态 ψ_n 的概率.

解　$t\geqslant 0$ 时波函数可以表示成

$$\psi(t)=\sum_n C_n(t)\psi_n e^{-i\omega_n t} \tag{1}$$

其中 $\omega_n=E_n/\hbar$. 微扰论计算(一级近似)给出[1]

$$C_n(t)=\frac{1}{i\hbar}\int_0^t H'_{n0}(t)e^{i\omega_{n0}t}dt \tag{2}$$

$|C_n(t)|^2$ 即时刻 t 体系处于 ψ_n 态的概率. 显然

$$H'_{n0}(t)=F_{n0}e^{-t/\tau} \tag{3}$$

其中

$$F_{n0}=\langle\psi_n|F(x)|\psi_0\rangle$$

代入式(2)即得

$$C_n(t)=\frac{F_{n0}}{i\hbar}\int_0^t e^{i\omega_{n0}t-t/\tau}dt$$

$$=F_{n0}(e^{i\omega_{n0}t-t/\tau}-1)/\left(-\hbar\omega_{n0}-\frac{i\hbar}{\tau}\right) \tag{4}$$

当 $t\gg\tau$，可取 $e^{-t/\tau}\approx 0$，因此

---

1. 参看曾谨言，《量子力学》卷 I (科学出版社，1997)，§ 12.1.

$$C_n(t \gg \tau) = F_{n0} / \left(\hbar\omega_{n0} + \frac{\mathrm{i}\hbar}{\tau} \right) \tag{5}$$

$$|C_n(t \gg \tau)|^2 = \frac{|F_{n0}|^2}{(\hbar\omega_{n0})^2 + \dfrac{\hbar^2}{\tau^2}} = \frac{|F_{n0}|^2}{(E_n - E_0)^2 + \dfrac{\hbar^2}{\tau^2}} \tag{6}$$

此即所求概率.

微扰论成立的条件为$|C_n|^2 \ll 1$,即

$$|F_{n0}| \ll (E_n - E_0), \text{ 或 } |F_{n0}| \ll \hbar/\tau \tag{7}$$

10.2 氢原子处于基态,受到脉冲电场

$$\mathscr{E}(t) = \mathscr{E}_0 \delta(t) \tag{1}$$

作用,$\mathscr{E}_0$为常数.试用微扰论计算电子跃迁到各激发态的概率以及仍停留在基态的概率.

解 自由氢原子的 Hamilton 量记为 H_0,能级记为 E_n,能量本征态记为 ψ_n(n 代表 nlm 三个量子数),满足本征方程

$$H_0\psi_n = E_n\psi_n \tag{2}$$

如以电场方向作为 z 轴,微扰作用势可以表示成

$$H' = e\mathscr{E}(t) \cdot \boldsymbol{r} = e\mathscr{E}_0 z\delta(t) \tag{3}$$

在电场作用过程中,波函数满足 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r}, t) = H_0\psi + H'\psi \tag{4}$$

初始条件为

$$\psi(t = 0^-) = \psi_1 \equiv \psi_{100}(\boldsymbol{r}) \tag{5}$$

令

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = \sum_n C_n(t)\psi_n(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar} \tag{6}$$

初始条件(5)亦即

$$C_n(0^-) = \delta_{n1} \tag{5'}$$

以式(6)代入式(4),但微扰项 $H'\psi$ 中 ψ 取初始值 ψ_1(这是微扰论的实质性要点!)即得

$$\sum_n \mathrm{i}\hbar\psi_n \frac{\mathrm{d}C_n}{\mathrm{d}t}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar} = H'\psi_1 = e\mathscr{E}_0 z\psi_1\delta(t)$$

以 ψ_n^* 左乘上式两端,并对全空间积分,即得

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}C_n}{\mathrm{d}t} = e\mathscr{E}_0 z_{n1}\delta(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}E_n t/\hbar}$$

再对 t 积分,由 $t=0^-\to t>0$,即得

$$C_n(t) = \frac{e\mathscr{E}_0}{\mathrm{i}\hbar}z_{n1}, \quad (n \neq 1) \tag{7}$$

因此 $t>0$ 时(即脉冲电场作用后)电子已经跃迁到 ψ_n 态的概率为

$$P_n = |C_n(t)|^2 = \left(\frac{e\mathscr{E}_0}{\hbar}\right)^2 |z_{n1}|^2 \tag{8}$$

根据选择定则($\Delta l=1$, $\Delta m=0$),终态量子数必须是

$$(nlm) = (n10)$$

即电子只跃迁到各 np 态($l=1$),而且磁量子数 $m=0$.

跃迁到各激发态的概率总和为

$$\sum_n{}' P_n = \left(\frac{e\mathscr{E}_0}{\hbar}\right)^2 \sum_n{}' |z_{n1}|^2$$

$$= \left(\frac{e\mathscr{E}_0}{\hbar}\right)^2 \left[\sum_n |z_{n1}|^2 - |z_{11}|^2\right] \tag{9}$$

其中

$$z_{11} = \langle\psi_1|z|\psi_1\rangle = 0, \quad (z \text{ 为奇宇称})$$

$$\sum_n |z_{n1}|^2 = \sum_n \langle \psi_1 | z | \psi_n \rangle \langle \psi_n | z | \psi_1 \rangle$$

$$= \langle \psi_1 | z^2 | \psi_1 \rangle = \frac{1}{3} \langle \psi_1 | r^2 | \psi_1 \rangle = a_0^2 \tag{10}$$

a_0 为 Bohr 半径. 代入式(9)即得

$$\sum_n{}' P_n = (e\mathscr{E}_0 a_0 / \hbar)^2 \tag{11}$$

电场作用后电子仍留在基态的概率为

$$1 - \sum_n{}' P_n = 1 - (e\mathscr{E}_0 a_0 / \hbar)^2 \tag{12}$$

10.3 氢原子处于基态，受到脉冲电场

$$\mathscr{E}(t) = \mathscr{E}_0 \delta(t)$$

作用，$\mathscr{E}_0$为常数. 求作用后($t>0$)发现氢原子仍处于基态的概率(精确解).

解 基态是球对称的，所求概率显然和电场方向无关，也和自旋无关. 以$\mathscr{E}_0$方向作为 z 轴，电场对原子的作用能可以表示成

$$H' = ez\mathscr{E}(t) = e\mathscr{E}_0 z\delta(t) \tag{1}$$

以 H_0 表示自由氢原子的 Hamilton 量，则电场作用过程中总 Hamilton 量为

$$H = H_0 + H' = H_0 + e\mathscr{E}_0 z\delta(t) \tag{2}$$

电子的波函数满足 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r}, t) = (H_0 + H')\psi(\boldsymbol{r}, t) \tag{3}$$

初始条件为

$$\psi(t = 0^-) = \psi_{100}(r) \equiv \psi_0 \tag{4}$$

为了便于用初等方法求解式(3)，我们采取 $\mathscr{E}(t)$的下列表示形式：

$$\mathscr{E}(t)=\begin{cases}\mathscr{E}_0/\tau, & 0\leqslant t\leqslant\tau;\\ 0, & t<0,\ t>\tau,\end{cases}$$

$$(\tau\to 0^+) \tag{5}$$

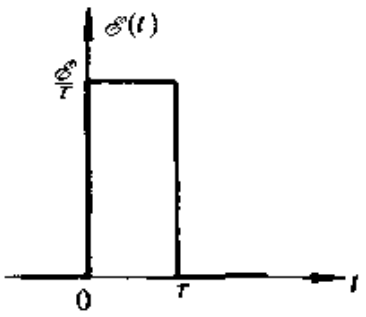


图 10.3

$\mathscr{E}(t)$的图形如图 10.3 所示. 注意

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathscr{E}(t)\mathrm{d}t=\mathscr{E}_0\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(t)\mathrm{d}t$$

$$=\mathscr{E}_0 \tag{6}$$

式(5)显然也给出同样的结果. 利用式(5), 可以将式(1)等价地表示成

$$H'=\begin{cases}e\mathscr{E}_0 z/\tau, & 0\leqslant t\leqslant\tau;\\ 0, & t<0,\ t>\tau,\end{cases}$$

$$(\tau\to 0^+) \tag{1'}$$

下面将在相互作用表象中求解方程(3),即令

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\mathrm{e}^{H_0t/\mathrm{i}\hbar}\phi(\boldsymbol{r},t) \tag{7}$$

代入式(3),并用算符 $\mathrm{e}^{-H_0t/\mathrm{i}\hbar}$左乘之,得到

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi(\boldsymbol{r},t)=\tilde{H}'\phi(\boldsymbol{r},t) \tag{8}$$

其中

$$\tilde{H}'=\mathrm{e}^{-H_0t/\mathrm{i}\hbar}H'\mathrm{e}^{H_0t/\mathrm{i}\hbar} \tag{9}$$

一般来说,H'和 H_0 不对易,但因 H'仅在 $0\leqslant t\leqslant\tau$ 才不为 0,故当 $\tau\to 0^+$ 时

$$\mathrm{e}^{H_0t/\mathrm{i}\hbar}\to 1$$

(条件是 $H_0\tau/\hbar\ll 1$),因此 $\tilde{H}'\to H'$,代入式(8)即得

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi(\boldsymbol{r},t)=H'\phi(\boldsymbol{r},t) \tag{10}$$

再利用式(1′),即得

$$t<0,\ t>\tau,\quad \frac{\partial}{\partial t}\phi(\boldsymbol{r},t)=0$$

$$0\leqslant t\leqslant\tau,\quad \frac{\partial}{\partial t}\phi(\boldsymbol{r},t)=\frac{e\mathscr{E}_0 z}{\mathrm{i}\hbar\kappa}\phi(\boldsymbol{r},t) \tag{11}$$

初始条件(4)等价于

$$\phi(\boldsymbol{r},0)=\phi_0\equiv\psi_{100}(r) \tag{4′}$$

方程(11)满足初始条件的解显然是

$$\phi(\boldsymbol{r},t)=\phi_0\exp\left(\frac{e\mathscr{E}_0 z}{\mathrm{i}\hbar\kappa}t\right),\quad 0\leqslant t\leqslant\tau \tag{12}$$

当 $t>\tau$(电场作用以后),$\phi(\boldsymbol{r},t)$不再变化,为

$$\phi(\boldsymbol{r},t)=\phi(\boldsymbol{r},\tau)=\phi_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\kappa z},\ \kappa=e\mathscr{E}_0/\hbar \tag{13}$$

代入式(7),即得

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\mathrm{e}^{H_0t/\mathrm{i}\hbar}\,\psi_{100}(r)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\kappa z},\quad t>0 \tag{14}$$

这是方程(3)的精确解.

$t>0$ 时(电场作用以后)发现电子仍处于基态的概率为

$$P=|\langle\psi_{100}|\psi(\boldsymbol{r},t)\rangle|^2=|\langle\psi_{100}|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\kappa z}\psi_{100}\rangle|^2 \tag{15}$$

计算中利用了公式

$$\langle\psi_{100}|\mathrm{e}^{H_0t/\mathrm{i}\hbar}=\langle\psi_{100}|\mathrm{e}^{E_1t/\mathrm{i}\hbar}$$

利用基态波函数的具体形式

$$\psi_{100}=(\pi a_0^3)^{-1/2}\mathrm{e}^{-r/a_0} \tag{16}$$

容易算出

$$\langle\psi_{100}|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\kappa z}\psi_{100}\rangle=\frac{1}{\pi a_0^3}\int\mathrm{e}^{-2r/a_0}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\kappa r\cos\theta}r^2\mathrm{d}r\mathrm{d}\Omega$$

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

$$=\frac{1}{\left(1+\frac{1}{4}\kappa^2a_0^2\right)^2} \tag{17}$$

a_0 为 Bohr 半径. 将上式代入式(15),即得所求概率为

$$P=|\langle\psi_{100}|\psi(r,t)\rangle|^2=\frac{1}{\left(1+\frac{1}{4}\kappa^2a_0^2\right)^4} \tag{18}$$

如电场很弱,即 $\kappa a_0\ll 1$,上式给出

$$P\approx 1-\kappa^2a_0^2=1-(e\mathscr{E}_0a_0/\hbar)^2 \tag{19}$$

这正是上题用微扰论求得的结果,$\kappa^2a_0^2$ 为跃迁到各激发态的概率总和.

10.4 有一个二能级体系,Hamilton 量记为 H_0,能级和能量本征态记为 E_1, E_2; ψ_1, ψ_2. 设 $E_1<E_2$. $t\leqslant 0$ 时,体系处于状态 ψ_1, $t\geqslant 0$ 时,体系受到微扰 H' 作用,设

$$H'_{11}=\alpha,\quad H'_{22}=\beta,\quad H'_{12}=H'_{21}=\gamma$$

求 $t>0$ 时体系处于 ψ_2 态的概率.

解 $t\geqslant 0$ 时,体系的 Hamilton 量为 $H=H_0+H'$, 其矩阵表示(H_0 表象)为

$$H=H_0+H'=\begin{bmatrix}E_1+\alpha & \gamma\\ \gamma & E_2+\beta\end{bmatrix} \tag{1}$$

设 H 的本征函数为

$$\psi_E=C_1\psi_1+C_2\psi_2\Rightarrow\begin{bmatrix}C_1\\ C_2\end{bmatrix} \tag{2}$$

代入本征方程

$$H\psi_E = E\psi_E \tag{3}$$

得到

$$\begin{cases}(E_1 + \alpha - E)C_1 + \gamma C_2 = 0\\ \gamma C_1 + (E_2 + \beta - E)C_2 = 0\end{cases} \tag{4}$$

上式存在非平庸解的条件为

$$\begin{vmatrix}E_1 + \alpha - E & \gamma\\ \gamma & E_2 + \beta - E\end{vmatrix}$$

$$= (E_1 + \alpha - E)(E_2 + \beta - E) - \gamma^2 = 0$$

由此解出

$$E = \frac{1}{2}[E_1 + \alpha + E_2 + \beta$$

$$\pm \sqrt{(E_2 + \beta - E_1 - \alpha)^2 + 4\gamma^2}] = E_\pm \tag{5}$$

令

$$\omega_1 = \frac{E_1 + \alpha}{\hbar}, \quad \omega_2 = \frac{E_2 + \beta}{\hbar}, \quad \omega = \omega_2 - \omega_1 \tag{6}$$

式(5)可以写成

$$E_\pm = \frac{\hbar}{2}(\omega_1 + \omega_2 \pm \sqrt{\omega^2 + 4\gamma^2/\hbar^2}) \tag{5'}$$

当 $E=E_+$，由式(4)求得

$$C_2 = \frac{\hbar}{2\gamma}(\omega + \sqrt{\omega^2 + 4\gamma^2/\hbar^2})C_1$$

取 $C_1=1$，即得相应的能量本征函数(未归一化)为

$$\psi_{E_+} = \psi_1 + \frac{\hbar}{2\gamma}(\omega + \sqrt{\omega^2 + 4\gamma^2/\hbar^2})\psi_2 \tag{7}$$

当 $E=E_-$，类似地可以求得

$$\psi_{E_-} = \psi_1 + \frac{\hbar}{2\gamma}(\omega - \sqrt{\omega^2 + 4\gamma^2/\hbar^2})\psi_2 \tag{8}$$

$t=0$ 时，体系的初始状态为

$$\psi(t=0) = \psi_1 = \frac{\Omega-\omega}{2\Omega}\psi_{E_+} + \frac{\Omega+\omega}{2\Omega}\psi_{E_-} \tag{9}$$

其中

$$\Omega = \sqrt{\omega^2 + 4\gamma^2/\hbar^2} \tag{10}$$

因此 $t\geqslant 0$ 时波函数为

$$\psi(t) = \frac{\Omega-\omega}{2\Omega}\psi_{E_-}e^{iE_-t/\hbar} + \frac{\Omega+\omega}{2\Omega}\psi_{E_+}e^{-iE_-t/\hbar} \tag{11}$$

以式(5′)、(7)、(8)代入上式，即得

$$\psi(t) = \psi_1\left(\cos\frac{\Omega t}{2} + i\frac{\omega}{\Omega}\sin\frac{\Omega t}{2}\right)e^{\frac{1}{2}(\omega_1+\omega_2)t}$$

$$+ \psi_2\left(-i\frac{2\gamma}{\hbar\Omega}\sin\frac{\Omega t}{2}\right)e^{-\frac{1}{2}(\omega_1+\omega_2)t} \tag{12}$$

体系处于 ψ_2 态的概率为

$$|\langle\psi_2|\psi(t)\rangle|^2 = \left(\frac{2\gamma^2}{\hbar\Omega}\right)\sin^2\frac{\Omega t}{2} \tag{13}$$

10.5 上题中，如能级是简并的，令 $E_1=E_2=E_0$. 设微扰矩阵元 $H'_{11}=H'_{22}=0$，$H'_{12}=H'_{21}=\gamma$. 如 $t=0$ 时 $\psi=\psi_1$，求 $\psi(t)$，并和经典共振现象作对比讨论.

解 $t\geqslant 0$ 时，Hamilton 量为(H_0 表象)

$$H = H_0 + H' = \begin{bmatrix} E_0 & \gamma \\ \gamma & E_0 \end{bmatrix} \tag{1}$$

容易求得 H 的本征值和本征函数为

$$E_+ = E_0 + \gamma, \quad \psi_{E_+} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1 + \psi_2)$$

$$E_- = E_0 - \gamma, \quad \psi_{E_-} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1 - \psi_2) \tag{2}$$

初始波函数可以表示成

$$\psi(t=0) = \psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{E_+} + \psi_{E_-}) \tag{3}$$

因此

$$\psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{E_+} e^{-iE_+ t/\hbar} + \psi_{E_-} e^{-iE_- t/\hbar})$$

$$= \left(\psi_1 \cos\frac{\gamma t}{\hbar} - i\psi_2 \sin\frac{\gamma t}{\hbar}\right) e^{-iE_0 t/\hbar} \tag{4}$$

上式表明，由于微扰 H' 的作用，体系将在原来的两个简并态之间振荡. $t=0$ 时，$\psi=\psi_1$，$t=\pi\hbar/2\gamma$，$\psi\sim\psi_2$；再经过同样的时间，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.

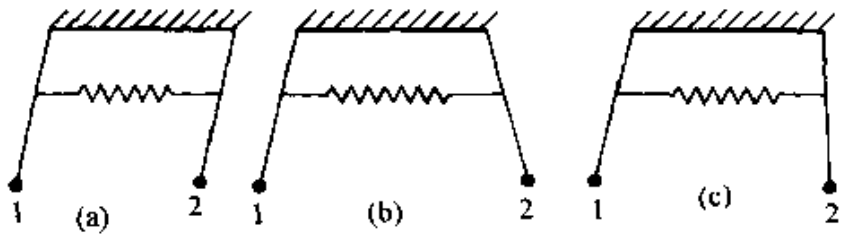


图 10.5

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，用一条很轻的弹簧联结起来，从而形成耦合摆. 图 10.5(a) 二者同相($\sim\psi_{E_+}$)，图 10.5(b)二者反相($\sim\psi_{E_-}$)，这两种振荡是稳定的(~定态). 图 10.5(c)所示振荡，相当于开始时摆 1 有角偏离，而摆 2 静止于平衡位置. 此后，由于弹簧的耦合，两摆不断交换能量，来回振荡($\sim\psi(t)$)，这是一种不稳定振荡.

10.6 有一个自旋 1/2，磁矩为 μ，电荷为 0 的粒子，置于磁场 $\boldsymbol{B}$ 中. 开始时($t=0$)磁场沿 z 方向，$\boldsymbol{B}=\boldsymbol{B}_0=(0,\ 0,\ B_0)$，粒子处于 σ_z 的本征态$\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$，即 $\sigma_z=-1$. $t>0$ 时再加上沿 x 方向的较弱的磁场 $\boldsymbol{B}_1=(B_1,\ 0,\ 0)$，从而

$$\boldsymbol{B}=\boldsymbol{B}_0+\boldsymbol{B}_1=(B_1,\ 0,\ B_0)$$

求 $t>0$ 时粒子的自旋态，以及测得自旋“向上”($\sigma_z=1$)的概率.

解 粒子的磁矩算符可以表示成

$$\mu=\mu\sigma \tag{1}$$

σ 为 Pauli 自旋算符. 磁场对粒子的作用能为

$$H=-\boldsymbol{B}\cdot\mu=-\mu(B_1\sigma_x+B_0\sigma_z) \tag{2}$$

在 σ_z 表象中，H 的矩阵表示为

$$H=-\mu B_1\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}-\mu B_0\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}$$

$$=-\mu\begin{bmatrix}B_0 & B_1\\ B_1 & -B_0\end{bmatrix} \tag{2'}$$

以下求 H 的本征值和本征函数. 设本征函数为

$$\psi=C_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+C_2\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}C_1\\C_2\end{pmatrix} \tag{3}$$

本征方程为 $H\psi=E\psi$，即

$$-\mu\begin{bmatrix}B_0 & B_1\\ B_1 & -B_0\end{bmatrix}\begin{pmatrix}C_1\\C_2\end{pmatrix}=E\begin{pmatrix}C_1\\C_2\end{pmatrix} \tag{4}$$

能级方程为

$$\det(E-H)=\begin{vmatrix} E+\mu B_0 & \mu B_1 \\ \mu B_1 & E-\mu B_0 \end{vmatrix}=0 \tag{5}$$

令

$$\mu B_0=\hbar\omega_0,\quad \mu B_1=\hbar\omega_1,\quad \sqrt{\omega_0^2+\omega_1^2}=\omega \tag{6}$$

由式(5)容易解出

$$E=\pm\hbar\omega \tag{7}$$

将 E 之值代回式(4),即可求出如下本征函数:

$$E=\hbar\omega,\qquad E=-\hbar\omega$$

$$C_1/C_2=-\omega_1/(\omega+\omega_0),\qquad C_1/C_2=\omega_1/(\omega-\omega_0)$$

$$\psi_+=\begin{pmatrix}-\omega_1\\ \omega+\omega_0\end{pmatrix},\qquad \psi_-=\begin{pmatrix}\omega_1\\ \omega-\omega_0\end{pmatrix} \tag{8}$$

注意,这两个本征函数并未归一化.

将 $t=0$ 时初始波函数按能量本征函数展开,

$$\psi(t=0)=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\frac{1}{2\omega}(\psi_++\psi_-) \tag{9}$$

因此,$t>0$ 时波函数

$$\psi(t)=\frac{1}{2\omega}(\psi_+\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}+\psi_-\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t})$$

$$=\mathrm{i}\,\frac{\omega_1}{\omega}\sin\omega t\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$

$$+\left(\cos\omega t-\mathrm{i}\,\frac{\omega_0}{\omega}\sin\omega t\right)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \tag{10}$$

注意 $\psi(t)$ 满足归一化条件

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle=1$$

在时刻 $t>0$，测得粒子自旋“向上”($\sigma_z=1$)的概率为

$$P(\sigma_z=1)=\left|\mathrm{i}\frac{\omega_1}{\omega}\sin\omega t\right|^2=\frac{\omega_1^2}{\omega^2}\sin^2\omega t$$

$$=\frac{B_1^2}{B_0^2+B_1^2}\left[\sin\left(\frac{\mu}{\hbar}\sqrt{B_0^2+B_1^2}t\right)\right]^2 \tag{11}$$

本题可以视为 10.4 题的一个实例.

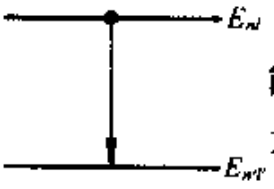


图 10.7

10.7 电子在中心力场中运动，能级为 E_{nl}，能量本征态取为(H, l^2, J^2, J_z)的共同本征态，记为 ψ_{nljm_j}. 求电偶极自发跃迁选择定则.

解 设电子由能量本征态 ψ_{nljm_j} 跃迁至 $\psi_{n'l'jm'_j}$，电偶极自发跃迁速率为①

$$A_{n\to n'}=\frac{4}{3}\frac{e^2\omega^3}{\hbar c^3}|\boldsymbol{r}_{n'n}|^2 \tag{1}$$

其中 n、n' 各代表 4 个量子数，$\omega=(E_{nl}-E_{n'l'})/\hbar$. 上式中

$$|\boldsymbol{r}_{n'n}|^2=|x_{n'n}|^2+|y_{n'n}|^2+|z_{n'n}|^2 \tag{2}$$

三个矩阵元中至少要有一个不等于 0，跃迁才是允许的.

ψ_{nljm_j} 可以表示成

$$\psi_{nljm_j}=R_{nl}(r)\phi_{ljm_j}(\theta,\ \varphi,\ s_z) \tag{3}$$

其中 R_{nl} 为径向波函数，ϕ_{ljm_j} 为(l^2, J^2, J_z)的共同本征函数，可以分成两类②

$$\phi^A_{jmj}=\frac{1}{\sqrt{2l+1}}\begin{pmatrix}\sqrt{l+m+1} & Y_{lm}\\ \sqrt{l-m} & Y_{lm+1}\end{pmatrix}$$

① 参看曾谨言，《量子力学》卷 I（科学出版社，1997），§ 12.3.

② 参看曾谨言《量子力学》卷 I（科学出版社，1997），§ 8.2.

$$j=l+\frac{1}{2},\ m_j=m+\frac{1}{2}$$

$$\phi^B_{jm_j}=\frac{1}{\sqrt{2l'+1}}\begin{pmatrix}\sqrt{l'-m} & Y_{l'm}\\ \sqrt{l'+m+1} & Y_{l'm+1}\end{pmatrix}$$

$$j=l'-\frac{1}{2},\ m_j=m+\frac{1}{2} \tag{4}$$

利用式(3),矩阵元 $r_{n'n}$ 可以分离变量地表示成

$$r_{n'n}=\langle\phi_{l'j'm'_j}|\frac{r}{r}|\phi_{ljm_j}\rangle\int_0^\infty R_{n'l'}R_{nl}r^3dr \tag{5}$$

其中径向积分通常与选择定则无关.

利用公式(见题 6.21)

$$2\frac{r}{r}=\sigma\sigma_r+\sigma_r\sigma,\quad(\sigma_r=\sigma\cdot r/r) \tag{6}$$

以及 6.33 题证明的公式

$$\sigma_r\phi^A_{jm_j}=-\phi^B_{jm_j},\quad \sigma_r\phi^B_{jm_j}=-\phi^A_{jm_j} \tag{7}$$

即得

$$\langle\phi^B_{j'm'_j}|\frac{r}{r}|\phi^B_{jm_j}\rangle=\langle\phi^A_{j'm'_j}|\sigma_r\frac{r}{r}\sigma_r|\phi^A_{jm_j}\rangle$$

$$=\langle\phi^A_{j'm'_j}|\frac{r}{r}|\phi^A_{jm_j}\rangle.\quad(\text{利用了 }\sigma_r^2=1). \tag{8}$$

类似地,可得

$$\langle\phi^B_{j'm'_j}|\frac{r}{r}|\phi^A_{jm_j}\rangle=\langle\phi^A_{j'm'_j}|\frac{r}{r}|\phi^B_{jm_j}\rangle \tag{9}$$

再利用式(6),可得

$$-2\langle\phi^A_{j'm'_j}|\frac{r}{r}|\phi^A_{jm_j}\rangle=\langle\phi^A_{j'm'_j}|\sigma|\phi^B_{jm_j}\rangle$$

$$+\langle\phi^B_{j'm'_j}|\sigma|\phi^A_{jm_j}\rangle \tag{10}$$

$$-2\langle\phi^B_{j'm'_j}|\frac{r}{r}|\phi^A_{jm_j}\rangle=\langle\phi^A_{j'm'_j}|\sigma|\phi^A_{jm_j}\rangle$$

$$+\langle\phi^B_{j'm'_j}|\sigma|\phi^B_{jm_j}\rangle \tag{11}$$

利用 Pauli 矩阵σ的具体形式

$$\sigma_x=\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix},\ \sigma_y=\begin{bmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{bmatrix}$$

$$\sigma_z=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}$$

以及 Y_{lm}的正交归一性和式(4),就可算出这些矩阵元. 这样计算较之直接利用 Y_{lm}的递推公式要方便得多,特别是有利于确定选择定则. 但是定性地利用 Y_{lm}的递推公式还是有益的,它们是

$$\begin{aligned}&\frac{z}{r}Y_{lm}=\cos\theta Y_{lm}\to Y_{l+1m},\ Y_{l-1m}\\ &\frac{x\pm iy}{r}Y_{lm}=\sin\theta e^{\pm i\varphi}Y_{lm}\to Y_{l+1m\pm1},Y_{l-1m\pm1}\end{aligned} \tag{12}$$

由此可见,量子数 l 的选择定则是 $\Delta l=\pm1$.

下面分类讨论.

1° $E_{nl}\to E_{n'l'}$, $l'=l+1$, $\Delta l=l'-l=1$

(a) $\phi^A\to\phi^A$ 型

$$j=l+\frac{1}{2},\quad j'=l'+\frac{1}{2}=j+1$$

$$\Delta j=j'-j=1$$

$\phi^A_{jm_j}$中球谐函数的阶为 l; $\phi^A_{j'm'_j}$中,阶为$(l+1)$.

$\phi^B_{jm_j}$中,阶为$(l+1)$;$\phi^B_{j'm'_j}$中,阶为$(l+2)$.

σ 作用的结果. 并不改变球谐函数的阶. 属于不同阶的球谐函数是互相正交的. 因此式(10)右端第二项为 0,从而

$$\langle \phi^{A}_{j'm'_j} | \frac{r}{r} | \phi^{A}_{jm_j} \rangle = -\frac{1}{2} \langle \phi^{A}_{j'm'_j} | \sigma | \phi^{B}_{jm_j} \rangle$$

$$= -\frac{1}{2(2l+3)} \int d\Omega \begin{pmatrix} \sqrt{l+m'+2}\,Y_{l+1,m'} \\ \sqrt{l-m'+1}\,Y_{l+1,m'+1} \end{pmatrix}^{+}$$

$$\cdot \sigma \begin{pmatrix} -\sqrt{l-m+1}\,Y_{l+1,m} \\ \sqrt{l+m+2}\,Y_{l+1,m+1} \end{pmatrix}$$

容易看出，仅当 $m'=m$、$m\pm1$ 时，上式才不等于 0，故 m_j 的选择定则为

$$\Delta m_j = m'_j - m_j = 0, \pm 1 \tag{13}$$

当 $\Delta m_j=0$，

$$\langle \phi^{A}_{j'm_j} | \frac{x}{r} | \phi^{A}_{jm_j} \rangle = 0$$

$$\langle \phi^{A}_{j'm_j} | \frac{y}{r} | \phi^{A}_{jm_j} \rangle = 0$$

$$\langle \phi^{A}_{j'm_j} | \frac{z}{r} | \phi^{A}_{jm_j} \rangle = \frac{1}{2l+3} \sqrt{(l+m+2)(l-m+1)}$$

当 $\Delta m_j=1$，

$$\langle \phi^{A}_{j'm_j+1} | \frac{x}{r} | \phi^{A}_{jm_j} \rangle$$

$$= i \langle \phi^{A}_{j'm_j+1} | \frac{y}{r} | \phi^{A}_{jm_j} \rangle$$

$$= -\frac{1}{2(2l+3)} \sqrt{(l+m+3)(l+m+2)}$$

$$\langle \phi^{A}_{j'm_j+1} | \frac{z}{r} | \phi^{A}_{jm_j} \rangle = 0 \tag{14}$$

当 $\Delta m_j=-1$，

$$\langle \phi^{A}_{j'm_j-1} | \frac{x}{r} | \phi^{A}_{jm_j} \rangle$$

$$= -\mathrm{i}\langle\phi^{A}_{j'm_j\ -1}|\ \frac{y}{r}|\phi^{A}_{jm_j}\rangle$$

$$=\frac{1}{2(2l+3)}\sqrt{(l-m+2)(l-m+1)}$$

$$\langle\phi^{A}_{j'm_j-1}|\ \frac{z}{r}|\phi^{A}_{jm_j}\rangle = 0$$

(b) $\phi^{B}\to\phi^{B}$ 型

$$j = l-\frac{1}{2},\quad j' = l'-\frac{1}{2} = j+1$$

$$\Delta j = j'-j = 1$$

根据式(8)，只需将情况(a)所得公式中 l 换成 $(l-1)$，即可得到相应的矩阵元公式. m_j 的选择定则仍为 $\Delta m_j=0,+1$. 当 $\Delta m_j=0$，

$$\langle\phi^{B}_{j'm_j}|\ \frac{z}{r}|\phi^{B}_{jm_j}\rangle$$

$$=\frac{1}{2l+1}\sqrt{(l+m+1)(l-m)}$$

$\frac{x}{r}$，$\frac{y}{r}$ 矩阵元为 0.

当 $\Delta m_j=1$，

$$\langle\phi^{B}_{j'm_j+1}|\ \frac{x}{r}|\phi^{B}_{jm_j}\rangle = \mathrm{i}\langle\phi^{B}_{j'm_j+1}|\ \frac{y}{r}|\phi^{B}_{jm_j}\rangle$$

$$=-\frac{1}{2(2l+1)}\sqrt{(l+m+2)(l+m+1)}$$

$\frac{z}{r}$ 矩阵元为 0. (15)

当 $\Delta m_j=-1$，

$$\langle\phi^{B}_{j'm_j-1}|\ \frac{x}{r}|\phi^{B}_{jm_j}\rangle = -\mathrm{i}\langle\phi^{B}_{j'm_j-1}|\ \frac{y}{r}|\phi^{B}_{jm_j}\rangle$$

$$=\frac{1}{2(2l+1)}\sqrt{(l-m+1)(l-m)}$$

$\frac{z}{r}$ 矩阵元为 0.

(c) $\phi^A \to \phi^B$ 型

$$j = l + \frac{1}{2}, \quad j' = l' - \frac{1}{2} = l + \frac{1}{2} = j$$

$$\Delta j = j' - j = 0$$

根据式(11),取

$$j = j' = l + \frac{1}{2}$$

利用球谐函数的正交性,易得 m_j 的选择定则仍为 $\Delta m_j = 0, \pm 1$. r/r的矩阵元中不等于 0 的是

$$\Delta m_j = 0, \langle \phi^B_{jm_j} | \frac{z}{r} | \phi^A_{jm_j} \rangle = -\frac{2m+1}{(2l+1)(2l+3)}$$

$$\Delta m_j = 1, \langle \phi^B_{jm_j+1} | \frac{x}{r} | \phi^A_{jm_j} \rangle = \mathrm{i} \langle \phi^B_{jm_j+1} | \frac{y}{r} | \phi^A_{jm_j} \rangle$$

$$= -\sqrt{(l+m+2)(l-m)}/(2l+1)(2l+3) \qquad (16)$$

$$\Delta m_j = -1, \langle \phi^B_{jm_j-1} | \frac{x}{r} | \phi^A_{jm_j} \rangle = -\mathrm{i} \langle \phi^B_{jm_j-1} | \frac{y}{r} | \phi^A_{jm_j} \rangle$$

$$= -\sqrt{(l+m+1)(l-m+1)}/(2l+1)(2l+3)$$

(d) $\phi^B \to \phi^A$ 型

$$j = l - \frac{1}{2}, \quad j' = l' + \frac{1}{2} = j + 2$$

$$\Delta j = j' - j = 2$$

由式(9)及(11)得到

$$\langle \phi^A_{j'm_j} | \frac{r}{r} | \phi^B_{jm_j} \rangle = -\frac{1}{2} \langle \phi^A_{j'm_j} | \sigma | \phi^A_{jm_j} \rangle$$

$$-\frac{1}{2} \langle \phi^B_{j'm_j} | \sigma | \phi^B_{jm_j} \rangle$$

球谐函数的阶，$\phi^A_{j'm_j}$中为$(l+1)$(即l')，$\phi^A_{jm_j}$中为$(l-1)\left(\text{即 } j-\frac{1}{2}\right)$，$\phi^B_{j'm_j}$中为$(l+2)\left(\text{即 } j'+\frac{1}{2}\right)$，$\phi^B_{jm_j}$中为$l\left(\text{即 } j+\frac{1}{2}\right)$. 由球谐函数的正交性，易见上式右端等于0. 故$\Delta j=2$的跃迁是禁戒的.

总结以上结果，跃迁$E_{nl}\to E_{nl'}$($\Delta l=1$)的选择定则为

$$\boxed{\Delta j=1,0;\ \Delta m_j=0,\pm 1} \tag{17}$$

$\Delta j=1$相应于$\phi^A\to\phi^A$型或$\phi^B\to\phi^B$型. $\Delta j=0$相应于$\phi^A\to\phi^B$型，由于是从"l,s平行"状态跃迁到"l,s反平行"状态，虽然量子数l增加1，总角动量量子数j不变.

2° $E_{nl}\to E_{n'l'}$，$l'=l-1$，$\Delta l=l'-l=-1$

计算类似于1°，选择定则为

$$\Delta j=-1,0;\ \Delta m_j=0,\pm 1 \tag{18}$$

$\Delta j=-1$相应于$\phi^A\to\phi^A$型或$\phi^B\to\phi^B$型. $\Delta j=0$相应于$\phi^B\to\phi^A$型.

3° 如电子原来处于能级E_{nl}上角动量状态$\phi^A_{jm_j}$中，如计算跃迁到能级$E_{n'l+1}$的总概率，则需将矩阵元$\langle\phi_{j'm'_j}|\frac{\boldsymbol{r}}{r}|\phi^A_{jm_j}\rangle$的绝对值平方对一切可能的终态($n'l'$固定，$l'=l+1$)求和. 利用上面得到的公式，容易算出

$$\begin{aligned}
&\sum_{j'm'_j}\left|\langle\phi_{j'm'_j}|\frac{\boldsymbol{r}}{r}|\phi^A_{jm_j}\rangle\right|^2\\
&=\sum_{m'_j}\left|\langle\phi^A_{j+1,m'_j}|\frac{\boldsymbol{r}}{r}|\phi^A_{jm_j}\rangle\right|^2\\
&\quad+\sum_{m'_j}\left|\langle\phi^B_{jm'_j}|\frac{\boldsymbol{r}}{r}|\phi^A_{jm_j}\rangle\right|^2\\
&=\frac{l+1}{2l+1}
\end{aligned} \tag{19}$$

类似地，如电子原来处于能级E_{nl}上$\phi^B_{jm_j}$态中，计算其跃迁到能级

$E_{n'l+1}$的总概率时，仍有

$$\sum_{j'm'_j}\left|\langle\phi_{j'm'_j}|\frac{\boldsymbol{r}}{r}|\phi^B_{jm_j}\rangle\right|^2$$

$$=\sum_{m'_j}\left|\langle\phi^B_{j+1,m'_j}|\frac{\boldsymbol{r}}{r}|\phi^B_{jm_j}\rangle\right|^2$$

$$=\frac{l+1}{2l+1} \tag{20}$$

亦即从能级 E_{nl}上任何一个能量本征态跃迁到能级 $E_{n'l+1}$的总概率是一样的. 不难验证，如不考虑自旋自由度，这个概率仍不变. 原因是：电偶极跃迁的作用和自旋无关.

10.8 不考虑自旋，原子中的电子状态可以表示为

$$\psi_{nlm}=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

对于初态为 s 态(能级 E_{nl}，$l=0$)，终态为 p 态(能级 $E_{n'l'}$，$l'=1$)的电偶极自发跃迁，求终态磁量子数 $m=1,0,-1$ 的分支比.

解 初态波函数为

$$\psi_{n00}=R_{n0}(r)Y_{00}=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}R_{n0}(r) \tag{1}$$

终态波函数为

$$\psi_{n'1m}=R_{n'1}(r)Y_{1m}(\theta,\varphi),\quad m=1,0,-1 \tag{2}$$

由于三种终态的径向波函数相同，跃迁分支比等于电偶极矩的矩阵元$\langle 1m|\boldsymbol{r}|00\rangle$的绝对值平方之比. 由于

$$\boldsymbol{r}=x\boldsymbol{e}_1+y\boldsymbol{e}_2+z\boldsymbol{e}_3$$

$$=r\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{1-1}-Y_{11})\boldsymbol{e}_1\right.$$

$$\left.+\frac{i}{\sqrt{2}}(Y_{11}+Y_{1-1})\boldsymbol{e}_2+Y_{10}\boldsymbol{e}_3\right] \tag{3}$$

利用 Y_{lm}的正交归一性，容易求出

$$|\langle 10|\boldsymbol{r}|00\rangle|^2 = \left|\frac{1}{\sqrt{3}}r\boldsymbol{e}_3\right|^2 = \frac{r^2}{3}$$

$$|\langle 11|\boldsymbol{r}|00\rangle|^2 = \left|\frac{r}{\sqrt{6}}(\mathrm{i}\boldsymbol{e}_2 - \boldsymbol{e}_1)\right|^2$$

$$= \frac{r^2}{6} \times 2 = \frac{r^2}{3}$$

$$|\langle 1-1|\boldsymbol{r}|00\rangle|^2 = \left|\frac{r}{\sqrt{6}}(\mathrm{i}\boldsymbol{e}_2 + \boldsymbol{e}_1)\right|^2 = \frac{r^2}{6} \times 2 = \frac{r^2}{3} \quad (4)$$

由此可见，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.

10.9 同上题，设能级只取决于主量子数 n. 设初态为(nlm)，终态为$(n'l'm')$，n、n'、l、m 均已给定.

(a) 求跃迁到 l' 相同，m' 不同的各个终态的分支比；

(b) 求 l' 不同的各个终态(对 m' 求和)的分支比.

解 令 $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{r}/r$，则有

$$n_x \pm \mathrm{i}n_y = \frac{1}{r}(x \pm \mathrm{i}y) = \sin\theta \mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\varphi}$$

$$n_z = z/r = \cos\theta \quad (1)$$

$$\boldsymbol{r}/r = \boldsymbol{n} = n_x\boldsymbol{e}_1 + n_y\boldsymbol{e}_2 + n_z\boldsymbol{e}_3$$

$$= \frac{1}{2}(n_x + \mathrm{i}n_y)(\boldsymbol{e}_1 - \mathrm{i}\boldsymbol{e}_2)$$

$$+ \frac{1}{2}(n_x - \mathrm{i}n_y)(\boldsymbol{e}_1 + \mathrm{i}\boldsymbol{e}_2) + n_z\boldsymbol{e}_3 \quad (2)$$

利用 Y_{lm}的递推公式

$$n_z Y_{lm} = \cos\theta Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

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

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

$$(n_x \pm in_y)Y_{lm}=\sin\theta\, e^{\pm i\varphi}Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$$=\mp\left[\frac{(l\pm m+2)(l\pm m+1)}{(2l+3)(2l+1)}\right]^{\frac{1}{2}}Y_{l+1,m\pm1}$$

$$\pm\left[\frac{(l\mp m)(l\mp m-1)}{(2l-1)(2l+1)}\right]^{\frac{1}{2}}Y_{l-1,m\pm1} \qquad (3)$$

易见 $\boldsymbol{n}$(即 $\boldsymbol{r}/r$)的矩阵元中不等于 0 者为

$\langle l\pm1,m|n_z|lm\rangle$, $\langle l\pm1,\ m+1|(n_x+in_y)|lm\rangle$, $\langle l\pm1,\ m-1|(n_x-in_y,|lm\rangle$.

(a) 终态 $l'=l+1$,

$m'=m$,

$$|\langle l+1,\ m|\boldsymbol{n}|lm\rangle|^2=\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+3)(2l+1)}$$

$m'=m\pm1$, (4)

$$|\langle l+1,\ m\pm1|\boldsymbol{n}|lm\rangle|^2=\frac{(l\pm m+2)(l\pm m+1)}{2(2l+3)(2l+1)}$$

$$\sum_{m'}|\langle l+1,\ m'|\boldsymbol{n}|lm\rangle|^2=\frac{l+1}{2l+1} \qquad (5)$$

所以跃迁到终态 $m'=m+1$, m, $m-1$ 的分支比为

$$(l+m+2)(l+m+1):2(l+m+1)(l-m+1):(l-m+2)(l-m+1)$$

例如初态 $l=m=0$, 终态 $l'=1$, 则 $m'=1,0,-1$ 的分支比为 2 : 2 : 2, 此即上题结果.

(b) 终态 $l'=l-1$,

$m'=m$,

$$|\langle l-1, m|\boldsymbol{n}|lm\rangle|^2 = \frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}$$

$m' = m \pm 1$, (6)

$$|\langle l-1, m\pm 1|\boldsymbol{n}|lm\rangle|^2 = \frac{(l\mp m)(l\mp m-1)}{2(2l+1)(2l-1)}$$

$$\sum_{m'} |\langle l-1, m'|\boldsymbol{n}|lm\rangle|^2 = \frac{l}{2l+1} \tag{7}$$

所以跃迁到终态 $m'=m+1$, m, $m-1$ 的分支比为

$$(l-m)(l-m-1) : 2(l+m)(l-m) :$$

$$(l+m)(l+m-1)$$

式(5)和(7)给出终态 $l'=l+1$, $l-1$ 分支比为

$$(l+1) : l \tag{8}$$

注意这个分支比和初态磁量子数 m 无关. 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.

另外,考虑到选择定则 $\Delta l = l'-l = \pm 1$,由式(5),(7)即得

$$\sum_{l',m'} |\langle l'm'|\boldsymbol{n}|lm\rangle|^2 = 1 \tag{9}$$

这个结果可以利用 Y_{lm} 的正交归一性和完备性公式

$$\sum_{l',m'} |l'm'\rangle\langle l'm'| = 1 \tag{10}$$

直接导出,如下:

$$\sum_{l',m'} |\langle l'm'|\boldsymbol{n}|lm\rangle|^2$$

$$= \sum_{l',m'} \langle lm|\boldsymbol{n}|l'm'\rangle \cdot \langle l'm'|\boldsymbol{n}|lm\rangle$$

$$= \langle lm|\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{n}|lm\rangle = \langle lm|lm\rangle = 1$$

10.10 以平面线偏振光射向处于基态的氢原子，造成电子能级跃迁 1s→2p. 考虑自旋，但忽略 $2p_{1/2}$和 $2p_{3/2}$的能量差. 设基态电子自旋"向上"($s_z=\hbar/2$).

(a) 求终态为 $2p_{3/2}$和 $2p_{1/2}$的分支比，它与入射光的偏振方向无关. (b) 设入射光的电场沿 z 方向偏振，求终态为 $2p_{3/2}$时

$$m_j=\frac{3}{2},\ \frac{1}{2},\ -\frac{1}{2},\ -\frac{3}{2}$$

的分支比. (c)设光沿 x 方向入射，为非偏振光，求终态为 $2p_{3/2}$时各 m_j 态的分支比.

解 (a) 以$\mathscr{E}$ 表示入射光的电场. 以$|i\rangle$表示电子的初态，$|f\rangle$表示终态，在电偶极跃迁中，跃迁概率和$|\langle f|\mathscr{E}\cdot\boldsymbol{r}|i\rangle|^2$ 成正比. 对于各终态来说，径向波函数相同，因此，讨论分支比时可以不管矩阵元中的径向积分，而只考虑波函数的角动量部分. $(l^2,\ l_z)$的共同本征态记为$|lm\rangle$；s_z 本征态记为$|\frac{1}{2}\rangle$，$|-\frac{1}{2}\rangle$；$(l^2,\ \boldsymbol{J}^2,\ J_z)$的共同本征态记为$|ljm_j\rangle$. 后者的非耦合角动量表象展开式为

初态：$l=m=0$，$j=\frac{1}{2}$，$m_j=s_z=\frac{1}{2}$

$$|i\rangle=\left|0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle=\left|00\right|\left\rangle\ \frac{1}{2}\right\rangle \tag{1}$$

终态：$l=1$，$j=l\pm\frac{1}{2}=\frac{3}{2},\ \frac{1}{2}$，$m_j=\pm\frac{3}{2},\ \pm\frac{1}{2}$. $j=\frac{3}{2}$，共有 4 种状态，相应于 $m_j=\frac{3}{2},\ \frac{1}{2},\ -\frac{1}{2},\ -\frac{3}{2}$，

$$\left|1\ \frac{3}{2}\ \frac{3}{2}\right\rangle=|11\rangle\left|\ \frac{1}{2}\right\rangle$$

$$\left|1\ \frac{3}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}|11\rangle\left|-\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$+\sqrt{\frac{2}{3}}|10\rangle\left|\ \frac{1}{2}\right\rangle$$

$$|1\ \frac{3}{2}\ -\frac{1}{2}\rangle=\sqrt{\frac{2}{3}}|10\rangle|-\frac{1}{2}\rangle \tag{2}$$

$$+\frac{1}{\sqrt{3}}|1\ -1\rangle|\frac{1}{2}\rangle$$

$$|1\ \frac{3}{2}\ -\frac{3}{2}\rangle=|1\ -1\rangle|-\frac{1}{2}\rangle$$

$j=\frac{1}{2}$，共有 2 种状态，相应于 $m_j=\frac{1}{2}$，$-\frac{1}{2}$，

$$|1\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\rangle=\sqrt{\frac{2}{3}}|11\rangle|-\frac{1}{2}\rangle$$

$$-\frac{1}{\sqrt{3}}|10\rangle|\frac{1}{2}\rangle \tag{3}$$

$$|1\ \frac{1}{2}\ -\frac{1}{2}\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}|10\rangle|-\frac{1}{2}\rangle$$

$$-\sqrt{\frac{2}{3}}|1\ -1\rangle|\frac{1}{2}\rangle$$

式(2)中，第一式可以直接写出，其余三式可用算符$(J_x-\mathrm{i}J_y)$逐次作用于第一式而得出．式(3)中，第一式可以利用式(2)以及正交条件

$$\langle 1\ \frac{3}{2}\ \frac{1}{2}|1\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\rangle=0$$

而得出，再用$(J_x-\mathrm{i}J_y)$作用于第一式，得出第二式．

由于初态自旋状态为$|\frac{1}{2}\rangle$，计算矩阵元$\langle f|\boldsymbol{r}|i\rangle$时，有贡献的只是终态波函数中含有$|\frac{1}{2}\rangle$的项．利用公式

$$\boldsymbol{r}=x\boldsymbol{e}_1+y\boldsymbol{e}_2+z\boldsymbol{e}_3$$

$$=r\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}(\mathrm{Y}_{1-1}-\mathrm{Y}_{11})\boldsymbol{e}_1\right.$$

$$+\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(Y_{1-1}+Y_{11})\boldsymbol{e}_2+Y_{10}\boldsymbol{e}_3\Big] \tag{4}$$

容易求出

$$\begin{aligned}
&\langle 1\ \frac{3}{2}\ \frac{3}{2}|\boldsymbol{r}|i\rangle=\frac{r}{\sqrt{6}}(-\boldsymbol{e}_1+\mathrm{i}\boldsymbol{e}_2)\\
&\langle 1\ \frac{3}{2}\ \frac{1}{2}|\boldsymbol{r}|i\rangle=\frac{\sqrt{2}}{3}r\boldsymbol{e}_3\\
&\langle 1\ \frac{3}{2}-\frac{1}{2}|\boldsymbol{r}|i\rangle=\frac{\sqrt{2}}{6}r(\boldsymbol{e}_1+\mathrm{i}\boldsymbol{e}_2)\\
&\langle 1\ \frac{3}{2}-\frac{3}{2}|\boldsymbol{r}|i\rangle=0\\
&\langle 1\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}|\boldsymbol{r}|i\rangle=-\frac{r}{3}\boldsymbol{e}_3\\
&\langle 1\ \frac{1}{2}-\frac{1}{2}|\boldsymbol{r}|i\rangle=-\frac{r}{3}(\boldsymbol{e}_1+\mathrm{i}\boldsymbol{e}_2)
\end{aligned} \tag{5}$$

令

$$\boldsymbol{\mathscr{E}}=\mathscr{E}_z\boldsymbol{e}_1+\mathscr{E}_y\boldsymbol{e}_2+\mathscr{E}_x\boldsymbol{e}_3 \tag{6}$$

即得

$$\begin{aligned}
&|\langle 1\ \frac{3}{2}\ \frac{3}{2}|\ \boldsymbol{\mathscr{E}}\cdot\boldsymbol{r}|i\rangle|^2=\frac{1}{6}r^2(\mathscr{E}_x^2+\mathscr{E}_y^2)\\
&|\langle 1\ \frac{3}{2}\ \frac{1}{2}|\ \boldsymbol{\mathscr{E}}\cdot\boldsymbol{r}|i\rangle|^2=\frac{2}{9}r^2\mathscr{E}_z^2\\
&|\langle 1\ \frac{3}{2}-\frac{1}{2}|\ \boldsymbol{\mathscr{E}}\cdot\boldsymbol{r}|i\rangle|^2=\frac{1}{18}r^2(\mathscr{E}_x^2+\mathscr{E}_y^2)\\
&|\langle 1\ \frac{3}{2}-\frac{3}{2}|\ \boldsymbol{\mathscr{E}}\cdot\boldsymbol{r}|i\rangle|^2=0\\
&|\langle 1\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}|\ \boldsymbol{\mathscr{E}}\cdot\boldsymbol{r}|i\rangle|^2=\frac{1}{9}r^2\mathscr{E}_z^2
\end{aligned}$$

$$|\langle 1\ \frac{1}{2}\ -\frac{1}{2}|\ \mathscr{E}\cdot\boldsymbol{r}|i\rangle|^2=\frac{1}{9}r^2(\mathscr{E}_x^2+\mathscr{E}_y^2) \tag{7}$$

除共同的常数因子外，跃迁到 $2p_{3/2}$ 态的总概率

$$W_{3/2}\propto\sum_{m_j}|\langle 1\ \frac{3}{2}m_j|\ \mathscr{E}\cdot\boldsymbol{r}|i\rangle|^2=\frac{2}{9}r^2\mathscr{E}^2 \tag{8}$$

跃迁到 $2p_{1/2}$ 态的总概率

$$W_{1/2}\propto\sum_{m_j}|\langle 1\ \frac{1}{2}m_j|\ \mathscr{E}\cdot\boldsymbol{r}|i\rangle|^2=\frac{1}{9}r^2\mathscr{E}^2 \tag{9}$$

二者均和入射光的偏振方向无关. 分支比为

$$W_{3/2}:W_{1/2}=2:1 \tag{10}$$

(b) 入射光电场沿 z 方向偏振，这时

$$\mathscr{E}_x=0,\ \mathscr{E}_y=0,\ \mathscr{E}_z=\mathscr{E}$$

由式(7)易见，当终态为 $2p_{3/2}$ 时 $m_j=\frac{3}{2}$，$\frac{1}{2}$，$-\frac{1}{2}$，$-\frac{3}{2}$ 的分支比为 0∶1∶0∶0，即终态只能是 $(ljm_j)=\left(1\ \frac{3}{2}\ \frac{1}{2}\right)$. 这个结论可以直接利用选择定则 $\Delta m_s=0$，$\Delta m=0$，$\Delta m_j=0$(由于 z 和 J_z 对易)得出.

(c) 当入射光为沿 x 方向入射的非偏振光时，

$$\mathscr{E}_x=0,\ \langle\mathscr{E}_y^2\rangle=\langle\mathscr{E}_z^2\rangle=\frac{1}{2}\mathscr{E}^2$$

由式(7)易得，终态为 $2p_{3/2}$ 时，$m_j=\frac{3}{2}$，$\frac{1}{2}$，$-\frac{1}{2}$，$-\frac{3}{2}$ 的分支比为

$$\frac{1}{6}:\frac{2}{9}:\frac{1}{18}:0=3:4:1:0$$

10.11 用沿正 z 方向传播的右旋圆偏振光照射原子，造成原子中电子的受激跃迁. 求选择定则.

解 右旋偏振光中的电场$\mathscr{E}$的旋转方向符合右手螺旋法则. 因波长远大于原子半径,可以略去电场的空间变化(相当于只考虑电偶极跃迁). 如以$2\mathscr{E}_0$表示光波电场的振幅,则电场的时间变化为

$$\mathscr{E}_x(t) = 2\mathscr{E}_0\cos\omega t = \mathscr{E}_0 e^{i\omega t} + \mathscr{E}_0 e^{-i\omega t}$$

$$\mathscr{E}_y(t) = 2\mathscr{E}_0\sin\omega t = -i\mathscr{E}_0 e^{i\omega t} + i\mathscr{E}_0 e^{-i\omega t}$$

$$\mathscr{E}_z(t) = 0$$

$$\mathscr{E}(t) = \boldsymbol{e}_1\mathscr{E}_x(t) + \boldsymbol{e}_2\mathscr{E}_y(t)$$

$$= (\boldsymbol{e}_1 - i\boldsymbol{e}_2)\mathscr{E}_0 e^{i\omega t} + (\boldsymbol{e}_1 + i\boldsymbol{e}_2)\mathscr{E}_0 e^{-i\omega t} \tag{1}$$

光波对原子的作用能为

$$H' = e\boldsymbol{r}\cdot\mathscr{E}(t) = (x - iy)e\mathscr{E}_0 e^{-i\omega t}$$

$$+ (x + iy)e\mathscr{E}_0 e^{-i\omega t} \tag{2}$$

(a) 电子由(nlm)态$\to(n'l'm')$态,$E_n > E_{n'}$.

电子由高能级跃迁到低能级(放出光子),这时式(2)中$e^{-i\omega t}$项对跃迁产生主要贡献($\hbar\omega \sim E_n - E_{n'}$),跃迁矩阵元为$\langle n'l'm'|(x-iy)|nlm\rangle$. 根据球谐函数的递推关系(见题 11.9),易得选择定则为

$$\Delta l = l' - l = \pm 1, \quad \Delta m = m' - m = -1 \tag{3}$$

(b) 电子由(nlm)态$\to(n'l'm')$态,$E_n < E_{n'}$.

电子由低能级跃迁到高能级(吸收光子),这时式(2)中$e^{-i\omega t}$项对跃迁产生主要贡献($\hbar\omega \sim E_{n'} - E_n$),跃迁矩阵元为$\langle n'l'm'|(x+iy)|nlm\rangle$,选择定则为

$$\Delta l = l' - l = \pm 1, \ \Delta m = m' - m = +1 \tag{4}$$

以上结果可以用角动量守恒定律解释如下. 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 $m'-m=1$. 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

$$m' - m = -1$$

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.

注：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 $p=h/\lambda$，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 $|\boldsymbol{l}|\sim 0$. 所以只需要考虑光子的自旋.

10.12 根据实验测定，氢原子的 $2s_{1/2}$ 能级高于 $2p_{1/2}$ 能级 1058MHz(Lamb 移位). 试求电子从 $2s_{1/2}$ 能级到 $2p_{1/2}$ 能级的自发跃迁平均寿命.

解 电子由初态 $|i\rangle$ 自发跃迁至终态 $|f\rangle$，电偶极型跃迁的跃迁速率为

$$A_{i\to f}=\frac{4}{3}\frac{e^2\omega^3}{\hbar c^3}|\langle f|\boldsymbol{r}|i\rangle|^2 \tag{1}$$

其中 $\hbar\omega$ 为能级差，初、终态的量子数为

初态($2s_{1/2}$)：$n=2$，$l=0$，$j=\frac{1}{2}$，$m_j=m_s=\pm\frac{1}{2}$

终态($2p_{1/2}$)：$n=2$，$l=1$，$j=\frac{1}{2}$，$m_j=\pm\frac{1}{2}$

量子数关系完全符合电偶极跃迁选择定则

$$\Delta l=\pm 1,\quad \Delta j=0,\pm 1,\quad \Delta m_j=0,\pm 1$$

的要求，初态波函数有二种：

$$\psi_i=R_{20}(r)Y_{00}\cdot\alpha,\quad R_{20}(r)Y_{00}\cdot\beta \tag{2}$$

α、β 为 s_z 的本征态$\left(\text{相应于 } m_s=\frac{1}{2},\ -\frac{1}{2}\right)$，即 10.10 题中 $|\frac{1}{2}\rangle$ 和

$|-\frac{1}{2}\rangle$. 初态的自旋指向显然不影响跃迁速率和寿命，可以任选一种进行计算. 终态波函数也有二种(参看题 10.10)：

$$\psi_f = R_{21}(r)\left[\sqrt{\frac{2}{3}}Y_{11}\cdot\beta - \frac{1}{\sqrt{3}}Y_{10}\cdot\alpha\right]$$

$$\left(j=\frac{1}{2},\ m_j=\frac{1}{2}\right)$$

$$R_{21}(r)\left[\frac{1}{\sqrt{3}}Y_{10}\cdot\beta - \sqrt{\frac{2}{3}}Y_{1-1}\cdot\alpha\right] \tag{3}$$

$$\left(j=\frac{1}{2},\ m_j=-\frac{1}{2}\right)$$

计算由初态到终态的总跃迁速率时，应将式(1)对终态求和，对初态求平均. 初态平均寿命 τ 等于总跃迁速率的倒数，即

$$\frac{1}{\tau} = \sum_f \frac{4}{3}\frac{e^2\omega^3}{\hbar c^3}|\langle f|\boldsymbol{r}|i\rangle|^2 \tag{4}$$

跃迁矩阵元中，角度-自旋部分可以利用 10.8 题结果. 如取初态自旋态为 $\alpha(s_z=\hbar/2)$，容易求出

$$\sum_f |\langle f|\boldsymbol{r}|i\rangle|^2 = |r_{21,20}|^2\left[\frac{1}{3}|\langle 10|\frac{\boldsymbol{r}}{r}|00\rangle|^2 + \frac{2}{3}|\langle 1-1|\frac{\boldsymbol{r}}{r}|00\rangle|^2\right]$$

$$= |r_{21,20}|^2\left[\frac{1}{3}|\frac{1}{\sqrt{3}}\boldsymbol{e}_3|^2 + \frac{2}{3}|\frac{1}{\sqrt{6}}(\boldsymbol{e}_1+\mathrm{i}\boldsymbol{e}_2)|^2\right]$$

$$= |r_{21,20}|^2\left[\frac{1}{3}\cdot\frac{1}{3} + \frac{2}{3}\cdot\frac{2}{6}\right] = \frac{1}{3}|r_{21,20}|^2 \tag{5}$$

其中

$$r_{21,20} = \int_0^\infty R_{21}(r)rR_{20}(r)r^2\mathrm{d}r = -3\sqrt{3}\,a_0 \tag{6}$$

a_0 为 Bohr 半径. 将式(6)代入式(5),即得

$$\sum_f |\langle f|\boldsymbol{r}|i\rangle|^2 = 9a_0^2 \tag{7}$$

如取初态自旋态为 $\beta(s_z=-\hbar/2)$, 结果相同.

由式(4)得到初态平均寿命为

$$\tau = \frac{\hbar c^3}{12e^2\omega^3 a_0^2} = \frac{1}{12}\frac{\hbar c}{e^2}\left(\frac{c}{a_0}\right)^2\frac{1}{\omega^3} \tag{8}$$

以 $\omega=1058\times 2\pi\times 10^6/\mathrm{s}$ 代入上式,即得

$$\tau = 1.25\times 10^9\mathrm{s} = 39.5\text{ 年} \tag{9}$$

10.13 通过强子反应可以产生中性 K 介子. 例如

$$\pi^- + \mathrm{p} \to \Lambda^0 + \mathrm{K}^0$$

K^0 的反粒子记为$\overline{\mathrm{K}}^0$,它们的奇异量子数 S 分别为 1 和 -1,即

$$S|\mathrm{K}^0\rangle = |\mathrm{K}^0\rangle, \qquad S|\overline{\mathrm{K}}^0\rangle = -|\overline{\mathrm{K}}^0\rangle$$

K^0 介子通过弱作用发生衰变. 实验发现在 K^0 的衰变过程中可能出现$\overline{\mathrm{K}}^0$,试解释这个事实.

解 用 C 表示电荷共轭变换(或称粒子-反粒子变换),即

$$C|\mathrm{K}^0\rangle = |\overline{\mathrm{K}}^0\rangle, \quad C|\mathrm{K}^0\rangle = |\overline{\mathrm{K}}^0\rangle \tag{1}$$

如以$|\mathrm{K}^0\rangle$、$|\overline{\mathrm{K}}^0\rangle$作为基矢,建立一个表象,即取

$$|\mathrm{K}^0\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, \quad |\overline{\mathrm{K}}^0\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \tag{2}$$

则 S 和 C 的矩阵表示为

$$S = \begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}, \; C = \begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix} \tag{3}$$

在 K^0 介子的衰变过程中,奇异数 S 不守恒,而电荷共轭变换 C 是

守恒量，C 的本征态记为 $|K_S\rangle$ 和 $|K_L\rangle$，它们是

$$|K_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|K^0\rangle + |\overline{K}^0\rangle)$$

$$|K_L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|K^0\rangle - |\overline{K}^0\rangle) \tag{4}$$

容易验证

$$C|K_S\rangle = |K_S\rangle,\ C|K_L\rangle = -|K_L\rangle \tag{5}$$

（读者可以注意，S 和 $|K^0\rangle$，$|\overline{K}^0\rangle$ 的表示形式类似于自旋 1/2 粒子的 s_x 表象中 Pauli 矩阵 σ_x 及其本征函数，C 和 $|K_S\rangle$，$|K_L\rangle$ 则类似于 σ_z 及其本征函数.）

$|K_S\rangle$ 和 $|K_L\rangle$ 都是似稳态，其衰变寿命 $\tau_S \ll \tau_L$（约相差 500 倍），分别称为短寿命和长寿命 K^0 介于，也就是说，如 K^0 介子的初始状态为 $\psi(t=0)=|K_S\rangle$，则 $t>0$ 时

$$\psi(t) = |K_S\rangle e^{-i\omega_S t} e^{-t/2\tau_S}$$

类似地，如 $\psi(t=0)=|K_L\rangle$，则 $t>0$ 时

$$\psi(t) = |K_L\rangle e^{-i\omega_L t} e^{-t/2\tau_L}$$

其中

$$\hbar\omega_S = \sqrt{p^2c^2 + m_S^2c^4},\quad \hbar\omega_L = \sqrt{p^2c^2 + m_L^2c^4}$$

m_S 和 m_L 为 K_S 和 K_L 介于的静质量.

现在来分析 K^0 介子的衰变过程. 以 K^0 介于产生之时作为 $t=0$，则

$$\psi(t=0) = |K^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|K_S\rangle + |K_L\rangle) \tag{6}$$

在衰变过程中，$(t>0)$，

$$\psi(t) = |K_S\rangle \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\omega_S t - t/2\tau_S} + |K_L\rangle \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\omega_L t - t/2\tau_L} \quad (7)$$

在时刻 t 粒子处于$|\overline{K}^0\rangle$态的概率幅度为

$$\langle \overline{K}^0 | \psi(t) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \overline{K}^0 | K_S \rangle e^{-i\omega_S t - t/2\tau_S}$$

$$+ \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \overline{K}^0 | K_L \rangle e^{-i\omega_L t - t/2\tau_L}$$

$$= \frac{1}{2} (e^{-i\omega_S t - t/2\tau_S} - e^{-i\omega_L t - t/2\tau_L}) \quad (8)$$

测得$\overline{K}^0$的概率为

$$P_{\overline{K}^0}(t) = |\langle \overline{K}^0 | \psi(t) \rangle|^2 \quad (9)$$

由式(8)式,即得

$$P_{\overline{K}^0}(t) = \frac{1}{4} \left[e^{-t/\tau_S} + e^{-t/\tau_L} - 2e^{-\frac{t}{2}\left(\frac{1}{\tau_S} + \frac{1}{\tau_L}\right)} \cos(\omega_S - \omega_L)t \right] \quad (10)$$

当 $t=0, P_{\overline{K}^0}=0$;

当 $\tau_S < t \ll \tau_L$, $P_{\overline{K}^0} \approx \frac{1}{4}$[这时式(7)中$|K_S\rangle$项已衰变殆尽,但$|K_L\rangle$项衰变甚少].

当 $t > \tau_L$, $P_{\overline{K}^0} \to 0$.

由此可见,测得$\overline{K}^0$的可能性确实是存在的.

第十一章　弹性散射

11.1　质量为 μ 的粒子束被球壳 δ 势场散射，

$$V(r)=V_0\delta(r-a)$$

在高能近似下，用 Born 近似计算散射振幅和微分截面.

解　散射振幅的 Born 近似公式为

$$f(\theta)=-\frac{2\mu}{\hbar^2 q}\int_0^\infty \mathrm{d}r r V(r)\sin qr \tag{1}$$

其中 $q=2k\sin\dfrac{\theta}{2}$，$\theta$ 为散射角. 根据 δ 函数的积分性质，容易算出

$$\begin{aligned} f(\theta)&=-\frac{2\mu V_0 a}{\hbar^2 q}\sin qa \\ &=-\frac{2\mu V_0 a^2}{\hbar^2}\frac{\sin\left(2ka\sin\dfrac{\theta}{2}\right)}{2ka\sin\dfrac{\theta}{2}} \end{aligned} \tag{2}$$

在高能条件($ka\gg1$)下，对于一般的散射角 θ，有 $ka\theta\gg1$，上式中 $\sin\left(2ka\sin\dfrac{\theta}{2}\right)$ 随 θ 变化而迅速振荡，其平方可以按 1/2 对待，因此微分截面为

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2\approx\frac{1}{2}\left(\frac{\mu V_0 a}{\hbar^2 k\sin\dfrac{\theta}{2}}\right)^2 \tag{3}$$

$\theta\to0$ 处，应取

$$\sigma(0)=|f(0)|^2=(2\mu V_0 a^2/\hbar^2)^2 \tag{4}$$

总截面为

$$\sigma_t = \int \sigma(\theta) \mathrm{d}\Omega = 2\pi \int_0^{\pi} \sigma(\theta) \sin\theta \mathrm{d}\theta \tag{5}$$

当 $\theta > 1/ka$，$\sigma(\theta)$即远小于 $\sigma(0)$，因此 σ_t 之值主要来自角范围 $\theta \lesssim 1/ka$，由此可得

$$\begin{aligned} \sigma_t &\sim 2\pi\sigma(0) \int_0^{1/ka} \sin\theta \mathrm{d}\theta \sim \pi\sigma(0)/k^2a^2 \\ &\sim 4\pi\mu^2 V_0^2 a^2/k^2\hbar^4 = 2\pi\mu V_0^2 a^2/\hbar^2 E \end{aligned} \tag{6}$$

11.2 设有某种球对称的电荷分布，电荷密度记为 $\rho(r)$，具有下列性质：$r \to \infty$，$\rho(r)$迅速趋于 0；

$$\int \rho(r) \mathrm{d}^3x = 0; \qquad \int \rho(r) r^2 \mathrm{d}^3x = A \tag{1}$$

今有一束质量 m，电荷 e，动量 $p = \hbar k$ 的粒子，沿 z 轴方向入射，受到此电荷分布所生静电场作用而发生散射. 试用一级 Born 近似公式计算向前散射($\theta = 0$)的微分截面.

解 粒子受到的静电作用势为

$$V(r) = e \int \frac{\rho(r')}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|} \mathrm{d}^3x' \tag{2}$$

以 $\boldsymbol{k}_0 = (0, 0, k)$表示入射波波矢量，$\boldsymbol{k}$ 表示被散射到(θ, φ)方向的粒子的波矢量，$\hbar\boldsymbol{k}$ 为散射粒子的动量. 按照 Born 一级近似，散射振幅为

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int V(r) \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}_0 - \boldsymbol{k}) \cdot \boldsymbol{r}} \mathrm{d}^3x \tag{3}$$

粒子向前散射($\theta \to 0$)时 $= \boldsymbol{k} = \boldsymbol{k}_0$，散射振幅为

$$\begin{aligned} f(0) &= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int V(r) \mathrm{d}^3x \\ &= -\frac{me}{2\pi\hbar^2} \iint \frac{\rho(r')}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|} \mathrm{d}^3x' \mathrm{d}^3x \end{aligned} \tag{4}$$

可以证明

$$\int \frac{\mathrm{d}^3x}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} = 4\pi\int_0 \mathrm{d}r r^2 \times \begin{cases} 1/r', r < r' \\ 1/r, r > r' \end{cases} \tag{5}$$

$$= 4\pi\left[\frac{1}{r'}\int_0^{r'} r^2\mathrm{d}r + \int_{r'}^{\infty} r\mathrm{d}r\right]$$

$$= 2\pi R^2 - \frac{2\pi}{3}r'^2, \qquad R \to \infty \tag{6}$$

代入式(4),即得

$$f(0) = \frac{me}{\hbar^2}\int\left(\frac{1}{3}r'^2 - R^2\right)\rho(r')\mathrm{d}^3x', \qquad R \to \infty$$

再利用式(1),即得

$$f(0) = meA/3\hbar^2 \tag{7}$$

向前散射的微分截面为

$$\sigma(\theta \to 0) = |f(0)|^2 = m^2e^2A^2/9\hbar^4 \tag{8}$$

附注　式(5)的证明如下:

计算积分 $\int\cdots\mathrm{d}^3x$ 时,以 $\boldsymbol{r}'$ 为极轴,

则

$$\mathrm{d}^3x = r^2\mathrm{d}r\sin\theta'\,\mathrm{d}\theta'\,\mathrm{d}\phi$$

$$|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'| = (r^2 + r'^2 - 2rr'\cos\theta')^{\frac{1}{2}}$$

对角度积分,即得

$$\int \sin\theta'\,\mathrm{d}\theta'\,\mathrm{d}\phi' / |\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|$$

$$= 2\pi\int_{\theta=0}^{\pi} \frac{-\mathrm{d}\cos\theta'}{(r^2 + r'^2 - 2rr'\cos\theta')^{\frac{1}{2}}}$$

$$= \frac{2\pi}{rr'}[(r+r') - |r-r'|]$$

$$= 4\pi \times \begin{cases} 1/r', r < r' \\ 1/r, r > r' \end{cases}$$

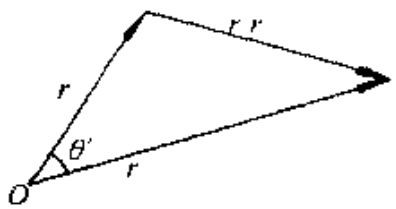


图 11.2

此即式(5).

11.3 粒子束被势场 $V(r)$ 散射，求散射振幅的 Born 一级近似和二级修正公式.

解 总波函数满足定态 Schrödinger 方程

$$(\nabla^2+k^2)\psi=\frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)\psi,k=\sqrt{2\mu E}/\hbar \tag{1}$$

取入射波为

$$\psi^{(0)}(r)=e^{ikz}=e^{ik_0\cdot r} \tag{2}$$

$k_0=(0,0,k)$ 为入射波波矢量. 在 Born 近似法中，以 $\psi^{(0)}$ 作为 ψ 的零级近似，ψ 的逐级展开为

$$\psi=\psi^{(0)}+\psi^{(1)}+\psi^{(2)}+\cdots \tag{3}$$

右端从第二项开始为散射波，它们应该具有出射波的形式，即 $r\to\infty$ 处

$$\psi^{(1)}\approx f^{(1)}(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r}$$

$$\psi^{(2)}\approx f^{(2)}(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r}$$

$$\psi^{(1)}+\psi^{(2)}+\cdots\approx[f^{(1)}+f^{(2)}+\cdots]\frac{e^{ikr}}{r}$$

$$=f(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r} \tag{4}$$

$f(\theta,\varphi)$为散射振幅，$f^{(1)}$、$f^{(2)}$为f的一级近似和二级修正.

入射波$\psi^{(0)}$满足方程

$$(\nabla^2+k^2)\psi^{(0)}=0 \tag{5}$$

因此，将式(3)代入式(1)，即得

$$\begin{aligned}&(\nabla^2+k^2)(\psi^{(1)}+\psi^{(2)}+\cdots)\\&=\frac{2\mu}{\hbar^2}V(\boldsymbol{r})(\psi^{(0)}+\psi^{(1)}+\cdots)\end{aligned} \tag{6}$$

如视$2\mu V/\hbar^2$为小量，而用逐级近似法求解式(6)，可令

$$\begin{cases}(\nabla^2+k^2)\psi^{(1)}=\dfrac{2\mu}{\hbar^2}V(\boldsymbol{r})\psi^{(0)}\\(\nabla^2+k^2)\psi^{(2)}=\dfrac{2\mu}{\hbar^2}V(\boldsymbol{r})\psi^{(1)}\\\cdots\cdots\end{cases} \tag{7}$$

式(7)的形式解为

$$\begin{aligned}\psi^{(1)}&=(\nabla^2+k^2)^{-1}\frac{2\mu}{\hbar^2}V(\boldsymbol{r})\psi^{(0)}\\&=(\nabla^2+k^2)^{-1}\rho_1(\boldsymbol{r})\\\psi^{(2)}&=(\nabla^2+k^2)^{-1}\frac{2\mu}{\hbar^2}V(\boldsymbol{r})\psi^{(1)}\\&=(\nabla^2+k^2)^{-1}\rho_2(\boldsymbol{r})\end{aligned} \tag{8}$$

如引入Green函数

$$G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')=(\nabla^2+k^2)^{-1}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \tag{9}$$

并利用公式

$$\rho(\boldsymbol{r})=\int\rho(\boldsymbol{r}')\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3x' \tag{10}$$

式(8)可以进一步写成

$$\psi^{(1)}(\boldsymbol{r}) = \int G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\rho_1(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3x'$$

$$= \frac{2\mu}{\hbar^2}\int G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')V(\boldsymbol{r}')\psi^{(0)}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3x' \tag{11}$$

$$\psi^{(2)}r = \frac{2\mu}{\hbar^2}\int G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')V(\boldsymbol{r}')\psi^{(1)}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3x' \tag{12}$$

式(9)仅为Green 函数的形式定义，选取具体形式时应符合问题的性质，并满足相应的边界条件. 对于散射问题，可取

$$\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3}\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}\mathrm{d}^3k' \tag{13}$$

由于

$$(\nabla^2+k^2)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}} = (k^2-k'^2)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}}$$

Green 函数可以取为

$$G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3}\int \frac{1}{k^2-k'^2}e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}\mathrm{d}^3k' \tag{14}$$

积分在 $\boldsymbol{k}'$ 空间进行，$\boldsymbol{k}$、$\boldsymbol{r}$、$\boldsymbol{r}'$ 作为常量对待. 如取 $\boldsymbol{k}'$ 空间球坐标(k',θ,φ)，并以 $\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'$ 作为极轴，则

$$\mathrm{d}^3k' = k'^2\mathrm{d}k'\mathrm{d}\Omega, \qquad \mathrm{d}\Omega = \sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi$$

式(14)中角度部分积分容易算出，为

$$\int e^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}'\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}\mathrm{d}\Omega = \int e^{\mathrm{i}k'|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\cos\theta}\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi$$

$$= 2\pi\int_{-1}^{1} e^{\mathrm{i}k'|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\xi}\mathrm{d}\xi$$

$$= 4\pi\frac{\sin(k'|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)}{k'|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} \tag{15}$$

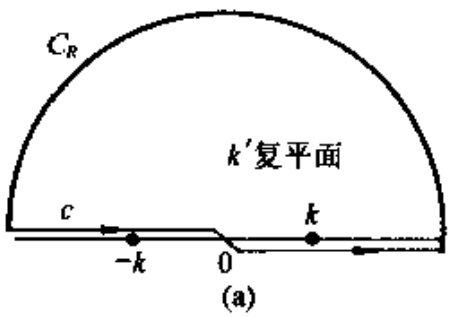
代入式(14)，即得

$$G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \frac{1}{2\pi^2}\int_0^\infty \frac{k'^2\mathrm{d}k'}{k^2-k'^2}\frac{\sin(k'|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)}{k'|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}$$

$$= \frac{i}{8\pi^2}\frac{1}{|r-r'|} \cdot \int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{1}{k'-k}+\frac{1}{k'+k}\right)e^{ik'|r-r'|}dk' \qquad (14')$$

$k'=\pm k$ 为被积函数的一级极点. 式(14′)可以利用 k' 复平面上围道积分法算出. 为了确保 $G(r,r')$ 中只包含出射波项,与边界条件(4)相符,在 k' 复平面的左半平面,积分路线应取实轴上岸,在 k' 右半平面,积分路线应取实轴下岸,如图 11.3(a)所示. 亦即式(14′)中的积分规定成

$$\int_{-\infty}^{\infty}\cdots dk' = \int_{C}\cdots dk' \qquad (16)$$



(a)

图 11.3

作此规定后,可求出

$$G(r,r') = \frac{1}{8\pi^2|r-r'|}\int_C\left(\frac{1}{k'-k}+\frac{1}{k'+k}\right)e^{ik'|r-r'|}dk'$$
$$= -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ik|r-r'|}}{|r-r'|} \qquad (17)$$

(注意,沿大圆弧 C_R 积分为 0.)

上述积分路线的规定等价于式(14′)中或式(14)中

$$k \to k+i\varepsilon, \quad (\varepsilon \text{ 为无限小正实数}) \qquad (18)$$

反之,如取积分路线为左实轴下岸及右实轴上岸(相当于 $k\to k-i\varepsilon$),将给出

$$G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')=-\frac{1}{4\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}/|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|$$

这和散射问题的边条件不符.

将式(17)代入式(11),得到

$$\psi^{(1)}(\boldsymbol{r})=-\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{1}{4\pi}\int\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}V(\boldsymbol{r}')\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{r}'}\mathrm{d}^3x' \tag{19}$$

在远离散射中心处,$r\gg r'$,可取近似[参看图 11.3(b)]

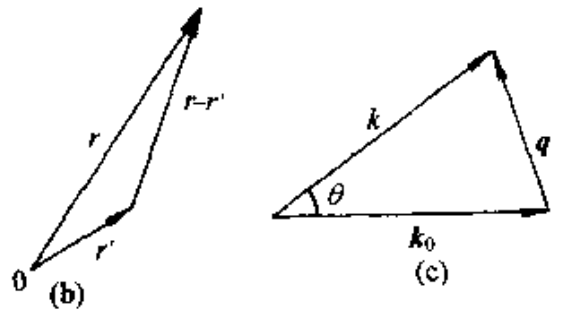


图 11.3

$$\begin{aligned}|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|&\approx r-\boldsymbol{r}'\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\\ k|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|&\approx kr-k\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{r}'=kr-\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'\end{aligned} \tag{20}$$

$\boldsymbol{k}$ 为出射波波矢量,沿 $\boldsymbol{r}$ 方向,即沿散射角方向.$\boldsymbol{k}=k\boldsymbol{r}/r$.将近似式(20)代入式(19),即得散射波的 Born 一级近似:

$$\boxed{\psi^{(1)}(\boldsymbol{r})\approx-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}\int V(\boldsymbol{r}')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0)\cdot\boldsymbol{r}'}\mathrm{d}^3x'} \tag{21}$$

令
$$\boldsymbol{q}=\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0,\qquad q=|\boldsymbol{q}|=2k\sin\frac{\theta}{2} \tag{22}$$

如图 11.3(c)所示,并令

$$V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0)=\int V(\boldsymbol{r}')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0)\cdot\boldsymbol{r}'}\mathrm{d}^3x' \tag{23}$$

式(21)可以写成

$$\psi^{(1)}(r)\approx-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0)\frac{e^{ikr}}{r} \tag{21'}$$

和式(4)比较,即得散射振幅的一级近似:

$$\boxed{f^{(1)}(\theta,\varphi)=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_0)} \tag{24}$$

注意,式(21)或(21')仅适用于 $r\gg r'$ 处,式(19)则对任何 r 值均成立.

将式(11)代入式(12),并将式(12)中积分变数 r' 改写为 r'',得到

$$\psi^{(2)}(r)=\left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^2\iint G(r,r'')V(r'')\cdot G(r'',r')V(r')e^{ik_0\cdot r'}d^3x'd^3x''$$

在远离散射区域处,$r\gg r''$,对 $G(r,r'')$ 可作类似于式(20)的近似处理,即

$$G(r,r'')=-\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ik|r-r''|}}{|r-r''|}\approx-\frac{e^{ikr}}{4\pi r}e^{-ik\cdot r''} \tag{25}$$

对于 $G(r'',r')$ 只能取式(14)或(17)的形式,我们取式(14)(注意 r 换成 r''),和式(25)一起代入 $\psi^{(2)}$ 中,得到

$$\begin{aligned}\psi^{(2)}(r)\approx&-\left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^2\frac{1}{(2\pi)^3}\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ikr}}{r}\\&\cdot\iiint d^3k'd^3x'd^3x''\frac{1}{k^2-k'^2}V(r'')e^{-i(k-k')\cdot r''}\\&\cdot V(r')e^{-i(k'-k_0)\cdot r'}\\=&\left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^2\frac{1}{32\pi^4}\frac{e^{ikr}}{r}\int\frac{1}{k'^2-k^2}V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\end{aligned}$$

$$\cdot V(k'-k_0)\mathrm{d}^3k' \tag{26}$$

和式(14)比较，即得散射振幅的 Born 二级修正公式：

$$\boxed{f^{(2)}(\theta,\varphi)=\frac{1}{32\pi^4}\left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^2\int\frac{1}{k'^2-k^2}\times V(k-k')V(k'-k_0)\mathrm{d}^3k'} \tag{27}$$

上二式中，k^2 均应按式(18)，理解成$(k+\mathrm{i}\varepsilon)^2$.

从量子跃迁观点来看，散射过程相当于从初态 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0\cdot r}$ 向终态 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\cdot r}$ 的跃迁，$V(k-k_0)$ 相当于跃迁矩阵元. 式(21)相当于微扰论一级近似. 式(26)相当于二级微扰修正，即二级跃迁：先由 k_0 变到中间态 k'，再变到终态 k，V 的两个矩阵元清楚地表明了这一点.[①]

11.4 设能量为 $E=\hbar^2k^2/2\mu$ 的粒子被一个非定域势场 $V(r,r')$ 散射，波函数满足方程

$$(\nabla^2+k^2)\psi(r)=\frac{2\mu}{\hbar^2}\int V(r,r')\psi(r')\mathrm{d}^3x' \tag{1}$$

并设势场可以分离变量地表示为

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

试说明只有 s 波对散射有贡献，并证明散射振幅的 Born 近似为 [$U(k)$定义见下面式(10)]

$$f(k)=4\pi\lambda|U(k)|^2\left[1-\frac{2\lambda}{\pi}\int\frac{|U(k')|^2}{k^2-k'^2+\mathrm{i}\varepsilon}\mathrm{d}^3k'\right] \tag{3}$$

(ε 为无限小正实数)

解 从势场的结构式(2)可知，散射是轴对称的，

---

① 参考曾谨言，《量子力学》下册(科学出版社，1981)，§ 10.5. Landau 等，《量子力学》下册(高等教育出版社，1980)，§ 126.

$$\psi = \psi(r,\theta)$$

令
$$\psi = \sum_l R_l(r)Y_{l0}(\theta) \tag{4}$$

代入式(1),由于

$$\int Y_{l0}(\theta)d\Omega = 0, \quad l \geqslant 1$$

故只有 s 波($l=0$)对式(1)右端的积分有贡献,故散射完全来自 s 波.

仿照上题,入射波仍取为

$$\psi^{(0)}(\boldsymbol{r}) = e^{ikz} = e^{i\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{r}} \tag{5}$$

总波函数写成

$$\psi = \psi^{(0)} + \psi^{(1)} + \psi^{(2)} + \cdots \tag{6}$$

各项分别为零级近似,一级修正,二级修正,…. 按照逐级近似解法,

$$(\nabla^2 + k^2)\psi^{(1)}(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2}\int V(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\psi^{(0)}(\boldsymbol{r}')d^3x' \tag{7}$$

将式(2)及(5)代入上式,得到

$$(\nabla^2 + k^2)\psi^{(1)}(r) = -\lambda U(r)\int U(r')e^{i\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{r}'}d^3x' \tag{8}$$

用球坐标,将角度部分积分算出,得到

$$\int U(r')e^{i\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{r}'}d^3x' = \int U(r')e^{ikr'\cos\theta'}r'^2dr'\sin\theta'd\theta'd\phi = 4\pi\int_0^\infty U(r')\frac{\sin kr'}{kr'}r'^2dr' = 4\pi U(k) \tag{9}$$

其中

$$U(k)=\int_0^\infty U(r)\frac{\sin kr}{kr}r^2\mathrm{d}r \tag{10}$$

于是式(8)可以写成

$$(\nabla^2+k^2)\psi^{(1)}(r)=-4\pi\lambda U(k)U(r) \tag{11}$$

其解为

$$\psi^{(1)}(r)=-4\pi\lambda U(k)\int G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')U(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3x' \tag{12}$$

此式对任何 r 成立. 对于很大的 r，由上题式(25)，

$$G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\approx-\frac{1}{4\pi r}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'} \tag{13}$$

代入式(12)，即得

$$\psi^{(1)}(\boldsymbol{r})\approx\lambda U(k)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}\int U(\boldsymbol{r}')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'}\mathrm{d}^3x' \tag{12'}$$

其中

$$\int U(\boldsymbol{r}')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'}\mathrm{d}^3x'=\int U(r')\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr'\cos\theta}r'^2\mathrm{d}r'\mathrm{d}\Omega'$$

$$=4\pi\int_0^\infty U(r')\frac{\sin kr'}{kr'}r'^2\mathrm{d}r'=4\pi U(k)$$

因此

$$\psi^{(1)}(r)\approx4\pi\lambda|U(k)|^2\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} \tag{14}$$

亦即散射振幅的一级近似为

$$f^{(1)}(k)=4\pi\lambda|U(k)|^2 \tag{15}$$

波函数的二级修正 $\psi^{(2)}$ 满足方程

$$(\nabla^2+k^2)\psi^{(2)}(r)=\frac{2\mu}{\hbar^2}\int V(r,r')\psi^{(1)}(r')\mathrm{d}^3x'$$

$$=-\lambda U(r)\int U(r')\psi^{(1)}(r')\mathrm{d}^3x'$$

$$=-\lambda 4\pi A(k)U(r) \tag{16}$$

其中

$$A(k)=\frac{1}{4\pi}\int U(r)\psi^{(1)}(r)\mathrm{d}^3x \tag{17}$$

式(16)的解为

$$\psi^{(2)}(r)=-4\pi\lambda A(k)\int G(r,r')U(r')\mathrm{d}^3x' \tag{18}$$

此式和式(12)比较，可见

$$\psi^{(2)}=\frac{A(k)}{U(k)}\psi^{(1)} \tag{19}$$

利用式(14)即得

$$\psi^{(2)}(r)\approx 4\pi\lambda A(k)U(k)\frac{\mathrm{e}^{ikr}}{r} \tag{20}$$

亦即散射振幅的二级修正为

$$f^{(2)}=4\pi\lambda A(k)U(k) \tag{21}$$

下面计算 $A(k)$. 将式(12)代入式(17)，得到

$$A(k)=-\lambda U(k)\iint U(r)G(r,r')U(r')\mathrm{d}^3x\mathrm{d}^3x'$$

$$=-\lambda U(k)\frac{1}{(2\pi)^3}\iiint\frac{U(r)U(r')}{k^2-k'^2}\mathrm{e}^{ik'\cdot(r-r')}\mathrm{d}^3k'\mathrm{d}^3x\mathrm{d}^3x'$$

其中 $G(r,r')$ 的表达式利用了上题式(14). 将 $\int\cdots\cdots\mathrm{d}^3x\mathrm{d}^3x'$ 的角度部分积分算出，并利用 $U(k)$ 的定义(10)，即得

$$A(k)=-\frac{2}{\pi}\lambda U(k)\int\frac{|U(k')|^2}{k^2-k'^2}\mathrm{d}^3k' \tag{22}$$

代入式(21)即得

$$f^{(2)} = -4\pi\lambda|U(k)|^2\frac{2\lambda}{\pi}\int\frac{|U(k')|^2}{k^2-k'^2}\mathrm{d}^3k' \tag{23}$$

积分中,k^2 应该按照$(k+\mathrm{i}\varepsilon)^2$ 对待[见上题式(18)],即

$$k^2 \to (k+\mathrm{i}\varepsilon)^2 = k^2 + \mathrm{i}2k\varepsilon - \varepsilon^2 \to k^2 + \mathrm{i}\varepsilon'$$

其中 $\varepsilon' = 2k\varepsilon$,仍为无限小正实数,将 ε' 重新写成 ε,式(23)可以改为

$$f^{(2)} = -4\pi\lambda|U(k)|^2\frac{2\lambda}{\pi}\int\frac{|U(k')|^2}{k^2-k'^2+\mathrm{i}\varepsilon}\mathrm{d}^3k' \tag{23'}$$

式(23′)与式(15)相加,即得

$$f = f^{(1)} + f^{(2)} = 4\pi\lambda|U(k)|^2\left[1 - \frac{2\lambda}{\pi}\int\frac{|U(k')|^2}{k^2-k'^2+\mathrm{i}\varepsilon}\mathrm{d}^3k'\right]$$

这正是需要证明的式(3).

注意,散射振幅 f 与方向无关,仅为 k 的函数,这是 s 波散射的特点.

11.5 质量 m,自旋 1/2,能量 E 的两个全同粒子,从相反方向入射,发生弹性散射.粒子间的作用势为

$$V(r) = \frac{\beta}{r}\mathrm{e}^{-r/a}, \qquad a > 0 \tag{1}$$

两个粒子都是未极化的.

(a) 设入射能量 E 很大($ka \gg 1$),求微分散射截面;

(b) 设在 θ 及 $\pi-\theta$ 方向(见图 11.5)测得两个出射粒子,求它们的总自旋 $S=1$ 的概率,以及两个粒子自旋都指向入射方向(z 轴)的概率;

(c) a 项中所作近似,对能量有何要求?

(d) 如 $E\to 0$,散射后两个粒子总自旋 $S=1$ 的概率等于多少?

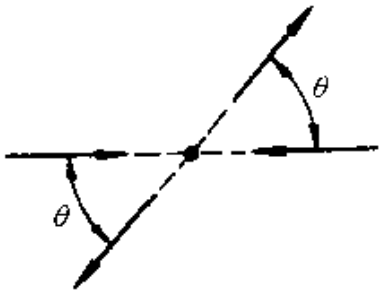


图 11.5

解 本题的实验室坐标系就是质心系，总动能 $E_c=2E$，约化质量 $\mu=m/2$. 令

$$k=\sqrt{2\mu E_c}/\hbar=\sqrt{4mE}/\hbar \tag{2}$$

(a) 对于高能情形($ka\gg1$)，如用 Born 近似，散射振幅为

$$f(\theta)=-\frac{2\mu}{\hbar^2}\int_0^\infty\frac{\sin qr}{qr}V(r)r^2\mathrm{d}r \tag{3}$$

其中

$$q=2k\sin\frac{\theta}{2} \tag{4}$$

将式(1)代入式(3)，利用公式

$$\int_0^\infty \mathrm{e}^{-r/a}\sin qr\mathrm{d}r=\frac{qa^2}{1+q^2a^2}$$

容易求出

$$f(\theta)=-\frac{2\mu\beta a^2}{\hbar^2}\frac{1}{1+4k^2a^2\sin^2\dfrac{\theta}{2}} \tag{5}$$

由于 $ka\gg1$，故除 $\theta\to0$ 外，可取近似

$$f(\theta)\approx-\frac{2\mu\beta}{4\hbar^2k^2}\frac{1}{\sin^2\dfrac{\theta}{2}}=-\frac{\beta}{8E}\frac{1}{\sin^2\dfrac{\theta}{2}} \tag{6}$$

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($S=0$)，空间波函数必为对称态，微分散射截面为

$$\begin{aligned}\sigma_s(\theta) &= |f(\theta)+f(\pi-\theta)|^2 \\ &= \frac{\beta^2}{64E^2}\left(\frac{1}{\sin^2\frac{\theta}{2}}+\frac{1}{\cos^2\frac{\theta}{2}}\right)^2 \\ &= \frac{\beta^2}{4E^2\sin^4\theta}\end{aligned} \tag{7}$$

如入射波为自旋三重态($S=1$)，空间波函数必为反对称态，微分散射截面为

$$\sigma_a(\theta) = |f(\theta)-f(\pi-\theta)|^2 = \frac{\beta^2\cos^2\theta}{4E^2\sin^4\theta} \tag{8}$$

由于入射粒子自旋取向是混乱的，构成自旋单态的概率为 1/4，构成三重态的概率为 3/4，故微分散射截面的有效值是

$$\sigma(\theta) = \frac{1}{4}\sigma_s(\theta)+\frac{3}{4}\sigma_a(\theta) = \frac{\beta^2(1+3\cos^2\theta)}{16E^2\sin^4\theta} \tag{9}$$

(b) 在 θ 及 $\pi-\theta$ 方向测得出射粒子的概率和微分散射截面成正比. 两个出射粒子总自旋 $S=0$ 和 1 的概率显然为

$$P(S=0) = \frac{\frac{1}{4}\sigma_s(\theta)}{\sigma(\theta)} = \frac{1}{1+3\cos^2\theta} \tag{10}$$

$$P(S=1) = \frac{\frac{3}{4}\sigma_a(\theta)}{\sigma(\theta)} = \frac{3\cos^2\theta}{1+3\cos^2\theta} \tag{11}$$

$S=1$ 共有 3 种状态，即

$$\chi_{11} = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2, \qquad \chi_{1,-1} = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2$$

$$\chi_{10}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2+\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2\right]$$

两个粒子自旋均指向入射方向,即状态 χ_{11},另外二种状态并不包含此种成分.可见,散射后两粒子自旋均指向入射方向的概率为

$$P(\uparrow\uparrow)=\frac{1}{3}P(S=1)=\frac{\cos^2\theta}{1+3\cos^2\theta} \tag{12}$$

(c) Born 近似成立的条件相当于微扰论成立的条件.式(3)来源于散射后波函数的渐近表示式

$$\psi(\boldsymbol{r})\approx e^{ikz}-\frac{1}{4\pi}\frac{2\mu}{\hbar^2}\int\frac{e^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}V(\boldsymbol{r}')e^{ikz'}d^3x' \tag{13}$$

按微扰论观点,上式即

$$\psi\approx\psi^{(0)}+\psi^{(1)}$$

微扰论成立条件为$|\psi^{(1)}|\ll|\psi^{(0)}|$,即在 $V(r)$的有效范围内,

$$\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\left|\int\frac{e^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\frac{\beta}{r'}e^{-r'/a}e^{ikz'}d^3x'\right|\ll 1 \tag{14}$$

积分的主要贡献来自 r'的变化范围 $\Delta r'\sim 1/k$,作为数量级估计,可取

$$|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\sim r',\ d^3x'\sim 4\pi r'^2\Delta r'\sim 4\pi r'^2/k$$

$$\int\cdots d^3x'\sim 4\pi\beta/k$$

故条件(14)相当于

$$\frac{2\mu\beta}{\hbar^2 k}\ll 1,\qquad \text{即 } E\gg\frac{m\beta^2}{2\hbar^2} \tag{15}$$

在此条件下,式(5)成立.

式(6)成立的条件是 $ka\gg 1$,即 $E\gg\hbar^2/2ma^2$.

(d)如 $E\to 0$,仅 s 波($l=0$)对散射截面有贡献.这时散射振幅

$f(\theta)$为常量，$f(\theta)=f(\pi-\theta)$，所以 $\sigma_a(\theta)=0$，只有自旋单态对散射截面有贡献. 因此散射后两个出射粒子必然处于总自旋 $S=0$ 的状态，而 $S=1$ 的概率为 0.[①]

11.6 粒子被中心力场 $V(r)$散射，设作用是短程的，当 r 大于某个值("作用球"半径 a)，$V(r)$即迅速趋于 0. 试将低能 s 波($l=0$)散射的相移、散射振幅、散射截面等用"散射长度"表示出来.

解 s 波($l=0$)的波函数可以记为

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}R_0(r)=\frac{u(r)}{r} \tag{1}$$

$u(r)$满足径向方程

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}u+\left[k^2-\frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)\right]u=0 \tag{2}$$

其中 $k=\sqrt{2\mu E}/\hbar$，E 为粒子的入射功能.

方程(2)中当 $r>a$，则 $V(r)$可以略去；如再取低能极限，即 $k\to 0$，则方程(2)成为

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}u\approx 0, \qquad (r>a, k\to 0) \tag{3}$$

其解为

$$u(r)\approx C\left(1-\frac{r}{a_0}\right) \tag{4}$$

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(2)的一般解可以表示为

$$u(r)\approx A\sin(kr+\delta_0)$$

---

① 参考曾谨言，《量子力学》下册(科学出版社，1981)，§10.5，10.6. Landau 等，《量子力学》(高等教育出版社，1980)，§45，126.

$$\propto A\sin\delta_0(\cos kr + \cot\delta_0\sin kr) \tag{5}$$

δ_0 为 s 波相移，上式如取低能极限 $k\to 0$，则

$$\cos kr \to 1, \qquad \sin kr \to kr$$

$$u(r) \approx A\sin\delta_0(1 + kr\cot\delta_0) \tag{6}$$

比较式(4)、(6)，即得相移和散射长度的关系：

$$\boxed{k\cot\delta_0 = -1/a_0. \qquad (k\to 0)} \tag{7}$$

只考虑 s 波散射时，散射振幅为

$$\boxed{f = \frac{1}{k}e^{i\delta_0}\sin\delta_0 \equiv \frac{1}{k\cot\delta_0 - ik}} \tag{8}$$

在低能极限，将式(7)代入式(8)，即得

$$\boxed{f = -\frac{a_0}{1 + ika_0}. \qquad (k\to 0)} \tag{9}$$

s 波总截面为

$$\sigma_0 = 4\pi|f|^2 = 4\pi a_0^2/[1 + (ka_0)^2] \tag{10}$$

如散射长度 a_0 取有限值，则在低能极限($k\to 0$)下，$k|a_0| \ll 1$，式(9)和(10)分母上的 ka_0 可以略去，从而得到

$$f = -a_0, \qquad \sigma_0 = 4\pi a_0^2, (k\to 0) \tag{11}$$

而式(7)则给出

$$-ka_0 = \tan\delta_0 \approx \delta_0. \qquad (k\to 0) \tag{12}$$

这种情况下势场 $V(r)$ 的散射效果相当于半径为 a_0 的刚球.

如散射长度 $a_0\to\pm\infty$，就出现共振散射，这时式(7)、(8)、(10)分别给出

$$k\cot\delta_0 \to 0, \quad \delta_0 = \frac{\pi}{2} \text{ 或 } -\frac{\pi}{2} \tag{13}$$

$$f = \frac{1}{k}, \qquad \sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2} = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu E} \tag{14}$$

散射截面和入射动能 E 成反比，当 $E\to 0, \sigma_0 \to \infty$.

11.7 同 11.4 题，求低能($ka \ll 1$)s 波散射截面.

解 s 波($l=0$)波函数可以写成

$$\psi = u(r)/r \tag{1}$$

$u(r)$满足径向方程

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}u + k^2 u - \frac{2\mu}{\hbar^2}V_0\delta(r-a)u = 0 \tag{2}$$

上式在 $r=a$ 附近积分，可得 u' 的跃变条件

$$u'(a+0) - u'(a-0) = \frac{2\mu}{\hbar^2}V_0 u(a) \tag{3}$$

亦即

$$\left.\frac{u'}{u}\right|_{a-0}^{a+0} = \frac{2\mu V_0}{\hbar^2} \tag{3'}$$

此外，u 还必须满足边界条件 $u(0)=0$.

$r\neq a$ 处，方程(2)中最后一项为 0，其解可以表示成

$$\begin{aligned} u(r) &= B\sin kr, \qquad r < a \\ u(r) &= A\sin(kr+\delta_0), r > a \end{aligned} \tag{4}$$

δ_0 为相移. 利用跃变条件(3')，可得到确定 δ_0 的超越方程

$$k\cot(ka+\delta_0) - k\cot ka = 2\mu V_0/\hbar^2 \tag{5}$$

对于低能极限，$ka \ll 1$，可取

$$\cot(ka+\delta_0)\approx\cot\delta_0,\qquad k\cot ka\approx 1/a$$

代入式(5),即得

$$k\cot\delta_0\approx\frac{1}{a}+\frac{2\mu V_0}{\hbar^2} \tag{6}$$

根据题 11.6 式(8),散射振幅为

$$f=\frac{1}{k\cot\delta_0-\mathrm{i}k}\approx\frac{1}{\dfrac{1}{a}+\dfrac{2\mu V_0}{\hbar^2}-\mathrm{i}k} \tag{7}$$

在非共振条件下,上式分母中的 $\mathrm{i}k$ 可以略去,从而得到

$$f\approx 1\Big/\left(\frac{1}{a}+\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}\right) \tag{7'}$$

s 波散射截面为

$$\sigma_0=4\pi|f|^2\approx 4\pi\Big/\left(\frac{1}{a}+\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}\right)^2 \tag{8}$$

发生低能共振散射时,$k\cot\delta_0\to 0$,由式(6)易见共振条件为

$$V_0a=-\hbar^2/2\mu \tag{9}$$

这正是球壳 δ 势阱中存在一条 s 态束缚能级 $E=0^-$ 的条件[见题 5.27 式(11)].发生低能共振散射时,式(7)给出

$$f=\mathrm{i}/k \tag{10}$$

从而

$$\sigma_0=4\pi|f|^2=\frac{4\pi}{k^2}=\frac{2\pi\hbar^2}{\mu E} \tag{11}$$

这在题 11.6 中已经给予普遍证明.

11.8 同上题,求各分波的相移 δ_l,并和刚球散射的结果比

较.

解 令

$$\psi = \sum_l R_l(r)Y_{l0}(\theta) \tag{1}$$

R_l 为第 l 分波的径向波函数，它应该具有下列渐近性质：

$$R_l(r) \sim \frac{1}{kr}\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right), \qquad kr \to \infty \tag{2}$$

R_l 满足径向方程

$$\frac{d^2}{dr^2}R_l + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}R_l + \left[k^2 - \frac{2\mu}{\hbar^2}V(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R_l = 0 \tag{3}$$

将势能写成

$$V(r) = V_0\delta(r-a) \equiv \frac{\hbar^2\Omega}{2\mu a}\delta(r-a) \tag{4}$$

并令 $kr=\rho$，方程(3)可以写成

$$\frac{d^2R_l}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR_l}{d\rho} + \left[1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R_l - \frac{\Omega}{ka}\delta(\rho - ka)R_l = 0 \tag{5}$$

当 $\rho \neq ka$，上式即球 Bessel 方程，它在 $\rho \to 0$ 处有限的解为

$$R_l = Cj_l(\rho), \qquad \rho < ka \tag{6}$$

在 $\rho > ka$ 区域，方程(5)的具有渐近性质(2)的解为

$$R_l = j_l(\rho)\cos\delta_l - n_l(\rho)\sin\delta_l, \qquad \rho > ka \tag{7}$$

j_l 为球 Bessel 函数，n_l 为球 Neumann 函数.

在 $\rho=ka$ 处，R_l 应该连续，即

$$Cj_l(ka) - j_l(ka)\cos\delta_l + n_l(ka)\sin\delta_l = 0 \tag{8}$$

但在 $\rho=ka$ 处，R'_l 是不连续的. 把方程(5)在 $\rho=ka$ 附近积分，容易得到

$$R'_l(ka+0) - R'_l(ka-0) = \frac{\Omega}{ka}R_l(ka) \tag{9}$$

亦即

$$j_l'(ka)\cos\delta_1 - n'_l(ka)\sin\delta_l - Cj_l'(ka) = \frac{\Omega}{ka}Cj_l(ka) \tag{10}$$

式(8)乘 $j'_l(ka)$，式(10)乘 $j_l(ka)$，相加，并利用公式

$$j_l(\rho)n'_l(\rho) - n_l(\rho)j'_l(\rho) = 1/\rho^2$$

即得

$$\tan\delta_l = \frac{ka\Omega[j_l(ka)]^2}{ka\Omega j_l(ka)n_l(ka) - 1} \tag{11}$$

给定 ka 及 Ω(无量纲)之值后，利用 Bessel 函数表，即可求出 δ_l.

讨论 **1°** 如 Ω 很大，式(11)分母中可以略去(−1)，得到

$$\tan\delta_l \approx j_l(ka)/n_l(ka) \tag{12}$$

这正是刚球(半径 a)散射的相移公式.[①]

2° 如 ka 很小，以致式(11)分母中 $ka\Omega$ 项可以略去(低能极限)，则得

$$\begin{aligned}\delta_l \approx \tan\delta_1 &\approx -\, ka\Omega[j_l(ka)]^2 \\ &\approx -\,\Omega\frac{(ka)^{2l+1}}{[(2l+1)!!]^2}\end{aligned} \tag{13}$$

δ_1 和作用强度 Ω 以及 $(ka)^{2l+1}$ 成正比，这和球方势垒(阱)低能散射结果类似.(参看题 12.21)

---

① 关于刚球散射，参看曾谨言，《量子力学》下册(科学出版社，1981)，§ 10.2. 关于 j_l 和 n_l 的公式参看同书附录六.

11.9 粒子被势场

$$V(r) = -\frac{\hbar^2}{\mu}\left[\frac{\lambda}{\mathrm{ch}(\lambda r)}\right]^2 \tag{1}$$

散射，求低能($E\to 0$)s 波散射截面. ($\mathrm{ch}x$ 为双曲余弦函数)

解 s 波($l=0$)波函数可以表示成

$$\psi = u(r)/r \tag{2}$$

$E\to 0$ 时，径向方程为

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}u = \frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)u = -\frac{2\lambda^2}{[\mathrm{ch}(\lambda r)]^2}u \tag{3}$$

令 $\xi=\lambda r$，上式变成

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}u + \frac{2}{\mathrm{ch}^2(\xi)}u = 0 \tag{3'}$$

上式满足边界条件 $u(0)=0$ 的解为

$$u = \mathrm{th}(\xi) = \frac{\mathrm{sh}(\xi)}{\mathrm{ch}(\xi)} = \frac{\mathrm{e}^{\xi}-\mathrm{e}^{-\xi}}{\mathrm{e}^{\xi}+\mathrm{e}^{-\xi}}$$
$$= \frac{\mathrm{e}^{\lambda r}-\mathrm{e}^{-\lambda r}}{\mathrm{e}^{\lambda r}+\mathrm{e}^{-\lambda r}} \tag{4}$$

当 $\lambda r\gg 1$，$V(r)\to 0$，$u(r)\to 1$. 和 11.6 题式(4)比较，可知散射长度 $a_0=\infty$，为共振散射. 因此，根据 11.6 题的结果，散射振幅和散射截面分别为

$$f = \frac{\mathrm{i}}{k} = \mathrm{i}\hbar/\sqrt{2\mu E}$$
$$\sigma_0 = 4\pi|f|^2 = 2\pi\hbar^2/\mu E \tag{5}$$

11.10 粒子被势场

$$V(r) = \frac{\alpha}{r^4} \qquad \alpha > 0 \tag{1}$$

散射，求低能($E\to 0$)s 波散射的散射长度、相移、散射振幅和散射截面.

解 s 波($l=0$)波函数可以表示成 $\psi=u(r)/r$，$E\to 0$ 时径向方程为

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}u=\frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)u=\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}\frac{u}{r^4} \tag{2}$$

边界条件为

$$u(0)=0,\qquad u(\infty)\text{ 有界.}$$

令 $\xi=\hbar r/\sqrt{2\mu\alpha}$，式(2)变成

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}u-\frac{u}{\xi^4}=0 \tag{2'}$$

容易验证，上式满足边界条件的解为

$$u=\xi\mathrm{e}^{-1/\xi} \tag{3}$$

当 $r\to\infty$，$1/\xi\to 0$，$u(r)$的渐近表示为

$$\begin{aligned}u(r)&\approx\xi\left(1-\frac{1}{\xi}\right)=\xi-1\\&=-\left(1-\frac{\hbar}{\sqrt{2\mu\alpha}}r\right)\end{aligned} \tag{4}$$

和题 11.6 式(4)比较，即得散射长度

$$a_0=\sqrt{2\mu\alpha}/\hbar \tag{5}$$

按照题 11.6 式(11)、(12)，可得

相移

$$\delta_0=-ka_0=-\frac{k}{\hbar}\sqrt{2\mu\alpha}=-\frac{2\mu}{\hbar^2}\sqrt{\alpha E} \tag{6}$$

散射振幅

$$f=-a_0=-\sqrt{2\mu\alpha}/\hbar \tag{7}$$

s 波总截面

$$\sigma_0 = 4\pi|f|^2 = 8\pi\mu a^2/\hbar^2 \tag{8}$$

11.11 在作用势 $V(r)$很弱的条件下，证明相移 δ_l 的 Born 近似公式

$$\boxed{\delta_l \approx -\frac{2\mu k}{\hbar^2}\int_0^\infty V(r)[j_l(kr)]^2 r^2 dr} \tag{1}$$

并用来处理球方势阱(垒)

$$V(r) = \begin{cases} V_0, & r < a \\ 0 & r > a \end{cases} \tag{2}$$

的低能散射($ka \ll 1$)问题.

证一 按照 Born 近似，散射振幅为

$$f(\theta) = -\frac{2\mu}{\hbar^2}\int_0^\infty dr r^2 V(r)\frac{\sin qr}{qr} \tag{3}$$

其中 $q = 2k\sin\frac{\theta}{2}$，$\theta$ 为散射角、利用展开公式①

$$\frac{\sin qr}{qr} = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)[j_l(kr)]^2 P_l(\cos\theta) \tag{4}$$

代入式(3)，即得

$$f(\theta) = -\frac{2\mu}{\hbar^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta) \times \int_0^\infty V(r)[j_l(kr)]^2 r^2 dr \tag{5}$$

与分波法公式

① 参看 G. N. Watson, Theory of Bessel Function. Cambridge University Press. , p. 363.

$$f(\theta)=\frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i\delta_l}\sin\delta_l P_l(\cos\theta) \tag{6}$$

比较，当作用势很弱时，$|\delta_l|\ll 1$，可取

$$e^{i\delta_l}\approx 1,\qquad \sin\delta_l\approx\delta_l$$

因此

$$\delta_l\approx-\frac{2\mu k}{\hbar^2}\int_0^{\infty}V(r)[j_l(kr)]^2r^2dr$$

此即式(1).

证二　将入射波 e^{ikz} 展开为球面波的叠加

$$e^{ikz}=e^{ikr\cos\theta}=\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l j_l(kr)P_l(\cos\theta)$$

$$=\frac{1}{kr}\sum_l u_l^{(0)}(r)P_l(\cos\theta) \tag{7}$$

其中

$$u_l^{(0)}(r)=(2l+1)i^l krj_l(kr) \tag{8}$$

$u_l^{(0)}$ 满足自由粒子的径向方程

$$\frac{d^2}{dr^2}u_l^{(0)}+k^2u_l^{(0)}-\frac{l(l+1)}{r^2}u_l^{(0)}=0 \tag{9}$$

散射后，总波函数可以展开成

$$\psi=\frac{1}{kr}\sum_l u_l(r)P_l(\cos\theta) \tag{10}$$

$u_l(r)$ 满足径向方程

$$\frac{d^2}{dr^2}u_l+\left[k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}-\frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)\right]u_l=0 \tag{11}$$

以 $u_l^{(0)}$ 左乘式(11)，以 u_l 左乘式(9)，相减，即得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left[u_l^{(0)}\frac{\mathrm{d}u_l}{\mathrm{d}r}-u_l\frac{\mathrm{d}u_l^{(0)}}{\mathrm{d}r}\right]=\frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)u_lu_l^{(0)}$$

积分，即得

$$\frac{2\mu}{\hbar^2}\int_0^{\infty}V(r)u_lu_l^{(0)}\mathrm{d}r=\left[u_l^{(0)}\frac{\mathrm{d}u_l}{\mathrm{d}r}-u_l\frac{\mathrm{d}u_l^{(0)}}{\mathrm{d}r}\right]\Bigg|_{r=0}^{r\to\infty} \tag{12}$$

由于

$$r\to 0,\qquad u_l\to 0,\ u_l^{(0)}\to 0$$

$$r\to\infty,\qquad u_l^{(0)}\to(2l+1)\mathrm{i}^l\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)$$

$$u_l\to(2l+1)\mathrm{i}^l\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right)$$

可得

$$\left(u_l^{(0)}\frac{\mathrm{d}u_l}{\mathrm{d}r}-u_l\frac{\mathrm{d}u_l^{(0)}}{\mathrm{d}r}\right)\xrightarrow{r\to\infty}(-1)^{l+1}(2l+1)\mathrm{i}k\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}\sin\delta_l \tag{13}$$

代入式(12)，即得

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}\sin\delta_l=(-1)^{l+1}\frac{2\mu}{\hbar^2k(2l+1)^2}\int_0^{\infty}V(r)u_lu_l^{(0)}\mathrm{d}r \tag{14}$$

至此是严格的.

如作用势 $V(r)$ 很弱，则 $|\delta_l|\ll 1$，上式左端可用 δ_l 代替，右端可按微扰论精神用 $u_l^{(0)}$ 代替 u_l，再利用式(8)，即得

$$\delta_l\approx-\frac{2\mu k}{\hbar^2}\int_0^{\infty}V(r)[j_l(kr)]^2r^2\mathrm{d}r \tag{1}$$

证明完毕.

如果 $V(r)$ 仅在某个“作用球”(半径 a)内才有显著的值，在作用球外可以忽略不计，则式(1)中积分上限可以换成 $r=a$. 在低能极限($ka\ll 1$)下，$j_l(kr)$ 可取其级数展开式的首项：

$$j_l(kr)\approx(kr)^l/(2l+1)!!,\qquad(kr\ll 1)$$

于是得到

$$\boxed{\delta_l \approx -\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{k^{2l+1}}{[(2l+1)!!]^2}\int_0^a r^{2l+2}V(r)\mathrm{d}r \propto k^{2l+1}} \tag{15}$$

对于球方势阱(垒)式(2),在低能极限($ka \ll 1$)下,上式给出

$$\delta_l \approx -\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}a^2(ka)^{2l+1}/(2l+1)!!(2l+3)!! \tag{16}$$

$\delta_l \propto (ka)^{2l+1}$. 随 l 之增大,δ_l 下降很快,所以通常只需考虑 l 较小的少数分波. 能量很低时,只需考虑 s 波,这时

$$\delta_0 \approx -\frac{2}{3}\frac{\mu V_0}{\hbar^2}ka^3 \ll 1 \tag{17}$$

散射振幅为

$$f = \frac{\delta_0}{k} \approx -\frac{2}{3}\frac{\mu V_0 a^3}{\hbar^2} \tag{18}$$

总截面为

$$\sigma_t = 4\pi|f|^2 \approx \frac{16\pi}{9}\left(\frac{\mu V_0 a^3}{\hbar^2}\right)^2 \tag{19}$$

这些结果也可利用式(3)直接求出,即对于球方势阱低能散射.$ka \ll 1$,因此

$$qr \ll 1, \qquad \frac{\sin qr}{qr} \approx 1$$

代入式(3),即得

$$f(\theta) \approx -\frac{2\mu}{\hbar^2}\int_0^a V_0 r^2\mathrm{d}r = -\frac{2}{3}\frac{\mu V_0 a^3}{\hbar^2}$$

总截面为

$$\sigma_t = \int|f(\theta)|^2\mathrm{d}\Omega = 4\pi|f|^2 = \frac{16\pi}{9}\left(\frac{\mu V_0 a^3}{\hbar^2}\right)^2$$[1]

---

[1] 参考曾谨言,《量子力学》下册(科学出版社,1981),§10.5.

11.12 求中子-中子低能($E\to 0$)s 波散射截面. 设两中子间的作用势为

$$V=\begin{cases}\sigma_1\cdot\sigma_2 V_0, & r\leqslant a\\ 0, & r>a\end{cases} \tag{1}$$

其中 $V_0>0$,σ_1、σ_2 为两中子的 Pauli 自旋算符. 入射中子和靶中子都是未极化的.

解 中子-中子体系的总波函数必须是交换反对称的. s 波($l=0$)波函数是两粒子空间坐标的对称函数,所以自旋波函数必须是反对称的,即为自旋单态. 因此,体系总自旋为 0,

$$\sigma_1\cdot\sigma_2=-3$$

亦即,对于低能 s 波散射,式(1)等价于球方势阱:

$$V(r)=\begin{cases}-3V_0, & r\leqslant a\\ 0, & r>a\end{cases} \tag{1'}$$

在质心系中,s 态空间波函数可以写成

$$\psi(r)=u(r)/r \tag{2}$$

其中 r 为两中子的相对距离,即 $r=|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|$. $E\to 0$ 时,径向方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}u''+V(r)u=0 \tag{3}$$

亦即

$$\begin{aligned}&u''+k_0^2u=0, && r\leqslant a\\ &u''=0, && r>a\end{aligned}\qquad (E\to 0) \tag{3'}$$

其中

$$k_0=\sqrt{6\mu V_0}/\hbar=\sqrt{3mV_0}/\hbar \tag{4}$$

m 为中子质量,$\mu=m/2$ 为两中子体系的约化质量.

方程(3')满足边界条件 $u(0)=0$ 的解为

$$u(r)=\begin{cases}A\sin k_0 r, & r\leqslant a\\ C\left(1-\dfrac{r}{a_0}\right), & r>a\end{cases}\tag{5}$$

其中 a_0 为散射长度(待定),$(-a_0)$即散射振幅.利用 $r=a$ 处 u'/u 的连续条件,求得

$$a_0=-a\left(\frac{\tan k_0 a}{k_0 a}-1\right)\tag{6}$$

$$f(\theta)=-a_0=a\left(\frac{\tan k_0 a}{k_0 a}-1\right)\tag{7}$$

由于是全同粒子散射,s 波微分截面为

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)+f(\pi-\theta)|^2=4a_0^2\tag{8}$$

总截面(自旋单态,s 波)为

$$\sigma_t=4\pi\sigma(\theta)=16\pi a_0^2\tag{9}$$

考虑到入射中子和靶中子都是未极化的,自旋指向取随机分布,两中子形成自旋单态($S=0$)的概率为 1/4,形成自旋三重态($S=1$)的概率为 3/4,后者对 s 波散射无贡献.因此,有效的总截面为

$$\sigma_{有效}=\frac{1}{4}\sigma_t=4\pi a_0^2=4\pi a^2\left(\frac{\tan k_0 a}{k_0 a}-1\right)^2\tag{10}$$

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.共振散射的条件为 $a_0\to\pm\infty$,亦即[参看式(6)]

$$k_0 a=\frac{\pi}{2},\frac{3\pi}{2},\frac{5\pi}{2},\cdots\tag{11}$$

这正是势阱的"阱口"出现束缚能级($E=0^-$)的条件.这时式(9)和(10)应改为[参看题 11.6]

$$\sigma_t=16\pi|f|^2=\frac{16\pi}{k^2}=\frac{8\pi\hbar^2}{\mu E_r}=\frac{32\pi\hbar^2}{mE}\tag{12}$$

$$\sigma_{有效}=\frac{1}{4}\sigma_t=\frac{8\pi\hbar^2}{mE} \tag{13}$$

其中 E 为实验室坐标系中入射中子动能，$E_c=E/2$ 为质心系中总动能，$E_c=\hbar^2k^2/2\mu$.

11.13 热中子被质子散射. 姑且设作用势为球方势阱，且与自旋无关，即

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

已知势阱中存在一个束缚态($l=0$)能级，其值为

$$\varepsilon=-2.23\text{MeV}$$

(氘核结合能). 热中子动能约为 $E_0\approx\frac{1}{40}$eV. 势阱宽(核力力程)$a\approx2\times10^{-13}$cm，V_0 约 25～30MeV. 试证明散射只在 s 道($l=0$)进行，总截面可以近似表示成

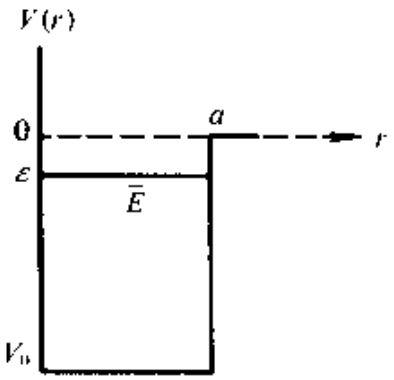


图 11.13

$$\sigma_0\approx 4\pi\hbar^2/m|\varepsilon|$$

证 以 m 表示中子质量，中子质子体系的约化质量 $\mu\approx m/2$. 当热中子以实验室动能

$$E_0 \approx \frac{1}{40}\text{eV}$$

入射，质心系中总动能约为

$$E \approx \frac{1}{2}E_0 \approx \frac{1}{80}\text{eV}$$

因此

$$k = \sqrt{2\mu E}/\hbar \approx \sqrt{mc^2 E}/\hbar c \approx 1.7 \times 10^8 \text{cm}^{-1}$$

$$ka \approx 3.5 \times 10^{-5} \ll 1$$

因此只需考虑 s 波散射. s 态波函数可以表示成

$$\psi(r) = u(r)/r$$

束缚态和散射态都是 s 态，其波函数分别记为

$$\psi_\varepsilon = \frac{u_\varepsilon(r)}{r}, \qquad \psi_E = \frac{u_E(r)}{r} \tag{1}$$

u_ε 和 u_E 分别满足径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}u''_\varepsilon + V(r)u_\varepsilon = \varepsilon u_\varepsilon, \quad (\varepsilon < 0) \tag{2}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}u'_E + V(r)u_E = Eu_E, \quad (E > 0) \tag{3}$$

在势阱内($r<a$)，$V(r)=-V_0$，由于 $V_0 \gg E, |\varepsilon|$，如略去方程中含有 ε 和 E 的项，对波函数并无多大影响. 由此可以断定

$$u_\varepsilon \approx u_E, \qquad r < a \tag{4}$$

阱外($r>a$)$V(r)=0$，方程(2)和(3)的解可以表示成

$$u_\varepsilon(r) = Ce^{-\beta r}, \qquad r > a, \quad \beta = \sqrt{2\mu|\varepsilon|}/\hbar \tag{5}$$

$$u_E(r) = A\sin(kr + \delta_0), \qquad r > a \tag{6}$$

(均已考虑到 $r\to\infty$ 处的边界条件.)在 $r=a$ 处，势阱内、外波函数

应满足 u'/u 连续的条件. 由于在阱内 $u_\varepsilon \approx u_E$，故应有

$$\left.\frac{u'_\varepsilon}{u_\varepsilon}\right|_{r=a} \approx \left.\frac{u'_E}{u_E}\right|_{r=a} \tag{7}$$

而由阱外波函数的表示式(5)、(6)可得

$$\left.\frac{u'_\varepsilon}{u_\varepsilon}\right|_{r=a} = -\beta, \qquad \left.\frac{u'_E}{u_E}\right|_{r=a} = k\cot(ka+\delta_0) \tag{8}$$

因此，

$$k\cot(ka+\delta_0) \approx -\beta = -\sqrt{2\mu|\varepsilon|}/\hbar \tag{9}$$

上式就是确定相移 δ_0 的方程(近似的)，成立条件为 $V_0 \gg E, |\varepsilon|$.

当 $E \to 0, ka \to 0$，式(9)成为

$$k\cot\delta_0 \approx -\beta = -\sqrt{2\mu|\varepsilon|}/\hbar, \quad (k \to 0) \tag{10}$$

所以 $1/\beta$ 就是散射长度[参看 11.6 题式(7)]. 散射振幅为

$$f = \frac{1}{k\cot\delta_0 - \mathrm{i}k} = -\frac{1}{\beta + \mathrm{i}k} \tag{11}$$

s 波总截面为

$$\sigma_0 = 4\pi|f|^2 = \frac{4\pi}{\beta^2+k^2} = \frac{4\pi\hbar^2}{2\mu(|\varepsilon|+E)} \tag{12}$$

热中子能量 E 远小于氘核结合能 $|\varepsilon|$，上式中略去 E，即得

$$\boxed{\sigma_0 \approx \frac{2\pi\hbar^2}{\mu|\varepsilon|} \approx \frac{4\pi\hbar^2}{m|\varepsilon|}} \tag{13}$$

以 ε 及 m(中子质量)之值代入上式，算出 $\sigma_0 \approx 2.3\times10^{-24}\mathrm{cm}^2$.

讨论 1° 本题所得主要结果式(10)至(13)，均和势阱的深度 V_0 及宽度 a 无直接关系，亦即和作用势的具体函数形式无关. 只要是短程作用($ka \ll 1$)，并满足条件 $|\varepsilon| \ll V_0$，式(10)至(13)即可成立.

2° 散射长度 a_0 和束缚态能级 ε 的关系为

$$1/a_0 = \beta = \sqrt{2\mu|\varepsilon|}/\hbar$$

因此，当势阱中存在束缚态能级时，散射长度必为正值；反之，如 $a_0<0$，则势阱中必然不存在束缚态能级. 可以想象，如势阱适当地变得更浅、更窄，则能级 ε 的绝对值将越来越小、而趋于 0，这时 a_0 为很大的正值($a_0\to\infty$). 如势阱再进一步变浅、变窄，a_0 将变为很大的负值($1/a_0$ 由稍大于 0 变为稍小于 0)，这时势阱中已经不存在束缚态能级，但有时仍称由下式定义的量

$$\varepsilon = \hbar^2/2\mu a_0^2, (a_0 \text{ 为很大的负值})$$

为该势阱的“虚能级”，意思是，只要势阱稍为变深或变宽，该“虚能级”就可以变成真实的能级.

3° 式(11)中，k 为正实数. 但如将式(11)解析延拓到 E 可以取一切复数值，则显然 $k=\mathrm{i}\beta$(即 $E=-|\varepsilon|$)为散射振幅 f 的奇点. 可以普遍证明[①]，分立能级是散射振幅 f 的单极点(在解析延拓的意义上).

4° 事实上，中子-质子作用势和自旋有关. 氘核自旋为 1，故本题结果相当于 n-p 自旋三重态($S=1$)的散射. n-p 体系处于自旋单态($S=0$)时，不存在束缚态，散射长度为负值(参看下题).

11.14 实验发现，中子-质子低能 s 波散射的散射振幅和散射截面与中子-质子体系的自旋状态有关. 对于自旋单态和自旋三重态，散射振幅分别为

$$f_1 = -2.37\times10^{-12}\text{cm}, \qquad f_3 = 0.538\times10^{-12}\text{cm}$$

(a) 分别求自旋单态及自旋三重态的总散射截面；

(b) 如入射中子(n)和质子(p)都是未极化的，求总截面；

---

① 参看 Landau 等，《量子力学》(高等教育出版社，1980)，§128.

(c) 如入射中子自旋"向上",质子靶自旋"向下",求总截面以及散射后 n、p 自旋均转向相反方向的概率.

解 (a)以 ψ_i 表示入射波,ψ_s 表示散射波. 如散射振幅与自旋无关,s 波散射过程可以表示成

$$\psi_i = e^{ikz} \to \psi_s \approx f\frac{e^{ikr}}{r} \tag{1}$$

其中箭头表示由入射波转化成散射波,f 为散射振幅. 如果散射作用势与自旋有关,则散射振幅 f 也与体系的自旋状态有关,式(1)应改为

$$\begin{aligned} &\chi_{00}e^{ikz} \to f_1\chi_{00}\frac{e^{ikr}}{r} \\ &\chi_{1M}e^{ikz} \to f_3\chi_{1M}\frac{e^{ikr}}{r}, \qquad M = 1,0,-1 \end{aligned} \tag{2}$$

其中 χ_{00} 表示 n-p 体系自旋单态($S=0$),χ_{1M}表示自旋三重态($S=1$).

s 波散射的总截面为

$$\sigma = 4\pi|f|^2 \tag{3}$$

自旋单态和三重态的总截面分别为

$$\begin{aligned} \sigma_1 &= 4\pi|f_1|^2 = 70.6\times10^{-24}\text{cm}^2 \\ \sigma_3 &= 4\pi|f_3|^2 = 3.64\times10^{-24}\text{cm}^2 \end{aligned} \tag{4}$$

(b)如 n、p 均未极化,即自旋指向是混乱的,则构成单态($S=0$)的概率为 1/4,构成三重态($S=1$)的概率为 3/4,因此总截面应为

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{1}{4}\sigma_1 + \frac{3}{4}\sigma_3 = \pi(|f_1|^2 + 3|f_3|^2) \\ &= 20.4\times10^{-24}\text{cm}^2 \end{aligned} \tag{5}$$

(c) 入射波波函数的自旋部分为

$$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p$$

$$= \frac{1}{2}\left\{\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p + \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_n\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p\right\}$$

$$+ \frac{1}{2}\left\{\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p - \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_n\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p\right\}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\chi_{10} + \frac{1}{\sqrt{2}}\chi_{00}$$

入射波为

$$\psi_i = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{10} + \chi_{00})e^{ikz} \tag{6}$$

按照式(2)，散射波为

$$\psi_s \approx \frac{1}{\sqrt{2}}(f_1\chi_{00} + f_3\chi_{10})\frac{e^{ikr}}{r} \tag{7}$$

散射截面和散射波的径向流密度成正比，后者定义是

$$j_s = -\frac{i\hbar}{2\mu}\psi_s^{\dagger}\frac{\partial}{\partial r}\psi_s + \text{c.c.} \tag{8}$$

对于式(1)，略去 $1/r^3$ 以上小量后，求出

$$j_s = \frac{\hbar k}{\mu}\frac{1}{r^2}|f|^2 \tag{9}$$

对于式(7)，注意到 χ_{00} 和 χ_{10} 的正交归一性，容易算出

$$j_s = \frac{\hbar k}{\mu}\frac{1}{r^2}\frac{1}{2}(f_1^2 + f_3^2) \tag{10}$$

式(10)相当于式(9)中 $|f|^2$ 换成 $\frac{1}{2}(f_1^2+f_3^2)$. 总截面可在式(3)中作同样的代换而得出：

$$\sigma = 2\pi(f_1^2 + f_3^2) = \frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_3) = 37.1 \times 10^{-24}\text{cm}^2 \quad (11)$$

最后，为了计算 n、p 自旋反转概率，将式(7)写成

$$\begin{aligned}\psi_s &= \frac{1}{\sqrt{2}}(f_1\chi_{10} + f_3\chi_{10})\frac{e^{ikr}}{r} \\ &= \left\{\frac{1}{2}(f_3 + f_1)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p\right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2}(f_3 - f_1)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_n\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p\right\}\frac{e^{ikr}}{r} \end{aligned} \quad (12)$$

其中第一项的自旋状态和入射波相同，第二项反映出由于散射而发生了 n、p 自旋指向反转. 因此

$$\begin{aligned}\text{自旋反转概率} &= \frac{(f_3 - f_1)^2}{(f_3 + f_1)^2 + (f_3 - f_1)^2} \\ &= \frac{(f_3 - f_1)^2}{2(f_3^2 + f_1^2)} = 0.716 \end{aligned} \quad (13)$$

11.15 同上题，设质子自旋“向上”(指向 z 轴方向，即入射方向)，入射中子自旋指向(θ,φ)方向，求低能 s 波散射总截面.

解 以 ξ、η 分别表示散射前中子和质子的自旋态，它们是(参看 6.12 题)

$$\xi = \begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{pmatrix}, \qquad \eta = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \quad (1)$$

二者都是归一化的，但是并不正交，标积为

$$\xi^{\dagger}\eta = \eta^{\dagger}\xi = \cos\frac{\theta}{2} \quad (2)$$

散射前 n-p 体系的自旋态为

$$\chi(\mathrm{n},\mathrm{p}) = \xi(\mathrm{n})\eta(\mathrm{p}) = \begin{pmatrix} \cos\dfrac{\theta}{2} \\ \sin\dfrac{\theta}{2}e^{i\varphi} \end{pmatrix}_{\mathrm{n}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_{\mathrm{p}} \tag{3}$$

需要将 $\chi(\mathrm{n},\mathrm{p})$展开成自旋单态和三重态之和. 单态是交换反对称的,三重态则是对称的. 由单粒子态 ξ、η 可以构成的对称和反对称态显然如下:

$$\begin{aligned} &\text{对称态}\quad \chi^{(S)} = \frac{1}{2}[\xi(\mathrm{n})\eta(\mathrm{p}) + \eta(\mathrm{n})\xi(\mathrm{p})] \\ &\text{反对称态}\quad \chi^{(A)} = \frac{1}{2}[\xi(\mathrm{n})\eta(\mathrm{p}) - \eta(\mathrm{n})\xi(\mathrm{p})] \end{aligned} \tag{4}$$

$\chi^{(S)}$和 $\chi^{(A)}$显然是正交的,但不归一化,

$$\begin{aligned} \langle\chi^{(S)}|\chi^{(S)}\rangle &= \frac{1}{4}[2 + \xi^{+}(\mathrm{n})\eta(\mathrm{n})\eta^{+}(\mathrm{p})\xi(\mathrm{p}) + \mathrm{c.c.}] \\ &= \frac{1}{2}\left(1 + \cos^2\frac{\theta}{2}\right) \end{aligned} \tag{5}$$

$$\langle\chi^{(A)}|\chi^{(A)}\rangle = \frac{1}{2}\left(1 - \cos^2\frac{\theta}{2}\right) = \frac{1}{2}\sin^2\frac{\theta}{2}$$

入射波波函数可以表示成

$$\psi_i = \xi(\mathrm{n})\eta(\mathrm{p})e^{ikz} = [\chi^{(S)} + \chi^{(A)}]e^{ikz} \tag{6}$$

仿照上题,可知散射波为

$$\psi_s = [f_3\chi^{(S)} + f_1\chi^{(A)}]\frac{e^{ikr}}{r} \tag{7}$$

总截面为

$$\begin{aligned} \sigma &= 4\pi[f_3^2\langle\chi^{(S)}|\chi^{(S)}\rangle + f_1^2\langle\chi^{(A)}|\chi^{(A)}\rangle] \\ &= 4\pi\left[f_3^2\cdot\frac{1}{2}\left(1 + \cos^2\frac{\theta}{2}\right) + f_1^2\cdot\frac{1}{2}\sin^2\frac{\theta}{2}\right] \\ &= \frac{1}{2}\sigma_1\sin^2\frac{\theta}{2} + \frac{1}{2}\sigma_3\left(1 + \cos^2\frac{\theta}{2}\right) \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{4}(1-\cos\theta)\sigma_1 + \frac{1}{4}(3+\cos\theta)\sigma_3 \qquad (8)$$

讨论 1° 如果中子的极化方向 $\theta=0$，入射波自旋态

$$\chi(n,p) = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p = \chi_{11}$$

为单纯三重态，式(8)给出 $\sigma=\sigma_3$.

如果 $\theta=\pi$，则入射波自旋态为 $\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_n \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p$，式(8)给出

$$\sigma = \frac{1}{2}(\sigma_1+\sigma_3)$$

这种情况类似于上题(c).

2° 如果入射中子是未极化的，则计算有效总截面时应将式(8)对于各(θ,φ)方向平均. 由于 $\cos\theta$ 平均为 0，故得

$$\sigma_{有效} = \frac{1}{4}\sigma_1 + \frac{3}{4}\sigma_3$$

这种情况类似于上题(b).

11.16 在 n-p 低能 s 波散射问题中，为了简化计算过程，引入“散射振幅算符”[①]

$$\boxed{\hat{f} = \frac{1}{4}(3f_3+f_1) + \frac{1}{4}(f_3-f_1)\boldsymbol{\sigma}_n\cdot\boldsymbol{\sigma}_p} \qquad (1)$$

其中 f_1 和 f_3 是 n-p 体系自旋单态和三重态的散射振幅，$\boldsymbol{\sigma}_n$ 和 $\boldsymbol{\sigma}_p$ 是中子和质子的 Pauli 自旋算符.

---

① 如引入自旋三重态和单态的投影算符

$$\hat{P}_3=\frac{1}{4}(3+\boldsymbol{\sigma}_n\cdot\boldsymbol{\sigma}_p), \qquad \hat{P}_1=\frac{1}{4}(1-\boldsymbol{\sigma}_n\cdot\boldsymbol{\sigma}_p)$$

则式(1)可以表示成

$$\hat{f}=f_3\hat{P}_3+f_1\hat{P}_1$$

(a) 证明 $\hat{f}$ 作用于入射波的自旋波函数，能够给出散射振幅的正确结果；

(b) 导出总截面的计算公式；

(c) 利用算符 $\hat{f}$ 重新处理题 11.14 和 11.15.

解 (a) n-p 体系的自旋单态(反对称态)和三重态(对称态)都是 $\boldsymbol{\sigma}_n \cdot \boldsymbol{\sigma}_p$ 的本征态，本征值分别为 -3 和 1，即

$$\boldsymbol{\sigma}_n \cdot \boldsymbol{\sigma}_p \chi^{(S)} = \chi^{(S)}, \boldsymbol{\sigma}_n \cdot \boldsymbol{\sigma}_p \chi^{(A)} = -3\chi^{(A)} \tag{2}$$

因此

$$\hat{f}\chi^{(A)} = f_1 \chi^{(A)}, \qquad \hat{f}\chi^{(S)} = f_3 \chi^{(S)} \tag{3}$$

n-p 体系的任何自旋态总可以表示成对称态与反对称态之叠加：

$$\chi(\mathrm{n,p}) = \chi^{(S)} + \chi^{(A)} \tag{4}$$

如入射波的自旋波函数表示成式(4)，以算符 $\hat{f}$ 作用之，即得

$$\hat{f}\chi(\mathrm{n,p}) = f_3 \chi^{(S)} + f_1 \chi^{(A)} \tag{5}$$

这正是散射振幅的正确结果.

(b) 当入射波的自旋态表示成式(4)时，如求 $\hat{f}^2$ 的平均值，显然可得

$$\langle \chi | \hat{f}^2 | \chi \rangle = f_1^2 \langle \chi^{(A)} | \chi^{(A)} \rangle + f_3^2 \langle \chi^{(S)} | \chi^{(S)} \rangle \tag{6}$$

上式乘 4π，就是总截面. 因此，总截面的计算公式是

$$\boxed{\sigma = 4\pi \langle \chi(\mathrm{n,p}) | \hat{f}^2 | \chi(\mathrm{n,p}) \rangle} \tag{7}$$

算符 $\hat{f}^2$ 可将式(1)平方而算出，利用公式(见题 6.39)

$$(\boldsymbol{\sigma}_\mathrm{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}_\mathrm{p})^2 = 3 - 2\boldsymbol{\sigma}_\mathrm{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}_\mathrm{p}$$

易将 $\hat{f}^2$ 化简成下列形式：

$$\hat{f}^2 = \frac{1}{4}(3f_3^2 + f_1^2) + \frac{1}{4}(f_3^2 - f_1^2)\boldsymbol{\sigma}_\mathrm{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}_\mathrm{p} \tag{8}$$

(c) 下面利用式(7)和(8)重新处理上两题中的几种 n-p 散射问题.

1° 如中子或质子至少有一个自旋是未极化的,即其自旋指向是混乱的,则当计算 $\hat{f}^2$ 的平均值时,$\sigma_n \cdot \sigma_p$ 的随机平均值为 0,于是得到

$$\begin{aligned} \langle \hat{f}^2 \rangle &= \frac{1}{4} f_1^2 + \frac{3}{4} f_3^2 \\ \sigma &= 4\pi \langle \hat{f}^2 \rangle = \pi(f_1^2 + 3f_3^2) = \frac{1}{4}\sigma_1 + \frac{3}{4}\sigma_3 \end{aligned} \tag{9}$$

2° 入射中子自旋"向上",质子自旋"向下",即

$$\chi(\mathrm{n},\mathrm{p}) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_n \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_p$$

容易算出

$$\begin{aligned} \langle \sigma_n \cdot \sigma_p \rangle &= -1 \\ \langle \hat{f}^2 \rangle &= \frac{1}{2}(f_3^2 + f_1^2) \end{aligned} \tag{10}$$

$$\sigma = 4\pi \langle \hat{f}^2 \rangle = 2\pi(f_3^2 + f_1^2) = \frac{1}{2}(\sigma_3 + \sigma_1)$$

3° 入射中子沿(θ,φ)方向极化,质子自旋"向上"(指向 z 轴),即

$$\chi(\mathrm{n},\mathrm{p}) = \begin{pmatrix} \cos\dfrac{\theta}{2} \\ \sin\dfrac{\theta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix}_n \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_p \tag{11}$$

这时

$$\begin{aligned} \langle \sigma_n \cdot \sigma_p \rangle &= \langle \sigma_{nx}\sigma_{px} + \sigma_{ny}\sigma_{py} + \sigma_{nz}\sigma_{pz} \rangle \\ &= \langle \sigma_{nx} \rangle \langle \sigma_{px} \rangle + \langle \sigma_{ny} \rangle \langle \sigma_{py} \rangle + \langle \sigma_{nz} \rangle \langle \sigma_{pz} \rangle \end{aligned}$$

因为$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p$是$\sigma_{pz}$的本征态，故有

$$\langle\sigma_{pz}\rangle = 1, \quad \langle\sigma_{px}\rangle = 0, \quad \langle\sigma_{py}\rangle = 0$$

而

$$\langle\sigma_{nz}\rangle = \left(\cos\frac{\theta}{2} \quad \sin\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi}\right)\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{pmatrix}$$

$$= \cos^2\frac{\theta}{2} - \sin^2\frac{\theta}{2} = \cos\theta$$

所以

$$\langle\boldsymbol{\sigma}_n \cdot \boldsymbol{\sigma}_p\rangle = \cos\theta \tag{12}$$

$$\langle\hat{f}^2\rangle = \frac{1}{4}(3f_3^2 + f_1^2) + \frac{1}{4}(f_3^2 - f_1^2)\cos\theta \tag{13}$$

$$\sigma = 4\pi\langle\hat{f}^2\rangle = \pi f_1^2(1 - \cos\theta) + \pi f_3^2(3 + \cos\theta)$$

$$= \frac{1}{4}(1 - \cos\theta)\sigma_1 + \frac{1}{4}(3 + \cos\theta)\sigma_3 \tag{14}$$

特例：

$$\theta = 0, \qquad \sigma = \sigma_3$$

$$\theta = \frac{\pi}{2}, \qquad \sigma = \frac{3}{4}\sigma_3 + \frac{1}{4}\sigma_1$$

$$\theta = \pi, \qquad \sigma = \frac{1}{2}(\sigma_3 + \sigma_1)$$

如入射中子未极化，应将式(14)对各(θ,φ)方向取平均值，由于$\cos\theta$平均为0，得到

$$\sigma = \frac{3}{4}\sigma_3 + \frac{1}{4}\sigma_1 \tag{15}$$

所有这些结果，均与题11.14和11.15的结果相同.

11.17 慢中子被氢分子散射，设中子波长远大于分子键长．散射同时来自两个质子(氢原子核)，而且质子间距离对散射波位相的影响可以忽略．但是必须考虑到，两个质子可能处于不同的自旋状态．设入射中子是未极化的．

(a) 分别计算中子对正氢($S=1$)分子和仲氢($S=0$)分子的散射截面，以及二者之比；

(b) 常温下，氢气中约 3/4 为正氢，1/4 为仲氢，试求总截面的平均值；

(c) 如果没有正、仲氢之分，即假设氢分子中两个质子的自旋指向是完全混乱的，总截面的有效值等于多少？和(b)的结果作比较．

解 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，因此散射振幅算符(参看上题的定义)可以写成

$$\hat{f}=\frac{1}{2}(f_1+3f_3)+\frac{1}{4}(f_3-f_1)\boldsymbol{\sigma}_n\cdot(\boldsymbol{\sigma}_{p1}+\boldsymbol{\sigma}_{p2}) \tag{1}$$

以 $\chi(n,p1,p2)$表示入射波的自旋波函数，总截面等于

$$\sigma=4\pi\langle\chi(n,p1,p2)|\hat{f}^2|\chi(n,p1,p2)\rangle \tag{2}$$

两个质子的总自旋记为

$$\boldsymbol{S}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_{p1}+\boldsymbol{\sigma}_{p2}),\qquad (\text{取}\hbar=1) \tag{3}$$

式(1)可以写成

$$\hat{f}=\frac{1}{2}(f_1+3f_3)+\frac{1}{2}(f_3-f_1)\boldsymbol{\sigma}_n\cdot\boldsymbol{S} \tag{1'}$$

利用公式

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\sigma}_n\cdot\boldsymbol{S})^2&=\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{S}+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_n\times(\boldsymbol{S}\times\boldsymbol{S})\\&=\boldsymbol{S}^2-\boldsymbol{\sigma}_n\cdot\boldsymbol{S}\end{aligned}$$

容易证明

$$\hat{f}^2 = \frac{1}{4}[(3f_3 + f_1)^2 + (f_3 - f_1)^2 \boldsymbol{S}^2 + (5f_3 + 3f_1)(f_3 \quad f_1)\boldsymbol{\sigma}_n \cdot \boldsymbol{S}] \tag{4}$$

将式(4)代入式(2),即可求出总截面 σ.

(a) 未极化中子被氢分子散射,由于 $\boldsymbol{\sigma}_n$的指向是混乱的,当按照式(2)计算 $\hat{f}^2$ 平均值时,$\boldsymbol{\sigma}_n \cdot \boldsymbol{S}$ 的随机平均值可取为 0. 对于正氢,$\boldsymbol{S}^2=2$,总截面为

$$\sigma_{正} = 4\pi \cdot \frac{1}{4}[(3f_3 + f_1)^2 + 2(f_3 - f_1)^2] = \pi(11f_3^2 + 3f_1^2 + 2f_3f_1) \tag{5}$$

对于仲氢,$\boldsymbol{S}^2=0$,总截面为

$$\sigma_{仲} = \pi(3f_3 + f_1)^2 \tag{6}$$

二者之比为

$$\frac{\sigma_{正}}{\sigma_{仲}} = 1 + \frac{2(f_3 - f_1)^2}{(3f_3 + f_1)^2} \tag{7}$$

(b) 如氢气中 3/4 为正氢,1/4 为仲氢,则中子的平均总截面为

$$\sigma_{平均} = \frac{3}{4}\sigma_{正} + \frac{1}{4}\sigma_{仲} = \pi(3f_3 + f_1)^2 + \frac{3\pi}{2}(f_3 - f_1)^2 \tag{8}$$

(c) 如氢分子中两质子的自旋指向是混乱的,则应取 $\boldsymbol{\sigma}_n \cdot \boldsymbol{S}$ 的随机平均值为 0,$\boldsymbol{S}^2$ 的随机平均值为 3/2[$\boldsymbol{S}^2 = 2\times\frac{3}{4} + 2\boldsymbol{s}_{p1} \cdot \boldsymbol{s}_{p2}$,$\boldsymbol{s}_{p1} \cdot \boldsymbol{s}_{p2}$的随机平均值为 0]. 因此总截面的有效值为

$$\sigma_{有效} = \pi(3f_3 + f_1)^2 + \frac{3\pi}{2}(f_3 - f_1)^2 \tag{9}$$

和式(8)一致.

11.18 质量为 m 的粒子被一个很重的靶粒子散射，二者自旋均为 $\hbar/2$，相互作用势为

$$V = As_1 \cdot s_2\delta(\boldsymbol{r}) \tag{1}$$

其中 A 为很小的常数，s_1、s_2 分别为入射粒子和靶粒子的自旋算符，$\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2$ 为二者相对距离. 设入射粒子自旋"向上"，入射动量 $p=\hbar k$，靶粒子自旋指向呈无规分布. 试求总散射截面以及散射后粒子自旋仍然保持向上的概率.

解 由于靶粒子很重，可以不考虑其空间运动，但其自旋状态显然与散射过程有关，应该包括在入射波和散射波的波函数中加以分析. 就空间波函数来说，散射过程可以归结为

$$(\text{入射波})\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} \to (\text{散射波}) f(\theta)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} \tag{2}$$

$f(\theta)$ 为散射振幅. 如作用势很弱（A 很小），$f(\theta)$ 可用 Born 近似公式

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int V(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}_0-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}^3x \tag{3}$$

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(1)中 $s_1\cdot s_2$ 分别等于 $-3\hbar^2/4$ 和 $\hbar^2/4$，作用势分别为

$$V_1 = -\frac{3}{4}A\hbar^2\delta(\boldsymbol{r}),\quad V_3 = \frac{1}{4}A\hbar^2\delta(\boldsymbol{r}) \tag{1'}$$

代入式(3)，给出不同的散射振幅

$$f_1 = \frac{3}{8\pi}mA,\qquad f_3 = -\frac{1}{8\pi}mA \tag{4}$$

二者均和方向无关，散射是各向同性的. 注意 $f_1=-3f_3$.

自旋单态和三重态的散射过程可以表示成

$$\begin{aligned}&\chi_{00}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} \to \chi_{00}f_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}/r\\ &\chi_{1M}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} \to \chi_{1M}f_3\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}/r,\qquad M=1,0,-1\end{aligned} \tag{2'}$$

二者的总截面分别为

$$\sigma_1 = 4\pi f_1^2, \qquad \sigma_3 = 4\pi f_3^2 \tag{5}$$

本题入射粒子自旋态为$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1$，靶粒子自旋态为$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2$及$\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2$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

$$\psi_i = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2 e^{ikz} = \chi_{11}e^{ikz} \tag{6}$$

为三重态，总截面为σ_3. 按照式(2′)，散射波应该是

$$\psi_s \approx \chi_{11}f_3 e^{ikr}/r = f_3\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2 e^{ikr}/r \tag{7}$$

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) 散射前靶粒子自旋"向下"，则入射波波函数为

$$\begin{aligned}\psi_i &= \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2 e^{ikz}\\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{10}+\chi_{00})e^{ikz}\end{aligned} \tag{8}$$

按照式(2′)，散射波应该是

$$\psi_s = \frac{1}{\sqrt{2}}(f_3\chi_{10}+f_1\chi_{00})e^{ikr}/r \tag{9}$$

$$\begin{aligned}&= \left[\frac{1}{2}(f_3+f_1)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2\right.\\ &\quad \left.+\frac{1}{2}(f_3-f_1)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2\right]\frac{e^{ikr}}{r}\end{aligned} \tag{9′}$$

无论是式(9)还是式(9′)，ψ_s中的两项自旋波函数都是正交的. 按照式(9)，总截面为

$$\sigma = 4\pi \left| \frac{1}{\sqrt{2}}(f_3\chi_{10} + f_1\chi_{00}) \right|^2 = 2\pi(f_3^2 + f_1^2) \qquad (10)$$

按照式(9′),总截面为

$$\begin{aligned}\sigma &= 4\pi \left| \frac{1}{2}(f_3 + f_1)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2}(f_3 - f_1)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_2 \right|^2 \\ &= \pi[(f_3 + f_1)^2 + (f_3 - f_1)^2] \\ &= 2\pi(f_3^2 + f_1^2) \end{aligned} \qquad (10')$$

散射波的两种表示给出相同的总截面,这是意料之中的.

出现这种情况的概率亦为 1/2,故对总截面的贡献为

$$\pi(f_3^2 + f_1^2) = \frac{1}{4}(\sigma_3 + \sigma_1)$$

综合(a)、(b)两种情况,可知有效的总截面为

$$\begin{aligned}\sigma_t &= \frac{1}{2}\sigma_3 + \frac{1}{4}(\sigma_3 + \sigma_1) \\ &= \frac{3}{4}\sigma_3 + \frac{1}{4}\sigma_1 = \frac{3}{16\pi}m^2A^2 \end{aligned} \qquad (11)$$

情况(a)及式(9′)中第一项相当于入射粒子经过散射后自旋方向仍保持"向上".按照散射截面的意义,易知相应的概率为

$$\begin{aligned}P(\uparrow \to \uparrow) &= \left[\frac{1}{2}\sigma_3 + 2\pi\left(\frac{f_3 + f_1}{2}\right)^2\right]/\sigma_3 \\ &= \frac{2f_3^2 + \frac{1}{2}(f_3 + f_1)^2}{3f_3^2 + f_1^2} = \frac{1}{3} \end{aligned} \qquad (12)$$

11.19 考虑 n-p 低能 s 波散射,设 s 波相移 δ_0 与 n-p 体系自旋状态有关,对于自旋单态,为 δ_1,对于三重态,为 δ_t. 设中子入射时自旋指向前进方向(z 轴方向),质子(靶)是非极化的. 试求(a)

中子自旋取向保持不变的散射截面；(b) 中子自旋反向的散射截面；(c) 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

$$\boxed{f_1=\frac{1}{k}e^{i\delta_1}\sin\delta_1,\qquad f_3=\frac{1}{k}e^{i\delta_t}\sin\delta_t} \tag{1}$$

入射波中，中子自旋态为$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n$，质子自旋态取$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p$和$\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p$的概率各为 1/2.

1° 入射波为

$$\psi_i=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p e^{ikz}=\chi_{11}e^{ikz} \tag{2}$$

仿照题 11.14 的分析，散射波为

$$\psi_s\doteq f_3\chi_{11}e^{ikr}/r=f_3\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_p e^{ikr}/r \tag{3}$$

散射后中子自旋取向不变. 这种情况下，散射截面为 $4\pi|f_3|^2$. 由于出现这种情况的随机概率为 1/2，故对散射截面 σ_{tt} 的贡献为 $2\pi|f_3|^2$.

2° 入射波为

$$\begin{aligned}\psi_i&=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p e^{ikz}\\&=\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{10}+\chi_{00})e^{ikz}\end{aligned}$$

则散射波为

$$\begin{aligned}\psi_s&\approx\frac{1}{\sqrt{2}}(f_3\chi_{10}+f_1\chi_{00})e^{ikr}/r\\&=\left[\frac{1}{2}(f_3+f_1)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_n\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_p\right.\end{aligned}$$

$$+\frac{1}{2}(f_3-f_1)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}_n\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_\downarrow\Big]\frac{e^{ikr}}{r} \tag{4}$$

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. 出现这种情况的随机概率亦为 1/2，故对 $\sigma_{\uparrow\uparrow}$ 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：

(a) 中子自旋取向保持不变的散射截面为

$$\sigma_{\uparrow\uparrow}=2\pi|f_3|^2+\frac{\pi}{2}|f_3+f_1|^2 \tag{5}$$

(b) 中子自旋反向的散射截面为

$$\sigma_{\uparrow\downarrow}=\frac{\pi}{2}|f_3-f_1|^2 \tag{6}$$

(c) 总截面为

$$\begin{aligned}\sigma_t=\sigma_{\uparrow\uparrow}+\sigma_{\uparrow\downarrow}&=2\pi|f_3|^2+\frac{\pi}{2}(|f_3+f_1|^2+|f_3-f_1|^2)\\&=\pi(|f_1|^2+3|f_3|^2)\end{aligned} \tag{7}$$

注意，上题和本题的处理方法，原则上相同，只是 f_1 和 f_3 所用公式不同，上题利用了 Born 近似公式，本题利用了分波法公式.

11.20 质量为 μ 的粒子被中心势场

$$V(r)=\frac{\alpha}{r^2},\qquad \alpha>0$$

散射. (a) 求各分波相移 δ_l；(b) 在条件 $\frac{\mu\alpha}{\hbar^2}\ll\frac{1}{8}$ 下，求相移，散射振幅及微分截面的近似公式；(c) 用 Born 近似计算散射振幅及微分截面，并和(b)的结果比较.

解 (a) 定态 Schrödinger 方程为

$$\nabla^2\psi + \left[k^2 - \frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)\right]\psi = 0 \tag{1}$$

令

$$\psi = \sum_l R_l(r)Y_{l0}(\theta)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\sum_l \sqrt{2l+1}R_l(r)P_l(\cos\theta) \tag{2}$$

则 R_l 满足径向方程

$$\frac{d^2}{dr^2}R_l + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}R_l + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2\mu\alpha}{\hbar^2 r^2}\right]R_l = 0 \tag{3}$$

当 $\alpha=0$(势场为 0,粒子作自由运动)时,方程(3)满足边界条件

$$\text{当 } r \to 0,\infty \text{ 时,} \qquad R_l(r) \text{ 有限}$$

的解为

$$R_l^{(0)}(r) = j_l(kr) = \sqrt{\frac{\pi}{2kr}}J_{l+\frac{1}{2}}(kr) \tag{4}$$

$kr\to\infty$处,渐近表示为

$$R_l^{(0)}(r) = j_l(kr) \xrightarrow{r\to\infty} \frac{1}{kr}\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) \tag{5}$$

如令

$$l(l+1) + 2\mu\alpha/\hbar^2 = \nu(\nu+1) \tag{6}$$

即

$$\nu + \frac{1}{2} = \left[\left(l+\frac{1}{2}\right)^2 + \frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{6'}$$

则式(3)可以写成

$$\frac{d^2}{dr^2}R_l+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}R_l+\left[k^2-\frac{\nu(\nu+1)}{r^2}\right]R_l=0 \qquad (3')$$

在原点为有限的解为

$$R_l(r)=\sqrt{\frac{\pi}{2kr}}J_{\nu+\frac{1}{2}}(kr) \qquad (7)$$

式(7)和(4)的差别在于 l 换成了 ν. 式(7)的渐近表示为

$$R_l(r)\xrightarrow{r\to\infty}\frac{1}{kr}\sin\left(kr-\frac{\nu\pi}{2}\right) \qquad (8)$$

按照分波法普遍理论，R_l 的渐近表示为(略去常数因子)

$$R_l(r)\xrightarrow{r\to\infty}\frac{1}{kr}\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right) \qquad (9)$$

比较式(8)、(9)，即得 l 分波的相移公式：

$$\begin{aligned}\delta_l&=-\frac{\pi}{2}(\nu-l)\\&=-\frac{\pi}{2}\left[\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2+\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}}-\left(l+\frac{1}{2}\right)\right]\end{aligned} \qquad (10)$$

注意，δ_l 与入射能量($E=\hbar^2k^2/2\mu$)无关. 散射振幅为

$$f(\theta)=\frac{1}{k}\sum_l(2l+1)e^{i\delta_l}\sin\delta_l P_l(\cos\theta) \qquad (11)$$

显然 $f(\theta)\propto 1/k$，因此微分截面 $\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2\propto 1/E$.

(b) 如果 $\frac{\mu\alpha}{\hbar^2}\ll\frac{1}{8}$，可对式(6')和(10)作近似展开，

$$\begin{aligned}\nu+\frac{1}{2}&=\left(l+\frac{1}{2}\right)\left[1+\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}\right]^{1/2}\\&\approx l+\frac{1}{2}+\frac{\mu\alpha}{\left(l+\frac{1}{2}\right)\hbar^2}\end{aligned}$$

$$\delta_l = -\frac{\pi}{2}(\nu - l) \approx -\frac{\pi\mu\alpha}{(2l+1)\hbar^2} \tag{12}$$

注意，$|\delta_l| \ll 1$，因此式(11)中可取

$$e^{i\delta_l} \approx 1, \qquad \sin\delta_l \approx \delta_l$$

从而得到

$$\begin{aligned} f(\theta) &\approx \frac{1}{k}\sum_l (2l+1)\delta_l P_l(\cos\theta) \\ &= -\frac{\pi\mu\alpha}{\hbar^2 k}\sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos\theta) \\ &= -\frac{\pi\mu\alpha}{2\hbar^2 k\sin\frac{\theta}{2}} \end{aligned} \tag{13}$$

计算中利用了公式

$$1/\sin\frac{\theta}{2} = 2\sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos\theta) \tag{14}$$

微分截面为

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 \approx \frac{\pi^2\mu^2\alpha^2}{4\hbar^4 k^2}\frac{1}{\sin^2\frac{\theta}{2}} \tag{15}$$

由于 $\theta \to 0$ 处 $\sigma(\theta) \propto 1/\theta^2$，总截面是发散的.

注意，即使条件 $\frac{\mu\alpha}{\hbar^2} \ll \frac{1}{8}$ 不成立，对于足够大的 l，式(12)仍可成立，因此 $\theta \to 0$ 处 $f(\theta)$ 和 $\sigma(\theta)$ 的奇异性仍如式(13)和(15)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.

(c) 按照 Born 近似，散射振幅为

$$f(\theta) = -\frac{2\mu}{\hbar^2}\int_0^{\infty} dr r^2 V(r)\frac{\sin qr}{qr}$$

$$\left(q = 2k\sin\frac{\theta}{2}\right)$$

$$= -\frac{2\mu a}{\hbar^2}\int_0^\infty \mathrm{d}r\,\frac{\sin qr}{qr} = -\frac{\pi\mu a}{\hbar^2 q}$$

$$= -\pi\mu a/2\hbar^2 k\sin\frac{\theta}{2} \tag{16}$$

和式(13)一致，因此微分截面仍由式(15)表示，总截面是发散的.

附注　式(14)证明如下：

利用 $P_l(x)$的母函数公式

$$(1 + z^2 - 2xz)^{-1/2} = \sum_l z^l P_l(x)$$

令 $z\to 1$，即得

$$\sum_l P_l(x) = 1/\sqrt{2(1-x)}$$

再令 $x=\cos\theta$，即得

$$\sum_l P_l(\cos\theta) = 1/\sqrt{2(1-\cos\theta)}$$

$$= 1/2\sin\frac{\theta}{2}$$

此即式(14).[1]

11.21　在弹性散射问题中，以入射方向为 z 轴，以 θ 表示散射角，入射波和散射波记为 ψ_i 和 ψ_s，粒子动量记为 $p=\hbar k$. 如取入射波为

$$\psi_i = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}$$

在远离散射中心处($r\to\infty$)，散射波的渐近形式为

---

① 参考曾谨言，《量子力学》下册(科学出版社，1981)，§10.2，10.5. D. ter Haar 选编《量子力学习题集》(高等教育出版社，1965)，§9.

$$\psi_s \xrightarrow{r\to\infty} f(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r}$$

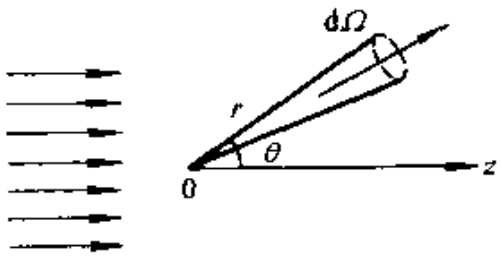


图 11.21

$f(\theta,\varphi)$称为散射振幅. 微分散射截面和总散射截面分别记为$\sigma(\theta,\varphi)$和σ_t,按照散射问题一般理论[①],

$$\sigma(\theta,\varphi) = |f(\theta,\varphi)|^2$$
$$\sigma_t = \int\sigma(\theta,\varphi)\mathrm{d}\Omega = \int|f(\theta,\varphi)|^2\mathrm{d}\Omega$$

试证明下列"光学定理":

$$\boxed{\sigma_t = \frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}f(0)}$$

证一 在远离散射中心处($r\to\infty$),总波函数为

$$\psi = \psi_i + \psi_s \to e^{ikz} + f(\theta,\varphi)e^{ikr}/r \tag{1}$$

径向流量为

$$j_r = -\frac{i\hbar}{2\mu}\left(\psi^*\frac{\partial}{\partial r}\psi - \psi\frac{\partial}{\partial r}\psi^*\right) \tag{2}$$

考虑到$z=r\cos\theta$,容易算出

$$j_r = \frac{\hbar k}{\mu}\left[\cos\theta + \frac{ff^*}{r^2} + \frac{1+\cos\theta}{2r}(fe^{ikr(1-\cos\theta)} + \mathrm{c.c.})\right]$$

---

① 参看曾谨言,《量子力学》卷 1 (科学出版社,1997),§ 11.1.

$$+\left[\frac{i\hbar}{2\mu}\frac{f}{r^2}e^{ikr(1-\cos\theta)}+c.c.\right] \tag{3}$$

其中 c.c. 表示前一项的共轭复数. 上式中第一项($\cos\theta$ 项)来自入射波 ψ_i,第二项(ff^* 项)来自散射波 ψ_s,其他各项来自 ψ_i 和 ψ_s 的"干涉效应". 这些干涉项均含有因子 $e^{\pm ikr(1-\cos\theta)}$,由于 kr 很大,当 θ 变化时,这些干涉项将迅速振荡. 利用公式

$$\lim_{\alpha\to\infty}\alpha e^{i\alpha x}=2i\delta(x),\qquad x\geqslant 0 \tag{4}$$

可以将 $e^{ikr(1-\cos\theta)}$ 表示成

$$e^{ikr(1-\cos\theta)}\xrightarrow{kr\to\infty}\frac{2i}{kr}\delta(1-\cos\theta) \tag{5}$$

代入式(3),即得

$$\begin{aligned}j_r=&\frac{\hbar k}{\mu}\left(\cos\theta+\frac{ff^*}{r^2}\right)\\&+i\frac{\hbar}{\mu}(f-f^*)\frac{1+\cos\theta}{r^2}\delta(1-\cos\theta)\\&-\frac{\hbar}{k\mu}\frac{f+f^*}{r^3}\delta(1-\cos\theta)\end{aligned} \tag{6}$$

在半径为 r 的大球面上,净流出量应该为 0,即

$$\oint j_r r^2 d\Omega=0 \tag{7}$$

注意到

$$\oint\cos\theta d\Omega=0$$

$$\begin{aligned}\oint\delta(1-\cos\theta)d\Omega=&\oint\delta(1-\cos\theta)\sin\theta d\theta d\varphi\\=&2\pi\int_{\theta=0}^{\theta=\pi}\delta(1-\cos\theta)d(1-\cos\theta)\end{aligned}$$

(令 $1-\cos\theta=x$)