量子力学解答

(钱伯初<量子力学>)

Chap1　绪论

1-13　(a) 求室温(T~300K)下中子的德布罗意波长.

(b) 如上述中子在地面附近下落 1m,求波长变化的比率.

解: (a) $\lambda = \dfrac{h}{p} = \dfrac{h}{\sqrt{2mE_k}} = \dfrac{h}{\sqrt{2m\dfrac{3}{2}kT}} = \dfrac{h}{\sqrt{3mkT}}$

中子的平均平动动能为

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

所以

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m\frac{3}{2}kT}} = \frac{h}{\sqrt{3mkT}}$$

代入数值得

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{3mkT}} = \frac{6.63\times10^{-34}}{\sqrt{3\times1.67\times10^{-27}\times1.38\times10^{-23}\times300}} = 1.45\times10^{-10}\,m = 0.145nm$$

(b) $\Delta\lambda = \Delta\dfrac{h}{p} = -\dfrac{h\Delta p}{p^2}$, 即 $\dfrac{\Delta\lambda}{\lambda} = -\dfrac{\Delta p}{p}$

由机械能守恒: $\dfrac{p^2}{2m} + mgh = E$,得 $\dfrac{p\Delta p}{m} + mg\Delta h = 0$,于是

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = -\frac{\Delta p}{p} = \frac{mg\Delta h}{2(p^2/2m)} = \frac{mg\Delta h}{2E_k} = \frac{mg\Delta h}{3kT} = \frac{1{,}67\times10^{-27}\times9.8\times(-1)}{3\times1.38\times10^{-23}\times300} = -1.32\times10^{-6}$$

1-14　质量为 m 的粒子受弹性力 $F=-kx$ $(k>0)$ 作用而作一维简谐振动,按照经典力学可以求出其运动规律为

$$x(t) = A\sin(\omega t + \alpha), \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

A 为振幅.谐振子的能量为 $E = \dfrac{1}{2}kA^2$. 以上请读者自行验证.试再利用玻尔-索末菲量子化条

课后答案网 www.khdaw.com

件或对应原理证明能量及振幅的量子化结果:

$$E_n = n\hbar\omega, \qquad A_n = \sqrt{\frac{2n\hbar}{m\omega}}, \quad n = 0,1,2,...$$

证明: 由玻尔-索末菲量子化条件 $\oint pdq = nh$,注意到

$p = mv = m\dot{x}$, $q = x = A\sin(\omega t + \alpha)$,有:

$$\oint pdq = \oint m\dot{x}dx = \oint m\dot{x}\frac{dx}{dt}dt = m\int_0^T \dot{x}^2 dt = m\int_0^T A^2\omega^2\cos^2(\omega t+\alpha)dt = \frac{1}{2}mTA^2\omega^2 = nh$$

上式利用了 $\frac{1}{T}\int_0^T \cos^2(\omega t+\alpha)dt = \frac{1}{2}$,注意 $T\omega = 2\pi$

得 $A = A_n = \sqrt{\frac{2n\hbar}{m\omega}}$, 能量 $E_n = \frac{1}{2}kA_n^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 A_n^2 = n\hbar\omega$ //

1–15 质量 m 的粒子在大小一定的向心力 $\vec{F} = -\frac{k\vec{r}}{r}(k>0)$ 作用下作圆周运动.先用经典力学证明轨道半径 r, 角速度 ω, 总能量 E 有如下关系:

$$r\omega^2 = \frac{k}{m}, \qquad E = \frac{3}{2}kr = \frac{3}{2}\frac{k^2}{m\omega^2}$$

再利用量子化条件或对应原理证明能级的量子化公式:

$$E_n = \frac{3}{2}\left(\frac{\hbar^2k^2n^2}{m}\right)^{1/3}, \quad n = 1,2,3...$$

证明: 注意到 $\vec{F} = -\frac{k\vec{r}}{r} = -k\vec{r}$, 径向牛顿力学方程为

$k = ma_n = mr\omega^2$, 即 $r\omega^2 = \frac{k}{m}$

选取 r=0 为势能零点, 势能为 $E_p = \int_r^0 -k\hat{r}\cdot d\vec{r} = \int_r^0 -kdr = kr$

总能量为: $E = \frac{1}{2}mr^2\omega^2 + kr = \frac{1}{2}kr + kr = \frac{3}{2}kr$

对力心的角动量守恒, $L=mr^2\omega$为常量,由玻尔-索末菲量子化条件 $\oint pdq = nh$,得

$$\oint pdq = \oint Ld\theta = L\oint d\theta = mr^2\omega 2\pi = \sqrt{mkr^3}\,2\pi = nh$$

解得: $r = r_n = \left(\frac{n^2\hbar^2}{mk}\right)^{1/3}$

于是, $E_n = \frac{3}{2}kr_n = \frac{3}{2}k\left(\frac{n^2\hbar^2}{mk}\right)^{1/3} = \frac{3}{2}\left(\frac{n^2\hbar^2k^2}{m}\right)^{1/3}$, $n = 1,2,3...$ //

课后答案网 www.khdaw.com

Chap 2 波函数和薛定谔方程

2-1 设$\psi_1(\vec{r},t)$和$\psi_2(\vec{r},t)$是两个真实的运动态波函数,满足薛定谔方程.证明$\int_{全}\psi_1^*\psi_2 d\tau$之值与时间无关.

证明: 由 Schrodinger 方程:

$$i\hbar\frac{\partial\psi_1}{\partial t}=(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V)\psi_1 \qquad (1)$$

$$i\hbar\frac{\partial\psi_2}{\partial t}=(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V)\psi_2 \qquad (2)$$

取复共轭（1）*: $-i\hbar\frac{\partial\psi_1^*}{\partial t}=(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V)\psi_1^* \qquad (3)$

$\psi_1^*\times(2)-\psi_2\times(1)$得

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

对全空间积分并注意可与对时间求导交换，得:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\int_{全}(\psi_1^*\psi_2)d\tau=-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{全}\nabla\cdot(\psi_1^*\nabla\psi_2-\psi_2\nabla\psi_1^*)d\tau=-\frac{\hbar^2}{2m}\oiint_S(\psi_1^*\nabla\psi_2-\psi_2\nabla\psi_1^*)\cdot d\vec{S}$$

$S\to\infty$时，态函数有限要求 $\psi\sim1/r^{3/2}$,面积分为零。即

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_{全}\psi_1^*\psi_2 d\tau=0 \qquad //$$

2-2 证明从单粒子薛定谔方程解出的速度场是无旋的，即 $\nabla\times\boldsymbol{v}=0$，其中 $\boldsymbol{v}=\boldsymbol{j}/\rho$, ρ为概率密度，$\boldsymbol{j}$ 为 概率流密度。

证明: $\rho(\boldsymbol{r},t)=\psi^*(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t)$

$$\boldsymbol{j}=-\frac{i\hbar}{2m}[\psi^*(\boldsymbol{r},t)\nabla\psi(\boldsymbol{r},t)-\psi(\boldsymbol{r},t)\nabla\psi^*(\boldsymbol{r},t)$$

粒子的速度分布 $\boldsymbol{v}$

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

其旋度为

$$\nabla\times\mathbf{v}=-\frac{i\hbar}{2m}\nabla\times\nabla(\ln\frac{\psi}{\psi^*})=0 \qquad //$$

2-3 粒子在一维势场 $V(x)$ 中运动，$V(x)$ 无奇点，设 ψ_n, ψ_m为束缚态波函数，$E_n\neq E_n$.

课后答案网 www.khdaw.com

证明ψ_n 与 ψ_m正交，即证明$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n\psi_m dx=0$

证明: 由定态 Schrodinger 方程：

$$(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V)\psi_n=E_n\psi_n \qquad (1)$$

$$(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V)\psi_m=E_m\psi_m \qquad (2)$$

$\psi_n\times(2)-\psi_m\times(1)$ 得

$$(E_m-E_n)\psi_n\psi_m=-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi_n\psi_m''-\psi_m\psi_n'')=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d}{dx}(\psi_n\psi_m'-\psi_m\psi_n')$$

对全空间积分，注意束缚态函数在无穷远必须趋于0，得

$$(E_m-E_n)\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n\psi_m dx=-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d}{dx}(\psi_n\psi_m'-\psi_m\psi_n')dx=-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi_n\psi_m'-\psi_m\psi_n')\Big|_{-\infty}^{+\infty}=0$$

当 $E_n\neq E_n$时，有$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n\psi_m dx=0$ //

2-5 质量为m 的粒子被限制在 0<x<a (无限深势阱)运动，求全部束缚态能级 (E_n)和归一化波函数（ψ_n）。

解： $U(x)$与 t 无关，是定态问题。写出各区域 Schrodinger 方程的具体形式为

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

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

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

(1)、(3)方程中，由于$U(x)=\infty$，要等式成立，必须

$$\psi_1(x)=0$$

$$\psi_3(x)=0$$

即粒子不能运动到势阱以外的地方去。

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

课后答案网 www.khdaw.com

令 $k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$，得

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

其解为 $\psi_2(x)=A\sin kx+B\cos kx$ （4）

根据波函数的标准条件确定系数 A，B，由连续性条件，得

$\psi_2(0)=\psi_1(0)$ $\Rightarrow B=0$ （5）

$\psi_2(a)=\psi_3(a)$ $\Rightarrow A\sin ka=0$ （6）

$\because A\neq 0$

$\therefore \sin ka=0$

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

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

由归一化条件

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

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

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

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

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

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

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

对应于 E_n 的归一化的定态波函数为

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

课后答案网 www.khdaw.com

或：$\begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{2m}\psi'' = E\psi & 0 < x < a \\ \psi = 0 & x \le 0, x \ge a \end{cases}$

$$\begin{cases} \psi(x) = A\cos kx + B\sin kx & 0 < x < a \qquad k = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \\ \psi = 0 & x \le 0, x \ge a \end{cases}$$

由边界条件得：

$$\psi(0) = 0, \qquad \Rightarrow A = 0$$

$$\psi(a) = 0, \qquad \Rightarrow B\sin ka = 0$$

$$B \neq 0, \ \Rightarrow k = \frac{n\pi}{a}, \quad \Rightarrow E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}, \qquad n = 1,2,3...$$

$$\begin{cases} \psi(x) = B\sin\dfrac{n\pi}{a}x & 0 < x < a \\ \psi = 0 & x \le 0, x \ge a \end{cases}$$

归一化，$\int_0^a B^2 \sin^2\frac{n\pi x}{a}dx = 1, \ \Rightarrow B = \sqrt{\frac{2}{a}}$

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

2-6　质量为m 的粒子只能沿圆环（半径R）运动，能力算符为 $\hat{H} = -\dfrac{\hbar^2}{2mR^2}\dfrac{d^2}{d\varphi^2}$，$\varphi$ 为旋转角。求能级 (E_n)和归一化波函数（ψ_n)。讨论各能级的简并度。

解：写出 Schrodinger 方程：

$$-\frac{\hbar^2}{2mR^2}\frac{d^2\psi}{d\varphi^2} = E\psi$$

解此方程可得

$$\psi = Ae^{ik\varphi}$$

其中 $k = \dfrac{\sqrt{2mE}R}{\hbar}$。利用波函数归一化条件 $\int_0^{2\pi} |\psi|^2 d\varphi = A^2 2\pi = 1$，可求出 $A = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}$。

再利用周期边界条件 $\psi(0)=\psi(2\pi)$, 可得 $k=n$（整数），于是有

课后答案网 www.khdaw.com

$E_n=\frac{n^2\hbar^2}{2mR^2}$， $\psi_n=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{in\varphi}$， $n=0,\pm1,\pm2,...$

除 n=0 时，简并度为 1 外，其余 n 值简并度为 2。

2-8 对于δ势阱造成的束缚态，计算$\overline{T},\overline{V},\Delta x,\Delta p.$

解：δ势阱只有一个束缚态：

$$\psi(x)=\begin{cases}\sqrt{\beta}e^{-\beta x} & x>0,\\ \sqrt{\beta}e^{\beta x} & x<0\end{cases}\qquad \beta=\frac{m\gamma}{\hbar^2}$$

由书上 p38 第（9）、（10）式，对一维，有

$$\overline{T}=\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\left|\frac{d\psi}{dx}\right|^2dx=\frac{\hbar^2}{2m}[\int_{-\infty}^{0}\left|\frac{d}{dx}\sqrt{\beta}e^{\beta x}\right|^2dx+\int_{0}^{\infty}\left|\frac{d}{dx}\sqrt{\beta}e^{-\beta x}\right|^2dx]$$

$$=\frac{\hbar^2}{2m}[\int_{-\infty}^{0}\beta^3e^{2\beta x}dx+\int_{0}^{\infty}\beta^3e^{-2\beta x}dx]=\frac{\hbar^2}{2m}[\frac{\beta^2}{2}+\frac{\beta^2}{2}]=\frac{\hbar^2\beta^2}{2m}=\frac{m\gamma^2}{2\hbar^2}$$

$$\overline{V}=\int_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2Vdx=-\int_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2\gamma\delta(x)dx=-\gamma|\psi(0)|^2=-\gamma\beta=-\frac{m\gamma^2}{\hbar^2}$$

$$\overline{x}=\int_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2xdx=0\quad（|\psi|^2\text{ 为偶函数}）$$

$$\overline{x^2}=\int_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2x^2dx=2\int_{0}^{\infty}\beta e^{-2\beta x}x^2dx=\frac{1}{2\beta^2}$$

$$\Delta x=(\overline{x^2}-\overline{x}^2)^{1/2}=\frac{1}{\sqrt{2}\beta}=\frac{\hbar^2}{\sqrt{2}m\gamma}$$

$$\overline{p}=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\hat{p}\psi dx=-i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\psi'dx=-i\hbar[\int_{-\infty}^{0}\beta^2e^{2\beta x}dx-\int_{0}^{\infty}\beta^2e^{-2\beta x}dx]=0$$

$$\overline{p^2}=2m\overline{T}=\hbar^2\beta^2=\frac{m^2\gamma^2}{\hbar^2}$$

$$\Delta p=(\overline{p^2}-\overline{p}^2)^{1/2}=\frac{m\gamma}{\hbar}$$

$$\Delta x\Delta p=\frac{\hbar^2}{\sqrt{2}m\gamma}\frac{m\gamma}{\hbar}=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}$$

2–9 粒子在下列势阱中运动，

$$V(x)=\begin{cases}\infty & x\le0\\ -V_0 & 0<x<a\\ 0 & x\ge a\end{cases}$$

课后答案网 www.khdaw.com

试证明仅当阱深、阱宽满足条件$V_0a^2>\frac{\hbar^2\pi^2}{8m}$时，才能存在束缚态($E$<0).并求能级方程。

证明：写出各区域定态 Schrodinger 方程及解：

$$\begin{cases}\psi=0 & x\le 0\\ \psi''+k^2\psi=0,\ \psi=Ae^{ikx}+Be^{-ikx} & 0<x<a \qquad k=\dfrac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}\\ \psi''-\beta^2\psi=0,\ \psi=Ce^{-\beta x} & x\ge a \qquad \beta=\dfrac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}\end{cases}$$

k、β为实数。由边界条件，$\psi(0)$=0，得：A=–B ；$\psi=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}=Ai\sin kx,\ 0<x<a$

x=a 处ψ'/ψ 连续，得：$k\cot ka=-\beta$

$\cot ka=-\beta/k<0,\quad \Rightarrow|ka|>\pi/2$，即：$k^2a^2>\frac{\pi^2}{4},\quad \Rightarrow V_0a^2>\frac{\hbar^2\pi^2}{8m}-Ea^2$

对于束缚态，E<0，所以 $V_0a^2>\frac{\hbar^2\pi^2}{8m}$，能级方程为$k\cot ka=-\beta$。//

2-11　对于有限深平底势阱的第n个束缚态ψ_n，E_n，设 V_0>> E_n+V_0，计算

（a）　粒子在阱外出现概率。

（b）　$V(x)$和$V^2(x)$的平均值，并与E_n比较。

解：（a）偶宇称态：$\psi(x)=\begin{cases}Ce^{-\beta x}, & \beta=\dfrac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}>0 \qquad x\ge a\\ A\cos kx, & k=\dfrac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}>0 \qquad -a<x<a\\ Ce^{\beta x}, & x\le -a\end{cases}$

连续条件：$Ce^{-\beta a}=A\cos ka$，

能级方程：　$k\tan ka=\beta,\quad k^2+\beta^2=\frac{2mV_0}{\hbar^2}$

$\Rightarrow\qquad \sin ka=\frac{\beta}{\sqrt{k^2+\beta^2}},\quad \cos ka=\frac{k}{\sqrt{k^2+\beta^2}}$

归一化：

课后答案网 www.khdaw.com

$$W=\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi|^2dx=2[A^2\int_0^a\cos^2 kxdx+C^2\int_a^{\infty}e^{-2\beta x}dx]=2A^2[\frac{a}{2}+\frac{1}{2k}\sin ka\cos ka+\frac{\cos^2 ka}{2\beta}]$$

$$=A^2(a+\frac{1}{\beta})$$

粒子在阱外出现概率：

$$W_{外}=2\int_a^{+\infty}|\psi|^2dx/W=2C^2[\int_a^{\infty}e^{-2\beta x}dx]/W=\frac{\cos^2 ka}{\beta}/[a+\frac{1}{\beta}]=\frac{\cos^2 ka}{a\beta+1}$$

$$=\frac{k^2}{(k^2+\beta^2)(a\beta+1)}=\frac{2m(E+V_0)\hbar}{2mV_0(a\sqrt{-2mE}+\hbar)}\approx\frac{(E+V_0)\hbar}{V_0a\sqrt{-2mE}}$$

$$=\frac{(E+V_0)\hbar}{V_0a\sqrt{2mV_0(1-\frac{E+V_0}{V_0})}}\approx\frac{(E+V_0)\hbar}{V_0a\sqrt{2mV_0}}$$

（b）

$$\overline{V}=2\int_0^{+\infty}|\psi|^2Vdx/W=2\int_0^a|\psi|^2(-V_0)dx/W=-V_0[\int_0^{+\infty}|\psi|^2dx-\int_a^{+\infty}|\psi|^2dx]/W=-V_0(1-W_{外})$$

$$\overline{V^2}=2\int_0^{+\infty}|\psi|^2V^2dx/W=2\int_0^a|\psi|^2(-V_0)^2dx/W=V_0^2[\int_0^{+\infty}|\psi|^2dx-\int_a^{+\infty}|\psi|^2dx]/W=V_0^2(1-W_{外})$$

2-13　对于谐振子的能量本征态，证明下列公式：

$$x\psi_n=\frac{x_0}{\sqrt{2}}(\sqrt{n}\psi_{n-1}+\sqrt{n+1}\psi_{n+1})$$

$$\frac{d\psi_n}{dx}=\frac{1}{\sqrt{2}x_0}(\sqrt{n}\psi_{n-1}-\sqrt{n+1}\psi_{n+1})$$

证明：$\psi_n=N_ne^{-\xi^2/2}H_n(\xi)=(x_0\sqrt{\pi}2^n n!)^{-1/2}e^{-\xi^2/2}H_n(\xi)$

其中 $H_n(\xi)=(-1)^ne^{\xi^2}(\frac{d}{d\xi})^ne^{-\xi^2}$

书上 p55(10')式写为：$H_n''-2\xi H_n'+2nH_n=0$　　（1）

$$H_n'=(-1)^n2\xi e^{\xi^2}(\frac{d}{d\xi})^ne^{-\xi^2}+(-1)^ne^{\xi^2}(\frac{d}{d\xi})^{n+1}e^{-\xi^2}=2\xi H_n-H_{n+1}$$

$$H_n''=2H_n+2\xi H_n'-H_{n+1}'=2H_n+4\xi^2H_n-2\xi H_{n+1}-2\xi H_{n+1}+H_{n+2}=2H_n+4\xi^2H_n-4\xi H_{n+1}+H_{n+2}$$

于是，（1）为

$$2H_n+4\xi^2H_n-4\xi H_{n+1}+H_{n+2}-2\xi(2\xi H_n-H_{n+1})+2nH_n=2(n+1)H_n-2\xi H_{n+1}+H_{n+2}=0$$

即递推关系：

课后答案网 www.khdaw.com

$$2nH_{n-1}-2\xi H_n+H_{n+1}=0 \qquad (2)$$

$$H_n'=2\xi H_n-H_{n+1}=2nH_{n-1} \qquad (3)$$

利用递推关系，即得：

$$x\psi_n=N_n e^{-\xi^2}x_0\xi H_n(\xi)=(x_0\sqrt{\pi}2^n n!)^{-1/2}e^{-\xi^2}x_0[nH_{n-1}+\frac{1}{2}H_{n+1}]$$

$$=x_0[(x_0\sqrt{\pi}2^{n-1}(n-1)!)^{-1/2}e^{-\xi^2}\frac{\sqrt{n}}{\sqrt{2}}H_{n-1}+(x_0\sqrt{\pi}2^{n+1}(n+1)!)^{-1/2}e^{-\xi^2}\frac{\sqrt{n+1}}{\sqrt{2}}H_{n+1}]$$

$$=\frac{x_0}{\sqrt{2}}(\sqrt{n}\psi_{n-1}+\sqrt{n+1}\psi_{n+1})$$

$$\frac{d\psi_n}{dx}=\frac{N_n}{x_0}[-\xi e^{-\xi^2/2}H_n(\xi)+e^{-\xi^2}H_n'(\xi)]=\frac{1}{x_0}[-\frac{1}{x_0}x\psi_n+2n(x_0\sqrt{\pi}2^n n!)^{-1/2}e^{-\xi^2}H_{n-1}]$$

$$=\frac{1}{x_0}[-(\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{n}\psi_{n-1}+\frac{\sqrt{n+1}}{\sqrt{2}}\psi_{n+1})+\sqrt{2n}\psi_{n-1}]$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}x_0}(\sqrt{n}\psi_{n-1}-\sqrt{n+1}\psi_{n+1})$$

2-14 利用上题中公式，求ψ_n态的$\overline{T},\overline{V},\Delta x,\Delta p.$ Δp定义为$\Delta p=(\overline{p^2}-\overline{p}^2)^{1/2}$

解：$\frac{d\psi_n}{dx}=\frac{1}{\sqrt{2}x_0}(\sqrt{n}\psi_{n-1}-\sqrt{n+1}\psi_{n+1})$

$$\frac{d^2\psi_n}{dx^2}=\frac{1}{\sqrt{2}x_0}[\sqrt{n}\frac{d\psi_{n-1}}{dx}-\sqrt{n+1}\frac{d\psi_{n+1}}{dx}]=\frac{1}{\sqrt{2}x_0}[\sqrt{n}\frac{1}{\sqrt{2}x_0}(\sqrt{n-1}\psi_{n-2}-\sqrt{n}\psi_n)-\sqrt{n+1}\frac{1}{\sqrt{2}x_0}(\sqrt{n+1}\psi_n-\sqrt{n+2}\psi_{n+2})$$

$$\overline{T}=-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*\frac{d^2\psi_n}{dx^2}dx$$

利用波函数的正交归一性，有：

$$\overline{T}=-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*\frac{d^2\psi_n}{dx^2}dx=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{2x_0^2}[-n-(n+1)]=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}[-(2n+1)]$$

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

$$x\psi_n=\frac{x_0}{\sqrt{2}}(\sqrt{n}\psi_{n-1}+\sqrt{n+1}\psi_{n+1})$$

课后答案网 www.khdaw.com

$$x^2\psi_n = \frac{x_0}{\sqrt{2}}(\sqrt{n}x\psi_{n-1} + \sqrt{n+1}x\psi_{n+1})$$

$$= \frac{x_0}{\sqrt{2}}[\sqrt{n}\frac{x_0}{\sqrt{2}}(\sqrt{n-1}\psi_{n-2} + \sqrt{n}\psi_n) + \sqrt{n+1}\frac{x_0}{\sqrt{2}}(\sqrt{n+1}\psi_n + \sqrt{n+2}\psi_{n+2})]$$

$$= \frac{x_0^2}{2}[\sqrt{n(n-1)}\psi_{n-2} + (2n+1)\psi_n + \sqrt{(n+1)(n+2)}\psi_{n+2})]$$

$$\overline{V} = \int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^* V\psi_n dx = \frac{1}{2}m\omega^2\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^* x^2\psi_n dx$$

利用波函数的正交归一性，有：

$$\overline{V} = \frac{1}{2}m\omega^2\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^* x^2\psi_n dx = \frac{1}{2}m\omega^2\frac{1}{2}x_0^2(2n+1) = \frac{1}{2}(n+\frac{1}{2})\hbar\omega = \frac{1}{2}E_n$$

$$\overline{x} = \int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^* x\psi_n dx = 0$$ （利用波函数的正交性）

因为 $\overline{V} = \frac{1}{2}m\omega^2\overline{x^2} = \frac{1}{2}(n+\frac{1}{2})\hbar\omega$

有 $\overline{x^2} = (n+\frac{1}{2})\frac{\hbar}{m\omega}$

$$\Delta x = (\overline{x^2} - \overline{x}^2)^{1/2} = \sqrt{\overline{x^2}} = \sqrt{(n+\frac{1}{2})\frac{\hbar}{m\omega}}$$

$$\overline{p} = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\hat{p}\psi dx = -i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\frac{d\psi}{dx}dx = 0$$ （利用波函数的正交性）

而 $\overline{p^2} = 2m\overline{T} = 2m\frac{1}{2}(n+\frac{1}{2})\hbar\omega = (n+\frac{1}{2})m\hbar\omega$

$$\Delta p = (\overline{p^2} - \overline{p}^2)^{1/2} = \sqrt{\overline{p^2}} = \sqrt{(n+\frac{1}{2})m\hbar\omega}$$

$$\Delta x\Delta p = (n+\frac{1}{2})\hbar$$

2–15 二维各向同性谐振子，$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}) + \frac{k}{2}(x^2+y^2)$，试用分离变量法求能级和定态波函数。并求各能级的简并度。

解： 由 $\hat{H}\psi = E\psi$，$\psi = \psi_1(x)\psi_2(y)$

得：

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}) + \frac{k}{2}(x^2+y^2)]\psi_1(x)\psi_2(y) = E\psi_1(x)\psi_2(y)$$

或

$$\frac{1}{\psi_1(x)}[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{k}{2}x^2]\psi_1(x) + \frac{1}{\psi_2(y)}[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dy^2} + \frac{k}{2}y^2]\psi_2(y) = E = E_x + E_y$$

课后答案网 www.khdaw.com

即得方程：

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{k}{2}x^2]\psi_1(x)=E_x\psi_1(x)$$

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dy^2}+\frac{k}{2}y^2]\psi_2(y)=E_y\psi_2(y)$$

分别是一维谐振子的定态方程。能级分别为：

$$E_x=(n_x+\frac{1}{2})\hbar\omega,\qquad E_y=(n_y+\frac{1}{2})\hbar\omega,\qquad n_x,n_y=0,1,2,...$$

$$E_n=E_x+E_y=(n_y+n_y+1)\hbar\omega=n\hbar\omega,\qquad n=1,2,...$$

波函数为

$$\psi_{n_xn_y}=\psi_1(x)\psi_2(y)=N_{n_x}e^{-x^2/2x_0^2}H_{n_x}(\frac{x}{x_0})N_{n_y}e^{-y^2/2y_0^2}H_{n_y}(\frac{y}{y_0})$$

E_1要求 $n_x=n_y=0$，简并度为 1；

E_2要求 $n_x=0,n_y=1;n_x=1,n_y=0$，简并度为 2；

E_3要求 $n_x=0,n_y=2;n_x=1,n_y=1;n_x=2,n_y=0;$，简并度为 3；

…

E_n要求 $n_x=0,n_y=n-1;n_x=1,n_y=n-2;...n_x=n-1,n_y=0;$，简并度为 n；

21-7　粒子在下列“切割谐振子势阱”中运动。

$$V(x)=\begin{cases}\infty, & x\le 0\\ \frac{k}{2}x^2, & x>0.\end{cases}$$

求能级和定态波函数。

解：$x>0$ 时，定态 Schrodinger 方程为

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

方程的解

$$E_n=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega,\qquad \omega=\sqrt{\frac{k}{m}},\qquad n=0,1,2,...$$

$$\psi_n=\psi(x)=N_ne^{-x^2/2x_0^2}H_n(\frac{x}{x_0})$$

满足 $x\to\infty,\psi\to 0$ 的边界条件。但还要求满足边界条件 $x=0,\psi=0$，即 $x=0,H_n=0$，

课后答案网 www.khdaw.com

即谐振子解的奇宇称解，$n=2m+1, m=0,1,2,\ldots$：

$$E_m=(2m+\frac{3}{2})\hbar\omega,\qquad \omega=\sqrt{\frac{k}{m}},\qquad m=0,1,2,\ldots$$

$$\psi_m=N_m e^{-x^2/2x_0^2}H_m(\frac{x}{x_0})\qquad //$$

2–19 粒子以动能 $E=\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}$ 从左方入射，遇势场

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

求反射系数和透射系数。（$E>V_0$ 及$E<V_0$分别讨论。）

解：$E>V_0$时

写出各区域定态 Schrodinger 方程及解：

$$\begin{cases}\psi''+k^2\psi=0,\ \psi=Ae^{ikx}+Be^{-ikx} & x<0\quad k=\dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\\ \psi''+\beta^2\psi=0,\ \psi=Ce^{i\beta x} & x>0\qquad \beta=\dfrac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}\end{cases}$$

k、β为实数。由边界条件，x=0 处ψ和ψ'连续，得：

$A+B=C$ ； $k(A-B)=\beta C$，

可解出：$B=\dfrac{k-\beta}{k+\beta}A,\quad C=\dfrac{2k}{k+\beta}A$

反射系数 R 和透射系数 T 分别为：

$$R=\frac{j_R}{j_A}=\frac{\hbar k|B|^2/m}{\hbar k|B|^2/m}=\left|\frac{A}{B}\right|^2=(\frac{k-\beta}{k+\beta})^2,$$

$$T=\frac{j_T}{j_A}=\frac{\hbar\beta|C|^2/m}{\hbar k|A|^2/m}=\frac{\beta}{k}\left|\frac{C}{A}\right|^2=1-R$$

$0<E<V_0$时

$$\begin{cases}\psi''+k^2\psi=0,\ \psi=Ae^{ikx}+Be^{-ikx} & x<0\quad k=\dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\\ \psi''-\beta^2\psi=0,\ \psi=Ce^{-\beta x} & x>0\qquad \beta=\dfrac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}\end{cases}$$

k、β为实数。比较可知，只需将上面结果作代换 $\beta\to i\beta$ 即得：

课后答案网 www.khdaw.com

$$B=\frac{k-i\beta}{k+i\beta}A,\quad C=\frac{2k}{k+i\beta}A$$

反射系数 R 和透射系数 T 分别为：

$$R=\frac{j_R}{j_A}=\frac{\hbar k|B|^2/m}{\hbar k|A|^2/m}=\left|\frac{B}{A}\right|^2=\left|\frac{k-i\beta}{k+i\beta}\right|^2=1,$$

$$T=1-R=0$$

2-20 粒子以动能 $E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$ 从左方入射，遇δ势场$V(x)=\gamma\delta(x),\gamma>0$,求透射系数。

解：写出各区域定态 Schrodinger 方程及解：

$$\begin{cases}\psi''+k^2\psi=0,\ \psi=Ae^{ikx}+Be^{-ikx} & x<0\quad k=\dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\\ \psi''+k^2\psi=0,\ \psi=Ce^{ikx} & x>0\end{cases}$$

由边界条件，x=0 处ψ连续，$\psi'(0^+)-\psi(0^-)=\frac{2m\gamma}{\hbar^2}\psi(0)$，得：

$$A+B=C,$$

$$ik[C-(A-B)]=\frac{2m\gamma}{\hbar^2}C$$

可解出：$C=\dfrac{2ik}{2ik-\dfrac{2m\gamma}{\hbar^2}}A$

透射系数 T 为：

$$T=\frac{j_T}{j_A}=\frac{\hbar k|C|^2/m}{\hbar k|A|^2/m}=\left|\frac{C}{A}\right|^2=\frac{4k^2}{4k^2+\dfrac{4m^2\gamma^2}{\hbar^4}}=\frac{k^2\hbar^4}{k^2\hbar^4+m^2\gamma^2}=\frac{E}{E+\dfrac{m\gamma^2}{2\hbar^2}}$$

课后答案网 www.khdaw.com

量子力学解答

(钱伯初<量子力学>)

Chap3　基本原理

3-1　粒子在一维无限深势阱中运动，已知初始波函数，$\psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(x)+\psi_2(x)]$，求

$\psi(x,t),\overline{E},\overline{E^2},\overline{x}(t).$

解：　t时刻各定态为对应能量本征值$E_n(n=1,2)$的本征态：

$\psi_1(x,t)=\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar}$，　$\psi_2(x,t)=\psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}$

其中　　$E_n=\frac{1}{2m}(\frac{n\pi\hbar}{2a})^2$

由叠加原理，有：$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar}+\psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}]$

$C_1=C_2=\frac{1}{\sqrt{2}},\qquad \sum_n|C_n|^2=|C_1|^2+|C_2|^2=\frac{1}{2}+\frac{1}{2}=1$

已归一化，所以

$$\overline{E}=\sum_n|C_n|^2E_n=|C_1|^2E_1+|C_2|^2E_2=\frac{1}{2}(1+2^2)\frac{1}{2m}(\frac{\pi\hbar}{2a})^2=\frac{5}{2}E_1=\frac{5}{16m}(\frac{\pi\hbar}{a})^2$$

$$\overline{E^2}=\sum_n|C_n|^2E_n^2=|C_1|^2E_1^2+|C_2|^2E_2^2=\frac{1}{2}(1+2^4)[\frac{1}{2m}(\frac{\pi\hbar}{2a})^2]^2=\frac{17}{2}E_1^2=\frac{17}{128m^2}(\frac{\pi\hbar}{a})^4$$

$$\overline{x}(t)=(\psi(x,t),x\psi(x,t))=\frac{1}{2}[(\psi_1(x,t)+\psi_2(x,t)),x(\psi_1(x,t)+\psi_2(x,t)]$$

$$=\frac{1}{2}[(\psi_1(x,t),x\psi_1(x,t))+(\psi_2(x,t),x\psi_2(x,t))+(\psi_1(x,t),x\psi_2(x,t))+(\psi_2(x,t),x\psi_1(x,t)]$$

$$=\frac{1}{2}[(\psi_1(x),x\psi_1(x))+(\psi_2(x),x\psi_2(x))+e^{-i(E_2-E_1)t/\hbar}(\psi_1(x),x\psi_2(x))+e^{i(E_2-E_1)t/\hbar}(\psi_2(x),x\psi_1(x)]$$

$$(\psi_1(x),x\psi_1(x))=\int_{-a}^{a}\frac{1}{a}x\cos^2\frac{\pi}{2a}xdx=0$$

$$(\psi_2(x),x\psi_2(x))=\int_{-a}^{a}\frac{1}{a}x\sin^2\frac{2\pi}{2a}xdx=0$$

$$(\psi_1(x),x\psi_2(x))=(\psi_2(x),x\psi_1(x))=\int_{-a}^{a}\frac{1}{a}x\cos\frac{\pi}{2a}x\sin\frac{\pi}{a}xdx$$

课后答案网 www.khdaw.com

经过两次分步积分，可得

$$(\psi_1(x), x\psi_2(x)) = (\psi_2(x), x\psi_1(x)) = \int_{-a}^{a} \frac{1}{a} x \cos\frac{\pi}{2a} x \sin\frac{\pi}{a} x dx = \frac{32a}{9\pi^2}$$

所以，有

$$\bar{x}(t) = \frac{1}{2}\frac{32a}{9\pi^2}[e^{-i(E_2-E_1)t/\hbar} + e^{i(E_2-E_1)t/\hbar}] = \frac{32a}{9\pi^2}\cos\frac{E_2 - E_1}{\hbar}t$$

3-2 粒子在一维无限深势阱（0<*x*<*a*）中运动，已知初始波函数，$\psi(x,0) = cx(a-x)$，*c*为归一化常数，请确定*c*，并计算各能量本征值(E_n)的测量概率以及$\overline{E}, \Delta E.$

解:

$$(\psi(x,0), \psi(x,0) = c^2 \int_0^a x^2(a-x)^2 dx = \frac{1}{5}a^5 - \frac{1}{2}a^5 + \frac{1}{3}a^5 = \frac{1}{30}a^5 = 1$$

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

粒子在一维无限深势阱（0<*x*<*a*）中运动，能量本征值和归一化本征函数分别为：

$$E_n = n^2 \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}, \qquad n = 0,1,2,3...$$

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

将初始波函数按上面的本证态展开：

$$\sqrt{\frac{30}{a^5}}x(a-x) = \sum_n C_n \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{n\pi x}{a})$$

展开系数：

$$C_n = (\psi_n, \psi(x,0)) = \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{n\pi x}{a})\sqrt{\frac{30}{a^5}}x(a-x)dx = \frac{4\sqrt{15}}{n^3\pi^3}[1-(-1^n)]$$

能量本征值(E_n)的测量概率为：

$$|C_n|^2 = \begin{cases} \frac{960}{n^6\pi^6}, & n\text{为奇数}; \\ 0, & n\text{为偶数} \end{cases}$$

$\overline{E}, \Delta E.$ 可由 $\overline{E} = \sum_n |C_n|^2 E_n, \overline{E^2} = \sum_n |C_n|^2 E^2, \Delta E = \sqrt{\overline{E^2} - \overline{E}^2}$ 给出，但下式计算较简单：

$$\overline{E} = (\psi(x,0), \hat{H}\psi(x,0) = c^2 \int_0^a x(a-x)(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}x(a-x)dx = \frac{\hbar^2}{6m}a^5\frac{30}{a^5} = \frac{5\hbar^2}{ma^2}$$

课后答案网 www.khdaw.com

$$\overline{E^2}=(\psi(x,0),\hat{H}^2\psi(x,0)=(\hat{H}\psi(x,0),\hat{H}\psi(x,0)=c^2\int_0^a(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}x(a-x))^2dx=(\frac{\hbar^2}{m})^2a\frac{30}{a^5}=\frac{30\hbar^4}{m^2a^4}$$

$$\Delta E=\sqrt{\overline{E^2}-\overline{E}^2}=\frac{\sqrt{5}\hbar^2}{ma^2}$$

3-3　已知平面转子初始波函数为$\psi(\varphi,0)=A\sin^2\varphi$，$A$ 为归一化常数，请确定 A，并求 $\psi(x,t)$ 以及 $\overline{E},\Delta E.$

解:　$(\psi(\varphi,0),\psi(\varphi,0)=A^2\int_0^{2\pi}\sin^4\varphi d\varphi=A^2\frac{3\pi}{4}=1$

$$\therefore\qquad A=2\sqrt{\frac{1}{3\pi}}$$

平面转子的能量本征值和归一化本征函数分别为：

$$E_n=n^2\frac{\hbar^2}{2mR^2}=n^2\frac{\hbar^2}{2I},\qquad n=0,\pm1,\pm2,\pm3...$$

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{in\varphi}$$

$$\therefore\psi(x,0)=2\frac{1}{\sqrt{3\pi}}\sin^2x=2\frac{1}{\sqrt{3\pi}}(\frac{e^{i\varphi}-e^{-i\varphi}}{2i})^2=\frac{\sqrt{2}}{2\sqrt{3}}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}(2-e^{i2\varphi}-e^{-i2\varphi})$$

$$=\sqrt{\frac{2}{3}}\psi_0-\frac{1}{\sqrt{6}}\psi_2-\frac{1}{\sqrt{6}}\psi_{-2}$$

于是：

$$\psi(x,t)=\sqrt{\frac{2}{3}}\psi_0-\frac{1}{\sqrt{6}}\psi_2e^{-iE_2t/\hbar}-\frac{1}{\sqrt{6}}\psi_{-2}e^{-iE_2t/\hbar}=\sqrt{\frac{2}{3}}\psi_0-\frac{1}{\sqrt{6}}(\psi_2+\psi_{-2})e^{-iE_2t/\hbar}$$

$$=\sqrt{\frac{2}{3}}\sqrt{\frac{1}{2\pi}}-\frac{1}{\sqrt{6}}\sqrt{\frac{1}{2\pi}}(e^{i2\varphi}+e^{-i2\varphi})e^{-iE_2t/\hbar}=\sqrt{\frac{1}{3\pi}}(1-\cos2\varphi e^{-iE_2t/\hbar})$$

由 $\overline{E}=\sum_n|C_n|^2E_n=\frac{1}{3}E_0+2\times\frac{1}{6}E_2=\frac{1}{3}E_2=\frac{2}{3}\frac{\hbar^2}{I}$

$$\overline{E^2}=\sum_n|C_n|^2E_n^2=\frac{1}{3}E_0^2+2\times\frac{1}{6}E_2^2=\frac{1}{3}E_2^2=\frac{4}{3}\frac{\hbar^4}{I^2}$$

$$\Delta E=\sqrt{\overline{E^2}-\overline{E}^2}=\frac{2\sqrt{2}\hbar^2}{3I}$$

3-4 粒子作一维自由运动，-∞<x∞，已知初始波函数为$\psi(x,0)=A(\sin k_0x+\cos k_0x)$，求 $\psi(x,t)$，动量（p_x）及动能的取值及概率以及平均值。

课后答案网 www.khdaw.com

解: 自由粒子的能量本征值和归一化本征函数分别为：

$$E_k = \frac{p_x^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m},$$

$$\psi_k(x) = \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ikx}$$

$$\therefore \psi(x,0) = A(\sin^2 k_0 x + \cos k_0 x) = A[(\frac{e^{ik_0 x} - e^{-ik_0 x}}{2i})^2 + \frac{e^{ik_0 x} + e^{-ik_0 x}}{2}]$$

$$= A[\frac{1}{4}(2 - (e^{i2k_0 x} + e^{-i2k_0 x}) + \frac{1}{2}(e^{ik_0 x} + e^{-ik_0 x})]$$

$$= A\sqrt{2\pi\hbar}[\frac{1}{2}\psi_0 - \frac{1}{4}\psi_{2k0} - \frac{1}{4}\psi_{-2k0} + \frac{1}{2}\psi_{k0} + \frac{1}{2}\psi_{k0}]$$

由第三个等号，有：

$$\psi(x,t) = A[\frac{1}{2} - \frac{1}{4}(e^{i2k_0 x} + e^{-i2k_0 x})e^{-iE_{2k}t/\hbar} + \frac{1}{2}(e^{ik_0 x} + e^{-ik_0 x})e^{-iE_k t/\hbar}]$$

$$= A[\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\cos 2k_0 x e^{-i2\hbar k_0^2 t/m} + \cos k_0 x e^{-i\hbar k_0^2 t/2m}]$$

由$\psi(x,0)$的展开式，可以看出动量（p_x）及动能的取值及概率有如下列表：

注意：$\sum_n |C_n|^2 = (\frac{1}{2})^2 + (\frac{1}{4})^2 + (\frac{1}{4})^2 + (\frac{1}{2})^2 + (\frac{1}{2})^2 = \frac{7}{8}$，　概率：$\frac{|C_n|^2}{\sum_n |C_n|^2} = \frac{8}{7}|C_n|^2$

动量（p_x）	取值	0	$-2\hbar k_0$	$2\hbar k_0$	$-\hbar k_0$	$\hbar k_0$
	概率	2/7	1/14	1/14	2/7	2/7
动能	取值	0	$2\frac{\hbar^2 k_0^2}{m}$,	$2\frac{\hbar^2 k_0^2}{m}$,	$\frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}$,	$\frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}$,
	概率	2/7	1/7		4/7	

所以：

$$\overline{p_x} = 0 \times \frac{2}{7} + (-2\hbar k_0)\frac{1}{14} + 2\hbar k_0 \frac{1}{14} + (-\hbar k_0)\frac{2}{7} + \hbar k_0 \frac{2}{7} = 0$$

$$\overline{T} = 0 \times \frac{2}{7} + 2\frac{\hbar^2 k_0^2}{m} \times \frac{1}{7} + \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} \times \frac{4}{7} = \frac{4}{7}\frac{\hbar^2 k_0^2}{m}$$

3-5 一维谐振子，初始波函数为$\psi(x,0) = \frac{\sqrt{3}}{2}\psi_0(x) + \frac{1}{2}\psi_1(x)$，求$\psi(x,t), \overline{E}(t), \overline{x}(t), \overline{p_x}(t)$。

解: 一维谐振子的能量本征值为：

课后答案网 www.khdaw.com

$$E_n=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega,\qquad n=0,1,2,...$$

显然，由$\psi(x,0)$即得：

$$\psi(x,t)=\frac{\sqrt{3}}{2}\psi_0(x)e^{-iE_0t/\hbar}+\frac{1}{2}\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar}=\frac{\sqrt{3}}{2}\psi_0(x)e^{-i\omega t/2}+\frac{1}{2}\psi_1(x)e^{-i3\omega t/2}$$

注意$\psi(x,t)$是归一化的，因而有：

$$\overline{E}=\sum_n|C_n|^2E_n=(\frac{\sqrt{3}}{2})^2E_0+(\frac{1}{2})^2E_1=\frac{3}{2}\hbar\omega$$

而

$$\bar{x}(t)=(\psi(x,t),x\psi(x,t)=(\frac{\sqrt{3}}{2}\psi_0(x)e^{-i\omega t/2}+\frac{1}{2}\psi_1(x)e^{-i3\omega t/2},x\frac{\sqrt{3}}{2}\psi_0(x)e^{-i\omega t/2}+x\frac{1}{2}\psi_1(x)e^{-i3\omega t/2})$$

展开后利用递推关系（习题 2-13）$x\psi_n=\frac{x_0}{\sqrt{2}}(\sqrt{n}\psi_{n-1}+\sqrt{n+1}\psi_{n+1})$和正交归一性：

$$\bar{x}(t)=(\psi(x,t),x\psi(x,t)=(\frac{\sqrt{3}}{2}\psi_0(x)e^{-i\omega t/2}+\frac{1}{2}\psi_1(x)e^{-i3\omega t/2},x\frac{\sqrt{3}}{2}\psi_0(x)e^{-i\omega t/2}+x\frac{1}{2}\psi_1(x)e^{-i3\omega t/2})$$

$$=\frac{3}{4}(\psi_0(x),x\psi_0(x))+\frac{\sqrt{3}}{4}(\psi_0(x),x\psi_1(x))e^{-i\omega t}+\frac{\sqrt{3}}{4}(\psi_1(x),x\psi_0(x))e^{i\omega t}+\frac{1}{4}(\psi_1(x),x\psi_1(x))$$

$$=\frac{3}{4}0+\frac{\sqrt{3}}{4}(\psi_0(x),\frac{x_0}{\sqrt{2}}[\psi_0+\sqrt{2}\psi_2])e^{-i\omega t}+\frac{\sqrt{3}}{4}(\psi_1(x),\frac{x_0}{\sqrt{2}}\psi_1(x))e^{i\omega t}+\frac{1}{4}\times0$$

$$=\frac{\sqrt{3}}{4}\frac{x_0}{\sqrt{2}}e^{-i\omega t}+\frac{\sqrt{3}}{4}\frac{x_0}{\sqrt{2}}e^{i\omega t}=\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}x_0\cos\omega t$$

式中，$x_0=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$。同理

$$\bar{p}(t)=(\psi(x,t),\hat{p}\psi(x,t)=-i\hbar(\frac{\sqrt{3}}{2}\psi_0(x)e^{-i\omega t/2}+\frac{1}{2}\psi_1(x)e^{-i3\omega t/2},\frac{d}{dx}\frac{\sqrt{3}}{2}\psi_0(x)e^{-i\omega t/2}+\frac{d}{dx}\frac{1}{2}\psi_1(x)e^{-i3\omega t/2})$$

展开后利用递推关系（习题 2-13）$\frac{d\psi_n}{dx}=\frac{1}{\sqrt{2}x_0}(\sqrt{n}\psi_{n-1}-\sqrt{n+1}\psi_{n+1})$和正交归一性：

$$\bar{p}(t)=-i\hbar[\frac{3}{4}(\psi_0,\frac{d\psi_0}{dx})+\frac{\sqrt{3}}{4}(\psi_0,\frac{d\psi_1}{dx})e^{-i\omega t}+\frac{\sqrt{3}}{4}(\psi_1,\frac{d\psi_0}{dx})e^{i\omega t}+\frac{1}{4}(\psi_1,\frac{d\psi_1(x)}{dx})]$$

$$=-i\hbar[\frac{3}{4}0+\frac{\sqrt{3}}{4}(\psi_0(x),\frac{1}{\sqrt{2}x_0}[\psi_0-\sqrt{2}\psi_2])e^{-i\omega t}-\frac{\sqrt{3}}{4}(\psi_1(x),\frac{1}{\sqrt{2}x_0}\psi_1(x))e^{i\omega t}+\frac{1}{4}\times0]$$

$$=-i\hbar[\frac{\sqrt{3}}{4}\frac{1}{\sqrt{2}x_0}e^{-i\omega t}-\frac{\sqrt{3}}{4}\frac{1}{\sqrt{2}x_0}e^{i\omega t}]=-\frac{\sqrt{3}\hbar}{2\sqrt{2}x_0}\sin\omega t=-\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}\sqrt{m\hbar\omega}\sin\omega t=m\frac{d}{dt}\bar{x}(t)$$

3-7 一维谐振子($V=kx^2/2$)处于基态，如势场突然变成$V_2=kx^2$,即弹性力增大一倍，求V_2势场的能级以及粒子处于新势场中基态的概率。

课后答案网 www.khdaw.com

解: 一维谐振子的能量本征值为：

$$E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega, \qquad n = 0,1,2,...$$

这里，$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$，本征态为$\psi_n$

如势场突然变成$V_2=kx^2$，令$k' = 2k$，则$V_2 = k'x^2/2$，$\omega' = \sqrt{\frac{k'}{m}} = \sqrt{2}\omega$，能量本征值为：

$$E'_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega' = \sqrt{2}E_n = \sqrt{2}(n+\frac{1}{2})\hbar\omega, \qquad n = 0,1,2,...$$

本征态为ψ'_n.

现求ψ_n向ψ'_n态的跃迁概率。将ψ_n按新态ψ'_n展开：$\psi_n = \sum_m C_m\psi'_m$，则跃迁概率（为设态已经归一化）：$|C_n|^2 = |(\psi'_n, \psi_n)|^2$

基态：$\psi_0 = (x_0\sqrt{\pi})^{-1/2}e^{-x^2/2x_0^2}$，$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$，而$x'_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega'}} = \frac{1}{2^{1/4}}x_0$

$$\psi'_0 = (x'_0\sqrt{\pi})^{-1/2}e^{-x^2/2x_0'^2} = 2^{1/8}(x_0\sqrt{\pi})^{-1/2}e^{-\sqrt{2}x^2/2x_0^2},$$

所以，

$$C_0 = (\psi'_0, \psi_0) = \frac{2^{1/8}}{x_0\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\sqrt{2}+1)x^2/2x_0^2}dx = \frac{2^{1/8}}{x_0\sqrt{\pi}}\frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\frac{\sqrt{2}+1}{2x_0^2}}} = \frac{2^{5/8}}{\sqrt{1+\sqrt{2}}}$$

$$|C_0|^2 = \frac{2^{5/4}}{1+\sqrt{2}} = 0.9852$$

3-8 粒子处于一维无限深势阱（$|x|<a$）中的基态，如势阱突然扩展至$|x|<2a$（阱宽加倍），设扩展时粒子的波函数不变，求扩展后粒子能量的可能测值以及粒子处于新势阱基态的概率。

解: 一维无限深势阱（$|x|<a$）中粒子的能量本征值和本征态分别为：

$$E_n = \frac{1}{2m}(\frac{n\pi\hbar}{2a})^2, \qquad n = 1,2,...$$

$$\psi_n = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}}\cos\frac{n\pi x}{2a}, & n = 1,3,5,... \\ \frac{1}{\sqrt{a}}\sin\frac{n\pi x}{2a}, & n = 2,4,6,... \end{cases}$$

扩展后（$|x|<2a$）粒子的能量本征值和本征态分别为：

$$E'_n = \frac{1}{2m}(\frac{n\pi\hbar}{2\cdot 2a})^2 = \frac{1}{4}E_n, \qquad n = 1,2,...$$

课后答案网 www.khdaw.com

$$\psi_n'=\begin{cases}\dfrac{1}{\sqrt{2a}}\cos\dfrac{n\pi x}{4a}, & n=1,3,5,...\\ \dfrac{1}{\sqrt{2a}}\sin\dfrac{n\pi x}{4a}, & n=2,4,6,...\end{cases}$$

将ψ_0按新态ψ'_n展开：$\psi_0=\sum_n C_n\psi_n'$，n为奇数时：

$$C_n=(\psi_n',\psi_0)=\int_{-a}^{a}\sqrt{\frac{1}{2a}}\cos\frac{n\pi x}{4a}\frac{1}{\sqrt{a}}\cos(\frac{\pi x}{2a})dx=\frac{1}{\sqrt{2a}}\int_0^a[\cos(n+2)\frac{\pi x}{4a}+\cos(n-2)\frac{\pi x}{4a}]dx$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2a}}[\frac{4a}{\pi(n+2)}\sin(n+2)\frac{\pi}{4}+\frac{4a}{\pi(n-2)}\sin(n-2)\frac{\pi}{4}]$$

$$=\frac{4}{\sqrt{2\pi}}\frac{1}{(n^2-4)}[n(\sin(n+2)\frac{\pi}{4}+\sin(n-2)\frac{\pi}{4})+2(\sin(n+2)\frac{\pi}{4}-\sin(n-2)\frac{\pi}{4})]$$

$$=\frac{4}{\sqrt{2\pi}}\frac{1}{(n^2-4)}[2n\sin\frac{n\pi}{4}\cos\frac{\pi}{2}+4\cos\frac{n\pi}{4}\sin\frac{\pi}{2}]=\frac{16}{\sqrt{2\pi}}\frac{1}{(n^2-4)}\cos\frac{n\pi}{4}$$

n 为偶数时：

$$C_n=(\psi_n',\psi_0)=\int_{-a}^{a}\sqrt{\frac{1}{2a}}\sin\frac{n\pi x}{4a}\frac{1}{\sqrt{a}}\cos(\frac{\pi x}{2a})dx=\frac{1}{\sqrt{2a}}\int_0^a[\sin(n+2)\frac{\pi x}{4a}+\sin(n-2)\frac{\pi x}{4a}]dx$$

$$=-\frac{1}{\sqrt{2a}}[\frac{4a}{\pi(n+2)}\cos(n+2)\frac{\pi}{4}+\frac{4a}{\pi(n-2)}\cos(n-2)\frac{\pi}{4}]$$

$$=-\frac{4}{\sqrt{2\pi}}\frac{1}{(n^2-4)}[n(\cos(n+2)\frac{\pi}{4}+\cos(n-2)\frac{\pi}{4})+2(\cos(n+2)\frac{\pi}{4}-\cos(n-2)\frac{\pi}{4})]$$

$$=\frac{4}{\sqrt{2\pi}}\frac{1}{(n^2-4)}[2n\cos\frac{n\pi}{4}\cos\frac{\pi}{2}+4\cos\frac{n\pi}{4}\cos\frac{\pi}{2}]=0$$

即只跃迁到偶宇称态，能量可能测值为：

$$E_n'=\frac{1}{2m}(\frac{n\pi\hbar}{2\cdot 2a})^2=\frac{1}{4}E_n=\frac{1}{32m}(\frac{n\pi\hbar}{a})^2,\qquad n=1,3,5,...$$

粒子处于新势阱基态的概率为：

$$|C_0|^2=(\frac{16}{\sqrt{2\pi}}\frac{1}{(1-4)}\cos\frac{\pi}{4})^2=(\frac{8}{3\pi})^2=0.7205$$

3-11　利用基本对易式$[x,p_x]=i\hbar$等，计算$[p_x,L_y]$，$[p_x,L_z]$，并写出另外几个下标轮换

$(x\to y\to z\to x)$公式。

$$[p_x,L_y]=[p_x,zp_x-xp_z]=[p_x,zp_x]-[p_x,xp_z]=z[p_x,p_x]+[p_x,z]p_x-x[p_x,p_z]-[p_x,x]p_z$$
$$=0+0-0-(-i\hbar)p_z=i\hbar p_z$$

$$[p_x,L_z]=[p_x,xp_y-yp_x]=[p_x,xp_y]-[p_x,yp_x]=x[p_x,p_y]+[p_x,x]p_y-y[p_x,p_x]-[p_x,y]p_x$$
$$=0+(-i\hbar)p_y-0-0=-i\hbar p_y$$

轮换$(x\to y\to z\to x)$公式可以写为：$\hat{\vec{p}}\times\hat{\vec{L}}=i\hbar\hat{\vec{p}}$

3-12　证明算符关系：

$$\vec{r}\times\vec{L}+\vec{L}\times\vec{r}=2i\hbar\vec{r}$$

$$\vec{p}\times\vec{L}+\vec{L}\times\vec{p}=2i\hbar\vec{p}$$

证明：

$$(\vec{p}\times\vec{L}+\vec{L}\times\vec{p})_x=p_yL_z-p_zL_y+L_yp_z-L_zp_y=[p_y,L_z]+[L_y,p_z]=i\hbar p_x+i\hbar p_x=2i\hbar p_x$$

同理，

$$(\vec{r}\times\vec{L}+\vec{L}\times\vec{r})_x=yL_z-zL_y+L_yz-L_zy=[y,L_z]+[L_y,z]=i\hbar x+i\hbar x=2i\hbar x$$

类似可得其他对应关系。

3-13　设线性算符不是厄米的，即 $F\neq F^+$。试证明 F 可分解成 $F=A+iB$，A，B 均为厄米算符。求 A,B.

证明：构造两个算符：$A=\frac{1}{2}(F+F^+)$ 和 $B=\frac{1}{2i}(F-F^+)$，显然：$F=A+iB$

只需证明 A，B 均为厄米算符。显然：

$$A^+=[\frac{1}{2}(F+F^+)]^+=\frac{1}{2}[(F^++(F^+)^+]=\frac{1}{2}(F+F^+)=A,$$

$$B^+=[\frac{1}{2i}(F-F^+)]^+=-\frac{1}{2i}[(F^+-(F^+)^+]=\frac{1}{2i}(F-F^+)=B \quad //$$

3-15　算符 A（无量纲）的指数函数定义成

$$e^A=\sum_{n=0}\frac{A^n}{n!}=1+A+\frac{A^2}{2!}+...+\frac{A^n}{n!}+...$$

（a）　如 A,B 对易，证明 $e^Ae^B=e^{A+B}$

（b）　如 A,B 不对易，令 $[A,B]=AB-BA=C_1$，$[A,C_1]=C_2$，…，$[A,C_n]=C_{n+1}$，证明公式 $e^ABe^{-A}=B+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{C_n}{n!}$

证明：（a）令 $f(\lambda)=e^{\lambda A}e^{\lambda B}$，则

$$\frac{df(\lambda)}{d\lambda}=Ae^{\lambda A}e^{\lambda B}+e^{\lambda A}Be^{\lambda B},$$

注意到 A,B 对易，$\frac{df(\lambda)}{d\lambda}=e^{\lambda A}e^{\lambda B}(A+B)=f(\lambda)(A+B)$

即：$\frac{df(\lambda)}{f(\lambda)}=(A+B)d\lambda$，积分，得

$f(\lambda)=f(0)e^{\lambda(A+B)}$，令$\lambda$=1，注意$f$(0)=1,即有：$e^Ae^B=e^{A+B}$

课后答案网 www.khdaw.com

(b) 令 $f(\lambda)=e^{\lambda A}Be^{-\lambda A}$，则按$\lambda$展开，有：

$f(\lambda)=\sum_{n=0}\frac{\lambda^n}{n!}f^{(n)}(0)$，另一方面，

$f(\lambda)=e^{\lambda A}Be^{-\lambda A},\qquad f^{(0)}(0)=B$

$f^{(1)}(\lambda)=e^{\lambda A}ABe^{-\lambda A}-e^{\lambda A}BAe^{-\lambda A}=e^{\lambda A}[A,B]e^{-\lambda A}=e^{\lambda A}C_1e^{-\lambda A},\qquad f^{(1)}(0)=C_1=[A,B]$

$f^{(2)}(\lambda)=e^{\lambda A}AC_1e^{-\lambda A}-e^{\lambda A}C_1Ae^{-\lambda A}=e^{\lambda A}[A,C_1]e^{-\lambda A}=e^{\lambda A}C_2e^{-\lambda A},\qquad f^{(2)}(0)=C_2=[A,C_1]$

…

$$f^{(n)}(\lambda)=(e^{\lambda A}C_{n-1}e^{-\lambda A})'=A(e^{\lambda A}C_{n-1}e^{-\lambda A})-(e^{\lambda A}C_{n-1}e^{-\lambda A})A$$
$$=e^{\lambda A}[A,C_{n-1}]e^{-\lambda A})=e^{\lambda A}C_ne^{-\lambda A},$$
$$f^{(n)}(0)=C_n$$

于是：$f(\lambda)=\sum_{n=0}\frac{\lambda^n}{n!}f^{(n)}(0)=B+\sum_{n=1}\frac{\lambda^n}{n!}C_n$，取$\lambda$=1得：

$$e^{A}Be^{-A}=B+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{C_n}{n!}\qquad //$$

3-20　设力学量K的算符可以表示成两个不对易算符L及M之积，K=LM，而L,M的对易式为[L,M]=1。K的本征函数、本征值记为ψ_n, λ_n (n=1,2,…).试证明：函数Lψ_n, Mψ_n如存在，则它们也是K的本征函数，本征值分别为（λ_n–1），（λ_n+1）。

证明：如函数Lψ_n, Mψ_n存在，用算符K=LM分别作用，注意对易关系[L,M]=1，即ML=LM–1，得：

KLψ_n=LMLψ_n=L(LM–1)ψ_n=L(K–1)ψ_n=L(λ_n –1)ψ_n = (λ_n –1) L ψ_n

KMψ_n=LMMψ_n=(ML+1)Mψ_n =M(LM +1)ψ_n=M(K +1)ψ_n=M(λ_n+1)ψ_n= (λ_n+1)Mψ_n

即Lψ_n, Mψ_n是K的本征函数，本征值分别为（λ_n–1），（λ_n+1）。//

3-21　求能使x-p_x不确定度关系下限成立$\Delta x\Delta p_x=\frac{\hbar}{2}$的一维波函数。

解一：由概率知识可知，方差为σ^2的概率分布函数是高斯型分布：$e^{-(x-a)^2/2\sigma^2}$。考虑不确定度关系下限成立$\Delta x\Delta p_x=\frac{\hbar}{2}$的动量方差为$(\Delta p_x)^2=\frac{\hbar^2}{4(\Delta x)^2}$的概率分布：

$\left|C_{p_x}\right|^2=A^2e^{-\frac{2(\Delta x)^2(p_x-p_0)^2}{\hbar^2}}$，由此构造波函数。显然

$C_{p_x}=Ae^{-\frac{(\Delta x)^2(p_x-p_0)^2}{\hbar^2}}$

于是：

课后答案网 www.khdaw.com

$$\psi(x)=\int C_{p_x}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ip_x x/\hbar}dp_x=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-[\frac{(\Delta x)^2(p_x-p_0)^2}{\hbar^2}-ip_x x/\hbar]}dp_x$$

$$=Be^{\frac{i}{\hbar}p_o x-\frac{x^2}{4(\Delta x)^2}}$$

B为归一化常量。

解二：仿不确定关系的证明，令算符 $F(\xi)=x+i\xi p$, 则

$$F^+F=x^2+i\xi[x,p]+\xi^2p^2=x^2-\xi\hbar+\xi^2p^2$$

$$I(\xi)=(\overline{F^+F})=(\psi,F^+F\psi)=(F\psi,F\psi)=\int d\tau\left|F\psi\right|^2\geq 0$$

即 $I(\xi)=\overline{x^2}-\xi\hbar+\xi^2\overline{p^2}\geq 0$

“=”成立，对应 $F\psi=0$，而上式要求 $\hbar^2-4\overline{p^2}\,\overline{x^2}=0$，即 $\sqrt{\overline{p^2}\,\overline{x^2}}=\Delta x\Delta p=\frac{\hbar}{2}$；此时。将 $F\psi=0$ 写成（取参量ξ=1)：$(x+\hbar\frac{d}{dx})\psi=0$，解出

$$\psi(x)=Ce^{-\frac{x^2}{2\hbar}}=Ce^{-\alpha^2x^2}$$

3-23 粒子在一维势场 $V(x)=k\left|x\right|^v,(k,v>0)$ 中运动，利用不确定度关系估算基态能级及 Δx 的量级。

解： $E=\frac{p^2}{2m}+k\left|x\right|^v$，$p$ ~Δp, x ~Δx, $\Delta x\Delta p\sim\hbar$ 于是： $E\approx\frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2}+k\left|\Delta x\right|^v$，求极值，令

$$\frac{dE}{d\Delta x}=-\frac{\hbar^2}{m\Delta x^3}+kv\Delta x^{v-1}=0,\text{解得：}\ \Delta x=(\frac{\hbar^2}{mkv})^{\frac{1}{v+2}}$$

$$E\approx\frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2}+k\left|\Delta x\right|^v=(\frac{v}{2}+1)k\left|\Delta x\right|^v=(\frac{v+2}{2})k(\frac{\hbar^2}{mkv})^{\frac{v}{v+2}}$$

3-24 核子（质子，中子）间的核力（强相互作用）通过吞吐π介子而传播，$m_\pi\approx 270m_2$，试利用不确定关系估算核力力程。

解：由 $\Delta x\Delta p\sim\hbar$， $\Delta p\sim p\approx mc$，所以 $\Delta x\sim\frac{\hbar}{p}=\frac{\hbar}{m_\pi c}\approx 1.4\text{f}m$

3-25 质量 m，电荷 q 的粒子在均匀电场(场强ε，沿 x 正方向）中运动，能量算符为

$H=\frac{p_x^2}{2m}-q\varepsilon x$.已知 t=0 时 $\bar{x}=0,\overline{p_x}=p_0$，试利用 Heisenberg 方程计算 $\bar{x}(t),\overline{p_x}(t)$。

解一：由 Heisenberg 方程：

课后答案网 www.khdaw.com

$$\frac{d}{dt}x(t)=\frac{1}{i\hbar}[x(t),H]=\frac{1}{i\hbar}U^{+}[x,H]U=\frac{1}{i\hbar}U^{+}([x,\frac{p_x^2}{2m}]-qe[x,x])U$$

$$=\frac{1}{i\hbar}U^{+}(p_x[x,\frac{p_x}{2m}]+[x,\frac{p_x}{2m}]p_x)U=\frac{1}{i\hbar}U^{+}(i\hbar\frac{p_x}{m})U=\frac{1}{m}U^{+}p_xU=\frac{p_x(t)}{m}$$

而 $p_x(t)=U^{+}p_xU=e^{iHt/\hbar}p_xe^{-iHt/\hbar}$，利用 2-14（b）结果，这里，$A=iHt/\hbar, B=p_x$，

$$C_1=[A,B]=[iHt/\hbar,p_x]=it/\hbar[H,p_x]=it/\hbar[\frac{p_x^2}{2m}-q\varepsilon x,p_x]=-\frac{q\varepsilon it}{\hbar}[x,p_x]=q\varepsilon t,$$

$$C_2=[A,C_1]=[iHt/\hbar,q\varepsilon t]=0,...C_n=[A,C_{n-1}]=[iHt/\hbar,0]=0$$

于是

$$p_x(t)=U^{+}p_xU=e^{iHt/\hbar}p_xe^{-iHt/\hbar}=p_x+q\varepsilon t$$

所以

$$\overline{p_x}(t)=\overline{p_x}+q\varepsilon t=p_0+q\varepsilon t$$

而：$\frac{d}{dt}x(t)=\frac{p_x(t)}{m}=\frac{p_x}{m}+\frac{q\varepsilon t}{m}$

积分，得：$x(t)=\frac{p_x}{m}t+\frac{q\varepsilon t^2}{2m}$

所以：$\bar{x}(t)=\frac{\overline{p_x}}{m}t+\frac{q\varepsilon t^2}{2m}=\frac{p_0}{m}t+\frac{q\varepsilon t^2}{2m}$

解二：由 Heisenberg 方程：

$$\frac{d}{dt}p_x(t)=\frac{1}{i\hbar}[p_x(t),H(t)]=\frac{1}{i\hbar}([p_x(t),\frac{p_x^2(t)}{2m}]-q\varepsilon[p_x(t),x(x)])=0-\frac{q\varepsilon}{i\hbar}([U^{+}p_xU,U^{+}xU]$$

$$=-\frac{q\varepsilon}{i\hbar}(U^{+}U^{+}[p_x,x]UU)=-\frac{q\varepsilon}{i\hbar}(-i\hbar)=q\varepsilon$$

所以：$p_x(t)=U^{+}p_xU=e^{iHt/\hbar}p_xe^{-iHt/\hbar}=p_x+q\varepsilon t$

$$\overline{p_x}(t)=\overline{p_x}+q\varepsilon t=p_0+q\varepsilon t$$

同样

$$\frac{d}{dt}x(t)=\frac{1}{i\hbar}U^{+}[x,H]U=\frac{1}{i\hbar}U^{+}([x,\frac{p_x^2}{2m}]-q\varepsilon[x,x])U=\frac{1}{i\hbar}(i\hbar\frac{U^{+}p_xU}{m})=\frac{p_x(t)}{m}=\frac{p_x}{m}+\frac{q\varepsilon t^2}{2m}$$

积分，得：$x(t)=\frac{p_x}{m}t+\frac{q\varepsilon t^2}{2m}$

课后答案网 www.khdaw.com

所以： $\bar{x}(t)=\frac{\overline{p_x}}{m}t+\frac{q\varepsilon t^2}{2m}=\frac{p_0}{m}t+\frac{q\varepsilon t^2}{2m}$

3-26 带电粒子在均匀磁场(沿 z 轴方向）中运动，哈密顿算符可以近似表示成

$H=\frac{p^2}{2m}-\omega L_z,\omega=\frac{qB}{2mc}$，q 为粒子的电荷，B 为场强.已知 t=0 时 $\overline{p_x}=p_0$，

$\overline{p_y}=\bar{p}_z=0$，试求 t>0 时 $\overline{p_x}(t),\overline{p_y}(t),\bar{p}_z(t)$。又，本题有哪些重要的守恒力学量？

解一：$p_x(t)=U^+p_xU=e^{iHt/\hbar}p_xe^{-iHt/\hbar}$，利用 2-14（b）结果，这里，$A=iHt/\hbar,B=p_x$，

$$C_1=[A,B]=[iHt/\hbar,p_x]=it/\hbar[H,p_x]=it/\hbar[\frac{p^2}{2m}-\omega L_z,p_x]=-\frac{\omega it}{\hbar}[L_z,p_x]=\omega tp_y,$$

$$C_2=[A,C_1]=[iHt/\hbar,\omega tp_y]=i\omega t^2/\hbar[H,p_y]=i\omega t^2/\hbar[\frac{p^2}{2m}-\omega L_z,p_y]=-\frac{\omega^2it^2}{\hbar}[L_z,p_y]=-\omega^2t^2p_x$$

$$C_3=[A,C_2]=[iHt/\hbar,-\omega^2t^2p_x]=-(\omega t)^3p_y$$

$$C_4=[A,C_3]=[iHt/\hbar,-(\omega t)^3p_y]=(\omega t)^4p_x$$

…

$$p_x(t)=U^+p_xU=e^{iHt/\hbar}p_xe^{-iHt/\hbar}=p_x+\sum_{n=1}\frac{C_n}{n!}$$

$$=p_x-\frac{1}{2}(\omega t)^2p_x+\frac{1}{4}(\omega t)^4p_x+\ldots+\omega tp_y-\frac{1}{3}(\omega t)^3p_y+\ldots$$

$$=p_x[1-\frac{1}{2}(\omega t)^2+\frac{1}{4}(\omega t)^4+\ldots]+p_y[\omega t-\frac{1}{3}(\omega t)^3+\ldots]$$

$$=p_x\cos\omega t+p_y\sin\omega t$$

所以：$\overline{p_x}(t)=\overline{p_x}\cos\omega t+\overline{p_y}\sin\omega t=p_0\cos\omega t$

同理

$p_y(t)=U^+p_yU=e^{iHt/\hbar}p_ye^{-iHt/\hbar}$，利用 2-14（b）结果，这里，$A=iHt/\hbar,B=p_y$，

$$C_1=[A,B]=[iHt/\hbar,p_y]=it/\hbar[H,p_y]=it/\hbar[\frac{p^2}{2m}-\omega L_z,p_y]=-\frac{\omega it}{\hbar}[L_z,p_y]=-\omega tp_x,$$

$$C_2=[A,C_1]=[iHt/\hbar,-\omega tp_x]=-i\omega t^2/\hbar[H,p_x]=-i\omega t^2/\hbar[\frac{p^2}{2m}-\omega L_z,p_x]=\frac{\omega^2it^2}{\hbar}[L_z,p_x]=\omega^2t^2p_y$$

$$C_3=[A,C_2]=[iHt/\hbar,\omega^2t^2p_y]=(\omega t)^3p_x$$

课后答案网 www.khdaw.com

$C_4 = [A, C_3] = [iHt/\hbar, (\omega t)^3 p_y] = -(\omega t)^4 p_y$

…

$$p_y(t) = U^+ p_y U = e^{iHt/\hbar} p_y e^{-iHt/\hbar} = p_y + \sum_{n=1} \frac{C_n}{n!}$$

$$= p_y + \frac{1}{2}(\omega t)^2 p_y - \frac{1}{4}(\omega t)^4 p_y + \ldots - \omega t p_x + \frac{1}{3}(\omega t)^3 p_x + \ldots$$

$$= 2p_y - p_y[1 - \frac{1}{2}(\omega t)^2 + \frac{1}{4}(\omega t)^4 + \ldots] - p_x[\omega t - \frac{1}{3}(\omega t)^3 + \ldots]$$

$$= 2p_y - p_y \cos \omega t - p_x \sin \omega t$$

所以：$\overline{p_y(t)} = -\overline{p_x} \sin \omega t = -p_0 \sin \omega t$

对p_z，由于

$$[iHt/\hbar, p_z] = it/\hbar[H, p_z] = it/\hbar[\frac{p^2}{2m} - \omega L_z, p_z] = -\frac{\omega it}{\hbar}[L_z, p_z] = 0,$$

于是$[U^+, p_z] = [e^{itH/\hbar}, p_z] = 0$, 故 $p_z(t) = U^+ p_z U = p_z U^+ U = p_z$

所以：$\overline{p_z}(t) = \overline{p_z} = 0$

解二：由 Heisenberg 方程：

$$\frac{d}{dt} p_x(t) = \frac{1}{i\hbar} U^+ [p_x, H] U = \frac{1}{i\hbar} U^+ ([p_x, \frac{p^2}{2m}] - \omega [p_x, L_z]) U = 0 - \frac{\omega}{i\hbar}(-i\hbar U^+ p_y U) = \omega p_y(t)$$

于是，$\frac{d}{dt}\overline{p_x(t)} = \omega \overline{p_y(t)}$

同理：

$$\frac{d}{dt} p_y(t) = \frac{1}{i\hbar} U^+ [p_y, H] U = \frac{1}{i\hbar} U^+ ([p_y, \frac{p^2}{2m}] - \omega [p_y, L_z]) U = 0 - \frac{\omega}{i\hbar}(i\hbar U^+ p_x U) = -\omega p_x(t)$$

$$\frac{d}{dt}\overline{p_y(t)} = -\omega \overline{p_x(t)}$$

$$\frac{d}{dt} p_z(t) = \frac{1}{i\hbar} U^+ [p_z, H] U = \frac{1}{i\hbar} U^+ ([p_z, \frac{p^2}{2m}] - \omega [p_z, L_z]) U = 0$$

$\frac{d}{dt}\overline{p_z(t)} = 0$积分，得：

$$\overline{p_z}(t) = \overline{p_z} = 0$$

为求$\overline{p_x}(t), \overline{p_y}(t)$，求出：$\frac{d^2}{dt^2}\overline{p_x(t)} = \omega \frac{d\overline{p_y(t)}}{dt} = -\omega^2 \overline{p_x(t)}$，

课后答案网 www.khdaw.com

和 $\frac{d^2}{dt^2}\overline{p_y(t)} = -\omega\frac{d\overline{p_x(t)}}{dt} = -\omega^2\overline{p_y(t)}$

通解分别为：$\overline{p_x}(t) = A\cos\omega t + B\sin\omega t$，$\overline{p_y}(t) = C\cos\omega t + D\sin\omega t$

代入初始条件，可得：$A = p_0, C = 0$

由：$\frac{d}{dt}\overline{p_x(t)} = \omega\overline{p_y(t)}$ 和 $\frac{d}{dt}\overline{p_y(t)} = -\omega\overline{p_x(t)}$，可得：$D = -p_0, B = 0$。于是：

$\overline{p_x(t)} = \overline{p_x}\cos\omega t + \overline{p_y}\sin\omega t = p_0\cos\omega t$

$\overline{p_y(t)} = -\overline{p_x}\sin\omega t = -p_0\sin\omega t$

本题中，由于$[p_z, H] = 0, [L^2, H] = 0, [L_z, H] = 0, [H, H] = 0$，所以 $p_z, L^2 L_z, H$ 为守恒量。

3-27　对于一维谐振子，求 Heisenberg 图像中算符 $x(t), p_x(t)$，将它们用 x, p_x, t 表示出来。

解一：$p_x(t) = U^+ p_x U = e^{iHt/\hbar} p_x e^{-iHt/\hbar}$，利用 2-14（b）结果，这里，$A = iHt/\hbar, B = p_x$，

$$C_1 = [A, B] = [iHt/\hbar, p_x] = \frac{it}{\hbar}[\frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, p_x] = \frac{m\omega^2 it}{2\hbar}[x^2, p_x] = -m\omega^2 tx,$$

$$C_2 = [A, C_1] = [iHt/\hbar, -m\omega^2 tx] = -\frac{im\omega^2 t^2}{\hbar}[H, x] = -\frac{im\omega^2 t^2}{\hbar}[\frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, x] = -\omega^2 t^2 p_x$$

$$C_3 = [A, C_2] = [iHt/\hbar, -\omega^2 t^2 p_x] = m\omega^4 t^3 x$$

$$C_4 = [A, C_3] = [iHt/\hbar, m\omega^4 t^3 x] = \omega^4 t^4 p_x$$

…

$$\begin{aligned} p_x(t) = U^+ p_x U = e^{iHt/\hbar} p_x e^{-iHt/\hbar} &= p_x + \sum_{n=1}\frac{C_n}{n!} \\ &= p_x - \frac{1}{2}(\omega t)^2 p_x + \frac{1}{4}(\omega t)^4 p_x + \ldots - m\omega^2 tx + \frac{1}{3}m\omega^4 t^3 x - \ldots \\ &= p_x[1 - \frac{1}{2}(\omega t)^2 + \frac{1}{4}(\omega t)^4 + \ldots] - m\omega x[\omega t - \frac{1}{3}(\omega t)^3 + \ldots] \\ &= p_x\cos\omega t - m\omega x\sin\omega t \end{aligned}$$

另外，由 Heisenberg 方程：

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}x(t) &= \frac{1}{i\hbar}[x(t), H] = \frac{1}{i\hbar}U^+[x, H]U = \frac{1}{i\hbar}U^+([x, \frac{p_x^2}{2m}]) = \frac{1}{i\hbar}U^+(i\hbar\frac{p_x}{m})U \\ &= \frac{1}{m}U^+ p_x U = \frac{p_x(t)}{m} = \frac{p_x}{m}\cos\omega t - x\omega\sin\omega t \end{aligned}$$

课后答案网 www.khdaw.com

积分,得: $x(t)=\frac{p_x}{\omega m}\sin\omega t+x\cos\omega t$

解二：由 Heisenberg 方程：

$$\frac{d}{dt}p_x(t)=\frac{1}{i\hbar}U^+[p_x,H]U=\frac{1}{i\hbar}U^+([p_x,\frac{p_x^2}{2m}]+\frac{1}{2}m\omega^2[p_x,x^2])U=0+\frac{m\omega^2}{2i\hbar}(-2i\hbar U^+xU)=-m\omega^2x(t)$$

同理：

$$\frac{d}{dt}x(t)=\frac{1}{i\hbar}U^+[x,H]U=\frac{1}{i\hbar}U^+([x,\frac{p_x^2}{2m}]+\frac{1}{2}m\omega^2[x,x^2])U=\frac{1}{m}(U^+p_xU)=\frac{p_x(t)}{m}$$

于是：$\frac{d^2}{dt^2}x(t)=\frac{dp_x(t)}{mdt}=-\omega^2x(t)$。其通解为：

$x(t)=A\cos\omega t+B\sin\omega t$ 。

求导，$\frac{d}{dt}x(t)=-A\omega\sin\omega t+B\omega\cos\omega t=\frac{p_x(t)}{m}$

代入初始条件：$t=0,x(0)=x,p_x(0)=p$，得：$A=x,B=\frac{p_x}{m\omega}$，所以：

$$x(t)=\frac{p_x}{\omega m}\sin\omega t+x\cos\omega t$$

$$p_x(t)=m\frac{d}{dt}x(t)=-xm\omega\sin\omega t+p_x\cos\omega t$$

3-28　粒子在势场 $V(\boldsymbol{r})$中运动，设 V 与粒子的质量无关。证明：如粒子的质量增大，则束缚态能级下降。

证明：粒子的 Hamilton 为：$H=\frac{p_x^2}{2m}+V$，选取 m 为参量，则由 Hellmann 定理：

$$\frac{\partial E_n}{\partial m}=\left\langle\frac{\partial H}{\partial m}\right\rangle_n=\left\langle-\frac{p^2}{2m^2}\right\rangle_n=-\frac{1}{2}\left\langle\frac{p^2}{m^2}\right\rangle_n<0$$

可见，如粒子的质量增大，则胜负态能级下降。

3-29　质量为m的粒子在对数函数型中心力场 $V(r)=V_0\ln(r/r_0)$ 中运动，V_0,r_0>0 并与质量 m无关。试利用Hellmann定理和位力定理，证明：(a)各个束缚态的能量虽然不同，但动能平均值相同。(b)如改变粒子的质量，任何两个能级的间距不受影响。

证明：（a）利用位力定理，注意 $V(r)=V_0\ln(r/r_0)$，得：

$$\langle T\rangle_n=\frac{1}{2}\langle\vec{r}\cdot\nabla V\rangle_n=\frac{1}{2}\left\langle\vec{r}\cdot V_0\frac{\nabla r}{r}\right\rangle_n=\frac{V_0}{2}\left\langle\vec{r}\cdot\frac{\vec{r}}{r^2}\right\rangle_n=\frac{V_0}{2}$$

课后答案网 www.khdaw.com

（b）Hamilton 为：$H=\frac{p_x^2}{2m}+V=-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}+V$，选取 $\hbar$ 为参量，则由 Hellmann 定理：

$$\frac{\partial E_n}{\partial \hbar}=\left\langle\frac{\partial H}{\partial \hbar}\right\rangle_n=\left\langle\frac{2}{\hbar}\frac{p^2}{2m}\right\rangle_n=\frac{2}{\hbar}\langle T\rangle_n=\frac{V_0}{\hbar}$$

与质量无关。即如改变粒子的质量，任何两个能级的间距不受影响。

课后答案网 www.khdaw.com

量子力学解答

(钱伯初<量子力学>)

Chap4　表象理论

4-1 设力学量算符（厄米算符）A,B满足关系$A^2=B^2=1$，　$AB+BA=0$

(a) 求 A,B 的本征值。[提示：利用 3-19 题证明的结论]

(b) 在 A 表象中，求 A，B 的矩阵表示。

(c) 在 A 表象中，求 B 的特征矢量。

(d) 写出由 A 表象到 B 表象的变换矩阵 S。

(e) 利用幺正变换公式，将矩阵 A,B 由 A 表象变换到 B 表象。

解: (a) 设 A 的本征值和本征函数分别为 $a,|a>$。 则本征值方程为：

$A|a>=a|a>$,利用$A^2=1$，有：

$A^2|a>=Aa|a>=a^2|a>=1|a>$, 即： $a^2=1$, a为实数，故A的本征值有两个：$a_1=1,a_2=-1$

(b) 在 A 表象中，A 的矩阵为由其本征值构成的对角矩阵：

$$A=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

设 B 矩阵为 $B=\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}$，利用 $AB+BA=\begin{pmatrix}a & b\\ -c & -d\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}a & -b\\ c & -d\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2a & 0\\ 0 & -2d\end{pmatrix}$

得：$a=d=0$。又因为B为厄米算符：$B=\begin{pmatrix}0 & b\\ c & 0\end{pmatrix}=B^{+}=\begin{pmatrix}0 & c^{*}\\ b^{*} & 0\end{pmatrix}$，所以: $b=c^{*}$.

而 $B^2=\begin{pmatrix}0 & b\\ c & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & b\\ c & 0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}bc & 0\\ 0 & bc\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}|c|^2 & 0\\ 0 & |c|^2\end{pmatrix}=1$,所以 $|c|^2=1$，$c=e^{-i\delta}$，$b=c^{*}=e^{i\delta}$，即

$$B=\begin{pmatrix}0 & e^{i\delta}\\ e^{-i\delta} & 0\end{pmatrix}$$

B 的本征值可以通过求久期方程 $\begin{vmatrix}\lambda & e^{i\delta}\\ e^{-i\delta} & \lambda\end{vmatrix}=0$ 得到：$\lambda=1,-1$。

(c) 设 B 的本征函数为：$\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix}$。当 B 的本征值为 1 时：

$\begin{pmatrix}0 & e^{i\delta}\\ e^{-i\delta} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\beta e^{i\delta}\\ \alpha e^{-i\delta}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix}$，即 $\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix}=\alpha\begin{pmatrix}1\\ e^{-i\delta}\end{pmatrix}$。归一化，

$(\alpha^{*},\beta^{*})\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix}=|\alpha|^2(1+1)=2|\alpha|^2=1$，得：$\begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ e^{-i\delta}\end{pmatrix}$。

课后答案网 www.khdaw.com

类似，当 B 的本征值为 –1 时：

$\begin{pmatrix} 0 & e^{i\delta} \\ e^{-i\delta} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \beta e^{i\delta} \\ \alpha e^{-i\delta} \end{pmatrix}=-1\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$，即 $\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}=\alpha\begin{pmatrix} 1 \\ -e^{-i\delta} \end{pmatrix}$。归一化，

$(\alpha^*,\beta^*)\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}=|\alpha|^2(1+1)=2|\alpha|^2=1$，得：$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -e^{-i\delta} \end{pmatrix}$

(d) 法 1：设由 A 表象到 B 表象的变换矩阵 $S=\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$.则 $S^+=\begin{pmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{pmatrix}$. 分别考虑 B 的对应本征值为 1 和–1 的两个本征矢，在 A 表象中为：$|\alpha>=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ e^{-i\delta} \end{pmatrix},|\beta>=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -e^{-i\delta} \end{pmatrix}$，

在 B 表象（自身表象）中为：$|a>=\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},|b>=\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$。于是 B 的本征态由 A 表象变到 B 表象有：对本征值为 1 的本征态，

$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ e^{-i\delta} \end{pmatrix}$，

以S^+左乘上式，利用$S^+S=1$，$\begin{pmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ e^{-i\delta} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} a^* \\ b^* \end{pmatrix}$

同理，对本征值为–1 的本征态，

$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -e^{-i\delta} \end{pmatrix}$，

以S^+左乘上式，利用$S^+S=1$，$\begin{pmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -e^{-i\delta} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} c^* \\ d^* \end{pmatrix}$

于是，$S^+=\begin{pmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ e^{-i\delta} & -e^{-i\delta} \end{pmatrix}$

所以

$$S=(S^+)^+=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ e^{-i\delta} & -e^{-i\delta} \end{pmatrix}^+=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & e^{i\delta} \\ 1 & -e^{i\delta} \end{pmatrix}$$

法 2：利用算符变换：算符 B 在 A 表象的表示已经求出，B 表象的表示为本征值构成的对角矩阵，于是：

$\begin{pmatrix} \boldsymbol{1} & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{-1} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \boldsymbol{a} & \boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{c} & \boldsymbol{d} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \boldsymbol{0} & \boldsymbol{e^{i\delta}} \\ \boldsymbol{e^{-i\delta}} & \boldsymbol{0} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \boldsymbol{a^*} & \boldsymbol{c^*} \\ \boldsymbol{b^*} & \boldsymbol{d^*} \end{pmatrix}$，再利用$S^+S=1$即可求出。

法 3：S 也可以按照定义求。注意在 A 表象中，A 和 B 的（对应本征值为 1 和–1 的）两个

课后答案网 www.khdaw.com

本征矢分别为：$|a>=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},|b>=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$，为：$|\alpha>=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\e^{-i\delta}\end{pmatrix},|\beta>=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-e^{-i\delta}\end{pmatrix}$。于是，

$$S=\begin{pmatrix}<\alpha|a> & <\alpha|b>\\ <\beta|a> & <\beta|b>\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\delta}\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\delta}\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & e^{-i\delta}\\ 1 & -e^{-i\delta}\end{pmatrix}$$

(d) A、B 算符在 B 表象中的表示为

$$A(B)=SA(A)S^{+}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & e^{i\delta}\\ 1 & -e^{i\delta}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ e^{-i\delta} & -e^{-i\delta}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$$

$$B(B)=SB(A)S^{+}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & e^{i\delta}\\ 1 & -e^{i\delta}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & e^{i\delta}\\ e^{-i\delta} & 0\end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ e^{-i\delta} & -e^{-i\delta}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

2-4 二阶矩阵A,A满足关系 $A^2=0$，$AA^{+}+A^{+}A=1$，$A^{+}A=B$

试证明 $B^2=B$,并在B表象中求出矩阵A,B.

证：$B^2=BB=A^{+}AA^{+}A=A^{+}(1-A^{+}A)A=A^{+}A-A^{+}A^{+}AA=B-A^{+}A^{+}A^2=B$

设 B 的本征值和本征函数分别为 $b,|b>$。 则本征值方程为：

$B|b>=b|b>$,利用$B^2=B$，有：

$B^2|b>=Bb|b>=b^2|b>=B|b>=b|b>$, 即： $b^2=b$,故B的本征值有两个：$b_1=0,b_2=1$

在 B 表象中，B 的矩阵为由其本征值构成的对角矩阵：

$B=\begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$。设 B 表象中 A 矩阵为 $A=\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}$，则

$$A^{+}A=\begin{pmatrix}a^{*} & c^{*}\\ b^{*} & d^{*}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}|a|^2+|c|^2 & a^{*}b+c^{*}d\\ b^{*}a+d^{*}c & |b|^2+|d|^2\end{pmatrix}=B=\begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$$

得：$|a|^2+|c|^2=0$,即$a=c=0$，所以 $A=\begin{pmatrix}0 & b\\ 0 & d\end{pmatrix}$

$A^2=\begin{pmatrix}0 & b\\ 0 & d\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & b\\ 0 & d\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & bd\\ 0 & d^2\end{pmatrix}=0$，所以 $d=0$。而

$$AA^{+}+A^{+}A=\begin{pmatrix}0 & b\\ 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 0\\ b^{*} & 0\end{pmatrix}+B=\begin{pmatrix}|b|^2 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}=1,$$

所以 $|b|^2=1$，$b=e^{i\alpha}$ (α 为实数).结果为： $A=\begin{pmatrix}0 & e^{i\alpha}\\ 0 & 0\end{pmatrix}$

4-6 设$|n>,|k>$是厄米算符 F 的本征态矢量，相应于不同的本征值。设算符 G 与 F 对易。证明 $<k|G|n>=0$.

证：$|n>,|k>$是厄米算符F的本征态矢量，$F|n>=n|n>,<k|F=k^{*}<k|=k<k|$.

又算符 G 与 F 对易： $GF=FG$,于是

课后答案网 www.khdaw.com

$<k|GF-GF|n>=<k|GF|n>-<k|FG|n>=n<k|G|n>-k<k|G|n>=(n-k)<k|G|n>=0$

而 $n-k\neq 0$, 所以 $<k|G|n>=0$

4-7 设$|n>$是厄米算符 H 的本征态矢量，A 是另一个算符。证明$<n|[A,H]|n>=0$.又如$|n>,|k>$是简并态(相应于 H 的同一本征值)，证明$<n|[A,H]|k>=0$。

证明：

$$<n|[A,H]|n>=<n|AH-HA|n>=<n|AH|n>-<n|HA|n>$$
$$=n<n|A|n>-n<n|A|n>=0$$

$|n>,|k>$是简并态(相应于 H 的同一本征值)，即 $H|n>=n|n>$, $H|k>=n|k>$。

$$<n|[A,H]|k>=<n|AH-HA|k>=<n|AH|k>-<n|HA|k>$$
$$=n<n|A|k>-n<n|A|k>=0$$

4-9 粒子在均匀力场(F)中作一维运动，$V(x)=-Fx$，写出并解动量表象中的定态 Schrodinger 方程。

解：动量表象中，坐标算符：$x=i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$,于是动量表象中的定态 Schrodinger 方程为：

$H(p)\varphi(p)=(\frac{p^2}{2m}-Fx)\varphi(p)=E\varphi(p)$，即

$$(\frac{p^2}{2m}-i\hbar F\frac{d}{dp})\varphi(p)=E\varphi(p)$$

改写为：$\frac{d\varphi}{\varphi}=\frac{i}{\hbar F}(E-\frac{p^2}{2m})dp$，积分，得：

$$\varphi(p)=A\exp[\frac{i}{\hbar F}(Ep-\frac{p^3}{6m})]$$

4-14 一维谐振子，对于能量本征态$|n>$，利用升降算符(a^+,a)计算动能平均值、势能平均值，以及 $\Delta x,\Delta p$.

解：$x=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}[a^++a]$ ， $\hat{p}=i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}[a^+-a]$,

动能平均值为：

$$\overline{E}_k=<n|\frac{\hat{p}^2}{2m}|n>=-\hbar\omega\frac{1}{4}<n|[a^+-a][a^+-a]|n>=-\frac{\hbar\omega}{4}<n|[a^+a^+-a^+a-aa^++aa]|n>$$

利用对易关系：$N=a^+a,[a,\hat{a}^+]=aa^+-a^+a=1$，和

$N|n>=n|n>,a|n>=\sqrt{n}|n-1>,\hat{a}^+|n>=\sqrt{n+1}|n+1>$及正交归一关系，有：

课后答案网 www.khdaw.com

$$\overline{E}_k = -\frac{\hbar\omega}{4} < n|[a^+a^+ - a^+a - aa^+ + aa]|n> = -\frac{\hbar\omega}{4} < n|[a^+a^+ - 1 - 2N + aa]|n>$$

$$= -\frac{\hbar\omega}{4}(1+2n) = (n+\frac{1}{2})\frac{\hbar\omega}{2}$$

同理，势能平均值为：

$$\overline{E}_p = <n|\frac{m\omega^2 x^2}{2}|n> = \hbar\omega\frac{1}{4} < n|[a^+ + a][a^+ + a]|n> = \frac{\hbar\omega}{4} < n|[a^+a^+ + a^+a + aa^+ + aa]|n>$$

$$\overline{E}_p = \frac{\hbar\omega}{4} < n|[a^+a^+ + 2N + 1 + aa]|n>$$

$$= \frac{\hbar\omega}{4}(2n+1) = (n+\frac{1}{2})\frac{\hbar\omega}{2}$$

$$\overline{x} = <n|\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}[a^+ + a]|n> = <n|\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}[\sqrt{n+1}|n+1> + \sqrt{n}|n-1>] = 0$$

$$\overline{\hat{p}} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} < n|[a^+ - a]|n> = 0$$

$$\overline{x^2} = \frac{2}{m\omega^2}\overline{E}_p = (n+\frac{1}{2})\frac{\hbar}{m\omega}$$

$$\overline{p^2} = 2m\overline{E}_k = (n+\frac{1}{2})m\hbar\omega$$

所以，$\Delta x = \sqrt{\overline{x^2} - \overline{x}^2} = \sqrt{(n+\frac{1}{2})\frac{\hbar}{m\omega}}$，$\Delta p = \sqrt{\overline{p^2} - \overline{p}^2} = \sqrt{(n+\frac{1}{2})m\hbar\omega}$

$$\Delta x\Delta p = \sqrt{(n+\frac{1}{2})\frac{\hbar}{m\omega}}\sqrt{(n+\frac{1}{2})m\hbar\omega} = (n+\frac{1}{2})\hbar \geq \frac{\hbar}{2}$$

4-16 某体系的能量算符（已经无量纲化）为 $H = \frac{5}{3}a^+a + \frac{2}{3}(a^2 + a^{+2})$

其中 $a = \frac{1}{\sqrt{2}}(q+ip), a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(q-ip)$，*q,p* 满足对易关系[*q*,*p*]=*i*.试求体系的能谱及基态波函数（*q* 表象）。

解：利用对易关系[*q*,*p*]=*i*，可得

$$[a,a^+] = \frac{1}{2}[(q+ip),(q-ip)] = \frac{1}{2}([q,q] + i[p,q] - i[q,p] + [p,p]) = \frac{1}{2}(0 + i(-i) - ii + 0) = 1$$

为了将*H*化成谐振子的形式，应该找到一对算符*b*、b^+,满足[*b*,b^+]=1,并使*H*化成下列形式：$H=kb^+b+E_0$.为此，令

$$b = ua + va^+, b^+ = ua^+ + va$$

(*u*,*v*)为待定实数。于是有：

$$[b,b^+] = [ua + va^+, ua^+ + va] = u^2[a,a^+] + v^2[a^+,a] = u^2 - v^2 = 1$$

课后答案网 www.khdaw.com

$b^+b=(u^2+v^2)a^+a+uv(a^2+a^{+2})+v^2$

于是

$$H=kb^+b+E_0=k(u^2+v^2)a^+a+kuv(a^2+a^{+2})+kv^2+E_0=\frac{5}{3}a^+a+\frac{2}{3}(a^2+a^{+2})$$

即得:

$$k(u^2+v^2)=\frac{5}{3},kuv=\frac{2}{3},kv^2+E_0=0,u^2-v^2=1$$

解得：$k=1,u=\frac{2}{\sqrt{3}},v=\frac{1}{\sqrt{3}},E_0=-\frac{1}{3}$

于是： $H=b^+b-\frac{1}{3}$

$$[H,b]=[b^+b-\frac{1}{3},b]=[b^+b,b]=[b^+,b]b=-b$$

$$[H,b^+]=[b^+b-\frac{1}{3},b^+]=b^+$$

设 $b^+b\,|n>=n\,|n>$，则

$$H\,|n>=(b^+b-\frac{1}{3})\,|n>=(n-\frac{1}{3})\,|n>$$

$$Hb\,|n>=(bH-b)\,|n>=(n-\frac{1}{3}-1)b\,|n>=[(n-1)-\frac{1}{3}]b\,|n>$$

$b|n>$属于 H 的第$(n-1)$各本征态，于是 $b\,|n>=c\,|n-1>$

而 $<n\,|b^+b\,|n>=<n\,|n\,|n>=n=<n-1\,|c^*c\,|n-1>=|c|^2$，即 $b\,|n>=\sqrt{n}\,|n-1>$

同理，可得：$b^+\,|n>=\sqrt{n+1}\,|n+1>$

所以， $E_n=n-\frac{1}{3}$， n=0,1,2…

基态，n=0. $b\,|0>=0$,而

$b=\frac{2}{\sqrt{3}}a+\frac{1}{\sqrt{3}}a^+=\sqrt{3}q+\frac{1}{\sqrt{3}}\frac{d}{dq}$ （假设 $p=-i\frac{d}{dq}$）

所以， $b<q\,|0>=(\sqrt{3}q+\frac{1}{\sqrt{3}}\frac{d}{dq})\psi_0=0$

解得：

$\psi_0=Ce^{-3q^2/2}$

4-18 对于角动量算符 $\boldsymbol{J}$ 和常矢量 $\boldsymbol{n}$，证明 $[\boldsymbol{J},\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}]=i\hbar\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J}$

课后答案网 www.khdaw.com

证： $\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}=n_xJ_x+n_yJ_y+n_zJ_z$

利用角动量对易关系：$\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J}=i\hbar\boldsymbol{J}$ 得：

$$[J_x,\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}]=[J_x,n_xJ_x+n_yJ_y+n_zJ_z]=n_x[J_x,J_x]+n_y[J_x,J_y]+n_z[J_x,J_z]$$
$$=0+n_yi\hbar J_z+n_z(-i\hbar J_y)=i\hbar(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J})_x$$

同理可得：$[J_y,\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}]=i\hbar(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J})_y$，$[J_z,\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}]=i\hbar(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J})_z$

4-19　对于角动量算符 $\boldsymbol{J}$ 和参数λ，证明公式（取$\hbar=1$）

（1）$J_z^nJ_\pm=J_\pm(J_z\pm1)^n,\quad n=1,2,3...$

（2）$e^{i\lambda J_z}J_xe^{-i\lambda J_z}=J_x\cos\lambda-J_y\sin\lambda$，$e^{i\lambda J_z}J_ye^{-i\lambda J_z}=J_x\sin\lambda+J_y\cos\lambda$

证明：（1）利用角动量对易关系：$\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J}=i\boldsymbol{J}$，易得：

$$[J_z,J_\pm]=[J_z,J_x\pm iJ_y]=[J_z,J_x]\pm i[J_z,J_y]=iJ_y\pm i(-iJ_x)=\pm J_\pm$$

即：$J_zJ_\pm=J_\pm(J_z\pm1)$

$$J_z^2J_\pm=J_zJ_\pm(J_z\pm1)=J_\pm(J_z\pm1)^2$$

归纳法：设 $J_z^{n-1}J_\pm=J_\pm(J_z\pm1)^{n-1}$，注意：$J_zJ_\pm=J_\pm(J_z\pm1)$

得：

$$J_z^nJ_\pm=J_zJ_z^{n-1}J_\pm=J_zJ_\pm(J_z\pm1)^{n-1}=J_\pm(J_z\pm1)(J_z\pm1)^{n-1}=J_\pm(J_z\pm1)^n,n=1,2,3...$$

（2）法 1：

$$e^{i\lambda J_z}J_\pm=\sum_n\frac{1}{n!}(i\lambda)^nJ_z^nJ_\pm=\sum_n\frac{1}{n!}(i\lambda)^nJ_\pm(J_z\pm1)^n=J_\pm\sum_n\frac{1}{n!}(i\lambda)^n(J_z\pm1)^n=J_\pm e^{i\lambda(J_z\pm1)}$$

即得：$e^{i\lambda J_z}J_\pm e^{-i\lambda J_z}=J_\pm e^{\pm i\lambda}$，或：

$e^{i\lambda J_z}J_+e^{-i\lambda J_z}=J_+e^{i\lambda}$，$e^{i\lambda J_z}J_-e^{-i\lambda J_z}=J_-e^{-i\lambda}$

两式相加、减，利用：$J_x=\frac{1}{2}(J_++J_-),J_y=\frac{1}{2i}(J_+-J_-)$

得：$e^{i\lambda J_z}J_xe^{-i\lambda J_z}=J_x\cos\lambda-J_y\sin\lambda$，$e^{i\lambda J_z}J_ye^{-i\lambda J_z}=J_x\sin\lambda+J_y\cos\lambda$

法 2：设 $f(\lambda)=e^{i\lambda J_z}J_xe^{-i\lambda J_z}$，则$f(0)=J_x$对参数$\lambda$求导,得：

$$f'(\lambda)=\frac{df(\lambda)}{d\lambda}=ie^{i\lambda J_z}[J_z,J_x]e^{-i\lambda J_z}=-e^{i\lambda J_z}J_ye^{-i\lambda J_z},\text{则}f'(0)=-J_y$$

$$\frac{d^2f(\lambda)}{d\lambda^2}=-ie^{i\lambda J_z}[J_z,J_y]e^{-i\lambda J_z}=-i(-i)e^{i\lambda J_z}J_xe^{-i\lambda J_z}=-f(\lambda)$$

课后答案网 www.khdaw.com

所以： $f(\lambda)=A\cos\lambda+B\sin\lambda$, $f'(\lambda)=-A\sin\lambda+B\cos\lambda$,代入

$f(0)=J_x$, $f'(0)=-J_y$， 得： $A=J_x=A, B=-J_y$

即： $e^{i\lambda J_z}J_x e^{-i\lambda J_z}=J_x\cos\lambda-J_y\sin\lambda$， $e^{i\lambda J_z}J_y e^{-i\lambda J_z}=-f'(\lambda)=J_x\sin\lambda+J_y\cos\lambda$

法 3：利用 3-15（b）公式直接证明。

$e^A Be^{-A}=B+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{C_n}{n!}$， $[A,B]=AB-BA=C_1$， $[A,C_1]=C_2$， …， $[A,C_n]=C_{n+1}$。

这里，$A=i\lambda J_z, B=J_\pm$。 $C_1=[i\lambda J_z, J_\pm]=i\lambda(\pm J_\pm)=\pm i\lambda J_\pm$，

$C_2=[i\lambda J_z, C_1]=(\pm i\lambda)^2 J_\pm$,…， $C_n=[i\lambda J_z, C_{n-1}]=(\pm i\lambda)^n J_\pm$

所以：

$$e^{i\lambda J_z}J_+e^{-i\lambda J_z}=J_++J_+\sum_{n=1}\frac{(i\lambda)^n}{n!}=J_+\sum_{n=0}\frac{(i\lambda)^n}{n!}=J_+e^{i\lambda}$$

$$e^{i\lambda J_z}J_+e^{-i\lambda J_z}=J_-\sum_{n=0}\frac{(-i\lambda)^n}{n!}=J_-e^{-i\lambda}$$

两式相加、减，利用： $J_x=\frac{1}{2}(J_++J_-), J_y=\frac{1}{2i}(J_+-J_-)$

得： $e^{i\lambda J_z}J_x e^{-i\lambda J_z}=J_x\cos\lambda-J_y\sin\lambda$， $e^{i\lambda J_z}J_y e^{-i\lambda J_z}=J_x\sin\lambda+J_y\cos\lambda$

4-20　证明：在J^2，J_z共同本征态$|jm>$下， $\bar{J}_x=0, \bar{J}_y=0$。再进一步证明J_x和J_y的奇次幂次式(J_x^3， $J_x^2J_y$,等等)平均值也等于 0。

证明：法 1：利用对易关系：$[J_z,J_x]=i\hbar J_y$， $[J_z,J_y]=-i\hbar J_x$ 有：

$$i\hbar\bar{J}_y=<jm|[J_z,J_x]|jm>=<jm|J_zJ_x|jm>-<jm|J_xJ_z|jm>$$
$$=m\hbar<jm|J_x|jm>-m\hbar<jm|J_x|Jm>=0$$

$$-i\hbar\bar{J}_x=<jm|[J_z,J_y]|jm>=<jm|J_zJ_y|jm>-<jm|J_yJ_z|jm>$$
$$=m\hbar<jm|J_y|jm>-m\hbar<jm|J_y|Jm>=0$$

法 2：根据 $J_x=\frac{1}{2}(J_++J_-), J_y=\frac{1}{2i}(J_+-J_-)$

而 $J_\pm|jm>=C_\pm|jm\pm1>$，利用$|jm>$的正交归一性，得：

$\bar{J}_\pm=<jm|J_\pm|jm>=C_\pm<jm|jm\pm1>=0$，所以，

$$\bar{J}_x=\frac{1}{2}(\bar{J}_++\bar{J}_-)=0, \bar{J}_y=\frac{1}{2i}(\bar{J}_+-\bar{J}_-)=0$$

课后答案网 www.khdaw.com

J_x和J_y的奇次幂次式(J_x^3，$J_x^2J_y$,等等)，必然是J_+和J_-的奇次幂次式,而

$J_\pm(\text{奇次幂式})|\,jm>=C_{\pm m'}|\,jm'>$，这里$m'-m=\text{奇数}\neq 0$

所以，$<jm|\,J_\pm(\text{奇次幂式})|\,jm>=C_{\pm m'}<jm|\,jm'>=0$，于是

$<jm|\,(J_x,J_y\text{奇次幂式})|\,jm>=<jm|\,(J_\pm\text{奇次幂式})|\,jm>=0$

4-23　以|*lm*>表示L^2, L_z共同本征态，[$L^2=l(l+1)\hbar^2, L_z=m\hbar$]限定*l*=1，取基矢为|11〉，|10〉，|1-1〉，在这态矢量子空间建立L^2-L_z表象。求L_x，L_y的矩阵（3 阶）表示以及本征值和本征矢量。

解：*l* =1 时，*m*=1，0，-1。*L* 和 *Lz* 为对角矩阵。

$$<lm'|\,L_\pm|\,lm>=\hbar\sqrt{(l\mp m)(l\pm m+1)}\,\delta_{m'm\pm1}$$

即

$$L_+=\hbar\begin{pmatrix}0&\sqrt{2}&0\\0&0&\sqrt{2}\\0&0&0\end{pmatrix},\quad L_-=\hbar\begin{pmatrix}0&0&0\\\sqrt{2}&0&0\\0&\sqrt{2}&0\end{pmatrix}$$

$$L_x=\frac{1}{2}(L_++L_-)=\frac{\sqrt{2}\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix},\quad L_y=\frac{i}{2}(L_--L_+)=\frac{i\sqrt{2}\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&-1&0\\1&0&-1\\0&1&0\end{pmatrix}$$

由久期方程可以求出L_x 的本征值：

$$\begin{vmatrix}0-\lambda&\frac{\sqrt{2}\hbar}{2}&0\\\frac{\sqrt{2}\hbar}{2}&0-\lambda&\frac{\sqrt{2}\hbar}{2}\\0&\frac{\sqrt{2}\hbar}{2}&0-\lambda\end{vmatrix}=0$$，解得：$\lambda=\hbar,0,-\hbar$.设本征矢为：$\varphi_\lambda=\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix}$，则本征值方程为：

$$\frac{\sqrt{2}\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix}$$，或：$$\frac{\sqrt{2}\hbar}{2}\begin{pmatrix}a_2\\a_1+a_3\\a_2\end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix}$$

将$\lambda=\hbar,0,-\hbar$分别代入上式，可以确定出相应本征值的本征矢。$\lambda=\hbar$ 时：解得：

$a_1=a_3=\frac{\sqrt{2}}{2}a_2$，所以：$\varphi_1=\frac{\sqrt{2}}{2}a_2\begin{pmatrix}1\\\sqrt{2}\\1\end{pmatrix}$，归一化，

课后答案网 www.khdaw.com

$$\varphi_1^+\varphi_1=\frac{\sqrt{2}}{2}a_2^*(1,\sqrt{2},0)\frac{\sqrt{2}}{2}a_2\begin{pmatrix}1\\\sqrt{2}\\1\end{pmatrix}=\frac{1}{2}|a_2|^2(1+2+1)=2|a_2|^2=1,$$

所以：$a_2=\frac{\sqrt{2}}{2}$，于是：$\varphi_1=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\\sqrt{2}\\1\end{pmatrix}$；

$\lambda=0$ 时：解得：

$a_1=-a_3,a_2=0$，所以：$\varphi_0=a_1\begin{pmatrix}1\\0\\-1\end{pmatrix}$，归一化，

$$\varphi_0^+\varphi_0=a_1^*(1,0,-1)a_1\begin{pmatrix}1\\0\\-1\end{pmatrix}=|a_1|^2(1+0+1)=2|a_1|^2=1,$$

所以：$a_1=\frac{\sqrt{2}}{2}$，于是：$\varphi_0=\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}1\\0\\-1\end{pmatrix}$；

$\lambda=-\hbar$ 时：解得：

$a_1=a_3=-\frac{\sqrt{2}}{2}a_2$，所以：$\varphi_{-1}=-\frac{\sqrt{2}}{2}a_2\begin{pmatrix}1\\\sqrt{2}\\1\end{pmatrix}$，归一化，

$$\varphi_{-1}^+\varphi_{-1}=\frac{\sqrt{2}}{2}a_2^*(1,\sqrt{2},0)\frac{\sqrt{2}}{2}a_2\begin{pmatrix}1\\\sqrt{2}\\1\end{pmatrix}=\frac{1}{2}|a_2|^2(1+2+1)=2|a_2|^2=1,$$

所以：$a_2=\frac{\sqrt{2}}{2}$，于是：$\varphi_{-1}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\-\sqrt{2}\\1\end{pmatrix}$

同理，由久期方程可以求出L_y 的本征值：

$\begin{vmatrix}0-\kappa & -i\frac{\sqrt{2}\hbar}{2} & 0\\ i\frac{\sqrt{2}\hbar}{2} & 0-\kappa & -i\frac{\sqrt{2}\hbar}{2}\\ 0 & i\frac{\sqrt{2}\hbar}{2} & 0-\kappa\end{vmatrix}=0$，解得：$\kappa=\hbar,0,-\hbar$.设本征矢为：$\psi_\kappa=\begin{pmatrix}b_1\\b_2\\b_3\end{pmatrix}$，

则本征值方程为：

课后答案网 www.khdaw.com

$$i\frac{\sqrt{2}\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&-1&0\\1&0&-1\\0&1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}b_1\\b_2\\b_3\end{pmatrix}=\kappa\begin{pmatrix}b_1\\b_2\\b_3\end{pmatrix}$$，或：$$i\frac{\sqrt{2}\hbar}{2}\begin{pmatrix}-b_2\\b_1-b_3\\b_2\end{pmatrix}=\kappa\begin{pmatrix}b_1\\b_2\\b_3\end{pmatrix}$$

将 $\kappa=\hbar,0,-\hbar$ 分别代入上式，可以确定出相应本征值的本征矢。$\kappa=\hbar$ 时：解得：

$b_1=-b_3=-i\frac{\sqrt{2}}{2}b_2$，所以：$\psi_1=-i\frac{\sqrt{2}}{2}b_2\begin{pmatrix}1\\i\sqrt{2}\\-1\end{pmatrix}$，归一化，

$$\psi_1^+\psi_1=i\frac{\sqrt{2}}{2}b_2^*(1,-i\sqrt{2},-1)(-i\frac{\sqrt{2}}{2})b_2\begin{pmatrix}1\\i\sqrt{2}\\-1\end{pmatrix}=\frac{1}{2}|b_2|^2(1+2+1)=2|b_2|^2=1,$$

所以（取）：$b_2=\frac{\sqrt{2}}{2}i$，于是：$\psi_1=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\i\sqrt{2}\\-1\end{pmatrix}$；

$\kappa=0$ 时：解得：

$b_1=b_3,b_2=0$，所以：$\psi_0=b_1\begin{pmatrix}1\\0\\1\end{pmatrix}$，归一化，

$$\psi_0^+\psi_0=b_1^*(1,0,1)b_1\begin{pmatrix}1\\0\\1\end{pmatrix}=|b_1|^2(1+0+1)=2|b_1|^2=1,$$

所以：$b_1=\frac{\sqrt{2}}{2}$，于是：$\varphi_0=\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}1\\0\\1\end{pmatrix}$；

$\kappa=-\hbar$ 时：解得：

$b_1=-b_3=i\frac{\sqrt{2}}{2}b_2$，所以：$\psi_{-1}=i\frac{\sqrt{2}}{2}b_2\begin{pmatrix}1\\-i\sqrt{2}\\-1\end{pmatrix}$，归一化，

$$\psi_{-1}^+\psi_{-1}=-i\frac{\sqrt{2}}{2}b_2^*(1,i\sqrt{2},-1)i\frac{\sqrt{2}}{2}b_2\begin{pmatrix}1\\-i\sqrt{2}\\-1\end{pmatrix}=\frac{1}{2}|b_2|^2(1+2+1)=2|b_2|^2=1,$$

所以：$b_2=-i\frac{\sqrt{2}}{2}$，于是：$\varphi_{-1}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\-i\sqrt{2}\\-1\end{pmatrix}$

课后答案网 www.khdaw.com

量子力学解答

(钱伯初<量子力学>)

Chap5　中心力场

5-2 限于l=1 的情形。分别求L^2，L_x的共同本征函数和L^2，L_y的共同本征函数，把它们表示成Y_{lm}的线性叠加。然后验证：L_x=0 的本征函数，L_y=0 的本征函数，L_z=0 的本征函数（Y_{10}）三者互相正交。你能否不依赖本征函数的具体形式而对此结果给与理论证明？

解：利用 4-23 题结果：在L^2,L_z表象中，L_x和L_y的对应本征值(ħ,0,–ħ)的本征态分别为：

L_x=　　ħ,　　0,　　–ħ　　L_y=　　ħ,　　0,　　–ħ

$$\varphi_1=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\ \sqrt{2}\\ 1\end{pmatrix}\quad \varphi_0=\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}1\\ 0\\ -1\end{pmatrix}\quad \varphi_{-1}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\ -\sqrt{2}\\ 1\end{pmatrix}\qquad \psi_1=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\ i\sqrt{2}\\ -1\end{pmatrix}\quad \psi_0=\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}1\\ 0\\ 1\end{pmatrix}\quad \psi_{-1}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\ -i\sqrt{2}\\ -1\end{pmatrix}$$

L_z的本征函数为：

L_z=　ħ,　　0,　　–ħ

$$\phi_1=\begin{pmatrix}1\\ 0\\ 0\end{pmatrix}\quad \phi_0=\begin{pmatrix}0\\ 1\\ 0\end{pmatrix}\quad \phi_{-1}=\begin{pmatrix}0\\ 0\\ 1\end{pmatrix}$$

容易验证正交关系：

$$<\phi_0\,|\,\varphi_0>=(0,1,0)\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}1\\ 0\\ -1\end{pmatrix}=0\quad ,\qquad <\phi_0\,|\,\psi_0>=(0,1,0)\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}1\\ 0\\ 1\end{pmatrix}=0\quad ,$$

$$<\psi_0\,|\,\varphi_0>=\frac{\sqrt{2}}{2}(1,0,1)\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}1\\ 0\\ -1\end{pmatrix}=\frac{1}{2}(1+0-1)=0$$

即三者正交。或者在坐标表象中，$\phi_0=(0,1,0)\begin{pmatrix}Y_{11}\\ Y_{10}\\ Y_{1-1}\end{pmatrix}=Y_{10}$，

$$\varphi_0=\frac{\sqrt{2}}{2}(1,0,-1)\begin{pmatrix}Y_{11}\\ Y_{10}\\ Y_{1-1}\end{pmatrix}=\frac{\sqrt{2}}{2}(Y_{11}-Y_{1-1})\,,\quad \psi_0=\frac{\sqrt{2}}{2}(1,0,1)\begin{pmatrix}Y_{11}\\ Y_{10}\\ Y_{1-1}\end{pmatrix}=\frac{\sqrt{2}}{2}(Y_{11}+Y_{1-1})\,,$$

利用球谐函数的正交性：

$$<\phi_0\,|\,\varphi_0>=<Y_{10}\,|\,\frac{\sqrt{2}}{2}(Y_{11}-Y_{1-1})>=\frac{\sqrt{2}}{2}(<Y_{10}\,|\,Y_{11}>-<Y_{10}\,|\,Y_{1-1}>)=0$$

课后答案网 www.khdaw.com

$$<\phi_0|\psi_0>=<Y_{10}|\frac{\sqrt{2}}{2}(Y_{11}+Y_{1-1})>=\frac{\sqrt{2}}{2}(<Y_{10}|Y_{11}>+<Y_{10}|Y_{1-1}>)=0$$

$$<\psi_0|\varphi_0>=<\frac{\sqrt{2}}{2}(Y_{11}+Y_{1-1})|\frac{\sqrt{2}}{2}(Y_{11}-Y_{1-1})>=\frac{1}{2}(<Y_{11}|Y_{11}>+0-0-<Y_{1-1}|Y_{1-1}>)=0$$

此结果不依赖本征函数的具体形式的理论证明如下：

l=1 时，m=1，0，–1。L_z=0 的本征函数为Y_{10}，

利用升降算符表示 Lx,Ly：$L_x=\frac{1}{2}(L_++L_-)$，$L_y=\frac{i}{2}(L_--L_+)$

$$L_x^2=\frac{1}{4}(L_++L_-)^2, L_y^2=-\frac{1}{4}(L_+-L_-)^2$$

而 $L_\pm|Y_{lm}>=\hbar\sqrt{(l\mp m)(l\pm m+1)}|Y_{lm\pm1}>$，所以，在$Y_{10}$中的平均值为：

$$<Y_{10}|L_x^2|Y_{10}>=\frac{1}{4}<Y_{10}|(L_++L_-)^2|Y_{10}>=\frac{1}{4}<Y_{10}|(L_++L_-)\hbar\sqrt{2}(|Y_{11}>+|Y_{1-1}>)$$

$$=\frac{\hbar^2}{2}<Y_{10}|(0+|Y_{10}>+|Y_{10}>+0)=\hbar^2$$

Lx本征值仅有三个：ħ，0，-ħ， 对应本征函数记为：|11〉，|10〉，|1-1〉。将Y_{10}按它们展开：$|Y_{10}\rangle=a|11\rangle+b|10\rangle+c|1\text{-}1\rangle$，则 a^2,b^2,c^2分别是在Y_{10}态中测得Lx的本征值取ħ，0，-ħ的概率。于是：

$<Y_{10}|L_x^2|Y_{10}>=a^2\hbar^2+b^2\times0+c^2\hbar^2=(a^2+c^2)\hbar^2=\hbar^2$，即：$a^2+c^2=1$

归一化：$<Y_{10}|Y_{10}>=a^2+b^2+c^2=1$，利用上式，得：b=0。于是

$|Y_{10}\rangle=a|11\rangle+c|1\text{-}1\rangle$，不含|10〉项。立即可得：

$\langle10|Y_{10}\rangle=a\langle10|11\rangle+c\langle10|1\text{-}1\rangle=0+0=0$

即L_x=0 的本征函数与L_z=0 的本征函数（Y_{10}）正交。同理可证，L_y=0 的本征函数与L_z=0 的本征函数（Y_{10}）正交，L_x=0 的本征函数与L_y=0 的本征函数正交。

5-3 求Y_{11}态下L_x的可能测值及相应概率，用下述两种方法。

(a) 将Y_{11}按L^2,L_z共同本征函数展开。

(b)对Y_{11}态计算L_x及L_x^2的平均值。

解：(a) 在L^2,L_z表象中，L_x和L_z对应本征值(ħ,0,–ħ)的本征态分别为：

L_x=　ħ,　0,　–ħ　　L_z=　ħ,　0,　–ħ

$$\varphi_1=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\\sqrt{2}\\1\end{pmatrix}\quad\varphi_0=\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}1\\0\\-1\end{pmatrix}\quad\varphi_{-1}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\-\sqrt{2}\\1\end{pmatrix}\qquad Y_{11}=\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}\quad Y_{10}=\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}\quad Y_{1-1}=\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}$$

将Y_{11}按L^2,L_z共同本征函数展开：

$$Y_{11}=a\varphi_1+b\varphi_0+c\varphi_{-1}$$

课后答案网 www.khdaw.com

展开系数分别为：

$$a =< \varphi_1 \mid Y_{11} >= \frac{1}{2}(1,\sqrt{2},1)\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix} = \frac{1}{2},\quad b =< \varphi_0 \mid Y_{11} >= \frac{\sqrt{2}}{2}(1,0,-1)\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix} = \frac{\sqrt{2}}{2},$$

$$c =< \varphi_{-1} \mid Y_{11} >= \frac{1}{2}(1,-\sqrt{2},1)\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix} = \frac{1}{2},\ \text{于是：}\ Y_{11} = \frac{1}{2}\varphi_1 + \frac{\sqrt{2}}{2}\varphi_0 + \frac{1}{2}\varphi_{-1}$$

L_x测值	ħ	0	–ħ
概率=|系数|^2	1/4	1/2	1/4

(b) 利用升降算符表示：$L_x = \frac{1}{2}(L_+ + L_-)$，$L_x^2 = \frac{1}{4}(L_+ + L_-)^2$

而 $L_\pm \mid Y_{lm} >= \hbar\sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)} \mid Y_{lm\pm1} >$，利用$Y_{lm}$的正交性，在$Y_{11}$中的平均值为：

$$< Y_{11} \mid L_x \mid Y_{11} >= \frac{1}{2} < Y_{11} \mid (L_+ + L_-) \mid Y_{11} >= \frac{1}{4} < Y_{11} \mid \hbar\sqrt{2}(0+ \mid Y_{10} >) = 0$$

$$< Y_{11} \mid L_x^2 \mid Y_{11} >= \frac{1}{4} < Y_{11} \mid (L_+ + L_-)^2 \mid Y_{11} >= \frac{1}{4} < Y_{11} \mid (L_+ + L_-)\hbar\sqrt{2}(0+ \mid Y_{10} >)$$

$$= \frac{\hbar^2}{2} < Y_{11} \mid (\mid Y_{11} > +0) = \frac{\hbar^2}{2}$$

*Lx*本征值仅有三个：ħ，0，-ħ， 对应本征函数记为：|11〉，|10〉，|1-1〉。将Y_{11}按它们展开：|Y_{11}〉=a|11〉+b|10〉+c|1-1〉,则 a^2,b^2,c^2分别是在Y_{11}态中测得*Lx*的本征值取ħ，0，-ħ的概率。于是：

$< Y_{11} \mid L_x \mid Y_{11} >= a^2\hbar + b^2 \times 0 + c^2(-\hbar) = (a^2 - c^2)\hbar = 0$，得：$a^2=c^2$

$< Y_{11} \mid L_x^2 \mid Y_{11} >= a^2\hbar^2 + b^2 \times 0 + c^2\hbar^2 = 2a^2\hbar^2 = \hbar^2/2$,得：$a^2=c^2=1/4$

归一化：$< Y_{11} \mid Y_{11} >= a^2 + b^2 + c^2 = 1$，利用上式，得：$b^2=1/2$。于是

L_x测值	ħ	0	–ħ
概率=|系数|^2	1/4	1/2	1/4

5-4 设粒子状态为 $\psi = A(x + y + 2z)e^{-\lambda r}, (\lambda > 0)$ 求

(a) L^2的取值 (b) $\overline{L_z}$ (c) L_z= ħ的概率 (d) L_x的可能测值及相应概率。

解：利用球谐函数的具体形式，可以将态写为：

$$\psi = Are^{-\lambda r}\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\left(\frac{i-1}{\sqrt{2}}Y_{11} + 2Y_{10} + \frac{i+1}{\sqrt{2}}Y_{1-1}\right)$$

(a) 可见为L^2的属于*l*=1 的本征态，故：L^2的取值=$l(l+1)\hbar^2$=2 $\hbar^2$

(b) 设对应L_z三个本征值ħ，0，-ħ的本征态的展开系数分别为a,b,c, 则相对概率之比为：a^2：b^2：c^2=1：4：1，归一化得概率为：

L_z测值	ħ	0	–ħ
概率=|系数|^2	1/6	4/6=2/3	1/6

所以：$\overline{L}_z=\frac{1}{6}\hbar+\frac{2}{3}\times 0+\frac{1}{6}(-\hbar)=0$

(c) L_z= ħ的概率为 1/6。

(d) 在L^2,L_z表象中，L_x和L_z对应本征值(ħ,0,–ħ)的本征态分别为：

L_x= ħ, 0, –ħ L_z= ħ, 0, –ħ

$$\varphi_1=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\ \sqrt{2}\\ 1\end{pmatrix}\quad \varphi_0=\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}1\\ 0\\ -1\end{pmatrix}\quad \varphi_{-1}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\ -\sqrt{2}\\ 1\end{pmatrix}\qquad Y_{11}=\begin{pmatrix}1\\ 0\\ 0\end{pmatrix}\quad Y_{10}=\begin{pmatrix}0\\ 1\\ 0\end{pmatrix}\quad Y_{1-1}=\begin{pmatrix}0\\ 0\\ 1\end{pmatrix}$$

即：

$$\varphi_1=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\ \sqrt{2}\\ 1\end{pmatrix}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\ 0\\ 0\end{pmatrix}+\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}0\\ 1\\ 0\end{pmatrix}+\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0\\ 0\\ 1\end{pmatrix}=\frac{1}{2}Y_{11}+\frac{\sqrt{2}}{2}Y_{10}+\frac{1}{2}Y_{1-1},$$

$$\varphi_0=\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}1\\ 0\\ -1\end{pmatrix}=\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}1\\ 0\\ 0\end{pmatrix}+-\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}0\\ 0\\ 1\end{pmatrix}=\frac{\sqrt{2}}{2}(Y_{11}-Y_{1-1})$$

$$\varphi_{-1}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\ \sqrt{2}\\ -1\end{pmatrix}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\ 0\\ 0\end{pmatrix}+\frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}0\\ 1\\ 0\end{pmatrix}-\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0\\ 0\\ 1\end{pmatrix}=\frac{1}{2}Y_{11}+\frac{\sqrt{2}}{2}Y_{10}-\frac{1}{2}Y_{1-1}$$

于是：

$$\psi=Are^{-\lambda r}\sqrt{\frac{4\pi}{3}}(\frac{i+21}{\sqrt{2}}\varphi_1-\varphi_0+\frac{i-21}{\sqrt{2}}\varphi_{-1})$$

L_x=(ħ,0,–ħ)的概率之比为：5/2：1：5/2，即L_x=(ħ,0,–ħ)的概率分别为：5/12，1/6，5/12。

5-6 质量为μ的粒子在中心力场$V(r)=-\lambda r^{-3/2}(\lambda>0)$中运动，试用不确定关系估算基态能量。

解：能量平均值为：

$E=\overline{T}+\overline{V}=\frac{1}{2m}\overline{p^2}-\lambda\overline{r^{-3/2}}$，由不确定关系：

$\Delta r\Delta p\sim\overline{rp}\sim\hbar$

$$E=\overline{T}+\overline{V}=\frac{1}{2m}\overline{p^2}-\lambda\overline{r^{-3/2}}\approx\frac{1}{2m}\overline{p}^2-\lambda\overline{r}^{-3/2}\approx\frac{\hbar^2}{2m}\overline{r}^{-2}-\lambda\overline{r}^{-3/2}$$

课后答案网 www.khdaw.com

令：$\frac{\partial E}{\partial \bar{r}}=0$，即：$\bar{r}=\frac{4}{9}(\frac{\hbar^2}{m\lambda})^2$，代入上式，得：

$$E\approx-\frac{27}{32}(\frac{m^3\lambda^4}{\hbar^6})=-0.84\frac{m^3\lambda^4}{\hbar^6}$$

5-9 对氢原子基态 ψ_{100}，计算电子出现在经典禁区的概率。

解：由能量关系：$E=T+V$，动能T=0时,E=V=$-e^2/r$,显然，大于r=$-e^2/E$的区域是经典禁区。对于基态，r=$-e^2/E_1$=$-e^2/(-e^2/2a_0)$=$2a_0$. 电子出现在经典禁区的概率

$$w=\int_{2a_0}^{\infty}\left|R_{10}\right|^2 r^2dr=\int_{2a_0}^{\infty}\frac{4}{a_0^3}e^{-2r/a_0}r^2dr=-\frac{4}{a_0^3}e^{-2r/a_0}(\frac{a_0^3}{4}+\frac{a_0^2r}{2}+\frac{a_0r^2}{2})=13e^{-4}=0.2381$$

5-11 对于氢原子的(n,n-1,m)态，求最概然半径及$\bar{r},\overline{r^2},\Delta r$.

解：u(r)=Rr,径向概率密度为：$w(r)=|R_{nl}|^2r^2=|u_{nl}(r)|^2$
对于氢原子的(n,n-1,m)态, l=n-1, 而 n=n_r+l+1,即 n_r=0。由书上p182 式（19）上面知：a=$-n_r$=0，于是，由书上p181 式（14）知：F=1, 再由书上p180 式（6）知：

$$u_{n,n-1}=Cr^{l+1}Fe^{-\alpha r}=Cr^ne^{-\alpha r}\text{，其中，}\alpha=\frac{1}{na_0}$$

最概然半径条件为（极值条件）：$\frac{du_{n,n-1}}{dr}=C(nr^{n-1}-\alpha r^n)e^{-\alpha r}=0$，解得：

$$r_m=\frac{n}{\alpha}=n^2a_0$$

$$\bar{r}=\int_{-\infty}^{+\infty}\left|R\right|^2r^2rdr=\int_{-\infty}^{+\infty}u_{n,n-1}^2rdr=\int_{-\infty}^{+\infty}\left|C\right|^2r^{2n+1}e^{-2\alpha r}dr=\int_{-\infty}^{+\infty}r^{2n+1}e^{-2\alpha r}dr/\int_{-\infty}^{+\infty}r^{2n}e^{-2\alpha r}dr$$

分子分部积分，得：

$$\int_{-\infty}^{+\infty}r^{2n+1}e^{-2\alpha r}dr=-\frac{1}{2\alpha}r^{2n+1}e^{-2\alpha r}\Big|_{-\infty}^{+\infty}+\frac{2n+1}{2\alpha}\int_{-\infty}^{+\infty}r^{2n}e^{-2\alpha r}dr=\frac{2n+1}{2\alpha}\int_{-\infty}^{+\infty}r^{2n}e^{-2\alpha r}dr$$

于是：$\bar{r}=\frac{2n+1}{2\alpha}=(n^2+\frac{n}{2})a_0$

$$\overline{r^2}=\int_{-\infty}^{+\infty}\left|R\right|^2r^2r^2dr=\int_{-\infty}^{+\infty}u_{n,n-1}^2r^2dr=\int_{-\infty}^{+\infty}r^{2n+2}e^{-2\alpha r}dr/\int_{-\infty}^{+\infty}r^{2n}e^{-2\alpha r}dr$$

分子分部积分两次，得：

$$\int_{-\infty}^{+\infty}r^{2n+2}e^{-2\alpha r}dr=-\frac{1}{2\alpha}r^{2n+2}e^{-2\alpha r}\Big|_{-\infty}^{+\infty}+\frac{2n+2}{2\alpha}\int_{-\infty}^{+\infty}r^{2n+1}e^{-2\alpha r}dr=\frac{2n+2}{2\alpha}\frac{2n+1}{2\alpha}\int_{-\infty}^{+\infty}r^{2n}e^{-2\alpha r}dr$$

于是：$\overline{r^2}=\frac{(2n+1)(2n+2)}{4\alpha^2}=(n+\frac{1}{2})(n+1)n^2a_0$

课后答案网 www.khdaw.com

$$\Delta r=\sqrt{(\overline{r^2}-\bar{r}^2)}=\sqrt{[(n+\frac{1}{2})(n+1)-(n+\frac{1}{2})^2]n^2a_0^2}=na_0\sqrt{\frac{n}{2}+\frac{1}{4}}$$

5-12 原子核突然发生β⁻衰变，电荷突然由Ze变成(Z+1)e.衰变过程中核外的电子波函数不受影响。对于原来处于原子(Z)的K层(1s层，nlm=100)的电子，衰变后仍旧处于原子(Z+1)的K层的概率是多少？

解：原来处于原子(Z)的 K 层的电子波函数为：

$$\psi_{100}(Z,r)=\left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3}\right)^{1/2}e^{-Zr/a_0}\ ,$$

衰变后处于原子(Z+1)的 K 层的电子波函数为：

$$\psi_{100}(Z+1,r)=\left(\frac{(Z+1)^3}{\pi a_0^3}\right)^{1/2}e^{-(Z+1)r/a_0}$$

跃迁概率由$\psi_{100}(Z,r)$按衰变后的态$\psi_{nlm}(Z+1,r)$展开的系数决定。与$\psi_{100}(Z+1,r)$对应的展开系数为：

$$<\psi_{100}(Z+1,r)\,|\,\psi_{100}(Z,r)>=\left(\frac{(Z+1)^3}{\pi a_0^3}\right)^{1/2}\left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3}\right)^{1/2}4\pi\int_0^\infty e^{-(2Z+1)r/a_0}r^2dr$$

$$=\left(\frac{(Z+1)^3}{\pi a_0^3}\right)^{1/2}\left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3}\right)^{1/2}\frac{8\pi a_0^3}{(2Z+1)^3}=\left(\frac{Z^3(Z+1)^3}{(Z+1/2)^6}\right)^{1/2}$$

于是，衰变后仍旧处于原子(Z+1)的 K 层的概率是

$$P=|<\psi_{100}(Z+1,r)\,|\,\psi_{100}(Z,r)>|^2=\frac{Z^3(Z+1)^3}{(Z+1/2)^6}$$

5-13 单价原子的外层电子（价电子）所受原子核及内层电子的平均作用势可以近似表示成：

$$V(r)=-\frac{e^2}{r}-\lambda a_0\frac{e^2}{r^2},\ 0<\lambda<<1$$

试求价电子能级，与氢原子比较，列出主量子数 n 的修正公式。

解：将势函数带入径向方程$[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2}+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}+V(r)]u(r)=Eu(r)$，得：

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2}+\frac{l(l+1)\hbar^2-2m\lambda a_0e^2}{2mr^2}-\frac{e^2}{r}]u(r)=Eu(r)$$

如令：$l'(l'+1)\hbar^2=l(l+1)\hbar^2-2m\lambda a_0e^2$，注意：$a_0=\frac{\hbar^2}{me^2}$，即

课后答案网 www.khdaw.com

$$l'(l'+1)=l(l+1)-2\lambda$$

则方程退化为氢原子问题，价电子能级为：

$$E=-\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}\left(\frac{1}{n'}\right)^2 \qquad n'=l'+n_r+1$$

如令：$l'=l+\Delta$，则：$n'=l'+n_r+1=l+n_r+1+\Delta=n+\Delta$

由于λ<<1，$l'(l'+1)=(l+\Delta)(l+\Delta+1)=l(l+1)+(2l+1)\Delta+\Delta^2=l(l+1)-2\lambda$

忽略二阶小量，得：$\Delta=-\lambda/(l+1/2)$。可见能级与 n 和 l 都有关。

课后答案网 www.khdaw.com

量子力学解答

(钱伯初<量子力学>)

Chap6　定态微扰论与变分法

6-1 某物理体系只有两个能级。在H_0表象中H的矩阵元表示为：

$$H = H_0 + H' = \begin{pmatrix} E_1^{(0)} + a & b \\ b & E_2^{(0)} + a \end{pmatrix}$$

a,b为实数，并且远小于（$E_2^{(0)}$-$E_1^{(0)}$）.试求能级的精确值。再按微扰论公式写出能级（二级近似）。比较两种结果。

解：能级的精确解由久期方程给出：

$$\begin{vmatrix} E_1^{(0)} + a - E & b \\ b & E_2^{(0)} + a - E \end{vmatrix} = 0$$

解得：

$$E = E_{\pm} = \frac{1}{2}(E_2^{(0)} + E_1^{(0)} + 2a \pm \sqrt{(E_2^{(0)} - E_1^{(0)})^2 + 4b^2})$$

为非简并能级，

$$H = H_0 + H' = \begin{pmatrix} E_1^{(0)} & 0 \\ 0 & E_2^{(0)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} a & b \\ b & a \end{pmatrix}, \quad H' = \begin{pmatrix} a & b \\ b & a \end{pmatrix}$$

即：$H'_{11} = H'_{22} = a, H'_{12} = H'_{21} = b$

按微扰公式，$E_1^{(1)} = H'_{11} = a$，$E_2^{(1)} = H'_{22} = a$；

$$E_1^{(2)} = \sum_{k \neq 1} \frac{|H'_{1k}|^2}{E_1^{(0)} - E_k^{(0)}} = \frac{|H'_{12}|^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} = \frac{b^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \quad ,$$

$$E_2^{(2)} = \sum_{k \neq 2} \frac{|H'_{2k}|^2}{E_2^{(0)} - E_k^{(0)}} = \frac{|H'_{21}|^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} = -\frac{b^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}}$$

所以：

$$E_1 = E_1^{(0)} + E_1^{(1)} + E_1^{(2)} = E_1^{(0)} + a + \frac{b^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \quad ,$$

$$E_2 = E_2^{(0)} + E_2^{(1)} + E_2^{(2)} = E_1^{(0)} + a - \frac{b^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}}$$

为了比较，将精确解展开（b<<（$E_2^{(0)}$-$E_1^{(0)}$））：

课后答案网 www.khdaw.com

$$E = E_{\pm} = \frac{1}{2}(E_2^{(0)} + E_1^{(0)} + 2a \pm \sqrt{(E_2^{(0)} - E_1^{(0)})^2 + 4b^2})$$

$$= \frac{1}{2}[E_2^{(0)} + E_1^{(0)} + 2a \pm (E_2^{(0)} - E_1^{(0)})\sqrt{1 + \frac{4b^2}{(E_2^{(0)} - E_1^{(0)})^2}}]$$

$$= \frac{1}{2}[E_2^{(0)} + E_1^{(0)} + 2a \pm (E_2^{(0)} - E_1^{(0)})(1 + \frac{1}{2}\frac{4b^2}{(E_2^{(0)} - E_1^{(0)})^2})]$$

$$= \begin{cases} E_1^{(0)} + a + \dfrac{b^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \\ E_2^{(0)} + a - \dfrac{b^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \end{cases}$$

即精确到b^2时结果完全一样。

6-2 粒子在势阱

$$V(x) = \begin{cases} V_0 x / a, & 0 < x < a \\ \infty, & x \le 0, x \ge a \end{cases}$$

中运动，$V_0 << \dfrac{\hbar^2}{ma^2}$，试用微扰论计算其能谱(一级近似)。

解：以一维无限深势阱作为未微扰的能级（非简并），$H' = V_0 x / a, (0 < x < a)$ 看作微扰。

则零级能量和态函数为：

$$E_n^{(0)} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2, \qquad n = 1,2,3...$$

$$\psi_n^{(0)} = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{2}{a}} \sin(\dfrac{n\pi x}{a}) & 0 < x < a \\ 0, & x \le 0, x \ge a \end{cases}$$

$$E_n^{(1)} = H'_{nn} = \int_0^a \psi_n^{(0)*} V_0 x / a \, \psi_n^{(0)} dx = \frac{2V_0}{a^2} \int_0^a x \sin^2 \frac{n\pi x}{a} dx = \frac{2V_0}{a^2} \int_0^a x \frac{1}{2}(1 - \cos \frac{2n\pi x}{a}) dx$$

$$= \frac{V_0}{a^2}[\frac{1}{2}x^2 - \frac{\cos(2n\pi x / a)}{(2n\pi / a)^2} - \frac{x \sin(2n\pi x / a)}{(2n\pi / a)}]\Big|_0^a = \frac{V_0}{a^2}[\frac{1}{2}a^2 - 0 - 0] = \frac{V_0}{2}$$

所以，$E_n \approx E_n^{(0)} + E_n^{(1)} = \dfrac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 + \dfrac{V_0}{2}, \qquad n = 1,2,3$

6-4 三维自由转子的能量算符为 $H_0 = \dfrac{L^2}{2I}$，I 为转动惯量。试求其能级及简并度。设此转子受到微扰 $H' = \lambda \cos\theta$ 作用，求基态能级的变化（二级近似）。

课后答案网 www.khdaw.com

解：由轨道角动量的本征值方程：$L^2Y_{lm}(\theta,\varphi)=l(l+1)\hbar^2Y_{lm}(\theta,\varphi)$，可得：

$H_0Y_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{L^2}{2I}Y_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{l(l+1)\hbar^2}{2I}Y_{lm}(\theta,\varphi)$，即能级为：$E_l^{(0)}=\frac{l(l+1)\hbar^2}{2I}$。由于能级只与 l 有关， l 确定后 m 可取：$-l,\ldots l$ 共 $2l+1$ 个值，所以简并度为 $2l+1$。

基态 $l=0$，能级为非简并。按非简并微扰公式，注意到基态$|00>=1/\sqrt{4\pi}$，得：

$$E_0^{(1)}=H'_{00}=<00|\lambda\cos\theta|00>=\lambda\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi}\cos\theta\sin\theta d\theta=0$$

为求二级修正，先求矩阵元$H'_{0l}=\lambda<00|\cos\theta|lm>$，利用利用（p341 式（45））：

$\cos\theta|lm>=\sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}|l+1,m>+\sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l-1)(2l+1)}}|l-1,m>$ 及球谐函数的正交性：

$$H'_{0l}=\lambda<00|\cos\theta|lm>$$
$$=\lambda(\sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}<00|l+1,m>+\sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l-1)(2l+1)}}<00|l-1,m>$$
$$=\lambda\sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l-1)(2l+1)}}\delta_{l1}\delta_{m0}$$

于是：

$$E_0^{(2)}=\sum_l\frac{|H'_{0l}|^2}{E_0^{(0)}-E_l^{(0)}}=\sum_l\frac{\lambda^2}{E_0^{(0)}-E_l^{(0)}}\frac{(l+m)(l-m)}{(2l-1)(2l+1)}\delta_{l1}\delta_{m0}$$
$$=\frac{\lambda^2}{E_0^{(0)}-E_1^{(0)}}\frac{1}{3}=\frac{\lambda^2}{0-\hbar^2/I}\frac{1}{3}=-\frac{\lambda^2 I}{3\hbar^2}$$

即为基态能量的变化。

6-5 一维谐振子，受到微扰$H'=\frac{\lambda p}{m}$作用，试按微扰论公式求能谱（准确到λ^2），与精确值（3–30题）比较。

解：零级能量和态函数即谐振子的能量和(正交归一)态函数分别为$E_n^{(0)}=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega$和|n〉。它是非简并的。按微扰论，能量一级修正为：

$$E_n^{(1)}=H'_{nn}=\frac{\lambda}{m}<n|p|n>$$

利用（p154 式(32)） $p|n>=i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\sqrt{n+1}|n+1>-\sqrt{n}|n-1>)$，和态的正交性，得：

课后答案网 www.hdaw.com

$$E_n^{(1)} = H'_{nn} = \frac{\lambda}{m} < n \mid p \mid n > = 0$$

为求能级二级修正，先求矩阵元：

$$H'_{kn} = \frac{\lambda}{m} < k \mid p \mid n > = i\frac{\lambda}{m}\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} < k \mid (\sqrt{n+1} \mid n+1 > -\sqrt{n} \mid n-1 >)$$

$$= i\frac{\lambda}{m}\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\sqrt{n+1}\delta_{k,n+1} - \sqrt{n}\delta_{k,n-1})$$

代入二级修正公式：

$$E_n^{(2)} = \sum_k \frac{|H'_{kn}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} = \frac{\lambda^2\hbar\omega}{2m}\sum_k \frac{1}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}[(n+1)\delta_{k,n+1} + n\delta_{k,n-1} - 2\sqrt{n(n+1)}\delta_{k,n+1}\delta_{k,n-1}]$$

$$= \frac{\lambda^2\hbar\omega}{2m}[\frac{n+1}{E_n^{(0)} - E_{n+1}^{(0)}} + \frac{n}{E_n^{(0)} - E_{n-1}^{(0)}}] = \frac{\lambda^2\hbar\omega}{2m}[\frac{n+1}{-\hbar\omega} + \frac{n}{\hbar\omega}] = -\frac{\lambda^2}{2m}$$

所以：$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega - \frac{\lambda^2}{2m}$

与 3-30 题所得精确值一致。

6-7 在类氢离子（核电荷 Ze）的能谱计算中，通常视原子核为点电荷。这样求出的能谱记成 $E_n^{(0)}$.实际上原子核更接近于电荷均匀分布的小球，核半径 $R = r_0 Z^{1/3}, r_0 = 1.635\times10^{-15} m$.试求这种核电荷分布效应对于离子中电子基态能级的影响（一级微扰修正）。

解：电子受 Coulomb 势为：

$$V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{R}(\frac{3}{2} - \frac{r^2}{2R^2}), & r < R \\ -\frac{Ze^2}{r}, & r > R \end{cases},$$

以 $H' = V(r) - (-\frac{Ze^2}{r}) = \begin{cases} Ze^2(\frac{1}{r} - \frac{3}{2R} + \frac{r^2}{2R^3}), & r < R \\ 0, & r > R \end{cases}$ 作为微扰。非微扰的类氢离子能级和态函数已知。基态为非简并的，态函数为：

$$|100> = (\frac{Z^3}{\pi a^3})^{1/2} e^{-Zr/a_0}$$

于是，能量一级微扰修正为：

$$E_1^{(1)} = H'_{11} = <100 \mid H' \mid 100> = (\frac{Z^3}{\pi a_0^3})Ze^2\int_0^R e^{-2Zr/a_0}(\frac{1}{r} - \frac{3}{2R} + \frac{r^2}{2R^3})4\pi r^2 dr$$

课后答案网 www.khdaw.com

原子核半径$R<<a_0/Z$, $e^{-2Zr/a_0}\approx 1$,于是：

$$E_1^{(1)}\approx(\frac{Z^3}{\pi a_0^3})Ze^2\int_0^R(\frac{1}{r}-\frac{3}{2R}+\frac{r^2}{2R^3})4\pi r^2dr=\frac{4Z^4e^2}{a_0^3}(\frac{1}{2}R^2-\frac{1}{2}R^2+\frac{1}{10}R^2)=\frac{2Z^4e^2R^2}{5a_0^3}$$

注意到$E_1^{(0)}=-\frac{Z^2e^2}{2a_0}$，相对修正量：

$$\frac{E_1^{(1)}}{|E_1^{(0)}|}=\frac{2Z^4e^2R^2}{5a_0^3}\Big/\frac{Z^2e^2}{2a_0}=\frac{4Z^2R^2}{5a_0^2}\sim\frac{Z^2R^2}{a_0^2}\sim 10^{-4}$$

6-10 (a) 粒子在二维无限深方势阱(0<x<a,0<y<a)中运动，写出能级与能量本征函数。

(b) 加上微扰$H'=\lambda xy$，求最低两个能级的一级微扰修正。

解：(a) $H_0\psi(x,y)=(H_x+H_y)\psi=E\psi$，定态 Schrodinger 方程分离变量为：

$$H_x\varphi_{nx}=E_{nx}\varphi_{nx},\qquad E_{nx}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n_x^2,\qquad \varphi_{nx}=\begin{cases}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{n_x\pi x}{a}) & 0<x<a\\ 0, & x\le 0,x\ge a\end{cases}$$

$$H_y\varphi_{ny}=E_{ny}\varphi_{ny},\qquad E_{ny}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n_y^2,\qquad \varphi_{ny}=\begin{cases}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{n_y\pi y}{a}) & 0<y<a\\ 0, & y\le 0,y\ge a\end{cases}$$

$$E=E_{nx}+E_{ny},\ \psi(x,y)=\varphi_{nx}(x)\varphi_{ny}(y),\qquad n_x,n_y=1,2,3...$$

即能级与能量本征函数为：

$$E_{nx,ny}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n_x^2+n_y^2),\qquad n_x,n_y=1,2,3...$$

$$|n_x,n_y>=\psi_{nx,ny}=\begin{cases}\frac{2}{a}\sin(\frac{n_x\pi x}{a})\sin(\frac{n_y\pi y}{a}) & 0<x,y<a\\ 0, & x,y\le 0,x,y\ge a\end{cases}$$

(b) 基态是非简并的：

$$E_{1,1}=\frac{\pi^2\hbar^2}{ma^2},\quad \psi_{1,1}=\begin{cases}\frac{2}{a}\sin(\frac{\pi x}{a})\sin(\frac{\pi y}{a}) & 0<x,y<a\\ 0, & x,y\le 0,x,y\ge a\end{cases}$$

加上微扰$H'=\lambda xy$后能量的一级修正可由非简并微扰公式求得：

$$E_{1,1}^{(1)}=<11|H'|11>=\iint\psi_{1,1}^*\lambda xy\psi_{1,1}dxdy=\lambda\frac{4}{a^2}\int_0^a x\sin^2\frac{\pi x}{a}dx\int_0^a y\sin^2\frac{\pi y}{a}dy=\lambda\frac{a^2}{4}$$

课后答案网 www.khdaw.com

第一激发态是简并的：

$$E_{1,2}=E_{2,1}=\frac{5\pi^2\hbar^2}{2ma^2},\quad |\alpha>=|12>,\quad |\beta>=|2,1>$$

加上微扰 $H'=\lambda xy$ 后能量的能级修正应由简并微扰公式求得。为此，需要先求出该能级简并子空间的微扰矩阵元：

$$H_{\alpha,\alpha}=<12|H'|12>=\iint\psi_{1,2}^{*}\lambda xy\psi_{1,2}dxdy=\lambda\frac{4}{a^2}\int_0^a x\sin^2\frac{\pi x}{a}dx\int_0^a y\sin^2\frac{2\pi y}{a}dy=\lambda\frac{a^2}{4}$$

$$H_{\beta,\beta}=<21|H'|21>=\iint\psi_{2,1}^{*}\lambda xy\psi_{2,1}dxdy=\lambda\frac{4}{a^2}\int_0^a x\sin^2\frac{2\pi x}{a}dx\int_0^a y\sin^2\frac{\pi y}{a}dy=\lambda\frac{a^2}{4}$$

$$H_{\alpha,\beta}=<12|H'|21>=\iint\psi_{1,2}^{*}\lambda xy\psi_{2,1}dxdy=\lambda\frac{4}{a^2}\int_0^a x\sin\frac{\pi x}{a}\sin\frac{2\pi x}{a}dx\int_0^a y\sin\frac{\pi y}{a}\sin\frac{2\pi y}{a}dy$$

$$=\lambda\frac{4}{a^2}\left(\frac{8a^2}{9\pi^2}\right)^2=H_{\beta,\alpha}$$

一级修正由久期方程确定：

$$\begin{vmatrix}H_{\alpha\alpha}-E^{(1)} & H_{\alpha\beta}\\ H_{\beta\alpha} & H_{\beta\beta}-E^{(1)}\end{vmatrix}=0,\ \text{即}\begin{vmatrix}H_{\alpha\alpha}-E^{(1)} & H_{\alpha\beta}\\ H_{\alpha\beta} & H_{\alpha\alpha}-E^{(1)}\end{vmatrix}=0$$

解得：$E^{(1)}=H_{\alpha\alpha}\pm H_{\alpha\beta}=\lambda\frac{a^2}{4}\left(1\pm\frac{1024}{81\pi^4}\right)$

6-11 苯分子的“自由电子模型”认为电子是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。即

(a) 不计及微扰作用时，可以认为电子是在半径为 R 的环上自由运动。写出能量本征值与本征函数，作为零级近似。

(b) 微扰可以表示成 $H'=V(\varphi)=-V_0\cos 6\varphi$,试研究它对各能级的影响（一级修正），特别是要找出发生分裂的能级。

解：(a) 能量算符为 $H_0=\frac{L_z^2}{2I}=-\frac{\hbar^2}{2\mu R^2}\frac{d^2}{d\varphi^2}$，利用$L_z$的本征值方程：

$$L_z\phi_m=m\hbar\phi_m,\ \phi_m=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi},\qquad m=0,\pm1,\pm2,...$$

得：

$$H_0\phi_m(\varphi)=\frac{L_z^2}{2\mu R^2}\phi_m(\varphi)=\frac{m^2\hbar^2}{2\mu R^2}\phi_m(\varphi)$$，即能级为：$E_m^{(0)}=\frac{m^2\hbar^2}{2mR^2}$，$m=0,\pm1,\pm2,...$。

课后答案网 www.khdaw.com

除基态(m=0)外，能级是二重简并的，本征态为：$|\pm m>=|+>,|->$。

(b) 基态非简并，能量一级修正为：

$$E_0^{(1)}=<0|H'|0>=\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}-V_0\cos 6\varphi d\varphi=-\frac{V_0}{2\pi}\frac{\sin 6\varphi}{6}\Big|_0^{2\pi}=0$$

($m\neq 0$)时，能级是二重简并的。先求微扰矩阵元：

$$H'_{11}=<+|H'|+>=\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}-e^{-im\varphi}V_0\cos 6\varphi e^{im\varphi}d\varphi=-\frac{V_0}{2\pi}\frac{\sin 6\varphi}{6}\Big|_0^{2\pi}=0,$$

同理，$H'_{22}=<-|H'|->=\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}-e^{im\varphi}V_0\cos 6\varphi e^{-im\varphi}d\varphi=-\frac{V_0}{2\pi}\frac{\sin 6\varphi}{6}\Big|_0^{2\pi}=0$

$$H'_{12}=<+|H'|->=\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}-e^{-im\varphi}V_0\cos 6\varphi e^{-im\varphi}d\varphi=-\frac{V_0}{4\pi}\int_0^{2\pi}e^{-i2m\varphi}(e^{i6\varphi}+e^{-i6\varphi})d\varphi$$

$$=-\frac{V_0}{4\pi}\int_0^{2\pi}(e^{-i(2m-6)\varphi}+e^{-i(2m+6)\varphi})d\varphi$$

$$=-\frac{V_0}{4\pi}2\pi\delta_{m,\pm 3}=-\frac{V_0}{2}\delta_{m,\pm 3}$$

一级能量修正由久期方程：

$$\begin{vmatrix}H_{11}-E^{(1)} & H_{12}\\ H_{21} & H_{22}-E^{(1)}\end{vmatrix}=0，\text{即}\begin{vmatrix}-E^{(1)} & -\frac{V_0}{2}\delta_{m.\pm 3}\\ -\frac{V_0}{2}\delta_{m.\pm 3} & -E^{(1)}\end{vmatrix}=0$$

可解出：

$$E_m^{(1)}=\pm\frac{V_0}{2}\delta_{m,\pm 3}，\text{即：}\ E_3^{(1)}=\pm\frac{V_0}{2},\quad E_{m\neq 3}^{(1)}=0$$

6-13 某体系的能量算符H_0只有两个本征值$E_1^{(0)}$, $E_2^{(0)}$,前者二重简并，后者不简并。受微扰H'作用后，能量算符的矩阵表示（H_0表象）为：

$$H=H_0+H'=\begin{bmatrix}E_1^{(0)} & 0 & a\\ 0 & E_1^{(0)} & b\\ a & b & E_2^{(0)}\end{bmatrix}$$

试用微扰论求能级（二级近似），再用矩阵方法求能级的精确公式，然后作近似展开（$a,b<<$, $E_2^{(0)}-E_1^{(0)}$）,与微扰论结果比较。

解：由题设能量算符矩阵可得：

$$H_0=\begin{bmatrix}E_1^{(0)} & 0 & 0\\ 0 & E_1^{(0)} & 0\\ 0 & 0 & E_2^{(0)}\end{bmatrix},\quad H'=\begin{bmatrix}0 & 0 & a\\ 0 & 0 & b\\ a & b & 0\end{bmatrix}$$

对简并$E_1^{(0)}$，在简并能态子空间中微扰矩阵元均为 0。解久期方程结果得一级修正$E_1^{(0)}=0$。

可见，一级修正没有解除简并。设该子空间的两个简并态分别为：|11>,|12>,由它们组合而成

课后答案网 www.khdaw.com

的 0 级态函数|1>$^{(0)}$=c|11>+d|12>,系数c，d决定于该子空间的方程组（p200 公式（8））：

$\begin{bmatrix}0 & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}\begin{pmatrix}c\\ d\end{pmatrix}=E_1^{(0)}\begin{pmatrix}c\\ d\end{pmatrix}$确定。代入 $E_1^{(0)}=0$，可知 c，d 并不确定。为了确定它们，需要利用二级项公式（P196 公式（9c））：

$$(H_0-E_1^{(0)})|1>^{(2)}=(E_1^{(0)}-H')|1>^{(1)}+E_1^{(2)}|1>^{(0)} \qquad (*)$$

式中 1 级态函数修正不应该包含该能级的 0 级态函数，即只能由$E_2^{(0)}$能级的本征态|2>构成：$|1>^{(1)}=e|2>$。系数e可通过一级项公式（P196 公式（9b））

$(H_0-E_1^{(0)})|1>^{(1)}=(E_1^{(0)}-H')|1>^{(0)}$左乘<2|得到：

$$左=<2|(H_0-E_1^{(0)})e|2>=e(E_2^{(0)}-E_1^{(0)})$$

$$右=<2|(E_1^{(0)}-H')(c|11>+d|12>)=-c<2|H'|11>-d<2|H'|12>=-ca-db$$

于是：

$$|1>^{(1)}=e|2>=\frac{a}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}c|2>+\frac{b}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}d|2>=\frac{ac+bd}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}|2>$$

代入（*），并以<11|和<12|分别左乘（*），得：

$$0=<11|(E_1^{(0)}-H')|1>^{(1)}+<11|E_1^{(2)}|1>^{(0)}=-\frac{ac+bd}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}<11|H'|2>+E_1^{(2)}c$$

$$=-\frac{a^2c+abd}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}+E_1^{(2)}c$$

$$0=<12|(E_1^{(0)}-H')|1>^{(1)}+<12|E_1^{(2)}|1>^{(0)}=-\frac{ac+bd}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}<12|H'|2>+E_1^{(2)}c$$

$$=-\frac{abc+b^2d}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}+E_1^{(2)}d$$

上面两式关于系数 c，d 的方程，有非 0 解得条件为它们的系数行列式为 0，即由久期方程决定：

$$\begin{vmatrix}-\frac{a^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}+E_1^{(2)} & -\frac{ab}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}\\ -\frac{ab}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}} & -\frac{b^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}+E_1^{(2)}\end{vmatrix}=0$$

解得能级二级修正为：

$$E_1^{(2)}=0,\frac{a^2+b^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}$$

于是，该简并能级精确到二级微扰后，简并解除，能量分别为：

课后答案网 www.khdaw.com

$E_1 = E_1^{(0)}, E_1^{(0)} + \dfrac{a^2+b^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}}$。

可见，通过一级项不能解除简并时，就要到二级（高一级）项的方程解决。

对非简并能级$E_2^{(0)}$，由非简并微扰公式可直接写出其精确到二级微扰得结果：

$$E_2 = E_2^{(0)} + H'_{22} + \frac{|H'_{2,11}|^2 + |H'_{2,12}|^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} = E_2^{(0)} + \frac{a^2+b^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}}$$

本题的精确解由久期方程解出：

$\begin{vmatrix} E_1^{(0)} - E & 0 & a \\ 0 & E_1^{(0)} - E & b \\ a & b & E_2^{(0)} - E \end{vmatrix} = 0$，解得：

$$E = E_1^{(0)}, E_{\pm} = \frac{1}{2}[(E_1^{(0)} + E_2^{(0)}) \pm (E_1^{(0)} - E_2^{(0)})\sqrt{1 + \frac{4(a^2+b^2)}{(E_1^{(0)} - E_2^{(0)})^2}}]$$

因为：（$a,b << E_2^{(0)} - E_1^{(0)}$），作近似展开：

$$E_{\pm} = \frac{1}{2}[(E_1^{(0)} + E_2^{(0)}) \pm (E_1^{(0)} - E_2^{(0)})\sqrt{1 + \frac{4(a^2+b^2)}{(E_1^{(0)} - E_2^{(0)})^2}}]$$

$$\approx \frac{1}{2}[(E_1^{(0)} + E_2^{(0)}) \pm (E_1^{(0)} - E_2^{(0)})(1 + \frac{2(a^2+b^2)}{(E_1^{(0)} - E_2^{(0)})^2})]$$

$$= \frac{1}{2}[(E_1^{(0)} + E_2^{(0)}) \pm (E_1^{(0)} - E_2^{(0)})(1 + \frac{2(a^2+b^2)}{(E_1^{(0)} - E_2^{(0)})^2})]$$

$$= \begin{cases} E_1^{(0)} + \dfrac{(a^2+b^2)}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \\ E_2^{(0)} - \dfrac{(a^2+b^2)}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} = E_2^{(0)} + \dfrac{(a^2+b^2)}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} \end{cases}$$

与微扰结果相同。

6-14 (a)如粒子（质量μ）的波函数（未归一化）为：

$$\psi(\lambda, r) = e^{-\lambda r} \quad 或 \quad e^{-\lambda^2 r^2/2}$$

求动能平均值。

(b)以这两种函数作为三维各向同性谐振子的基态试探函数（λ位变分参数），求基态能级近似值。

解：(a) $\psi(\lambda, r) = e^{-\lambda r}$ 时：

课后答案网 www.khdaw.com

$$\overline{T}=\iiint e^{-\lambda r}[-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}+\frac{L^2}{2mr^2}]e^{-\lambda r}d\tau/\iiint e^{-2\lambda r}d\tau$$

$$=-\frac{2\pi\hbar^2}{\mu}\int_0^\infty e^{-\lambda r}(\frac{d}{dr}r^2\frac{d}{dr}e^{-\lambda r})dr/4\pi\iiint e^{-2\lambda r}r^2dr$$

$$=\frac{\lambda\hbar^2}{2\mu}\int_0^\infty e^{-2\lambda r}(2r-\lambda r^2)dr/\int_0^\infty e^{-2\lambda r}r^2dr$$

，得：

$$=\frac{\lambda\hbar^2}{2\mu}[\int_0^\infty e^{-2\lambda r}2rdr/\int_0^\infty e^{-2\lambda r}r^2dr-\lambda]$$

$$=\frac{\lambda\hbar^2}{2\mu}[(r^2e^{-2\lambda r}\Big|_0^\infty+2\lambda\int_0^\infty e^{-2\lambda r}r^2dr)/\int_0^\infty e^{-2\lambda r}r^2dr-\lambda]$$

$$=\frac{\lambda^2\hbar^2}{2\mu}$$

$\psi(\lambda,r)=e^{-\lambda^2r^2/2}$ 时：

$$\overline{T}=\iiint e^{-\lambda^2r^2/2}[-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}+\frac{L^2}{2mr^2}]e^{-\lambda^2r^2/2}d\tau/\iiint e^{-\lambda^2r^2}d\tau$$

$$=-\frac{2\pi\hbar^2}{\mu}\int_0^\infty e^{-\lambda^2r^2/2}(\frac{d}{dr}r^2\frac{d}{dr}e^{-\lambda^2r^2/2})dr/4\pi\iiint e^{-\lambda^2r^2}r^2dr$$

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

$$=\frac{\lambda^2\hbar^2}{2\mu}[3-\lambda^2\int_0^\infty e^{-\lambda^2r^2}r^4dr/\int_0^\infty e^{-\lambda^2r^2}r^2dr]$$

$$=\frac{\lambda^2\hbar^2}{2\mu}[3+\frac{1}{2}(r^3e^{-\lambda^2r^2}\Big|_0^\infty-3\int_0^\infty e^{-2\lambda r}r^2dr)/\int_0^\infty e^{-\lambda^2r^2}r^2dr]$$

$$=\frac{3\lambda^2\hbar^2}{4\mu}$$

(b) $\psi(\lambda,r)=e^{-\lambda r}$ 时：

$$\overline{V}=\iiint e^{-\lambda r}[\frac{1}{2}\mu\omega^2r^2]e^{-\lambda r}d\tau/\iiint e^{-2\lambda r}d\tau$$

$$=\frac{1}{2}\mu\omega^2\int_0^\infty e^{-2\lambda r}4\pi r^4dr/4\pi\int_0^\infty e^{-2\lambda r}r^2dr$$

$$=\frac{1}{2}\mu\omega^2[(-\frac{1}{2\lambda}r^4-\frac{1}{\lambda^2}r^3)e^{-2\lambda r}\Big|_0^\infty+\frac{3}{\lambda^2}\int_0^\infty e^{-2\lambda r}r^2dr]/\int_0^\infty e^{-2\lambda r}r^2dr$$

$$=\frac{3}{2\lambda^2}\mu\omega^2$$

课后答案网 www.khdaw.com

所以：$\overline{E}=\overline{T}+\overline{V}=\frac{\hbar^2\lambda^2}{2\mu}+\frac{3}{2\lambda^2}\mu\omega^2$

令：$\frac{d\overline{E}}{d\lambda}=\frac{\hbar^2\lambda}{\mu}-\frac{3}{\lambda^3}\mu\omega^2=0$，解得：$\lambda^2=\frac{\sqrt{3}\mu\omega}{\hbar}$，代入上式：

$E_1=\sqrt{3}\hbar\omega$

$\psi(\lambda,r)=e^{-\lambda^2r^2/2}$　　时：

$\overline{T}=\iiint e^{-\lambda^2r^2/2}\frac{\mu}{2}\omega^2r^2e^{-\lambda^2r^2/2}d\tau/\iiint e^{-\lambda^2r^2}d\tau$

$=\frac{\mu}{2}\omega^2\int_0^\infty e^{-\lambda^2r^2}r^4dr/\int_0^\infty e^{-\lambda^2r^2}r^2dr$

$=\frac{\mu}{2}\omega^2[(-\frac{1}{2\lambda^2}r^3e^{-\lambda^2r^2}\Big|_0^\infty+\frac{3}{2\lambda^2}\int_0^\infty e^{-2\lambda r}r^2dr)/\int_0^\infty e^{-\lambda^2r^2}r^2dr]$

$=\frac{3\mu}{4\lambda^2}\omega^2$

所以：$\overline{E}=\overline{T}+\overline{V}=\frac{3\hbar^2\lambda^2}{4\mu}+\frac{3}{4\lambda^2}\mu\omega^2$

令：$\frac{d\overline{E}}{d\lambda}=\frac{3\hbar^2\lambda}{2\mu}-\frac{3}{2\lambda^3}\mu\omega^2=0$，解得：$\lambda^2=\frac{\mu\omega}{\hbar}$，代入上式：

$E_2=\frac{3}{2}\hbar\omega$

6-15 如粒子（质量μ）在势场$V(x)=kx^4(k>0)$中运动，用变分法求基态能级近似值。试探函数波函数（未归一化）取为：

(a) $\psi(\lambda,r)=e^{-\lambda|x|}$ 或　　$e^{-\lambda^2r^2/2}$

(b) $\psi(\lambda,r)=e^{-\lambda^2x^2/2}$.解释(a)结果较差的原因。

解：(a) $\psi(\lambda,r)=e^{-\lambda|x|}$ 时：

$\overline{E}=\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\lambda|x|}[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2}+kx^4]e^{-\lambda|x|}dx/\int_{-\infty}^{\infty}e^{-2\lambda|x|}dx$

$=\int_0^\infty e^{-\lambda x}[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2}+kx^4]e^{-\lambda x}dx/\int_0^\infty e^{-2\lambda x}dx=\frac{\lambda^2\hbar^2}{2\mu}+k\int_0^\infty e^{-2\lambda x}x^4dx/\int_0^\infty e^{-2\lambda x}dx$

$=\frac{\lambda^2\hbar^2}{2\mu}+\frac{3k}{2\lambda^4}$

课后答案网 www.khdaw.com

令：$\frac{d\bar{E}}{d\lambda}=\frac{\hbar^2\lambda}{\mu}-\frac{6}{\lambda^5}k=0$，解得：$\lambda^2=(\frac{6\mu k}{\hbar^2})^{1/3}$，代入上式，得：

$$E_1=\frac{3}{2}(\frac{3k\hbar^4}{4\mu^2})^{1/3}\approx 1.36(\frac{k\hbar^4}{\mu^2})^{1/3}$$

(b) $\psi(\lambda,r)=e^{-\lambda^2x^2/2}$时：

$$\bar{E}=\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\lambda^2x^2/2}[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2}+kx^4]e^{-\lambda^2x^2/2}dx/\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\lambda^2x^2}dx$$

$$=\int_0^{\infty}e^{-\lambda^2x^2}[-\frac{\hbar^2}{2\mu}(-\lambda^2+\lambda^4x^2)+kx^4]dx/\int_0^{\infty}e^{-\lambda^2x^2}dx=\frac{\lambda^2\hbar^2}{2\mu}-\frac{\lambda^2\hbar^2}{4\mu}+\frac{3k}{4\lambda^4}$$

$$=\frac{\lambda^2\hbar^2}{4\mu}+\frac{3k}{4\lambda^4}$$

令：$\frac{d\bar{E}}{d\lambda}=\frac{\hbar^2\lambda}{2\mu}-\frac{3k}{\lambda^5}=0$，解得：$\lambda^2=(\frac{6\mu k}{\hbar^2})^{1/3}$，代入上式：

$$E_2=\frac{3}{8}(\frac{6k\hbar^4}{\mu^2})^{1/3}\approx 0.6814(\frac{k\hbar^4}{\mu^2})^{1/3}$$

(a)结果较差的原因在于试探波函数不够光滑，在 x=0 处真正的波函数及其导数都是连续的。

6-16 粒子在无限深势阱(-*a*<*x*<*a*)中运动，试用多项式近似及其变分法求第一激发能级的近似值，与精确值比较。

解：第一激发能级波函数为奇宇称，取多项式：$\psi(\lambda,x)=N[\frac{x}{a}+\lambda\left(\frac{x}{a}\right)^3-(1+\lambda)\left(\frac{x}{a}\right)^5]$时：

归一化，令：$\int_{-a}^{a}N^2[\frac{x}{a}+\lambda\left(\frac{x}{a}\right)^3-(1+\lambda)\left(\frac{x}{a}\right)^5]^2dx=N^2a\int_{-1}^{1}[y+\lambda y^3-(1+\lambda)y^5]^2dy=1$

得：$N^2a=3465/16(5\lambda^2+32\lambda+60)$

$$\bar{E}=\int_{-a}^{a}N[\frac{x}{a}+\lambda\left(\frac{x}{a}\right)^3-(1+\lambda)\left(\frac{x}{a}\right)^5][-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2}]N[\frac{x}{a}+\lambda\left(\frac{x}{a}\right)^3-(1+\lambda)\left(\frac{x}{a}\right)^5]dx$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2\mu}N^2\int_{-a}^{a}[\frac{x}{a}+\lambda\left(\frac{x}{a}\right)^3-(1+\lambda)\left(\frac{x}{a}\right)^5][\frac{6\lambda}{a^2}\left(\frac{x}{a}\right)-20\frac{(1+\lambda)}{a^2}\left(\frac{x}{a}\right)^3]dx$$

$$=-\frac{\hbar^2}{\mu a}N^2[2\lambda+\frac{1}{5}(6\lambda^2-20(1+\lambda))-\frac{1}{7}26\lambda(1+\lambda)+\frac{1}{9}20(1+\lambda)^2]$$

$$=\frac{\hbar^2}{\mu a^2}\frac{1}{4}\frac{253\lambda^2+1100\lambda+1540}{5\lambda^2+32\lambda+60}$$

课后答案网 www.khdaw.com

令：$\frac{d\overline{E}}{d\lambda}=0$，解得最佳值：$\lambda=-1.5169755$，代入上式，得：

$$E=4.937694\frac{\hbar^2}{ma^2}=1.000586E_2$$

补充题：

设 Hamilton 量的矩阵形式为：$H=\begin{pmatrix}1 & c & 0\\ c & 3 & 0\\ 0 & 0 & c-2\end{pmatrix}$，$c<<1$

（1） 求能量的一级，二级修正；
（2） 求一级近似态函数；
（3） 求能量的精确解。

解：（1）$c<<1$，可取 0 级和微扰 Hamilton 量分别为：

$$H_0=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 3 & 0\\ 0 & 0 & -2\end{pmatrix}\qquad H'=\begin{pmatrix}0 & c & 0\\ c & 0 & 0\\ 0 & 0 & c\end{pmatrix}$$

H_0 是对角矩阵，是H_0在自身表象中的形式。所以能量的 0 级近似为：
$E_1^{(0)}=1$，$E_2^{(0)}=3$， $E_3^{(0)}=-2$，由非简并微扰公式：

$$\begin{cases}E_n^{(1)}=H'_{nn}\\ E_n^{(2)}=\sum\limits_{k\neq n}\dfrac{|H'_{kn}|^2}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}\end{cases}$$

得能量一级修正：

$$\begin{cases}E_1^{(1)}=H'_{11}=0\\ E_2^{(1)}=H'_{22}=0\\ E_3^{(1)}=H'_{33}=c\end{cases}$$

能量二级修正为：

$$E_1^{(2)}=\sum_{k\neq n}\frac{|H'_{k1}|^2}{E_1^{(0)}-E_k^{(0)}}=\frac{|H'_{21}|^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}+\frac{|H'_{31}|^2}{E_1^{(0)}-E_3^{(0)}}=-\tfrac{1}{2}c^2$$

$$E_2^{(2)}=\sum_{k\neq n}\frac{|H'_{k2}|^2}{E_2^{(0)}-E_k^{(0)}}=\frac{|H'_{12}|^2}{E_2^{(0)}-E_1^{(0)}}+\frac{|H'_{32}|^2}{E_2^{(0)}-E_3^{(0)}}=\tfrac{1}{2}c^2$$

$$E_3^{(2)}=\sum_{k\neq n}\frac{|H'_{k3}|^2}{E_3^{(0)}-E_k^{(0)}}=\frac{|H'_{13}|^2}{E_3^{(0)}-E_1^{(0)}}+\frac{|H'_{23}|^2}{E_3^{(0)}-E_2^{(0)}}=0$$

准确到二级近似的能量值为：

课后答案网 www.khdaw.com

$$\begin{cases} E_1 = 1 - \frac{1}{2}c^2 \\ E_2 = 3 + \frac{1}{2}c^2 \\ E_3 = -2 + c \end{cases}$$

（2）对应三个能级的 0 级本征态即为H_0表象的基矢：$\psi_1^{(0)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$，$\psi_2^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$，$\psi_3^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

由微扰论公式立刻可以写出态函数一级修正为：

$$\psi_1^{(1)} = \sum_{k\neq 1} \frac{H'_{k1}}{E_1^{(0)} - E_k^{(0)}}\psi_k^{(0)} = \frac{H'_{21}}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}}\psi_2^{(0)} + \frac{H'_{31}}{E_1^{(0)} - E_3^{(0)}}\psi_3^{(0)} = -\frac{1}{2}c\psi_2^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ -c/2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\psi_2^{(1)} = \sum_{k\neq 2} \frac{H'_{k2}}{E_2^{(0)} - E_k^{(0)}}\psi_k^{(0)} = \frac{H'_{21}}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}}\psi_1^{(0)} + \frac{H'_{32}}{E_2^{(0)} - E_3^{(0)}}\psi_3^{(0)} = \frac{1}{2}c\psi_1^{(0)} = \begin{pmatrix} c/2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\psi_3^{(1)} = \sum_{k\neq 3} \frac{H'_{k3}}{E_3^{(0)} - E_k^{(0)}}\psi_k^{(0)} = \frac{H'_{13}}{E_3^{(0)} - E_1^{(0)}}\psi_1^{(0)} + \frac{H'_{23}}{E_3^{(0)} - E_2^{(0)}}\psi_2^{(0)} = 0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

于是，一级修正后态函数为：

$$\psi_1 = \psi_1^{(0)} + \psi_1^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ -c/2 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\psi_2 = \psi_2^{(0)} + \psi_2^{(1)} = \begin{pmatrix} c/2 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\psi_3 = \psi_3^{(0)} + \psi_3^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

（3）能量的精确值由久期方程：

$$\begin{vmatrix} 1-E & c & 0 \\ c & 3-E & 0 \\ 0 & 0 & c-2-E \end{vmatrix} = 0$$，解得：$E_1 = 2 - \sqrt{1+c^2}$，$E_2 = 2 + \sqrt{1+c^2}$，$E_3 = -2 + c$

由于 $c<<1$，展开可得：

课后答案网 www.khdaw.com

$$\begin{cases} E_1 = 2-\sqrt{1+c^2} = 1-\frac{1}{2}c^2+\frac{1}{8}c^4+\cdots \\ E_2 = 2+\sqrt{1+c^2} = 3+\frac{1}{2}c^2-\frac{1}{8}c^4+\cdots \\ E_3 = -2+c \end{cases}$$

可见，忽略 4 次幂及高阶小量，结果与二级微扰相同。

课后答案网 www.khdaw.com

量子力学解答

(钱伯初<量子力学>)

Chap7　自旋

7-2 在S_z表象中，求σ_x的本征函数及σ_y的本征函数。

解：在S_z表象中，$\sigma_x=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$，$\sigma_y=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}$

因为：$\sigma_x^2=\sigma_y^2=1$，可知它们的本征值为：$\sigma_x=\sigma_y=\pm1$。设本征函数为：$\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$，将本征值分别代入本征值方程，得：

$\sigma_x=1$ 时：$\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$，解出：$a=b$，即 $\varphi_+=a\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$，

归一化：$\varphi_+^+\varphi_+=|a|^2(1,1)\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}=2|a|^2=1$，得：$a=\frac{1}{\sqrt{2}}$，于是：$\varphi_+=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$；

同理，$\sigma_x=-1$ 时：$\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=-\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$，解出：$a=-b$，即 $\varphi_-=a\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$，

归一化，得：$\varphi_-=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$

$\sigma_y=1$ 时：$\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$，解出：$ia=b$，即 $\phi_+=a\begin{pmatrix}1\\i\end{pmatrix}$，

归一化，得：$\phi_+=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\i\end{pmatrix}$

$\sigma_y=-1$ 时：$\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=-\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$，解出：$-ia=b$，即 $\phi_-=a\begin{pmatrix}1\\-i\end{pmatrix}$，

归一化，得：$\phi_-=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-i\end{pmatrix}$

7-5 证明$(\sigma_x+i\sigma_y)^2=0$，$(\sigma_x-i\sigma_y)^2=0$。用$(\sigma_x\pm i\sigma_y)$的矩阵表示（S_z表象）验证这

课后答案网 www.khdaw.com

两个公式。

证：$(\sigma_x \pm i\sigma_y)^2 = \sigma_x^2 - \sigma_y^2 \pm i(\sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x)$

利用σ_x^2= σ_y^2=1 和反对易关系$(\sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x) = 0$，即得：

$(\sigma_x + i\sigma_y)^2 = 0$，$(\sigma_x - i\sigma_y)^2 = 0$。

在S_z表象中，$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$，$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$，于是：$\sigma_x + i\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$，

$(\sigma_x + i\sigma_y)^2 = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = 0$；

同理：$\sigma_x - i\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}$，$(\sigma_x - i\sigma_y)^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} = 0$

7-7 证明公式$e^{i\lambda\sigma_z} = \cos\lambda + i\sigma_z \sin\lambda$.（$\lambda$为实参量，$\sigma_x$为泡利算符）并在$S_z$表象中证明

$e^{i\lambda\sigma_z} = \begin{pmatrix} e^{i\lambda} & 0 \\ 0 & e^{-i\lambda} \end{pmatrix}$。

证 1：由泰勒展开

$$e^{i\lambda\sigma_z} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(i\lambda\sigma_z)^n = \sum_{n偶}\frac{1}{n!}\lambda^n\sigma_z^n + i\sigma_z\sum_{n奇}\frac{1}{n!}\lambda^n\sigma_z^{n-1}$$ ）

由于 σ_z^2=1，n 为偶数时σ_z^n=1

$$e^{i\lambda\sigma_z} = \sum_{n偶}^{\infty}\frac{1}{n!}\lambda^n + i\sigma_z\sum_{n奇}\frac{1}{n!}\lambda^n = \cos\lambda + i\sigma_z\sin\lambda$$

证 2：设$y(\lambda) = e^{i\sigma_z\lambda}$,则$\frac{dy}{d\lambda} = i\sigma_z e^{i\sigma_z\lambda}$，注意到$\sigma_z^2 = 1$，有$\frac{d^2y}{d\lambda^2} = -\sigma_z^2 e^{i\sigma_z\lambda} = -y$，方程的解为：$y(\lambda) = A\cos\lambda + B\sin\kappa$，带入$y(0) = 1$和$\left.\frac{dy}{d\lambda}\right|_{\lambda=0} = i\sigma_z$，得 A=1，$B = i\sigma_z$,于是，$e^{i\lambda\sigma_z} = \cos\lambda + i\sigma_z\sin\lambda$ //

以上证明只用到σ_z^2=1，由于σ_x^2= σ_y^2=1，所以，将σ_z换作σ_x、σ_y以上关系也成立。

课后答案网 www.khdaw.com

在S_z表象中证明，$\sigma_z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$，所以：

$$e^{i\lambda\sigma_z}=\cos\lambda+i\sigma_z\sin\lambda=\begin{pmatrix}\cos\lambda&0\\0&\cos\lambda\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}i\sin\lambda&0\\0&-i\sin\lambda\end{pmatrix}$$
$$=\begin{pmatrix}\cos\lambda+i\sin\lambda&0\\0&\cos\lambda-i\sin\lambda\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}e^{i\lambda}&0\\0&e^{-i\lambda}\end{pmatrix}$$

7-12 证明：$e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_x e^{-i\lambda\sigma_z}=\sigma_x\cos 2\lambda-\sigma_y\sin 2\lambda$

$$e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_y e^{-i\lambda\sigma_z}=\sigma_y\cos 2\lambda+\sigma_x\sin 2\lambda$$

证：法 1：利用上题结论：$e^{i\lambda\sigma_z}=\cos\lambda+i\sigma_z\sin\lambda$，于是：

$$e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_x e^{-i\lambda\sigma_z}=(\cos\lambda+i\sigma_z\sin\lambda)\sigma_x(\cos\lambda-i\sigma_z\sin\lambda)$$
$$=\sigma_x\cos^2\lambda+i\sigma_z\sigma_x\sin\lambda\cos\lambda-i\sigma_x\sigma_z\sin\lambda\cos\lambda+\sigma_z\sigma_x\sigma_z\sin^2\lambda$$

利用对易关系得：$\sigma_z\sigma_x\sigma_z=-\sigma_z\sigma_z\sigma_x=-\sigma_x,[\sigma_z,\sigma_x]=2i\sigma_y$，

整理并利用三角函数关系：$\cos 2\lambda=\cos^2\lambda-\sin^2\lambda,\sin 2\lambda=2\sin\lambda\cos\lambda$，得：

$$e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_x e^{-i\lambda\sigma_z}=\sigma_x\cos^2\lambda+i[\sigma_z,\sigma_x]\sin\lambda\cos\lambda-\sigma_x\sin^2\lambda$$
$$=\sigma_x(\cos^2\lambda-\sin^2\lambda)+i(2i\sigma_y)\sin\lambda\cos\lambda$$
$$=\sigma_x\cos 2\lambda-\sigma_y\sin 2\lambda$$

同理：

$$e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_y e^{-i\lambda\sigma_z}=\sigma_y\cos^2\lambda+i[\sigma_z,\sigma_y]\sin\lambda\cos\lambda-\sigma_y\sin^2\lambda$$
$$=\sigma_y(\cos^2\lambda-\sin^2\lambda)+i(-2i\sigma_x)\sin\lambda\cos\lambda$$
$$=\sigma_y\cos 2\lambda+\sigma_x\sin 2\lambda$$

法 2：设 $f(\lambda)=e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_x e^{-i\lambda\sigma_z}$，则$f(0)=\sigma_x$对参数$\lambda$求导,得：

$$f'(\lambda)=\frac{df(\lambda)}{d\lambda}=ie^{i\lambda\sigma_z}[\sigma_z,\sigma_x]e^{-i\lambda\sigma_z}=-e^{i\lambda\sigma_z}2\sigma_y e^{-i\lambda\sigma_z},\text{则}f'(0)=-2\sigma_y$$

$$\frac{d^2f(\lambda)}{d\lambda^2}=-ie^{i\lambda\sigma_z}2[\sigma_z,\sigma_y]e^{-i\lambda\sigma_z}=-i2(-i2)e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_x e^{-i\lambda\sigma_z}=-4f(\lambda)$$

所以：$f(\lambda)=A\cos 2\lambda+B\sin 2\lambda$，$f'(\lambda)=-2A\sin 2\lambda+2B\cos 2\lambda$,代入

$f(0)=\sigma_x,f'(0)=-2\sigma_y$，得：$A=\sigma_x,B=-\sigma_y$

即：$e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_x e^{-i\lambda\sigma_z}=\sigma_x\cos 2\lambda-\sigma_y\sin 2\lambda$，

课后答案网 www.khdaw.com

$$e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_y e^{-i\lambda\sigma_z} = -f'(\lambda)/2 = A\sin 2\lambda - B\cos 2\lambda = \sigma_x \sin 2\lambda + \sigma_y \cos 2\lambda$$

7-16 电子的总磁矩算符是

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_L + \vec{\mu}_s = -\frac{e}{2m_e c}(\vec{L} + 2\vec{S})\,,$$

试对于ψ_{ljj}态(m_j=j)计算μ_z平均值（结果用量子数j表示）。

解：$\mu_z = -\frac{e}{2m_e c}(L_z + 2S_z) = -\frac{e}{2m_e c}(J_z + S_z)$，其中总角动量$J_z = L_z + S_z$。

μ_z在ψ_{ljj}态(m_j=j)中的平均值为：

$$\overline{\mu_z} = -\frac{e}{2m_e c}(<ljj|J_z|ljj> + <ljj|S_z|ljj>) = -\frac{e}{2m_e c}(j\hbar + \frac{\hbar}{2} <ljj|\sigma_z|ljj>)$$

利用$<ljm_j|\sigma_z|ljm_j> = \begin{cases} m_j/j, & j = l + 1/2 \\ -m_j/(j+1), & j = l - 1/2 \end{cases}$，注意$m_j$=$j$，得：

$$\overline{\mu_z} = -\frac{e\hbar}{2m_e c}\begin{cases} j + 1/2, & j = l + 1/2 \\ j - j/(2j+2) & j = l - 1/2 \end{cases}$$

7-17 某电子态波函数为$\Psi(r,\theta,\varphi,S_z) = R(r)Y_{l0}(\theta,\varphi)\chi_{1/2}(S_z)$。这是否是$J^2$或$J_z$本征函数？试计算<$J^2$>，从而求出$J^2$的可能测值及相应概率。

解：态$\Psi(r,\theta,\varphi,S_z) = R(r)Y_{l0}(\theta,\varphi)\chi_{1/2}(S_z)$是轨道角动量和自旋角动量的非耦合（直乘）表象中的表示，所以是(L^2,S^2,L_z,S_z)的本征态，L_z和S_z 的本征值分别为 0 和ħ/2。由于J_z=L_z+S_z，它也是J_z的属于J_z=ħ/2 的本征态。但不是J^2的本征态。事实上，$[J^2, L_z] \neq 0, [J^2, S_z] \neq 0$，$J^2$与$L_z$,$S_z$没有共同的本征态（$J_z$与 ($L^2$,$S^2$,$L_z$,$S_z$)对易，可以有共同本征态）。$J^2$的本征态是$L$与$S_z$的耦合表象的表示$|jM\rangle$。

将态用 Dirac 符号写出：$\Psi(r,\theta,\varphi,S_z) = R(r)Y_{l0}(\theta,\varphi)\chi_{1/2}(S_z) = |R> |l0, \frac{1}{2}\frac{1}{2}>$

$$<J^2> = <l0, \frac{1}{2}\frac{1}{2}|J^2|l0, \frac{1}{2}\frac{1}{2}> = <l0, \frac{1}{2}\frac{1}{2}|L^2 + S^2 + \hbar\vec{\sigma}\cdot\vec{L}|l0, \frac{1}{2}\frac{1}{2}>$$
$$= l(l+1)\hbar^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + \hbar <l0, \frac{1}{2}\frac{1}{2}|\sigma_x L_x + \sigma_y L_y + \sigma_z L_z|l0, \frac{1}{2}\frac{1}{2}>$$
$$= l(l+1)\hbar^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + \hbar(\overline{\sigma}_x \overline{L}_x + \overline{\sigma}_y \overline{L}_y + \overline{\sigma}_z \overline{L}_z)$$

在|l0>态中，$\overline{L}_x = \overline{L}_y = 0, \overline{L}_z = 0$，故

课后答案网 www.khdaw.com

$$< J^2 >= l(l+1)\hbar^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 \qquad (*)$$

另一方面，J^2的本征值为：$j(j+1)\hbar^2$，j只可取两个值：$j=l+1/2, j=l-1/2$。设在该态中$j=l+1/2$的概率为w，则取$j=l-1/2$ 的概率为（$1-w$），于是：

$$< J^2 >= (l+\frac{1}{2})(l+\frac{3}{2})\hbar^2 w + (l-\frac{1}{2})(l+\frac{1}{2})\hbar^2(1-w) = [(l^2-\frac{1}{4})+(2l+1)w]\hbar^2$$

与（*）式联立，解得：$w = \frac{l+1}{2l+1}$。即J^2的可能测值及相应概率分别为：

$$(l+\frac{1}{2})(l+\frac{3}{2})\hbar^2, \qquad w = \frac{l+1}{2l+1}$$

$$(l-\frac{1}{2})(l+\frac{1}{2})\hbar^2, \qquad (1-w) = \frac{l}{2l+1}$$

法 2：也可将该非耦合（直乘）表象的态按J^2的本征态$|jM\rangle$（耦合表象）展开。注意，$J_z=\hbar/2$，即$M=1/2$,而j只可取两个值：$j=l+1/2, j=l-1/2$，故$|jM\rangle$ 有两个。于是：

$$\Psi(r,\theta,\varphi,S_z) = R(r)Y_{l0}(\theta,\varphi)\chi_{1/2}(S_z) = |R>|l0,\frac{1}{2}\frac{1}{2}>=|R>\sum_{jM}|jM><jM|l0,\frac{1}{2}\frac{1}{2}>$$

$$=|R>(<l+\frac{1}{2},\frac{1}{2}|l0,\frac{1}{2}\frac{1}{2}>|l+\frac{1}{2},\frac{1}{2}>+<l-\frac{1}{2},\frac{1}{2}|l0,\frac{1}{2}\frac{1}{2}>|l-\frac{1}{2},\frac{1}{2}>)$$

式中内积就是C.G系数的复共轭。查表（书上p240 表 7-1 第 1 列，$j_1=l$），得：

$$<l+\frac{1}{2},\frac{1}{2}|l0,\frac{1}{2}\frac{1}{2}>=\sqrt{\frac{l+1}{2l+1}}, <l-\frac{1}{2},\frac{1}{2}|l0,\frac{1}{2}\frac{1}{2}>=-\sqrt{\frac{l}{2l+1}}$$

即：$\Psi(r,\theta,\varphi,S_z) = |R>(\sqrt{\frac{l+1}{2l+1}}|l+\frac{1}{2},\frac{1}{2}>-\sqrt{\frac{l}{2l+1}}|l-\frac{1}{2},\frac{1}{2}>)$

于是，J^2的本征态、可能测值及相应概率分别为：

$$|l+\frac{1}{2},\frac{1}{2}>, \qquad (l+\frac{1}{2})(l+\frac{3}{2})\hbar^2, \qquad |C_+|^2 = \frac{l+1}{2l+1}$$

$$|l-\frac{1}{2},\frac{1}{2}>, \qquad (l-\frac{1}{2})(l+\frac{1}{2})\hbar^2, \qquad |C_-|^2 = \frac{l}{2l+1}$$

$$< J^2 >= (l+\frac{1}{2})(l+\frac{3}{2})\hbar^2\frac{l+1}{2l+1} + (l-\frac{1}{2})(l+\frac{1}{2})\hbar^2\frac{l}{2l+1} = l(l+1)\hbar^2 + \frac{3}{4}\hbar^2$$

7-18　自旋为 0 的带电粒子在均匀磁场中运动，Hamilton 算符为

$$H = \frac{m\hat{v}^2}{2} = \frac{1}{2m}(\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A})^2,$$

设磁场沿 z 轴方向，矢势取为：$\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B}\times\vec{r}$，即：

课后答案网 www.khdaw.com

$$A_x=-\frac{By}{2},\qquad A_y=\frac{Bx}{2},\qquad A_z=0$$

(a) 计算 v_x, v_y, v_z之间的对易式

(b) 设粒子电荷 $q>0$.证明 H 可以表示成：

$$H=\frac{\hbar qB}{mc2}(\hat{Q}^2+\hat{P}^2)+\frac{1}{2m}\hat{p}_2$$

确定$\hat{Q},\hat{P}$，证明$QP-PQ=i$。

(c) 利用谐振子的结果，确定本题的能谱。

解：(a)

$$[v_x,v_y]=\frac{1}{m^2}[p_x-\frac{q}{c}A_x,p_y-\frac{q}{c}A_y]=\frac{1}{m^2}[p_x+\frac{qBy}{2c},p_y-\frac{qBx}{2c}]$$

$$=\frac{1}{m^2}(-[p_x,\frac{qBx}{2c}]+[\frac{qBy}{2c},p_y])=i\frac{\hbar qB}{m^2c}$$

类似：$[v_x,v_z]=\frac{1}{m^2}[p_x-\frac{q}{c}A_x,p_z-\frac{q}{c}A_z]=\frac{1}{m^2}[p_x+\frac{qBy}{2c},p_z]=0$

$$[v_y,v_z]=\frac{1}{m^2}[p_y-\frac{q}{c}A_y,p_z-\frac{q}{c}A_z]=\frac{1}{m^2}[p_y-\frac{qBx}{2c},p_z]=0$$

(b) $H=\frac{m\hat{v}^2}{2}=\frac{m}{2}[v_x^2+v_y^2]+\frac{1}{2m}p_z^2$

令：$Q=m\sqrt{\frac{c}{q\hbar B}}v_x,P=m\sqrt{\frac{c}{q\hbar B}}v_y$，则：$H=\frac{\hbar qB}{2mc}[Q^2+P^2]+\frac{1}{2m}p_z^2$

$$[Q,P]=[m\sqrt{\frac{c}{q\hbar B}}v_x,m\sqrt{\frac{c}{q\hbar B}}v_y]=\frac{m^2c}{q\hbar B}[v_x,v_y]=i$$

7-20 有一个定域电子（不考虑“轨道”运动），受到沿正x方向的均匀磁场作用，此作用势：$H=\frac{eB}{mc}S_x=\frac{e\hbar B}{2mc}\sigma_x$，设$t$=0 时电子的自旋状态为$\sigma_z$=1 的本征态，即 $\chi_{1/2}=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$。求任意$t>0$ 时自旋波函数 $\chi(t)=\begin{pmatrix}a(t)\\b(t)\end{pmatrix}$，并求 $\overline{S}_x(t),\overline{S}_y(t),\overline{S}_z(t)$。

解：法 1：$H=\frac{eB}{mc}S_x=\frac{e\hbar B}{2mc}\sigma_x$，其本征值为（代入$\sigma_x=\pm1$）：$E_\pm=\pm\frac{e\hbar B}{2mc}=\pm\hbar\omega$，$\omega=\frac{e\hbar B}{2mc}$。对应本征态即$\sigma_x$的本征态，分别为：

$$\varphi_+=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix},\quad \varphi_-=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$$

课后答案网 www.khdaw.com

t=0 时电子的自旋状态为σ_z=1 的本征态，即 $\chi_{1/2}=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$，由叠加原理知处于能量本征态 φ_+,φ_- 的叠加态上： $\chi(0)=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=a\varphi_++b\varphi_-$， 叠加系数为：

$$a=\varphi_+^+\chi(0)=\frac{1}{\sqrt{2}}(1,1)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}},b=\varphi_-^+\chi(0)=\frac{1}{\sqrt{2}}(1,-1)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}$$ ， 即：

$$\chi(0)=\frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_++\varphi_-)$$。根据叠加原理，求任意 t>0 时自旋波函数满足同样的叠加关系：

$$\chi(t)=\frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_+e^{-iE_+t/\hbar}+\varphi_-e^{-iE_-t/\hbar})=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}e^{-i\omega t}+\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}e^{i\omega t}=\begin{pmatrix}\cos\omega t\\-i\sin\omega t\end{pmatrix}$$

法 2：设 $\chi(t)=\begin{pmatrix}a(t)\\b(t)\end{pmatrix}$， 由 Schrodinger 方程： $i\hbar\frac{d}{dt}\chi(t)=H\chi(t)$， 即：

$$i\hbar\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}a(t)\\b(t)\end{pmatrix}=H\begin{pmatrix}a(t)\\b(t)\end{pmatrix}=\hbar\omega\sigma_x\begin{pmatrix}a(t)\\b(t)\end{pmatrix}=\hbar\omega\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a(t)\\b(t)\end{pmatrix}=\hbar\omega\begin{pmatrix}b(t)\\a(t)\end{pmatrix},$$

即： $\frac{da}{dt}=-i\omega b$， $\frac{db}{dt}=-i\omega a$

于是： $\frac{d^2a}{dt^2}=-i\omega\frac{db}{dt}=-\omega^2a$， 解得： $a(t)=A\cos\omega t+B\sin\omega t$

$$b=\frac{i}{\omega}\frac{da}{dt}=-iA\sin\omega t+iB\cos\omega t$$

代入初始条件： $\chi(0)=\begin{pmatrix}a(0)\\b(0)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$， 可得：A=1，B=0

即： $\chi(t)=\begin{pmatrix}a(t)\\b(t)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\omega t\\-i\sin\omega t\end{pmatrix}$

$$\bar{S}_x(t)=\chi^+(t)\frac{\hbar}{2}\sigma_x\chi(t)=\frac{\hbar}{2}(\cos\omega t,\sin\omega t)\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\omega t\\-i\sin\omega t\end{pmatrix}=0$$

$$\bar{S}_y(t)=\chi^+(t)\frac{\hbar}{2}\sigma_y\chi(t)=\frac{\hbar}{2}(\cos\omega t,\sin\omega t)\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\omega t\\-i\sin\omega t\end{pmatrix}=-\frac{\hbar}{2}\sin 2\omega t$$

$$\bar{S}_z(t)=\chi^+(t)\frac{\hbar}{2}\sigma_z\chi(t)=\frac{\hbar}{2}(\cos\omega t,\sin\omega t)\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\omega t\\-i\sin\omega t\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}\cos 2\omega t$$

课后答案网 www.khdaw.com

7-22 对于氢原子，求自旋轨道耦合作用引起的能级分裂 ΔE_{nl}。

解：自旋轨道耦合作用 $H'=\dfrac{e^2}{2m^2c^2}\dfrac{1}{r^3}\vec{S}\cdot\vec{L}$ 作为微扰，除基态外能级简并。选取耦合表象波函数 $\Psi^{(0)}_{nljm_j}=R^{(0)}_{nl}(r)\psi_{ljm_j}(\theta,\varphi,S_z)$ 作为 0 级近似，微扰矩阵元是对角的，即为正确的零级波函数。于是能量 1 级修正为：

$$E^{(1)}_{nlj}=<H'>=\frac{e^2}{2m^2c^2}<\frac{1}{r^3}><ljm_j|\vec{S}\cdot\vec{L}|ljm_j>$$

$\psi_{ljm_j}(\theta,\varphi,S_z)=|ljm_j>$ 为 $\vec{S}\cdot\vec{L}$ 的本征态，

$$<ljm_j|\vec{S}\cdot\vec{L}|ljm_j>=\begin{cases}l\hbar^2/2, & j=l+1/2\\ -(l+1)\hbar^2/2, & j=l-1/2\end{cases}$$

$<\dfrac{1}{r^3}>=\int_0^\infty\dfrac{1}{r}|R^{(0)}_{nl}(r)|^2\,dr$，利用 5-15 结果：$<\dfrac{1}{r^3}>=\dfrac{1}{n^3l(l+1/2)(l+1)a_0^3}$

于是，能级分裂：

$$\Delta E=E^{(1)}_{nll+1/2}-E^{(1)}_{nll+1/2}=\frac{e^2}{2m^2c^2}\frac{1}{n^3l(l+1/2)(l+1)a_0^3}(l+\frac{1}{2})\hbar^2$$

$$=\frac{e^2}{a_0}\frac{1}{2n^3l(l+1)}(\frac{e^2}{\hbar c})^2\qquad(l\neq0)$$

s 态（包括基态）时，l=0，$<ljm_j|\vec{S}\cdot\vec{L}|ljm_j>=0$，没有能级分裂。

7-23 设氢原子处于S态（l=0），考虑电子与质子的自旋角动量，$\boldsymbol{S}_1$与$\boldsymbol{S}_2$。设电子自旋态为α，质子自旋态为β，即总自旋态为$\alpha(1)\beta(2)$。求总自旋平方$\boldsymbol{S}^2=(\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2)^2$的可能取值及相应概率。

解：在非耦合（直乘）表象中总自旋态为$\alpha(1)\beta(2)$，它不是$\boldsymbol{S}^2$的本征态。$\boldsymbol{S}^2$的本征态是总自旋态在耦合表象中的表示$|SM\rangle$。

法 1：将$\alpha(1)\beta(2)$按J^2的本征态$|SM\rangle$（耦合表象）展开。注意，

$S_z\alpha(1)\beta(2)=S_{1z}\alpha(1)S_{2z}\beta(2)=(1/2-1/2)\alpha(1)\beta(2)=0$，

即 M=0，而 j 只可取两个值：$j=s+1/2=1$，$j=s-1/2=0$，故$|jM\rangle$ 有两个。于是：

$$\alpha(1)\beta(2)=|\frac{1}{2}\frac{1}{2},\frac{1}{2}-\frac{1}{2}>=\sum_{jM}|jM><jM|\frac{1}{2}\frac{1}{2},\frac{1}{2}-\frac{1}{2}>$$

$$=<1,0|\frac{1}{2}\frac{1}{2},\frac{1}{2}-\frac{1}{2}>|1,0>+<0,0|\frac{1}{2}\frac{1}{2},\frac{1}{2}-\frac{1}{2}>|0,0>$$

式中内积就是C.G系数的复共轭。查表（书上p240 表 7-1 第 2 列，M=0，$j_1=s$=1/2），得：

$$<1,0|\frac{1}{2}\frac{1}{2},\frac{1}{2}-\frac{1}{2}>=\sqrt{\frac{1}{2}},\qquad<0,0|\frac{1}{2}\frac{1}{2},\frac{1}{2}-\frac{1}{2}>=\sqrt{\frac{1}{2}}$$

课后答案网 www.khdaw.com

即：$\alpha(1)\beta(2)=\frac{1}{\sqrt{2}}|1,0>+\frac{1}{\sqrt{2}}|0,0>$

于是，S^2的本征态、可能测值及相应概率分别为：

$|1,0>,\ \ j(j+1)\hbar^2=2\hbar^2,\qquad |C_1|^2=\frac{1}{2}$

$|0,0>,\ \ j(j+1)\hbar^2=0,\qquad |C_0|^2=\frac{1}{2}$

$<S^2>=\frac{1}{2}2\hbar^2+\frac{1}{2}0=\hbar^2$

法 2：先求<$\boldsymbol{S}^2$>.

$<S^2>=<\alpha(1)\beta(2)|S^2|\alpha(1)\beta(2)>=<\alpha(1)\beta(2)|S_1{}^2+S_2{}^2+2\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2|\alpha(1)\beta(2)>$

$=2\frac{3}{4}\hbar^2+\frac{\hbar^2}{2}<\alpha(1)\beta(2)|\sigma_{1x}\sigma_{2x}+\sigma_{1y}\sigma_{2y}+\sigma_{1z}\sigma_{1z}|\alpha(1)\beta(2)>$

$=\frac{3}{2}\hbar^2+\frac{\hbar^2}{2}<\alpha(1)\beta(2)|(\beta(1)\alpha(2)>+|\beta(1)\alpha(2)>+|\alpha(1)\beta(2)>)$

$=\frac{3}{2}\hbar^2+\frac{\hbar^2}{2}(0+0-1)=\hbar^2$

第三步利用了书上 p215 公式（17）。

另一方面，S^2的本征值为：$j(j+1)\hbar^2$，j只可取两个值：j=1, j=0。设在该态中j= 1 的概率为P，则取j=0 的概率为（1–P），于是：

$<S^2>=2\hbar^2P+0(1-P)=2P\hbar^2=\hbar^2$

解得：P=1/2。即S^2的可能测值及相应概率分别为：

$2\hbar^2,\quad P=1/2$

$0,\quad (1-P)=1/2$

*补充题

同上题，如电子处于$S_{1z}=\frac{1}{2}\hbar$的状态（即$\chi_{1/2}$）,质子处于$S_{2z}=\frac{1}{2}\hbar$的状态，求总自旋平方$\boldsymbol{S}^2$及总S_z=S_{1z}+S_{2z}的可能测值及相应概率。

解：系统的总自旋态$\alpha(1)\alpha(2)$为非耦合（直乘）表象中的表示，它同时也是总自旋态在耦合表象中“最大的”那个态$|SM\rangle$ =$|SS\rangle$ =$|11\rangle$ =$\alpha(1)\alpha(2)$，即是$\boldsymbol{S}^2$和S_z的本征态：

$S_z\alpha(1)\alpha(2)=S_{1z}\alpha(1)S_{2z}\alpha(2)=(1/2+1/2)\hbar\alpha(1)\alpha(2)=\hbar\alpha(1)\alpha(2)$

$\boldsymbol{S}^2\alpha(1)\alpha(2)=\boldsymbol{S}^2|11\rangle=S(S+1)|11>=2\hbar^2\alpha(1)\alpha(2)$

即M=1, S_z=S_{1z}+S_{2z}的可能测值为$\hbar$，概率为 1。S=1, $\boldsymbol{S}^2$的可能测值为 $2\hbar^2$，概率为 1。

事实上，如将$\alpha(1)\alpha(2)$按S^2的本征态$|SM\rangle$（耦合表象）展开：

课后答案网 www.khdaw.com

$$\alpha(1)\alpha(2)=|\frac{1}{2}\frac{1}{2},\frac{1}{2}\frac{1}{2}>=\sum_{jM}|\,jM><jM\,|\frac{1}{2}\frac{1}{2},\frac{1}{2}\frac{1}{2}>$$

$$=<1,1|\frac{1}{2}\frac{1}{2},\frac{1}{2}\frac{1}{2}>|1,1>+<0,1|\frac{1}{2}\frac{1}{2},\frac{1}{2}\frac{1}{2}>|0,1>$$

式中内积就是C.G系数的复共轭。查表（书上p240 表 7-1 第 1 列，M=1, j_1=s=1/2），得：

$$<1,1|\frac{1}{2}\frac{1}{2},\frac{1}{2}\frac{1}{2}>=1,\quad <0,1|\frac{1}{2}\frac{1}{2},\frac{1}{2}\frac{1}{2}>=0$$

即：$\alpha(1)\beta(2)=|1,1>$是S^2的本征态。

7-24 同上题，如电子处于$S_{1z}=\frac{1}{2}\hbar$的状态（即$\chi_{1/2}$），质子处于$S_{2x}=\frac{1}{2}\hbar$的状态，求总自旋平方$\boldsymbol{S}^2$及总S_z=S_{1z}+S_{2z}的可能测值及相应概率。

解：$S_{2x}=\frac{1}{2}\hbar$的状态即$\varphi_+(2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}]=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(2)+\beta(2)]$。系统的总自旋态$\alpha(1)\varphi_+(2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\alpha(2)+\alpha(1)\beta(2)]$为非耦合（直乘）表象中的叠加态。

$\alpha(1)\alpha(2)$是$\boldsymbol{S}^2$和S_z的分别属于 $2\hbar^2$和$\hbar$的本征态（见上补充题），该态出现概率为 1/2；而在$\alpha(1)\beta(2)$中$\boldsymbol{S}^2$及总S_z=S_{1z}+S_{2z}的可能测值及相对概率由 7-23 题给出，该态出现概率为 1/2。综合列表结果如下：

	态的出现概率 w	S_z测值相对概率P		$\boldsymbol{S}^2$测值相对概率P	
		$S_z=\hbar$	$S_z=0$	$\boldsymbol{S}^2=2\hbar^2$	$\boldsymbol{S}^2=0$
$\alpha(1)\alpha(2)$	1/2	1	0	1	0
$\alpha(1)\beta(2)$	1/2	0	1	1/2	1/2
总概率=ΣwP		1/2	1/2	1/2+1/4=3/4	1/4
平均值		$\hbar$ (1/2)+0(1/2)= $\hbar$/2		$2\hbar^2$(3/4)+0(1/4)=$3\hbar^2$/2	

7-27 对于二电子体系的自旋三重态和单态（χ_{00}），证明它们都是$\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2$的本征态，本征值分别为 1 和–3。

证明：法 1：利用书上 p218 公式（13）

$$\vec{\sigma}\cdot\vec{L}(\text{本征值})=l\hbar,\quad j=l+1/2$$
$$-(l+1)\hbar,\quad j=l-1/2$$

令：$\vec{\sigma}=\vec{\sigma}_1,\vec{L}=\vec{S}_2=\frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}_2$，则 l=s=1/2，j=S，于是由上式可得：

$$\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2(\text{本征值})=1,\quad S=1,\quad \text{三重态};$$
$$=-3,\quad S=0,\quad \text{单重态}。$$

即有下列本征值方程：

课后答案网 www.khdaw.com

$S=1$, 三重态： $\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2\chi_{1Ms}=1\chi_{1Ms}$;

$S=0$, 单重态： $\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2\chi_{00}=-3\chi_{00}$

三重态χ_{1MS}和单重态χ_{00}都是$\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2$的本征态，本征值分别为 1 和–3。

法 2：将$\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2$分别作用到三重态$\chi_{1MS}$和单重态$\chi_{00}$的具体形式，利用书上p215 公式（17）直接计算。具体过程略。

课后答案网 www.khdaw.com

量子力学解答

(钱伯初<量子力学>)

Chap8　弹性散射

8-1 粒子束被中心势场$V(r)=\frac{\alpha}{r^2}(\alpha>0)$散射，求各分波相移$\delta_l$。再在条件$\frac{\mu\alpha}{\hbar^2}<<\frac{1}{8}$下，求$\delta_l$，$f(\theta)$及$\sigma(\theta)$的近似公式。

解：定态 Schrodinger 方程为：$\nabla^2\psi+[k^2-\frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)]=0$

令　$\psi=\sum_l R_l(r)Y_{l0}(\theta)=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\sum_l\sqrt{2l+1}R_l(r)P_l(\cos\theta)$

则径向部分满足径向方程：

$$\frac{d^2R_l}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR_l}{dr}+[k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}-\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2r^2}]R_l=0$$

当α=0（粒子做自由运动）时，满足边界条件$R_l(r)\overset{r\to0,\infty}{\to}$有限的解为：

$$R_l^{(0)}(r)=j_l(kr)=\sqrt{\frac{\pi}{2kr}}J_{l+1/2}(kr)\quad(*)$$

$kr\to\infty$处，渐进解为：$R_l^{(0)}(r)=j_l(kr)\overset{r\to\infty}{\to}\frac{1}{kr}\sin(kr-\frac{l\pi}{2})$

如令：$l(l+1)+\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}=v(v+1)$，即

$$v+\frac{1}{2}=[(l+\frac{1}{2})^2+\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}]^{1/2}$$

则径向方程化为：$\frac{d^2R_l}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR_l}{dr}+[k^2-\frac{v(v+1)}{r^2}]R_l=0$

在原点为有限的解为：$R_l^{(0)}(r)=\sqrt{\frac{\pi}{2kr}}J_{v+1/2}(kr)$

其渐进表示为：$R_l^{(0)}(r)\overset{r\to\infty}{\to}\frac{1}{kr}\sin(kr-\frac{v\pi}{2})$。与分波法普遍理论的渐进表示

$R_l^{(0)}(r)\overset{r\to\infty}{\to}\frac{1}{kr}\sin(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l)$比较，得 l 分波的相移：

$$\delta_l=-\frac{\pi}{2}(v-l)=-\frac{\pi}{2}[\sqrt{(l+\frac{1}{2})^2+\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}}-(l+\frac{1}{2})]$$

课后答案网 www.khdaw.com

散射振幅为：

$$f(\theta)=\frac{1}{k}\sum_l(2l+1)e^{i\delta_l}\sin\delta_l P_l(\cos\theta)$$

所以，$f(\theta)\propto\frac{1}{k},\qquad \sigma(\theta)=|f(\theta)|^2\propto\frac{1}{E}$

(b) 在条件$\frac{\mu\alpha}{\hbar^2}<<\frac{1}{8}$下，$\nu+\frac{1}{2}=[(l+\frac{1}{2})^2+\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}]^{1/2}\approx(l+\frac{1}{2})+\frac{\mu\alpha}{(l+1/2)\hbar}$，

所以，$\delta_l=-\frac{\pi}{2}(\nu-l)=-\frac{\pi}{2}[\sqrt{(l+\frac{1}{2})^2+\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}}-(l+\frac{1}{2})]\approx-\frac{\pi\mu\alpha}{(2l+1)\hbar^2}$

可见，$|\delta_l|<<1$，因而：$\sin\delta_l\approx\delta_l,\qquad e^{i\delta_l}\approx1$，所以：

$$f(\theta)=\frac{1}{k}\sum_l(2l+1)e^{i\delta_l}\sin\delta_l P_l(\cos\theta)$$

$$\approx\frac{1}{k}\sum_l(2l+1)\delta_l P_l(\cos\theta)=-\frac{\pi\mu\alpha}{\hbar^2k}\sum_{l=0}^{\infty}P_l(\cos\theta)=-\frac{\pi\mu\alpha}{2\hbar^2k\sin\frac{\theta}{2}}$$

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2=\frac{\pi^2\mu^2\alpha^2}{4\hbar^4k^2\sin^2\frac{\theta}{2}}$$

8-3 粒子束被球形势阱散射，

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

设$\frac{2\mu V_0a^2}{\hbar^2k}<<1$，并考虑低能散射$(ka<<1)$。

(a) 用公式计算s波(l=0)相移δ_0及散射振幅，总散射截面。

(b) 用 Born 近似公式计算散射振幅和总散射截面。Born 近似公式适用条件是什么？

解：(a) 低能散射，$|\delta_l|<<1$，有下面的公式成立：

$$\sin\delta_l\approx\delta_l\approx-\frac{2\mu k}{\hbar^2}\int_0^{\infty}V(r)[j_l(kr)]^2r^2dr$$

依题意：$\delta_0\approx\frac{2\mu kV_0}{\hbar^2}\int_0^a[j_0(kr)]^2r^2dr$

$j_0(kr)=\frac{\sin kr}{kr}$，所以：

课后答案网 www.khdaw.com

$$\delta_0 \approx \frac{2\mu k V_0}{\hbar^2}\int_0^a [j_0(kr)]^2 r^2 dr = \frac{2\mu V_0}{\hbar^2 k}\int_0^a \sin^2 kr dr = \frac{2\mu V_0}{\hbar^2 k}\frac{1}{2k}(kr - \frac{1}{2}\sin 2kr)\Big|_0^a$$

$$= \frac{\mu V_0}{\hbar^2 k^2}(ka - \frac{1}{2}\sin 2ka)$$

$ka << 1, \qquad \therefore \sin 2ka \approx 2ka - \frac{1}{3!}(2ka)^3$

于是：$\delta_0 \approx \frac{\mu V_0}{\hbar^2 k^2}(ka - \frac{1}{2}\sin 2ka) \approx \frac{2\mu V_0 ka^3}{3\hbar^2}$

$$f(\theta) = \frac{\sqrt{4\pi}}{k}\sum_{l=0}\sqrt{2l+1}\sin\delta_l e^{i\delta_l} Y_{l0} = \frac{\sqrt{4\pi}}{k}\sin\delta_0 e^{i\delta_0} Y_{00}$$

取 l=0，因 $|\delta_l| << 1$，$\sin\delta_l \approx \delta_l$，$e^{i\delta_l} \approx 1$，注意 $\sqrt{4\pi}Y_{00} = 1$，得：

$$f(\theta) = \frac{\sqrt{4\pi}}{k}\sin\delta_0 e^{i\delta_0} Y_{00} = \frac{\delta_0}{k} = \frac{2\mu V_0 a^3}{3\hbar^3}$$

由 p253 公式（21），得：$\sigma_{总} = \sigma_0 = \frac{4\pi}{k^2}\delta_0^2 = \frac{16\pi}{9}(\frac{\mu V_0 a^3}{\hbar^3})^2$

(c) 由 Born 近似

$$f^{(1)}(\theta) = -\frac{2\mu}{\hbar^2}\int_0^\infty V(r)\frac{\sin qr}{qr} r^2 dr = \frac{2\mu V_0}{\hbar^2 q}\int_0^a (\sin qr) r dr = \frac{2\mu V_0}{\hbar^2 q}(-\frac{r}{q}\cos qr + \frac{1}{q^2}\sin qr)\Big|_0^a$$

$$= \frac{2\mu V_0}{\hbar^2 q}(-\frac{a}{q}\cos qa + \frac{1}{q^2}\sin qa)$$

$q = 2k\sin\frac{\theta}{2}$，$qa = 2ka\sin\frac{\theta}{2}$，注意，$ka << 1$，故 $qa << 1$，于是：

$\cos qa \approx 1 - \frac{qa}{2}$，$\sin qa \approx qa - \frac{1}{3!}(qa)^3$，所以：

$$f^{(1)}(\theta) = \frac{2\mu V_0}{\hbar^2 q}(-\frac{a}{q}\cos qa + \frac{1}{q^2}\sin qa) \approx \frac{2\mu V_0}{\hbar^2 q}[-\frac{a}{q}(1 - \frac{(qa)^2}{2}) + \frac{1}{q^2}(qa - \frac{1}{3!}(qa)^3]$$

$$= \frac{2\mu V_0}{\hbar^2 q}[\frac{qa^3}{3}] = \frac{2\mu V_0 a^3}{3\hbar^2}$$

$$\sigma_{总} = \int |f^{(1)}(\theta)|^2 2\pi d\theta = (\frac{2\mu V_0 a^3}{3\hbar^2})^2 4\pi = \frac{16\pi}{9}(\frac{\mu V_0 a^3}{\hbar^2})^2$$

适用条件为：$\frac{\mu V_0 a^2}{\hbar^2} << 1$。

8-4 在分波法计算中，如只需考虑l=0,1 两个分波的散射，试写出$f(\theta)$及$\sigma(\theta)$的公式，并就

课后答案网 www.khdaw.com

$\delta_0=\frac{\pi}{9},\delta_1=\frac{\pi}{36}$，具体计算$\theta=0,\frac{\pi}{2},\pi$三种方向$\sigma(\theta)$的相对比率。

解：$f(\theta)=\frac{\sqrt{4\pi}}{k}\sum_{l=0}\sqrt{2l+1}\sin\delta_l e^{i\delta_l}Y_{l0}=\frac{\sqrt{4\pi}}{k}\sin\delta_0 e^{i\delta_0}Y_{00}+\frac{\sqrt{4\pi}}{k}\sqrt{3}\sin\delta_1 e^{i\delta_1}Y_{10}$

注意$\sqrt{4\pi}Y_{00}=1,\quad \sqrt{4\pi}Y_{10}=\sqrt{3}\cos\theta$，得：

$$f(\theta)=\frac{\sqrt{4\pi}}{k}\sin\delta_0 e^{i\delta_0}Y_{00}+\frac{\sqrt{4\pi}}{k}\sqrt{3}\sin\delta_1 e^{i\delta_1}Y_{10}=\frac{1}{k}(\sin\delta_0 e^{i\delta_0}+3\sin\delta_1 e^{i\delta_1}\cos\theta)$$

$$\sigma(\theta)=f^*(\theta)f(\theta)$$
$$=\frac{1}{k^2}(\sin^2\delta_0+9\sin^2\delta_1\cos^2\theta+3\sin\delta_0\sin\delta_1 e^{i(\delta_1-\delta_0)}\cos\theta+3\sin\delta_0\sin\delta_1 e^{-i(\delta_1-\delta_0)}\cos\theta)$$
$$=\frac{1}{k^2}(\sin^2\delta_0+9\sin^2\delta_1\cos^2\theta+6\sin\delta_0\sin\delta_1\cos(\delta_1-\delta_0)\cos\theta)$$

当$\delta_0=\frac{\pi}{9},\delta_1=\frac{\pi}{36}$时，

$$\sigma(0)=\frac{1}{k^2}(\sin^2\frac{\pi}{9}+9\sin^2\frac{\pi}{36}\cos^2 0+6\sin\frac{\pi}{9}\sin\frac{\pi}{36}\cos\frac{\pi}{12}\cos 0)$$
$$=\frac{1}{k^2}(\sin^2\frac{\pi}{9}+9\sin^2\frac{\pi}{36}+6\sin\frac{\pi}{9}\sin\frac{\pi}{36}\cos\frac{\pi}{12})=\frac{1}{k^2}11.37\times10^{-5}$$

$$\sigma(\frac{\pi}{2})=\frac{1}{k^2}(\sin^2\frac{\pi}{9}+9\sin^2\frac{\pi}{36}\cos^2\frac{\pi}{2}+6\sin\frac{\pi}{9}\sin\frac{\pi}{36}\cos\frac{\pi}{12}\cos\frac{\pi}{2})$$
$$=\frac{1}{k^2}(\sin^2\frac{\pi}{9})=\frac{1}{k^2}3.7\times10^{-5}$$

$$\sigma(\pi)=\frac{1}{k^2}(\sin^2\frac{\pi}{9}+9\sin^2\frac{\pi}{36}\cos^2\pi+6\sin\frac{\pi}{9}\sin\frac{\pi}{36}\cos\frac{\pi}{12}\cos\pi)$$
$$=\frac{1}{k^2}(\sin^2\frac{\pi}{9}+9\sin^2\frac{\pi}{36}-6\sin\frac{\pi}{9}\sin\frac{\pi}{36}\cos\frac{\pi}{12})=\frac{1}{k^2}0.233\times10^{-5}$$

$\frac{\sigma(\pi)}{\sigma(0)}=0.0353$，$\frac{\sigma(\pi)}{\sigma(\pi/2)}=0.108$，$\frac{\sigma(\pi/2)}{\sigma(0)}=0.326$

8-5 对于下列中心势场，用 Born 近似计算 $f(\theta)$及$\sigma(\theta)$。

(a) $V(r)=A\delta(\vec{r})$，(b) $V(r)=V_0e^{-\alpha r}$，(c) $V(r)=V_0e^{-\alpha^2r^2}$

解：(a)

课后答案网 www.khdaw.com

$$V(\vec{k},\vec{k}_0)\equiv\int V(r)e^{i(\vec{k}_0-\vec{k})\cdot\vec{r}}d^3\vec{r}=A\int\delta(\vec{r})e^{i(\vec{k}_0-\vec{k})\cdot\vec{r}}d^3\vec{r}=A$$

$$f^{(1)}(\theta)=-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}V(\vec{k},\vec{k}_0)=-\frac{\mu A}{2\pi\hbar^2}$$

$$\sigma(\theta)=\left|f^{(1)}(\theta)\right|^2=(\frac{\mu A}{2\pi\hbar^2})^2$$

(b) $f^{(1)}(\theta)=-\frac{2\mu}{\hbar^2}\int_0^\infty V(r)\frac{\sin qr}{qr}r^2dr$，$q=2k\sin\frac{\theta}{2}$

$$f^{(1)}(\theta)=-\frac{2\mu}{\hbar^2}\int_0^\infty V(r)\frac{\sin qr}{qr}r^2dr=-\frac{2\mu V_0}{\hbar^2 q}\int_0^\infty e^{-\alpha r}(\sin qr)rdr=-\frac{\mu V_0}{\hbar^2 qi}\int_0^\infty[e^{-(\alpha-iq)r}-e^{-(\alpha+iq)r}]rdr$$

$$=-\frac{\mu V_0}{\hbar^2 qi}[-(\frac{r}{\alpha-iq}+\frac{1}{(\alpha-iq)^2})e^{-(\alpha-iq)r}+(\frac{r}{\alpha+iq}+\frac{1}{(\alpha+iq)^2})e^{-(\alpha+iq)r}]\Big|_0^\infty$$

$$=-\frac{\mu V_0}{\hbar^2 qi}[\frac{1}{(\alpha-iq)^2}-\frac{1}{(\alpha+iq)^2}]=-\frac{\mu V_0}{\hbar^2 qi}[\frac{4i\alpha q}{(\alpha^2+q^2)^2}]=-\frac{4\mu\alpha V_0}{\hbar^2(\alpha^2+q^2)^2}$$

$$\sigma(\theta)=\left|f^{(1)}(\theta)\right|^2=\frac{16\mu^2\alpha^2V_0^2}{\hbar^4(\alpha^2+q^2)^4}$$

(c) $f^{(1)}(\theta)=-\frac{2\mu}{\hbar^2}\int_0^\infty V(r)\frac{\sin qr}{qr}r^2dr$，$q=2k\sin\frac{\theta}{2}$

$$f^{(1)}(\theta)=-\frac{2\mu}{\hbar^2}\int_0^\infty V(r)\frac{\sin qr}{qr}r^2dr=-\frac{2\mu V_0}{\hbar^2 q}\int_0^\infty e^{-\alpha^2r^2}(\sin qr)rdr$$

$$=-\frac{2\mu V_0}{\hbar^2 q}[-\frac{1}{2\alpha^2}e^{-\alpha^2r^2}\sin qr\Big|_0^\infty+\frac{q}{2\alpha^2}\int_0^\infty e^{-\alpha^2r^2}\cos qrdr]$$

$$=-\frac{2\mu V_0}{\hbar^2 q}[0+\frac{q}{2\alpha^2}\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^2}}e^{-q^2/4\alpha^2}]=-\frac{\sqrt{\pi}\mu V_0}{2\hbar^2\alpha^3}e^{-q^2/4\alpha^2}$$

$$\sigma(\theta)=\left|f^{(1)}(\theta)\right|^2=\frac{\pi\mu^2V_0^2}{\hbar^4\alpha^6}e^{-q^2/2\alpha^2}$$

8-8 粒子被中心势场$V(r)=-\frac{\hbar^2}{\mu}\left[\frac{\lambda}{ch(\lambda r)}\right]^2(\lambda>0)$散射，求低能（$E\to0$）$s$ 分波散射截面。

解：s 波为：$\psi=R_0(r)Y_{00}(\theta)=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}R_0(r)=\frac{u(r)}{r}$

$u(r)$满足径向方程：

$$\frac{d^2u}{dr^2}=\frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)u=-\frac{2\lambda^2}{[ch(\lambda r)]^2}u$$

当$\xi=\lambda r$，上式变为：

课后答案网 www.khdaw.com

$$\frac{d^2u}{d\xi^2}+\frac{2}{ch^2\xi}u=0$$

满足边界条件$u(0)=0$的解为：

$$u=th\xi=\frac{e^{\lambda r}-e^{-\lambda e}}{e^{\lambda r}+e^{-\lambda e}}$$

当$\lambda r>>1, u(r)\to 1$。另一方面，$\lambda r>>1, V(r)\to 0$，径向方程为：

$\frac{d^2u}{dr^2}\approx 0$，其一般解可表示为：

$$u(r)\approx A\sin(kr+\delta_0)=A(\sin kr\cos\delta_0+\cos kr\sin\delta_0)$$

低能散射（$E\to 0$），从而$kr\sim 0$，故$\sin kr\approx kr,\quad \cos kr\approx 1$，于是：

$$u(r)\approx A(\sin kr\cos\delta_0+\cos kr\sin\delta_0)=Akr\cos\delta_0+A\sin\delta_0$$

与$\lambda r>>1, u(r)\to 1$比较，知含 r 系数为 0：$\cos\delta_0=0$，即$\delta_0=\frac{\pi}{2}$

散射振幅为：

$$f(\theta)=\frac{1}{k}e^{i\delta_0}\sin\delta_0 P_0(\cos\theta)=\frac{1}{k}e^{i\pi/2}=\frac{i}{k}=\frac{i\hbar}{\sqrt{2\mu E}}$$

散射截面为：$\sigma_0=4\pi|f(\theta)|^2=\frac{2\pi\hbar^2}{\mu E}$

课后答案网 www.khdaw.com

量子力学解答

(钱伯初<量子力学>)

Chap9　量子跃迁

9-2 某体系（能量算符H_0）只有两个能级（非简并的），$E_2-E_1=\hbar\omega>0$，设$t<0$ 时处于基态ψ_1。$t>0$ 时受到外来作用，能量算符变成$H=H_0+H'$，设H'不含t，矩阵元为：

$$<\psi_1|H'|\psi_1>=<\psi_2|H'|\psi_2>=0,$$
$$<\psi_1|H'|\psi_2>=<\psi_2|H'|\psi_1>=\hbar v$$

试严格求解Schrodinger方程，求$\psi(t)$。如在任意$t>0$ 时刻测量H_0之值，测得$H_0=E_2$的概率等于什么？

解：在H_0表象中，$H=\begin{pmatrix}E_1 & \hbar v\\ \hbar v & E_2\end{pmatrix}$，本征值由久期方程求得：$\begin{vmatrix}E_1-E & \hbar v\\ \hbar v & E_2-E\end{vmatrix}=0$，即：

$$E_\pm=\frac{E_1+E_2}{2}\pm\frac{(E_2-E_1)}{2}\sqrt{1+\frac{4\hbar^2v^2}{(E_2-E_1)^2}}=E_1+\frac{\hbar\omega}{2}\pm\frac{\hbar\omega}{2}\sqrt{1+\frac{4v^2}{\omega^2}}=E_1+\frac{\hbar\omega}{2}\pm\frac{\hbar\omega}{2}\lambda$$

其中，$\lambda=\sqrt{1+\frac{4v^2}{\omega^2}}$

设本征函数为$\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}$，代入本征值方程：$\begin{pmatrix}E_1 & \hbar v\\ \hbar v & E_2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}=E_\pm\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}$，可得：

$b=\frac{E_\pm-E_1}{\hbar v}a=\frac{\omega(1\pm\lambda)}{2v}a$，于是可得归一化态函数：

$$\psi_\pm=\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}=\sqrt{\frac{\lambda\mp1}{2\lambda}}\begin{pmatrix}1\\ \frac{\omega(1\pm\lambda)}{2v}\end{pmatrix}=\sqrt{\frac{\lambda\mp1}{2\lambda}}\psi_1+\sqrt{\frac{\lambda\mp1}{2\lambda}}\frac{\omega(1\pm\lambda)}{2v}\psi_2$$

$$\psi_\pm=\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}=\frac{\hbar v}{\sqrt{\hbar^2v^2+(E_\pm-E_1)^2}}\begin{pmatrix}1\\ \frac{E_\pm-E_1}{\hbar v}\end{pmatrix}=\frac{\hbar v}{\sqrt{\hbar^2v^2+(E_\pm-E_1)^2}}\psi_1+\frac{E_\pm-E_1}{\sqrt{\hbar^2v^2+(E_\pm-E_1)^2}}\psi_2$$

将本征值分别代入上面的定态解，得到含时解：

$$\psi_+(t)=(\frac{\hbar v}{\sqrt{\hbar^2v^2+(E_+-E_1)^2}}\psi_1+\frac{E_+-E_1}{\sqrt{\hbar^2v^2+(E_+-E_1)^2}}\psi_2)e^{-iE_+t/\hbar}$$

$$\psi_-(t)=(\frac{\hbar v}{\sqrt{\hbar^2v^2+(E_--E_1)^2}}\psi_1+\frac{E_--E_1}{\sqrt{\hbar^2v^2+(E_--E_1)^2}}\psi_2)e^{-iE_-t/\hbar}$$

课后答案网 www.khdaw.com

按照叠加原理，它们的叠加态也是含时 Schrodinger 方程的解：

$$\psi(t)=C_-\psi_-(t)+C_+\psi_-(t)=C_-(\frac{\hbar v}{\sqrt{\hbar^2v^2+(E_--E_1)^2}}\psi_1+\frac{E_--E_1}{\sqrt{\hbar^2v^2+(E_--E_1)^2}}\psi_2)e^{-iE_-t/\hbar}$$

$$+C_+(\frac{\hbar v}{\sqrt{\hbar^2v^2+(E_+-E_1)^2}}\psi_1+\frac{E_+-E_1}{\sqrt{\hbar^2v^2+(E_+-E_1)^2}}\psi_2)e^{-iE_+t/\hbar}$$

$$=(\frac{C_-e^{-iE_-t/\hbar}}{\sqrt{\hbar^2v^2+(E_--E_1)^2}}+\frac{C_+e^{-iE_+t/\hbar}}{\sqrt{\hbar^2v^2+(E_+-E_1)^2}})hv\psi_1+(\frac{C_-e^{-iE_-t/\hbar}(E_--E_1)}{\sqrt{\hbar^2v^2+(E_--E_1)^2}}+\frac{C_+e^{-iE_+t/\hbar}(E_+-E_1)}{\sqrt{\hbar^2v^2+(E_+-E_1)^2}})\psi_2$$

由初始条件：$\psi(0)=\psi_1$，得：

$$\frac{C_-(E_--E_1)}{\sqrt{\hbar^2v^2+(E_--E_1)^2}}+\frac{C_+(E_+-E_1)}{\sqrt{\hbar^2v^2+(E_+-E_1)^2}}=0$$

$$(\frac{C_-}{\sqrt{\hbar^2v^2+(E_--E_1)^2}}+\frac{C_+}{\sqrt{\hbar^2v^2+(E_+-E_1)^2}})hv=1$$

解得：$C_-=\dfrac{\sqrt{\hbar^2v^2+(E_--E_1)^2}(E_+-E_1)}{\hbar v(E_+-E_-)}$，$C_+=\dfrac{\sqrt{\hbar^2v^2+(E_+-E_1)^2}(E_--E_1)}{\hbar v(E_--E_+)}$

于是：

$$\psi(t)=(\frac{E_+-E_1}{E_+-E_-}e^{-iE_-t/\hbar}-\frac{E_--E_1}{E_+-E_-}e^{-iE_+t/\hbar})\psi_1+(\frac{E_+-E_1}{E_+-E_-}\frac{E_--E_1}{\hbar v}e^{-iE_-t/\hbar}-\frac{E_+-E_1}{E_+-E_-}\frac{E_--E_1}{\hbar v}e^{-iE_+t/\hbar})\psi_2$$

$$=(\frac{1+\lambda}{2\lambda}e^{-iE_-t/\hbar}-\frac{1-\lambda}{2\lambda}e^{-iE_+t/\hbar})\psi_1-(e^{-iE_-t/\hbar}-e^{-iE_+t/\hbar})\frac{v}{\omega\lambda}\psi_2$$

$$=[\frac{1}{\lambda}e^{-i(E_1+E_2)t/2\hbar}\frac{(e^{i\omega\lambda t/2}-e^{-i\omega\lambda t/2})}{2}+e^{-i(E_1+E_2)t/2\hbar}\frac{(e^{i\omega\lambda t/2}+e^{-i\omega\lambda t/2})}{2}]\psi_1-e^{-i(E_1+E_2)t/2\hbar}(e^{i\omega\lambda t/2}-e^{-i\omega\lambda t/2})\frac{v}{\omega\lambda}\psi_2$$

$$=e^{-i(E_1+E_2)t/2\hbar}[\frac{\mathrm{i}}{\lambda}\sin\frac{\omega\lambda t}{2}+\cos\frac{\omega\lambda t}{2}]\psi_1-i\frac{2v}{\omega\lambda}\sin\frac{\omega\lambda t}{2}\psi_2]$$

H_0=E_2的概率为：

$$(\frac{2v}{\omega\lambda}\sin\frac{\omega\lambda t}{2})^2=\frac{4v^2}{\omega^2\lambda^2}\sin^2\frac{\omega\lambda t}{2}=\frac{4v^2}{\omega^2(1+\frac{4v^2}{\omega^2})}\sin^2\frac{\omega\lambda t}{2}=\frac{4v^2}{\omega^2+4v^2}\sin^2\frac{\omega\lambda t}{2}$$

9-3 上题中，设 H' 是微扰，即设 $v<<\omega$，求t>0 时刻测得H_0=E_2的概率，与微扰论结果比较。

解：$v<<\omega$ 时，上题结果 $\lambda=\sqrt{1+\dfrac{4v^2}{\omega^2}}\approx1$, 测得$H_0$=$E_2$的概率为：

$$(\frac{2v}{\omega\lambda}\sin\frac{\omega\lambda t}{2})^2\approx\frac{4v^2}{\omega^2}\sin^2\frac{\omega t}{2}<<1$$

按照微扰论，系统由ψ_1跃迁到ψ_2的系数：

$$C_{21}(t)=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^t H'_{21}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_2-E_1)t/\hbar}\mathrm{d}t=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^t\hbar v\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\mathrm{d}t=\frac{v}{\omega}(1-\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t})$$

跃迁概率为：

课后答案网 www.khdaw.com

$$|C_{21}(t)|^2=\frac{v^2}{\omega^2}(1-\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t})(1-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t})=\frac{v^2}{\omega^2}[2-(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t})]$$

$$=\frac{v^2}{\omega^2}[2-2\cos\omega t]=\frac{4v^2}{\omega^2}\sin^2\frac{\omega t}{2}$$

与上面结果一致。

9-4 t=0 时电子的自旋取值为 $S_z=\frac{\hbar}{2}$，t>0 时受到沿正 x 方向的均匀磁场（B）作用，作用势为 $H'=\frac{eB}{mc}S_x=\hbar\omega\sigma_x$，$\omega=\frac{eB}{2mc}$，视 H' 为微扰，试计算 t>0 时测得 $S_z=-\frac{\hbar}{2}$ 的概率。微扰论计算公式成立的条件是什么？

解：按照微扰论，系统由α 跃迁到β 的系数：

$$C_{\beta\alpha}(t)=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^t H'_{\beta\alpha}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_2-E_1)t/\hbar}\mathrm{d}t$$

未微扰初、末态能级与外加磁场无关，故能级相同。即这里是简并态的微扰计算。而

$$H'_{\beta\alpha}=\hbar\omega<\beta|\sigma_x|\alpha\rangle=\hbar\omega<\beta|\beta\rangle=\hbar\omega$$

所以：$C_{\beta\alpha}(t)=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^t\hbar\omega\mathrm{d}t=-i\omega t$

跃迁概率为：

$$|C_{\beta\alpha}(t)|^2=|-i\omega t|^2=\omega^2t^2$$

微扰论计算公式成立的条件是 $\sum|C_{\beta\alpha}(t)|^2<<1$，即 $\omega^2t^2<<1$

9-5 电荷为e（或-e）质量为m的一维谐振子，(a)写出电偶极跃迁选择定则。(b)求自发跃迁速率公式（初态ψ_n）。

解：(a) 在电偶极近似下，作用势为常微扰：$H'=e\varepsilon x$

由黄金规则：

$$w_{n\to f}=\frac{2\pi}{\hbar}|H'_{fn}|^2\delta(E_f-E_n)$$

$$H'_{fn}=e\varepsilon<f|x|n>$$

利用 $x|n>=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{n+1}|n+1>+\sqrt{n}|n-1>)$，得：

$$H'_{fn}=e\varepsilon<f|x|n>=e\varepsilon\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{n+1}<f|n+1>+\sqrt{n}<f|n-1>)$$

$$=e\varepsilon\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{n+1}\delta_{f,n+1}+\sqrt{n}\delta_{f,n-1})$$

课后答案网 www.khdaw.com

可见，$H'_{fn} \neq 0$ 的条件即从初态|n>跃迁到末态$|n \pm 1>$时跃迁概率 $w_{n\to n\pm1} \neq 0$，即跃迁选择定则为：$\Delta n = \pm 1$。

(b) 自发跃迁速率公式（初态ψ_n）：

$$A_{n,n-1} = \frac{4\omega_{n,n-1}^2}{3\hbar c^3} e^2 \left| x_{n-1,n} \right|^2 = \frac{4[(n+1/2)\omega - (n-1-1/2)\omega)]^2}{3\hbar c^3} e^2 (\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\sqrt{n})^2 = \frac{2n\omega e^2}{3mc^3}$$

课后答案网 www.khdaw.com

量子力学解答

(钱伯初<量子力学>)

Chap10　多粒子体系

10-3 某体系又 3 个自旋为 0 的全同粒子组成，限定但粒子状态只能是$\psi_\alpha,\psi_\beta,\psi_\gamma$，试写出体系的所有可能状态的波函数。

解：

$$\Phi_S^{111}(q_1,q_2,q_3)=\frac{1}{\sqrt{6}}[\phi_1(q_1)\phi_2(q_2)\phi_3(q_3)+\phi_1(q_2)\phi_2(q_3)\phi_3(q_1)$$
$$+\phi_1(q_3)\phi_2(q_1)\phi_3(q_2)+\phi_1(q_3)\phi_2(q_2)\phi_3(q_1)$$
$$+\phi_1(q_2)\phi_2(q_1)\phi_3(q_3)+\phi_1(q_1)\phi_2(q_3)\phi_3(q_2)]$$

$$\Phi_S^{300}(q_1,q_2,q_3)=\phi_1(q_1)\phi_1(q_2)\phi_1(q_3)$$

$$\Phi_S^{030}(q_1,q_2,q_3)=\phi_2(q_1)\phi_2(q_2)\phi_2(q_3)$$

$$\Phi_S^{003}(q_1,q_2,q_3)=\phi_3(q_1)\phi_3(q_2)\phi_3(q_3)$$

$$\Phi_S^{210}(q_1,q_2,q_3)=\sqrt{\frac{1}{3}}[\phi_1(q_1)\phi_1(q_2)\phi_2(q_3)+\phi_1(q_1)\phi_1(q_3)\phi_2(q_2)+\phi_1(q_3)\phi_1(q_2)\phi_2(q_1)]$$

$$\Phi_S^{102}(q_1,q_2,q_3)=\sqrt{\frac{1}{3}}[\phi_1(q_1)\phi_3(q_2)\phi_3(q_3)+\phi_1(q_2)\phi_3(q_1)\phi_3(q_3)+\phi_1(q_3)\phi_3(q_2)\phi_3(q_1)]$$

$$\Phi_S^{012}(q_1,q_2,q_3)=\sqrt{\frac{1}{3}}[\phi_2(q_1)\phi_3(q_2)\phi_3(q_3)+\phi_2(q_2)\phi_3(q_1)\phi_3(q_3)+\phi_2(q_3)\phi_3(q_2)\phi_3(q_1)]$$

$$\Phi_S^{021}(q_1,q_2,q_3)=\sqrt{\frac{1}{3}}[\phi_2(q_1)\phi_2(q_2)\phi_3(q_3)+\phi_2(q_1)\phi_2(q_3)\phi_3(q_2)+\phi_2(q_3)\phi_2(q_2)\phi_3(q_1)]$$

$$\Phi_S^{120}(q_1,q_2,q_3)=\sqrt{\frac{1}{3}}[\phi_1(q_1)\phi_2(q_2)\phi_2(q_3)+\phi_1(q_2)\phi_2(q_1)\phi_2(q_3)+\phi_1(q_3)\phi_2(q_2)\phi_2(q_1)]$$

$$\Phi_S^{201}(q_1,q_2,q_3)=\sqrt{\frac{1}{3}}[\phi_1(q_1)\phi_1(q_2)\phi_3(q_3)+\phi_1(q_1)\phi_1(q_3)\phi_3(q_2)+\phi_1(q_3)\phi_1(q_2)\phi_3(q_1)]$$

10-9 有两个全同粒子组成的体系，如单粒子自旋量子数为 S，[$S^2=S(S+1)\hbar^2$]体系总自

课后答案网 www.khdaw.com

旋态有多少种独立的交换对称态、反对称态？

解：单粒子自旋态为：$|Sm\rangle$,S 确定后，m=–S,…S 共有 2S+1 个态。2 粒子体系总自旋态独立的交换对称态数，即为在 2S+1 个态中每次取 2 个的重复组合数：

$$C_{2S+1}^{\tilde{2}}=C_{2S+1+2-1}^{2}=\frac{(2S+1+2-1)!}{2!(2S+1-1)!}=\frac{(2S+2)!}{2!(2S)!}=\frac{(2S+1)(2S+2)}{2}=(2S+1)(S+1)$$

交换反对称态要求取出的两个态不能相同，而相同的态总数为 2S+1 个，因此需要在上面计算的态数种扣除。于是，2 粒子体系总自旋态独立的交换反对称态数为：

$$(2S+1)(S+1)-(2S+1)=S(2S+1)$$

或者，2 粒子体系总自旋态独立的交换反对称态数，即在 2S+1 个态中每次取 2 个的组合数：

$$C_{2S+1}^{2}=\frac{(2S+1)!}{2!(2S+1-2)!}=\frac{(2S+1)!}{2!(2S-1)!}=\frac{(2S)(2S+1)}{2}=S(2S+1)$$

10-11 两电子体系，定义“自旋交换算符”P_{12}，$P_{12}\chi(S_{1z},S_{2z})=\chi(S_{2z},S_{1z})$，证明：

$P_{12}=\frac{1}{2}(1+\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2)=S^2-1$。（$S$为总自旋，取$\hbar$=1）。

证明：按定义，对两电子体系的对称态（三重态）和反对称态（单态），应有：

$P_{12}\chi_{1Ms}=\chi_{1Ms}$，$P_{12}\chi_{00}=-\chi_{00}$.　（*）

而 $S^2\chi_{1Ms}=2\chi_{1Ms}$,$(S^2-1)\chi_{1Ms}=\chi_{1Ms}$，

且 $(S^2-1)\chi_{00}=(0-1)\chi_{00}=-\chi_{00}$，

于是，令：$P_{12}=S^2-1=(\frac{3}{2}+\frac{1}{2}\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2)-1=\frac{1}{2}(1+\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2)$

可得使（*）满足的交换算符。由于两电子体系的任意自旋态均可表示为各 χ_{SMs} 态的线性叠加，所以定义 $P_{12}=S^2-1=\frac{1}{2}(1+\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2)$ 对任意两电子体系的自旋态都成立。

10-12 设粒子 1，2 自旋量子数均为 1/2，以 $\vec{S}=\vec{S}_1+\vec{S}_2$ 表示总自旋算符，取 $\hbar$=1。证明一下算符关系：

$[\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2,\vec{S}_1]=i\vec{S}_1\times\vec{S}_2$，　$[\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2,\vec{S}_2]=-i\vec{S}_1\times\vec{S}_2$

$[\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2,\vec{S}]=0$，　$\vec{S}\vec{S}^2=\vec{S}^2S=2\vec{S}$。

证：书上 p216 公式（27）可写为：

$[\vec{\sigma}\cdot\vec{A},\vec{\sigma}]=-2i\vec{A}\times\vec{\sigma}$　　（*）

课后答案网 www.khdaw.com

令：$\vec{\sigma}=\vec{\sigma}_1=2\vec{S}_1,\vec{A}=\vec{S}_2$，注意 $\vec{A}\times\vec{\sigma}=-\vec{\sigma}\times\vec{A}$ 得：

$[2\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2,2\vec{S}_1]=-2i\vec{S}_2\times2\vec{S}_1=4i\vec{S}_1\times\vec{S}_2$，即

$[\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2,\vec{S}_1]=i\vec{S}_1\times\vec{S}_2$　　（1）

式（*）中令：$\vec{\sigma}=\vec{\sigma}_2=2\vec{S}_2,\vec{A}=\vec{S}_1$，注意 $\vec{A}\cdot\vec{\sigma}=\vec{\sigma}\cdot\vec{A}$ 得：

$[2\vec{S}_2\cdot\vec{S}_1,2\vec{S}_2]=4[\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2,\vec{S}_2]=-2i\vec{S}_1\times2\vec{S}_2$，即

$[\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2,\vec{S}_2]=-i\vec{S}_1\times\vec{S}_2$　　（2）

（1）+（2）得：$[\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2,\vec{S}_1+\vec{S}_2]=[\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2,\vec{S}]=0$

由于：$[S^2,\vec{S}]=[\frac{3}{2}+2\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2,\vec{S}]=2[\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2,\vec{S}]=0$

所以：$\vec{S}S^2=S^2\vec{S}=(\frac{3}{2}+2\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2)\vec{S}=\frac{3}{2}\vec{S}+2(\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2)\vec{S}$

利用 $(S_{1x})=1/4,\vec{S}_1\times\vec{S}_1=i\hbar\vec{S}_1$ 等等，容易算出：

$(\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2)\vec{S}=(S_{1x}S_{2x}+S_{1y}S_{2y}+S_{1z}S_{2z})[(S_{1x}+S_{2x})\vec{i}+(S_{1y}+S_{2y})\vec{j}+(S_{1z}+S_{2z})\vec{k}]$

$=\frac{1}{4}\vec{S}$

或者，利用书上 p216 公式（24）可得：

$(2\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2)2\vec{S}_1=\vec{S}_2+2i\vec{S}_1\times\vec{S}_2$　(3)

$(2\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2)2\vec{S}_2=\vec{S}_1-2i\vec{S}_1\times\vec{S}_2$　(4)

(3)+(4)得：$(\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2)\vec{S}=\frac{1}{4}\vec{S}$

于是：$\vec{S}S^2=S^2\vec{S}=\frac{3}{2}\vec{S}+2(\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2)\vec{S}=\frac{3}{2}\vec{S}+\frac{1}{2}\vec{S}=2\vec{S}$

10-13 两个自旋量子数为 1/2 的非全同粒子，位置固定，相互作用能（算符）为 $H=\frac{\omega}{\hbar}\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2$。$t$=0 时粒子 1 自旋（$\boldsymbol{S}_1$）沿正z轴方向极化，粒子 2 自旋（$\boldsymbol{S}_2$）极化方向正好相反。对于任意 t>0 时刻，

(a) 求体系总自旋波函数$\chi(t)$，用单粒子自旋态$\alpha(1)$，$\beta(1)$，$\alpha(2)$，$\beta(2)$表示出来。

(b) 求$\boldsymbol{S}_1$极化方向与初始指向相同的概率。

(c) 求$\boldsymbol{S}_1$和$\boldsymbol{S}_2$极化方向均指向正z轴的概率。

(d) 总自旋量子数 $\boldsymbol{S}$=1,0 的各自概率。

课后答案网 www.khdaw.com

解：（a）$H=\frac{\omega}{\hbar}\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2=\frac{\omega}{2\hbar}(S^2-\frac{3}{2}\hbar^2)$

可见总自旋$\boldsymbol{S}$是守恒量，所以选定态波函数为耦合表象中的态表示比较方便，它是$\boldsymbol{S}^2$的本征态$|SM\rangle$。S有两个值：S=1, S=0

$$H|SM>=\frac{\omega}{2\hbar}(\hat{S}^2-\frac{3}{2}\hbar^2)|SM>=\frac{\omega\hbar}{2}[S(S+1)-\frac{3}{2}]|SM>$$

$$S=1,\quad |SM>=\chi_{1Ms},\quad E_1=\frac{\hbar\omega}{4},$$

$$S=0,\quad |SM>=\chi_{00},\quad E_0=-\frac{3\hbar\omega}{4}$$

按题设，t=0 时：$\chi(0)=\alpha(1)\beta(2)=\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{10}+\chi_{00})$

因此，t>0 时波函数为：$\chi(t)=\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{10}e^{-iE_1t/\hbar}+\chi_{00}e^{-iE_0t/\hbar})$

即：

$$\chi(t)=\frac{1}{2}[\alpha(1)\beta(2)+\beta(1)\alpha(2)]e^{-i\omega t/4}+\frac{1}{2}[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)]e^{i3\omega t/4}$$

$$=[\alpha(1)\beta(2)\cos\frac{\omega t}{2}-i\beta(1)\alpha(2)\sin\frac{\omega t}{2}]e^{i\omega t/4}$$

(b) $\boldsymbol{S}_1$极化方向与初始指向相同(z轴方向)的概率为：$\cos^2\frac{\omega t}{2}$

(c) $\boldsymbol{S}_1$和$\boldsymbol{S}_2$极化方向均指向正z轴的概率为 0（因为没有$\alpha(1)\alpha(2)$项）。

(d) 由 $\chi(t)=\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{10}e^{-iE_1t/\hbar}+\chi_{00}e^{-iE_0t/\hbar})$ 可知总自旋量子数 $\boldsymbol{S}$=1,0 的概率均为 1/2。

课后答案网 www.khdaw.com