张永德 主编

物理学大题典

A Grand Dictionary of Physics Problems and Solutions

7

量子力学（上册）

Quantum Mechanics

第二版

张永德 张鹏飞 刘乃乐 柳盛典
吴 强 朱栋培 范洪义 潘必才 / 编著



科学出版社
中国科学技术大学出版社

物理学大题典⑦/张永德主编

量子力学

（上册）

（第二版）

张永德　张鹏飞　刘乃乐　柳盛典
吴　强　朱栋培　范洪义　潘必才　编著

南京大学 藏書 图书馆

科学出版社

中国科学技术大学出版社

内 容 简 介

“物理学大题典”是一套大型工具性、综合性物理题解丛书. 丛书内容涵盖综合性大学本科物理内容:从普通物理的力学、热学、光学、电磁学、近代物理到“四大力学”,以及原子核物理、粒子物理、凝聚态物理、等离子体物理、天体物理、激光物理、量子光学、量子信息等. 内容新颖、注重物理、注重学科交叉、注重与科研结合.

《量子力学(第二版)》上册共6章,包括量子力学的物理基础、一维定态问题、中心场束缚态问题、算符、表象和表示、轨道及自旋角动量问题和带电粒子在电磁场中运动问题.

本丛书可作为物理类本科生的学习辅导用书、研究生的入学考试参考书和各类高校物理教师的教学参考书.

图书在版编目(CIP)数据

量子力学. 上册/张永德等编著. —2版. —北京:科学出版社,2018.9
(物理学大题典/张永德主编;7)
ISBN 978-7-03-058373-4

Ⅰ.①量… Ⅱ.①张… Ⅲ.①量子力学-题解 Ⅳ.①O413.1-44

中国版本图书馆CIP数据核字(2018)第167669号

责任编辑:昌 盛 陈曰德 / 责任校对:张凤琴
责任印制:吴兆东 / 封面设计:华路天然工作室

科学出版社 出版
北京东黄城根北街16号
邮政编码:100717
http://www.sciencep.com

中国科学技术大学出版社
安徽省合肥市金寨路96号
邮政编码:230026

北京虎彩文化传播有限公司 印刷
科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2005年9月第 一 版 开本:787×1092 1/16
2018年9月第 二 版 印张:33 1/4
2018年9月第四次印刷 字数:788 000

定价:89.00元

(如有印装质量问题,我社负责调换)

祝贺《物理学大题典》
在中国科学技术大学
六十周年校庆之际
再次出版

李政道

二〇一八年五月

“物理学大题典”编委会

主　编　张永德

编　委　（按姓氏拼音排序）

白贵儒　陈银华　程稼夫　范洪义　范扬眉　宫竹芳　顾恩普

郭光灿　胡友秋　金怀诚　李泽华　林鸿生　刘金英　刘乃乐

柳盛典　潘必才　潘海俊　强元棨　仝茂达　王冠中　王韶舜

翁明其　吴　强　许咨宗　轩植华　杨保忠　杨德田　杨建明

尤峻汉　张家铝　张鹏飞　张永德　章世玲　赵叔平　郑久仁

周又元　周子舫　朱栋培　朱俊杰

丛 书 序

这套“物理学大题典”源自20世纪80年代末期的“美国物理试题与解答”，而那套丛书则源自80年代的CUSPEA项目(China-United States Physical Examination and Application Program). 这套丛书收录的题目主要源自美国各著名大学物理类研究生入学试题，经筛选后由中国科学技术大学近百位高年级学生和研究生解答，再经中科大数十位老师审定. 所以这套丛书是中国改革开放初期中美文化交流的成果，是中美物理教学合作的结晶，是CUSPEA项目丰硕成果的一朵花絮.

贯穿整个80年代的CUSPEA项目由李政道先生提出. 1979年李先生为了配合中国刚刚开始实施的改革开放方针，向中国领导建言，逐步实施美国著名大学在中国高校联合招收赴美攻读物理博士研究生计划. 经李先生与我国各级领导和美国各著名大学反复多次磋商研究，1979年教育部和中国科学院联合发文《关于推荐学生参加赴美研究生考试的通知》，紧接着同年7月14日又联合发出补充通知《关于推荐学生参加赴美物理研究生考试的通知》，直到1980年5月13日，教育部和中国科学院再次联合发文《关于推荐学生参加赴美物理研究生考试的通知》，神州大地正式全面启动这一计划.

1979年最初实施的是Pre-CUSPEA，从李先生任教的哥伦比亚大学开始，通过考试选录了5名同学进入哥大. 此后计划迅速扩大，包括了美国所有著名大学在内的53所大学，后期还包括了加拿大的大学，总数达到97所. 10年CUSPEA共计录取915名中国各高校应届学生，进入所有美国著名大学. 迄今项目过去30年，当年赴美的青年学子早已各有所成，展布全球，许多人回国报效，成绩斐然，可喜可慰.

李先生在他总结文章中回忆说[①]：“在CUSPEA实施的10年中，粗略估计每年都用去了我约三分之一的精力. 虽然这对我是很重的负担，但我觉得以此回报给我创造成长和发展机会的祖国母校和老师是完全应该的.”文中李先生两次提及他已故夫人秦惠箐女士和助理Irene女士，为赴美中国年轻学子勤勤恳恳、默默无闻地做了大量细致的服务工作. 编者读到此处，深为感动！这次丛书再版适逢中国科学技术大学60周年校庆，又承李先生题词祝贺，中科大、科学出版社以及丛书编者同仁都十分感谢！

苏轼《花影》诗：“重重叠叠上瑶台，几度呼童扫不开. 刚被太阳收拾去，却教明月送将来.”聚中科大百多位师生之力，历二十余载，唯愿这套丛书对中美教育和文化交流起一点奠基作用，有助于后来学者踏着这些习题有形无迹的斑驳花影，攀登瑶台，观看无边深邃的美景.

张永德　谨识

2018年6月29日

① 李政道，《我和CUSPEA》，载于“知识分子”公众号，2016年11月30日.

前　言

物理学，由于它在自然科学中所具有的主导作用，在人类文明史，特别是在人类物质文明史中，占据着极其重要的地位. 经典物理学的诞生和发展曾经直接推动了欧洲物质文明的长期飞跃. 20 世纪初诞生并蓬勃发展起来的近代物理学，又造就了上个世纪物质文明的辉煌. 自 20 世纪末到 21 世纪初的当前时代，物理学正以空前的活力，广阔深入地开创着向化学、生物学、生命科学、材料科学、信息科学和能源科学渗透和应用的新局面. 在本世纪里，物理学再一次直接推动新一轮物质文明飞跃的伟大进程已经开始.

然而，经历长足发展至今的物理学，宽广深厚浩瀚无垠. 教授和学习物理学都是相当艰苦而漫长的过程. 在教授和学习过程许多环节中，做习题是其中必要而又重要的环节. 做习题是巩固所学知识的必要手段，是深化拓展所学知识的重要练习，是锻炼科学思维的体操.

但是，和习题有关的事有时并不被看重，似乎求解和编纂练习题是全部教学活动中很次要的环节. 但丛书编委会同仁们觉得，这件事是教学双方的共同需要，只要是需要的，就是合理的，有益的，应当有人去做. 于是大家本着甘为孺子牛的精神，平时在科研教学中一道题一道题地积累，现在又一道题一道题地编审，花费了大量时间做着这种不起眼的事. 正如一个城市的基础建设，不能只去建地面上摩天大楼和纪念碑等“抢眼球”的事，也同样需要去做修马路、建下水道等基础设施的事.

这套“物理学大题典”的前身是中国科技大学出版社出版的“美国物理试题与解答”丛书(7 卷). 那套丛书于 20 世纪 80 年代后期由张永德发起并组织完成，内容包括普通物理的力、热、光、电、近代物理到四大力学的全部基础物理学. 出版时他选择了“中国科学技术大学物理辅导班主编”的署名方式. 自那套丛书出版之后，历经 10 余年，仍然有不断的需求，于是就有了现在的这套丛书——“物理学大题典”.

“题典”编审的大部分教师仍为原来的，只增加了少许新成员. 经过大家着力重订和大量扩充，耗时近两年而成. 现在这次再版，编审工作又增加了几位新成员，复历一年而再成. 此次再版除在原来基础上适当修订审校之外，还有少量扩充，增加了第 6 卷《相对论物理学》，第 7 卷《量子力学》扩充为上、下两分册. 丛书最终为 8 卷 10 分册. 总计起来，丛书编审历时近 20 年，耗费近 40 位富有科研和教学经验的教授、约 150 位 20 世纪 80 年代和现在的研究生及高年级本科生的巨大辛劳. 丛书确实是众人长期合作辛劳的结晶！

现在的再版，题目主要来源当然依旧是美国所有著名大学物理类研究生的入学试题，但也收录了部分编审老师的积累. 内容除涵盖力、热、光、电、近代物理到四大力学全部基础物理学之外，还包括了原子核物理、粒子物理、凝聚态物理、等离子体物理、天体物理、激光物理、量子光学和量子信息物理. 于是，追踪不断发展的科学轨迹，现在这套丛书仍然大体涵盖了综合性大学全部本科物理课程内容.

这里应当强调指出两点：其一，一般地说，人们过去熟悉的苏联习题模式常常偏重基

础知识、偏于计算推导、偏向基本功训练;与此相比,美国物理试题涉及的数学并不繁难,但却或多或少具有以下特色:内容新颖,富于"当代感",思路灵活,涉及面宽广,方法和结论简单实用,试题往往涉及新兴和边沿交叉学科,不少试题本身似乎显得粗糙但却抓住了物理本质,显得"物理味"很足!纵观比较,编审者深切感到,这些考题的集合在一定程度上体现着美国科学文化个性及思维方式特色!唯鉴于此,大家不惮繁重,集众多人力而不怯,耗漫长岁月而不辍,是值得的!另外,扩充修订中增添的题目,也是本着这种精神,摘自编审老师各自科研工作成果,或是来自各人教学心得,实是点滴聚成.

其二,对于学生,的确有一个正确使用习题集的问题.有的同学,有习题集也不参考,咬牙硬顶,一个晚上自习时间只做了两道题.这种精神诚应嘉勉,但效率不高,也容易挫伤积极性,不利于培养学习兴趣;另有些同学,逮到合适解答提笔就抄,这样做是浮躁不踏实的.两种学习方法都不可取.编审者认为,正确使用习题集是一个"三步曲"过程:遇到一道题,先自己想一想,想出来了自己做最好;如果认真想了些时间还想不出来,就不要老想了,不妨翻开习题集找寻答案,看懂之后,合上书自己把题目做出来;最后,要是参考习题集做出来的,花费一两分钟时间分析解剖一下自己,找找存在的不足,今后注意.如此"三步曲"下来,就既踏实又有效率.本来,效率和踏实是一对矛盾,在这一类"治学小道"之下,它俩就统一起来了.总之,正确使用之下的习题集肯定能够成为学生们有用的"爬山"拐杖.

丛书第一版是在科学出版社胡升华博士倡议和支持下进行的,同时也获得刘万东教授、杜江峰教授的支持.没有他们推动和支持,丛书面世是不可能的.这次再版工作又承科学出版社昌盛先生全力支持,并再次获得中国科技大学物理学院和教务处的支持.对于这些宝贵支持,编审同仁们表示深切谢意.

※　※　※　※　※　※　※　※

《量子力学(第二版)》共计12章,题目总数由原来380道增扩为707道.题目来源是一些国内外量子力学习题集和量子力学教材,另有相当一部分是我们自拟的.

前后近20年中,参加本卷解题的人有任勇、戴铁生、萧旭东、周苏闽、王力军、何小东、孟国武、斯其苗、袁卡佳、何广梁、缪凌、康绍强、张洪、陈一新、杨仲侠、宁铂、吴盛俊、周锦东、赵博、赵梅生、杨洁、张强等.其间也听取过马雷、唐忠、潘建伟、刘乃乐、吴建达等的意见.为了丛书行文简洁,书中不再另行指出他们姓名.另外,戴铁生、郁司夏、赵博、赵梅生、杨洁、张强、曾树祥和王立志分别承当过部分审校、抄写和计算机输入工作.编写期间曾承俞礼钧教授提供过资料.

编审者谨识

2005年5月

2018年8月修改

目　录

丛书序
前言
题意要览
第 1 章　量子力学的物理基础 …… 1
第 2 章　一维定态问题 …… 39
第 3 章　中心场束缚态问题 …… 159
第 4 章　算符、表象和表示 …… 256
第 5 章　轨道及自旋角动量问题 …… 330
第 6 章　带电粒子在电磁场中运动问题 …… 466

题意要览

1.1 就几种情况在数值上加以证明在宏观世界里量子现象常常可以忽略
1.2 基本量的数值估计
1.3 几个重要物理量数值的量级
1.4 几个重要实验的意义
1.5 电子、中子和光子的 de Broglie 波长
1.6 室温下中子、电子热运动 de Broglie 波长
1.7 电子的双缝干涉
1.8 原子的稳定性
1.9 光子衰变
1.10 电子偶素的衰变
1.11 光的折射与最小作用量原理
1.12 de Broglie 波的相速度和群速度
1.13 考虑相对论修正后电子的 de Broglie 波长
1.14 de Broglie 波长的计算
1.15 电子显微镜的分辨率
1.16 波函数的归一化
1.17 粒子的径向和角向分布
1.18 验证不确定性关系
1.19 利用不确定性关系估算无限深方势阱中粒子的基态能量
1.20 给定一维运动粒子的波函数做有关计算
1.21 自由粒子动量和动能期望值的计算
1.22 电子 Young 双缝实验与测量公设
1.23 测量公设例 (Ⅰ)
1.24 测量公设例 (Ⅱ)
1.25 测量公设例 (Ⅲ)
1.26 能量守恒
1.27 一维束缚态无简并
1.28 一维束缚态的性质
1.29 广义 Virial 定理
1.30 广义 Hellmann-Feynman 定理
1.31 Schmidt 正交化方案
1.32 Virial 定理的应用
1.33 态随时间的演化
1.34 力学量期望值随时间的演化
1.35 常见的不确定性关系有三种形式

1.36 从波粒二象性以物理分析方式推论出量子力学的三个基本特征
2.1 自由粒子波包的扩散
2.2 自由粒子运动的普遍解
2.3 一维无限深方势阱中的粒子处于两个定态的叠加态
2.4 一维无限深方势阱中的粒子
2.5 平面转子
2.6 禁闭在一维盒中电子对器壁的压力
2.7 半壁无限高方势阱
2.8 $H=H_0+\frac{\lambda}{m}p$ 的求解
2.9 一维束缚态的逆 (反散射) 问题 (1)
2.10 一维束缚态的逆 (反散射) 问题 (2)
2.11 一维束缚态的逆 (反散射) 问题 (3)
2.12 一维束缚态的逆 (反散射) 问题 (4)
2.13 半壁无限深和有限深对称方势阱存在束缚态的条件
2.14 δ-势阱的束缚态
2.15 δ-势阱的束缚态中，使粒子处于 $|x|<x_0$ 的概率为 1/2 的 x_0 值
2.16 势无限高的墙壁外存在 δ-势，粒子在该势场中做一维运动
2.17 一维束缚态逆问题
2.18 粒子在阶跃势与 δ-势叠加的势场中运动
2.19 无限深势阱中央有一个 δ-势垒，粒子在其中运动
2.20 处于一维谐振子叠加态的位置期望值
2.21 考察原子在势壁附近行为的近似模型
2.22 Dirac 梳对粒子的散射发生完全反射的条件
2.23 双 δ-势垒中的共振态能级
2.24 δ-势阱中粒子波函数系数矩阵
2.25 在动量表象中求解 δ-势阱束缚态问题
2.26 粒子在非经典区的概率 (谐振子基态)
2.27 粒子在对称方势阱中运动，阱口刚好出现一条束缚态能级的条件
2.28 van der Waals 力势场中的束缚态
2.29 限制在圆周上运动且存在一个 δ-势垒的束缚态
2.30 限制在一段圆弧上运动的粒子
2.31 计算散射势垒的宽度
2.32 谐振子基态为最小不确定性态
2.33 由谐振子基态位置涨落求其跃迁到第一激发态所需的能量
2.34 谐振子随时间的演化
2.35 谐振子一般态位置期望值随时间的演化以及势能对时间的平均
2.36 谐振子势中心加一个很高很薄势垒
2.37 与给定的谐振子本征态能级相邻的本征态
2.38 关于谐振子一个特定的定态叠加态的计算
2.39 谐振子基态和第一激发态波函数在 p 表象中的形式
2.40 两个能量本征态的能级差
2.41 对势场 $V(x)=V_0(x/a)^{2n}$，用不确定性关系估计基态能

2.42 一个关于一维 Schrödinger 方程本征值的定理
2.43 束缚态存在定理
2.44 一维势存在束缚态条件的讨论
2.45 双势阱中态的一些讨论
2.46 一维反散射问题
2.47 自由粒子波包随时间的演化
2.48 自由粒子波包随时间演化的极限形式
2.49 $^{212}_{83}$Bi 的 α 衰变的量子模型
2.50 质量为 m 的粒子在一维双 δ-势阱中运动
2.51 方势阱的透射
2.52 阶跃势对粒子的散射
2.53 粒子自势阶方向入射时的透射、反射
2.54 粒子的反射系数 R 及透射系数 T 满足 $R+T=1$
2.55 对于相同能量的粒子，从势垒左边入射与从右边入射，其反射系数、透射系数均相同
2.56 势阶反射比率
2.57 δ-势垒的透射
2.58 $V(x)=-V_0\mathrm{sech}^2x$ 的 S 矩阵
2.59 中子束在平板上的反射
2.60 一维常数 (虚) 势的吸收系数
2.61 Galileo 变换下 Schrödinger 方程的解
2.62 在动量表象中计算粒子对 δ-势垒的透射概率
2.63 计算粒子对双 δ-势垒的透射概率
2.64 动量表象求解 Dirac 梳对粒子的散射
2.65 受冲力 $\lambda\delta(t)$ 作用的谐振子基态
2.66 谐振子势场的突变
2.67 重力场中粒子的能量
2.68 一维 Ising 模型
2.69 关于 Dirac 梳的计算
2.70 一个类谐振子能谱
2.71 氨分子钟的工作原理
2.72 在均匀力场中运动粒子 $\dfrac{\partial\rho}{\partial t}$ 与 $\dfrac{\partial\rho}{\partial p}$ 的关系
2.73 粒子入射势垒的反射系数 (1)
2.74 粒子入射势垒的反射系数 (2)
2.75 入射至半壁无限高势阱粒子的入射波和出射波的相位关系
2.76 在无限深方势阱内粒子动能平方三种办法的计算
3.1 轨道角动量量子数确定的定态中粒子平均位置必在原点
3.2 粒子在中心力场 $V(r)=-\dfrac{\alpha}{r^s}(\alpha>0)$ 中运动存在束缚态条件
3.3 原子单位
3.4 三维无限深势阱
3.5 “夸克”禁闭
3.6 被空穴束缚的电子吸收谱的最大波长

3.7 处于无限深球方势阱基态电子对器壁压力
3.8 粒子在两个不可穿透的同心球壳中的运动
3.9 谐振子几个问题
3.10 中心力场运动粒子各能级径向波函数的节点数
3.11 三维各向同性谐振子能级的占有数和简并度
3.12 三维耦合谐振子
3.13 对数势中运动的粒子
3.14 氢原子受一无限高势壁的作用
3.15 氢原子波函数随时间的演化
3.16 电子偶素
3.17 电子在势场 $V=kr(k>0)$ 中运动
3.18 重夸克之间近似相互作用势 $V(r)=A+Br$
3.19 质子和中子通过交换 $\pi^{\pm}$ 介子产生近似的吸引势 $V(r)=\dfrac{g^2}{d}\exp\{-r/d\}$
3.20 中心力场束缚态的一个重要关系
3.21 有限深球方势阱中的束缚态
3.22 有限深球方势阱存在束缚态的条件
3.23 受反射壁影响粒子运动的 Green 函数及其复数模平方
3.24 电子在不可穿入的导体表面上方的运动
3.25 非相对论电子在无限大接地、不可穿透导体上方的运动
3.26 粒子在势场 $V(r)=-\dfrac{\lambda}{r^{2/3}}$ 中运动，由不确定性关系估计其基态能量
3.27 质量为 μ 的粒子在球壳势阱中运动
3.28 Coulomb 吸引势与距离平方反比排斥势之和的势场中运动粒子的能量本征值和本征态
3.29 三维各向同性谐振子与 Coulomb 场束缚态径向方程的联系
3.30 幂函数型中心势场 $V(r)=\lambda r^{\nu}$ 束缚定态能量 $\nu>0$ 与 $-2<\nu<0$ 情形的对应
3.31 球对称幂律势场中运动粒子的能级量纲构造式
3.32 球对称幂律势场中运动粒子在半径为 a 的球面内出现的概率
3.33 若中心势场势函数 $V(r)$ 为单调上升函数，则任意半径球内势的期望值小于整个空间势的期望值
3.34 对核电荷为 Ze 的类氢原子，计算处于束缚定态 ψ_{nlm} 下的电子的 $\langle r^{-1}\rangle$、$\langle r^{-2}\rangle$ 和 $\langle r^{-3}\rangle$
3.35 类氢离子束缚定态下 $\langle r^{\lambda}\rangle$ 的 Kramers 递推公式
3.36 三维各向同性谐振子的束缚定态中 $\langle r^{\lambda}\rangle$ 的递推关系
3.37 原子核的突然 β^- 衰变
3.38 用不确定性关系估算氦原子的基态能量
3.39 估算核力的力程
3.40 对于氢原子基态，验证不确定性关系
3.41 类氢离子“圆轨道”态的讨论
3.42 对于氢原子中的“圆轨道”态，求电子在经典禁区 $(V>E)$ 中的概率
3.43 对于氢原子的各 s 态计算 Δx、Δp_x
3.44 碱金属价电子受屏蔽势作用时的能级
3.45 中心力场等效势的讨论

3.46 双原子分子内部运动能级的近似表达式
3.47 Morse 势的 s 态解
3.48 有限深球方势阱的一般讨论
3.49 n-p 体系束缚态
3.50 介子的弹性袋模型
3.51 二维和三维中心力场能量本征值的对应关系
3.52 在无限长圆筒中运动粒子的能量
3.53 中心力场束缚态能级对磁量子数 m 简并
3.54 中心力场存在束缚态的充分条件
3.55 氢原子定态波函数径向部分在动量表象中的形式
3.56 粒子在 Kratzer 分子势中运动束缚态解
3.57 三维中心力场的“反散射”问题 (1)
3.58 三维中心力场的“反散射”问题 (2)
3.59 一维氢原子的束缚态解
3.60 氢原子 1s、2s 和 2p 态在动量表象中的形式
3.61 氢原子中电子的电偶极矩
3.62 刚性球半径突变时处于球内的粒子
3.63 粒子在 Hulthen 势中束缚态能级的不等式
3.64 无自旋粒子在柱对称势下运动的讨论
4.1 宇称 (空间反演) 算符
4.2 证明束缚定态中动量的期望值恒为零
4.3 $\left[\hat{A},\ \hat{B}\right]_+ = 0$ 时，在 Hermite 算符 $\hat{A}$ 的分立谱本征态下 $\hat{B}$ 的期望值为零
4.4 $\left[\hat{A},\ \hat{H}\right]_+ = 0$ 时能量本征态的性质
4.5 算符函数 $\hat{F}^N$ 的展开
4.6 坐标算符本征值谱的讨论
4.7 动量算符本征值谱的讨论
4.8 坐标平移算符的本征值及本征态
4.9 轨道角动量算符 $\hat{L}_z$ 的 Hermite 性条件
4.10 流密度算符
4.11 压缩算符的转置及 Hermite 共轭算符
4.12 算符 $\mathrm{i}\dfrac{\partial}{\partial r}$ 的转置及 Hermite 共轭算符
4.13 对 Hermite 算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$，算符 $(\hat{A}+\mathrm{i}\hat{B})^2$ Hermite 性的条件
4.14 压缩算符在 x 表象中的表示
4.15 压缩相干态在 x 表象中的表示
4.16 压缩态的另一种形式
4.17 Fourier(积分) 变换的性质
4.18 动量空间的 Schrödinger 方程
4.19 $F = \alpha p + \beta x$ 的本征态
4.20 算符 $x + \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ 的本征态
4.21 两反对易算符存在共同本征态的条件
4.22 线性算符在连续谱表象中的矩阵元——积分核

4.23 算符 $\frac{1}{r}$ 和 $\frac{1}{r^2}$ 的积分核
4.24 算符 $\hat{L}$ 的 $\hat{L}^*, \hat{L}^{\mathrm{T}}, \hat{L}^\dagger$ 的积分核
4.25 已知算符 $\hat{L}$ 积分核的形式，讨论 $\hat{L}$ 的 Hermite 条件
4.26 两对易算符的积分核之间的关系
4.27 与 $\hat{x}$、$\hat{p}$ 都对易的算符为常数算符
4.28 积分核形如 $F(x,x')=f(x)f^*(x')$ 算符的本征值、本征态
4.29 若 $\hat{\pi}\psi(x)=\psi(-x)$ 则 $\hat{\pi}\varphi(p)=\varphi(-p)$
4.30 算符函数在连续谱表象中的矩阵元——积分核
4.31 投影定理
4.32 投影算子
4.33 投影算子的积分核
4.34 投影算子的形式
4.35 力学量期望值对时间的二次微商
4.36 坐标算符平方期望值对时间的二次微商
4.37 算符整函数与 x、p 的对易关系
4.38 Baker-Hausdorff 公式
4.39 Glauber 公式
4.40 Kubo 恒等式
4.41 对易关系的一个重要结果
4.42 矢量算符的点乘积、叉乘积与标量算符的对易关系
4.43 轨道角动量算符与整函数算符的对易子
4.44 轨道角动量与动量算符的两个代数关系
4.45 矢量算符与角动量算符的一般代数关系
4.46 $\hat{\boldsymbol{L}}^2$、$\hat{\boldsymbol{p}}^2$ 的代数结果
4.47 $\hat{\boldsymbol{L}}$、$\hat{\boldsymbol{r}}$ 与 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 的混合积与三重叉积
4.48 关于 $\hat{\boldsymbol{L}}$、$\hat{\boldsymbol{p}}$ 的几个代数关系
4.49 算符的逆
4.50 算符的导数
4.51 关于有限阶矩阵行列式、迹的几个等式
4.52 关于有限阶矩阵行列式和迹的一个关系式
4.53 由算符满足的最低阶方程求本征值
4.54 电荷算符与“电荷共轭”算符
4.55 算符本征态的完备性与可观测量 Hermite 性的应用
4.56 能量表象中的求和规则 (1)
4.57 能量表象中的求和规则 (2)
4.58 能量表象中的求和规则 (3)
4.59 能量表象中的求和规则 (4)
4.60 由不确定性关系求最小不确定性态
4.61 力学量的时间导数算符在能量表象的矩阵元
4.62 在动量表象中求解均匀力场中运动粒子的定态波函数
4.63 中子与反中子互相转变
4.64 表象与表象变换例 (1)

4.65 表象与表象变换例 (2)
4.66 幺正算符与幺正矩阵
4.67 Heisenberg 表象中算符方程
4.68 幺正算符的时间导数
4.69 积分方程 $\hat{B}(t)=\hat{B}_0+\mathrm{i}\left[\hat{A},\int_0^t\hat{B}(\tau)\mathrm{d}\tau\right]$ 的解
5.1 角动量的对易关系
5.2 角动量的升降算符
5.3 在角动量平方、z 方向分量的共同本征态下，求角动量 x 分量的期望值、均方值和涨落
5.4 在角动量平方和其第三分量的共同本征态下角动量沿空间某一方向分量及其平方的期望值
5.5 在角动量平方、z 方向分量表象的 J=1 的子空间，角动量 x 方向分量、y 方向分量的矩阵表示及本征值与本征态
5.6 在 $J=1$ 的子空间中，证明 $J_x^3=J_x$
5.7 在角动量平方、z 方向分量共同本征态下，测量角动量 x 方向分量或 y 方向分量取 $\pm m'$ 的概率相等
5.8 在角动量平方、z 方向分量的共同本征态中，求 x 方向分量四次幂的期望值
5.9 在 Y_{20} 态下，L_x 的可能值及相应概率
5.10 与角动量对易的标量算符在角动量本征态下的期望值与磁量子数无关
5.11 角动量的投影定理
5.12 角动量算符和矢量算符的几个代数关系
5.13 σ_n 的本征值与本征态
5.14 1/2 自旋沿正 z 轴，求自旋沿空间方向分量的可能值及相应概率
5.15 与 Pauli 算符的三个分量都对易的非零二维矩阵必为常数矩阵
5.16 角动量的对易关系
5.17 SU_2 矩阵的一般形式
5.18 同位旋算符
5.19 C 数矢量算符与 Pauli 算符的一个关系式
5.20 Pauli 算符有关的几个求迹的运算
5.21 一个 C 数矢量算符与 Pauli 算符的关系式
5.22 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}=\cos\lambda+\mathrm{i}\sigma_z\sin\lambda$
5.23 1/2 旋量空间转动算符的关系式
5.24 自旋空间中绕 z 轴的转动下 Pauli 算符的变换
5.25 自旋空间中绕空间某方向转动下 Pauli 算符的变换
5.26 $\sigma_\pm=\sigma_x\pm\mathrm{i}\sigma_y$ 的一些代数结果
5.27 自旋态 $|\lambda\rangle$ 的投影算子
5.28 自旋极化矢量在均匀磁场中的动力学方程 (I)
5.29 自旋极化矢量在均匀磁场中的动力学方程 (II)
5.30 在 σ_n 本征态下的自旋极化矢量
5.31 $s=1/2$ 时极化矢量与投影算子的关系
5.32 1/2 粒子自旋态为 $|x\rangle$，测得其处于 $|\lambda\rangle$ 态的概率
5.33 由测量结果确定自旋态

5.34 轨道、自旋和总角动量之间的一些代数关系
5.35 总角动量的投影算子
5.36 Pauli 算符径向分量对自旋-轨道耦合表象基矢的作用
5.37 在态 αY_{l0} 下总角动量平方及第三分量的可能值及相应概率
5.38 自旋轨道耦合表象总角动量态下的自旋期望值
5.39 在自旋-轨道耦合表象基矢下求总磁矩分量的期望值
5.40 两个 1/2 自旋 Pauli 算符标量积满足的最简单代数关系
5.41 自旋交换算符
5.42 两个 1/2 自旋粒子的一个两体算符的展开
5.43 两个自旋 1/2 粒子的 Pauli 算符的一些代数结果
5.44 两个自旋 1/2 粒子自旋算符和总自旋算符的一些代数结果
5.45 两个 1/2 自旋粒子张量算符的本征值
5.46 两个 1/2 自旋粒子张量算符的本征值和本征态
5.47 两电子原子处于自旋单态时， L-S 耦合对能量无贡献
5.48 两个 $s=1/2$ 非全同粒子的自旋状态中， $\boldsymbol{S}^2$ 的可能测量值及相应概率
5.49 两个自旋 1/2 粒子系受均匀外磁场作用时的能级
5.50 三个自旋 1/2(非全同) 粒子系统的能级和简并度 (1)
5.51 三个自旋 1/2(非全同) 粒子系统的能级和简并度 (2)
5.52 对于两个自旋 1/2 粒子系的自旋单态 χ_{00}， $S_n\chi_{00}=0$ 及 $\langle\chi_{00}|\sigma_i|\chi_{00}\rangle=0$
5.53 两个自旋 1/2 粒子各自沿空间方向自旋分量之间的关联
5.54 轨道角动量平方和分量与空间单位矢量分量的对易关系
5.55 Pauli 矩阵的一些性质
5.56 $S=1$ 的自旋算符的代数结果
5.57 角动量矩阵的本征值
5.58 $s=1/2$ 时极化矢量与投影算子的关系
5.59 在态 $\psi=K[x+y+2z]\exp\{-\alpha r\}$ 中，总角动量及角动量第三分量的期望值
5.60 粒子具有轨道角动量量子数 $l=2$ 和自旋角动量量子数 $s=1$，求自旋 -轨道作用相关的能级和简并度
5.61 电子在 $\psi=\dfrac{1}{\sqrt{4\pi}}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\sin\theta+\cos\theta)g(r)$ 态中， L_z 的可能值及概率
5.62 $U(\beta,y)$ 为绕 y 轴转 β 角的转动算符，证明矩阵元 $\langle jm|U(\beta,y)|jm'\rangle$ 是 $\sin\dfrac{\beta}{2}$ 和 $\cos\dfrac{\beta}{2}$ 的 $2j$ 次齐次多项式
5.63 两个自旋 1/2 粒子相互作用 $f=a+b\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$ 在耦合与非耦合表象中的矩阵表示
5.64 两粒子系各自粒子角动量平方及总角动量平方的可能值
5.65 在给定的空间态中，轨道角动量平方和其第三分量的取值
5.66 自由碳原子的电子组态
5.67 用带负电的全同 $S=1$ 的两粒子代替氦原子中电子求其基态简并度
5.68 电子自旋态的测量
5.69 1/2 自旋系统算符 AS_y+BS_z 的本征值、本征态
5.70 一个自旋为 1 的粒子 $H=AS_z+BS_x^2$ 的能级
5.71 两个自旋 1/2 粒子体系的能级
5.72 激发态原子二次发射的光子之间的关系

5.73 磁场中电子的自旋态
5.74 磁场中自旋 1/2 粒子的自旋态
5.75 磁场中自旋 1/2 粒子的自旋随时间变化
5.76 $H=-J\left[\sigma_x^{(1)}\sigma_x^{(2)}+\sigma_y^{(1)}\sigma_y^{(2)}\right]$ 时极化矢量与投影算子的关系
5.77 自由碳原子存在 L-S 精细结构耦合时，各可能态的 S, L, J 值及重数
5.78 $\pi^-+\mathrm{d}\to\mathrm{n}+\mathrm{n}$，中子对的轨道和总角动量
5.79 $\Omega^-\longrightarrow\Lambda+\mathrm{K}^-$ 中的角动量问题
5.80 两角动量 $j_1=1$、$j_2=\dfrac{1}{2}$ 耦合的 C-G 系数
5.81 电子在外磁场中运动时的自旋态及平均极化率
5.82 电子处于外磁场中时沿 x 和 z 方向的极化
5.83 两个自旋 1/2 粒子系在给定态下，总自旋 $S=0$ 的概率
5.84 与电子自旋有关的测量问题
5.85 为什么氘核不存在 p 态和 g 态
5.86 Stern-Gerlach 装置中的电子
5.87 处于基态的碱原子通过 Stern-Gerlach 装置
5.88 自旋 1/2 粒子束相继通过两个 Stern-Gerlach 装置
5.89 银原子束的 Stern-Gerlach 实验
5.90 两个自旋为 1/2 带等量异号电荷粒子组成的体系放在均匀磁场中
5.91 处于 $^2\mathrm{p}_{1/2}$ 态氢原子在弱和强外磁场中的有效磁矩
5.92 1/2 自旋粒子内禀磁矩处在外磁场中
5.93 磁共振问题 (1)
5.94 磁矩 $\boldsymbol{\mu}=\mu_0\boldsymbol{\sigma}$ 粒子处于磁场 $\boldsymbol{B}=B_0\boldsymbol{e}_z+B_1\boldsymbol{e}_x$ 中状态随时间的演化
5.95 磁共振问题 (2)
5.96 中子束相继穿过两个方向不同磁场时，自旋态的演化
5.97 原子在外磁场中 Hamilton 量中各项的意义
5.98 含自旋算符的开根和逆
6.1 速度算符及各分量间的对易关系
6.2 (机械) 速度算符、机械角动量算符的时间导数算符
6.3 自由电子在外磁场中的 Hamilton 量
6.4 带电粒子在均匀磁场中运动的轨道中心算符
6.5 带电粒子在均匀磁场中运动的轨道中心算符和轨道半径的本征值谱
6.6 电荷密度和电流密度算符
6.7 带电粒子在均匀磁场及三维各向同性谐振子势场中的能谱
6.8 限制在圆周上的带电粒子处于磁场中时的能级
6.9 磁通量量子化
6.10 对称规范与不对称规范
6.11 Pauli 提出的全面地反映电子在电磁场中运动的 Hamilton 量
6.12 带电粒子受均匀电场作用时的含时 Schrödinger 方程
6.13 处于均匀磁场中无自旋带电粒子的能级
6.14 带电粒子在均匀恒定相互垂直电磁场中运动
6.15 中子的旋量干涉
6.16 Aharonov-Bohm 效应

6.17 将 Bohr-Sommerfeld 关系推广应用到有电磁场存在的情况
6.18 规范变换对波函数的影响
6.19 三维刚性盒中电子受一均匀磁场作用时的能级
6.20 处于磁场中导体圆环中运动电子的基态与外磁场的关系
6.21 时间反演不变时，波函数的时间反演形式
6.22 有自旋的带电粒子在均匀磁场中低速运动时的 Hamilton 量
6.23 电子、μ 子等 g 因子的一种测量原理
6.24 中子干涉问题
6.25 处于 2p 态氢原子在外磁场中，计算 $\langle L_x \rangle$
6.26 不带电荷磁矩为 $\boldsymbol{\mu}$ 的粒子被约束在 $(-L, L)$ 的无限深势阱中，在 $x<0$ 区加磁场 $B_0\boldsymbol{e}_z$，在 $x>0$ 区加磁场 $B_0\boldsymbol{e}_x$，求能量本征态及能级方程
6.27 带电粒子在磁通为 Φ 的长螺线管穿过半径为 R 的双环中运动时，能级及本征函数

第 1 章　量子力学的物理基础

1.1　就几种情况在数值上加以证明在宏观世界里量子现象常常可以忽略

题 1.1　在宏观世界里，量子现象常常可以忽略. 对此就下列诸情况，在数值上加以证明：

(1) 长 $l=1.0\text{m}$，质量 $m=1.0\text{kg}$ 的单摆的零点振荡的振幅；

(2) 质量 $m=5.0\text{g}$，以速度 10cm/s 向一刚性障碍物 (高 5.0cm，宽 1.0cm) 运动的子弹的透射率；

(3) 质量 $m=0.10\text{kg}$，以速度 0.50m/s 运动的钢球被尺寸为 $1.0\text{m}\times 1.5\text{m}$ 的窗子所衍射.

解答　(1) 单摆的小幅摆动为简谐振动，其频率为

$$\omega=\sqrt{\frac{g}{l}}$$

谐振子的零点能为 $E=\dfrac{\hbar\omega}{2}$. 设单摆作零点振荡，其振幅为 A. 当单摆振荡位移达到振幅对应的位置时，势能达到最大，等于振荡能量，则

$$\frac{1}{2}m\omega^2A^2=\frac{1}{2}\hbar\omega$$

这给出

$$A=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}=\sqrt{\frac{\hbar}{m}}\sqrt{\frac{l}{g}}=0.58\times10^{-17}\text{m}$$

可见宏观振子的零点振荡实际上是不可能观测到的 (零点振荡的振幅也可通过波函数来计算).

(2) 如果把障碍物的宽度看成是势垒的厚度 a，把子弹透射看成是越过障碍物所设置的重力势垒，则透射概率为

$$T\approx\exp\left\{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m\left(V_0-E\right)}\right\}$$

这里，$V_0=mgH$，$E=mv^2/2$，则

$$\begin{aligned}T&\approx\exp\left\{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m\left(mgH-\frac{mv^2}{2}\right)}\right\}\\&=\exp\left\{-\frac{2ma}{\hbar}\sqrt{2gH-v^2}\right\}\end{aligned}$$

$$\approx \exp\left\{-\frac{2\times 5.0\times 10^{-3}\times 10^{-2}}{1.054\,571\,726(47)\times 10^{-34}}\sqrt{2\times 9.8\times 5.0\times 10^{-2}-0.10^2}\right\}$$
$$\approx \mathrm{e}^{-9.0\times 10^{31}}$$

可见透射概率可以忽略.

(3) 入射钢球的 de Broglie 波长为

$$\lambda=\frac{h}{p}=\frac{h}{mv}=\frac{6.626\,070\,040(81)\times 10^{-34}}{5.0\times 10^{-3}\times 10^{-34}\times 0.10}\approx 1.3\times 10^{-32}(\mathrm{m})$$

方形窗的水平和垂直方向的衍射角分别为

$$\theta_{\mathrm{h}} \approx \frac{\lambda}{D}\approx 1.3\times 10^{-30}\mathrm{rad}$$
$$\theta_{\mathrm{l}} \approx \frac{\lambda}{L}\approx 9.0\times 10^{-31}\mathrm{rad}$$

可见衍射可以忽略.

1.2 基本量的数值估计

题 1.2 用 $\hbar$、 e、 c、 m_{e}(电子质量)、 m_{p}(质子质量) 凑出下列每个量，给出粗略的数值估计：

(1) Bohr 半径 (cm)；　(2) 氢原子结合能 (eV)；　(3) Bohr 磁子；
(4) 电子的 Compton 波长 (cm)；　(5) 经典电子半径 (cm)；
(6) 电子静止能量 (MeV)；　(7) 质子静止能量 (MeV)；　(8) 精细结构常数；
(9) 典型的氢原子精细结构能级分裂.

解答 (1) Bohr 半径[①]

$$a_0=\frac{[4\pi\epsilon_0]\hbar^2}{m_{\mathrm{e}}e^2}=0.529\times 10^{-8}\mathrm{cm}$$

(2) 氢原子结合能

$$E=\frac{m_{\mathrm{e}}e^4}{2[(4\pi\epsilon_0)^2]\hbar^2}=13.605\mathrm{eV}$$

(3) Bohr 磁子

$$\mu_{\mathrm{B}}=\frac{e\hbar[c]}{2m_{\mathrm{e}}c}=9.273\times 10^{-21}\mathrm{erg}\cdot\mathrm{Gs}^{-1}/[5.788\times 10^{-11}\mathrm{MeV}\cdot\mathrm{T}^{-1}]$$

(4) 电子的 Compton 波长

$$\lambda_{\mathrm{c}}=\frac{h}{m_{\mathrm{e}}c}=2\pi\alpha a_0=2.426\times 10^{-10}\mathrm{cm}$$

① 这里看上去不必要的中括号用以对电磁学量同时列出 Gauss 单位制与 SI 制两种表达式，对前者忽略中括号，对后者式中包含中括号中的因子，下面一些地方均与此相同. 在微观物理中，很多时候用 Gauss 制更方便.

(5) 经典电子半径

$$r_{\mathrm{e}}=\alpha^2 a_0=\frac{e^2}{[4\pi\epsilon_0]m_{\mathrm{e}}c^2}=2.818\times10^{-13}\mathrm{cm}$$

(6) 电子静止能量

$$E_{\mathrm{e}}=m_{\mathrm{e}}c^2=0.511\mathrm{MeV}$$

(7) 质子静止能量

$$E_{\mathrm{p}}=m_{\mathrm{p}}c^2=938.272\mathrm{MeV}$$

(8) 精细结构常数

$$\alpha=\frac{e^2}{[4\pi\epsilon_0]\hbar c}=7.297\times10^{-3}\approx1/137$$

(9) 典型的氢原子精细结构能级分裂

$$\Delta E=\alpha^4 m_{\mathrm{e}}c^2=1.8\times10^{-4}\mathrm{eV}$$

1.3　几个重要物理量数值的量级

题 1.3　导出、估计、猜测或背出下列数值，精确到一个数量级范围内.

(1) 电子的 Compton 波长；　(2) μ-子的寿命；　(3) $^7_3$Li 核的磁偶极矩；

(4) 氢原子的电离能；　(5) 自由中子的寿命；　(6) 电子的 Thomson 截面；

(7) 中子和质子质量差；　(8) ^{4}He 核的束缚能；　(9) 最大稳定核的半径；

(10) π^0 介子的寿命；　(11) 氢原子的 Bohr 半径；

(12) 氢原子中基态能级的精细结构能级分裂.

解答　(1) 电子的 Compton 波长

$$\lambda_{\mathrm{c}}=\frac{h}{mc}=2\pi\alpha a_0=2.426\times10^{-10}\mathrm{cm}$$

(2) μ-子衰变是弱相互作用过程，μ-子的寿命

$$\tau=2.2\times10^{-6}\mathrm{s}$$

(3) $^7_3$Li 核 ($Z=3$) 的磁偶极矩

$$\mu=1.67\times10^{-26}\mathrm{J\cdot T^{-1}}$$

(4) 氢原子的电离能

$$E_{\mathrm{c}}=\frac{e^2}{2\times[4\pi\epsilon_0]a}=13.6\mathrm{eV}$$

(5) 自由中子的寿命

$$\tau_{\mathrm{n}}\approx15\mathrm{min}=9.0\times10^2\mathrm{s}$$

(6) 电子的 Thomson 截面

$$\sigma = \frac{8\pi}{3} r_{\mathrm{e}}^2 = 0.665 \times 10^{-28}\mathrm{m}^2$$

(7) 中子和质子质量差

$$\Delta m = m_{\mathrm{n}} - m_{\mathrm{p}} = 2.3 \times 10^{-30}\mathrm{kg} = 1.3\mathrm{MeV}/c^2 = 2.5 m_{\mathrm{e}} \doteq 0.1\% m_{\mathrm{p}}$$

(8) ^{4}He 核的束缚能

$$E = 4 \times 7\mathrm{MeV} = 28\mathrm{MeV}$$

(9) 在核力范围内

$$r = 1.4 A^{1/3}\mathrm{fm} = 1.4 \times (100)^{1/3}\,\mathrm{fm} \approx 6.5\mathrm{fm}$$

即为最大稳定核的半径估算值.

(10) π^0 介子的寿命

$$\tau = 0.828 \times 10^{-16}\mathrm{s}$$

(11) 氢原子的 Bohr 半径

$$a_0 = \frac{[4\pi\epsilon_0]\hbar^2}{me^2} = 0.529 \times 10^{-8}\mathrm{cm}$$

(12) 氢原子中基态能级的精细结构能级分裂

$$\Delta E_{\mathrm{fine}} \approx \alpha^2 E_{\mathrm{c}} \approx 13.6 \times \left(\frac{1}{137}\right)^2 \approx 10^{-4}(\mathrm{eV})$$

而超精细结构能级分裂

$$\Delta E_{\mathrm{super}} \approx \Delta E_{\mathrm{fine}} \times \frac{m_{\mathrm{e}}}{m_{\mathrm{p}}} \approx 10^{-7}\mathrm{eV}$$

1.4　几个重要实验的意义

题 1.4　指出下列实验中，哪些实验表明了辐射场的粒子性？哪些实验主要证明能量交换的量子性？哪些实验主要表明物质粒子的波动性？

(1) 光电效应；(2) 黑体辐射谱；(3) Franck-Hertz 实验；

(4) Davisson-Germer 实验；(5) Compton 散射.

简述理由.

解答　光电效应和 Compton 散射说明了光场的粒子性. 光电效应表明每个光子的能量为 $\hbar\omega$，Compton 散射更进一步说明光子的动量为 h/λ，并且说明光子与物质相互作用时，满足动量守恒与能量守恒.

黑体辐射谱与 Franck-Hertz 实验说明，黑体 (常描述为一谐振子体系) 与辐射场的能量交换过程、电子与原子的碰撞过程，能量交换是量子化的，即原子的能级是量子化的.

Davisson-Germer 实验 (电子在晶体中发生衍射)，则主要表现出电子的波动性，验证了 de Broglie 波长与动量的关系，$\lambda = h/p$.

1.5　电子、中子和光子的 de Broglie 波长

题 1.5　导出光子、非相对论电子和中子的 de Broglie 波长.

解答　对非相对论性自由粒子

$$E=\frac{p^2}{2m} \tag{1.1}$$

这里，p、E 分别是其动量和能量，m 为质量. de Broglie 关系

$$p=\frac{h}{\lambda} \tag{1.2}$$

式中，h 为 Planck 常量. 由上两式可以导出

$$\lambda=\frac{h}{\sqrt{2mE}} \tag{1.3}$$

利用组合常量

$$\begin{aligned} hc &= 6.626\times10^{-34}\mathrm{J\cdot s}\times2.998\times10^{8}\mathrm{m\cdot s^{-1}} \\ &= 1.241\times10^{4}\mathrm{eV\cdot \AA}=12.41\mathrm{keV\cdot \AA} \end{aligned} \tag{1.4}$$

容易验算

$$\begin{aligned} \frac{h}{\sqrt{2m_\mathrm{e}}} &= \frac{hc}{\sqrt{2m_\mathrm{e}c^2}}=12.26\mathrm{\AA\cdot eV^{1/2}} \\ \frac{h}{\sqrt{2m_\mathrm{n}}} &= \frac{hc}{\sqrt{2m_\mathrm{n}c^2}}=0.286\mathrm{\AA\cdot eV^{1/2}} \end{aligned}$$

这样

$$\lambda_\mathrm{e}=\frac{12.26}{\sqrt{E}},\quad \lambda_\mathrm{n}=\frac{0.286}{\sqrt{E}} \tag{1.3$'$}$$

对于光子而言

$$\lambda_\gamma=\frac{c}{\nu}=\frac{hc}{E} \tag{1.5}$$

同样利用组合常量 (1.4)，给出

$$\lambda_\gamma=\frac{1.241\times10^4}{E} \tag{1.5$'$}$$

上面式 (1.3′)与(1.5′)中 E(对 $m\neq0$ 的实物粒子，E 为其动能) 的单位为 eV，λ 的单位是 Å.

1.6　室温下中子、电子热运动 de Broglie 波长

题 1.6　室温 ($T\sim300\mathrm{K}$) 下中子速度为 2200m/s，计算它的 de Broglie 波长；求出同温度下电子速度，计算电子的 de Broglie 波长.

解答　由于题给中子速度远小于光速，故可以用非相对论公式计算其动能

$$\begin{aligned} E_{\mathrm{n}} &= \frac{1}{2}m_{\mathrm{n}}v_{\mathrm{n}}^2 = \frac{1}{2}\times 1.674\,927\,351\times 10^{-27}\times 2200^2\mathrm{J} \\ &\approx 4.05\times 10^{-21}\mathrm{J} \doteq 2.53\times 10^{-2}\mathrm{eV} \end{aligned}$$

其中用到能量单位换算关系，$1\mathrm{eV} = 1.602\,176\,565\times 10^{-19}\mathrm{J}$. 将上面结果代入 de Broglie 关系式，可得

$$\lambda_{\mathrm{n}} = \frac{0.286}{\sqrt{E_{\mathrm{n}}}} = \frac{0.286}{\sqrt{2.53\times 10^{-2}}} \doteq 1.8(\text{Å})$$

同温度下由能量均分定理知电子动能为

$$\begin{aligned} E_{\mathrm{e}} &= \frac{1}{2}m_{\mathrm{e}}v_{\mathrm{e}}^2 = \frac{3}{2}kT = \frac{3}{2}\times 1.380\,6488(13)\times 10^{-23}\times 300\mathrm{J} \\ &\approx 6.21\times 10^{-21}\mathrm{J} \doteq 3.88\times 10^{-2}\mathrm{eV} \end{aligned}$$

其中，$k = 1.380\,6488(13)\times 10^{-23}\mathrm{J}\cdot\mathrm{K}^{-1}$ 称为 Boltzmann 常量. 由上式也可算得电子的速度为

$$v_{\mathrm{e}} = \sqrt{\frac{2E_{\mathrm{e}}}{m_{\mathrm{e}}}} = \sqrt{\frac{3\times 1.380\,6488(13)\times 10^{-23}\times 300}{9.109\,382\,91\times 10^{-31}}} = 1.17\times 10^{5}(\mathrm{m/s})$$

可得电子的 de Broglie 波长

$$\lambda_{\mathrm{n}} = \frac{12.26}{\sqrt{E_{\mathrm{e}}}} = \frac{12.26}{\sqrt{3.88\times 10^{-2}}} \doteq 62(\text{Å})$$

1.7　电子的双缝干涉

题 1.7　考虑如下实验：一束准平面波电子射向刻有 A、B 两缝的平板，板外是一装有检测器阵列的屏幕. 利用检测器能定出电子撞击屏幕的位置. 在下列各种情形下，画出入射电子强度随屏幕位置变化的草图，给出简单解释.

(1) A 缝开启，B 缝关闭；

(2) B 缝开启，A 缝关闭；

(3) 两缝均开启；

(4) 将 Stern-Gerlach 装置连在缝上，使得只有 $S_x = \frac{1}{2}\hbar$ 电子能通过 A，同时只有 $S_x = -\frac{1}{2}\hbar$ 电子能通过 B；

(5) 只有 $S_x = \frac{1}{2}\hbar$ 电子能通过 A，同时只有 $S_x = \frac{1}{2}\hbar$ 电子能通过 B. 如果使束流强度低到在任一时刻只有一个电子能通过该装置，结果有什么变化?

解答　(1)~(3) 三种情形电子强度随屏幕位置变化的示意图分别如图 1.1(1)~(3) 所示 (为了视觉上明显起见，图中缝宽和双缝间距都夸大了；同时为了视觉上谐调起见，第 (3) 图双缝干涉随屏幕位置变化图的强度坐标与其余三个强度随屏幕位置变

化图相比缩小了 4 倍). (4)、(5) 两种情形电子强度随屏幕位置变化的示意图分别如图 1.2(4)~(5) 所示.

(1) 当 A 缝单独开启时，屏幕上的电子强度分布 $P_{\mathrm{A}}(x)$ 为电子 de Broglie 波在 A 缝的单缝衍射强度分布；

(2) 同理，B 缝单独开启时，屏幕上形成 B 缝的电子单缝衍射强度分布 $P_{\mathrm{B}}(x)$；

(3) 两缝同时开启时，屏幕上的电子强度分布 $P_{\mathrm{AB}}(x)$ 并非前两种情况强度分布的简单叠加，而是出现了干涉效应，即 $P_{\mathrm{A}}(x)+P_{\mathrm{B}}(x)+$干涉项，从而显示出电子的波动性；

(4) 通过缝 A 的电子和通过缝 B 的电子处于不同的自旋本征态，无干涉项，屏上得到两单缝情况的强度叠加；

(5) 同 (3)，但强度减少一半.

由于电子波函数的自身干涉，对入射强度弱到单电子情形，各种情况结果不变.

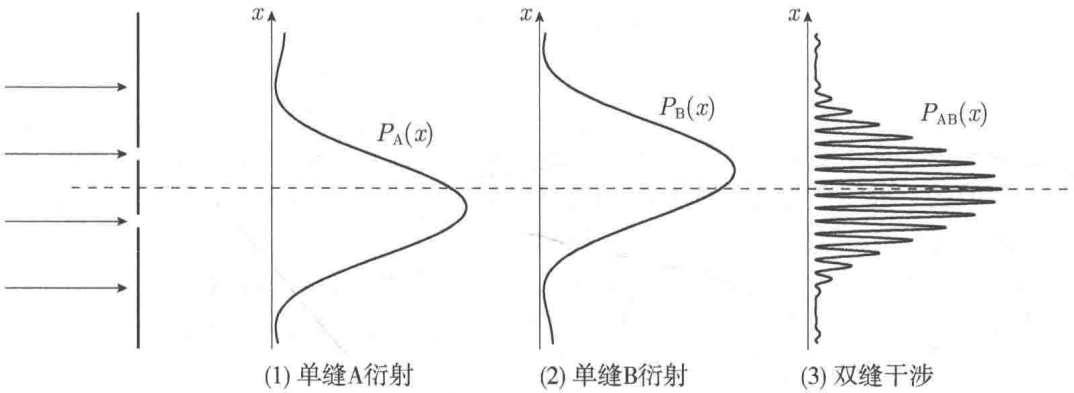


图 1.1　电子强度随屏幕位置变化的示意图 (I)

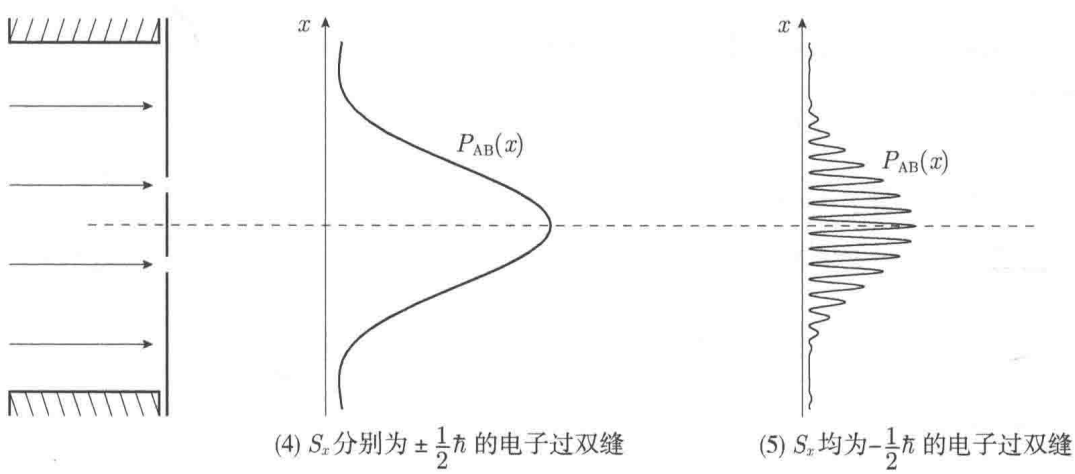


图 1.2　电子强度随屏幕位置变化的示意图 (II)

说明　Young 双缝实验是量子力学中最初的、最普通的、最著名的、最奇特的实

验，也是最富于量子力学味道的实验. 该实验深刻地蕴含着微观粒子的内禀性——波动性和粒子性，同时也涉及到对态的相干性和对微观粒子测量的初步理解. 这是不可多得的展现量子物理内涵的实验，堪称理解量子力学本质的关键，应是初学量子力学的“过关”实验. 对该实验（包括各种翻版）的讲解和讨论参见张永德，量子菜根谭 -量子理论专题分析，北京：清华大学出版社，第 3 版，2016 年 11 月，§ 1,P.1-14.

1.8　原子的稳定性

题 1.8　在量子力学产生之前，一个大的理论问题是如何防止原子发光，解释之. 在量子力学创立之后，一个大的理论问题是如何使处于激发态的原子发光，解释之. 什么使激发态发光?

解答　在量子力学产生之前，根据原子的行星模型，电子一般绕核做椭圆运动，由经典电动力学知，加速运动的带电粒子必伴随着辐射，也即原子一定发光. 这时电子不断损失能量，最后要落到核上，但事实是电子并不落到核上，基态原子稳定并不发光.

在量子力学产生之后，根据量子力学基本原理，若无外界作用，原子的 Hamilton 量是不含时的，处于激发态 (仍是定态) 的原子应永远处于该激发态，即处于激发态的原子不会自行发光. 但实际上原子会自发辐射.

根据量子电动力学，辐射场和原子中的电子形成两个量子力学系统，它们之间的相互作用包含了单光子产生算子 $a^\dagger$ 项，该项即使在初始无光子时也不为零. 正是这种相互作用使激发态原子发光，产生自发辐射.

1.9　光子衰变

题 1.9　一个 γ 光子在经过一个原子核 N 附近时，有可能衰变成为正负电子对

$$\gamma + \mathrm{N} \longrightarrow \mathrm{N} + \mathrm{e}^+ + \mathrm{e}^-$$

试求该光子的能量下限和波长上限.

解答　γ 光子的能量下限为

$$E_{\min} = 2m_{\mathrm{e}}c^2 = 2 \times 0.511\mathrm{MeV} = 1.022\mathrm{MeV}$$

其波长上限为

$$\lambda_{\max} = \frac{hc}{E_{\min}} = \frac{1.241 \times 10^4}{1.022 \times 10^6}\text{Å} = 0.012\text{Å}$$

上面过程的逆过程 $\mathrm{N} + \mathrm{e}^+ + \mathrm{e}^- \longrightarrow \gamma + \mathrm{N}$ 也可能发生，正负电子对湮灭，产生一个光子，但是这个过程发生的概率很小.

1.10　电子偶素的衰变

题 1.10　电子偶素 (e^+,e^-) 是由正负电子对形成的一个不稳定的束缚体系. 体系总自旋 $S=1$ 称为正电子偶素，其寿命是 1.4×10^{-7}s，湮灭表现为发射三个光子，体系总自旋 $S=0$ 的，称为仲电子偶素，其寿命为 1.25×10^{-10}s，湮灭转化为两个光子. 求过程 $e^+e^-\longrightarrow 2\gamma$ 产生的光子的最小能量.

解答　由能量守恒定律

$$2m_ec^2=E_{\gamma1}+E_{\gamma2}$$

由动量守恒定律

$$0=p_{\gamma1}+p_{\gamma2}$$

因为光量子能量 $E_\gamma=p_\gamma c$，解上面方程组得到

$$E_{\gamma1}=E_{\gamma2}=m_ec^2=0.511\text{MeV}$$

1.11　光的折射与最小作用量原理

题 1.11　(1) 试用 Fermat 最短光程原理导出光的折射定律：$n_1\sin\alpha_1=n_2\sin\alpha_2$(见图 1.3)；

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

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

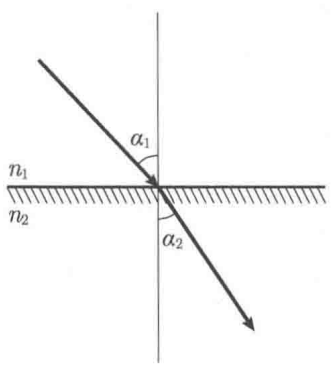


图 1.3　光在不同介质界面上的折射

解答　(1) 由 Fermat 最短光程原理知光线在同一均匀各向同性介质中沿直线传播. 因此光线从介质 I(折射率设为 n_1) 的一点 A 传播到介质 II(折射率设为 n_2) 的一点

B 走的路程是两段直线. 我们将根据 Fermat 最短光程原理确定光线与两种介质分解面 S 的交点 P.

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

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

$$l=n_1|AP|+n_2|BP|=n_1a\sec\alpha_1+n_2b\sec\alpha_2 \tag{1.6}$$

由于 A、B 都是确定点，因此若过 A、B 点向平面 S 作垂线，垂足分别为 A'、B'，则 $|A'B'|=c$ 为常数，即有

$$a\tan\alpha_1+b\tan\alpha_2=c \tag{1.7}$$

为常数. Fermat 最短光程原理要求式 (1.6) 中 l 最小，即有

$$0=\delta l=n_1a\delta\sec\alpha_1+n_2b\delta\sec\alpha_2=n_1a\sec\alpha_1\tan\alpha_1\delta\alpha_1+n_2b\sec\alpha_2\tan\alpha_2\delta\alpha_2 \tag{1.8}$$

再对式 (1.7) 求微分得

$$a\sec^2\alpha_1\delta\alpha_1+b\sec^2\alpha_2\delta\alpha_2=0 \tag{1.9}$$

式 (1.8)、(1.9) 消去 $\delta\alpha_1$、$\delta\alpha_2$ 即得

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

即为折射定律的第二个内容的 Snell 定律.

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

$$v_{\mathrm{p}}=\frac{c}{n}$$

(n 为介质的折射率) 混淆，此处认为 $v=v_{\mathrm{p}}$ 是造成错误的根源.

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

波的相速 v_{p} 为

$$v_{\mathrm{p}}=\frac{\omega}{k} \tag{1.10}$$

而波包的群速 v_{g} 为

$$v_{\mathrm{g}}=\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k} \tag{1.11}$$

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

$$v=\frac{\partial H}{\partial p} \tag{1.12}$$

对于光波而言，色散关系为

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

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

$$v_{\mathrm{p}}=v_{\mathrm{g}}$$

但在介质中，通常 n 与频率 ω 有关. 此时

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

故一般

$$v_{\mathrm{g}}=\frac{v_{\mathrm{p}}}{1+\dfrac{ck}{n^2}\dfrac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}\omega}}\neq v_{\mathrm{p}}$$

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

$$p=\frac{h}{\lambda},\quad E=h\nu \tag{1.13}$$

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

对于自由运动的实物粒子，题 1.12 对几个速度进行了讨论，给出

$$v_{\mathrm{p}}=\frac{c^2}{v},\quad v_{\mathrm{g}}=v<c<v_{\mathrm{p}} \tag{1.14}$$

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

在题述论证中，错误地认为粒子运动的速度 v 总是与相应的 de Broglie 波的相速 v_{p} 相等，才未能导出正确的折射定律.

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

$$\delta\int p\mathrm{d}l=0 \tag{1.15}$$

其中，p 由式 (1.13) 给出，而介质中光波的波长 λ 与介质折射率 n 之间的关系为

$$\lambda=\frac{\lambda_0}{n} \tag{1.16}$$

式中，λ_0 为光在真空中的波长. 因此介质中光子动量为

$$p=\frac{nh}{\lambda_0} \tag{1.17}$$

它和介质折射率成正比而非成反比. 将式 (1.17) 代入式 (1.15) 可得

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

也就是

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

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

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

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

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

1.12　de Broglie 波的相速度和群速度

题 1.12　试确定与 de Broglie 波长 $\lambda=\dfrac{h}{p}$ 相应的波的相速度 v_p 和群速度 v_g.

解答　粒子的能量、动量如下给出:

$$E=\sqrt{m^2c^4+p^2c^2}=mc^2/\sqrt{1-v^2/c^2} \tag{1.18}$$

以及

$$p=mv/\sqrt{1-v^2/c^2}=Ev/c^2 \tag{1.19}$$

按 de Broglie 关系，物质波的频率、波数分别为

$$k=\frac{p}{\hbar},\quad \omega=\frac{E}{\hbar} \tag{1.20}$$

因而 de Broglie 波的相速度为

$$v_\mathrm{p}=\frac{\omega}{k}=\frac{E}{p}=\frac{c^2}{v} \tag{1.21}$$

因为 $v<c$，故相速度 $v_\mathrm{p}>c$. 式 (1.18)、(1.20) 给出 de Broglie 如下色散关系:

$$\omega(k)=\frac{1}{\hbar}\sqrt{\frac{m^2c^4}{\hbar^2}+c^2k^2} \tag{1.22}$$

从而得物质波的波包群速度为

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

再由式 (1.18)、(1.20) 以及式 (1.19) 即得

$$v_{\mathrm{g}}=\frac{c^2p}{\sqrt{m^2c^4+c^2p^2}}=\frac{c^2p}{E}=v \tag{1.23}$$

可见 de Broglie 波的群速与粒子速度相等.

说明　和一个运动粒子相伴随的 de Broglie 波是用与之联系的由无数平面波叠加而成的一个波包来描述的. 每一个平面波都以相速度运动，相速度可以超过光速. 但是单个的相速度是观测不到的，可观测的量是局部扰动的速度，即群速度，这个速度就是通常所说的粒子的速度，它总小于光速.

1.13　考虑相对论修正后电子的 de Broglie 波长

题 1.13　电子被加速后的速度很大，必须考虑相对论修正，则原来 $\lambda=\dfrac{12.25}{\sqrt{V}}$Å 的电子的 de Broglie 波长与加速电压 V 的关系式应改为

$$\lambda=\frac{12.25}{\sqrt{V}}(1-0.489\times10^{-6}V)\text{Å}$$

式中，V 为以伏特为单位的电子加速电压. 试证明之.

解答　在非相对论情况下，若电子被电势差为 V 的电场加速，则 de Broglie 波长为

$$\lambda=\frac{h}{p}=\frac{h}{\sqrt{2mE}}=\frac{h}{\sqrt{2meV}}\approx\frac{12.25}{\sqrt{V}}\text{Å}$$

考虑相对论效应后，由能量 – 动量关系式

$$E^2=(K+m_0c^2)^2=(pc)^2+(m_0c^2)^2$$

式中，$K=eV$ 为电子的动能；m_0 为电子的静质量，有

$$pc=\left[2m_0c^2K\left(1+\frac{K}{2m_0c^2}\right)\right]^{1/2}$$

所以

$$\begin{aligned}\lambda&=\frac{h}{p}=\frac{hc}{pc}=\frac{h}{\sqrt{2m_0eV}}\cdot\left(1+\frac{eV}{2m_0c^2}\right)^{-1/2}\\&=\frac{12.25}{\sqrt{V}}\cdot\left(1+\frac{eV}{2m_0c^2}\right)^{-1/2}\end{aligned} \tag{1.24}$$

因为 $\dfrac{eV}{2m_0c^2} \ll 1$，可将式 (1.24)中的 $\left(1+\dfrac{eV}{2m_0c^2}\right)^{-1/2}$ 用二项式定理展开，只取前两项得

$$\left(1+\frac{eV}{2m_0c^2}\right)^{-1/2} \approx 1-\frac{eV}{4m_0c^2}$$

再代入式 (1.24)，即得

$$\lambda = \frac{12.25}{\sqrt{V}}(1-0.489\times 10^{-6}V)\text{Å}$$

1.14 de Broglie 波长的计算

题 1.14 (1) 试求质量为 0.010kg，速度为 10m/s 的一个小球的 de Broglie 波长；
(2) 经过 10000V 电压加速的电子的 de Broglie 波长；
(3) 经过 10000V 电压加速的质子的 de Broglie 波长；
(4) 试计算 0.050eV 中子的 de Broglie 波长.

解答 (1) 该小球的 de Broglie 波长为

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \approx 6.63\times 10^{-33}\text{m} = 6.63\times 10^{-23}\text{Å}$$

这说明，实物粒子的 de Broglie 波长太小，宏观世界中的任何物体的线度都比它大得多，故难以观测到实物粒子的波动性.

(2) 该电子的 de Broglie 波长为

$$\lambda_\text{e} = \frac{h}{p_\text{e}} = \frac{h}{\sqrt{2m_\text{e}E}} = \frac{h}{\sqrt{2m_\text{e}eV}} \approx 0.12\times 10^{-10}\text{m} = 0.12\text{Å}$$

这表明，电子的 de Broglie 波长能与晶体的原子间距相比拟，故晶体的电子衍射实验能够显示电子的波长.

(3) 质子的静质量为 $m_\text{p}c^2 \approx 9.39\times 10^8\text{eV}$，当质子获得动能时，相应的 de Broglie 波长可用非相对论性关系式得出

$$\lambda_\text{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_\text{p}eV}} \approx 2.9\times 10^{-13}\text{m} = 0.0029\text{Å}$$

(4) 由于中子的动能远小于它的静止能量，故可以利用非相对论性关系式计算

$$\lambda_\text{n} = \frac{h}{\sqrt{2m_\text{n}E_\text{k}}} \approx 1.28\times 10^{-10}\text{m} = 1.28\text{Å}$$

式中，m_n 为中子的质量；E_k 为其动能. 数量级为Å的这种常用波长在慢中子物理中用起来非常方便.

1.15　电子显微镜的分辨率

题 1.15　如果我们需要观测一个大小为 2.5Å 的物体，可用的光子的最小能量是多少？若把光子改为电子呢？

解答　为了发生散射，光波的波长必须与所观测物体的大小同数量级或者更小. 所以，在这个问题中我们能够采用的光的最大波长为 2.5Å，这样相应的光子的最小能量就为

$$E_{\min}=h\nu_{\min}=\frac{hc}{\lambda_{\max}}\approx 4.96\times 10^{3}\mathrm{eV}$$

若把光子改为电子，则最大电子的波长 $\lambda'_{\max}=2.5$Å，按照非相对论性计算

$$p=\sqrt{2m_{\mathrm{e}}E}$$

因此

$$\lambda=\frac{h}{p}=\frac{h}{\sqrt{2m_{\mathrm{e}}E_{\mathrm{k}}}}$$

则

$$E_{\mathrm{k}}=\frac{h^2}{2m_{\mathrm{e}}\lambda_{\max}^2}\approx 24.1\ \mathrm{eV}$$

由此可以看出，对于给定的能量，电子具有比光子高得多的分辨率. 正因为如此，电子显微镜能够有比光学显微镜更高的放大率.

1.16　波函数的归一化

题 1.16　讨论以下波函数的归一化问题：

(1) 粒子在一维无限深势阱中运动，设 $\psi(x)=A\sin\dfrac{\pi x}{a}(0\leqslant x\leqslant a)$，求 A 使波函数归一；

(2) 设 $\psi(x)=A\exp\left\{-\dfrac{1}{2}\alpha^2x^2\right\}$，$\alpha$ 为已知实常数，求归一化常数 A；

(3) 设 $\psi(x)=\exp\{\mathrm{i}kx\}$，粒子的位置概率分布如何？能否归一？

(4) 设 $\psi(x)=\delta(x)$，粒子的位置概率分布如何？能否归一？

解答　(1) 由于在全空间 (一维) 发现粒子的概率为 1，应有

$$\int\psi^*(x)\psi(x)\,\mathrm{d}x=\int_0^a|A|^2\left(\sin\frac{\pi x}{a}\right)^2\mathrm{d}x=1$$

由此可得 $|A|^2=\dfrac{2}{a}$. 不妨取 A 为正实数，则 $A=\sqrt{\dfrac{2}{a}}$.

(2) 同理有

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|A|^2\exp\left(-\alpha^2x^2\right)\mathrm{d}x=1$$

完成 Gauss 积分得

$$|A|^2=\sqrt{\frac{\alpha^2}{\pi}}$$

不妨取 A 为正实数，则 $A=\sqrt[4]{\dfrac{\alpha^2}{\pi}}$.

(3) 相对概率密度 $p(x)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}=1$，即在空间中任何位置处处相等，为等概率分布.

若沿用上面的方法来求归一化系数，则会出现

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|A|^2\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{+\infty}|A|^2\,\mathrm{d}x=\infty\cdot|A|^2$$

可见波函数不满足平方可积. 因此波函数不能有限归一，只能按照 Dirac 所建议的如下归一到 δ-函数:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{2\pi}\exp\left(-\mathrm{i}k'x\right)\exp\left(\mathrm{i}kx\right)\mathrm{d}x=\delta\left(k-k'\right)$$

(4) $\psi(x)=\delta(x-x_0)$ 是粒子的位置本征函数，此波函数描述的粒子的位置概率分布为

$$P(x)=\begin{cases}1, & x=x_0\\ 0, & x\neq x_0\end{cases}$$

即在 $x=x_0$ 处可测得粒子，在其他位置测不到粒子. 位置本征函数复数平方在全空间的积分为

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta\left(x-x_0\right)\delta\left(x-x_0\right)\mathrm{d}x=\delta\left(0\right)\to\infty$$

可见波函数不满足平方可积. 因此波函数不能有限归一，也只能如下归一到 δ-函数:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta\left(x-x_0\right)\delta\left(x-x_0'\right)\mathrm{d}x=\delta\left(x_0-x_0'\right)$$

1.17　粒子的径向和角向分布

题 1.17　设在球坐标中，粒子波函数为 $\psi(r,\theta,\varphi)$，试求:

(1) 在球壳 $(r,r+\mathrm{d}r)$ 中找到粒子的概率;

(2) 在 (θ,φ) 方向的立体角 $\mathrm{d}\Omega$ 中找到粒子的概率.

解答　(1) 设题目所给的波函数 $\psi(r,\theta,\varphi)$ 在全空间平方可积，也就是

$$\int|\psi(r,\theta,\varphi)|^2r^2\mathrm{d}r\mathrm{d}\Omega=\mathscr{N}^2<+\infty$$

这里，$\mathscr{N}^2$ 为题给波函数的模平方. 这样在球壳 $(r,r+\mathrm{d}r)$ 中找到粒子的概率为

$$\mathrm{d}p(r)=\frac{1}{\mathscr{N}^2}\left(\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}|\psi(r,\theta,\varphi)|^2\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi\right)r^2\mathrm{d}r$$

(2) 在 (θ,φ) 方向的立体角 $\mathrm{d}\Omega$ 中找到粒子的概率为

$$\mathrm{d}p(\theta,\varphi)=\frac{1}{\mathscr{N}^2}\left(\int_0^{\infty}|\psi(r,\theta,\varphi)|^2\,r^2\mathrm{d}r\right)\mathrm{d}\Omega$$

1.18　验证不确定性关系

题 1.18　对下列波函数所描述的粒子，分别求出位置和动量的不确定度，并验证不确定性关系：

(1) 平面波 $\psi(x)=\exp\{\mathrm{i}kx\}$；

(2) 位置本征态 $\psi(x)=\delta(x-x_0)$；

(3) Gauss 型波包 $\psi(x)=\exp\left\{-\dfrac{1}{2}\alpha^2x^2\right\}$；

(4) $\psi(x)=\dfrac{1}{\sqrt{L}}\exp\left(-\dfrac{|x|}{L}\right)$.

提示　注意 (4) 中 $\psi(x)$ 在 $x=0$ 处性状. 最好避免直接求其二阶导数.

解答　(1) 力学量 Ω 的不确定度，指 Ω 在某一量子态 ψ 下的不确定度

$$\Delta_\psi\Omega=\sqrt{\langle\Omega^2\rangle_\psi-\langle\Omega\rangle_\psi^2} \tag{1.25}$$

其中，$\langle\Omega\rangle_\psi=\int\psi^*(x)\,\Omega\psi(x)\,\mathrm{d}x$，并且假设 ψ 已经归一化. 按不确定性关系，力学量 Ω_1、Ω_2 在 ψ 态下的不确定度满足

$$(\Delta_\psi\Omega_1)(\Delta_\psi\Omega_2)\geqslant\left|\frac{1}{2}\langle[\Omega_1,\Omega_2]\rangle_\psi\right| \tag{1.26}$$

平面波 $\exp\{\mathrm{i}kx\}$ 是动量 $p=k/\hbar$ 的本征态，此波函数描述的粒子具有确定的动量 p，所以动量的期望值也为 p，均方偏差 $\Delta_\psi p=0$.

再求 $\langle\hat{x}\rangle_\psi$、$\langle\hat{x}^2\rangle_\psi$. 由于相对概率密度 $p(x)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}=1$，即在空间中任何位置处处相等，为等概率分布. 对任意的 x，必有一等概率的 $-x$，所以

$$\langle\hat{x}\rangle_\psi=0 \tag{1.27}$$

由于平面波 $\exp\{\mathrm{i}kx\}$ 不是平方可积，难以用通常函数表示粒子空间位置绝对概率分布. 为计算 $\langle\hat{x}^2\rangle_\psi$，我们采用变通的办法. 先对箱归一化波函数计算，再令箱子趋于无穷大. 此时取波函数在 $-L\leqslant x\leqslant L$ 上等概率分布，绝对概率为 $p=1/(2L)$，因而

$$\left\langle\hat{x}^2\right\rangle_{\psi,L}=\int_{-L}^{L}\frac{1}{2L}x^2\mathrm{d}x=\frac{1}{3}L^2 \tag{1.28}$$

因而

$$\left\langle\hat{x}^2\right\rangle_\psi=\lim_{L\to\infty}\left\langle\hat{x}^2\right\rangle_{\psi,L}=\lim_{L\to\infty}\frac{1}{3}L^2\to\infty \tag{1.29}$$

可见 $\langle\hat{x}^2\rangle_\psi$ 为二阶无穷大. 故有 $\Delta_\psi x=\infty$.

此时 $(\Delta_\psi\hat{x})(\Delta_\psi\hat{p})$ 为零乘以无穷大的不定型.

(2) 与第 (1) 小题类似，$\delta(x-x_0)$ 是位置的本征态，其本征值为 x_0，处于这种量子态的粒子具有确定的位置 x_0，所以有 $\Delta_\psi x=0$.

对于 $\langle p\rangle_\psi$ 与 $\langle p^2\rangle_\psi$，可转到动量空间求解，

$$\psi(k)=\int\delta(x-x_0)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{d}x=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx_0} \tag{1.30}$$

这与坐标表象平面波的波函数形式相同. 故按前面结果写出

$$\langle \hat{p} \rangle_\psi = 0 \tag{1.31}$$

而 $\langle \hat{p}^2 \rangle_\psi$ 为二阶无穷大. 故有 $\Delta_\psi p = \infty$.

注意　动量本征态与位置本征态是两种理想模型，是真实的物理波包无限展宽和无限压缩的两种极限结果. 它们是有用的概念，但并非是物理上真实的量子状态.

(3) 因为 $\langle \hat{x} \rangle_\psi$、$\langle \hat{p} \rangle_\psi$ 的积分式中被积函数为奇函数，故在 $-\infty \to +\infty$ 范围内的积分给出

$$\langle \hat{x} \rangle_\psi = \langle \hat{p} \rangle_\psi = 0 \tag{1.32}$$

下面求 $\langle \hat{x}^2 \rangle_\psi$、$\langle \hat{p}^2 \rangle_\psi$. 将题给波函数归一化，

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

这样

$$\langle \hat{x}^2 \rangle_\psi = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int \mathrm{e}^{-\alpha^2 x^2} x^2 \mathrm{d}x = \frac{1}{2\alpha^2} \tag{1.33}$$

其中，用到了积分公式 (A.2). 而

$$\begin{aligned} \langle \hat{p}^2 \rangle_\psi &= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int \mathrm{e}^{-\alpha^2 x^2/2} \left(-\hbar^2 \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} \right) \mathrm{e}^{-\alpha^2 x^2/2} \mathrm{d}x \\ &= \frac{\alpha\hbar^2}{\sqrt{\pi}} \int \left[-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \mathrm{e}^{-\alpha^2 x^2/2} \right]^2 \mathrm{d}x = \frac{\alpha^5 \hbar^2}{\sqrt{\pi}} \int \mathrm{e}^{-\alpha^2 x^2} x^2 \mathrm{d}x \\ &= \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2} \end{aligned} \tag{1.34}$$

所以有 $(\Delta_\psi \hat{x})(\Delta_\psi \hat{p}) = \hbar/2$. 因此称 $\psi(x) = \sqrt[4]{\frac{\alpha^2}{\pi}} \exp\left\{ -\frac{1}{2}\alpha^2 x^2 \right\}$ 为最小不确定波包.

(4) 同样因为被积函数为奇函数，在 $-\infty \to +\infty$ 范围内的积分给出 $\langle \hat{x} \rangle_\psi = 0$. 而

$$\langle \hat{x}^2 \rangle_\psi = \frac{1}{L} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-2x/L} x^2 \mathrm{d}x = \frac{2}{L} \int_0^\infty \mathrm{e}^{-2x/L} x^2 \mathrm{d}x = \frac{L^2}{2} \tag{1.35}$$

故有 $(\Delta_\psi \hat{x}) = \dfrac{L}{\sqrt{2}}$.

下面求 $(\Delta_\psi \hat{p})$. 因为

$$\frac{\partial}{\partial x} \mathrm{e}^{-|x|/L} = \left[\frac{1}{L} - \frac{2}{L}\theta(x) \right] \mathrm{e}^{-|x|/L} \tag{1.36}$$

其中

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}$$

为阶跃函数，有关系式

$$\delta(x)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\theta(x)$$

故有

$$\frac{\partial}{\partial x}\mathrm{e}^{-|x|/L}=-\frac{2}{L}\delta(x)\mathrm{e}^{-|x|/L}+\frac{1}{L^2}\mathrm{e}^{-|x|/L}$$

因此

$$\begin{aligned}\langle\hat{p}\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{\sqrt{L}}\mathrm{e}^{-|x|/L}\left[-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right]\frac{1}{\sqrt{L}}\mathrm{e}^{-|x|/L}\mathrm{d}x\\ &= -\mathrm{i}\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{L}\mathrm{e}^{-|x|/L}\left[\frac{1}{L}-\frac{2}{L}\theta(x)\right]\mathrm{e}^{-|x|/L}\mathrm{d}x=0\end{aligned}\tag{1.37}$$

并有

$$\begin{aligned}\langle\hat{p}^2\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{L}\mathrm{e}^{-|x|/L}\left(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\mathrm{e}^{-|x|/L}\mathrm{d}x\\ &= -\hbar^2\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{L}\left[\frac{2}{L}\delta(x)-\frac{1}{L^2}\right]\mathrm{e}^{-|x|/L}\mathrm{d}x\\ &= \frac{2\hbar^2}{L}|\psi(0)|^2-\frac{\hbar^2}{L^2}=\frac{\hbar^2}{L^2}\end{aligned}\tag{1.38}$$

因而

$$(\Delta_\psi\hat{p})=\frac{\hbar}{L}\tag{1.39}$$

由上面计算可知 $(\Delta_\psi\hat{x})(\Delta_\psi\hat{p})=\dfrac{\hbar}{\sqrt{2}}>\dfrac{\hbar}{2}$.

说明　第 (3)、(4) 小题对 $(\Delta_\psi\hat{p})$ 也可以转到动量空间求解. 如对于第 (4) 小题，先求动量空间波函数

$$\begin{aligned}\psi(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar L}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-|x|/L}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}x=\frac{2}{\sqrt{2\pi\hbar L}}\int_0^{\infty}\mathrm{e}^{-x/L}\cos\left(\frac{p}{\hbar}x\right)\mathrm{d}x\\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar L}}\frac{2/L}{p^2/\hbar^2+1/L^2}\end{aligned}$$

从而 $\langle\hat{p}\rangle=0$，并有

$$\langle\hat{p}^2\rangle=\frac{1}{2\pi\hbar L}\int_0^{\infty}\left(\frac{2/L}{p^2/\hbar^2+1/L^2}\right)^2p^2\mathrm{d}p=\frac{\hbar^2}{L^2}$$

上面利用了积分公式

$$\int\frac{\mathrm{d}x}{(a^2+x^2)^n}=\begin{cases}\dfrac{1}{a}\arctan\dfrac{x}{a}, & n=1\\ \dfrac{x}{2(n-1)a^2(a^2+x^2)^{n-1}}+\dfrac{2n-3}{2(n-1)a^2}\displaystyle\int\frac{\mathrm{d}x}{(a^2+x^2)^{n-1}}, & n>1\end{cases}$$

同样给出 $(\Delta_\psi\hat{p})=\dfrac{\hbar}{L}$.

1.19　利用不确定性关系估算无限深方势阱中粒子的基态能量

题 1.19　利用不确定性关系估计无限深势阱中粒子的基态能量，设阱宽为 a，粒子质量为 m.

解答　因为对基态波函数有 $\bar{x}=\bar{p}=0$，因而坐标、动量的涨落

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

粒子在阱宽为 a 的无限深势阱中运动，作为估算我们取 $\Delta x\sim a$，代入不确定性关系

$$\Delta p\cdot\Delta x\geqslant\frac{\hbar}{2}$$

给出 $\Delta p\geqslant\dfrac{\hbar}{2a}$，这时基态能量为

$$E_0=\frac{\overline{p^2}}{2m}=\frac{(\Delta p)^2}{2m}\sim\frac{\hbar^2}{8ma^2}$$

1.20　给定一维运动粒子的波函数做有关计算

题 1.20　一维运动的粒子处于如下波函数:

$$\psi(x)=\begin{cases}Ax\mathrm{e}^{-\lambda x}, & x\geqslant 0\\ 0, & x<0\end{cases}$$

描述的状态，其中 $\lambda>0$，A 为待求的归一化常数，试求:

(1) 粒子坐标的概率分布函数;

(2) 粒子坐标的期望值 $\bar{x}$ 和粒子坐标平方的期望值 $\overline{x^2}$;

(3) 粒子动量的概率分布函数;

(4) 粒子动量的期望值 $\bar{p}$ 和粒子动量平方的期望值 $\overline{p^2}$;

(5) 验证不确定性关系 $\overline{(\Delta\hat{x})^2}\cdot\overline{(\Delta\hat{p})^2}>\dfrac{\hbar^2}{4}$.

解答　先对题给波函数 $\psi(x)$ 进行归一化. 此波函数的归一化条件

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

即为

$$\int_0^{\infty}|A|^2x^2\mathrm{e}^{-2\lambda x}\mathrm{d}x=\frac{|A|^2}{4\lambda^3}=1$$

A 可以取为正数，由此得

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

于是

$$\psi(x)=\begin{cases}2\lambda^{3/2}x\mathrm{e}^{-\lambda x}, & x\geqslant 0\\ 0, & x<0\end{cases}$$

(1) 粒子坐标的概率分布函数为

$$\rho(x)=|\psi(x)|^2=\begin{cases}4\lambda^3x^2\mathrm{e}^{-2\lambda x}, & x\geqslant 0\\ 0, & x<0\end{cases}$$

(2) 坐标的期望值为

$$\bar{x}=\int_{-\infty}^{+\infty}x\rho(x)\mathrm{d}x=\int_0^{\infty}4\lambda^3x^3\mathrm{e}^{-2\lambda x}\mathrm{d}x=\frac{3}{2\lambda}$$

坐标平方的期望值为

$$\overline{x^2}=\int_{-\infty}^{+\infty}x^2\rho(x)\mathrm{d}x=\int_0^{\infty}4\lambda^3x^4\mathrm{e}^{-2\lambda x}\mathrm{d}x=\frac{3}{\lambda^2}$$

(3) 粒子动量表象波函数

$$\begin{aligned}c(p) &= (2\pi\hbar)^{-1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{d}x=\lambda^{3/2}(2\pi\hbar)^{-1/2}\int_0^{\infty}x\mathrm{e}^{-(\lambda+\mathrm{i}p/\hbar)x}\mathrm{d}x\\ &= 2\lambda^{3/2}(2\pi\hbar)^{-1/2}\left(\lambda+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p\right)^{-2}\end{aligned}$$

所以粒子的概率分布函数为

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

(4) 动量的期望值为

$$\begin{aligned}\bar{p} &= \int_{-\infty}^{+\infty}p|c(p)|^2\mathrm{d}p=\frac{2\lambda^3\hbar^3}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{p}{(\lambda^2\hbar^2+p^2)^2}\mathrm{d}p\\ &= -\frac{\lambda^3\hbar^3}{\pi(\lambda^2\hbar^2+p^2)}\Bigg|_{-\infty}^{+\infty}=0\end{aligned}$$

动量平方的期望值为

$$\begin{aligned}\overline{p^2} &= \int_{-\infty}^{+\infty}p^2|c(p)|^2\mathrm{d}p\\ &= \frac{2\lambda^3\hbar^3}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{p^2}{(\lambda^2\hbar^2+p^2)^2}\mathrm{d}p=\lambda^2\hbar^2\end{aligned}$$

(5) 不确定性关系为

$$(\Delta\hat{x})^2(\Delta\hat{p})^2=\left(\overline{x^2}-\bar{x}^2\right)\left(\overline{p^2}-\bar{p}^2\right)=\left[\frac{3}{\lambda^2}-\left(\frac{3}{2\lambda}\right)^2\right]\lambda^2\hbar^2=\frac{3}{4}\hbar^2>\frac{\hbar^2}{4}$$

1.21　自由粒子动量和动能期望值的计算

题 1.21　设 $t=0$ 时自由粒子的状态为 $\psi(x)=A\left(\sin^2 kx+\dfrac{1}{2}\cos kx\right)$，求此时粒子的平均动量和平均动能.

解答　此题不能直接套用动量的期望值公式计算

$$\bar{p}=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)\hat{p}\psi(x)\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)\left(\frac{h}{\mathrm{i}}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\psi(x)\mathrm{d}x \tag{1.40}$$

因为式 (1.40)的适用条件要求体系的状态波函数必须是已归一化，首先要求平方可积的一个必要条件是

$$\psi(x)\xrightarrow{|x|\to\infty}0 \tag{1.41}$$

而题给出的态显然不满足条件 (1.41)，故不能直接用式 (1.40)计算. 此题可用如下两种解法求解.

解法一　利用三角函数公式

$$\sin kx=\frac{1}{2\mathrm{i}}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}),\quad \cos kx=\frac{1}{2}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx})$$

可得

$$\begin{aligned}\psi(x)&=A\left(\sin^2 kx+\frac{1}{2}\cos kx\right)=\frac{A}{4}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}2kx}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2kx}+2)\\&=\frac{A}{4}(2\pi\hbar)^{1/2}\Big[(2\pi\hbar)^{-1/2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_1x}+(2\pi\hbar)^{-1/2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_2x}-(2\pi\hbar)^{-1/2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_3x}\\&\quad-(2\pi\hbar)^{-1/2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_4x}+2(2\pi\hbar)^{-1/2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_5x}\Big]\end{aligned} \tag{1.42}$$

式 (1.42)表明粒子所处的状态实际上是由 5 个平面波线性叠加而成的叠加态，根据叠加态原理，此时粒子动量有 5 个可取值，它们的取值及相应的概率分别为

$$\left.\begin{aligned}&p_1=\hbar k,\quad &&\omega_1=\left|\frac{A}{4}\sqrt{2\pi\hbar}\right|^2=\frac{\pi\hbar}{8}|A|^2\\&p_2=-\hbar k,\quad &&\omega_2=\left|\frac{A}{4}\sqrt{2\pi\hbar}\right|^2=\frac{\pi\hbar}{8}|A|^2\\&p_3=2\hbar k,\quad &&\omega_3=\left|-\frac{A}{4}\sqrt{2\pi\hbar}\right|^2=\frac{\pi\hbar}{8}|A|^2\\&p_4=-2\hbar k,\quad &&\omega_4=\left|-\frac{A}{4}\sqrt{2\pi\hbar}\right|^2=\frac{\pi\hbar}{8}|A|^2\\&p_5=0,\quad &&\omega_5=\left|\frac{A}{2}\sqrt{2\pi\hbar}\right|^2=\frac{\pi\hbar}{2}|A|^2\end{aligned}\right\} \tag{1.43}$$

由此可得粒子的动量与动能的期望值分别为

$$\bar{p}=\frac{\sum_{i=1}^{5}p_i\omega_i}{\sum_{i=1}^{5}\omega_i}=0$$

以及

$$\bar{T}=\frac{1}{2m}\overline{p^2}=\frac{1}{2m}\frac{\sum_{i=1}^{5}p_i^2\omega_i}{\sum_{i=1}^{5}\omega_i}=\frac{5k^2\hbar^2|A|^2}{8m|A|^2}=\frac{5k^2\hbar^2}{8m}$$

再由波函数的归一化条件，即在态 $\psi(x)$ 中，粒子动量取各可能值的概率和必须等于 1，有

$$\sum_{i=1}^{5}\omega_i=\pi\hbar|A|^2=1,\quad A=(\pi\hbar)^{-1/2}$$

解法二　将已知态 $\psi(x)$ 做 Fourier 展开

$$\psi(x)=\int_{-\infty}^{+\infty}c(p)(2\pi\hbar)^{-1/2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{d}p \tag{1.44}$$

则式 (1.44)的 Fourier 的逆变换为

$$c(p)=(2\pi\hbar)^{-1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{d}x \tag{1.45}$$

把式 (1.42)代入式 (1.45)，有

$$\begin{aligned}c(p)\ =\ &\frac{A}{4\sqrt{2\pi\hbar}}\left[\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_1-p)\frac{x}{\hbar}}\mathrm{d}x+\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_2-p)\frac{x}{\hbar}}\mathrm{d}x-\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_3-p)\frac{x}{\hbar}}\mathrm{d}x\right.\\&\left.-\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_4-p)\frac{x}{\hbar}}\mathrm{d}x+2\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_5-p)\frac{x}{\hbar}}\mathrm{d}x\right]\end{aligned}$$

由 δ-函数的关系式 $\delta(p'-p)=\dfrac{1}{2\pi}\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p'-p)x}\mathrm{d}x$，得

$$\begin{aligned}c(p)\ =\ &\frac{A}{4\sqrt{2\pi\hbar}}[2\pi\hbar\delta(p_1-p)+2\pi\hbar\delta(p_2-p)-2\pi\hbar\delta(p_3-p)\\&-2\pi\hbar\delta(p_4-p)+4\pi\hbar\delta(p_5-p)]\end{aligned}$$

再根据 δ-函数的关系

$$\delta(p'-p)=\begin{cases}\infty, & p=p'\\ 0, & p\neq p'\end{cases}$$

可知粒子的动量有 5 个可能的取值且相应的概率为

$$\left.\begin{aligned}&p_1=\hbar k, && \omega_1=\left|\frac{A}{4}\sqrt{2\pi\hbar}\right|^2=\frac{\pi\hbar}{8}|A|^2\\&p_2=-\hbar k, && \omega_2=\left|\frac{A}{4}\sqrt{2\pi\hbar}\right|^2=\frac{\pi\hbar}{8}|A|^2\\&p_3=2\hbar k, && \omega_3=\left|-\frac{A}{4}\sqrt{2\pi\hbar}\right|^2=\frac{\pi\hbar}{8}|A|^2\\&p_4=-2\hbar k, && \omega_4=\left|-\frac{A}{4}\sqrt{2\pi\hbar}\right|^2=\frac{\pi\hbar}{8}|A|^2\\&p_5=0, && \omega_5=\left|\frac{A}{2}\sqrt{2\pi\hbar}\right|^2=\frac{\pi\hbar}{2}|A|^2\end{aligned}\right\}$$

这与式 (1.43)的结果一致.

1.22　电子 Young 双缝实验与测量公设

题 1.22　结合电子 Young 双缝实验中电子被接收屏与探测器探测前后的实验测量过程，解释量子力学第三公设——测量公设中三个阶段的说法.

解答　量子体系状态的测量分三个阶段：纠缠分解、波函数坍缩、初态制备.

双缝屏上为 A、B 两条缝，通过双缝电子状态可以表示为

$$\psi(\boldsymbol{x},t)=\psi_{\mathrm{A}}(\boldsymbol{x},t)+\psi_{\mathrm{B}}(\boldsymbol{x},t)$$

电子态经过双缝时，和双缝所表示的两个可区分态构成了纠缠态. 当我们要测量电子是从哪条缝经过时，则测量结果坍缩到和某一条缝纠缠对应的态，即 $\psi_{\mathrm{A}}(\boldsymbol{x},t)$ 或者 $\psi_{\mathrm{B}}(\boldsymbol{x},t)$. 当不测量时，则处于叠加态，于是电子是同时通过两条缝，导致干涉条纹.

到了接收屏，电子态 $\psi(\boldsymbol{x},t)$ 可以分解为与接收屏位置可区分态相纠缠的电子位置本征态的叠加，即可表示为

$$\psi(\boldsymbol{x},t)=\iiint\psi(\boldsymbol{x}',t)\,\delta(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')\,\mathrm{d}\boldsymbol{x}'$$

其中，$\delta(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')$ 是位置本征值为 $\boldsymbol{x}'$ 的本征态. 当在接收屏上位置 $\boldsymbol{x}'$ 发现电子时，电子态即已经以 $|\psi(\boldsymbol{x}',t)|^2$ 的概率坍缩到 $\delta(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')$ 态. 此后以此为初态在接收屏新环境的新 Hamilton 量下继续演化.

1.23　测量公设例 (I)

题 1.23　可观测算符 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 本征值分别为 a_n、b_n，在任一态 ψ 中，先测得 $\hat{A}$ 的值 a_n，再测 $\hat{B}$ 的值 b_n 的概率为 $P(a_n,b_n)$；而先测得 $\hat{B}$ 的值 b_n，再测 $\hat{A}$ 的值 a_n 的概率为 $P(b_n,a_n)$，问：$P(a_n,b_n)=P(b_n,a_n)$ 的条件如何?

解答　按测量公设，

$$|\psi\rangle=\sum_n c_n|a_n\rangle$$

其中，在 $|\psi\rangle$ 态下测量 $\hat{A}$ 得到结果为 a_n 的概率为

$$|c_n|^2=|\langle a_n|\psi\rangle|^2$$

在 $|\psi\rangle$ 态下测量 $\hat{A}$ 得到 a_n 后，体系由 $|\psi\rangle$ 态坍缩为 $|a_n\rangle$ 态，在 $|a_n\rangle$ 态下测量 $\hat{B}$ 的值为 b_n 的概率为 $|\langle b_n|a_n\rangle|^2$.

故在态 $|\psi\rangle$ 下，先测得 $\hat{A}$ 的值 a_n，再测 $\hat{B}$ 的值 b_n 的概率为

$$P(a_n,b_n)=|\langle a_n|\psi\rangle|^2|\langle b_n|a_n\rangle|^2 \tag{1.46}$$

同理，在态 $|\psi\rangle$ 下，先测得 $\hat{B}$ 的值 b_n，再测 $\hat{A}$ 的值 a_n 的概率为

$$P(b_n,a_n)=|\langle b_n|\psi\rangle|^2|\langle a_n|b_n\rangle|^2 \tag{1.47}$$

若 $P(a_n,b_n)=P(b_n,a_n)$ 对所有 $|\psi\rangle$ 都成立，由式 (1.46)和式 (1.47)知

$$|\langle a_n|\psi\rangle|^2=|\langle b_n|\psi\rangle|^2 \tag{1.48}$$

由态 $|\psi\rangle$ 的任意性，式 (1.48)对一切 n 成立必有

$$|a_n\rangle=|b_n\rangle$$

故 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 有共同的本征函数系为 $P(a_n,b_n)=P(b_n,a_n)$ 的条件.

1.24　测量公设例 (Ⅱ)

题 1.24　一体系 Hamilton 量 H 与时间无关，而 H 由非简并本征值 $h\nu$ 对应本征矢 $|\nu\rangle$，$\hat{H}|\nu\rangle=h\nu|\nu\rangle$，可观测量 A 在同一 Hilbert 空间中，同样地用非简并本征方程 $\hat{A}|n\rangle=a_n|n\rangle$ 来定义.

(1) 设体系开始处于状态 $|\nu\rangle$，这时测量 $\hat{A}$，问 $\hat{A}$ 的期望值为何？这一测量给出 $\hat{A}$ 的值为 a_m 的概率为何？

(2) 如果测量值为 a_m，并且经过时间 t 后，再重复测量，问再次测得 a_m 的概率是多少？

解答　(1) 在初态 $|\nu\rangle$ 中 $\hat{A}$ 的期望值为

$$\bar{A}=\langle\nu|\hat{A}|\nu\rangle=\sum_{mn}\langle\nu|m\rangle\langle m|\hat{A}|n\rangle\langle n|\nu\rangle=\sum_n|\langle\nu|n\rangle|^2a_n$$

因此第一次测量结果，发现 $\hat{A}$ 的值 a_m 的概率是

$$P_m=|\langle\nu|m\rangle|^2$$

(2) 后来，体系不再处于初态 $|\nu\rangle$，而是处于态 $|m\rangle$，其进一步演化由 Schrödinger 方程给出

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|t\rangle=\hat{H}|t\rangle \tag{1.49}$$

演化初态是 $|m\rangle$，式 (1.49)的解为

$$|t\rangle=\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}t}|m\rangle=\sum_\mu\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}t}|\mu\rangle\langle\mu|m\rangle=\sum_\mu\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\mu t}|\mu\rangle\langle\mu|m\rangle$$

t 时刻，再次测 $\hat{A}$ 得 a_m 的概率是

$$P'_m=|\langle m|t\rangle|^2\left|\sum_\mu\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\mu t}|\langle\mu|m\rangle|^2\right|^2$$

1.25　测量公设例 (Ⅲ)

题 1.25　已知可观测量 a 的算符 A 有两个本征函数 ϕ_1、ϕ_2，本征值为 a_1、a_2；可观测量 β 的算符 B 有两个本征态 χ_1、χ_2，本征值为 b_1、b_2. 两种本征态有如下关系：

$$\phi_1=(2\chi_1+3\chi_2)/\sqrt{13},\quad \phi_2=(3\chi_1-2\chi_2)/\sqrt{13}$$

当测量 α 后得到 a_1，若再测量 β，以后再测量 α，证明第二次得到 a_1 的概率是 $97/169$.

解答　按测量公设，测量 α 得到 a_1 后，系统坍缩到 ϕ_1 态. 由于

$$\phi_1=(2\chi_1+3\chi_2)/\sqrt{13}$$

所以再测量 β 得到 b_1 的概率为 $4/13$，得到 b_2 的概率为 $9/13$，测量 β 后系统的态将坍缩到 χ_1 态或 χ_2 态. 由上式与

$$\phi_2=(3\chi_1-2\chi_2)/\sqrt{13} \tag{1.50}$$

可得

$$\chi_1=(2\phi_1+3\phi_2)/\sqrt{13},\quad \chi_2=(3\phi_1-2\phi_2)/\sqrt{13} \tag{1.51}$$

因此，当系统处于 χ_1 态，测量 α 得到 a_1 的概率为 $4/13$，因而从最初的态 ϕ_1，连续测量 β、α 获得 b_1、a_1 的概率为 $(4/13)\times(4/13)=16/169$，类似从 ϕ_1 测量 β、α 获得 b_2、a_1 的概率为 $(9/13)\times(9/13)=81/169$. 这样第二次测量 α 获得 a_1 的总概率为 $16/169+81/169=97/169$.

1.26　能量守恒

题 1.26　设质量为 m 的粒子在恒定势场 $V(\boldsymbol{r})$ 中运动，已知其波函数为 $\psi(\boldsymbol{r},t)$.

(1) 试证明其能量期望值 $\bar{H}=\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}w$，其中 w 为能量密度，如下给出：

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

(2) 试证明能量守恒公式

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

其中，$\boldsymbol{s}$ 称为能流密度，如下给出：

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

证明　(1) 题给粒子 Hamilton 量为

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\boldsymbol{r}) \tag{1.52}$$

这样其能量期望值为

$$\begin{aligned}\bar{H} &= \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\psi^*(\boldsymbol{r},t)H\psi(\boldsymbol{r},t)\\ &= \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\psi^*(\boldsymbol{r},t)\nabla^2\psi(\boldsymbol{r},t)+\psi^*(\boldsymbol{r},t)V(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r},t)\right]\end{aligned} \tag{1.53}$$

再利用 Gauss 定理

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

上面最后一个等号用到了波函数的平方可积条件，因而在全空间的边界面 S 上，面积分的结果为零. 因此 $\bar{H}=\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}w$，而

$$w=\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^*(\boldsymbol{r},t)\cdot\nabla\psi(\boldsymbol{r},t)+\psi^*(\boldsymbol{r},t)V(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{1.54}$$

(2) 由上面 w 的表达式得

$$\begin{aligned}\frac{\partial w}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi+\psi^*V\psi\right)\\ &= \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi+\psi^*V\psi\right)-\dot{\psi}^*\mathrm{i}\hbar\dot{\psi}+\dot{\psi}\mathrm{i}\hbar\dot{\psi}^*\\ &= \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial t}(\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi)-\dot{\psi}^*(H-V)\psi-\dot{\psi}(H-V)\psi^*\\ &= \frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla\dot{\psi}^*\cdot\nabla\psi+\nabla\psi^*\cdot\nabla\dot{\psi}\right)-\dot{\psi}^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi\right)-\dot{\psi}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^*\right)\\ &= \frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla\dot{\psi}^*\cdot\nabla\psi+\nabla\psi^*\cdot\nabla\dot{\psi}+\dot{\psi}^*\nabla^2\psi+\dot{\psi}\nabla^2\psi^*\right)\end{aligned} \tag{1.55}$$

由此如题设令

$$\boldsymbol{s}=-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial\psi^*(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}\nabla\psi(\boldsymbol{r},t)+\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}\nabla\psi^*(\boldsymbol{r},t)\right] \tag{1.56}$$

即有能量守恒关系

$$\frac{\partial w}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{s}=0 \tag{1.57}$$

而 $\boldsymbol{s}$ 也可以写为

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

讨论　(关于动量关系) 由动量期望值定义

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

定义动量密度为

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

此式对时间的微商为

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

注意上式中 ∇ 的微分性和矢量性得

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

上式即为

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

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

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

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

1.27　一维束缚态无简并

题 1.27　考虑任意势 $V(x)$ 的时间无关的一维 Schrödinger 方程，证明：如果一个解 $\psi(x)$ 具有性质，即当 $x\to\pm\infty$ 时 $\psi(x)\to 0$，则此解必然非简并，进而是实的，除了某一可能的相因子.

解答　用反证法. 设另一 $\phi(x)$ 满足同样的方程，且具有与 $\psi(x)$ 相同的能量 E，并有 $\lim\limits_{x\to\pm\infty}\phi(x)\to 0$，则

$$\begin{cases}\dfrac{\psi''}{\psi}=-\dfrac{2m(E-V)}{\hbar^2}\\ \dfrac{\phi''}{\phi}=-\dfrac{2m(E-V)}{\hbar^2}\end{cases}$$

所以 $\psi''\phi-\phi''\psi=0$，如此 $\psi'\phi-\phi'\psi=$ 常量.

由无穷远处条件得 $\psi'\phi-\phi'\psi=0$，因此

$$\frac{\psi'}{\psi}=\frac{\phi'}{\phi},\quad \left(\ln\frac{\psi}{\phi}\right)'=0$$

所以 $\phi(x)=$ 常量ψ，$\phi(x)$ 和 $\psi(x)$ 代表同一个态.

当 $V(x)$ 为实函数时，$\psi(x)$ 与 $\psi(x)^*$ 满足相同的方程，有相同的能量和相同的边界条件 $\lim\limits_{x\to\pm\infty}\psi^*(x)\to 0$，故 $\psi^*=c\psi$ 或 $\psi=c^*\psi^*$，由此得 $|c|^2=1$，可知 $c=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}$，此处 δ 为实数. 不妨取 $\delta=0$，则 $c=1$，$\psi(x)$ 为实函数.

1.28　一维束缚态的性质

题 1.28　考虑一个一维束缚粒子：

(1) 设 ψ_1 和 ψ_2 是 Schrödinger 方程的两个解，证明

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\psi_1^*(\boldsymbol{r},t)\psi_2(\boldsymbol{r},t)=0$$

(2) 证明：若某粒子在一给定的时刻是定态，则它将永远保持定态；

(3) 若在 $t=0$ 时，波函数在 $-a<x<a$ 范围内是常数，而在其他处为零，利用系统的本征态表达以后时间的完整波函数.

解答　(1) **证明**　按题意 ψ_1 和 ψ_2 是 Schrödinger 方程的解，则有

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi_1}{\partial t}=H\psi_1,\quad \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi_2}{\partial t}=H\psi_2$$

其中，$H=-\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\boldsymbol{r},t)$. 这样

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi_1^*(\boldsymbol{r},t)\psi_2(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}&=\psi_1^*H\psi_2-\psi_2(H\psi_1)^*\\&=\psi_1^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\boldsymbol{r},t)\right)\psi_2-\psi_2\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\boldsymbol{r},t)\right)\psi_1^*\\&=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\cdot(\psi_1^*\nabla\psi_2-\psi_2\nabla\psi_1^*)\end{aligned}$$

即有 $\dfrac{\partial\psi_1^*(\boldsymbol{r},t)\psi_2(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}=-\dfrac{\hbar}{2m\mathrm{i}}\nabla\cdot(\psi_1^*\nabla\psi_2-\psi_2\nabla\psi_1^*)$，此式对全空间积分即可得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\psi_1^*(\boldsymbol{r},t)\psi_2(\boldsymbol{r},t)=-\frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}\oint\mathrm{d}\boldsymbol{s}\cdot(\psi_1^*\nabla\psi_2-\psi_2\nabla\psi_1^*)=0$$

(2) **证明**　所谓定态即指能量本征态. 设粒子在 t_0 时刻处于定态，则有 $\hat{H}\psi(x,t_0)=E\psi(x,t_0)$. 任意时刻 t，粒子满足的 Schrödinger 方程为 $\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=\hat{H}\psi(x,t)$. 在 $\hat{H}$ 不显含 t 下，积分此式得形式解

$$\psi(x,t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t-t_0)/\hbar}\psi(x,t_0)$$

不难证明，此波函数满足定态 Schrödinger 方程

$$\hat{H}\psi(x,t)=E\psi(x,t)$$

即在任意时刻也保持定态.

(3) 按题意设

$$\psi(x,0)=\begin{cases}c, & |x|<a\\ 0, & |x|\geqslant a\end{cases}$$

式中，c 是常数，归一化得 $|c|^2=\dfrac{1}{2a}$，$c=\dfrac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}}{\sqrt{2a}}$，$\delta$ 为位相因子. 设 $t=0$ 时刻，粒子的能量本征态完备集为 $\{\psi_n(x,0)|n=0,1,2,\cdots\}$，则有

$$\hat{H}\psi_n(x,0)=E_n\psi_n(x,0)$$

任意粒子态可用它来展开，得

$$\psi(x,0)=\sum_n a_n\psi_n(x,0)$$

a_n 是与时间无关的系数，上式两边同乘以 $\psi_m^*(x,0)$，并且从 $-\infty$ 到 $+\infty$ 积分

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_m^*(x,0)\psi(x,0)\mathrm{d}x=\sum_n a_n\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_m^*(x,0)\psi_n(x,0)\mathrm{d}x$$

由 ψ_n 的正交归一性，交换上式左右次序写出

$$a_m=\sum_n a_n\delta_{nm}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}\frac{1}{\sqrt{2a}}\int_{-a}^{a}\psi_m^*(x,0)\mathrm{d}x$$

由第 (2) 小题得

$$\psi(x,t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\psi(x,0)=\sum_n a_n\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt/\hbar}\psi_n(x,0)$$

思考　第 (3) 小题所给波函数不满足连续条件，会有什么问题？读者可试着计算该波函数下动能期望值，注意边界点的贡献. 参见题 12.20 第 (3) 小题.

1.29　广义 Virial 定理

题 1.29　在 Hermite 算符 $\hat{A}$ 的分立谱本征态下，证明 $\hat{c}=[\hat{A},\hat{B}]$ 的期望值为零.

证明　Hermite 算符 $\hat{A}$ 的本征态为 φ_n，本征方程

$$\hat{A}\varphi_n = a_n\varphi_n$$

这样

$$\begin{aligned}\langle\hat{c}\rangle_n &= \int\varphi_n^*[\hat{A},\ \hat{B}]\varphi_n\mathrm{d}\tau = \int\varphi_n^*\hat{A}\hat{B}\varphi_n\mathrm{d}\tau - \int\varphi_n^*\hat{B}\hat{A}\varphi_n\mathrm{d}\tau \\ &= \int\hat{B}\varphi_n\left(\hat{A}\varphi_n\right)^*\mathrm{d}\tau - a_n\int\varphi_n^*\hat{B}\varphi_n\mathrm{d}\tau \\ &= a_n\int\varphi_n^*\hat{B}\varphi_n\mathrm{d}\tau - a_n\int\varphi_n^*\hat{B}\varphi_n\mathrm{d}\tau = 0\end{aligned}$$

讨论　上面的证明过程中，$\hat{B}$ 为任意的，但必须保证 $\hat{B}\varphi_n$ 在 $\hat{A}$ 的 Hermite 定义域中，即函数 $\hat{B}\varphi_n$ 保证 $\hat{A}$ 的 Hermite 性成立. 本题结果可称为广义 Virial 定理，若 $\hat{A}$ 为体系的 Hamilton 量，给出的结果则称为超 Virial 定理，它有许多应用.

1.30　广义 Hellmann–Feynman 定理

题 1.30　Hermite 算符 $\hat{F} = \hat{F}(\lambda)$ 且

$$\hat{F}\psi_n(\lambda) = f_n(\lambda)\psi_n(\lambda)$$

证明在 ψ_n 态下

$$\frac{\partial f_n}{\partial\lambda} = \left\langle\frac{\partial\hat{F}}{\partial\lambda}\right\rangle_n$$

证明　由 $\hat{F}\psi_n(\lambda) = f_n(\lambda)\psi_n(\lambda)$，两边对 λ 求导

$$\frac{\partial\hat{F}}{\partial\lambda}\psi_n(\lambda) + \hat{F}\frac{\partial\psi}{\partial\lambda} = \frac{\partial f}{\partial\lambda}\psi_n + f_n\frac{\partial\psi_n}{\partial\lambda} \tag{1.58}$$

式 (1.58)向 ψ_m 态上投影，有

$$\left\langle\frac{\partial F}{\partial\lambda}\right\rangle + \int\psi_n^*\hat{F}\frac{\partial\psi_n}{\partial\lambda}\mathrm{d}\tau = \frac{\partial f_n}{\partial\lambda} + f_n\int\psi_n^*\frac{\partial\psi_n}{\partial\lambda}\mathrm{d}\tau \tag{1.59}$$

对上式左边第二项，利用 $\hat{F}^\dagger = \hat{F}$，

$$\int\psi_n^*\hat{F}\frac{\partial\psi_n}{\partial\lambda}\mathrm{d}\tau = \int\left(\hat{F}\psi_n\right)^*\frac{\partial\psi_n}{\partial\lambda}\mathrm{d}\tau = f_n\int\psi_n^*\frac{\partial\psi_n}{\partial\lambda}\mathrm{d}\tau \tag{1.60}$$

所以

$$\frac{\partial f_n}{\partial\lambda} = \left\langle\frac{\partial\hat{F}}{\partial\lambda}\right\rangle_n \tag{1.61}$$

实际上，式 (1.58)向 ψ_m 态上投影，有更一般结果

$$\frac{\partial f_n}{\partial\lambda}\delta_{m,n} = \int\psi_m^*\frac{\partial\hat{F}}{\partial\lambda}\psi_n\mathrm{d}\tau + (f_m - f_n)\int\psi_m^*\frac{\partial\psi_n}{\partial\lambda}\mathrm{d}\tau \tag{1.62}$$

1.31 Schmidt 正交化方案

题 1.31 设属于某能级 E 有三个归一化的简并态 (ψ_1,ψ_2,ψ_3)，彼此线性无关，但不正交. 试找出三个彼此正交归一化的波函数. 它们是否还简并?

解答 可以用线性代数中的 Schmidt 正交化方法. 设三个彼此正交的归一化波函数为 e_1,e_2,e_3，不难证明

$$e_1=\psi_1$$
$$e_2=\frac{f_2}{|f_2|}$$
$$e_3=\frac{f_3}{|f_3|}$$

其中，$f_2=\psi_2-(e_1\cdot\psi_2)e_1$，$|f_3|$ 表示 f_2 的模长；$e_3=f_3/|f_3|$，其中，$f_3=\psi_3-(e_2\cdot\psi_3)e_2-(e_1\cdot\psi_3)e_1$，$|f_3|$ 表示 f_3 的模长.

因为 e_1、e_2 以及 e_3 是 ψ_1、ψ_2 以及 ψ_3 的线性组合，所以它们仍简并.

1.32 Virial 定理的应用

题 1.32 对幂次势 $V=\alpha|x|^n$，分别就 $\alpha>0$ 和 $\alpha<0$ 情况，用 Virial 定理讨论存在束缚态时，n 的取值范围.

解答 对束缚定态有 Virial 定理

$$\langle T\rangle=\left\langle\frac{1}{2}x\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle$$

因为题给幂次势是对称势，可只考虑 $x>0$ 的一边.

对于 $\alpha>0$ 情况，束缚定态的 Virial 定理给出

$$\langle T\rangle=\frac{n}{2}\alpha\langle|x|^n\rangle$$

由于 $\langle T\rangle>0$，上式给出此时 $n>0$.

对于 $\alpha<0$ 情况，同样束缚定态的 Virial 定理以及 $\langle T\rangle>0$ 给出

$$0<\langle T\rangle=\frac{n}{2}\alpha\langle|x|^n\rangle$$

可见 $n<0$. 此时 $V=\alpha|x|^n<0$，且当 $|x|\to+\infty$ 时，$V=\alpha|x|^n\to0$，束缚态存在的必要条件是 $E\leqslant0$，这给出

$$\langle E\rangle=\langle T+V\rangle=\frac{n+2}{2}\alpha\langle|x|^n\rangle\leqslant0 \tag{1.63}$$

综合上面两式给出 $-2\leqslant n<0$.

讨论 上面用 Virial 定理讨论了 $\alpha>0$ 与 $\alpha<0$ 两种情形下束缚态存在的必要条件. 下面我们进一步考察条件的充分性.

对 $\alpha>0$ 情形，前面得到此种情形束缚态存在的必要条件是 $n>0$. 另一方面，此时 $V=\alpha|x|^n>0$，且当 $|x|\to+\infty$ 时，$V=\alpha|x|^n\to+\infty$，所以在此种势场中运动的粒子波函数 $\psi(x)\xrightarrow{|x|\to+\infty}0$. 因此在这种势场的作用下，粒子运动是局域化的，不会到达无穷远处，因而其波函数是束缚态. 总之，此种情形，$n>0$ 也是束缚态存在的充分条件，所以是充要条件.

对 $\alpha<0$ 情形，在满足 $-2<n<0$ 条件下，式 (1.63) 还可以写成

$$E=\langle T+V\rangle=\left(1-\frac{s}{2}\right)\langle V\rangle=\alpha\left(1-\frac{s}{2}\right)\left\langle\frac{1}{r^s}\right\rangle \tag{1.64}$$

此时 $V=\alpha|x|^n<0$，且当 $|x|\to+\infty$ 时，$V=\alpha|x|^n\to0$，所以 $E<0$ 的解一定是束缚态，所以对于此种情形，$-2<n<0$ 也是束缚态存在的充分条件.

对 $\alpha<0$ 情形的 $n=-2$ 的临界情况，此时 $V(x)$ 为吸引势，若存在束缚定态，按 Virial 定理必有 $\langle T\rangle=-\langle V\rangle$，从而其能量本征值必有

$$E=\langle T+V\rangle=0$$

此吸引势的奇性较强，可能发生波函数几乎全部集中于中心原点，粒子最终落入力心，形不成定态. 而在位势满足一定条件下，则可避免这种坍缩 (Landau 坠落). 为了考察这种条件，利用 Courant-Hilbert 定理[①]，可知当位势 V 在任意态下的期望值有下界，

$$\int V(x)|\psi(x)|^2\mathrm{d}x>C \tag{1.65}$$

则能保证全部解集合的完备性，从而可避免 Landau 坠落而保证此种情形有束缚态存在. 定态 Schrödinger 方程

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+\left\{\frac{2\mu E}{\hbar^2}+\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2x^2}\right\}\psi=0$$

其中 μ 为粒子质量. 由此微分方程的指标方程[②]

$$\delta(\delta-1)+p_{-1}\delta+q_{-2}=0,\quad \text{即}\delta^2-\delta+\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}=0$$

求出其解为

$$\delta=\frac{1}{2}\left\{1\pm\sqrt{-\frac{8\mu\alpha}{\hbar^2}}\right\} \tag{1.66}$$

δ 决定零点附近 ψ 的行为[③]，即有 $\psi(x)\xrightarrow{x\to0}Ax^\delta$. 于是，式 (1.65)积分号下被积函数在积分下限处的行为是

$$|A|^2\left(\frac{-\alpha}{x^2}\right)\left|x^\delta\right|^2=|A|^2\left(\frac{-\alpha}{x^2}\right)x^{2\mathrm{Re}\delta-2}$$

① 张永德. 量子力学 (第三版)[M]. 北京: 科学出版社, 2015, P.70.
② 张永德. 量子力学 (第三版)[M]. 北京: 科学出版社, 2015, P.95 脚注.
③ 同②.

由此可知，要想积分 (1.65)在下限 $x=0$ 处收敛，在此邻域被积函数的幂次应当大于 -1，即有 $2\mathrm{Re}\delta>1$. 代入式 (1.66)就得到不坍缩条件

$$\alpha<-\frac{\hbar^2}{8\mu}$$

也即这种情况的位势 $V(x)$ 存在束缚态的条件.

此处参考对于中心场问题不坍缩条件的讨论，见 L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Course of Theoretical Physics*, *Volume* 3, *Quantum Mechanics : Non-Relativistic Theory*, Third Edition (原版影印本); 北京: 世界图书出版公司, 1999, §35; 中译本: 理论物理教程第 3 卷，量子力学——非相对论理论 (第 6 版)，北京: 高等教育出版社，2008，§35，P. 140-143. 其改进讨论见张永德，量子菜根谭——量子理论专题分析，北京: 清华大学出版社，第 3 版，2016 年，§15，P.161-171.

1.33　态随时间的演化

题 1.33　对一个系统，力学量算符 A 与 Hamilton 量 H 不对易，其有本征值为 a_1、a_2，相应的本征态为

$$\phi_1=\frac{\psi_1+\psi_2}{\sqrt{2}},\quad \phi_2=\frac{\psi_1-\psi_2}{\sqrt{2}} \tag{1.67}$$

这里 ψ_1、ψ_2 为 H 的本征函数，相应的本征值为 E_1 与 E_2. 若 $t=0$ 时系统初态为 ϕ_1，证明 A 在 t 时刻的期望值为

$$\langle A\rangle_t=\frac{a_1+a_2}{2}+\frac{a_1-a_2}{2}\cos\frac{(E_1-E_2)t}{\hbar} \tag{1.68}$$

解答　题给系统的初态

$$\psi(0)=\phi_1=\frac{\psi_1+\psi_2}{\sqrt{2}} \tag{1.69}$$

为 H 的本征态即定态的叠加，从而可知 t 时刻系统的态

$$\psi(t)=\frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_1 t}\psi_1+\frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_2 t}\psi_2 \tag{1.70}$$

由题意可知

$$\psi_1=\frac{\phi_1+\phi_2}{\sqrt{2}},\quad \psi_2=\frac{\phi_1-\phi_2}{\sqrt{2}} \tag{1.71}$$

将式 (1.71)代入式 (1.70)，有

$$\begin{aligned}\psi(t)&=\frac{1}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_1 t}(\phi_1+\phi_2)+\frac{1}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_2 t}(\phi_1+\phi_2)\\&=c_1\phi_1+c_2\phi_2\end{aligned} \tag{1.72}$$

由上面看出 $\psi(t)$ 也为 ϕ_1、ϕ_2 的叠加，其中叠加系数为

$$c_1=\frac{1}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_1 t}+\frac{1}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_2 t},\quad c_2=\frac{1}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_1 t}-\frac{1}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_2 t} \tag{1.73}$$

易知满足

$$|c_1|^2=\frac{1+\cos(\omega_1-\omega_2)t}{2},\quad |c_2|^2=\frac{1-\cos(\omega_1-\omega_2)t}{2} \tag{1.74}$$

由于式 (1.70)为 ϕ_1、 ϕ_2 的叠加，

$$\langle A\rangle_t=|c_1|^2a_1+|c_2|^2a_2 \tag{1.75}$$

将式 (1.74)代入式 (1.75)，即给出式 (1.68)的结果.

1.34　力学量期望值随时间的演化

题 1.34　设质量为 m 的一维粒子在势场 $V(x)$ 中运动，其波函数为 $\psi(x,t)$.

(1) 证明其位置与动量的期望值的时间演化分别为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle x\rangle=\frac{\langle p\rangle}{m},\quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle p\rangle=-\left\langle\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right\rangle$$

(2) 解释上述结果的物理意义.

解答　(1) **证明**　设 $\hat{A}$ 为某一力学量算符，则

$$\left\langle\hat{A}\right\rangle=\int\psi^*\hat{A}\psi\mathrm{d}x$$

若 $\hat{A}$ 不显含时间，则

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left\langle\hat{A}\right\rangle=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left\langle\hat{A}\hat{H}-\hat{H}\hat{A}\right\rangle$$

这里 $\hat{H}$ 为 Hamilton 算符. 令 $\hat{A}=\hat{x}$，则有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{x}\rangle=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left\langle\hat{x}\hat{H}-\hat{H}\hat{x}\right\rangle \tag{1.76}$$

设 Hamilton 算符为

$$H=\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(\hat{x})$$

故有

$$\hat{x}\hat{H}-\hat{H}\hat{x}=\frac{1}{2m}(\hat{x}\hat{p}^2-\hat{p}^2\hat{x})=-\frac{\hbar\hat{p}}{\mathrm{i}m}$$

代入式 (1.76)得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{x}\rangle=\frac{\langle\hat{p}\rangle}{m} \tag{1.77}$$

为了证明第二个关系式，令 $\hat{A}=\hat{p}$，我们有

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{p}\rangle&=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left\langle\left[\hat{p},\ \hat{H}\right]\right\rangle=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle[\hat{p},\ V(\hat{x})]\rangle\\&=-\int\psi^*\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}V(x)-V(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right]\psi\mathrm{d}x\end{aligned}$$

$$= \int \psi^* \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x} \psi \mathrm{d}x = -\left\langle \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x} \right\rangle \tag{1.78}$$

在上式中用了结果

$$\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}V(x) - V(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right]\psi = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(V\psi) - V\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x} = \left(\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right)\psi$$

(2) 式 (1.77)的意义是粒子的速度可以用两种等价的方法计算. 假定我们有可以用一个局域的波包表示粒子，在连续的时间 t_1 和 t_2，这个波包的位置如图 1.4 所示，$\langle x\rangle_1$ 和 $\langle x\rangle_2$ 相应于 t_1 和 t_2 时刻粒子的经典位置，所以速度为 $\dfrac{\langle x\rangle_2 - \langle x\rangle_1}{t_2 - t_1}$. 当 $t_2 - t_1$ 趋于 0 时，上式趋于 $\dfrac{\mathrm{d}\langle \hat{x}\rangle}{\mathrm{d}t}$. 另外我们还可以由 $\psi(x_1, t)$ 计算动量的期望值

$$\langle \hat{p}\rangle = \int \psi^* \hat{p} \psi \mathrm{d}x$$

然后用 m 相除得到速度的期望值，这两种方法相等.

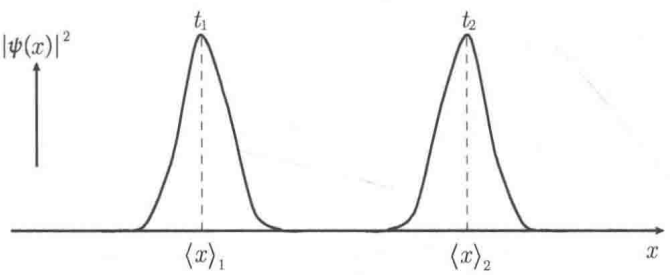


图 1.4　局域的波包

因为 $F = -\dfrac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}$，所以式 (1.78)说明力的期望值等于动量期望值的变化率. 如果粒子足够局域可以用一个足够窄的波包表示，则算符的期望值相当于观察量的经典极限，即式 (1.78)相当于牛顿第二定律，也是对应原理的一个例子，这就是说当系统可以表示为一个很局域的波函数时，量子力学必然产生与经典力学同样的结果. 式 (1.78)即为 Ehrenfest 定理.

1.35　常见的不确定性关系有三种形式

题 1.35　常见的不确定性关系有三种形式. 除了已叙述的两种，在轨道角动量分量 L_z 和对应转角 φ 之间还有一个不确定性关系. 共计有

$$\Delta x \cdot \Delta p \geqslant \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta t \cdot \Delta E \geqslant \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta\varphi \cdot \Delta L_z \geqslant \frac{\hbar}{2}$$

讨论：(1) 第三种的含义和特点；(2) 设想三者之间的关联.

提示　(1) φ 的周期性和有限定义范围；(2) 结合时空平移和转动.

解答　(1) 第三个关系指的是体系所处状态下方位角的不确定度与角动量分量 L_z 的不确定度所满足的关系. 由于方位角的有限定义范围，该关系式的特点是只对于具有

小的方位角的不确定度以及相应的大的角动量分量 L_z 的不确定度的态才成立；一般情形则不成立. 举一个极端的例子，如 L_z 的本征态，L_z 的不确定度为零，方位角的不确定度有限，则两个不确定度相乘给出零.

(2) 在分析力学中，(x,p)、(t,H) 以及 (φ,L_z) 各自为共轭量，p、H 以及 L_z 分别为 x 方向坐标平移、时间 t 平移和绕 z 轴转动的生成元. 这就容易使人误以为本题三个关系式是平行的，是对任何微观粒子态都成立的，在有的教科书中的确也是这样写的. 三个不确定性关系式毕竟还是不同的，前两个不确定性关系式中，x、t 变化范围从 $-\infty$ 到 $+\infty$，与此相应 p、H 取值 (如无别的约束) 可以连续；第三个关系中 φ 变化范围有限，L_z 的取值总是分立的，量子化的. 事实上，前面两个关系式总是正确的，而第三个关系式则一般不成立. 其实，因为方位角的有限定义范围，对第三个关系式的正确性的质疑在文献里早就出现了[①].

第一个关系是微观粒子波动性派生的波函数概率诠释以及 Fourier 积分变换的带宽定理的直接结论，第二个关系是第一个关系的另一种形式，它本身也可以借助 Fourier 变换的带宽定理论证. 可参见张永德量子力学 (四版)，科学出版社 (2017). 因为方位角的有限定义范围，方位角与角动量分量的不确定性关系则不能按此论证.

说明　书中给出，一般的两个不对易力学量 Ω_1、Ω_2 在 ψ 态的不确定度满足式 (1.26). 该关系可利用 Schwarz 不等式，根据两力学量的对易关系，特别还利用算符的 Hermite 性来论证. 方位角与角动量分量虽然有对易关系

$$[\varphi, L_z] = \mathrm{i}\hbar$$

然而由于方位角的有限定义范围和物理所要求的周期边界条件，L_z 只在具有 2π 周期的态函数空间才具有 Hermite 性，对于含 φ 与 L_z 乘积的量，L_z 朝前作用与朝后作用并不相同 (Hermite 算符则要求相同)，所以方位角与角动量分量的不确定性关系也不能按通常的做法论证，也就不能采用式 (1.26)不确定性关系的结论. 为了可以用式 (1.26)的结论，一种方案是选用可确定方位角的可微周期函数 $\Phi(\varphi)$ 来代替 φ，由该函数与 L_z 的对易关系写出不确定性关系. 例如，可选 $\Phi(\varphi) = 2\tan\dfrac{\varphi}{2}$，则由

$$\left[2\tan\frac{\varphi}{2}, L_z\right] = \mathrm{i}\hbar\sec^2\frac{\varphi}{2}$$

按式 (1.26)写出

$$\Delta\left(2\tan\frac{\varphi}{2}\right)\Delta L_z \geqslant \frac{\hbar}{2}\left\langle\sec^2\frac{\varphi}{2}\right\rangle$$

有关论述可参考: P. Carruthers, and Michael Martin Nieto, *Phase and Angle Variables in Quantum Mechanics*, Reviews of Modern Physics, **40**, 411-440(1968).

1.36　从波粒二象性以物理分析方式推论出量子力学的三个基本特征

题 1.36　回忆小结：如何从波粒二象性以物理分析方式推论出量子力学的三个基本特征?

① P. Jordan, Z. Physik,*Über eine neue Begründung der Quantenmechanik. II*, **44**, 1 (1927).

解答　量子力学的基本图像是：所有微观粒子都具有波粒二象性. 在实验中探测到微观粒子的时候，它们总是有一定的能量，相应于完整粒子的电荷和静止质量，特别是，有一个局域的位置！正是这些物理特征给人们以电子是“粒子”的形象. 同时微观粒子具有波的特征. 波和粒子的属性通过 Planck 常量连结成为 Einstein-de Broglie 关系. 由微观粒子都具有波粒二象性派生出量子力学的基本特征：概率幅描述、量子化现象、不确定性关系.

第一，**微观粒子波粒二象性导致量子力学的一个重要特征：描述粒子运动中的或然性，即概率幅或 de Broglie 波的概率诠释.** 以电子 Young 双缝实验为例. 假定电子源强度十分弱，实验时间很长，以致可以认为，每次实验都是单个电子穿过实验装置. 各个电子彼此之间相互独立. 对于一个电子，当它穿过缝屏后到底在接收屏上哪一个位置处被观测到，结果是随机的，无法事先以 Laplace 决定论方式作理论准确预计. 单个电子穿过狭缝时状态怎样突变、其动量改变多少、在接收屏上被测到时的状态怎样突变，都是事先无法预计的、不可逆转的变化. 只有大量同样条件入射的电子同类型突变的统计规律才是可以事先准确预计的. 关闭一个缝，则大量电子入射在接收屏上的计数形成单缝衍射图样；双缝同时打开，则大量电子入射在接收屏上的计数形成双缝干涉图样. 无论何种情形，接收屏上一点 x 的计数率或者概率与该处 de Broglie 波波场振幅的模平方成正比. de Broglie 波采用概率幅波描述既具有相干叠加性又具有概率的诠释，不但能以统一方式描述电子的波粒两种属性，而且和带有“或然性”的双缝干射实验事实相匹配.

第二，**微观粒子波动性导致微观粒子能量和状态的分立化或量子化现象**. 任何类型的波动，当它们展布或传播在无限时空中时，波参数可以取连续变化数值；但是，一旦用某种方式将这些波局域在有限时空，波场所取的波参数必定分立化，它们的频率和波长均要断续化、分立化. 对于微观粒子情况，局域 de Broglie 波的波动性同样会造成频率和波长的分立化. 而且还进一步，频率和波长的这种分立化又通过 de Broglie 波特有的禀性转化为该粒子能量和动量的分立化. 因此，任何局域化的 de Broglie 波必将伴随其能量的量子化. 这是微观粒子具有 de Broglie 波波动性的结果，是局域 de Broglie 波 (由边界反射而) 自相干涉的结果.

第三，**微观粒子的波动性导致 Heisenberg 不确定性关系.** 按照 de Broglie 波波包坐标表象波函数和动量表象波函数的物理解释，可以定义微观粒子坐标和动量的均方偏差. 坐标表象波函数和动量表象波函数是一对 Fourier 积分变换对，应用 Fourier 积分变换的带宽定理，可立刻得到 Heisenberg 不确定性关系.

说明　(1) 微观粒子的波粒二象性也是全同性原理的物理根源. 这是因为全同微观粒子的物质波彼此交叠，导致实验无法分辨这些微观粒子. 于是，交换这些全同粒子中的任意两个粒子，不会在物理现象上显示出可观测的差异.

(2) 微观粒子的波动性导致微观粒子在空间分布上的非定域性.

(3) 微观粒子的波动性导致量子态的相干叠加性和纠缠性.

有关讨论和引述参见张永德，量子菜根谭 – 量子理论专题分析，北京：清华大学出版社，第 3 版，2016 年 11 月，§29,P.330-340.

第 2 章　一维定态问题

2.1　自由粒子波包的扩散

题 2.1　$\psi(x,t)$ 是一个质量为 m 的自由粒子的一维 Schrödinger 方程的解. 已知初始时刻处在如下状态:

$$\psi(x,0)=A\mathrm{e}^{-x^2/a^2}$$

(1) 求出 $t=0$ 时，动量空间的概率振幅;

(2) 求出 $\psi(x,t)$.

解答　(1) 将初态 $\psi_0(x,0)$ 按平面波 (H 本征态) 展开

$$\psi_0(x,0)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{d}p \tag{2.1}$$

其中

$$\begin{aligned}\varphi(p,0) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x,0)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{d}x=\frac{A}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{a^2}-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{d}x\\ &= \left(\frac{Aa}{2\hbar}\right)^{1/2}\mathrm{e}^{-\frac{a^2p^2}{4\hbar^2}}\end{aligned} \tag{2.2}$$

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

$$\varphi(p,t)=\varphi(p,0)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}p^2t}{2m\hbar}} \tag{2.3}$$

(2) 由式 (2.3)

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

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

$$\psi_0(x,t)=\frac{Aa}{\sqrt{a^2+2\mathrm{i}\hbar t/m}}\exp\left[-\frac{x^2}{a^2+2\mathrm{i}\hbar t/m}\right] \tag{2.4}$$

2.2　自由粒子运动的普遍解

题 2.2　证明：

$$\psi(t)=\left(\frac{m}{2\pi \mathrm{i}t\hbar}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(x-y)^2m/(2t\hbar)}\psi(y,0)\mathrm{d}y$$

是初条件为 $\psi(x,0)$(设为已知) 的波包的自由粒子运动普遍解.

证明　将上式代入自由粒子的含时 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)$$

左边为

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) &= -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2t}\left(\frac{m}{2\pi \mathrm{i}\hbar t}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}(x-y)^2m}{2t\hbar}}\psi(y,0)\mathrm{d}y\\ &\quad+\left(\frac{m}{2\pi \mathrm{i}\hbar t}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}(x-y)^2m}{2t\hbar}}\left[\frac{(x-y)^2m}{2t^2}\right]\psi(y,0)\mathrm{d}y\end{aligned}$$

又因为

$$\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)=\left(\frac{m}{2\pi \mathrm{i}\hbar t}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}(x-y)^2m}{2t\hbar}}\left[\frac{\mathrm{i}(x-y)m}{t\hbar}\right]\psi(y,0)\mathrm{d}y$$

所以 Schrödinger 方程的右边应为

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{m}{2\pi \mathrm{i}\hbar t}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}(x-y)^2m}{2t\hbar}}\left[\left(\frac{\mathrm{i}(x-y)m}{t\hbar}\right)^2+\frac{\mathrm{i}m}{t\hbar}\right]\psi(y,0)\mathrm{d}y\\ &= \left(\frac{m}{2\pi \mathrm{i}\hbar t}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}(x-y)^2m}{2t\hbar}}\left[\frac{(x-y)^2m}{2t^2}-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2t}\right]\psi(y,0)\mathrm{d}y\end{aligned}$$

比较可知，左边等于右边. 令 $\alpha=\dfrac{m}{2\hbar t}$，注意到 $\sqrt{-\mathrm{i}}=\dfrac{1}{\sqrt{2}}(1-\mathrm{i})$，有

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

利用 δ-函数表达式 $\delta(x-y)=\lim\limits_{\alpha\to\infty}(1-\mathrm{i})\sqrt{\dfrac{\alpha}{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha(x-y)^2}$，即有

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

2.3　一维无限深方势阱中的粒子处于两个定态的叠加态

题 2.3　一个质量为 m 的粒子在一维无限深势阱 $(0\leqslant x\leqslant a)$ 中运动，$t=0$ 时刻的初态波函数为

$$\psi(x,0)=\sqrt{\frac{8}{5a}}\left(1+\cos\frac{\pi x}{a}\right)\sin\frac{\pi x}{a}$$

试求：

(1) 在后来某一时刻 t_0 的波函数是什么?

(2) 体系在 $t=0$ 和 $t=t_0$ 时的平均能量是多少?

(3) 在 $t=t_0$ 时，在势阱左半部 $(0\leqslant x\leqslant a/2)$ 发现粒子的概率是多少?

解答　(1) 无限深方势阱中粒子的归一化定态波函数为

$$\psi_n=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a} \tag{2.5}$$

其中，$n=1,2,3,\cdots$，相应的能量 $E_n=\dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$.

$t=0$ 时刻粒子的初态波函数可用这组定态波函数展开. 题给初态波函数也即

$$\psi(x,0)=\sqrt{\frac{8}{5a}}\left(\sin\frac{\pi x}{a}+\frac{1}{2}\sin\frac{2\pi x}{a}\right)$$

与式 (2.5)比较，可知

$$\psi(x,0)=\sqrt{\frac{4}{5}}\left(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x}{a}\right)+\sqrt{\frac{1}{5}}\left(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{2\pi x}{a}\right)=\sqrt{\frac{4}{5}}\psi_1+\sqrt{\frac{1}{5}}\psi_2 \tag{2.6}$$

显见初态波函数已归一化，从而由于体系演化的幺正性，在任意时刻波函数都是归一化的. $t=t_0$ 时刻粒子的波函数为

$$\psi(x,t_0)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t_0/\hbar}\psi(x,0)=\sqrt{\frac{4}{5}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_1t_0/\hbar}\psi_1+\sqrt{\frac{1}{5}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_2t_0/\hbar}\psi_2 \tag{2.7}$$

(2) Hamilton 量为守恒量，能量期望值不随时间变化，也就是 $t=0$ 时刻与 $t=t_0$ 时刻粒子能量期望值相同. 不妨对 $t=0$ 时刻计算给出

$$\langle E\rangle_{t=0}=\langle E\rangle_{t=t_0}=\frac{4}{5}E_1+\frac{1}{5}E_2=\frac{4\pi^2\hbar^2}{5ma^2} \tag{2.8}$$

(3) 波函数已归一化，从而在势阱左半部 $(0\leqslant x\leqslant a/2)$ 发现粒子的概率为

$$\begin{aligned}&\int_0^{a/2}\psi^*(x,t_0)\psi(x,t_0)\,\mathrm{d}x\\=&\int_0^{a/2}\left(\sqrt{\frac{4}{5}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_1t_0/\hbar}\psi_1+\sqrt{\frac{1}{5}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_2t_0/\hbar}\psi_2\right)^*\left(\sqrt{\frac{4}{5}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_1t_0/\hbar}\psi_1+\sqrt{\frac{1}{5}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_2t_0/\hbar}\psi_2\right)\mathrm{d}x\end{aligned}$$

继续演算下去

$$\begin{aligned}&\int_0^{a/2}\psi^*(x,t_0)\psi(x,t_0)\,\mathrm{d}x\\=&\int_0^{a/2}\left[\frac{4}{5}\psi_1^2+\frac{1}{5}\psi_2^2+\frac{2}{5}\psi_1\psi_2\cos\frac{(E_2-E_1)t_0}{\hbar}\right]\mathrm{d}x\\=&\int_0^{a/2}\left(\frac{8}{5a}\sin^2\frac{\pi x}{a}+\frac{2}{5a}\sin^2\frac{2\pi x}{a}+\frac{8}{5a}\sin\frac{\pi x}{a}\sin\frac{2\pi x}{a}\cos\frac{3\pi^2\hbar t_0}{2ma^2}\right)\mathrm{d}x\\=&\int_0^{a/2}\left[\frac{4}{5a}\left(1-\cos\frac{2\pi x}{a}\right)+\frac{1}{5a}\left(1-\cos\frac{4\pi x}{a}\right)+\frac{4}{5a}\left(\cos\frac{\pi x}{a}-\cos\frac{3\pi x}{a}\right)\cos\frac{3\pi^2\hbar t_0}{2ma^2}\right]\mathrm{d}x\\=&\frac{1}{2}+\frac{16}{15\pi}\cos\frac{3\pi^2\hbar t_0}{2ma^2}\end{aligned} \tag{2.9}$$

2.4　一维无限深方势阱中的粒子

题 2.4　设粒子处于无限深方势阱

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

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

(1) 求归一化常数 A;

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

(3) 通过作图来比较 $\psi(x)$ 与 $\psi_1(x)$ 的曲线. 从 $P_1\gg P_n(n\neq 1)$ 来说明两条曲线非常相似;

(4) 求 $\psi(x)$ 下的能量期望值及涨落.

解答　(1) 归一化条件

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

这样可取归一化常数

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

(2) 题给无限深势阱中粒子归一化的能量本征态为

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}\tag{2.10}$$

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

$$\psi(x)=\sum_n c_n\psi_n(x)\tag{2.11}$$

由 $\psi_n(x)$ 的正交归一性得

$$c_n=\int_0^a\psi_n^*(x)\psi(x)\mathrm{d}x=\frac{\sqrt{60}}{a^3}\int_0^a x(a-x)\sin\frac{n\pi x}{a}\mathrm{d}x\tag{2.12}$$

可类似题 3.3 所做进行分部积分，或者直接利用积分公式 (A.13)、(A.14) 完成上面积分即得

$$c_n=\frac{2\sqrt{60}}{\pi^3n^3}\left[1-(-1)^n\right]\tag{2.13}$$

此式当 n 为偶数时为零，只有当 n 为奇数时才不为 0. 故式 (2.11) 的求和只针对奇数 n，即有

$$\psi(x)=\frac{1}{\pi^3}\sqrt{\frac{1920}{a}}\left\{\sin\frac{\pi x}{a}+\frac{1}{27}\sin\frac{3\pi x}{a}+\cdots+\frac{1}{(2k-1)^3}\sin\frac{(2k-1)\pi x}{a}+\cdots\right\}\tag{2.14}$$

即 $\psi(x)$ 是各第奇数个能量本征态的叠加.

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

$$P_n=c_n^*c_n=\left(\frac{4\sqrt{60}}{\pi^3n^3}\right)^2=\frac{960}{\pi^6n^6} \tag{2.15}$$

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

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

(3) $\psi(x)$ 与 $\psi_1(x)$ 的曲线[①]如图 2.1所示.

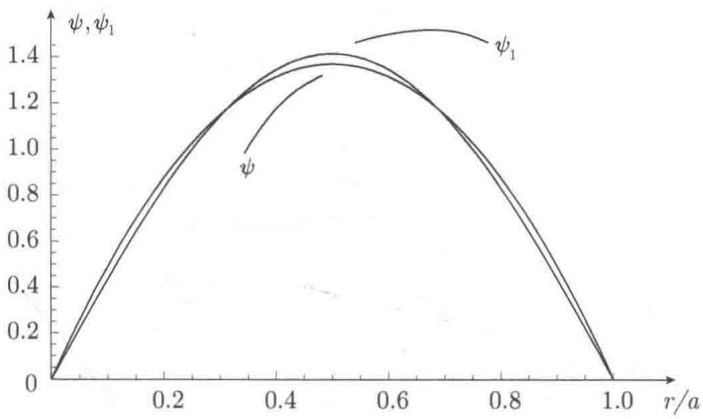


图 2.1　$\psi(x)$ 与 $\psi_1(x)$ 的曲线

由于 $P_1\gg P_n(n\neq1)$，$\psi(x)$ 处于 $\psi_n(x)$(其中 $n\neq1$) 的概率远小于处于 $\psi_1(x)$ 的概率，也就是说 $\psi(x)$ 基本上处于 $\psi_1(x)$ 态. 因此 $\psi(x)$ 与 $\psi_1(x)$ 两条曲线非常相似.

(4) 能量的期望值可以按照已知概率分布的公式计算

$$\overline{E}=\sum_{n=1}^{\infty}c_n^*c_n\cdot E_n=\sum_{n(\text{odd})=1}^{\infty}\frac{960}{\pi^6n^6}\cdot\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}=\frac{960\hbar^2}{2m\pi^4a^2}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{(2k-1)^4} \tag{2.16}$$

将式 (A.30) 的第二式 (可采用 Fourier 级数法计算) 代入式 (2.16) 得

$$\overline{E}=\frac{5\hbar^2}{ma^2} \tag{2.17}$$

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

$$\overline{E^2}=\sum_{n=1}^{\infty}c_n^*c_nE_n^2=\sum_{n(\text{odd})=1}^{\infty}\frac{960}{\pi^6n^6}\cdot\frac{n^4\pi^4\hbar^4}{4m^2a^4}=\frac{240\hbar^4}{\pi^2m^2a^4}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{(2k-1)^2} \tag{2.18}$$

① 图为 Mathematica 软件所绘.

将式 (A.30) 的第一式 (可采用 Fourier 级数法计算) 代入式 (2.18) 得

$$\overline{E^2}=\frac{30\hbar^4}{m^2a^4} \tag{2.19}$$

这样由式 (2.16)、式 (2.19) 得

$$\Delta E=\sqrt{\frac{30\hbar^4}{m^2a^4}-\frac{25\hbar^4}{m^2a^4}}=\frac{\sqrt{5}\hbar^2}{ma^2} \tag{2.20}$$

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

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

同样，为求 ΔE，现在坐标表象利用 $\psi(x)$ 直接计算

$$\begin{aligned}\overline{E^2}&=\int_0^a\psi^*\hat{H}^2\psi\mathrm{d}x=\int_0^a\left(\hat{H}\psi\right)^*\hat{H}\psi\mathrm{d}x\\&=A^2\int_0^a\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(ax-x^2)\right]\cdot\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(ax-x^2)\right]\mathrm{d}x\\&=\frac{30}{a^5}\cdot\frac{\hbar^4}{4m^2}\int_0^a2\cdot2\mathrm{d}x=\frac{30\hbar^4}{m^2a^4}\end{aligned}$$

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

2.5　平面转子

题 2.5　自由转子——一个量子 “刚体”，其 Hamilton 量为 $H=\frac{J_z^2}{2I_z}$，具有惯性矩 I_z，自由地在 xy 平面内转动，φ 为转角.

(1) 找出其能量本征值 E_n 和本征波函数 $\psi_n(\varphi)$;

(2) 在 $t=0$ 时转子由波包 $\psi(0)=A\sin^2\varphi$ 描述，求在 $t>0$ 时的 $\psi(t)$.

解答　(1) 按题意，系统的 Hamilton 量为 $H=\frac{J_z^2}{2I_z}$，系统定态 Schrödinger 方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2I_z}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\psi=E\psi \tag{2.21}$$

其中，φ 的范围为 $0\sim2\pi$. 解此方程可得

$$\psi_k(\varphi)=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\varphi} \tag{2.22}$$

其中，$k=\dfrac{\sqrt{2I_zE}}{\hbar}$. 利用波函数归一化条件，归一化系数可取为

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

再利用周期边条件 $\psi(2\pi)=\psi(0)$ 可知 k 为整数，故可知能量本征态为

$$\psi_n(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}n\varphi},\quad n=0,\pm1,\cdots \tag{2.23}$$

相应能量本征值为

$$E_n=\frac{n^2\hbar^2}{2I_z}$$

(2) 对 $t=0$ 时的波函数 $\psi(0)$ 考虑归一化条件，

$$1=|A|^2\int_0^{2\pi}\sin^4\varphi\mathrm{d}\varphi=|A|^2\frac{3\pi}{4}$$

可取 A 为正实数，则给出

$$A=\frac{2}{\sqrt{3\pi}} \tag{2.24}$$

$\psi(0)$ 用式 (2.23)这一组本征函数展开

$$\begin{aligned}\psi(0) &= A\sin^2\varphi=A\left(\frac{1-\cos2\varphi}{2}\right)=\frac{A}{2}-\frac{A}{2}\frac{\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\varphi}+\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\varphi}}{2}\\ &= \frac{A}{2}-\frac{A}{4}\left(\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\varphi}+\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\varphi}\right)\end{aligned} \tag{2.25}$$

这样 $t>0$ 时的波函数为

$$\begin{aligned}\psi(t) &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\psi(0)=\frac{A}{2}-\frac{A}{4}\left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(-2\varphi+2\hbar t/I_z)}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(2\varphi+2\hbar t/I_z)}\right]\\ &= \frac{A}{2}-\frac{A}{2}\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\hbar t/I_z}\cos2\varphi\end{aligned} \tag{2.26}$$

2.6　禁闭在一维盒中电子对器壁的压力

题 2.6　一个电子被禁闭在一维盒子中，并处于基态上. 盒宽 10^{-10}m，电子能量为 38eV. 计算：

(1) 电子在其第一激发态的能量；

(2) 当电子处于基态时盒壁所受的平均力.

提示　平均力计算利用 Hellmann-Feynman 定理.

解答　设盒宽为 a，一维无限深方势阱中，能量本征值为

$$E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

(1) 第一激发态能量

$$E_2=\frac{4\pi^2\hbar^2}{2ma^2}=4E_1=4\times 38=152(\mathrm{eV})$$

(2) 不妨考察右边盒壁所受的力. 取盒中央为坐标原点，坐标表象右边盒壁所受的力相应力学量为

$$F_r=\theta(x)\frac{\partial V}{\partial x}$$

不妨设盒壁势垒高为 V_0，则

$$F_r(x)=\theta(x)V_0\delta(x-a/2)$$

现在假设该一维盒左边固定，右边在 $b=a/2$ 附近有微小变化，则

$$V=V(x,b)$$

易知

$$F_r(x)=\theta(x)V_0\delta(x-a/2)=-\left.\frac{\partial V(x,b)}{\partial b}\right|_{b=a/2}$$

从而

$$\langle F_r\rangle=-\left\langle\left.\frac{\partial V(x,b)}{\partial b}\right|_{b=a/2}\right\rangle=\left\langle-\frac{\partial\hat{H}}{\partial b}\right\rangle\Bigg|_{b=a/2}$$

利用 Hellmann-Feynman 定理[①]

$$\langle F_r\rangle=-\left.\frac{\partial E_1}{\partial b}\right|_{b=a/2}\tag{2.27}$$

从而

$$\begin{aligned}\langle F_r\rangle&=-\frac{\partial}{\partial b}\left(\frac{\pi^2\hbar^2}{2m(b+a/2)^2}\right)\Bigg|_{b=a/2}=\left.\frac{\pi^2\hbar^2}{m(b+a/2)^3}\right|_{b=a/2}\\&=\frac{2}{a}\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}=7.6\times10^9\mathrm{eV}\cdot\mathrm{cm}^{-1}\end{aligned}$$

说明 1　一维束缚定态 ψ_n 下必有

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

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

① 本处也可以基于波函数进行计算. 该计算和对本题的进一步讨论可参见：张鹏飞, 阮图南, 朱栋培, 吴强, 量子力学习题解答与剖析, 北京：科学出版社, 2011, P.40-44.

说明 2　式 (2.27) 可作解释：若固定无限深势阱壁左侧而令右侧缓慢向外移动微小距离 Δb，则粒子对外做功 $\langle F_r\rangle \Delta b$，结果导致能级降低. 根据能量守恒定律，应有

$$\langle F_r\rangle = -\frac{\partial E_1}{\partial b}$$

与式 (2.27) 一致.

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

$$\overline{F_r} = -\frac{-mv-mv}{T} = \frac{2mv}{2a/v} = \frac{mv^2}{a} = \frac{2E}{a} \tag{2.28}$$

右边势阱壁受到平均作用力为

$$\overline{F_l} = -\frac{2E}{a} = -\overline{F_r} \tag{2.29}$$

这与定态情形的结果一致.

最后我们指出，本处也可以基于波函数进行计算. 该计算和对本题的进一步讨论可参见：张鹏飞, 阮图南, 朱栋培, 吴强, 量子力学习题解答与剖析, 科学出版社, 2011, P.40-44.

2.7　半壁无限高方势阱

题 2.7　设粒子处于半壁无限高的势场中

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

(1) 证明束缚态能级由方程 $\tan(\sqrt{2mE}a/\hbar) = [E/(V_0-E)]^{1/2}$ 给出；

(2) 不进一步求解，大致画出基态波函数的形状.

解答　(1) **证明**　对于束缚态解，$0<E<V_0$. 在 $x<0$ 区域 $\psi(x)=0$. 而在 $0\leqslant x\leqslant a$ 区域，Schrödinger 方程为 $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)\psi(x) = E\psi(x)$，或者

$$\psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi(x) = 0 \tag{2.30}$$

令 $\kappa = \dfrac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}$，则得 $\psi''(x)+\kappa^2\psi(x)=0$，解得

$$\psi(x) = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}\kappa x} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\kappa x} \tag{2.31}$$

在 $x>a$ 区域，Schrödinger 方程为 $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)+V_0\psi(x) = E\psi(x)$，或者

$$\psi''(x) + \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\psi(x) = 0 \tag{2.32}$$

令 $K=\sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar$，得 $\psi''(x)-K^2\psi(x)=0$，解得满足边界条件的波函数为

$$\psi(x)=C\mathrm{e}^{-Kx} \tag{2.33}$$

为确定上述各分区波函数中的系数，需利用分区边界处波函数的连接条件. 由 $x=0$ 处 $\psi=0$ 得 $A+B=0$，即有 $A=-B$，因此

$$\psi(x)=A_0\sin\kappa x$$

在 $x=a$ 处由波函数及导数连续得

$$A_0\sin\kappa a=C\mathrm{e}^{-Ka},\quad A_0\kappa\cos\kappa a=-CK\mathrm{e}^{-Ka}$$

由此得

$$\tan\kappa a=-\frac{\kappa}{K} \tag{2.34}$$

可见与对称方势阱的奇宇称态束缚态能量条件相同，本题的束缚态解实际上是对称方势阱的奇宇称态，也就是

$$\tan(\sqrt{2mE}a/\hbar)=[E/(V_0-E)]^{1/2}$$

(2) 按第 (1) 小题解答过程，基态波函数为

$$\psi(r)=\begin{cases}A\sin\kappa x, & 0\leqslant x\leqslant a\\ A\sin\kappa a\cdot\mathrm{e}^{K(a-x)}, & x>a\end{cases} \tag{2.35}$$

其中，A 为归一化常数，由此作图见图 2.2.

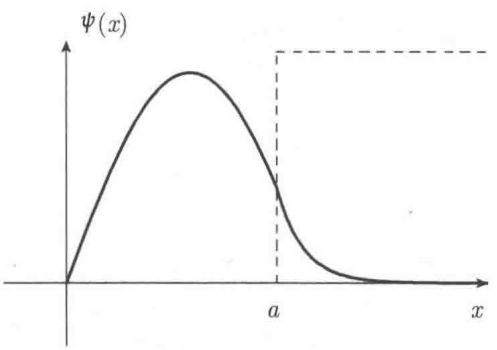


图 2.2　基态波函数

2.8　$H=H_0+\dfrac{\lambda}{m}p$ 的求解

题 2.8　在势 $V(x)$ 中做一维运动的粒子，其运动决定于 Hamilton 量 $H_0=\dfrac{p^2}{2m}+V(x)$，其中 $p=-\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ 为动量算子. 设 E_n^0，$n=1,2,\cdots$ 为 H_0 的本征值，现考虑 Hamilton 量 $H=H_0+\dfrac{\lambda}{m}p$，$\lambda$ 为参数. 给定 λ、m 和 E_n^0，求 H 的本征值.

解答　新 Hamilton 量为

$$\begin{aligned} H &= H_0+\frac{\lambda}{m}p=\frac{p^2}{2m}+\frac{\lambda}{m}p+V(x) \\ &= \frac{(p+\lambda)^2}{2m}+V(x)-\frac{\lambda^2}{2m} \end{aligned}$$

再由于

$$p\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda x/\hbar}\psi^{(0)}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda x/\hbar}(p+\lambda)\psi^{(0)}$$

新波函数 ψ 与旧波函数 $\psi^{(0)}$ 间的关系为

$$\psi=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda x/\hbar}\psi^{(0)}$$

其相应的本征值为

$$E_n=E_n^0-\frac{\lambda^2}{2m}$$

2.9　一维束缚态的逆 (反散射) 问题 (1)

题 2.9　粒子在一维势场中运动，其束缚定态波函数为

(1) $\psi(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{15}{16a^5}}(a^2-x^2), & |x|\leqslant a\\ 0, & |x|>a\end{cases}$;

(2) $\psi(x)=\sqrt{\alpha}\mathrm{e}^{-\alpha|x|}$, $-\infty<x<\infty$;

(3) $\psi(x)=\sqrt{2\alpha^3}x\mathrm{e}^{-\alpha|x|}$, $-\infty<x<\infty$. 求粒子相应的能级及势场 $V(x)$.

解答　这是一维束缚定态的逆问题，亦称为“反散射”问题. 由定态 Schrödinger 方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\right]\psi_E(x)=E\psi_E(x) \tag{2.36}$$

则有

$$V(x)=E+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi_E(x)}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_E(x) \tag{2.37}$$

其中，$-\infty<x<\infty$.

如果给定一个定态波函数 $\psi_E(x)$，则由式 (2.37)给出 $V(x)-E$，欲分别求出 E 和 $V(x)$，还需要附加条件，例如设定 $V(x)$ 的零点.

(1) 对于

$$\psi(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{15}{16a^5}}(a^2-x^2), & |x|\leqslant a\\ 0, & |x|>a\end{cases}$$

由式 (2.37)有

$$V(x)=\begin{cases}E+\dfrac{\hbar^2}{m(x^2-a^2)}, & |x|\leqslant a\\ \infty, & |x|>a\end{cases}$$

取 $x=0$ 处 $V(x)=0$，得

$$E=\frac{\hbar^2}{ma^2},\quad V(x)=\begin{cases}\dfrac{\hbar^2}{ma^2}\dfrac{x^2}{x^2-a^2}, & |x|\leqslant a\\ \infty, & |x|>a\end{cases}$$

(2) 利用 $\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}|x|=2\delta(x)$ 以及

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

可知

$$V(x)=E+\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}-\frac{\hbar^2\alpha}{m}\delta(x)$$

得到

$$E=-\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m},\quad V(x)=-\frac{\hbar^2\alpha}{m}\delta(x)$$

(3) 对于 $\psi(x)=\sqrt{2\alpha^3}x\mathrm{e}^{-\alpha|x|}$，$-\infty<x<\infty$，则

$$V(x)=E+\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}-\frac{\hbar^2\alpha}{m}\left[\frac{1}{|x|}+\delta(x)\right]$$

得到

$$E=-\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m},\quad V(x)=-\frac{\hbar^2\alpha}{m}\left[\frac{1}{|x|}+\delta(x)\right]$$

2.10　一维束缚态的逆 (反散射) 问题 (2)

题 2.10　质量为 m 的一维运动粒子处于能量本征态 $\psi(x)=Ax\mathrm{e}^{-\frac{\alpha^2x^2}{2}}$，求粒子所处的势场.

解答　由 Schrödinger 方程

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

可得

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

代入题给的能量本征态 $\psi(x)=Ax\mathrm{e}^{-\frac{\alpha^2x^2}{2}}$，可得

$$V(x)=E-\frac{3\alpha^2\hbar^2}{2m}+\frac{\hbar^2\alpha^4x^2}{2m}$$

若令 $V(0)=0$，则

$$E=\frac{3\alpha^2\hbar^2}{2m},\quad V(x)=\frac{\hbar^2\alpha^4x^2}{2m}$$

2.11　一维束缚态的逆 (反散射) 问题 (3)

题 2.11　考虑如下一维波函数：

$$\psi(x)=A\left(\frac{x}{x_0}\right)^n \mathrm{e}^{-x/x_0}$$

其中，A, n 与 x_0 为常数.

(1) 利用 Schrödinger 方程，求位势 $V(x)$ 和能量 E，对于它们，该波函数为一本征函数 (假设当 $x\to\infty$ 时，$V(x)\to 0$).

(2) 在你看来该势与轨道角动量为 l 的氢原子态的有效径向势有何联系?

解答　(1) 定态 Schrödinger 方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\right]\psi_E(x)=E\psi_E(x) \tag{2.38}$$

由题中波函数得

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi(x) &= A\frac{n}{x_0}\left(\frac{x}{x_0}\right)^{n-1}\mathrm{e}^{-x/x_0}+A\left(\frac{x}{x_0}\right)^n\left(-\frac{1}{x_0}\right)\mathrm{e}^{-x/x_0}\\
\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x) &= A\frac{n(n-1)}{x_0^2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^{n-2}\mathrm{e}^{-x/x_0}-2A\frac{n}{x_0^2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^{n-1}\mathrm{e}^{-x/x_0}+A\frac{1}{x_0^2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^n\mathrm{e}^{-x/x_0}\\
&= \left[\frac{n(n-1)}{x^2}-2\frac{n}{x_0x}+\frac{1}{x_0^2}\right]\psi(x)
\end{aligned}$$

由定态 Schrödinger 方程，两边消去 $\psi(x)$，得

$$E-V(x)=-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{n(n-1)}{x^2}-\frac{2n}{x_0x}+\frac{1}{x_0^2}\right]$$

当 $x\to\infty$ 时，$V(x)\to 0$，因此

$$E=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{x_0^2}$$

势 $V(x)$ 为

$$V(x)=-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{n(n-1)}{x^2}-\frac{2n}{xx_0}\right]$$

(2) 氢原子有效势为

$$-\frac{e^2}{r}+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}$$

故 $V(x)$ 中正比于 x^{-2} 的项与氢原子势中正比于 r^{-2} 的项形式相同，$V(x)$ 中正比于 x^{-1} 的项与 n 有关，而氢原子势中库仑项却与 l 无关，这是两者的区别.

2.12　一维束缚态的逆 (反散射) 问题 (4)

题 2.12　设波函数 $\psi(x)=A\left(\dfrac{x}{a}\right)^n \mathrm{e}^{-\frac{x}{a}}$ 是一维势 $V(x)$ 中的能量本征态，其中 A, n, a 为常数，当 $x\to 0$ 时，$V(x)\to 0$，求粒子能量和 $V(x)$.

解答　由定态 Schrödinger 方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\right]\psi_E(x)=E\psi_E(x) \tag{2.39}$$

可得

$$V(x)=\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\psi''(x)}{\psi(x)}+E$$

将 $\psi(x)$ 代入上式有

$$V(x)=\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[n(n-1)x^{-2}-\frac{2n}{a}x^{-1}+\frac{1}{a^2}\right]+E$$

由于 $x\to 0$ 时，$V(x)\to 0$，因此

$$E=-\frac{1}{a^2},\quad V(x)=\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[n(n-1)x^{-2}-\frac{2n}{a}x^{-1}\right]$$

2.13　半壁无限深和有限深对称方势阱存在束缚态的条件

题 2.13　考虑下列一维势阱 (图 2.3(a) 和 (b)).

(1) 对任意小的阱深 V_i，每个阱能有一个束缚态吗？定性解释之；

(2) 对于 $V_1=V_2$，两阱束缚态能量之间的关系是什么？

(3) 对给定能量的连续态，每个阱可有多少个独立解？

(4) 定性解释，怎样才能有这样一些束缚态，比起在阱内，它们更像是在阱外.

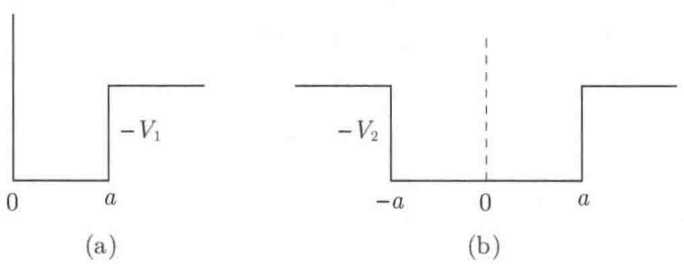


图 2.3　半壁无限深和有限深对称方势阱

解答　(1) 和 (2) 两小题的解此处略.

(3) 对能量 E 给定的连续态，阱 (a) 仅有一个独立解，即在 $x=0$ 处 ψ 为零的“驻波”解，阱 (b) 有两个独立解，对应于沿 x 轴正向和负向传播的两个“行波”解

(4) 这等价于要求 (以奇宇称解为例)

$$1 > \frac{\text{处在阱内的概率}}{\text{处在阱外的概率}} = \frac{\int_0^a A^2\sin^2 kx\mathrm{d}x}{\int_a^\infty B^2\mathrm{e}^{-2k'x}\mathrm{d}x}$$

$$= \frac{A^2}{B^2}\frac{k'a}{\mathrm{e}^{-2k'a}}\left(1-\frac{\sin 2ka}{2ka}\right) = \left(\frac{\mathrm{e}^{-\eta}}{\sin\xi}\right)^2\frac{\eta}{\mathrm{e}^{-2\eta}}\left(1-\frac{\sin 2\xi}{2\xi}\right) = \frac{\eta\left(1-\dfrac{\sin 2\xi}{2\xi}\right)}{\sin^2\xi}$$

式中，$\dfrac{A}{B}=\dfrac{\mathrm{e}^{-\eta}}{\sin\xi}$ 是在 $x=a$ 处波函数连续条件给出的，$\xi=ka$，$\eta=k'a$，$k'=\left(\dfrac{-2mE}{\hbar^2}\right)^{1/2}$，$k=\left(\dfrac{2m(V_i+E)}{\hbar^2}\right)^{1/2}$.

描述 Schrödinger 方程的本征值解的下列方程组:

$$\begin{cases}-\xi\cot\xi=\eta\\ \xi^2+\eta^2=\dfrac{2mV_i}{\hbar^2}a^2\end{cases}$$

当

$$\frac{2mV_ia^2}{\hbar^2}\to\left[\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi\right]^2,\quad n=0,1,2,\cdots$$

时，有解

$$\begin{cases}\xi=\sqrt{\dfrac{2mV_i}{\hbar^2}}a=\left(n+\dfrac{1}{2}\right)\pi\\ \eta=0\end{cases}$$

代入上面概率比值的表达式中，可知这时

$$\frac{\eta}{\sin^2\xi}\left(1-\frac{\sin 2\xi}{2\xi}\right)\to 0$$

故只需要

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

就会有所要求的情况出现.

2.14　δ- 势阱的束缚态

题 2.14　质量为 m 的粒子处在一维短程势 $V(x)=-V_0\delta(x)$ 中，求束缚能.

解法一　Schrödinger 方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}-V_0\delta(x)\right]\psi(x)=E\psi(x)\tag{2.40}$$

由于 $x\neq 0$ 时 $V=0$，束缚态条件要求 $E<0$，在离开原点处，Schrödinger 方程

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

解为

$$\begin{cases}\psi_{\mathrm{I}}=A\mathrm{e}^{kx}, & x<0\\ \psi_{\mathrm{II}}=A\mathrm{e}^{-kx}, & x>0\end{cases}\tag{2.41}$$

其中，$k^2=-\dfrac{2mE}{\hbar^2}$. 在原点附近 $(-\varepsilon,+\varepsilon)$ 范围对式 (2.40)积分，并取极限 $\epsilon\to 0$，

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}-V_0\delta(x)\right]\psi(x)\,\mathrm{d}x=\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}E\psi(x)\,\mathrm{d}x$$

于是

$$\lim_{\varepsilon\to 0}[\psi'(+\varepsilon)-\psi'(+\varepsilon)]+\frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi(0)=0$$

按式 (2.41)，这也就是

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\left[-Ak\mathrm{e}^{-k\varepsilon}-Ak\mathrm{e}^{-k\varepsilon}\right]+\frac{2mV_0}{\hbar^2}A=0$$

上式给出

$$k=\frac{mV_0}{\hbar^2}\tag{2.42}$$

由于 $k^2=-\dfrac{2mE}{\hbar^2}$，所以

$$E=-\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}$$

解法二　对于题给的 δ-势，定态 Schrödinger 方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}-\gamma\delta(x)\right]\psi=E\psi\tag{2.43}$$

对于散射问题，$E>0$. 根据波函数的概率解释以及波函数满足的 Schrödinger 方程，$x=0$ 处波函数连接条件为波函数连续，而波函数导数满足

$$\psi'(0^+)-\psi'(0^-)=\frac{2\mu\gamma}{\hbar^2}\psi(0)\tag{2.44}$$

在 $x\neq 0$ 区域中，方程 (2.43)化为

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi+k^2\psi=0\tag{2.45}$$

其中，$k=\sqrt{2mE}/\hbar$. 上式的两个线性独立解可取为 $\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}kx}$. 考虑到左入射波边条件，本题的解可表示为

$$\psi(x)=\begin{cases}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+r\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}, & x<0\\ s\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}, & x>0\end{cases}\tag{2.46}$$

其中，$\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$ 表示入射波，$r\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$ 表示反射波，$s\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$ 表示透射波. 这里入射波的振幅取为 1，是为了方便，并不影响透射系数和反射系数的计算结果. 根据 $x=0$ 处 ψ 连续条件以及 ψ' 跃变条件 (2.44)可得出

$$\begin{cases} 1+r=s \\ 1-r=s-\dfrac{2\mu\gamma}{\hbar^2\mathrm{i}k} \end{cases} \tag{2.47}$$

消去 R，得

$$s=\frac{1}{1-\dfrac{\mathrm{i}m\gamma}{\hbar^2k}} \tag{2.48}$$

从而可求出

$$r=s-1=-\frac{\dfrac{\mathrm{i}m\gamma}{\hbar^2k}}{1-\dfrac{\mathrm{i}m\gamma}{\hbar^2k}} \tag{2.49}$$

把此结果解析延拓到 $E<0$(复 k) 能域，可以看出

$$k=\mathrm{i}\frac{\mathrm{i}m\gamma}{\hbar^2k} \tag{2.50}$$

正是 s 和 $r=s-1$ 的简单极点 (simple pole). 此时

$$E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}=-\frac{m\gamma^2}{2\hbar^2} \tag{2.51}$$

这正是 δ-势阱中唯一的束缚能级. 所以 δ-势阱中的束缚能级所在，对应于反射或透射波幅的极点是 $k=\dfrac{\mathrm{i}m\gamma}{\hbar^2k}$，此极点在复 k 平面的正虚轴上.

说明　根据散射理论[①]，散射振幅在复波数平面上正虚轴上的极点，对应势阱的束缚能级. 而在复 k 平面上的极点，对应共振态. 如在高能物理中，散射振幅的极点法是寻找束缚态和共振态的基本方法之一.

2.15　δ-势阱的束缚态中，使粒子处于 $|x|<x_0$ 的概率为 $1/2$ 的 x_0 值

题 2.15　质量为 m 的非相对论粒子在势 $V(x)=-V_0\delta(x)$ 中做一维运动. 粒子处于束缚态，求 x_0 值，使得粒子处于 $|x|<x_0$ 的概率为 $1/2$.

解答　接前面题 2.14 的求解，质量为 m 的非相对论粒子在势 $V(x)=-V_0\delta(x)$ 中做一维运动的束缚态解为

$$\psi=A\mathrm{e}^{-k|x|} \tag{2.52}$$

其中，k 如式 (2.42)所给，A 为归一化系数. 归一化条件

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

① 参见 R G. Newton, *Scattering Theory of Waves and Particles*, Mc Graw-Hill, N. Y. 1966; H. M Nussenzweig, *Causality and Dispersion Relation*, Academic, N. Y. 1972.

故 A 可取为正数 $A=1/\sqrt{k}$. 粒子处于 $|x|<x_0$ 的概率为

$$\begin{aligned} P(|x|<x_0) &= 2|A|^2\int_0^{x_0}\mathrm{e}^{-2kx}\mathrm{d}x \\ &= |A|^2k\left(1-\mathrm{e}^{-2kx_0}\right) \end{aligned}$$

按题意要求上式等于 $1/2$，即

$$1-\mathrm{e}^{2kx_0}=\frac{1}{2},\quad \mathrm{e}^{-2kx_0}=\frac{1}{2}$$

也就是

$$x_0=\frac{\ln 2}{k}=\frac{\hbar^2\ln 2}{mV_0}$$

2.16　势无限高的墙壁外存在 δ-势，粒子在该势场中做一维运动

题 2.16　对一质量为 m 的非相对论粒子在势场中做一维运动，势函数如图 2.4 所示，

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

定义如下量: $k=\sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$, $\alpha=\dfrac{2mV}{\hbar^2}$. 在 $t=0$ 时，粒子波函数完全禁闭在 $-a<x<0$ 的区域中.

(1) 写出 $t=0$ 时粒子最低能量的归一化波函数;

(2) 给出能量本征函数

$$\psi_k(x)=\psi_k^{\mathrm{I}}(x),\quad \psi_k(x)=\psi_k^{\mathrm{II}}(x)$$

所必须满足的边界条件. 其中两区域为 (I)$-a<x<0$ 及 (II)$x\geqslant 0$;

(3) 求两区域中满足边界条件的能量本征波函数 (实数的) 解，准确到一个常因子;

(4) $t=0$ 时的波函数 $\psi(x)$ 可表示为能量本征波函数 $\psi_k(x)$ 的积分

$$\psi(x)=\int_{-\infty}^{+\infty}f(k)\psi_k(x)\mathrm{d}k$$

指明怎样从解 $\psi_k(x)$ 确定 $f(k)$;

(5) 利用 $f(k)$ 给出一个波函数随时间演变的表达式. 经过长时间后， k 的什么值支配着时间演化过程?

解答　(1) 按题设在 $t=0$ 时，粒子波函数完全禁闭在 $-a<x<0$ 的区域中，要找的波函数 $\psi(x)$ 满足边界条件 $\psi(-a)=\psi(0)=0$. 对满足这两个边界条件并定义在 $-a<x<0$ 中的函数，有如下一组正交、归一、完备基:

$$\phi_n(x)=\begin{cases} \sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\left(\dfrac{\pi nx}{a}\right), & -a<x<0 \\ 0, & \text{其他} \end{cases}$$

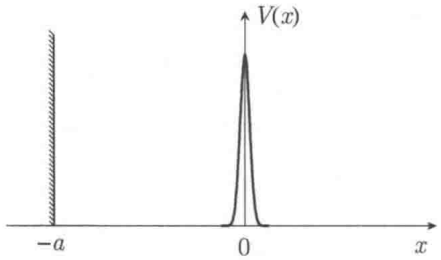


图 2.4　势无限高的墙壁外存在 δ-势

这里 $n=1,2,\cdots$. 它们在 $[-a,0]$ 内满足 Schrödinger 方程，并且

$$\langle\phi_n|H|\phi_m\rangle=E_n\delta_{mn},\quad E_n=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2$$

所求的归一化的最低能量波函数为

$$\psi(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\left(\dfrac{\pi x}{a}\right), & -a<x<0\\ 0, & \text{其他}\end{cases}$$

(2) 这时的 Schrödinger 方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi+V_0\delta(x)\psi=E\psi \tag{2.53}$$

或者

$$\psi''(x)+k^2\psi(x)=a\delta(x)\psi(x) \tag{2.53'}$$

边界条件为

$$\psi^{\mathrm{I}}(-a)=0,\quad \psi^{\mathrm{I}}(0)=\psi^{\mathrm{II}}(0),\quad \psi^{\mathrm{III}}(+\infty)=\text{有限},\quad \psi^{\mathrm{II}\prime}(0)-\psi^{\mathrm{I}\prime}(0)=a\psi^{\mathrm{I}}(0) \tag{2.54}$$

其中，ψ 上标 I 表示这是 $-a<x<0$ 区间的波函数，ψ 上标 II 表示这是 $x>0$ 区间的波函数. 上式最后一个关于导数不连续的条件是将 Schrödinger 方程对包含 $x=0$ 点的小区间 $[-\varepsilon,\varepsilon]$ 积分，令 $\varepsilon\to0$ 取极限而得.

由于本问题势函数的特点，粒子不存在束缚态，故 k 连续取值.

(3) 满足第 (2) 小题中方程 (2.53′) 和边界条件 (2.54)的解为

$$\psi_k(x)=\begin{cases}\psi_k^{\mathrm{I}}(x)=c_k\sin k(x+a), & -a<x<0\\ \psi_k^{\mathrm{II}}(x)=c_k\sin k(x+a)+A_k\sin kx, & x\geqslant0\\ 0, & x<-a\end{cases} \tag{2.55}$$

由第 (2) 小题中边界条件 (2.54)可得

$$A_k=\frac{a}{k}\sin ka,\quad c_k=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\left[1+\left(\frac{a\sin ka}{k}\right)^2+\frac{a\sin 2ka}{k}\right]^{-1/2}$$

(4) 将 $t=0$ 时的波函数 $\psi(x)$ 按上面 $\psi_k(x)$ 展开：

$$\psi(x)=\int_{-\infty}^{+\infty}f(k)\psi_k(x)\mathrm{d}k \tag{2.56}$$

设 $\psi_k(x)$ 已归一到 δ-函数，$\int\psi_k(x)\psi_{k'}(x)\mathrm{d}x=\delta(k-k')$. 利用 $\psi_k(x)$ 的正交归一性，得

$$\begin{aligned}\int_{-a}^{+\infty}\psi_{k'}^*(x)\psi(x)\mathrm{d}x &= \iint f(k)\psi_k(x)\psi_{k'}^*(x)\mathrm{d}k\mathrm{d}x\\ &= \int_{-\infty}^{+\infty}f(k)\delta(k-k')\mathrm{d}k=f(k')\end{aligned}$$

或者

$$f(k)=\int_{-a}^{+\infty}\psi_k^*(x)\psi(x)\mathrm{d}x \tag{2.57}$$

(5) 由于

$$\psi(x)=\psi(x,0)=\int_{-\infty}^{+\infty}f(k)\psi_k(x)\mathrm{d}k$$

所以

$$\psi(x,t)=\int_{-\infty}^{+\infty}f(k)\psi_k(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_kt/\hbar}\mathrm{d}k$$

在 $t=0$ 时，粒子处于宽为 a 的无限深方势阱的基态上，是一个波包. 当 $t>0$ 时，由于 δ-势垒的可穿透性，总趋势是波包要弥散到 $x>0$ 区域. 为具体研究起见，先计算 $f(k)$：

$$\begin{aligned}f(k) &= \int_{-a}^{0}c_k\sin k(x+a)\cdot\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x}{a}\mathrm{d}x\\ &= \sqrt{\frac{1}{2a}}\int_{-a}^{0}c_k\left\{\cos\left[\left(k-\frac{\pi}{a}\right)x+ka\right]-\cos\left[\left(k+\frac{\pi}{a}\right)x+ka\right]\right\}\mathrm{d}x\\ &= \frac{\pi}{a}\sqrt{\frac{2}{a}}\frac{\sin ka}{k^2-\left(\frac{\pi}{a}\right)^2}c_k\end{aligned}$$

这样

$$\psi(x,t)=\frac{\pi}{a}\sqrt{\frac{2}{a}}\int_{-\infty}^{+\infty}c_k\frac{\sin ka}{k^2-\left(\frac{\pi}{a}\right)^2}\left\{\begin{array}{l}\sin k(x+a)\\ \sin k(x+a)+\dfrac{a}{k}\sin ka\sin kx\end{array}\right\}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_kt/\hbar}\mathrm{d}k \tag{2.58}$$

其中，$E_k=\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}$，大括号中取上一行还是下一行要视等式的 x 取值在哪个区域中而定.

当 $t\to\infty$ 时，振动因子 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_kt/\hbar}$ 无限加快，而积分号下其余函数关于 k 是正规的 ($k=\pi/a$ 并非极点)，因此对任何给定的 x 值，积分所得的 $\psi(x,t)$ 均趋于零. 显然，当 t 很大时，小波数 k 的成分起主要作用，此时粒子实际上已“逃离” $[-a,0]$ 区域.

2.17　一维束缚态逆问题

题 2.17　处于一维势 $V(x)$ 中的一个质量为 μ 的粒子，其波函数由下式给出：

$$\psi(x,t)=\begin{cases}\alpha x\mathrm{e}^{-\beta x}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma t/\hbar}, & x>0\\ 0, & x<0\end{cases}$$

其中，α、β 和 γ 都是正常数.

(1) 粒子处于束缚态吗？为什么？

(2) 测量到粒子的总能量为 E 的概率密度 $\rho(E)$ 等于多少？

(3) 用已知的量求出 $V(x)$ 的最低能量本征值.

解答　该粒子处于束缚态. 因为其波函数在无穷远处为零 $\lim\limits_{x\to\infty}\psi(x,t)=0$:

$$\lim_{x\to\infty}\psi(x,t)=\lim_{x\to\infty}\alpha x\mathrm{e}^{-\beta x}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma t/\hbar}x=0,\quad \beta>0$$

并且易知满足平方可积. 将 $x>0$ 时的波函数 $\alpha x\mathrm{e}^{-\beta x}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma t/\hbar}$ 代入 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x}+V(x)\right]\psi(x,t)$$

则得

$$-\gamma x=-\frac{\hbar^2}{2\mu}(\beta^2x-2\beta)+V(x)x$$

由此可解出 $x>0$ 时的势

$$V(x)=-\gamma+\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\beta^2-\frac{2\beta}{x}\right)$$

现在求势 $V(x)$ 作用下粒子的定态波函数. $\psi_E(x)$ 满足方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}-\beta^2+\frac{2\beta}{x}\right)\psi_E(x)=(E+\gamma)\psi_E(x),\quad x>0$$

也就是

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi_E(x)}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[\left(E+\gamma-\frac{\beta^2\hbar^2}{2\mu}\right)+\frac{\beta\hbar^2}{\mu}\frac{1}{x}\right]\psi_E(x)=0$$

若令

$$E'=E+\gamma-\frac{\beta^2\hbar^2}{2\mu},\quad e^2=\frac{\beta\hbar^2}{\mu}$$

则以上方程化为

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi_E(x)}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2M}{\hbar^2}\left(E'+\frac{e^2}{x}\right)\psi_E(x)=0,\quad x>0$$

注意到 $\psi_E(x)\xrightarrow{x\to0}0$，即知上式为 $l=0$ 的氢原子径向波函数 $\chi_{n0}(x)=xR_{n0}(x)$ 所满足的方程. 这里相应的 Bohr 半径为

$$\alpha=\frac{\hbar^2}{\mu e^2}=\frac{1}{\beta}$$

而能级为

$$E'_n=-\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}=-\frac{\beta^2\hbar^2}{2M}\frac{1}{n^2},\quad n=1,2,\cdots$$

从而

$$E_n=-\gamma+\frac{\beta^2\hbar^2}{2M}\left(1-\frac{1}{n^2}\right),\quad n=1,2,\cdots$$

所以，最低的能量本征值为

$$E_1=-\gamma$$

容易看出粒子的波函数 $\psi(x,t)=\alpha x\mathrm{e}^{-\beta x}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma t/\hbar}\propto\psi_{E_1}(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_1t/\hbar}$，所以

$$\rho(E)=\begin{cases}1, & E=-\gamma\\ 0, & E\neq-\gamma\end{cases}$$

2.18　粒子在阶跃势与 δ-势叠加的势场中运动

题 2.18　质量为 μ 的粒子在一维势场

$$V(x)=-\alpha\delta(x)+V',\quad V'=\begin{cases}0, & x<0\\ V_0, & x>0\end{cases}$$

中运动，其中 α 与 V_0 均为实数.

(1) 试给出存在束缚态的条件，并给出其能量本征值和相应的本征函数；

(2) 给出粒子处于 $x>0$ 区域中的概率，它是大于 $1/2$，还是小于 $1/2$，为什么？

解答　由于当 $x\to-\infty$ 时，$V=0$，粒子在此势场中的束缚定态能量必定 $E<0$，令

$$E=-|E|,\quad \beta=\sqrt{\frac{2\mu|E|}{\hbar^2}},\quad \gamma=\sqrt{\frac{2\mu(V_0+|E|)}{\hbar^2}}\tag{2.59}$$

不包括 $x=0$ 点的定态方程为

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2}=\beta^2\psi(x),\quad x<0\tag{2.60}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2}=\gamma^2\psi(x),\quad x>0\tag{2.61}$$

$\psi(x)$ 满足条件

$$\psi(0^+)=\psi(0^-),\quad \psi(\pm\infty)=0\tag{2.62}$$

$$\psi'(0^+)-\psi'(0^-)=-\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}\psi(0)\tag{2.63}$$

方程 (2.60)与 (2.61)满足条件 (2.62)的解为

$$\psi(x)=\begin{cases}A\mathrm{e}^{\beta x}, & x<0\\ A\mathrm{e}^{-\gamma x}, & x>0\end{cases} \tag{2.64}$$

将式 (2.64)代入式 (2.63)得

$$\gamma+\beta=\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}$$

或者

$$\sqrt{\frac{2\mu(V_0+E)}{\hbar^2}}=\frac{2\mu a}{\hbar^2}-\sqrt{\frac{2\mu|E|}{\hbar^2}} \tag{2.65}$$

式 (2.65)两边平方，得

$$\sqrt{\frac{2\mu|E|}{\hbar^2}}=\frac{1}{2\alpha}\left(\frac{2\mu\alpha^2}{\hbar^2}-V_0\right) \tag{2.66}$$

显然 E 有解的条件是

$$\frac{2\mu\alpha^2}{\hbar^2}>V_0 \text{ 或 } \alpha^2>\frac{\hbar^2V_0}{2\mu}$$

这正是存在束缚态的条件. 由式 (2.66)得

$$|E|=\frac{\hbar^2}{8\mu\alpha^2}\left(\frac{2\mu\alpha^2}{\hbar^2}-V_0\right)^2 \tag{2.67}$$

也就是

$$E=-\frac{\hbar^2}{8\mu\alpha^2}\left(\frac{2\mu\alpha^2}{\hbar^2}-V_0\right)^2$$

相应的波函数如式 (2.64)所得，其中 β 与 γ 是由式 (2.59)与式 (2.67)决定的已知量. 常数 A 由归一化条件确定为

$$A=\left(\frac{2\beta\gamma}{\beta+\gamma}\right)^{1/2}$$

粒子处于 $x>0$ 区的概率为

$$|A|^2\int_0^\infty \mathrm{e}^{-\gamma x}\mathrm{d}x=\frac{\beta}{\beta+\gamma}<\frac{1}{2}$$

这是因为 $\beta>0$, $\gamma>0$, $\beta<\gamma$.

2.19　无限深势阱中央有一个 δ-势垒，粒子在其中运动

题 2.19　粒子在势场 (图 2.5)

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

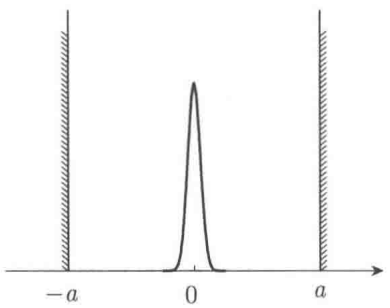


图 2.5　无限深势阱中央有一个 δ-势垒

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

解答　由于 $V(x)\geqslant 0$，所以 $E>0$. 在 $V(x)\to\infty$ 处，波函数应该趋于 0，所以有边界条件

$$\psi(x)=0,\quad |x|\geqslant L \tag{2.68}$$

也就是波函数只在阱内 ($|x|\leqslant L$) 不为零. 在阱内能量本征方程为

$$\psi''+\frac{2m}{\hbar^2}[E-V_0\delta(x)]\psi=0 \tag{2.69}$$

$x=0$ 处，ψ 连续条件给出

$$\psi(0^+)=\psi(0^-) \tag{2.70}$$

而 ψ' 的跃变条件为

$$\psi'(0^+)-\psi'(0^-)=\frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi(0) \tag{2.71}$$

现令

$$k=\sqrt{2mE}/\hbar \tag{2.72}$$

$x\neq 0$ 处，式 (2.69) 可以写成

$$\psi''+k^2\psi=0 \tag{2.73}$$

其解为

$$\psi=\sin kx,\ \cos kx \tag{2.74}$$

在 $-a<x<0$ 和 $0<x<a$ 两个区域，ψ 均可表示成 $\sin kx$ 和 $\cos kx$ 的线性叠加，同时还要满足边界条件 (2.68) 和 $x=0$ 处连接条件式 (2.70)、(2.71).

因位势 $V(x)$ 具有反射对称性，所以束缚定态有确定宇称. 先讨论奇宇称态，由于 $\psi(-x)=-\psi(x)$，当 $x\to 0$ 时，必有 $\psi(0)=0$，则由式 (2.71) 就有 $\psi'(0^+)-\psi'(0^-)=0$，即 ψ 在 $x=0$ 处是连续的. 由此可见，δ-势垒的存在对奇宇称态并无影响，波函数和能级应和无限深势阱的相同，波函数为

$$\psi(x)=C\sin kx,\quad -a<x<a \tag{2.75}$$

由边界条件 (2.68)，得到

$$k = n\pi/a, \quad n = 1,2,3,\cdots \tag{2.76}$$

给出能级为

$$E_2 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2, \quad n = 1,2,3,\cdots \tag{2.77}$$

归一化的能量本征函数为

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}, \quad n = 1,2,3,\cdots \tag{2.78}$$

由式 (2.74) 的解叠加的偶宇称态 ψ(满足 $\psi(-x) = \psi(x)$) 的一般形式为

$$\psi = \begin{cases} A\cos kx + B\sin kx, & 0 < x < a \\ A\cos kx - B\sin kx, & -a < x < 0 \end{cases} \tag{2.79}$$

由边界条件 (2.68)，得到

$$A\cos ka + B\sin ka = 0 \tag{2.80}$$

由 ψ' 跃变条件 (2.71)，得到

$$Bk = mV_0 A/\hbar^2 \tag{2.81}$$

联立式 (2.80)、式 (2.81) 即得能级方程

$$\tan ka = -\frac{\hbar^2}{m\gamma a}ka = -\frac{b}{a}ka \tag{2.82}$$

其中，$b = \hbar^2/m\gamma$ 是 δ-势垒的特征长度，对于给定的 a、b 后，可用图解法或数值解法求出 k，而偶宇称能级

$$E' = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{2.83}$$

若令

$$\xi = ka$$

式 (2.82)变为

$$\xi\cot\xi = -a/b \tag{2.84}$$

定态能量 E 由曲线 $y_1 = -\xi\cot\xi$ 和直线 $y_2 = b/a$ 的交点 ξ_i 决定 (图 2.6)，

$$E'_i = \frac{\xi_i^2\hbar^2}{2\mu a^2}$$

最低能量为 $E'_1 = \dfrac{\xi_1^2\hbar^2}{2\mu a^2}$. 因为

$$\frac{\pi}{2} < \xi_1 < \pi$$

因而

$$\frac{\pi^2\hbar^2}{8\mu a^2} < E'_1 < \frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}$$

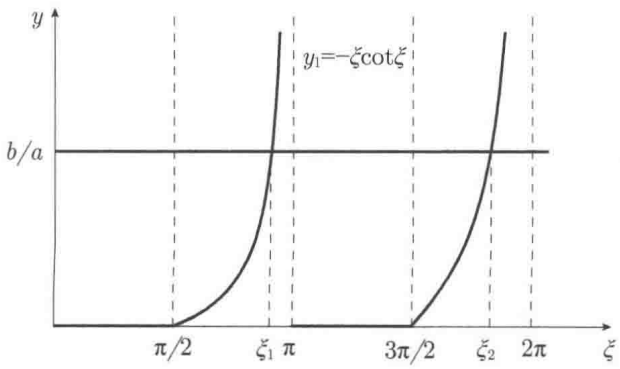


图 2.6　图解法求解偶宇称能级

前面奇宇称解中的最低能量为 $E_2=\dfrac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}$. 可见体系的基态能量是 E_1'，第一激发态能量是 E_2.

当 $a\gg b$，即 $\gamma\gg n\pi\hbar^2/ma$ 时，式 (2.82)可近似为 $\tan ka\approx 0$，由此得近似解

$$ka\approx n\pi,\quad n=1,2,3,\cdots \tag{2.85}$$

给出近似能级

$$E\approx\frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2,\quad n=1,2,3,\cdots \tag{2.86}$$

这种情况下相当于 δ-势垒作用足够强，阻碍了两边粒子的穿透，将原来的无限深势阱分隔成两个宽为 a 的无限深势阱，上式也即其能级公式.

当 $a\ll b$，即 $\gamma\ll\hbar^2/ma$ 时，式 (2.82) 近似为 $\cot ka\approx 0$，由此得近似解

$$ka\approx\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi,\quad n=0,1,2,\cdots \tag{2.87}$$

给出近似能级

$$E=\frac{1}{2m}\left[\frac{(2n+1)\pi\hbar}{2a}\right]^2,\quad n=0,1,2,\cdots \tag{2.88}$$

这种情况下相当于 δ-势垒作用足够弱，粒子从一边到另一边的穿透基本不受阻碍. 这样 δ-势垒基本可以忽略. 式 (2.88) 正是无限深势阱中偶宇称态的能级公式.

式 (2.77) 和式 (2.88) 可以统一写成

$$E=\frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{2a}\right)^2,\quad n=1,2,3,\cdots \tag{2.89}$$

偶数 n 对应奇宇称态，上式给出精确能级；奇数 n 对应偶宇称态，上式给出近似能级.

2.20　处于一维谐振子叠加态的位置期望值

题 2.20　考虑一谐振子，令 ψ_0 和 ψ_1 分别为它的基态与第一激发态的波函数 (均为实的和归一化的). 令 $A\psi_0+B\psi_1$ 是某一瞬时振子的波函数，A 和 B 是实数. 证明 x 的期望值一般不为零. A 和 B 取什么值时 $\langle x\rangle$ 为最大和最小?

解答　记谐振子的归一化本征态 ψ_n，当 n 为奇 (偶) 数时，ψ_n 分别为奇 (偶) 函数. 利用 ψ_0 和 ψ_1 以及 A 和 B 的实数性，x 的期望值

$$\begin{aligned}\langle x\rangle &= \int (A\psi_0+B\psi_1)^* x(A\psi_0+B\psi_1)\mathrm{d}x\\ &= \int (A^*B\psi_0^*x\psi_1+AB^*\psi_1^*x\psi_0)\mathrm{d}x = 2AB\int \psi_1 x\psi_0\mathrm{d}x\\ &= \left[1-(A-B)^2\right]\int \psi_1 x\psi_0\mathrm{d}x\end{aligned}$$

上式最后一个等号用了 $A^2+B^2=1$. 可见 $\langle x\rangle$ 一般不为零. 利用相应态归一化波函数

$$\begin{aligned}\psi_0 &= \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}\\ \psi_1 &= \sqrt{\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}2\alpha x\end{aligned}$$

可知 $x\psi_0=\dfrac{1}{\sqrt{2}\alpha}\psi_1$. 这样

$$\int \psi_1 x\psi_0\mathrm{d}x = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}\int \psi_1\psi_1\mathrm{d}x = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}$$

因而

$$\langle x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}\left[1-(A-B)^2\right]$$

考虑到 $A^2+B^2=1$，$A=B=\sqrt{1/2}$ 时，$\langle x\rangle$ 最大；$A=-B=\sqrt{1/2}$ 时，$\langle x\rangle$ 最小. 也就是

$$\langle x\rangle_{\max} = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha},\quad \langle x\rangle_{\min} = -\frac{1}{\sqrt{2}\alpha}$$

2.21　考察原子在势壁附近行为的近似模型

题 2.21　原子在势壁附近的行为，可以从下面的近似模型出发考察：一个粒子在一维势 (图 2.7)

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

中运动.

(1) 求出当势壁离粒子很远时，对束缚态能量的修正值，还要说明多远才算是“很远”;

(2) 至少存在一个束缚态时，V_0 和 d 应满足什么严格条件?

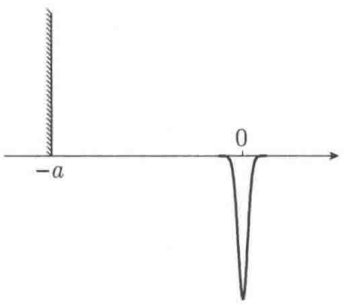


图 2.7　考察原子在势壁附近行为的近似模型

解答　(1) Schrödinger 方程为

$$\psi''+\frac{2m}{\hbar^2}\left[E+V_0\delta(x)\right]\psi=0,\quad x>-a \tag{2.90}$$

记 $\kappa=\dfrac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$,

$$\kappa=\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}\text{ 或 }E=-\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} \tag{2.91}$$

再定义特征长度

$$b=\frac{\hbar^2}{mV_0} \tag{2.92}$$

这样能量本征方程 (2.90) 可以写成

$$\psi''-\kappa^2\psi-\frac{2}{b}\delta(x)\psi=0,\quad x>-a \tag{2.93}$$

解的形式为

$$\psi(x)=\begin{cases}A\mathrm{e}^{\kappa x}+B\mathrm{e}^{-\kappa x}, & -a<x<0\\ \mathrm{e}^{-\kappa x}, & x>0\end{cases} \tag{2.94}$$

波函数连续条件和在 $x=0$ 处的导数跃变条件给出

$$\begin{cases}A+B=1\\ -\kappa-(A\kappa-B\kappa)=-\dfrac{2}{b}\\ A\mathrm{e}^{-\kappa a}+B\mathrm{e}^{\kappa a}=0\end{cases} \tag{2.95}$$

所以

$$A=-\frac{\mathrm{e}^{2\kappa a}}{1-\mathrm{e}^{2\kappa a}},\quad B=\frac{1}{1-\mathrm{e}^{2\kappa a}} \tag{2.96}$$

并有

$$\kappa b=1-\mathrm{e}^{-2\kappa a} \tag{2.97}$$

壁远离粒子意味着 $\kappa d\gg1$，则上式右边的 κ 可以用 $\dfrac{1}{b}=\dfrac{mV_0}{\hbar^2}$ 代替，即有

$$\kappa\approx\frac{mV_0}{\hbar^2}\left[1-\exp\left(-\frac{2mV_0a}{\hbar^2}\right)\right]$$

于是

$$
\begin{aligned}
E=-\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} &\approx -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{mV_0}{\hbar^2}\right)^2\left[1-\exp\left(\frac{2mV_0a}{\hbar^2}\right)\right]^2 \\
&\approx -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}\left[1-2\exp\left(-\frac{2mV_0a}{\hbar^2}\right)\right] \\
&=-\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}+\frac{mV_0^2}{\hbar^2}\exp\left(-\frac{2mV_0a}{\hbar^2}\right)
\end{aligned}
$$

后一项即为能量修正. 从上面可以看出，如果要使能量修正很小，就应有

$$
a>\frac{1}{\kappa}=\frac{\hbar^2}{mV_0}
$$

这就是“远离”的含义.

(2) 若通过式 (2.97)可解出 κ，即可由式 (2.91) 确定奇宇称束缚态的能量 E；由前式可见 κ 从而 E 是 a、b 的函数. 由式 (2.97) 看出，κ 的可能取值范围为

$$
0<\kappa<\frac{1}{b}
$$

因此 E 的可能取值范围为

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

若定义无量纲量 $\varepsilon=\kappa b$，则上式又可表示为

$$
\varepsilon=1-\mathrm{e}^{-\frac{2a}{b}\varepsilon} \tag{2.98}
$$

构造函数 $f(\varepsilon)=\varepsilon-1+\mathrm{e}^{-\frac{2a}{b}\varepsilon}$，问题转化为求 $f(\varepsilon)$ 的正根，即求解

$$
f(\varepsilon)=\varepsilon-1+\mathrm{e}^{-\frac{2a}{b}\varepsilon}=0 \tag{2.99}
$$

上面构造的函数 $f(\varepsilon)$ 满足 $f(0)=0$[①]，$f(+\infty)=+\infty$. $f'(\varepsilon)=1-\dfrac{2a}{b}\mathrm{e}^{-\frac{2a}{b}\varepsilon}$，当 $\varepsilon>0$ 时 $f'(\varepsilon)>f'(0)=1-\dfrac{2a}{b}$. 故当 $b\geqslant 2a$ 时，$f'(\varepsilon)>0$，$f'(\varepsilon)$ 在 $(0,+\infty)$ 上恒正，知 $f(\varepsilon)$ 在此区间上是增函数，结合 $f(0)=0$ 知在 $(0,+\infty)$ 上 $f(\varepsilon)>0$，故当 $b\geqslant 2a$ 时 $f(\varepsilon)$ 没有正根，因此此时不存在奇宇称束缚态. 因此存在束缚态的必要条件是 $b<2a$. 当 $b<2a$ 时，$f''(\varepsilon)=\dfrac{4a^2}{b^2}\mathrm{e}^{-\frac{2a}{b}\varepsilon}>0$，可见 $f'(\varepsilon)$ 是增函数. $f'(0)=1-\dfrac{2a}{b}<0$，$f'(+\infty)=1$. 根据连续函数中值定理并由 $f'(\varepsilon)$ 是增函数，$f'(\varepsilon)$ 在 $(0,+\infty)$ 上有唯一零点，设为 ε_0. 由 $f'(\varepsilon_0)=1-\dfrac{2a}{b}\mathrm{e}^{-\frac{2a}{b}\varepsilon_0}=0$ 解得 $\varepsilon_0=\dfrac{b}{2a}\ln\dfrac{2a}{b}$. 当 $0<\varepsilon<\varepsilon_0$ 时，$f'(\varepsilon)<0$；当 $\varepsilon>\varepsilon_0$ 时，$f'(\varepsilon)>0$. 因此当 $0<\varepsilon<\varepsilon_0$ 时，$f(\varepsilon)$ 从 0 递减到 $f(\varepsilon_0)=\dfrac{b}{2a}\ln\dfrac{2a}{b}+\dfrac{b}{2a}-1\ (<0)$ 为最小值. 当 $\varepsilon>\varepsilon_0$ 时，$f(\varepsilon)$ 从 $\dfrac{b}{2a}\ln\dfrac{2a}{b}+\dfrac{b}{2a}-1$ 递

① 即 $\varepsilon=0$ 为 $f(\varepsilon)$ 的根，这相应于 $\kappa=0(E=0)$，不是束缚态能量.

增到 $f(+\infty)=+\infty$. 由连续函数中值定理并由于 $f(\varepsilon)$ 在 $\varepsilon>\varepsilon_0$ 上的递增性, $f(\varepsilon)$ 在 $\varepsilon>\varepsilon_0$ 上有唯一的根 ε^*, 这相应于系统唯一的束缚态. 存在束缚态的充要条件是

$$V_0>\frac{\hbar^2}{2\mu a} \tag{2.100}$$

V_0 从较小的值逐渐增加到 $\dfrac{\hbar^2}{2\mu a}+0^+$, 就开始出现束缚态, 而其能量 $E=0^-$.

说明 1　要使式 (2.98)有解, 从图 2.8 中可以看出, 应有曲线 $y=1-\mathrm{e}^{-\frac{2a}{b}\varepsilon}$ 在原点处的斜率大于 $y=\varepsilon$ 的斜率, 即

$$\left.\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}\varepsilon}\right|_{\varepsilon=0}=\frac{2a}{b}>1$$

也就是 $2a>b$, 这样同样给出式 (2.100).

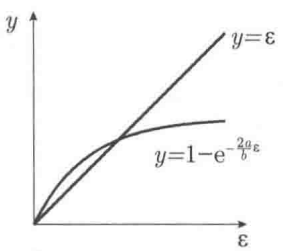


图 2.8　存在束缚态的条件

说明 2　为得到存在束缚态的条件, 也可设想 V_0 从较小的值逐渐增加, 最先出现的束缚态必定能量 $E=0^-$, 而 $\kappa\sim 0$, 代入式 (2.97), $\sinh\kappa a\sim\kappa a$, $\sinh\kappa a\sim 1$, 则 $2a=b$, 这给出存在束缚态所要求 V_0 的下限, 这样同样给出式 (2.100).

2.22　Dirac 梳对粒子的散射发生完全反射的条件

题 2.22　质量为 m 的粒子束以动量 $p=\hbar k$ 从 $x=-\infty$ 入射, 碰到周期性 δ-势垒

$$V(x)=\gamma\sum_{n=0}^{\infty}\delta(x-na),$$

其中 $a>0$, 求发生完全反射的动量值.

解答　(坐标表象) 为了便于讨论, 先设 δ-势垒总数为 N, 最后再令 $N\to\infty$. 各势垒位置依次为

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

它们将 $-\infty<x<\infty$ 空间分隔成 $(N+1)$ 个区间, 记 $(n-1)a<x<na$ 区间为第 n 区 ($x<0$, 为第 0 区, $x>Na$, 为第 N 区). 波函数 ψ 满足能量本征方程

$$\psi''(x)+k^2\psi(x)-\frac{2m\gamma}{\hbar^2}\sum_n\delta(x-na)\psi(x)=0 \tag{2.101}$$

在各个区域中，式 (2.101) 的解只能取 $\mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}kx}$ 的形式. 设第 n 区中波函数为

$$\psi_n(x) = D_n \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + R_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \tag{2.102}$$

其中，$D_0 = 1$，$R_N = 0$.

在 $x = na$ 处，ψ 的连续条件为

$$\psi_n(na) = \psi_{n+1}(na), \quad n = 0,\ 1,\ \cdots,\ N-1 \tag{2.103}$$

该点 ψ' 的连续条件为

$$\psi'_{n+1}(na) - \psi'_n(na) = \frac{2m\gamma}{\hbar^2}\psi_n(na) \tag{2.104}$$

将式 (2.102) 代入式 (2.103)、式 (2.104) 得

$$R_{n+1} - R_n = (D_n - D_{n+1})\mathrm{e}^{2\mathrm{i}nka} \tag{2.105}$$

$$R_{n+1} - R_n = \mathrm{i}\alpha(R_n + D_n \mathrm{e}^{2\mathrm{i}nka}) \tag{2.106}$$

其中无量纲数 α 如下定义:

$$\alpha = \frac{m\gamma}{k\hbar^2} \tag{2.107}$$

由于共有 $(N+1)$ 个分区，除 $D_0 = 1$，$R_N = 0$ 外尚有 $2N$ 个未知量 R_n、D_n. 而式 (2.105)、式 (2.106) 则为 $2N$ 个线性方程组成的方程组，由此方程组原则上可以确定这 $2N$ 个未知量. 一般情况下，求解较为复杂.

按照本题的要求，我们试着讨论下式成立时将有何结论:

$$\mathrm{e}^{2\mathrm{i}nka} = 1, \quad n = 0,\ 1,\ 2,\ \cdots \tag{2.108}$$

这时式 (2.105) 给出

$$\begin{aligned}
&D_0 - D_1 = R_1 - R_0 \\
&D_1 - D_2 = R_2 - R_1 \\
&\cdots\cdots \\
&D_n - D_{n+1} = R_{n+1} - R_n \\
&\cdots\cdots \\
&D_{N-1} - D_N = -R_{N-1}
\end{aligned} \tag{2.109}$$

由于最后一个区域中只有透射波，$R_N = 0$. 以上各式相加，即得

$$D_0 + R_0 = D_N \tag{2.110}$$

其中，D_0 为入射波振幅，R_0 为反射波振幅，D_N 为最后的透射波振幅，因此

$$\text{反射概率} = |R_0/D_0|^2, \quad \text{透射概率} = |D_N/D_0|^2 \tag{2.111}$$

概率守恒要求

$$|D_0|^2 = |R_0|^2 + |D_N|^2 \tag{2.112}$$

式 (2.110)、式 (2.112) 表明， D_0、 $(-R_0)$ 与 D_N 作为复数，如图 2.9 所示，在复平面上构成直角三角形的三边.

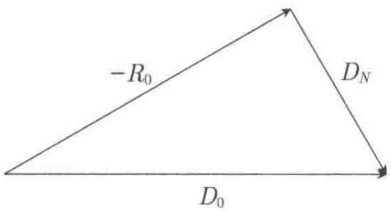


图 2.9　D_0、 $(-R_0)$ 与 D_N 作为复数，在复平面上构成直角三角形的三边

式 (2.109) 给出

$$R_n + D_n = R_{n+1} + D_{n+1} = \cdots = D_N \tag{2.113}$$

式 (2.106) 给出

$$R_{n-1} - R_n = \mathrm{i}\alpha(R_n + D_n) = \mathrm{i}\alpha D_n, \quad n = 0,1,2,\cdots \tag{2.114}$$

也就是

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

按递推法解出

$$-R_0 = \mathrm{i}N\alpha D_N, \quad -R_1 = \mathrm{i}(N-1)\alpha D_N \tag{2.115}$$

给定入射波 $D_0\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$ 后，由于 $|R_0| \leqslant |D_0|$，根据上式，当 δ-势垒总数 N 趋于 ∞ 时，$D_N \to 0$. 进而式 (2.110) 给出

$$R_0 \to -D_0, \quad N \to \infty$$

亦即透射概率为 0，反射概率为 1. 由式 (2.115) 还可以看出，各 R_n $(n = 0,1,2,\cdots)$ 是“同相”的，其数值则按等差数列逐级递减. 各 D_n 也按同样的规律变化.

根据上面分析，满足式 (2.108) 时发生完全反射，这要求

$$\exp(2\mathrm{i}ka) = 1 \tag{2.116}$$

由此式解出

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

其中， $m = 1,\ 2,\ 3,\ \cdots$. 相应的动量值为

$$p = \hbar k = m\frac{\pi\hbar}{a}$$

而入射波波长为

$$\lambda=\frac{2\pi}{k}=\frac{1}{m}(2a)$$

在此条件下，从相邻的两个 δ-势垒反射回来的波相位相同，使总的反射波幅达到最强，而透射波则逐级变弱，最后衰减为 0.

2.23　双 δ–势垒中的共振态能级

题 2.23　如图 2.10所示粒子在双 δ-势垒

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

作用下运动，求共振态能级.

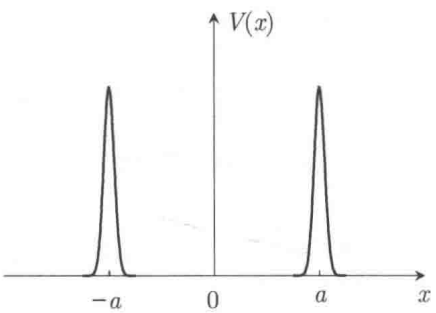


图 2.10　双 δ-势垒

解答　该粒子在题给势场中运动的定态 Schrödinger 方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x)+V_0\left[\delta(x+a)+\delta(x-a)\right]\psi(x)=E\psi(x) \tag{2.117}$$

由于 $V(x)>0$，所以能量本征值 $E>0$. 可令

$$k=\sqrt{2mE}/\hbar,\quad b=\frac{\hbar^2}{mV_0} \tag{2.118}$$

则

$$\psi''+k^2\psi-\frac{2}{b}\left[\delta(x+a)+\delta(x-a)\right]\psi=0 \tag{2.119}$$

在 $x\neq\pm a$ 处，式 (2.119)可以写成

$$\psi''+k^2\psi=0 \tag{2.120}$$

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

在 $x=a$ 处 ψ 应该连续，ψ' 的跃变条件为

$$\psi'(a+0)-\psi'(a-0)=\frac{2}{b}\psi(a) \tag{2.121}$$

在 $x=-a$ 处也有类似的公式.

(1) 偶宇称态

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

我们只写出 $x>-a$ 区域的 ψ，$x<-a$ 区域的 ψ 可按偶函数的条件写出. 由式 (2.120)有

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

由 $x=a$ 处 ψ 的连续性条件，应该有如下关系：

$$\cos ka=C\sin(ka+\theta) \tag{2.122}$$

由 ψ' 的跃变条件式 (2.121)，应该有如下关系：

$$C\cos(ka+\theta)+\sin ka=\frac{2}{kb}\cos ka \tag{2.123}$$

作为共振态，要求 $C\sim 0$，由式 (2.122)可得

$$|\cos ka|\ll 1$$

因此可令

$$ka=\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi-\varepsilon,\quad n=0,1,2,\cdots,\quad |\varepsilon|\ll\frac{\pi}{2} \tag{2.124}$$

代入式 (2.123)，并略去其中较小的 C 项，即得

$$\frac{kb}{2}\approx\cot ka=\cot\left(n\pi+\frac{\pi}{2}-\varepsilon\right)=\tan\varepsilon\approx\varepsilon$$

也就是

$$\varepsilon\approx\frac{kb}{2}\approx\frac{(n+1/2)\pi b}{2a}$$

代入式 (2.124)，即得

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

再代入式 (2.118)，即得共振能级

$$E\approx\frac{\pi^2(n+1/2)^2\hbar^2}{2ma^2}\left(1-\frac{b}{a}\right),\quad n=0,1,2,\cdots \tag{2.125}$$

(2) 奇宇称态

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

在区域 $x>-a$，波函数为

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

类似地可以求出

$$k\approx\frac{n\pi}{a}\left(1-\frac{b}{2a}\right),\quad n=1,2,3,\cdots$$

代入式 (2.118)，即得共振能级

$$E=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\left(1-\frac{b}{a}\right)\tag{2.126}$$

式 (2.125)和式 (2.126)可以统一写为

$$E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2}\left(1-\frac{b}{a}\right),\quad n=1,2,3,\cdots\tag{2.127}$$

偶宇称态 n 取奇数，奇宇称态 n 取偶数.

共振态出现的必要条件为

$$\varepsilon\approx\frac{kb}{2}\ll\frac{\pi}{2}$$

亦即

$$\frac{2a}{b}=\frac{2mV_0a}{\hbar^2}\gg n,\quad n=1,2,3,\cdots$$

在这个条件下，对于能量 E_n 来说，δ-势垒可以近似地认为是“不透明”的，双 δ-势垒的作用近似于宽度为 $2a$ 的无限深势阱. 式 (2.127)中，当 $2a/b\to\infty$ 时，即得

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

这正是无限深势阱的能级公式.

2.24　δ-势阱中粒子波函数系数矩阵

题 2.24　质量为 μ 的粒子在势场 $V(x)=-\alpha\delta(x),\quad \alpha>0$ 中运动，设粒子能量 $E<0$，它的波函数为

$$\psi_1(x)=A_1\mathrm{e}^{\lambda x}+A_1'\mathrm{e}^{-\lambda x},\quad x<0$$
$$\psi_2(x)=A_2\mathrm{e}^{\lambda x}+A_2'\mathrm{e}^{-\lambda x},\quad x>0$$

(1) 计算矩阵 M；

(2) 求能量 E 的值并解出波函数；

(3) 动量的概率分布.

解答　(1) 对束缚态来说，由束缚态边条件 $\psi \xrightarrow{x\to\pm\infty} 0$ 有

$$\begin{cases}\psi_1(x)=A_1\mathrm{e}^{\lambda x}, & x<0\\ \psi_2(x)=A_2\mathrm{e}^{-\lambda x}, & x>0\end{cases}$$

也就是

$$A_1'=A_2'=0$$

由于 $V(x)$ 具有空间反演对称性，能量本征态具有确定宇称，故可判定奇宇称束缚态不存在，只存在偶宇称态 $A_1=A_2'$，故 $M=\begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix}$，即

$$\begin{pmatrix}A_2\\A_2'\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}A_1\\A_1'\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\A_1\end{pmatrix}$$

(2) 对束缚态，由前面讨论只存在偶宇称解

$$\begin{cases}\psi_1(x)=A\mathrm{e}^{\lambda x}, & x<0\\ \psi_2(x)=A\mathrm{e}^{-\lambda x}, & x>0\end{cases}$$

利用 $x=0$ 处的跃变条件

$$\psi'(0^+)-\psi'(0^-)=-\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}\psi(0)$$

解出 $E=-\dfrac{\mu\alpha^2}{2\hbar^2}$，只存在一个偶宇称束缚态 (基态).

归一化的波函数为

$$\psi(x)=\sqrt{\lambda}\mathrm{e}^{-\lambda|x|},\quad \lambda=\frac{\mu\alpha}{\hbar^2}$$

(3) 在动量表象中形式为

$$\begin{aligned}\varphi(p) &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{d}x\\ &= \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{\mu\alpha}{\hbar}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{1}{p^2+\left(\frac{\mu\alpha}{\hbar}\right)^2}\\ &= \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}(\hbar\lambda)^{\frac{3}{2}}\frac{1}{p^2+(\hbar\lambda)^2}\end{aligned}$$

因此

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

2.25　在动量表象中求解 δ- 势阱束缚态问题

题 2.25　在 p 表象求解一维 δ-势阱 $V(x)=-\gamma\delta(x)$ 中的束缚定态能量和波函数，其中 γ 是一正的常数量. 计算 Δx 与 Δp，并验证不确定性关系.

解答　设势阱中运动的粒子质量为 μ，在 x 表象的定态方程为

$$\left[\frac{p^2}{2\mu}-\gamma\delta(x)\right]\psi(x)=E\psi(x) \tag{2.128}$$

现设

$$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p)\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}p \tag{2.129}$$

式 (2.128) 两边作 Fourier 变换，即得在 p 表象的定态方程[①]

$$\frac{p^2}{2\mu}\varphi-\frac{\gamma}{\sqrt{2\pi\hbar}}\psi(0)=E\varphi \tag{2.130}$$

或者

$$(p^2-2\mu E)\varphi(p)=\frac{2\mu\gamma}{\sqrt{2\pi\hbar}}\psi(0)=A \tag{2.130'}$$

其中，A 为一个常数，与 p 无关. 这样上式给出

$$\varphi(p)=\frac{A}{p^2-2\mu E} \tag{2.131}$$

即为动量表象的能量本征函数. 将式 (2.131) 代入式 (2.130′) 右边，并利用 $\psi(0)$ 的 Fourier 变换 [式 (2.129) 取 $x=0$] 得

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\frac{1}{p^2-2\mu E}=\frac{\pi\hbar}{\gamma\mu} \tag{2.132}$$

此为能量本征值方程.

对于束缚态 $E<0$，令 $\kappa=\sqrt{-2\mu E}/\hbar$，则式 (2.132) 的左边定积分为

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\frac{1}{p^2+\hbar^2\kappa^2}=\frac{1}{\hbar\kappa}\arctan\frac{p}{\hbar\kappa}\bigg|_{-\infty}^{+\infty}=\frac{\pi}{\hbar\kappa}$$

代入式 (2.132) 即得

$$\kappa=\frac{\gamma\mu}{\hbar^2}$$

可见决定束缚态能级的方程 (2.132) 只有上述 κ 一个值. 因此

$$E=-\frac{\hbar^2\kappa^2}{2\mu}=-\frac{\mu\gamma^2}{2\hbar^2}$$

① 在 δ-位势情形，通过对 x 表象的 Schrödinger 方程作 Fourier 变换，比从一般的 p 表象的 Schrödinger 方程出发要简洁一些.

对应唯一的一个束缚态. 相应的波函数由式 (2.131) 给出. 其中常数 A 可以由归一化条件确定, 根据

$$\begin{aligned} 1 &= \int \mathrm{d}p|\varphi(p)|^2 = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}p \frac{1}{\left(p^2-2\mu E\right)^2} \\ &= |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}p}{\left(p^2+\hbar^2\kappa^2\right)^2} = \frac{\pi|A|^2}{2(\hbar\kappa)^3} \end{aligned}$$

可知归一化系数可以取

$$A = \sqrt{\frac{2}{\pi}}(\hbar\kappa)^{3/2} = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2}\left(\frac{\mu\gamma}{\hbar}\right)^{3/2}$$

因而归一化的定态波函数为

$$\varphi(p) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\left(\frac{\mu\gamma}{\hbar}\right)^{3/2} \frac{1}{p^2+\dfrac{\mu^2\gamma^2}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2}{\pi}}(\hbar\kappa)^{3/2}\frac{1}{p^2+\hbar^2\kappa^2} \tag{2.133}$$

这样 p 和 p^2 的期望值为

$$\begin{aligned} \overline{p} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}p\varphi^*(p)p\varphi(p) = A^2\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{p\mathrm{d}p}{(p^2+\hbar^2\kappa^2)^2} = 0 \\ \overline{p^2} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}p\varphi^*(p)p^2\varphi(p) = A^2\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{p^2\mathrm{d}p}{(p^2+\hbar^2\kappa^2)^2} \\ &= \frac{A^2\pi}{2\hbar\kappa} = \hbar^2\kappa^2 \end{aligned}$$

因而得 $\Delta p = \sqrt{\overline{p^2}-(\overline{p})^2} = \hbar\kappa$. 在 p 表象中, 坐标力学量表示为算符 $\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial p}$, 利用力学量期望值公式即得坐标以及坐标平方的期望值分别为

$$\begin{aligned} \overline{x} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}p\varphi^*(p)\ \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\varphi(p) \\ &= A^2\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{p^2+\hbar^2\kappa^2}\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\frac{1}{p^2+\hbar^2\kappa^2}\mathrm{d}p = 0 \\ \overline{x^2} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}p\varphi^*(p)\hat{x}^2\varphi(p) = \int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\left[\hat{x}\varphi(p)\right]^*\left[\hat{x}\varphi(p)\right] \\ &= \hbar^2\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\frac{\partial}{\partial p}\frac{1}{p^2+\hbar^2\kappa^2}\right|^2\mathrm{d}p = 4A^2\hbar^2\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{p^2\mathrm{d}p}{(p^2+\hbar^2\kappa^2)^4} \\ &= \frac{A^2\pi}{4\hbar^3\kappa^5} = \frac{1}{2\kappa^2} \end{aligned}$$

这样

$$\Delta x = \sqrt{\overline{x^2}-(\overline{x})^2} = \frac{1}{\sqrt{2}\kappa}$$

因此

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

上式与不确定度关系式 $\Delta x\Delta p \geqslant \hbar/2$ 是一致的.

讨论　将动量表象定态波函数 (2.133) 代入式 (2.129)，即得相应的坐标表象波函数为

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\varphi(p)\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\sqrt{\frac{2}{\pi}}(\hbar\kappa)^{3/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\frac{1}{p^2+\hbar^2\kappa^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\end{aligned}$$

对于 $x>0$ 与 $x<0$ 两种情况，采用留数积分法可以求出

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\frac{1}{p^2+\hbar^2\kappa^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}=\frac{\pi}{\hbar\kappa}\mathrm{e}^{-\kappa|x|}$$

这样

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

这与在坐标表象中求解得到的结果完全一致.

2.26　粒子在非经典区的概率 (谐振子基态)

题 2.26　力常数为 k，质量为 m 的谐振子基态波函数为

$$\psi_0(x)=\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha x^2},\quad \alpha=\frac{m\omega_0}{\hbar},\quad \omega_0^2=\frac{k}{m}$$

求在经典区域之外找到粒子的概率的表达式.

解答　非经典区域是 $E<V(x)$ 的区域. 基态下

$$E=\frac{1}{2}\hbar\omega_0$$

因此非经典区域满足

$$\frac{1}{2}\hbar\omega_0<\frac{1}{2}m\omega_0^2x^2$$

也就是 $x^2>\dfrac{\hbar}{m\omega_0}=\dfrac{1}{\alpha}$，给出非经典区域为

$$x>\sqrt{\frac{1}{\alpha}}\ \text{或者}\ x<-\sqrt{\frac{1}{\alpha}}$$

这样在非经典区域里找到粒子的概率为

$$\begin{aligned}P &= \int_{-\infty}^{-\sqrt{1/\alpha}}\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\mathrm{e}^{-\alpha x^2}\mathrm{d}x+\int_{\sqrt{1/\alpha}}^{\infty}\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\mathrm{e}^{-\alpha x^2}\mathrm{d}x\\ &= 2\int_{\sqrt{1/\alpha}}^{\infty}\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\mathrm{e}^{-\alpha x^2}\mathrm{d}x=2\int_1^{\infty}\frac{1}{\sqrt{\pi}}\mathrm{e}^{-t^2}\mathrm{d}t\approx 16\%\end{aligned}$$

2.27　粒子在对称方势阱中运动，阱口刚好出现一条束缚态能级的条件

题 2.27　粒子在深度为 V_0、宽度为 a 的对称方势阱中运动，求

(1) 在阱口附近刚好出现一条束缚能级 ($E \approx V_0$) 的条件；

(2) 束缚态能级总数.

解答　对于题给的势阱，设阱底势函数的值为零，则粒子的定态当其能量 E 小于 V_0 时为束缚态，E 大于 V_0 时为散射态或游离态. 考虑粒子的束缚定态，其能量本征方程为

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\psi = 0 \tag{2.134}$$

我们令

$$\sqrt{2mE}/\hbar = k, \quad \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar = \beta, \quad \sqrt{2mV_0}/\hbar = k_0 \tag{2.135}$$

则式 (2.134) 可以分区间写为

$$\psi'' + k^2\psi = 0, \qquad |x| \leqslant a/2 \tag{2.136a}$$

$$\psi'' - \beta^2\psi = 0, \qquad |x| \geqslant a/2 \tag{2.136b}$$

根据束缚态无限远处的边界条件，式 (2.136b) 的解应取为

$$\psi(x) = \begin{cases} A\mathrm{e}^{-\beta x}, & x \geqslant a/2 \\ B\mathrm{e}^{\beta x}, & x \leqslant -a/2 \end{cases} \tag{2.137}$$

其中，A、B 为常数，对于奇、偶宇称解应分别满足 $A = -B$，$A = B$. 阱内波函数可由式 (2.136a) 解出，奇、偶宇称解分别为

$$\begin{array}{ll} \text{奇宇称} & \psi(x) = C_1 \sin kx, \\ \text{偶宇称} & \psi(x) = C_2 \cos kx, \end{array} \quad |x| \leqslant a/2 \tag{2.138}$$

其中，C_1、C_2 为常数，它们与式 (2.137) 中的 A、B 可通过波函数连续条件以及归一化条件确定.

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

$$\psi'(x) = \begin{cases} -\beta A\mathrm{e}^{-\beta x} \approx 0, & x \geqslant a/2 \\ \beta B\mathrm{e}^{\beta x} \approx 0, & x \leqslant -a/2 \end{cases} \tag{2.139}$$

根据 ψ' 的连续性，并由式 (2.138)，即得 ($E \approx V_0$，$k \approx k_0$)

$$\begin{array}{ll} \text{奇宇称} & \psi'(a/2) \approx C_1 k_0 \cos\dfrac{k_0 a}{2} \approx 0, \quad k_0 a = \pi, 3\pi, 5\pi, \cdots \\ \text{偶宇称} & \psi'(a/2) \approx -C_2 k_0 \sin\dfrac{k_0 a}{2} \approx 0, \quad k_0 a = 2\pi, 4\pi, 6\pi, \cdots \end{array} \tag{2.140}$$

综合奇宇称、偶宇称两种情况，阱口刚好出现束缚能级的条件为

$$k_0 a = n\pi, \quad n = 1,2,3,\cdots \tag{2.141}$$

根据式 (2.135)，上式表示为

$$\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} = n^2\pi^2 \tag{2.142}$$

其中，$n = 1,2,3,\cdots$.

一维对称方势阱总有一条束缚能级[①]. 当 V_0 较小时，即当 $\dfrac{2mV_0a^2}{\hbar^2} < \pi^2$ 时，势阱一定存在且只存在一条束缚能级 (偶宇称态[②]). 根据式 (2.140) 以及式 (2.135)，随着 V_0 逐渐增加，到满足 $\dfrac{2mV_0a^2}{\hbar^2} = \pi^2$ 时，能量 $E = V_0$ 的态也是束缚态；也就是此时除基态外，阱口将再出现一个能级 (奇宇称态)，这样共有两个束缚态能级，对应基态与第一激发态. 随着 V_0 增加，当 $\pi^2 < \dfrac{2mV_0a^2}{\hbar^2} < (2\pi)^2$ 时，势阱存在基态与第一激发态两个束缚态. V_0 继续增加，当 $\dfrac{2mV_0a^2}{\hbar^2} = (2\pi)^2$ 时，除基态与第一激发态以外，阱口将再出现一个能级 (偶宇称态)，这是第三个能级，即第二激发态. 依此类推. 由此可知，对于给定的 V_0a^2，束缚定态能级总数为

$$N = 1 + \left[\frac{a}{\pi\hbar}\sqrt{2mV_0}\right] \tag{2.143}$$

这里符号 $[A]$ 表示不超过 A 的最大整数.

当粒子在宽度为 a 的无限深方势阱中运动时，能级为

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

则 $E < V_0$ 的能级总数为

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

与式 (2.143) 比较可知，如果只计算 $E < V_0$ 的能级数，则有限深 (V_0) 势阱的能级数比无限深势阱的能级数多一个. 这一结果可从 Hellmann-Feynman 定理理解，因无限深方势阱的每一个能级均高于有限深方势阱的相应能级.

① 如参见张永德, 量子力学 (第三版)[M], 北京: 科学出版社, 2015, P.50. 或由束缚态存在定理.

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

2.28　van der Waals 力势场中的束缚态

题 2.28　分子间的 van der Waals 力所产生的势能可近似地表示为

$$V(x)=\begin{cases}\infty, & x<0\\ V_0, & 0\leqslant x\leqslant a\\ -V_1, & a\leqslant x\leqslant b\\ 0, & x>b\end{cases}$$

求束缚态的能级所满足的方程.

解答　van der Waals 力即分子间的内聚力. 用它可解释表面张力、吸附作用和其他分子现象. 此例表现在实际气体的 van der Waals 气体方程中. 根据位势的特点，束缚态下粒子能量的取值范围为 $-V_1<E<0$.

当 $x<0$ 时，由于 $V(x)\to\infty$，所以 $\psi_1(x)=0$.

当 $0\leqslant x\leqslant a$ 时，$V(x)=V_0$，相应的定态 Schrödinger 方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_2(x)+V_0\psi_2(x)=E\psi_2(x)$$

可令 $k_1=\sqrt{\dfrac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)}$，其解为

$$\psi_2(x)=A_1\mathrm{e}^{k_1x}+B_1\mathrm{e}^{-k_1x}$$

当 $a\leqslant x\leqslant b$ 时，$V(x)=-V_1$，相应的定态 Schrödinger 方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_3(x)-V_1\psi_3(x)=E\psi_3(x)$$

可令 $k_2=\sqrt{\dfrac{2m}{\hbar^2}(|V_1|+E)}$，其解为

$$\psi_3(x)=A_2\sin k_2x+B_2\cos k_2x$$

当 $x>b$ 时，$V(x)=0$，相应的定态 Schrödinger 方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_4(x)=E\psi_4(x)$$

可令 $k_3=\sqrt{\dfrac{-2mE}{\hbar^2}}$，其解为

$$\psi_4(x)=A_3\mathrm{e}^{k_3x}+B_3\mathrm{e}^{-k_3x}$$

根据束缚态波函数的特点，要求 $\psi(x)\xrightarrow{|x|\to\infty}0$，故 $A_3=0$，于是

$$\psi_4(x)=B_3\mathrm{e}^{-k_3x}$$

再让波函数满足连续性要求，有

$$\begin{aligned}
&\psi_1|_{x=0}=\psi_2|_{x=0}, \quad \text{故 } A_1+B_1=0\\
&\psi_3|_{x=a}=\psi_2|_{x=a}, \quad \text{故 } A_2\sin k_2a+B_2\cos k_2a=A_1\mathrm{e}^{k_1a}+B_1\mathrm{e}^{-k_1a}\\
&\psi_3'|_{x=a}=\psi_2'|_{x=a}, \quad \text{故 } A_2k_2\sin k_2a-B_2k_2\sin k_2a=A_1k_1\mathrm{e}^{k_1a}-B_1k_1\mathrm{e}^{-k_1a}\\
&\psi_4|_{x=b}=\psi_3|_{x=b}, \quad \text{故 } B_3\mathrm{e}^{-k_3b}=A_2\sin k_2b+B_2\cos k_2b\\
&\psi_4'|_{x=b}=\psi_3'|_{x=b}, \quad \text{故 } -B_3k_3\mathrm{e}^{-k_3b}=A_2k_2\cos k_2b-B_2k_2\sin k_2b
\end{aligned}$$

要使 $\psi(x)$ 有非零解，系数 A_1, B_1, A_2, B_2, B_3 不能同时为零. 则其系数组成的行列式必须为零，有

$$\begin{vmatrix}
1 & 1 & 0 & 0 & 0\\
0 & 0 & \sin k_2b & \cos k_2b & -\mathrm{e}^{-k_3b}\\
0 & 0 & k_2\cos k_2b & -k_2\sin k_2b & k_3\mathrm{e}^{-k_3b}\\
\mathrm{e}^{k_1a} & \mathrm{e}^{-k_1a} & -\sin k_1a & -\cos k_2b & 0\\
k_1\mathrm{e}^{k_1a} & -k_1\mathrm{e}^{-k_1a} & -k_2\cos k_2a & k_2\sin k_2a & 0
\end{vmatrix}=0 \tag{2.144}$$

计算此行列式，得到超越方程

$$\tan k_2(b-a)=\frac{k_1\cosh k_1a+k_3\sinh k_1a}{k_2^2\sinh k_1a-k_1k_3\cosh k_1a} \tag{2.145}$$

因为 k_1,k_2,k_3 都含有能量 E，故式 (2.145)就是束缚态能级满足的方程.

2.29　限制在圆周上运动且存在一个 δ- 势垒的束缚态

题 2.29　一个质量为 μ 的粒子在一圆周 (周长为 L) 上运动. 如果还存在 δ-函数势

$$V(x)=a\delta\left(x-\frac{L}{2}\right),\quad a\neq 0$$

请求出系统所有能级和相应的归一化波函数.

解答　定态 Schrödinger 方程为

$$\left[\frac{L_z^2}{2I}+V(\varphi)\right]\psi(\varphi)=E\psi(\varphi) \tag{2.146}$$

式中，$I=\mu R^2$，R 为圆的半径. $V(\varphi)$ 由 $V(x)=a\delta\left(x-\frac{L}{2}\right)$ 给出. 令 $x=R\varphi$ 与 $L=2\pi R$ 得到：

$$V(\varphi)=a\delta\left(R(\varphi-\pi)\right)=\frac{a}{R}\delta(\varphi-\pi) \tag{2.147}$$

将式 (2.147)及 $L_z=-\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi}$ 代入方程 (2.146)中，得

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varphi^2}+\frac{a}{R}\delta(\varphi-\pi)\right]\psi(\varphi)=E\psi(\varphi) \tag{2.148}$$

这个方程的解为

$$\begin{aligned}\psi_1(\varphi)&=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\varphi},\quad 0\leqslant\varphi<\pi\\ \psi_2(\varphi)&=C\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}+D\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\varphi},\quad \pi<\varphi\leqslant 2\pi\end{aligned}\tag{2.149}$$

其中，$m=0,1,2,\cdots$. 由 $\psi(\varphi)$ 在 $\varphi=\pi$ 的连续性条件：$\psi_1(\pi)=\psi_2(\pi)$，$\psi_1'(0)$ 在 $\varphi=0$ 或 2π 处的连续性条件：$\psi_1'(0)=\psi_2'(0)$，及 $\psi'(\varphi)$ 在 π 处的不连续性条件

$$\psi_2'(\pi)-\psi_1'(\pi)=\frac{2Ia}{\hbar^2R}\psi_1(\pi)\tag{2.150}$$

得到系数 A、B、C、D 满足的如下 3 个方程：

$$\begin{aligned}&A+B=C+D\\ &A-B=C-D\\ &C-A-D+B=-\frac{\mathrm{i}2Ia}{m\hbar^2R}(A+B)\end{aligned}$$

由这三个方程解得

$$B=-A,\quad C=A,\quad D=-A$$

从而

$$\begin{aligned}\psi_1(\varphi)&=A\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\varphi}\right),\qquad 0\leqslant\varphi<\pi\\ \psi_2(\varphi)&=A\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\varphi}\right),\qquad \pi<\varphi\leqslant 2\pi\end{aligned}$$

也就是

$$\psi(\varphi)=A'\sin m\varphi,\qquad 0\leqslant\varphi\leqslant 2\pi\tag{2.151}$$

粒子的归一化定态波函数为

$$\psi(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin m\varphi,\qquad 0\leqslant\varphi\leqslant 2\pi\tag{2.152}$$

其中，$m=1,2,\cdots$，相应的能量本征值为

$$E=\frac{\hbar^2m^2}{2I}\tag{2.153}$$

由于 $m=0$ 时，$\psi(\varphi)=0$，故不含 $m=0$.

2.30　限制在一段圆弧上运动的粒子

题 2.30　质量为 μ 的粒子被约束在半径为 r 的圆周上运动.

(1) 设立路障，进一步限制粒子在 $0<\varphi<\varphi_0$ 的一段圆弧上运动，

$$V(\varphi)=\begin{cases}0, & 0\leqslant\varphi<\varphi_0\\ \infty, & \varphi_0<\varphi\leqslant 2\pi\end{cases}$$

求解粒子能量本征值和本征函数；

(2) 设粒子处于第 (1) 小题情况的基态，求突然撤去路障后，粒子仍然处于最低能量态的概率.

解答　(1) 在路障外，波函数 $\psi(\varphi)=0$. 在路障内，定态方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\mathrm{d}\psi(\varphi)}{\mathrm{d}\varphi}=E\psi(\varphi) \tag{2.154}$$

其中，$I=\mu r^2$. 方程 (2.154)的解为

$$\psi(\varphi)=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\varphi}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\varphi},\qquad 0<\varphi<\varphi_0 \tag{2.155}$$

其中，$k=\sqrt{\dfrac{2IE}{\hbar^2}}$. 由 $\psi(0)=0$，得 $B=-A$，代入式 (2.155)得

$$\psi(\varphi)=A\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\varphi}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\varphi}\right)=c\sin k\varphi,\qquad 0<\varphi<\varphi_0 \tag{2.156}$$

由 $\psi(\varphi_0)=0$，得

$$k=\frac{n\pi}{\varphi_0},\quad E=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2I\varphi_0^2},\quad n=1,2,\cdots \tag{2.157}$$

由归一化条件 $\int_0^{\varphi_0}|\psi(\varphi)|^2\mathrm{d}\varphi=1$，算出归一化常数

$$c=\sqrt{\frac{2}{\varphi_0}} \tag{2.158}$$

(2) 设 $t=0$ 时撤去路障，撤去路障后的定态波函数与定态能量为

$$\psi_m(\varphi)=\frac{1}{2\pi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi},\quad E_m=\frac{m^2\hbar^2}{2I},\quad m=0,\pm1,\pm2,\cdots \tag{2.159}$$

粒子处于第 (1) 小题情况的基态，$t=0$ 时撤去路障，粒子状态来不及变化

$$\psi(\varphi,0)=\sum_m\frac{c_m\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}}{\sqrt{2\pi}}=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{\varphi_0}}\sin\dfrac{\pi\varphi}{\varphi_0}, & 0\leqslant\varphi<\varphi_0\\ 0, & \varphi_0\leqslant\varphi<2\pi\end{cases}$$

其中展开系数

$$c_m=\frac{1}{\sqrt{\pi\varphi_0}}\int_0^{\varphi_0}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\varphi}\sin\frac{\pi\varphi}{\varphi_0}\mathrm{d}\varphi$$

特别

$$c_0=\frac{1}{\sqrt{\pi\varphi_0}}\int_0^{\varphi_0}\sin\frac{\pi\varphi}{\varphi_0}\mathrm{d}\varphi=\frac{2\varphi_0}{\pi\sqrt{\pi\varphi_0}}$$

粒子仍处于基态的概率为 $|c_0|^2=\dfrac{4\varphi_0}{\pi^3}$.

2.31　计算散射势垒的宽度

题 2.31　能量为 1eV 的电子入射到矩形势垒上，势垒高为 2eV，为使穿透概率约为 10^{-3}，势垒大约多宽?

解答　如图 2.11所示，按矩形势垒散射问题结果，知透射概率为

$$\begin{aligned} T &\simeq \frac{16E(V_0-E)}{V_0^2}\cdot\exp\left[-\frac{2d}{\hbar}\sqrt{2m(V_0-E)}\right] \\ &= 4\exp\left[-\frac{2d}{\hbar}\sqrt{2m(V_0-E)}\right]\approx 10^{-3} \end{aligned}$$

所以

$$d=\frac{1}{2}\hbar\cdot\frac{1}{\sqrt{2m(V_0-E)}}\cdot\frac{3.602}{\log \mathrm{e}}\approx 8.1\text{Å}$$

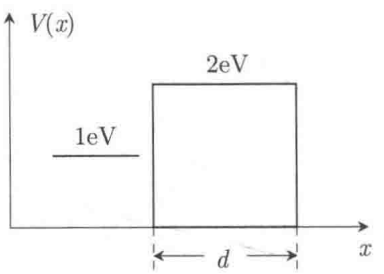


图 2.11　矩形势垒散射

2.32　谐振子基态为最小不确定性态

题 2.32　证明若 $\Delta x\Delta p=\dfrac{\hbar}{2}$，其中 $(\Delta p)^2=\left\langle[p-\langle p\rangle]^2\right\rangle$，则简谐振子最小能量为 $\dfrac{\hbar\omega}{2}$.

解答　对谐振子束缚定态有

$$\langle x\rangle=\langle p\rangle=0 \tag{2.160}$$

因此

$$(\Delta x)^2=\langle x^2\rangle,\quad (\Delta p)^2=\langle p^2\rangle \tag{2.161}$$

谐振子 Hamilton 量为 $H=\dfrac{p^2}{2m}+\dfrac{m\omega^2}{2}x^2$,

$$\langle H\rangle=\frac{\langle p^2\rangle}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}\langle x^2\rangle=\frac{(\Delta p)^2}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}(\Delta x)^2 \tag{2.162}$$

利用不等式

$$a+b\geqslant 2\sqrt{ab} \tag{2.163}$$

其中， a、b 为正实数，而其中等号当 $a=b$ 时取到. 由此得

$$\langle H\rangle \geqslant \sqrt{(\Delta x)^2(\Delta p)^2}\omega = \frac{\hbar\omega}{2} \tag{2.164}$$

基态为能量最低态，上式给出了基态能量的下限. 再结合 Virial 定理知谐振子束缚定态的动能与势能期望值相等，可知上式可以取到等号给出最小值，从而 $\langle H\rangle_{\min} = \dfrac{\hbar\omega}{2}$ 就是基态的能量.

2.33　由谐振子基态位置涨落求其跃迁到第一激发态所需的能量

题 2.33　一电子禁闭在一维谐振子基态，使得

$$\sqrt{\langle[x-\langle x\rangle]\rangle^2} = 10^{-10}\mathrm{m}$$

求激发该电子到其第一激发态所需的能量 (用 eV 表示).

提示　利用 Virial 定理.

解答　对一维谐振子束缚定态，Virial 定理给出

$$\langle T\rangle = \langle V\rangle$$

因此

$$E_0 = \langle H\rangle = \langle T\rangle + \langle V\rangle = 2\langle V\rangle = m_{\mathrm{e}}\omega^2\langle x^2\rangle$$

也就是

$$\frac{1}{2}\hbar\omega = m_{\mathrm{e}}\omega^2\langle x^2\rangle$$

谐振子定态 $\langle x\rangle = 0$，故

$$\sqrt{\left\langle[x-\langle x\rangle]^2\right\rangle} = \sqrt{\langle x^2\rangle} = 10^{-10}\mathrm{m}$$

因此

$$\omega = \frac{\hbar}{2m_{\mathrm{e}}\langle x^2\rangle}$$

激发该电子到其第一激发态所需能量为

$$E = E_1 - E_0 = \hbar\omega$$

将 ω 的表达式代入，得

$$E = \frac{\hbar^2}{2}m_{\mathrm{e}}\langle x^2\rangle \approx 3.8\mathrm{eV}$$

2.34　谐振子随时间的演化

题 2.34　在 $t=0$ 时，处在谐振子势 $V=\dfrac{1}{2}kx^2$ 中一粒子波函数为

$$\psi(x,0)=A\mathrm{e}^{-(\alpha x)^2/2}\left[\cos\beta\mathrm{H}_0(\alpha x)+\frac{\sin\beta}{2\sqrt{2}}\mathrm{H}_2(\alpha x)\right]$$

其中，α 和 A 为实常数，$\alpha^2=\dfrac{1}{\hbar}\sqrt{mk}$，且 Hermite 多项式是归一的，

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2}\left[\mathrm{H}_n(\alpha x)\right]^2\mathrm{d}x=\frac{\sqrt{n}}{\alpha}2^n n!$$

(1) 写出 $\psi(x,t)$ 的表达式；

(2) 在该态中测得粒子能量的可能结果是什么？且得到这些值的相对概率为多大？

(3) 在 $t=0$ 时 $\langle x\rangle$ 为多少？是怎样随时间变化的？

解答　(1) 系统的 Schrödinger 方程为

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

$\psi(x,t)$ 在 $t=0$ 时取给定值 $\psi(x,0)$. 因 H 不显含 t，则 Schrödinger 方程含有如下定态解：

$$\psi_n(x,t)=\psi_n(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt/\hbar}$$

而 $\psi_n(x)$ 为能量本征态满足

$$H\psi_n(x)=E_n\psi_n(x)$$

用能量本征态 $\psi_n(x)$ 展开 $\psi(x,0)$ 得

$$\psi(x,0)=\sum_n a_n\psi_n(x)$$

其中

$$a_n=\int\psi_n^*(x)\psi(x,0)\mathrm{d}x$$

因此

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

对谐振子

$$\psi_n(x)=N_n\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2/2}\mathrm{H}_n(\alpha x)$$

$$\begin{aligned}a_n&=\int\mathrm{d}xN_n\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2/2}\mathrm{H}_n(\alpha x)\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2/2}\cdot A\left[\cos\beta\mathrm{H}_0(\alpha x)+\frac{\sin\beta}{2\sqrt{2}}\mathrm{H}_2(\alpha x)\right]\\&=A\left[N_0\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^2}}\cos\beta\delta_{n0}+N_2\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^2}}2\sqrt{2}\sin\beta\delta_{n2}\right]\end{aligned}$$

所以

$$\psi(x,t)=A\left(\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}\right)^{\frac{1}{2}}\left[\cos\beta\psi_0(x)\mathrm{e}^{-2\pi\mathrm{i}E_0t/\hbar}+\sin\beta\psi_2(x)\mathrm{e}^{-2\pi\mathrm{i}E_2t/\hbar}\right]$$

(2) 可能测到的能量为 $E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega$ 和 $E_2=\frac{5}{2}\hbar\omega$，相对概率为

$$\frac{P_0}{P_2}=\frac{\cos^2\beta}{\sin^2\beta}=\cot^2\beta$$

(3) 由于 $\psi(x,0)$ 仅为 $\psi_0(x)$ 与 $\psi_2(x)$ 的组合，因此

$$\psi(-x,0)=\psi(x,0)$$

该体系宇称不变，则

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

则任意 t 时刻，总有

$$\langle x\rangle=(\psi(x,t),x\psi(x,t))=0$$

期望值不随时间变化.

2.35　谐振子一般态位置期望值随时间的演化以及势能对时间的平均

题 2.35　(1) 对一个一维谐振子势 $V=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ 中质量为 m 的粒子，利用谐振子本征态 $\phi_n(x)$，写出时间相关 Schrödinger 方程的最一般解 $\psi(x,t)$；

(2) 利用 (1) 证明 x 的期望值 $\langle x\rangle$ 作为时间的函数，可写成 $A\cos\omega t+B\sin\omega t$ 形式，其中 A、B 为常数；

(3) 利用 (1) 证明一般的 $\psi(x,t)$ 势能对时间的平均满足 $\langle V\rangle=\frac{1}{2}\langle E\rangle$. 注意等式

$$\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\phi_n=\sqrt{\frac{n+1}{2}}\phi_{n+1}+\sqrt{\frac{n}{2}}\phi_{n-1}$$

解答　(1) 系统的 Schrödinger 方程为

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

H 不显含 t，则

$$\psi(x,t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}\psi(x,0)$$

利用谐振子本征态 $\phi_n(x)$ 展开 $\psi(x,0)$，得

$$\psi(x,0)=\sum_n a_n\phi_n(x)$$

而 $\phi_n(x)$ 满足

$$H\phi_n(x)=E_n\phi_n(x),\quad E_n=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega$$

因此

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

(2) x 的期望值 $\langle x\rangle$

$$\begin{aligned}\langle x\rangle &= \int \mathrm{d}x\psi^*(x,t)x\psi(x,t)=\sum_{nn'} a_n^* a_{n'}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_{n'}-E_n)t/\hbar}\int \mathrm{d}x\phi_n^*(x)x\phi_{n'}(x)\\ &=\sum_{nn'} a_n^* a_{n'}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_{n'}-E_n)t/\hbar}\left(\sqrt{\frac{n'+1}{2}}\delta_{n,n'+1}+\sqrt{\frac{n'}{2}}\delta_{n,n'-1}\right)\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\\ &=\sum_n a_n^*\left(a_{n-1}\sqrt{\frac{n}{2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}+a_{n+1}\sqrt{\frac{n+1}{2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\right)\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}=A\cos\omega t+B\sin\omega t\end{aligned}$$

其中

$$A=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\sum_n a_n^*\left(a_{n-1}\sqrt{\frac{n}{2}}+a_{n+1}\sqrt{\frac{n+1}{2}}\right)$$

$$B=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\sum_n \mathrm{i}a_n^*\left(a_{n-1}\sqrt{\frac{n}{2}}+a_{n+1}\sqrt{\frac{n+1}{2}}\right)$$

(3) 势能对时间平均应理解为算符 V 对 $\psi(x,t)$ 的系统期望值再对时间 t 平均. 由于体系状态具有 $T_\omega=\dfrac{2\pi}{\omega}$ 的时间周期，故时间平均只需在一个周期内进行. 按题中符号， A 的时间平均记为 $\langle A\rangle$， A 的系综平均记为 $\bar{A}$.

$$\begin{aligned}V|\psi\rangle &=\frac{1}{2}\hbar\omega\cdot\frac{m\omega}{\hbar}x^2|\psi\rangle\\ &=\frac{1}{2}\hbar\omega\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\sum_{n=0}^{\infty}a_n\left(\sqrt{\frac{n+1}{2}}|n+1\rangle+\sqrt{\frac{n}{2}}|n-1\rangle\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(n+1/2)t}\\ &=\frac{1}{2}\hbar\omega\sum_{n=0}^{\infty}a_n\left[\frac{\sqrt{(n+1)(n+2)}}{2}|n+2\rangle+\left(n+\frac{1}{2}\right)|n\rangle+\frac{\sqrt{n(n-1)}}{2}|n-2\rangle\right]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt/\hbar}\end{aligned}$$

所以

$$\begin{aligned}\bar{V}=\langle\psi|V|\psi\rangle &=\frac{1}{2}\hbar\omega\sum_{n=0}^{\infty}a_n^*a_n\left(n+\frac{1}{2}\right)+\frac{1}{2}\hbar\omega\sum_{n=0}^{\infty}a_{n+2}^*a_n\sqrt{\frac{(n+1)(n+2)}{4}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\omega t}\\ &\quad+\frac{1}{2}\hbar\omega\sum_{n=0}^{\infty}a_n\cdot a_{n+2}^*\sqrt{\frac{(n+1)(n+2)}{4}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\omega t}\\ &=\frac{1}{2}\hbar\omega\sum_{n=0}^{\infty}a_n^*a_n\left(n+\frac{1}{2}\right)+\frac{1}{2}\hbar\omega\sum_{n=0}^{\infty}|a_n^*a_n|\sqrt{(n+1)(n+2)}\cos(2\omega t+\delta_n)\end{aligned}$$

式中， δ_n 是 $a_{n+1}^*a_n$ 的相位. 将 $\bar{V}$ 对一个周期平均，第二项为零，则得

$$\langle V\rangle=\frac{1}{T_\omega}\int_0^{T_\omega}\bar{V}\,dt=\frac{1}{2}\hbar\omega\sum_{n=0}^{\infty}a_n^*a_n\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

另一方面

$$E=\langle\psi|H|\psi\rangle=\hbar\omega\sum_{n=0}^{\infty}a_n^*a_n\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

由此得

$$\langle E\rangle=\bar{E}$$

两者相比较最后得

$$\langle V\rangle=\frac{1}{2}\langle E\rangle$$

2.36　谐振子势中心加一个很高很薄势垒

题 2.36　考虑在一维势中运动的粒子，如图 2.12所示.

$$V(x)=\begin{cases}\dfrac{1}{2}m\omega^2x^2, & |x|>b\\ V_0, & |x|<b\end{cases}$$

其中，$V_0\gg\hbar^2/mb^2\gg\hbar\omega$，也就是说，在谐振子势中心有一很高很薄、几乎不可透穿的势垒.

(1) 在势垒完全不可穿透的近似下，低能量谱是什么?

(2) 定性描述势垒有有限的穿透率时对能谱产生的效应.

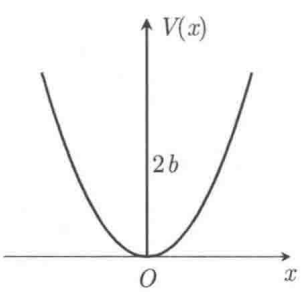


图 2.12　谐振子势中心有一很高很薄、几乎不可透穿的势垒

解答　(1) 势垒完全不可透穿. 此时势相当于两个具有一壁为无限高的半谐振子势. 低能谱对应于通常谐振子的奇量子数 $(2n+1)$ 的情况，即

$$E_n=\left(2n+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega,\quad n=0,1,2,\cdots$$

能级是二度简并的. 波函数在坐标原点均为零.

(2) 势垒有一个小的穿透. 显然，与无势垒时相比，粒子在 $|x|<b$ 内出现的概率变小，相对地说，在势垒外出现的概率变大. 粒子的态中混入了少量的偶宇称解，但在原点附近，偶宇称态的概率分布值将大于奇宇称态的概率分布值. 与之相应，在 (1) 中能

级上，也将混入少量的

$$E'_n = \left(2n + \frac{1}{2}\right)$$

数值. 由于

$$\langle\psi|\text{矩形势垒}|\psi\rangle > 0$$

此势垒的加入，所有能级均要上移. 在题给的条件下，偶宇称态的成分的能级移动大于奇宇称态成分的能级移动. 并且，随能量的升高，能级上移也逐步变小 (对同一宇称态而言).

2.37　与给定的谐振子本征态能级相邻的本征态

题 2.37　谐振子的 Hamilton 量可以用自然单位 ($m = \hbar = \omega = 1$) 写成

$$\hat{H} = \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2}\right)$$

其中，$\hat{a} \equiv \dfrac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} + \mathrm{i}\hat{p})$，$\hat{a}^\dagger \equiv \dfrac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} - \mathrm{i}\hat{p})$. 某个未归一化的能量本征函数为

$$\psi_a = (2x^3 - 3x)\mathrm{e}^{-x^2/2}$$

求能量最接近 ψ_a 的另外两个非归一化本征函数.

解答　首先考察 ψ_a 对应的占有数是多少.

$$\begin{aligned}
\hat{a}^\dagger \hat{a}\psi_a &= \frac{1}{2}\left(x - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\left(x + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)(2x^2 - 3x)\mathrm{e}^{-x^2/2} \\
&= \frac{1}{2}\left(x - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)(6x^2 - 3)\mathrm{e}^{-x^2/2} \\
&= 3(2x^3 - 3x)\mathrm{e}^{-x^2/2} = 3\psi_a
\end{aligned}$$

可见 ψ_a 对应的占有数是 3. 所以，与 ψ_a 最相近的两个本征函数的占有数分别为 2 和 4，波函数为

$$\psi_1 = \hat{a}\psi_a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(x + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)(2x^3 - 3x)\mathrm{e}^{-x^2/2} \sim (2x^2 - 1)\mathrm{e}^{-x^2/2} \tag{2.165}$$

$$\psi_2 = \hat{a}^\dagger \psi_a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(x - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)(2x^3 - 3x)\mathrm{e}^{-x^2/2} \sim (4x^4 - 12x^2 + 3)\mathrm{e}^{-x^2/2} \tag{2.166}$$

上面的结果已将无关紧要的常数因子略去.

2.38　关于谐振子一个特定的定态叠加态的计算

题 2.38　在 $t=0$ 时，处于势 $V(x)=\dfrac{1}{2}m\omega^2x^2$ 中的粒子由波函数

$$\psi(x,0)=A\sum_n\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^n\psi_n(x)$$

描述. $\psi_n(x)$ 是能量为

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

的能量本征态，$(\psi_n,\ \psi'_n)=\delta_{nn'}$.

(1) 求归一化常数 A;

(2) 给出 $t>0$ 时 $\psi(x,t)$ 的表示式;

(3) 证明 $|\psi(x,t)|^2$ 是时间的周期函数，指出最大周期 T;

(4) 求 $t=0$ 时的能量期望值.

解答　(1) 题给态的模平方为

$$(\psi(x,0),\psi(x,0))=|A|^2\sum_{mn}\left(\frac{1}{2}\right)^{(m+n)/2}(\psi_n,\psi_m)=2|A|^2$$

A 可以取为正实数，

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

(2) $\psi(x,t)$ 的表示式为

$$\psi(x,t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}\psi(x,0)=\sum_n\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^{n+1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t\left(n+\frac{1}{2}\right)}\psi_n(x)$$

(3) $|\psi(x,t)|^2$ 如下给出：

$$|\psi(x,t)|^2=\sum\left(\frac{1}{2}\right)^{\frac{m+n}{2}+1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t(n-m)}\psi_n(x)\psi_m^*(x)$$

显然 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t(n-m)}$ 是时间的周期函数. 最大周期为 $\dfrac{2\pi}{\omega}$.

(4) 求 $t=0$ 时的能量期望值

$$\overline{H}=(\psi(x,0),\hat{H}\psi(x,0))=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{2^{n+1}}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

注意到

$$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{x^n}=\frac{x}{x-1}$$

于是

$$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{-n}{x^{n+1}}=\frac{-1}{(x-1)^2}$$

从而得

$$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{n}{2^{n+1}}=1$$

代入 $\overline{H}$ 的表达式中，给出 $t=0$ 时的能量期望值

$$\overline{H}=\frac{3}{2}\hbar\omega$$

由于 H 是守恒量，这也是任意 t 时刻的能量期望值.

2.39　谐振子基态和第一激发态波函数在 p 表象中的形式

题 2.39　一维谐振子基态和第一激发态在坐标表象中的波函数分别为

$$\psi_0(x)=\left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$$

$$\psi_1(x)=\left(\frac{4\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\alpha x\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$$

求它们在动量表象中的形式 $\varphi_0(p)$ 和 $\varphi_1(p)$.

解答　动量表象波函数为坐标表象波函数的 Fourier 变换. 即有基态动量表象波函数

$$\begin{aligned}\varphi_0(p)&=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_0(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{d}x\\&=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[-\frac{1}{2}\alpha^2x^2-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px\right]\mathrm{d}x\end{aligned}$$

由广义 Gauss 积分公式 (A.5)，可得

$$\varphi_0(p)=\left(\frac{1}{\pi\hbar^2\alpha^2}\right)^{\frac{1}{4}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2\hbar^2\alpha^2}p^2}$$

同样，第一激发态动量表象波函数

$$\begin{aligned}\varphi_1(p)&=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{d}x\\&=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{4\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\alpha\int_{-\infty}^{+\infty}x\exp\left[-\frac{1}{2}\alpha^2x^2-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px\right]\mathrm{d}x\end{aligned}$$

由积分公式 (A.6)，可得

$$\varphi_1(p)=-\mathrm{i}\left(\frac{4}{\pi\hbar^2\alpha^2}\right)^{\frac{1}{4}}\frac{p}{\hbar\alpha}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2\hbar^2\alpha^2}p^2}$$

说明　求第一激发态动量表象波函数亦可利用 Fourier 积分性质，若 $F[\psi(x)]=\phi(p)$，则 $F[x\psi(x)]=\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}\phi(p)$.

2.40　两个能量本征态的能级差

题 2.40　已知描述单粒子一维束缚态的两个本征波函数分别为

$$\psi_1=A\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2},\quad \psi_2=B(x^2+bx+c)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$$

其中，A，B，b，c 均为实常数，$-\infty<x<\infty$，试确定 b，c 的取值和两个态的能量差.

解答　依题意可得

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\right]\psi_1(x)=E_1\psi_1(x)\tag{2.167}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\right]\psi_2(x)=E_2\psi_2(x)\tag{2.168}$$

由式 (2.167)得

$$V(x)=E_1+(\alpha^2x^2-1)\frac{\hbar^2}{2m}\tag{2.169}$$

显然 $V(-x)=V(x)$，故 Hamilton 量具有空间反演不变性，故其束缚定态具有确定宇称. 若 ψ_2 中 x^2 系数为 1，则 ψ_2 偶宇称，则 $b=0$. 再由于 Hamilton 量不同能量本征态正交

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

可有 $c=-\dfrac{1}{2\alpha}$，故

$$\psi_2(x)=B\left(x^2-\frac{1}{2\alpha}\right)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}\tag{2.170}$$

将上式代入式 (2.168)解出

$$V(x)=E_2+(\alpha^2x^2-1)\frac{\hbar^2}{2m}+\frac{2\alpha^2\hbar^2}{m}\tag{2.171}$$

这样

$$E_2-E_1=\frac{2\alpha^2\hbar^2}{m}\tag{2.172}$$

另外，由节点定理，可直接断定 ψ_1 无节点，故为基态，事实上 ψ_1 是一维谐振子的基态波函数，ψ_2 则有两个节点. 因为

$$x^2+bx+c=\left(x+\frac{b}{2}\right)^2+\left(c-\frac{b^2}{4}\right)$$

在一定的条件下，它有两个节点，$x=-\frac{b}{2}\pm\sqrt{-c+\frac{b^2}{4}}$，于是可以判定 ψ_2 为第二激发态.

2.41 对势场 $V(x)=V_0(x/a)^{2n}$，用不确定性关系估计基态能

题 2.41 考虑质量为 m 的质点在一维势 $V(x)=V_0(x/a)^{2n}$ 中的运动，其中 n 是正整数，$V_0>0$，定性讨论能量本征值的分布和相应本征函数的宇称 (如果有的话). 用不确定性关系，估计基态能量的数量级. 具体用于 $n=1$ 和 $n\to\infty$ 的情况下，说明这时 $V(x)$ 是什么样子的，把你的估计同你以前所学关于这些势的知识作一比较.

解答 由束缚态和分立谱的知识，$V(x)$ 中有无限多个束缚态. 能量本征值是分立的. 第 m 个激发态在 $E<V(x)$ 区域应有 m 个节点.

$\Delta x\cdot k\sim(m+1)\pi$，但随 m 增大，Δx 也缓慢增大. 由 Virial 定理 $2T=2nV$，得

$$k^2\propto(\Delta x)^{2n}\propto\left[\frac{(m+1)\pi}{k}\right]^{2n}$$

所以

$$E\propto k^2\propto(m+1)^{2n/(n+1)}$$

即一般说来，随着 n 增加，能级间隔也增加. 因为 $V(-x)=V(x)$，故所有本征态都有确定宇称. 基态和第二、第四 …… 激发态宇称为偶，其余本征态宇称为奇.

下面用不确定性关系估计基态能量

$$P_x\sim\frac{\hbar}{2b},\quad b=\sqrt{(\Delta x)^2}$$

这样

$$E=\frac{1}{2\mu}\left(\frac{\hbar}{2b}\right)^2+V_0\left(\frac{b}{a}\right)^{2n}$$

其中，μ 为质量. 求极值，即 $\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}b}=0$ 有

$$-\frac{\hbar}{4\mu b^3}+2nV_0\frac{b^{2n-1}}{a^{2n}}=0,\quad b=\left(\frac{\hbar^2a^{2n}}{8\mu nV_0}\right)^{\frac{1}{2n+2}}$$

所以

$$E=(n+1)\frac{V_0}{a^{2n}}\left(\frac{\hbar^2a^{2n}}{8\mu nV_0}\right)^{\frac{n}{n+1}}$$

$n=1$ 时，$V(x)$ 为谐振子势

$$V(x)=\frac{V_0x^2}{a^2}=\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2$$

上式给出 $E=\frac{1}{2}\hbar\omega$，与准确结果一致.

$n\to\infty$ 时，$V(x)$ 为无限深方势阱，上式给出 $\frac{\hbar^2\pi^2}{8\mu a^2}$，精确结果为 $\frac{\hbar^2\pi^2}{2\mu a^2}$.

2.42　一个关于一维 Schrödinger 方程本征值的定理

题 2.42　下面是一个关于一维 Schrödinger 方程本征值 $E_n(E_1<E_2<E_3<\cdots)$ 的定理.

定理　如果势 $V_1(x)$ 给出本征值 E_{1n}，$V_2(x)$ 给出本征值 E_{2n}，且有 $V_1(x)\leqslant V_2(x)$ 处处成立，则有 $E_{1n}\leqslant E_{2n}$.

(1) 证明这个定理；

(2) 考虑势

$$U(x)=\frac{1}{2}k\begin{cases}x^2, & |x|<a\\ a^2, & |x|\geqslant a\end{cases}$$

求这个势所能具有的束缚态数目. 假设这个数目 $N\geqslant 1$，决定 N 的上界 (或下界).

提示　(1) 利用 Hellmann-Feynman 定理，考虑一个含实常数 λ 的辅助势 $V(\lambda,x)$：

$$V(\lambda,x)=(1-\lambda)V_1(x)+\lambda V_2(x)$$

(2) 利用此定理，选择一个可解的比较势.

解答　(1) 按提示，令 $V(\lambda,x)=\lambda V_2(x)+(1-\lambda)V_1(x)$，显然 $V(0,x)=V_1(x)$，$V(1,x)=V_2(x)$. 而

$$\frac{\partial V}{\partial\lambda}=V_2(x)-V_1(x)\geqslant 0$$

写下 Hamilton 量

$$H(\lambda)=\frac{p^2}{2m}+V(\lambda,x)$$

相应定态 Schrödinger 方程为

$$H(\lambda)\,|n,\lambda\rangle=E_n(\lambda)\,|n,\lambda\rangle$$

由 Hellmann-Feynman 定理

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}E_n}{\mathrm{d}\lambda}&=\langle n,\lambda|\frac{\partial H(\lambda)}{\partial\lambda}|n,\lambda\rangle\\&=\langle n,\lambda|\frac{\partial V}{\partial\lambda}|n,\lambda\rangle=\int\frac{\partial V}{\partial\lambda}|\psi_n(x,\lambda)|^2\,\mathrm{d}x\geqslant 0\end{aligned}$$

可见 E_n 关于 λ 是增函数，所以 $E_{1n}=E_n(0)\leqslant E_n(1)=E_{2n}$.

(2) 令 $V(x)=kx^2/2$，则 $V(x)\geqslant U(x)$.

设 E_n 为势 $U(x)$ 对应的能级，则有 $E_n\leqslant(n+1/2)\hbar\omega$，其中 $\omega=\sqrt{k/m}$. $E_n\leqslant ka^2/2$ 对应于束缚态，因为 $E_n\leqslant(n+1/2)\hbar\omega$，所以在区间 $(0,ka^2/2)$ 内，$U(x)$ 相应的能级数大于 $V(x)$ 相应的能级数，所以解 $(N+1/2)\hbar\omega\leqslant ka^2/2$，将得到束缚态数目的下限

$$\left[\frac{m\omega a^2}{2\hbar}-\frac{1}{2}\right]\approx\left[\frac{m\omega a^2}{2\hbar}\right]$$

其中 [ ] 表示取整 (下同)，按题意 $N\gg1$，略去 [ ] 中的 $\frac{1}{2}$.

另外，若取势 $V(x)$ 为一有限深方势阱，

$$V(x)=\frac{1}{2}k\begin{cases}0, & |x|<a\\ a^2, & |x|\geqslant a\end{cases}$$

同理可知，$U(x)$ 的束缚态数少于 $V(x)$ 的束缚态数，后者为 $\left[\frac{2m\omega a^2}{\pi\hbar}\right]+1$. 所以，束缚态数目上限为 $\left[\frac{2m\omega a^2}{\pi\hbar}\right]$(因 $N\gg1$，1 可以略去).

综上，束缚态数目应介于 $\left[\frac{m\omega a^2}{2\hbar}\right]$ 和 $\left[\frac{2m\omega a^2}{\pi\hbar}\right]$ 之间.

2.43　束缚态存在定理

题 2.43　考虑做一维运动的粒子，Hamilton 量为

$$H=\frac{p^2}{2m}+V(x)$$

其中，$V(x)\leqslant0$. 对所有 x 值成立，$V(\pm\infty)=0$，且 V 并非处处为零. 证明至少存在一束缚态.

证法一　如图 2.13所示，$V(x)=f(x)$. 在此势阱内取一方势阱

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

且 $V'(x)\geqslant f(x)$，对所有 x 值成立.

在势阱 $V'(x)$ 中我们知道至少有束缚态 $\psi(x)$ 存在

$$\langle\psi(x)|H'|\psi(x)\rangle=\langle\psi(x)|\frac{p^2}{2m}+V'(x)|\psi(x)\rangle=E_0<0$$

在 $\psi(x)$ 态下

$$\langle\psi|H|\psi\rangle=\langle\psi|\frac{p^2}{2m}+f(x)|\psi\rangle=\langle\psi|\frac{p^2}{2m}+V'(x)|\psi\rangle=E_0<0$$

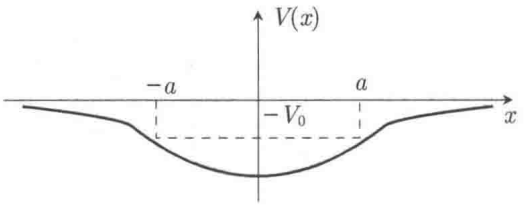


图 2.13　势阱内取一方势阱

令 H 的本征态为 $\cdots,\psi_{n-1}(x),\ \psi_n(x),\cdots$(这里以分立形式表示本征态只是为了方便，实际上还可以是连续本征态，也可以一部分分立，一部分连续. 对连续情形，下式中求和应为积分形式).

$$\psi(x)=\sum_n c_n\psi_n(x)$$

所以

$$\langle\psi|H|\psi\rangle=\sum_n^{\infty}|c_n|^2\langle\psi_n|H|\psi_n\rangle<0$$

可见至少有某一态 $\psi_i(x)$ 满足

$$\langle\psi_i|H|\psi_i\rangle<0$$

这意味着至少有一个定态 ψ_i，对应负能量 $E_i<0$. 按定理条件，在足够大的距离 $|x|>X$(X 很大)，$U\to 0$，此时粒子波函数满足

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi_i}{\mathrm{d}x^2}=E_i\psi_i,\quad |x|>X$$

或者

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi_i}{\mathrm{d}x^2}-\kappa^2\psi_i=0,\quad |x|>X$$

上式存在如下满足束缚态要求的解，满足当 $|x|>X$ 时

$$\psi_i=\mathrm{e}^{-\kappa|x|}$$

这样

$$\int_{|x|>X}\psi_i^*\psi_i\mathrm{d}x\sim\frac{1}{2\kappa}\mathrm{e}^{-\kappa|X|}<\infty$$

可见 ψ_i 是一个束缚态，因而至少有一束缚态存在.

证法二　取试探函数

$$\psi(x)=\left(\frac{b}{\pi}\right)^{1/4}\exp\left(-\frac{1}{2}bx^2\right)$$

用变分法. 计算

$$\langle H\rangle=\left(\frac{b}{\pi}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}bx^2}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\right)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}bx^2}\mathrm{d}x$$

$$
\begin{aligned}
&= \left(\frac{b}{\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\hbar^2 b}{2m} \mathrm{e}^{-bx^2} - \frac{\hbar^2 b^2}{2m} x^2 \mathrm{e}^{-bx^2} + V(x) \mathrm{e}^{-bx^2}\right) \mathrm{d}x \\
&= \frac{\hbar^2 b}{2m} - \frac{\hbar^2 b^2}{2m} \left(\frac{b}{\pi}\right)^{1/2} \left(-\frac{1}{2b} \mathrm{e}^{-bx^2} x \Big|_{-\infty}^{+\infty} + \frac{1}{2b} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-bx^2} \mathrm{d}x\right) + \langle V \rangle \\
&= \frac{\hbar^2 b}{4m} + \langle V \rangle
\end{aligned}
$$

相应基态满足

$$
\begin{aligned}
0 &= \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial b} = \frac{\hbar^2}{4m} + \frac{1}{2b} \langle V \rangle - \left(\frac{b}{\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 V(x) \mathrm{e}^{-bx^2} \mathrm{d}x \\
&= \frac{\hbar^2}{4m} + \frac{1}{2b} \langle V \rangle - \langle x^2 V \rangle
\end{aligned}
$$

所以

$$
b = \frac{\langle V \rangle}{2\left[\langle x^2 V \rangle - \dfrac{\hbar^2}{4m}\right]}
$$

将上式代入 $\langle H \rangle$ 的表达式，得

$$
\overline{E} = \langle H \rangle = \frac{2\langle x^2 V \rangle \langle V \rangle - \dfrac{\hbar^2}{4m} \langle V \rangle}{2\left[\langle x^2 V \rangle - \dfrac{\hbar^2}{4m}\right]}
$$

因为对任意 x 值，$V(x) \leqslant 0$，且 $V(\pm\infty) = 0$，所以

$$
\langle V \rangle < 0, \quad \langle x^2 V \rangle < 0
$$

于是

$$
2\langle x^2 V \rangle \langle V \rangle - \frac{\hbar^2}{4m} \langle V \rangle > 0
$$

也就有

$$
\langle x^2 V \rangle - \frac{\hbar^2}{4m} < 0
$$

由 $\overline{E}$，b 的表达式得

$$
\overline{E} < 0, \quad b > 0
$$

其实，此题中的粒子，只要总能量是某些负值 (只要大于 $\langle V \rangle$，以使 $\langle T \rangle$ 为正值)，不论 V 的形式如何 (在题目所设范围内)，粒子均不可能运动到无限远处，即为束缚态.

2.44　一维势存在束缚态条件的讨论

题 2.44　一个一维吸引势满足：

$$
V(x) < 0, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x V(x) \text{有限}, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x x^2 V(x) \text{有限}
$$

(1) 用形如 $\exp\{-\beta x^2/2\}$ 的试探波函数证明这个势至少有一个束缚态；

(2) 假设势相当弱 ($\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}xV(x)$, $\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}xx^2V(x)$ 都很“小”)，对于该试探波函数求能量的最佳上界；

(3) 用无量纲的叙述明确表明第 (2) 小题中“小”的含义.

解答　(1) 取归一化波函数 $\psi(x)=\left(\dfrac{\beta}{\pi}\right)^{1/4}\mathrm{e}^{-\beta x^2/2}$，令 $\beta=\dfrac{m\omega}{\hbar}$，则 Hamilton 量期望值

$$\begin{aligned}\bar{H} &= \langle\psi|H|\psi\rangle=\langle\psi|-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)|\psi\rangle\\ &= \left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\frac{\hbar^2}{2m}(\beta-\beta^2x^2)+V(x)\right]\mathrm{e}^{-\beta x^2}\mathrm{d}x\\ &= \frac{\hbar^2}{4m}\beta+\left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}V(x)\mathrm{e}^{-\beta x^2}\mathrm{d}x\end{aligned}\tag{2.173}$$

其中用到了积分公式 (A.1)、(A.2). 因而

$$\begin{aligned}\frac{\partial\bar{H}}{\partial\beta} &= \frac{\hbar^2}{4m}+\frac{1}{2\sqrt{\pi\beta}}\int_{-\infty}^{+\infty}V(x)\mathrm{e}^{-\beta x^2}\mathrm{d}x-\sqrt{\frac{\beta}{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}x^2V(x)\mathrm{e}^{-\beta x^2}\mathrm{d}x\\ &= \frac{\hbar^2}{4m}+\frac{1}{2\beta}\langle\psi|V(x)|\psi\rangle-\langle\psi|x^2V(x)|\psi\rangle\end{aligned}\tag{2.174}$$

由于 $\beta\to0$ 时，$\dfrac{\partial\bar{H}}{\partial\beta}\to-\infty$；$\beta\to\infty$ 时，$\dfrac{\partial\bar{H}}{\partial\beta}\to\dfrac{\hbar^2}{4m}>0$. 故 $\dfrac{\partial\bar{H}}{\partial\beta}=0$ 至少有一个解 $\beta_0(>0)$，相应的能量为

$$\begin{aligned}\bar{E} &= \bar{H}(\beta_0)=\frac{\hbar^2\beta_0}{4m}+\langle\psi(\beta_0)|V(x)|\psi(\beta_0)\rangle\\ &= \frac{\hbar^2\beta_0}{4m}+2\beta_0\left[-\frac{\hbar^2}{4m}+\langle\psi(\beta_0)|x^2V(x)|\psi(\beta_0)\rangle\right]\\ &= -\frac{\hbar^2\beta_0}{4m}+2\beta_0\langle\psi(\beta_0)|x^2V(x)|\psi(\beta_0)\rangle\leqslant0\end{aligned}\tag{2.175}$$

其中用到了 $\left.\dfrac{\partial\bar{H}}{\partial\beta}\right|_{\beta_0}=0$ 以及题给吸引势的条件. 所以系统至少存在一个束缚态.

(2) 设 $\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}xV(x)=A$，$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}xx^2V(x)=B$.

当 A、B 都很小时，势 $V(x)$ 只能在 $|x|$ 较小处有可能取较大的值，而在 $|x|$ 较大处，$V(x)$ 必须是快速衰减的，于是

$$\begin{aligned}A_1&=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\beta x^2}V(x)\mathrm{d}x\approx\int_{-\infty}^{+\infty}(1-\beta x^2)V(x)\mathrm{d}x=A-\beta B\\ B_1&=\int_{-\infty}^{+\infty}x^2\mathrm{e}^{-\beta x^2}V(x)\mathrm{d}x\approx\int_{-\infty}^{+\infty}x^2V(x)\mathrm{d}x=B\end{aligned}$$

由 $\dfrac{\partial \bar{H}}{\partial \beta}=0$，得

$$\frac{\hbar^2}{4m}+\frac{A_1}{2\sqrt{\pi\beta}}-\sqrt{\frac{\beta}{\pi}}B_1=0$$

求解上面关于 $\sqrt{\beta}$ 的方程，取正根得

$$\sqrt{\beta}=\frac{\sqrt{\pi}\hbar^2}{12mB}+\sqrt{\frac{\pi\hbar^4}{144m^2B^2}+\frac{A}{3B}} \tag{2.176}$$

于是，得到能量的一个估计

$$\begin{aligned}\bar{E} &= -\frac{\hbar^2\beta}{4m}+2\beta\sqrt{\frac{\beta}{\pi}}B \\ &= \left(\frac{\sqrt{\pi}\hbar^2}{12mB}+\sqrt{\frac{\pi\hbar^4}{144m^2B^2}+\frac{A}{3B}}\right)^2\left(-\frac{\hbar^2}{12m}-\sqrt{\frac{\hbar^4}{36m^2}+\frac{4AB}{3\pi}}\right)\end{aligned} \tag{2.177}$$

对它的最佳下界可如下估计：注意 A、B 均是负数，故 $\bar{E}<0$，于是有

$$\bar{E}<-\frac{\hbar^2}{4m}\left(\frac{\sqrt{\pi}\hbar^2}{12mB}+\sqrt{\frac{\pi\hbar^4}{144m^2B^2}+\frac{A}{3B}}\right)^2$$

由于对任意两实数 a、b，有不等式 $(a+b)^2\geqslant 4ab$，故上界为

$$\bar{E}=-\frac{\pi\hbar^6}{144m^3B^2}\sqrt{1+\frac{48m^2AB}{\pi\hbar^4}} \tag{2.178}$$

(3) 由第 (2) 小题知

$$\sqrt{\beta}=\frac{a_1}{B}+\sqrt{\frac{a_2}{B^2}+\frac{A}{3B}}$$

其中，$a_1=\dfrac{\sqrt{\pi}\hbar^2}{12m}$，$a_2=\dfrac{\pi\hbar^4}{144m^2B^2}$，则有

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\beta x^2}V(x)\mathrm{d}x\approx\int_{-\infty}^{+\infty}V(x)(1-\beta x^2)\mathrm{d}x=A-\beta B$$

以及

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\beta x^2}V(x)\mathrm{d}x\approx V(0)\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\beta x^2}\mathrm{d}x\sim\frac{V(0)}{\beta^{1/2}}$$

其中已略去常系数 $\sqrt{\pi}$，这不影响本问要求的结果. 比较上面两式知，在一级近似下有

$$\frac{V(0)}{\beta^{1/2}}=A-\beta B$$

从而

$$\left|\frac{V(0)}{\beta^{1/2}A}\right|=\left|1-\frac{\beta B}{A}\right|$$

其中 $V(0)<0$. 而

$$\frac{\beta B}{A}=\left(\frac{a_1}{B}\sqrt{\frac{B}{A}}+\sqrt{\frac{a_2}{B^2}+\frac{A}{3B}\frac{B}{A}}\right)^2=\left(\frac{a_1}{\sqrt{AB}}+\sqrt{\frac{a_2}{B^2}+\frac{A}{3B}\frac{B}{A}}\right)^2 \tag{2.179}$$

由于 A、B 皆为小量，故有 $\dfrac{\beta B}{A}\gg 1$，即得 $\left|\dfrac{V(0)}{\beta^{1/2}A}\right|\gg 1$.

对 B，类似地有

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\beta x^2}x^2V(x)\mathrm{d}x\approx B-\int_{-\infty}^{+\infty}\beta x^4V(x)\mathrm{d}x$$

以及

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\beta x^2}x^2V(x)\mathrm{d}x\approx V(0)\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\beta x^2}x^2\mathrm{d}x\sim V(0)\beta^{-3/2}$$

比较上面两式知，在一级近似下有

$$V(0)\beta^{-3/2}=B-\int_{-\infty}^{+\infty}\beta x^4V(x)\mathrm{d}x\approx B-\beta\cdot B\cdot\text{常数}$$

这样

$$\left|\frac{V(0)}{\beta^{3/2}B}\right|=\left|1-\frac{\beta}{B}\int_{-\infty}^{+\infty}x^4V(x)\mathrm{d}x\right| \tag{2.180}$$

又因为 $\left|\dfrac{\beta}{B}\cdot\text{常数}\right|\gg 1$，故有

$$\left|\frac{V(0)}{\beta^{3/2}B}\right|\gg 1$$

综上有

$$\begin{cases}\left|\dfrac{V(0)}{\beta^{1/2}A}\right|\gg 1\\ \left|\dfrac{V(0)}{\beta^{3/2}B}\right|\gg 1\end{cases} \tag{2.181}$$

也就是

$$\begin{cases}\left|\dfrac{\beta^{1/2}A}{V(0)}\right|\ll 1\\ \left|\dfrac{\beta^{3/2}B}{V(0)}\right|\ll 1\end{cases} \tag{2.182}$$

此即以无量纲表达式明确了 (2) 中“小”的含义.

2.45　双势阱中态的一些讨论

题 2.45　质量为 m 的粒子在 $t=0$ 时刻以下述方式被置于如图 2.14所示的双势阱中：其波函数 (在 $t=0$ 时) 是一正弦曲线 (“半个正弦波”)，该正弦曲线的波节在左半势阱的两边缘上，如图 2.14所示.

(1) 求 $t=0$ 时能量的期望值 (用图上定义的符号表示)；

(2) 在粒子被释放后的时间，能量期望值是常数吗？为什么？

(3) 这是具有确定能量的态吗 (也就是说，对它进行能量测量总是给出同一数值)？为什么？

(4) 波函数会从 $t=0$ 时刻的值开始随时间变化吗？如果“变化”，解释你如何去计算波函数的变化，如果“不变化”，解释为什么不变化；

(5) 粒子有无可能逃离势阱 (从整个势阱，从两个半势阱)？为什么？

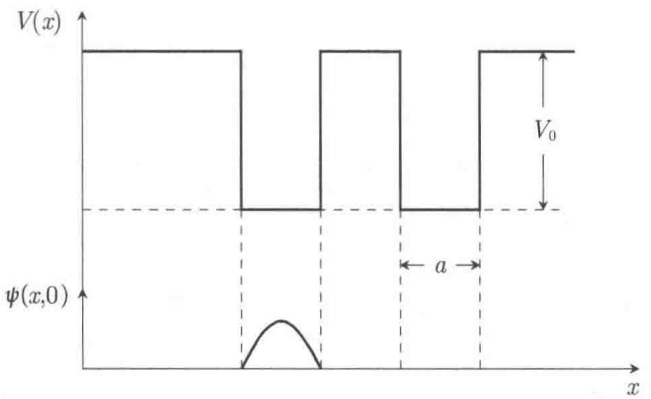


图 2.14　质量为 m 的粒子在双势阱中

解答　(1) $t=0$ 时能量的期望值为

$$\langle H\rangle_{t=0}=-V_0-\frac{\hbar^2 2}{2ma}\int_0^a \sin\frac{\pi x}{a}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\cdot\sin\frac{\pi x}{a}\mathrm{d}x=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma}-V_0$$

(2) 因为 H 是守恒量，故 $\langle H\rangle$ 是常数；

(3) 这不是一个具有确定能量的状态. 因为初始的状态波函数是阱宽为 α、阱深无限的位阱的能量本征态，并不是这里位阱的能量本征态. 它是本问题 (有限深势阱) 的不同能量本征态的叠加态. 因此，对这个状态的每次测量不是均能给出同一能量数值，而是以一定的概率序列给出一组能量数值.

(4) 波函数的形状将随时间变化. 这是因为符合所给初始条件的解是一个叠加态

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

$$\psi(x,0)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x}{a}=\sum_n c_n\psi_n(x)$$

由于 E_n 随 n 改变，故 $\psi(x,t)$ 的形状将随 t 改变.

(5) 粒子有可能逃离势阱，只要符合如下条件：

$$\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma}>V_0$$

也就是说，当势阱足够窄 (动能大)、势阱不很深 (数值不很大) 时，粒子总能量为正，即可从整个势阱逃离.

2.46　一维反散射问题

题 2.46　一个质量为 m 的粒子在势 $V(x)$ 的作用下做一维运动. 假如它处在 $E=\dfrac{\hbar^2\gamma^2}{2m}$ 的能量本征态 $\psi(x)=(\gamma^2/\pi)^{1/4}\mathrm{e}^{-\gamma^2x^2/2}$ 上.

(1) 求粒子的平均位置;

(2) 求粒子的平均动量;

(3) 求 $V(x)$;

(4) 求粒子动量在 $p\to p+\mathrm{d}p$ 的概率 $P(p)\mathrm{d}p$.

解答　(1) 易知题给波函数已归一化，这样

$$\langle x\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)x\psi(x)\mathrm{d}x=\sqrt{\frac{\gamma^2}{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\gamma^2x^2}x\mathrm{d}x$$

因为被积函数为奇函数，所以上式积分为 0，也就是 $\langle x\rangle=0$.

(2) 粒子的平均动量

$$\begin{aligned}\langle p\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x)\mathrm{d}x\\ &= \mathrm{i}\hbar\frac{\gamma}{\sqrt{\pi}}\sqrt{\frac{\gamma^2}{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\gamma^2x^2}x\mathrm{d}x=0\end{aligned}$$

(3) 将题给波函数代入 Schrödinger 方程

$$\begin{aligned}E\psi(x) &= H\psi(x)=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\right)\psi(x)\\ &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\gamma^2+\gamma^4x^2\right)+V(x)\right]\psi(x)\end{aligned}$$

可见

$$V(x)=\frac{\hbar^2\gamma^4x^2}{2m}$$

(4) 利用积分公式 (A.1)，对波函数作 Fourier 变换转换到动量空间，

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

从而按波函数概率解释粒子动量在 $p\to p+\mathrm{d}p$ 的概率

$$P(p)\mathrm{d}p=\sqrt{\frac{1}{\pi\gamma^2\hbar^2}}\mathrm{e}^{-\frac{p^2}{\gamma^2\hbar^2}}\mathrm{d}p$$

说明　第 (2) 问中 $\langle p\rangle=0$ 这一结果也可以通过下述考虑给出，因为 $\psi^*=\psi(\psi$ 为实数)，所以

$$\langle p\rangle=-\mathrm{i}\hbar\int_{\infty}^{-\infty}\psi(x)\psi'(x)\mathrm{d}x$$

上式左边为实数 (p 为可观察量)，而右边为一纯虚数，故必有 $\langle p\rangle=0$，所以在一维束缚态中 $\langle p\rangle=0$(一维束缚定态波函数可取为实函数). 束缚定态下动量期望值为零，这是普遍成立的结论.

2.47　自由粒子波包随时间的演化

题 2.47　一质量为 m 的粒子处于一维势阱的基态，使得该粒子被限制在一空间小区域内，如图 2.15所示. 在 $t=0$ 时刻，该势阱突然消失，使得 $t>0$ 时粒子是自由的，给出在 $t>0$ 时刻，该粒子单位时间内到达一个相距为 L 的观察者的概率公式.

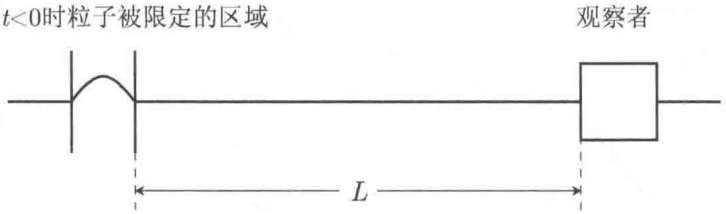


图 2.15　限制粒子运动的势阱突然消失

解答　设初始 $t=0$ 时刻波函数为 $\psi_0(x)$，则

$$\begin{aligned}\psi(x,t)&=\langle x|\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p^2t/(2m\hbar)}\,|\psi_0\rangle\\&=\int_{-\infty}^{+\infty}\langle x|\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p^2t/(2m\hbar)}\,|x'\rangle\,\langle x'|\,\psi_0\rangle\,\mathrm{d}x'\\&=\int_{-\infty}^{+\infty}\langle x|\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p^2t/(2m\hbar)}\,|x'\rangle\,\psi_0(x')\mathrm{d}x'\end{aligned}$$

而其中

$$\begin{aligned}\langle x|\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p^2t/(2m\hbar)}\,|x'\rangle&=\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p'\,\mathrm{d}p\,\langle x|\,p'\rangle\,\langle p'|\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p^2t/(2m\hbar)}\,|p\rangle\,\langle p\,|x'\rangle\\&=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{2\pi\hbar}\exp\left(\mathrm{i}\frac{px}{\hbar}-\mathrm{i}\frac{px'}{\hbar}-\mathrm{i}\frac{p^2t}{2m\hbar}\right)\mathrm{d}p\\&=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left\{-\mathrm{i}\left[p\sqrt{\frac{t}{2m\hbar}}+\frac{(x'-x)\sqrt{m}}{\sqrt{2\hbar t}}\right]^2\right\}\mathrm{d}p\\&\quad\cdot\exp\left[\mathrm{i}(x'-x)^2\frac{m}{2\hbar t}\right]\\&=\frac{1}{2\pi\hbar}\sqrt{\frac{2m\hbar}{t}}\exp\left[\mathrm{i}(x'-x)^2\frac{m}{2\hbar t}\right]\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}q^2}\mathrm{d}q\\&=\frac{1-\mathrm{i}}{2}\sqrt{\frac{m}{\pi\hbar t}}\exp\left[\mathrm{i}(x'-x)^2\frac{m}{2\hbar t}\right]\end{aligned}$$

于是

$$\psi(x,t)=\frac{1-\mathrm{i}}{2}\sqrt{\frac{m}{\pi\hbar t}}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[\mathrm{i}(x'-x)^2\frac{m}{2\hbar t}\right]\cdot\psi_0(x')\mathrm{d}x'$$

若令 $\psi_0(x)=\dfrac{1}{\pi^{1/4}a^{1/2}}\exp\left(-\dfrac{x^2}{2a^2}\right)$，即线度为 a 的 Gauss 波包，则代入积分可得

$$\begin{aligned}\psi(x,t)=&\frac{1-\mathrm{i}}{2}\sqrt{\frac{m}{\pi\hbar t}}\frac{1}{\pi^{1/4}a^{1/2}}\exp\left\{\left(\mathrm{i}\frac{mx^2}{2\hbar t}\right)\left[1-\frac{m}{2\hbar t\left(\dfrac{m}{2\hbar t}+\dfrac{\mathrm{i}}{2a^2}\right)}\right]\right\}\\&\cdot\frac{1}{\sqrt{\dfrac{m}{2\hbar t}+\dfrac{\mathrm{i}}{2a^2}}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\xi^2}\mathrm{d}\xi\\=&\frac{1}{\pi^{1/4}a^{1/2}}\sqrt{\frac{m}{m+\mathrm{i}\dfrac{\hbar t}{a^2}}}\exp\left(-\frac{mx^2}{2a^2}\frac{1}{m+\mathrm{i}\dfrac{\hbar t}{a^2}}\right)\end{aligned}$$

于是流密度为

$$j=\mathrm{Re}\left(\psi^*\frac{p_x}{m}\psi\right)=\frac{\hbar^2xt}{\sqrt{\pi}a^5m^2}\frac{1}{\left(1+\dfrac{\hbar^2t^2}{m^2a^4}\right)^{3/2}}\cdot\exp\left[-\frac{x^2}{a^2}\frac{1}{1+\left(\dfrac{\hbar t}{ma^2}\right)^2}\right]$$

将 $x=L$ 代入，即得 $t>0$ 时刻的单位时间内粒子到达 L 处的概率.

2.48　自由粒子波包随时间演化的极限形式

题 2.48　一维自由粒子的初态为 $\psi(x,0)$，

(1) 证明在足够长时间后的波函数为

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

式中

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

是初始波函数 $\psi(x,0)$ 的 Fourier 变换；

(2) 给出极限值 $\lim\limits_{t\to\infty}|\psi(x,t)|^2$ 合理的物理解释.

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

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

$$\psi(x,t)\ =\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}\psi(x,0)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\hbar t}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}}\psi(x,0)$$

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

也就是

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}k\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\hbar k^2 t}{2m}+\mathrm{i}kx}\varphi(k) \tag{2.183}$$

式中

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

代入式 (2.183)，得

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

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

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

也就是在足够长时间后的波函数为

$$\psi(x,t)\approx\sqrt{\frac{m}{\hbar t}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}mx^2}{2\hbar t}}\varphi\left(\frac{mx}{\hbar t}\right) \tag{2.184}$$

即为所证.

(2) 由题 (1) 结果

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

由于 $\varphi(k)$ 是 $\psi(x,0)$ 的 Fourier 变换，所以

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\varphi(k)|^2\mathrm{d}k=\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x,0)|^2\mathrm{d}x$$

于是一方面

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x,t)|^2\mathrm{d}x &= \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{m}{\hbar t}\left|\varphi\left(\frac{mx}{\hbar t}\right)\right|^2\mathrm{d}x\\ &= \int_{-\infty}^{+\infty}|\varphi(k)|^2\mathrm{d}k=\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x,0)|^2\mathrm{d}x\end{aligned}$$

表示总概率守恒，另一方面，对 $t\to\infty$ 的极限情况，

$$|\psi(x,t)|^2\to 0\cdot|\varphi(0)|^2=0\cdot\frac{1}{2\pi}\left(\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x,0)\mathrm{d}x\right)^2=0$$

表示粒子的波函数将无限地扩散.

说明　本题还可以利用自由粒子的 Propagator 求解，请读者自行考虑. 读者也可对式 (2.184) 取绝对值平方，考虑其物理意义.

2.49　$^{212}_{83}$Bi 的 α 衰变的量子模型

题 2.49　放射性同位素 $^{212}_{83}$Bi 衰变成 $^{208}_{81}$Tl，同时放出能量为 6MeV 的 α 粒子.

(1) 为了计算寿命，首先讨论如图 2.16(a) 所示的有限高势垒. 计算一个质量为 M 的粒子从左面入射的透射系数 T，粒子能量为 E，并设 $T \ll 1$；

(2) 利用上面的结果，对 $^{212}_{83}$Bi 的寿命给一粗略的数值估计，选择敏感的势垒参数来近似 α 粒子势.

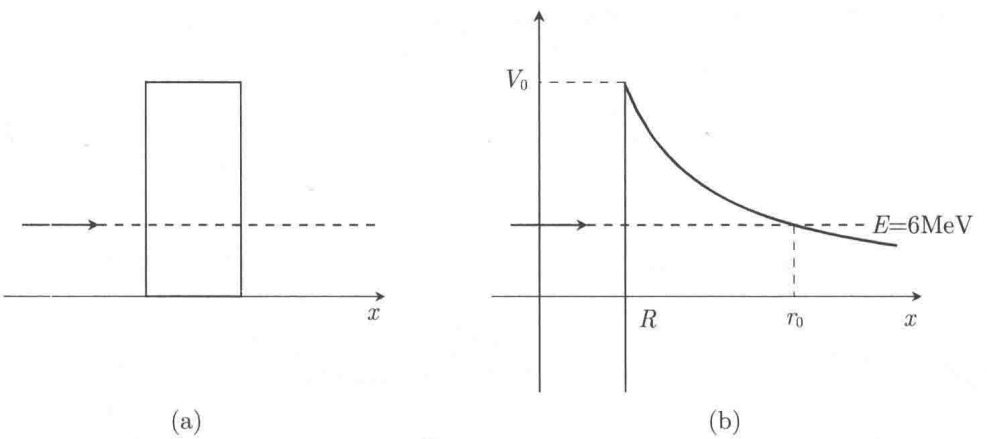


图 2.16　$^{212}_{83}$Bi 的 α 衰变的量子模型

解答　(1) 方势垒的散射问题在一般量子力学的书上都有讨论. 对本题题设给定 $T \ll 1$，则也可如下讨论. 此时在 $x=0$ 处的反射就好像势垒为无限厚另一边不存在一样，因而有

$$\psi(x) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + (t_1 - 1)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}, \quad x < 0 \tag{2.185}$$

$$\psi(x) = t_1 \mathrm{e}^{-k'x}, \quad 0 < x < b \tag{2.186}$$

其中，$k' = \sqrt{\dfrac{2m(V_0 - E_0)}{\hbar^2}}$，$k = \sqrt{\dfrac{2mE_0}{\hbar^2}}$，所以

$$\mathrm{i}k(2 - t_1) = -k't_1 \quad \text{或者} \quad t_1 = \frac{2k}{k + \mathrm{i}k'} \tag{2.187}$$

考虑在 $x=b$ 处的反射，有

$$\psi(x) = \mathrm{e}^{-k'b} \cdot t_1 \left[\mathrm{e}^{-k'(x-b)} + (t_2 - 1)\mathrm{e}^{k'(x-b)}\right], \quad 0 < x < b \tag{2.188}$$

$$\psi(x) = t_1 t_2 \mathrm{e}^{-k'b} \cdot \mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x-b)}, \quad x > b \tag{2.189}$$

由 $x=b$ 处的波函数导数连续性

$$-k'(2 - t_2) = \mathrm{i}kt_2 \quad \text{或者} \quad t_2 = 2\mathrm{i}k'/(k + \mathrm{i}k')$$

由此得方势垒透射振幅为

$$t_1 t_2 \mathrm{e}^{-k'b}$$

透射概率为

$$|T|^2 = \frac{16k^2k'^2}{(k^2+k'^2)^2}\mathrm{e}^{-2k'b} = \frac{16E(V_0-E)}{V_0^2}\mathrm{e}^{-2k'b} \tag{2.190}$$

此结果与严格求解 Schrödinger 方程后所得解的 $T \ll 1$ 情况的结果完全相同.

在透射概率微小 ($T \ll 1$) 的情况下，方势垒的透射概率可视为许多窄方势垒单独透射的概率的乘积，从而此结果可用被到非方势垒的透射问题，而且与 WKB 近似计算结果一致.

(2) α 粒子感受到的 Coulomb 场为

$$V(r) = \frac{81\times 2e^2}{r}$$

如图 2.16(b) 所示. 为估算 $^{212}_{83}$Bi 的 α 衰变的速率，我们可以把静电场视为势垒. 垒宽

$$r_0 = \frac{81\times 2\cdot e^2}{6\mathrm{MeV}} = \frac{162}{6\times 137}\cdot\frac{\hbar c}{\mathrm{MeV}} = \frac{162}{822}\cdot\frac{2\times 10^{-11}\mathrm{MeV}\cdot\mathrm{cm}}{\mathrm{MeV}} = 3.9\times 10^{-12}\mathrm{cm}$$

$^{208}_{81}$Tl 的半径为

$$R = 1.0\times 10^{-13}[208]^{1/3} = 6.0\times 10^{-13}(\mathrm{cm})$$

这样对此 Coulomb 场我们有

$$V_0 = 6\mathrm{MeV}\times\frac{3.9\times 10^{-12}\mathrm{cm}}{6\times 10^{-13}\mathrm{cm}} = 39\mathrm{MeV}$$

为估算 $^{212}_{83}$Bi 的 α 衰变的速率，我们可以把静电场 (6MeV 的 α 粒子感受到的 Coulomb 场) 视为势垒，采用第 (1) 小题的式 (2.190)，但是其 $k'b$ 应替换为

$$\begin{aligned}\int_R^{r_0} k'\mathrm{d}r &= \int_R^{r_0}\sqrt{\frac{2m(V_0-E_0)}{\hbar^2}}\mathrm{d}r \\ &= \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\int_R^{r_0}\sqrt{\frac{r_0}{r}-1}\mathrm{d}r \\ &= 0.8r_0\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \approx 30\end{aligned}$$

粒子在 $^{208}_{81}$Tl 的核内以速度 v 运动，每秒撞壁次数为 $\dfrac{v}{R}$，这样，每秒就有 $\dfrac{v}{R}|T|^2$ 的概率跑出去. 所以 $^{212}_{83}$Bi 的寿命为

$$\begin{aligned}\tau &\approx \frac{R}{\nu}\frac{1}{|T|^2} \approx \frac{6\times 10^{-13}}{3\times 10^{10}}\times \mathrm{e}^{2k'r_0} \\ &= 2\times 10^{-23}\mathrm{e}^{60} = 2.3\times 10^3(\mathrm{s})\end{aligned}$$

2.50　质量为 m 的粒子在一维双 δ-势阱中运动

题 2.50　质量为 m 的粒子在一维势场 $V(x)=-\gamma[\delta(x-a)+\delta(x+a)]$ 中运动，γ 是大于零的常数. 求基态本征函数，并导出联系 γ 和能量本征值 E 的方程.

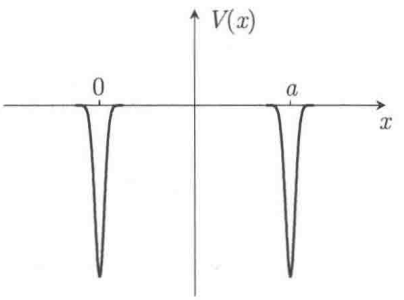


图 2.17　双 δ-势阱

解法一　定态 Schrödinger 方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x)-\gamma\left[\delta(x-a)+\delta(x+a)\right]\psi(x)=E\psi(x) \tag{2.191}$$

除了 $x=\pm a$ 以外，$V(x)=0$，因而束缚定态的能量 $E<0$(否则是游离态)，令

$$\kappa=\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}\quad 或\quad E=-\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} \tag{2.192}$$

再定义特征长度

$$b=\frac{\hbar^2}{m\gamma} \tag{2.193}$$

这样能量本征方程 (2.191) 可以写成

$$\psi''-\kappa^2\psi-\frac{2}{b}\left[\delta(x+a)+\delta(x-a)\right]\psi(x)=0 \tag{2.194}$$

分区间求解定态 Schrödinger 方程，在 $x\leqslant -a$(设为 1 区)、在 $-a<x<a$(设为 2 区)以及在 $x\geqslant a$(设为 3 区) 三个区间分别解得其波函数为

$$\psi(x)=\begin{cases}A\mathrm{e}^{\kappa x}, & x\leqslant -a\\ B\sinh\kappa x+D\cosh\kappa x, & |x|<a\\ C\mathrm{e}^{-\kappa x}, & x\geqslant a\end{cases} \tag{2.195}$$

将 2 区的波函数分为奇、偶宇称态，由波函数连续，对奇宇称态

$$A\mathrm{e}^{\kappa x}\big|_{x=-a}=B\sinh\kappa x\big|_{x=-a} \tag{2.196}$$

$$C\mathrm{e}^{-\kappa x}\big|_{x=a}=B\sinh\kappa x\big|_{x=a} \tag{2.197}$$

也就是

$$Ae^{-\kappa a} = -B\sinh\kappa a$$
$$Ce^{-\kappa a} = B\sinh\kappa a$$

由上式给出

$$A = -C, \quad B = \frac{Ce^{-\kappa a}}{\sinh\kappa a} \tag{2.198}$$

对偶宇称态

$$Ae^{\kappa x}\big|_{x=-a} = D\cosh\kappa x\big|_{x=-a} \tag{2.199}$$
$$Ce^{-\kappa x}\big|_{x=a} = D\cosh\kappa x\big|_{x=a} \tag{2.200}$$

也就是

$$Ae^{-\kappa a} = D\cosh\kappa a$$
$$Ce^{-\kappa a} = D\cosh\kappa a$$

由上式给出

$$A = C, \quad D = \frac{Ce^{-\kappa a}}{\cosh\kappa a} \tag{2.201}$$

在两个小区域 $(-a-\epsilon,-a+\epsilon),(a-\epsilon,a+\epsilon)$ 分别积分此 Schrödinger 方程给出

$$\begin{cases} \psi'(-a+\varepsilon)-\psi'(-a-\varepsilon) = -\dfrac{2m\gamma}{\hbar^2}\psi(-a) \\ \psi'(a+\varepsilon)-\psi'(a-\varepsilon) = -\dfrac{2m\gamma}{\hbar^2}\psi(a) \end{cases} \tag{2.202}$$

将 1、2、3 区的波函数根据奇偶宇称代入. 对于奇宇称

$$\begin{cases} B\kappa\cosh\kappa(-a) - A\kappa e^{\kappa(-a)} = -\dfrac{2m\gamma}{\hbar^2}Ae^{\kappa(-a)} \\ -C\kappa e^{-\kappa a} - B\kappa\cosh\kappa a = -\dfrac{2m\gamma}{\hbar^2}Ce^{-\kappa a} \end{cases} \tag{2.203}$$

对于偶宇称

$$\begin{cases} D\kappa\sinh\kappa(-a) - A\kappa e^{\kappa(-a)} = -\dfrac{2m\gamma}{\hbar^2}Ae^{\kappa(-a)} \\ -C\kappa e^{-\kappa a} - D\kappa\sinh\kappa a = -\dfrac{2m\gamma}{\hbar^2}Ce^{-\kappa a} \end{cases} \tag{2.204}$$

对式 (2.203)与式 (2.204)分别化简后得

$$\frac{\hbar^2}{m\gamma}\kappa = 1-e^{-2\kappa a}, \quad \text{奇宇称态} \tag{2.205}$$
$$\frac{\hbar^2}{m\gamma}\kappa = 1+e^{-2\kappa a}, \quad \text{偶宇称态} \tag{2.206}$$

这是联系 γ 和能量本征值的方程，奇宇称束缚态不一定有解 (取决于双 δ-势的强度 γ 和间距大小)，偶宇称束缚态则一定有唯一解. 因为 $E=-\dfrac{1}{2m}\hbar^2\kappa^2$，可知偶宇称态能级更低 (图 2.18中偶宇称态对应的交点具有更大的 κ 值)，基态为偶宇称态[①]，所以基态波函数为

$$\psi(x)=\begin{cases} D\cosh\kappa a\mathrm{e}^{\kappa a}\mathrm{e}^{-\kappa|x|}, & |x|>a \\ D\cosh\kappa x, & |x|\leqslant a \end{cases} \tag{2.207}$$

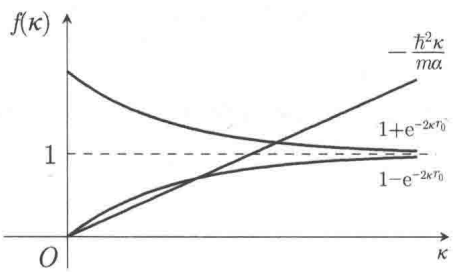


图 2.18　图解法求解双 δ-势偶宇称与奇宇称束缚态能级关于 κ 的函数曲线

由波函数归一化

$$2\int_a^{+\infty}(D\cosh\kappa a\mathrm{e}^{\kappa a}\mathrm{e}^{-\kappa x})^2\mathrm{d}x+\int_{-a}^{a}(D\cosh\kappa x)^2\mathrm{d}x=1$$

得系数 D 为

$$D=\left[\frac{\mathrm{e}^{2\kappa a}+2\kappa a+1}{2\kappa}\right]^{-1/2} \tag{2.208}$$

解法二　(动量空间) 设

$$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p)\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}p \tag{2.209}$$

式 (2.191) 两边作 Fourier 变换，即得在 p 表象的定态方程

$$(p^2+\hbar^2\kappa^2)\varphi(p)=\frac{2\mu\gamma}{\sqrt{2\pi\hbar}}\left[\psi(-a)\mathrm{e}^{\mathrm{i}pa/\hbar}+\psi(a)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}pa/\hbar}\right] \tag{2.210}$$

其中，$\hbar\kappa=\sqrt{-2mE}$ 同式 (2.192)，E 是束缚定态的能量，而 $x\to\infty$ 处 $V=0$，故 $E<0$.

根据 δ-函数的基本公式 $(x-x_0)\delta(x-x_0)=0$，可知式 (2.210) 的解为

$$\begin{aligned}\varphi(p) &= C_1\delta(p-\mathrm{i}\hbar\kappa)+C_2\delta(p+\mathrm{i}\hbar\kappa)+\frac{2m\gamma}{\sqrt{2\pi\hbar}}\frac{\psi(-a)\mathrm{e}^{\mathrm{i}pa/\hbar}+\psi(a)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}pa/\hbar}}{p^2+\hbar^2\kappa^2} \\ &= \frac{2m\gamma}{\sqrt{2\pi\hbar}}\frac{\psi(-a)\mathrm{e}^{\mathrm{i}pa/\hbar}+\psi(a)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}pa/\hbar}}{p^2+\hbar^2\kappa^2}\end{aligned} \tag{2.211}$$

① 此结论也可作一般性分析得到. 题给势函数满足 $V(x)=V(-x)$，这样 Hamilton 量在宇称变换下不变. 一维定态问题的束缚态不简并，应有确定的宇称. 再按节点定理，基态无节点，必为偶宇称态.

将式 (2.211) 代入式 (2.210)，得到 x 表象中的波函数

$$\psi(x)=\frac{m\gamma}{\pi\hbar}\left\{\psi(-a)\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}p(x+a)/\hbar}}{p^2+\hbar^2\kappa^2}\mathrm{d}p+\psi(a)\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}p(x-a)/\hbar}}{p^2+\hbar^2\kappa^2}\mathrm{d}p\right\} \tag{2.212}$$

对上面表达式中包含的两个积分，利用式 (A.23) 即得束缚定态的一般表达式

$$\psi(x)=\frac{1}{\kappa b}\left[\psi(-a)\mathrm{e}^{-\kappa|x+a|}+\psi(a)\mathrm{e}^{-\kappa|x-a|}\right] \tag{2.213}$$

其中，特征长度 $b=\dfrac{\hbar^2}{m\gamma}$. 上面 $\psi(-a)$ 与 $\psi(a)$ 分别为波函数 $\psi(x)$ 在 $x=-a$ 与 $x=a$ 处的值，可视为待定常数.

因位势 $V(x)$ 具有反射对称性，所以束缚定态有确定宇称. 先讨论偶宇称态，其波函数 ψ_+ 满足 $\psi_+(-x)=\psi_+(x)$，也就有 $\psi_+(-a)=\psi_+(a)$. 因而偶宇称束缚定态波函数可如下给出：

$$\psi_+(x)=\frac{1}{\kappa b}\psi_+(a)\left(\mathrm{e}^{-\kappa|x+a|}+\mathrm{e}^{-\kappa|x-a|}\right) \tag{2.214}$$

其中，$\psi_+(a)\neq 0$，不然 $\psi_+(x)$ 恒为零. 上式取 $x=a$ 得

$$\psi_+(a)=\frac{1}{\kappa b}\psi_+(a)\left(\mathrm{e}^{-2\kappa a}+1\right)$$

此即

$$\kappa b=1+\mathrm{e}^{-2\kappa a}$$

这一样给出解法一的偶宇称束缚定态能级公式 (2.206).

奇宇称态波函数 ψ_- 满足 $\psi_-(-x)=-\psi_-(x)$，也就有 $\psi_-(-a)=-\psi_-(a)$，因而偶宇称束缚定态波函数可如下给出：

$$\psi_-(x)=\frac{1}{\kappa b}\psi_-(a)\left(\mathrm{e}^{-\kappa|x-a|}-\mathrm{e}^{-\kappa|x+a|}\right) \tag{2.215}$$

其中，$\psi_-(a)\neq 0$，不然 $\psi_-(x)$ 恒为零. 上式取 $x=a$ 得

$$\psi_-(a)=\frac{1}{\kappa b}\psi_-(a)\left(1-\mathrm{e}^{-2\kappa a}\right)$$

此即

$$\kappa b=1-\mathrm{e}^{-2\kappa a}$$

这同样给出解法一的奇宇称束缚定态能级公式 (2.205).

解法三　(散射振幅的极点) 根据散射理论，散射振幅在复波数平面上正虚轴上的极点，对应势阱的束缚能级[①]，据此我们可通过势阱的散射振幅求束缚能级.

双 δ-势垒的散射问题在题 2.63 中进行讨论. 将所得结论中的 δ-势的强度反号，也就是相应双 δ-势阱的散射问题的解. 我们注意题 2.63 中的双 δ-势分别位于 $x=0$ 与 $x=a$，而本题则位于 $x=\pm a$. 但是散射振幅是 $x\to\infty$ 透射波或者 $x\to-\infty$ 反射波与

① 可见曾谨言, 量子力学 (第五版)(卷 I)[M], 北京: 科学出版社, 2013, P.91-93 讨论以及 P92 脚注所引文献.

$x\to-\infty$ 入射波复波幅的比，与坐标原点的选取无关. 我们注意本题双 δ-势的间隔为 $2a$，是题 2.63 双 δ-势间隔的 2 倍，这样我们直接利用题 2.63 的式 (2.283) 写下本题的透射振幅

$$D=\frac{\theta^2}{(-\theta+\mathrm{i})^2+\mathrm{e}^{4\mathrm{i}ak}}=\frac{1}{\left(1-\dfrac{\mathrm{i}}{\theta}\right)^2+\dfrac{1}{\theta^2}\mathrm{e}^{4\mathrm{i}ak}} \tag{2.216}$$

其中，$\theta=\dfrac{\hbar^2k}{m\gamma}=kb$，或者 $\dfrac{1}{\theta}=\dfrac{1}{kb}$. 透射振幅 D 的表达式的极点也就是 D 表达式分母的零点方程

$$\left(1+\frac{\mathrm{i}}{\theta}\right)^2+\frac{1}{\theta^2}\mathrm{e}^{4\mathrm{i}ak}=0$$

我们寻找式 (2.216) 在 k 复平面上正虚轴上的极点，令 $k=\mathrm{i}\kappa$，其中 $\kappa>0$. 利用

$$\left(1-\frac{\mathrm{i}}{kb}\right)^2-\frac{\mathrm{i}^2}{k^2b^2}\mathrm{e}^{4\mathrm{i}ak}=\left(1-\frac{\mathrm{i}}{kb}+\frac{\mathrm{i}}{kb}\mathrm{e}^{4\mathrm{i}ak}\right)\left(1-\frac{\mathrm{i}}{kb}-\frac{\mathrm{i}}{kb}\mathrm{e}^{4\mathrm{i}ak}\right)$$

即得

$$\left(1-\frac{1}{\kappa b}+\frac{1}{\kappa b}\mathrm{e}^{-2\kappa a}\right)\left(1-\frac{1}{\kappa b}-\frac{1}{\kappa b}\mathrm{e}^{-2\kappa a}\right)=0$$

因而得

$$1-\frac{1}{\kappa b}+\frac{1}{\kappa b}\mathrm{e}^{-2\kappa a}=0,\ \text{或}\ 1-\frac{1}{\kappa b}-\frac{1}{\kappa b}\mathrm{e}^{-2\kappa a}=0$$

由它们可确定束缚定态能级. 与先前的解法所得结果式 (2.206) 和式 (2.205) 完全一致.

说明　用这种方法，对于强度不同的双 δ-势阱，同样可利用题 2.63 的式 (2.283) 得到束缚定态能级.

2.51　方势阱的透射

题 2.51　考虑一维方势阱如图 2.19 所示

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

其中 $V_0>0$. 如果一质量为 m、动能为 E 的非相对论粒子从左入射，问透射概率为多少？ E 为何值时该概率为 1?

解答　能量为 E 的定态 Schrödinger 方程按势垒分区如下给出：

$$\begin{cases}-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x)=E\psi(x), & x<-a, x>a\\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x)-V_0\psi(x)=E\psi(x), & -a\leqslant x\leqslant a\end{cases}$$

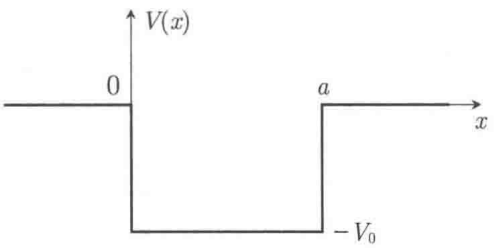


图 2.19　方势阱

这时方程的解为

$$\begin{aligned}\psi(x)&=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+r\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}, &\quad x<0\\ \psi(x)&=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'x}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'x}, &\quad 0<x<a\\ \psi(x)&=t\mathrm{e}^{+\mathrm{i}kx}, &\quad x>a\end{aligned}$$

其中

$$k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}},\qquad k'=\sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}$$

由边界条件确定 r,t,A,B，$x=0$ 点及 $x=a$ 点 $\psi(x)$，$\psi'(x)$ 连续，

$$\begin{aligned}&1+R=A+B\\ &k(1-R)=k'(A-B)\\ &A\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'a}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'a}=t\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}\\ &k'(A\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'a}-B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'a})=kt\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'a}\end{aligned}$$

依次消去 A、B 即得

$$t=\frac{4kk'\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}}{(k+k')^2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'a}-(k-k')^2\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'a}}$$

透射概率为

$$T=|t|^2=\frac{4k^2k'^2}{4(kk'\cos k'a)^2+(k^2-k'^2)^2\sin^2(k'a)}$$

要达到共振透射，须满足 $k'a=n\pi$，即入射粒子动能 $E=\dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma}-V_0$ 时，发生共振透射，粒子的透射概率 $T=1$.

2.52　阶跃势对粒子的散射

题 2.52　考虑势能为 $V(x)$ 的一维系统，

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

其中，V_0 为正常数. 若一能量为 E 的粒子束从 $-\infty$ 处入射，其透射率和反射率各为多少？考虑 E 的所有可能值.

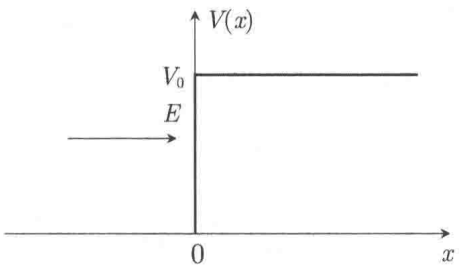


图 2.20　阶跃势对粒子的散射

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

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

其中，$k=\sqrt{2mE}/\hbar$，解上式得

$$\psi(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'x}+r\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'x} \tag{2.217}$$

对于 $x>0$ 区域，粒子波函数方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)+V_0\psi(x)=E\psi(x) \tag{2.218}$$

当 $E>V_0$ 时，方程 (2.218)化为

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

其中，$k'=\sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar$. 上式满足散射边界条件的波函数为

$$\psi(x)=t\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'x} \tag{2.219}$$

由式 (2.217) 得，入射粒子流密度与反射粒子流密度分别为

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

由式 (2.219) 得，透射粒子流密度为

$$j_{\mathrm{t}}=\frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'x}-\mathrm{c.c.}\right)|t|^2=\frac{\hbar k'}{m}|t|^2=\frac{k'}{k}|t|^2j_{\mathrm{i}}$$

$x=0$ 点波函数及导数的连续性给出

$$1+r\ =\ t \tag{2.220}$$

$$1-r = \frac{k'}{k}t \tag{2.221}$$

式 (2.220) 与式 (2.221) 相加得

$$2=\left(1+\frac{k'}{k}\right)t, \quad t=\frac{2k}{k+k'}$$

式 (2.220) 与式 (2.221) 相减得

$$2r=\left(1-\frac{k'}{k}\right)t=\frac{k-k'}{k}\cdot\frac{2k}{k+k'}=2\frac{k-k'}{k+k'}$$

即得

$$r=\frac{k-k'}{k+k'}, \quad t=\frac{2k}{k+k'}$$

再把 k、k' 与能量 E 的关系代入得

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

因而所求的反射系数为

$$R=\left|\frac{j_{\mathrm{r}}}{j_{\mathrm{i}}}\right|=|r|^2=\frac{V_0^2}{\left(\sqrt{E}+\sqrt{E-V_0}\right)^4}$$

透射率为

$$T=1-R=\frac{4kk'}{(k+k')^2}$$

当 $E<V_0$ 时，方程 (2.218)化为

$$\psi''(x)-\kappa^2\psi(x)=0$$

其中，$\kappa=\sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar$. 考虑到 $x\to\infty$ 时 $\psi(x)$ 有限，得

$$\psi(x)=t\mathrm{e}^{-k'x}$$

由波函数连续条件

$$1+r=t \tag{2.222}$$

$$\mathrm{i}k-\mathrm{i}kr=-t\kappa \tag{2.223}$$

可得

$$r=\frac{\kappa+\mathrm{i}k}{\mathrm{i}k-\kappa}=\frac{1-\mathrm{i}\kappa/k}{1+\mathrm{i}\kappa/k}$$

所以反射率为

$$R=|r|^2=1$$

透射率 $T=1-R=0$.

2.53　粒子自势阶方向入射时的透射、反射

题 2.53　若粒子从右边入射，求一维阶梯势的反射系数和透射系数，一维阶梯势为

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

解答　粒子从右边入射，所以 $E>V_0$. 参考题 2.52 求解，写出

$$\begin{aligned}&\text{入射波}\quad \psi_{\mathrm{i}}=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1x}\\ &\text{反射波}\quad \psi_{\mathrm{r}}=B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1x}\\ &\text{透射波}\quad \psi_{\mathrm{t}}=C\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_2x}\end{aligned}$$

其中

$$k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar},\quad k'=\frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$$

由波函数及波函数的一阶导数连续条件得

$$\begin{cases}A\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1x}\big|_{x=0}+B\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1x}\big|_{x=0}=C\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_2x}\big|_{x=0}\\ Ak_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1x}\big|_{x=0}-Bk_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1x}\big|_{x=0}=Ck_2\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_2x}\big|_{x=0}\end{cases}$$

即得

$$A+B=C,\quad (A-B)k_1=Ck_2$$

由上式可解出反射系数

$$|R|^2=\left|\frac{j_{\mathrm{r}}}{j_{\mathrm{i}}}\right|=\left|\frac{B}{A}\right|^2=\frac{V_0^2}{\left(\sqrt{E}+\sqrt{E-V_0}\right)^4}$$

透射系数 $|T|^2=1-|R|^2$.

注意　透射系数不能用 $\left|\dfrac{C}{A}\right|^2$. 这是因为，透射系数的定义为 $T=\dfrac{|j_{\mathrm{t}}|}{|j_{\mathrm{i}}|}$，$j$ 是概率流密度，正比于 k，因为势垒两边的波矢不同，所以不是简单的 $\left|\dfrac{C}{A}\right|^2$.

反射系数与粒子从右边入射的反射系数相同. 对此有下面较一般情形的题 2.55.

2.54　粒子的反射系数 R 及透射系数 T 满足 $R+T=1$

题 2.54　试证明对于如图 2.21所示的任意势垒的一维散射问题，粒子的反射系数 R 及透射系数 T 满足 $R+T=1$.

解答　如果势函数 $V(x)$ 没有给定，则 $\psi(x)$ 无法求解，因而无法计算各种概率流密度. 但对于如图 2.21 所示势垒，势函数 $V(x)$ 满足

$$\lim_{x\to-\infty}V(x)=0,\quad \lim_{x\to\infty}V(x)=V_0 \tag{2.224}$$

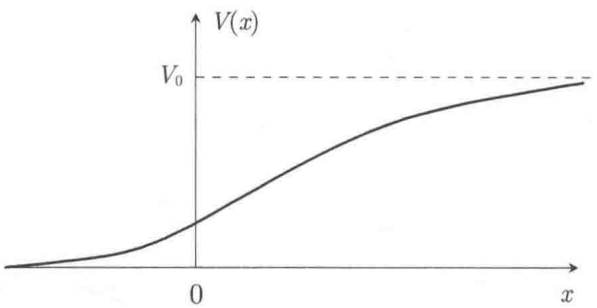


图 2.21　势垒的势函数

我们由此考虑 $\psi(x)$ 的渐近行为. 当 $x\to-\infty$ 时波函数可取为

$$\psi(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1x}+r\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1x} \tag{2.225}$$

其中, $k_1=\sqrt{2mE}/\hbar$. 式 (2.225) 表示入射波与反射波的叠加. 入射粒子流密度与反射粒子流密度分别为

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

因而反射系数为

$$R=\left|\frac{j_{\mathrm{r}}}{j_{\mathrm{i}}}\right|=|r|^2$$

$x\to\infty$ 时波函数可取为

$$\psi(x)=t\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_2x} \tag{2.226}$$

其中, $k_2=\sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar$. 式 (2.226) 表示透射波, 透射粒子流密度为

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

故透射系数为

$$T=\frac{|j_{\mathrm{t}}|}{|j_{\mathrm{i}}|}=|t|^2\frac{k_2}{k_1}$$

在 x 轴上任取两点 x_1、x_2. 由于定态条件, x_1、x_2 之间粒子的总概率不变, 根据粒子概率守恒 ($V(x)$ 是实函数), x_1、x_2 两点的概率流密度相等 ($j_1=j_2$). 可见对于一维定态问题, 概率流密度处处相等. 现在取 $x_1=-\infty$, $x_2=\infty$. 由式 (2.225), $x=-\infty$ 处粒子流密度为

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

由式 (2.226), $x=\infty$ 处粒子流密度为

$$j_{\infty}=\frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}\left[\psi^*(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi(x)-\mathrm{c.c.}\right]\Bigg|_{x=\infty}=j_{\mathrm{t}}=|t|^2\frac{k_2}{k_1}j_{\mathrm{i}}=Tj_{\mathrm{i}}$$

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

2.55　对于相同能量的粒子，从势垒左边入射与从右边入射，其反射系数、透射系数均相同

题 2.55　同题 2.54 所示的一维势垒，其势函数为 $V(x)$. 试证对于相同能量的粒子，从势垒左边入射与从右边入射，其反射系数、透射系数均相同.

解答　粒子从势垒左边入射，其波函数 ψ_{L} 的渐近行为如下给出：

$$\psi_{\mathrm{L}}(x)=\begin{cases}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1x}+r_1\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1x}, & x\to-\infty\\ t_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_2x}, & x\to\infty\end{cases}\tag{2.227}$$

其中，$k_1=\sqrt{2mE}/\hbar$，$k_2=\sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar$. 反射系数、透射系数分别为 $R_1=|r_1|^2$、$T_1=|t_1|^2\dfrac{k_2}{k_1}$. 题 2.54 给出 $R_1+T_1=1$.

现设粒子从势垒右边入射，其波函数 ψ_{R} 的渐近行为如下给出：

$$\psi_{\mathrm{R}}(x)=\begin{cases}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_2x}+r_2\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_2x}, & x\to\infty\\ t_2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1x}, & x\to-\infty\end{cases}\tag{2.228}$$

反射系数、透射系数分别为 $R_2=|r_2|^2$、$T_2=|t_2|^2\dfrac{k_1}{k_2}$. 同样按照题 2.54，$R_2+T_2=1$.

波函数 ψ_{L}、ψ_{R} 均满足定态 Schrödinger 方程

$$\psi''+\frac{2m}{\hbar^2}[E-V(x)]\psi=0\tag{2.229}$$

对上式取复数共轭，得

$$\psi^{*\prime\prime}+\frac{2m}{\hbar^2}[E-V(x)]\psi^*=0\tag{2.230}$$

由上式可知，若 ψ_{L} 是定态 Schrödinger 方程的解，则 ψ_{L}^* 也是相同能量的定态 Schrödinger 方程的解. 因而它们的如下线性组合：

$$\psi=\frac{1}{t_1^*}\psi_{\mathrm{L}}^*-\frac{r_1^*}{t_1^*}\psi_{\mathrm{L}}$$

也是同样能量的定态 Schrödinger 方程的解. 而

$$\psi=\frac{1}{t_1^*}\psi_{\mathrm{L}}^*-\frac{r_1^*}{t_1^*}\psi_{\mathrm{L}}=\begin{cases}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_2x}-\dfrac{r_1^*t_1}{t_1^*}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_2x}, & x\to\infty\\ \dfrac{1-r_1^*r_1}{t_1^*}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1x}, & x\to-\infty\end{cases}\tag{2.231}$$

与 ψ_{R} 的渐近行为完全相同. 而一维定态问题简并度最多为 2，可知 $\psi=\psi_{\mathrm{R}}$. 比较 (2.228)、(2.231) 两式即得

$$t_2=\frac{1-r_1^*r_1}{t_1^*}=\frac{1-|r_1|^2}{t_1^*}=\frac{t_1^*t_1}{t_1^*}\frac{k_2}{k_1}=t_1\frac{k_2}{k_1}$$

即有 $t_2=t_1\dfrac{k_2}{k_1}$. 因而得粒子从势垒右边入射的透射系数为

$$T_2=|t_2|^2\frac{k_1}{k_2}=|t_1|^2\left(\frac{k_2}{k_1}\right)^2\frac{k_1}{k_2}=|t_1|^2\frac{k_2}{k_1}=T_1$$

即粒子从势垒右边入射的透射系数等于从势垒左边入射的透射系数. 再由 $R_1+T_1=1$, $R_2+T_2=1$, 得 $R_1=R_2$. 即得所证.

2.56 势阶反射比率

题 2.56 用量子力学的观点讨论, 一质量为 m 的粒子束沿正 x 方向以能量 E 向 $x=0$ 处的势阶运动. 当 $x<0$ 时, 该势为 0, $x>0$ 时势为 $\dfrac{3E}{4}$. 问在 x 处被反射的粒子比率有多大?

解答 Schrödinger 方程为

$$\psi''+k^2\psi=0,\qquad x\leqslant 0$$
$$\psi''+\left(\frac{k}{2}\right)^2\psi=0,\qquad x>0$$

式中, $k=\sqrt{2mE}/\hbar$, 合乎题意的解为

$$\psi=\begin{cases}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+r\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}, & x\leqslant 0\\ t\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx/2}, & x>0\end{cases}$$

由波函数在 $x=0$ 处的连接条件, 有

$$1+r=t \tag{2.232}$$
$$k(1-r)=\frac{k}{2}t \tag{2.233}$$

所以 $r=\dfrac{1}{3}$, 粒子被反射的比率为 $R=|r|^2=\dfrac{1}{9}$.

2.57 δ-势垒的透射

题 2.57 考虑一个近似由平面波描述的粒子束沿 x 轴从左入射到势 $V(x)=\gamma\delta(x)$ 上, $\gamma>0$, $\delta(x)$ 是 Dirac δ-函数.

(1) 给出 $x<0$ 处波函数的形式;

(2) 给出 $x>0$ 时波函数的形式;

(3) 给出波函数在两个区间之间的边界条件;

(4) 计算透射概率.

解答　设粒子质量为 μ，在 x 表象的定态 Schrödinger 方程为

$$\left[\frac{p^2}{2\mu}+\gamma\delta(x)\right]\psi(x)=E\psi(x) \tag{2.234}$$

(1) 在 $x<0$ 处有入射波 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$ 和反射波 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$，所以波函数可表示为

$$\psi(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+r\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx},\quad x<0 \tag{2.235}$$

(2) 在 $x>0$ 时，只有透射波 $S\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$，所以

$$\psi(x)=t\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \tag{2.236}$$

(3) 将式 (2.234)两边对包含 $x=0$ 点的小区间 $[-\varepsilon,\varepsilon]$ 积分，令 $\varepsilon\to 0$ 取极限得

$$\psi'(0^+)-\psi'(0^-)=\frac{2m\gamma}{\hbar^2}\psi(0) \tag{2.237}$$

波函数在 $x=0$ 连续

$$\psi(0^+)=\psi(0^-) \tag{2.238}$$

(4) 由 (2.235)、(2.236)、(2.237)和 (2.238)四式，可得

$$1+r=t \tag{2.239}$$

$$\mathrm{i}kt-\mathrm{i}k(1-r)=\frac{2m\gamma}{\hbar^2}t \tag{2.240}$$

解得

$$t=\left(1+\frac{\mathrm{i}m\gamma}{\hbar^2k}\right)^{-1} \tag{2.241}$$

透射系数为

$$T=|t|^2=\left(1+\frac{m^2\gamma^2}{\hbar^4k^2}\right)^{-1}=\left(1+\frac{m\gamma^2}{2E\hbar^2}\right)^{-1} \tag{2.242}$$

说明　关于 δ-势与概率流守恒及波函数导数连续问题的分析，应注意由 δ-函数[①]势模型和 δ-函数积分而来的此公式蕴含两条先天性的约束[②]：

(i) δ-函数定义要求波函数在奇点 $x=0$ 处连续，不能有奇性，这才可以写式 (2.238)；

(ii) δ-函数势本身不吸收 (不放出) 粒子.

比如，如果是有吸收的一维散射定态，问题就不再能用简单而形式的 δ-函数势模型和上面公式描述. 这时出现两侧波函数不连续、入射流与吸收平衡、共振现象等问题，超出 δ-函数势的两条约束.

① 附带指出，作为线性泛函的 δ- 函数，其乘积函数 $f(x)$ 在 δ- 函数奇点处必须连续. 有时见到下面推广的 δ- 函数定义：

$$\int_a^b \mathrm{d}x f(x)\delta(x)=\begin{cases}0, & ab>0\\ \dfrac{1}{2}f(0), & ab=0\\ f(0), & ab<0\end{cases}$$

这种定义以及表达式 $\int_a^b \mathrm{d}x f(x)\delta(x)[f(0^-)+f(0^+)]/2, \theta(x)\delta(x)=\delta(x)/2$ 都是有问题的. 详见 S.M.Dutra,*Cavity Quantum Electrodynamics*, John Wiley Sons,Inc.,2001,Appendix F,P.333.

② 参见，张永德，量子菜根谭——量子理论专题分析，北京：清华大学出版社，第 3 版，2016 年，§13，P.145-146.

2.58　$V(x)=-V_0\,\mathrm{sech}^2x$ 的 S 矩阵

题 2.58　一维 Schrödinger 方程为

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial x^2}-2\mathrm{sech}^2x\right]\psi=\varepsilon\psi,\quad \hbar=1,\quad m=\frac{1}{2}$$

(1) 证明只要选取合适的 c，$\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}(\tanh x+c)$ 是方程的一个解. 计算这个问题的 S 矩阵 (反射和透射系数)；

(2) 波函数 $\mathrm{sech}x$ 恰好满足方程，计算相应束缚态的能量. 简单论证这个态必是基态；

(3) 扼要说明如果你事先不知道基态波函数的具体形式，如何估计基态能量.

解答　(1) 把所给形式的解代入 Schrödinger 方程，不难得出，当 $c=-\mathrm{i}k$ 时

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}(\tanh x+c)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}(\tanh x-\mathrm{i}k)$$

是方程的一个解，相应的能量本征值为 $\varepsilon=k^2$.

$$x\to\infty\text{时 }\psi=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}(1-\mathrm{i}k)$$
$$x\to-\infty\text{时 }\psi=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}(-1-\mathrm{i}k)$$

反射系数 $R=0$，透射系数 $T=1$. S 矩阵为

$$\begin{pmatrix}0 & -\dfrac{1-\mathrm{i}k}{1+\mathrm{i}k}\\ -\dfrac{1-\mathrm{i}k}{1+\mathrm{i}k} & 0\end{pmatrix}$$

(2) $\varepsilon=3$. 由于 $\mathrm{sech}x$ 为在全空间无节点的束缚态，故必为基态.

(3) 选取一个无节点的带参数的束缚态偶函数，用变分法得出基态能量的近似值.

2.59　中子束在平板上的反射

题 2.59　一束单一能量 E 的非相对论中子打到一个厚度为 t 的平板平面上. 在这个平板中，中子在一吸引的均匀势阱中运动，势阱深为 V. 中子束与平板的法线夹角为 θ，见图 2.22.

(1) 如果 $t\to\infty$，有多少中子被反射?

(2) 如果 V 势是排斥势，且 $V=E$，有多少中子被反射 (令 t 是有限的)?

解答　(1) 平板外 ($x<0$) 的波函数为

$$\psi_{\mathrm{in}}(x,y,t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{r}-\mathrm{i}\omega t}$$
$$\psi_{\mathrm{re}}(x,y,t)=R\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}_0'\cdot\boldsymbol{r}-\mathrm{i}\omega t}$$

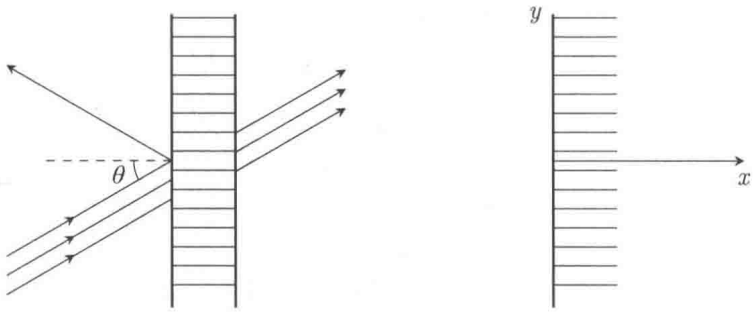


图 2.22　中子束在平板上的反射和透射 (1)

在 $x<0$ 处，波函数为

$$\psi_1(x,y)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0\cos\theta\cdot x+\mathrm{i}k_0\sin\theta\cdot y}+R\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_0\cos\theta\cdot z+\mathrm{i}k_0\sin\theta\cdot y}$$

在 $x>0$ 处 Schrödinger 方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi-V\psi=E\psi \tag{2.243}$$

其解为

$$\psi_2=T\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_x x+\mathrm{i}k_y y}$$

代入式 (2.243)，得

$$k_x^2+k_y^2=\frac{2m(E+V)}{\hbar^2} \tag{2.244}$$

在 $x=0$ 处，有边界条件

$$\psi_1(0,y)=\psi_2(0,y) \tag{2.245}$$

$$\frac{\partial\psi_1(0,y)}{\partial x}=\frac{\partial\psi_2(0,y)}{\partial x} \tag{2.246}$$

由此得

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0\cdot\sin\theta\cdot y}+R\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0\sin\theta\cdot y}=T\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_{y'}y} \tag{2.247}$$

$$\mathrm{i}k_0\cos\theta\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0\sin\theta\cdot y}-R^{\mathrm{i}k_0\cos\theta}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0\sin\theta\cdot y}=T\mathrm{i}k_x\cdot\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_{y'}y} \tag{2.248}$$

且有

$$k_y=k_0\sin\theta$$

从而有

$$1+R=T$$

$$\mathrm{i}k_0(1-R)\cos\theta=T\cdot\mathrm{i}k_x$$

也就是

$$1+R=T$$

$$Tk_x = k_0(1-R)\cos\theta$$

由上两式得

$$R = \frac{k_0\cos\theta - k_x}{k_0\cos\theta + k_x}$$

其中

$$k_x = \sqrt{\frac{2m(E+V)}{\hbar^2} - k_0^2\sin^2\theta}, \quad k_0 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

反射回来的概率为

$$P = |R|^2 = \left|\frac{k_0\cos\theta - k_x}{k_0\cos\theta + k_x}\right|^2$$

(2) **解法一**　在 $x<0$ 时波函数还是第 (1) 小题中的形式. 在 $0<x<t$ 时 Schrödinger 方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = 0$$

若 ψ 取这样的形式: $\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'y}\cdot\mathrm{e}^{kx}$, 有

$$-k'^2 + k^2 = 0, \qquad k = \pm k'$$

所以 $0<x<t$ 的波函数为

$$\psi_2(x,y) = (a\mathrm{e}^{k'x} + b\mathrm{e}^{-k'x})\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'y}$$

总起来有

$$\begin{aligned}
&x<0, \quad \phi_1(x) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_x x} + r\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_x x}\\
&0<x<t, \quad \phi_2(x) = a\mathrm{e}^{k'x} + b\mathrm{e}^{-k'x}\\
&x>t, \quad \phi_3(x) = c\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_x x}
\end{aligned}$$

其中

$$k_x = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\cos\theta, \quad k' = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\cdot\sin\theta$$

这里只写 x 分量. y 分量均为 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_y\cdot y}$,

$$k_y = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\cdot\sin\theta$$

所有边界条件为

$$\begin{cases}\phi_1(0) = \phi_2(0)\\ \dfrac{\mathrm{d}\phi_1(0)}{\mathrm{d}x} = \dfrac{\mathrm{d}\phi_2(0)}{\mathrm{d}x}\end{cases}, \quad \begin{cases}\phi_2(t) = \phi_3(t)\\ \dfrac{\mathrm{d}\phi_2(t)}{\mathrm{d}x} = \dfrac{\mathrm{d}\phi_3(t)}{\mathrm{d}x}\end{cases}$$

由此得

$$\begin{cases} 1+r=a+b \\ \mathrm{i}k_x(1-r)=k'(a-b) \\ c\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_x t}=a\mathrm{e}^{k't}+b\mathrm{e}^{-k't} \\ \mathrm{i}k_x\cdot c\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_x t}=k'a\mathrm{e}^{k't}-k'b\mathrm{e}^{-k't} \end{cases}$$

解得

$$r=\frac{\mathrm{e}^{2k't}-1}{1-\beta^2\mathrm{e}^{2k't}},\quad \beta=\frac{k'-\mathrm{i}k_x}{k'+\mathrm{i}k_x}$$

$$|R|^2=|r|^2=\frac{\mathrm{e}^{2k't}+\mathrm{e}^{-2k't}-2}{\mathrm{e}^{-2k't}+c^{2k't}-2\cos 4\theta}$$

解法二　用无限个振幅叠加的办法可以求解此题，这与光学中 Fabry-Perot 干涉仪的情况类似.

只考虑 x 分量，以 T_{12}，R_{12} 分别表示波从介质 1 到介质 2 的振幅透射系数及折射系数. T_{21}，R_{21} 分别表示波从介质 2 到介质 1 的振幅透射系数及折射系数. 设入射波振幅为 1，见图 2.23. 穿过介质 2 出来的波振幅为

$$\begin{aligned} T &= T_{12}\mathrm{e}^{-\delta}\cdot T_{21}+T_{12}\mathrm{e}^{-\delta}\cdot R_{21}\mathrm{e}^{-2\delta}R_{21}\cdot T_{21}+T_{12}\mathrm{e}^{-\delta}\cdot\left(R_{21}\mathrm{e}^{-2\delta}R_{21}\right)^2\cdot T_{21}+\cdots \\ &= T_{12}\mathrm{e}^{-\delta}T_{21}[1+R_{21}^2\mathrm{e}^{-2\delta}+\left(R_{21}^2\mathrm{e}^{-2\delta}\right)^2+\cdots]=T_{12}T_{21}\mathrm{e}^{-\delta}\frac{1}{1-R_{21}^2\mathrm{e}^{-2\delta}} \end{aligned}$$

其中，$\mathrm{e}^{-\delta}$ 是波在介质 2 中从一界面到另一界面的衰减系数.

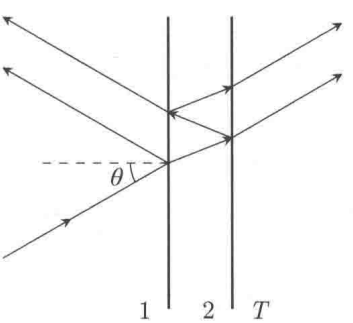


图 2.23　中子束在平板上的反射和透射 (2)

$$\delta=k't,\quad k'=\sqrt{2mE(1-\cos^2\theta)}/\hbar=\sqrt{2mE}\sin\theta/\hbar$$

可以利用第 (1) 小题的结果

$$R_{12}=\frac{k_{1x}-k_{2x}}{k_{1x}+k_{2x}},\quad T_{12}=1+R_{12}=2\frac{k_1}{k_{1x}+k_{2x}}$$

但其中

$$k_{1x}=\sqrt{2mE}\cos\theta/\hbar$$

$$k_{2x} = \mathrm{i}k' = \mathrm{i}\sqrt{2mE}\sin\theta/\hbar$$

于是

$$T_{12} = \frac{2k_{x1}}{k_{x1}+k_{x2}} = \frac{2\cos\theta}{\cos\theta+\mathrm{i}\sin\theta} = 2\cos\theta\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta} \tag{2.249}$$

$$T_{21} = \frac{2k_{x2}}{k_{x1}+k_{x2}} = \frac{2\sin\theta}{\cos\theta+\mathrm{i}\sin\theta} = 2\mathrm{i}\sin\theta\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta} \tag{2.250}$$

$$R_{21} = \frac{k_{2x}-k_{1x}}{k_{1x}+k_{2x}} = \frac{\mathrm{i}\sin\theta-\cos\theta}{\mathrm{i}\sin\theta+\cos\theta} = \mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\theta} \tag{2.251}$$

所以

$$\begin{aligned} T &= T_{12}T_{21}\mathrm{e}^{-\delta}\frac{1}{1-R_{21}^2\mathrm{e}^{-2\delta}} \\ &= \frac{4\mathrm{i}\cos\theta\sin\theta\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\theta}\cdot\mathrm{e}^{-k't}}{1-\mathrm{e}^{-4\mathrm{i}\theta}\mathrm{e}^{-2k't}} \\ &= \frac{2\mathrm{i}\sin 2\theta\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\theta}\mathrm{e}^{-k't}}{1-\mathrm{e}^{-4\mathrm{i}\theta}\mathrm{e}^{-2k't}} \end{aligned}$$

透射率为

$$\begin{aligned} |T|^2 &= \frac{4\sin^2 2\theta\mathrm{e}^{-2k't}}{(1-\mathrm{e}^{-2k't}\cos 4\theta)^2+(\mathrm{e}^{-2k't}\sin 4\theta)^2} \\ &= \frac{4\sin^2 2\theta\mathrm{e}^{-2k't}}{1+\mathrm{e}^{-4k't}-2\mathrm{e}^{-2k't}\cos 4\theta} \\ &= \frac{4\sin^2 2\theta}{\mathrm{e}^{2k't}+\mathrm{e}^{-2k't}-2\cos 4\theta} \end{aligned}$$

反射率为

$$\begin{aligned} 1-|T|^2 &= 1-\frac{4\sin^2 2\theta}{\mathrm{e}^{2k't}+\mathrm{e}^{-2k't}-2\cos 4\theta} \\ &= \frac{\mathrm{e}^{2k't}+\mathrm{e}^{-2k't}-2}{\mathrm{e}^{2k't}+\mathrm{e}^{-2k't}-2\cos 4\theta} \end{aligned}$$

其中，$k' = \sqrt{2mE}\sin\theta/\hbar$.

2.60　一维常数 (虚) 势的吸收系数

题 2.60　求在一维常数虚势 $-\mathrm{i}V(V \ll E)$ 中运动粒子的波函数. 计算概率流密度并证明虚势代表粒子的吸收，求相应的吸收系数.

解答　由 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \left(\frac{p^2}{2m}-\mathrm{i}V\right)\psi$$

设 $\psi=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$，则有

$$k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}\left(1+\mathrm{i}\frac{V}{E}\right)$$

由于 $V\ll E$，所以

$$k\approx\pm\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\left(1+\mathrm{i}\frac{V}{2E}\right)$$

所以有

$$\psi_{\pm}(x,t)=\exp\left[\mp\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\frac{V}{2E}x\right]\cdot\exp\left[\pm\mathrm{i}\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}x\right]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar}$$

式中，ψ_+ 和 ψ_- 分别对应于指数衰减的右行波和左行波. 利用概率流密度公式

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

对于 ψ_+ 和 ψ_-，分别算得

$$j_{\pm}=\pm\frac{\hbar}{m}\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\exp\left\{\mp\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\frac{V}{E}x\right\}$$

这显然是两个分别沿着各自传播方向呈指数衰减的流. 而吸收系数为

$$\alpha=\left|-\frac{1}{j}\frac{\mathrm{d}j}{\mathrm{d}x}\right|=\left|-\frac{\mathrm{d}\ln j}{\mathrm{d}x}\right|=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\frac{V}{E}$$

由此可见虚势意味着吸收.

2.61　Galileo 变换下 Schrödinger 方程的解

题 2.61　设惯性系 K' 以均匀速度 v 相对于惯性参考系 K(不妨设沿 x 轴方向) 运动 (见图 2.24)，空间中任意一点在两个参考系中的坐标满足下列关系：

$$x=x'+vt',\quad y=y',\quad z=z',\quad t=t'$$

势能在两个参考系中的表达式满足下列关系：

$$V'(x',t')=V'(x-vt,t)=V(x,t)$$

(1) 令有确定波长 λ 的一维自由粒子含时 Schrödinger 方程的解 $\psi(x,t)$，作为某观察者 o 在坐标为 (x,t) 的参考系中对该粒子的描述. 现在考虑观察者 o' 由坐标 (x',t') 所得的波函数 $\psi'(x',t')$ 所描述的同一粒子，其中 (x,t) 与 (x',t') 由 Galileo 变换相联系. $\psi(x,t)$ 与 $\psi'(x',t')$ 是否描述同样波长的波?

(2) 试证明 Schrödinger 方程在 Galileo 变换下的不变性. 证明 Schrödinger 方程在 K' 参考系中表为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t'}\psi'=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x'^2}+V'\right)\psi'$$

在 K 参考系中表为

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

其中

$$\psi(x,t)=\exp\left[\mathrm{i}\left(\frac{mv}{\hbar}x-\frac{mv^2}{2\hbar}t\right)\right]\psi'(x-vt,t)$$

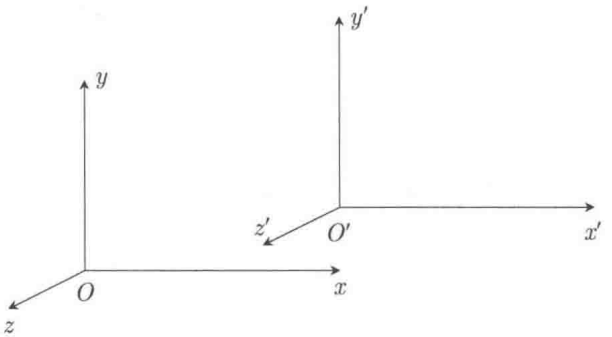


图 2.24　惯性系 K 与 K'

解答　(1) 一维自由粒子含时 Schrödinger 方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi'$$

其确定波长的解为

$$\psi_\lambda(x,t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)}$$

其中，$\lambda=2\pi\hbar/p=2\pi/k$，$\omega=\hbar^2k^2/2m$. 在两个相互运动的参考系中，$p$ 不同，因而波长 λ 也不同.

(2) **证明**　K' 参考系中 Schrödinger 方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t'}\psi'(x',t')=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x'^2}+V'(x',t')\right]\psi'(x',t')$$

根据 Galileo 变换

$$x'=x-vt,\quad t'=t,\qquad \frac{\partial}{\partial x'}=\frac{\partial}{\partial x},\quad \frac{\partial}{\partial t'}=\frac{\partial}{\partial t}+v\frac{\partial}{\partial x}$$

这样

$$\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t}+v\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi'(x-vt,t)=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V'(x-vt,t)\right]\psi'(x-vt,t)$$

也就是

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi'(x-vt,t)=\left[\frac{1}{2m}\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}+mv\right)^2-\frac{1}{2}mv^2+V'(x-vt,t)\right]\psi'(x-vt,t)$$

在上式两边左乘 $U_1=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{mv}{\hbar}x+\mathrm{i}\frac{mv^2}{2\hbar}t}$ 得

$$\begin{aligned}&\mathrm{i}\hbar\left[\frac{\partial}{\partial t}U_1\psi'(x-vt,t)-(\frac{\partial U_1}{\partial t}U_1^{\dagger})U_1\psi'(x-vt,t)\right]\\=\ &U_1\left[\frac{1}{2m}\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}+mv\right)^2-\frac{1}{2}mv^2+V'(x-vt,t)\right]U_1^{\dagger}U_1\psi'(x-vt,t)\end{aligned}$$

由于 $U_1pU_1^{\dagger}=p-mv,\quad \mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial U_1}{\partial t}U_1^{\dagger}=\dfrac{1}{2}mv^2$，由上式得

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}U_1\psi'(x-vt,t)=\left[\frac{1}{2m}\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2+V'(x-vt,t)\right]U_1\psi'(x-vt,t)$$

令 K 系波函数与势能函数分别为

$$\psi(x,t)=U_1\psi'(x-vt,t)=U_1\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{vt}{\hbar}p}\psi'(x,t),\quad V(x,t)=V'(x-vt,t)$$

则有

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

2.62　在动量表象中计算粒子对 δ- 势垒的透射概率

题 2.62　在动量表象中计算粒子对 δ-势垒的透射概率 $(E>0)$.

解答　设粒子质量为 μ，在 x 表象的定态 Schrödinger 方程为

$$\left(\frac{p^2}{2\mu}+\gamma\delta(x)\right)\psi(x)=E\psi(x)\tag{2.252}$$

现设

$$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p)\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}p\tag{2.253}$$

式 (2.252) 两边作 Fourier 变换，即得在 p 表象的定态方程为

$$\frac{p^2}{2\mu}\varphi+\frac{\gamma}{\sqrt{2\pi\hbar}}\psi(0)=E\varphi\tag{2.254}$$

或者

$$(p^2-\hbar^2k^2)\varphi(p)+\frac{2\mu\gamma}{\sqrt{2\pi\hbar}}\psi(0)=0\tag{2.255}$$

其中，$k=\sqrt{2\mu E}/\hbar$.

根据 δ-函数的基本公式 $(x-x_0)\delta(x-x_0)=0$，可知式 (2.255) 的通解为

$$\varphi(p)=C_1\delta(p-\hbar k)+C_2\delta(p+\hbar k)-\frac{2m\gamma}{\sqrt{2\pi\hbar}}\frac{\psi(0)}{p^2-\hbar^2k^2}\tag{2.256}$$

其中，C_1、C_2 与 $\psi(0)$ 待定.

将式 (2.256) 代入式 (2.253)，得到 x 表象中的波函数为

$$\psi(x)=\frac{C_1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+\frac{C_2}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}-\frac{2m\gamma}{2\pi\hbar}\psi(0)\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{p^2-\hbar^2k^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}p \tag{2.257}$$

上面表达式中包含一个奇异函数积分，记为

$$I(k)=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{p^2-\hbar^2k^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}p \tag{2.258}$$

该积分的被积函数在 $p=\pm\hbar k$ 处有两个一阶奇点. 若延拓到 p 的复平面积分，相对于极点选取不同的积分路径，就得到不同的积分结果. 积分路径应根据 ψ 所需满足的边界条件选取，但是因为还有 C_1、C_2 两个待定参数，所以积分路径的选取仍然可以有一定的自由度. 我们对积分路径按如下方式选取[①]：

$$I_{\mathrm{r}}(k)=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{(p+\mathrm{i}0^+)^2-\hbar^2k^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}p \tag{2.259}$$

其中，0^+ 表示正的小量. 利用式 (A.20)

$$I_{\mathrm{r}}(k)=\begin{cases}0, & x>0\\ \dfrac{\mathrm{i}\pi}{\hbar k}(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}), & x<0\end{cases} \tag{2.260}$$

式 (2.257) 中的积分现代以 I_{r}，并考虑边界和分区连接点处 ψ 的行为，以进一步确定有关系数. 当 $x>0$ 时，式 (2.260) 右端为 0，代入式 (2.257)，得

$$\sqrt{2\pi\hbar}\psi(x)=C_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+C_2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \tag{2.261}$$

设入射波 $\sim\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$，则在 $x>0$ 区域应该只有透射波，即 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$ 项，而不能存在 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$ 项. 因此

$$C_2=0 \tag{2.262}$$

从而

$$\psi(x)=\frac{C_1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx},\quad x>0 \tag{2.263}$$

当 $x\to0$ 时，式 (2.260) 右端为 0，则由式 (2.257) 得到

$$\psi(0)=(C_1+C_2)/\sqrt{2\pi\hbar}=C_1/\sqrt{2\pi\hbar} \tag{2.264}$$

当 $x<0$ 时，式 (2.257) 中的积分代以式 (2.260) 得

$$\begin{aligned}\psi(x)&=\frac{C_1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}-\frac{m\gamma}{\pi\hbar}\psi(0)\frac{\mathrm{i}\pi}{\hbar k}(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx})\\&=\frac{C_1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\left[\left(1+\frac{\mathrm{i}m\gamma}{\hbar^2k}\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}-\frac{\mathrm{i}m\gamma}{\hbar^2k}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\right]\end{aligned} \tag{2.265}$$

① 可以有别的选取，读者不妨试试.

上式为入射波 ($\sim \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$) 与反射波 ($\sim \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$) 的叠加. 与透射波 (2.263) 比较，即得透射振幅为

$$s=\frac{C_1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\Big/\left[\frac{C_1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\left(1+\frac{\mathrm{i}m\gamma}{\hbar^2k}\right)\right]=\frac{1}{1+\dfrac{\mathrm{i}m\gamma}{\hbar^2k}} \tag{2.266}$$

因而透射系数为

$$|s|^2=\frac{1}{1+\left(m\gamma/\hbar^2k\right)^2} \tag{2.267}$$

结果和题 2.57 坐标表象中的计算结果完全一样.

2.63　计算粒子对双 δ- 势垒的透射概率

题 2.63　粒子以能量 E 入射到一个双 δ-势垒 (图 2.25)，

$$V(x)=\gamma\left[\delta(x)+\delta(x-a)\right]$$

求反射概率和透射概率以及发生完全透射的条件.

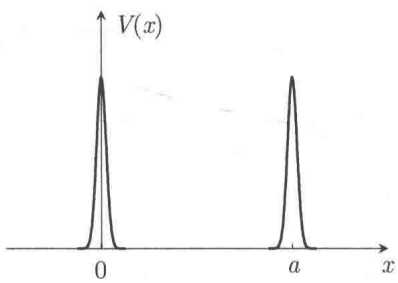


图 2.25　双 δ-势垒的散射

解答　粒子以能量 E 入射，H 为守恒量，从而粒子在运动过程中能量保持恒定，这是定态的特点. 设粒子质量为 m，为作更一般的讨论，记 $x=0$、$x=a$ 处势垒强度分别为 γ_1、γ_2(题给 $\gamma_1=\gamma_2=\gamma$). 该粒子在题给势场中运动的定态 Schrödinger 方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x)+\left[\gamma_1\delta(x)+\gamma_2\delta(x-a)\right]\psi(x)=E\psi(x) \tag{2.268}$$

可令

$$k=\sqrt{2mE}/\hbar,\quad C_{1,2}=2a(m\gamma_{1,2}/\hbar^2) \tag{2.269}$$

$C_{1,2}$ 为无量纲量. 这样能量本征方程 (2.268) 可以写成

$$\psi''+k^2\psi-\left[\frac{C_1}{a}\delta(x)+\frac{C_2}{a}\delta(x-a)\right]\psi=0 \tag{2.270}$$

在 $x=0$ 附近积分，可得 ψ' 跃变条件

$$\psi'(0^+)-\psi'(0^-)=\frac{C_1}{a}\psi(0) \tag{2.271}$$

类似地， $x=a$ 处 ψ' 跃变条件为

$$\psi'(a+0^+)-\psi'(a+0^-)=\frac{C_2}{a}\psi(a) \tag{2.272}$$

可见在 $x=0$ 与 $x=a$ 处， ψ' 均是有限跳跃，因而 ψ 连续.

除了 $x=0$ 与 $x=a$ 两个奇点外，式 (2.270) 化为

$$\psi''+k^2\psi=0 \tag{2.273}$$

其解为 $\mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}kx}$. 如取入射波为 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$，则总波函数可以表示成

$$\psi(x)=\begin{cases}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+R\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}, & x>a\\ A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}, & 0<x<a\\ D\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}, & x>a\end{cases} \tag{2.274}$$

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

下面确定 R、 D. 利用 $x=0$ 处波函数 ψ 的连续性以及 ψ' 跃变条件 (2.271) 得

$$1+R=A+B \tag{2.275}$$

$$\mathrm{i}k(A-B-1+R)=\frac{C_1}{a}(A+B) \tag{2.276}$$

利用 $x=a$ 处波函数 ψ 的连续性以及 ψ' 跃变条件 (2.272) 得

$$A\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}=D\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} \tag{2.277}$$

$$\mathrm{i}k(D-A)\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}+\mathrm{i}kB\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}=\frac{C_2}{a}D\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} \tag{2.278}$$

联立式 (2.275) 和式 (2.276) 得

$$B=(\mathrm{i}\theta_1-1)A-\mathrm{i}\theta_1 \tag{2.279}$$

$$R=\mathrm{i}\theta_1A-(1+\mathrm{i}\theta_1) \tag{2.280}$$

其中，无量纲参数如下定义：

$$\theta_{1,2}=\frac{2ak}{C_{1,2}}=\frac{\hbar^2k}{m\gamma_{1,2}} \tag{2.281}$$

联立式 (2.277) 和式 (2.278) 得

$$D=\frac{\theta_2}{\theta_2+\mathrm{i}}A=\mathrm{i}\theta_2B\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}ak} \tag{2.282}$$

将式 (2.279) 代入式 (2.282)，即可解出 A、 B、 D，再利用式 (2.280)，即可求出 R. 结果如下：

$$\begin{aligned}A&=\frac{\theta_1(\theta_2+\mathrm{i})}{(\theta_1+\mathrm{i})(\theta_2+\mathrm{i})+\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ak}}, & B&=\frac{-\mathrm{i}\theta_1\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ak}}{(\theta_1+\mathrm{i})(\theta_2+\mathrm{i})+\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ak}}\\ R&=\frac{1-\mathrm{i}\theta_2-(1+\mathrm{i}\theta_1)\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ak}}{(\theta_1+\mathrm{i})(\theta_2+\mathrm{i})+\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ak}}, & D&=\frac{\theta_1\theta_2}{(\theta_1+\mathrm{i})(\theta_2+\mathrm{i})+\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ak}}\end{aligned} \tag{2.283}$$

无量纲参数 $\theta_{1,2}$ 的定义见式 (2.281). 而反射概率 $|R|^2$ 与透射概率 $|D|^2$ 分别如下给出:

$$\begin{aligned}
|R|^2 &= \frac{1-\mathrm{i}\theta_2-(1+\mathrm{i}\theta_1)\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ak}}{(\theta_1+\mathrm{i})(\theta_2+\mathrm{i})+\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ak}}\frac{1+\mathrm{i}\theta_2-(1-\mathrm{i}\theta_1)\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}ak}}{(\theta_1-\mathrm{i})(\theta_2-\mathrm{i})+\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}ak}} \\
&= \frac{(2+\theta_1^2+\theta_2^2)-\left[(1+\mathrm{i}\theta_1)(1+\mathrm{i}\theta_2)\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ak}+c.c.\right]}{(\theta_1+\mathrm{i})(\theta_2+\mathrm{i})(\theta_1-\mathrm{i})(\theta_2-\mathrm{i})+1+\left[(\theta_1-\mathrm{i})(\theta_2-\mathrm{i})\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ak}+c.c.\right]} \\
&= \frac{(2+\theta_1^2+\theta_2^2)+2(\theta_1\theta_2-1)\cos 2ak+2(\theta_1+\theta_2)\sin 2ak}{(\theta_1^2+1)(\theta_2^2+1)+1+2(\theta_1\theta_2-1)\cos 2ak+2(\theta_1+\theta_2)\sin 2ak} \qquad (2.284) \\
|D|^2 &= \frac{\theta_1\theta_2}{(\theta_1+\mathrm{i})(\theta_2+\mathrm{i})+\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ak}}\frac{\theta_1\theta_2}{(\theta_1-\mathrm{i})(\theta_2-\mathrm{i})+\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}ak}} \\
&= \frac{\theta_1^2\theta_2^2}{(\theta_1^2+1)(\theta_2^2+1)+1+2(\theta_1\theta_2-1)\cos 2ak+2(\theta_1+\theta_2)\sin 2ak} \qquad (2.285)
\end{aligned}$$

满足 $|R|^2+|D|^2=1$. 对于本题上式中取 $\theta_1=\theta_2=\theta=\hbar^2k/m\gamma$.

完全透射条件为 $R=0$，由式 (2.283) 知此时

$$\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ak}=\frac{1-\mathrm{i}\theta_2}{1+\mathrm{i}\theta_1} \qquad (2.286)$$

上式两边取复数模，可知 $\theta_1^2=\theta_2^2$，因而 $\theta_1=\pm\theta_2$. 这时透射波振幅 D 可以表示成

$$D=\mp\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}ak}$$

显然此时 $|D|^2=1$. 式 (2.286) 意味着对于给定的势，只能有特定能量的粒子可以完全透射. 将式 (2.286) 表示为

$$\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ak}=\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\alpha_\pm} \qquad (2.287)$$

其中，$\theta_1=\theta_2$ 情况取 $\alpha_-=\arctan\theta$，$\theta_1=-\theta_2$ 情况取 $\alpha_-=0$. 式 (2.287) 的 $k>0$ 的解为

$$k=\frac{n\pi-\alpha_\pm}{a},\quad n=1,2,3,\cdots \qquad (2.288)$$

这种粒子能量为

$$E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}=\frac{\hbar^2(n\pi-\alpha_\pm)^2}{2ma^2} \qquad (2.289)$$

说明 1　从式 (2.283) 看透射系数知，除非 $\theta_{1,2}\to 0$(这时 $\gamma_{1,2}\to\infty$)，D 总不为零.

说明 2　如保持 γ_1、γ_2 不变，而令 $a\to 0$，即两个 δ-势垒合二为一，$V(x)=(\gamma_1+\gamma_2)\delta(x)$，这时式 (2.283) 给出透射系数

$$D=\frac{1}{1+\mathrm{i}\left(\dfrac{1}{\theta_1}+\dfrac{1}{\theta_2}\right)}$$

透射概率为

$$|D|^2=\frac{1}{1+\dfrac{m^2(\gamma_1+\gamma_2)^2}{\hbar^4k^2}}$$

这与粒子对于单 δ-势垒的透射问题相应结果一致[①].

说明 3　本题同样可以在动量表象中求解.

2.64　动量表象求解 Dirac 梳对粒子的散射

题 2.64　质量为 m 的粒子束以动量 $p=\hbar k$ 从 $x=-\infty$ 入射，碰到周期性 δ-势垒，

$$V(x)=\gamma\sum_{n=0}^{\infty}\delta(x-na)$$

其中，$a>0$，求发生完全反射的动量值.

解答　(动量表象) 设粒子质量为 μ，在 x 表象的定态 Schrödinger 方程为

$$\left[\frac{p^2}{2\mu}+\gamma\sum_{n=0}^{\infty}\delta(x-na)\right]\psi(x)=E\psi(x) \tag{2.290}$$

可设

$$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p)\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}p \tag{2.291}$$

式 (2.290) 两边作 Fourier 变换，可得如下 p 表象的定态方程：

$$(p^2-\hbar^2k^2)\varphi(p)=-\frac{2\mu\gamma}{\sqrt{2\pi\hbar}}\sum_n\psi(na)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}pna/\hbar} \tag{2.292}$$

其中，$k=\sqrt{2\mu E}/\hbar$.

根据 δ-函数的基本公式 $(x-x_0)\delta(x-x_0)=0$，可知式 (2.292) 的通解为

$$\varphi(p)=\sqrt{2\pi\hbar}A\delta(p-\hbar k)+\sqrt{2\pi\hbar}B\delta(p+\hbar k)-\frac{2m\gamma}{\sqrt{2\pi\hbar}}\sum_n\frac{\psi(na)}{(p^2-\hbar^2k^2)}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}pna/\hbar} \tag{2.293}$$

其中，A、B 与 $\psi(na)$ 为常数.

将式 (2.293) 代入式 (2.291)，得到 x 表象中的波函数

$$\psi(x)=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}-\frac{m\gamma}{\pi\hbar}\sum_n\psi(na)\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{p^2-\hbar^2k^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p(x-na)/\hbar}\mathrm{d}p \tag{2.294}$$

上面表达式中包含的各积分，记为

$$I(n,k)=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{p^2-\hbar^2k^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p(x-na)/\hbar}\mathrm{d}p \tag{2.295}$$

这些积分的被积函数在 $p=\pm\hbar k$ 处有两个一阶奇点. 若延拓到 p 的复平面积分，相对于极点选取不同的积分路径，就得到不同的积分结果. 积分路径应根据 ψ 所需满足的

① 见题 2.57、题 2.62.

边界条件选取，但是因为还有 A、B 两个待定参数，所以积分路径的选取仍然可以有一定的自由度. 对积分路径按如下方式选取：

$$I_a(n,k)=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{(p-\mathrm{i}0^+)^2-\hbar^2k^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p(x-na)/\hbar}\mathrm{d}p \tag{2.296}$$

其中 0^+ 表示正的小量. 利用式 (A.20)

$$I_a(n,k)=\begin{cases}\dfrac{\mathrm{i}\pi}{\hbar k}[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(x-na)}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x-na)}], & x>na\\ 0, & x<na\end{cases} \tag{2.297}$$

式 (2.294) 中的各积分现代以 I_a. 当 $x\to+\infty$(即 $x>na$，$n=0,1,2,\cdots$) 时，将式 (2.297) 代入式 (2.294)，得

$$\psi(x)\overset{x\to\infty}{\longrightarrow}\left[A-\mathrm{i}\frac{m\gamma}{\hbar^2k}\sum_n\psi(na)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kna}\right]\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+\left[B+\mathrm{i}\frac{m\gamma}{\hbar^2k}\sum_n\psi(na)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kna}\right]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \tag{2.298}$$

设入射波 $\sim\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$，则在 $x\to+\infty$ 区域应该只有透射波，即 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$ 项，而不能存在 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$ 项. 因此由式 (2.298)

$$B=-\mathrm{i}\frac{m\gamma}{\hbar^2k}\sum_n\psi(na)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kna} \tag{2.299}$$

当 $x-na<0$(即 $x<na$，$n=0,\ 1,\ 2,\ \cdots$) 时，式 (2.294) 中的积分代以式 (2.297)[都等于零] 得

$$\psi(x)=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \tag{2.300}$$

其中第一项为入射波，第二项为反射波.

如果出现完全反射，$x\to\infty$ 处透射波振幅应等于 0，即式 (2.298) 中 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$ 项系数为 0，这时

$$A=\mathrm{i}\frac{m\gamma}{\hbar^2k}\sum_n\psi(na)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kna} \tag{2.301}$$

而且反射概率 $|B|^2/|A|^2=1$，也就是 $|B|=|A|$，由式 (2.299) 和式 (2.301) 得

$$\left|\sum_n\psi(na)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kna}\right|=\left|\sum_n\psi(na)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kna}\right| \tag{2.302}$$

式 (2.302) 成立条件是

$$\exp(2\mathrm{i}ka)=1 \tag{2.303}$$

这与题 2.22 所得式 (2.116) 相同.

2.65　受冲力 $\lambda\delta(t)$ 作用的谐振子基态

题 2.65　一个质量为 m 的粒子处于频率为 ω 的一维谐振子势阱的基态上，受到一冲力 $\lambda\delta(t)$，求它仍处于基态的概率.

解答　设粒子的动量为 p，初始时动量为 p_0，所受力

$$F=p\delta(t)=\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t}$$

则粒子的动量是一个阶跃函数

$$p=\lambda\theta(t)+p_0=\begin{cases}p_0+\lambda, & t>0\\ p_0, & t<0\end{cases}$$

动量表象波函数 $\varphi(p_0)\to\varphi(p_0+\lambda)$.

谐振子归一化基态波函数为

$$\psi(x)=\sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$

动量表象波函数为

$$\begin{aligned}\varphi(p) &= \sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}px}{\hbar}}\mathrm{d}x=\sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}}\sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}-\frac{\mathrm{i}px}{\hbar}}\mathrm{d}x\\ &= \sqrt[4]{\frac{1}{\pi m\omega\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{p^2}{2\hbar m\omega}}\end{aligned}$$

在动量表象，初态波函数 $\varphi(p_0)$，末态波函数 $\varphi(p_0+\lambda)$. 粒子仍处于基态的概率为

$$\begin{aligned}P &= |(\varphi(p_0),\varphi(p_0+\lambda))|^2\\ &= \left|\sqrt{\frac{1}{\pi m\omega\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\frac{(p_0+\lambda)^2}{2\hbar m\omega}-\frac{p_0^2}{2\hbar m\omega}}\mathrm{d}p_0\right|^2\\ &= \mathrm{e}^{-\frac{\lambda^2}{2m\omega\hbar}}\end{aligned}$$

说明　也可以在 x 表象中考察此问题，冲击后体系的波函数为

$$\psi_0(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p')\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}(p'+\lambda)x}\mathrm{d}p'=\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\lambda x}\psi_0(x)$$

其中，$\psi_0(x)=\sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$，故粒子仍处于基态的概率为

$$P=\left|\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_0^*(x)\psi(x)\mathrm{d}x\right|^2=\mathrm{e}^{-\frac{\lambda^2}{2m\omega\hbar}}$$

与前面结果相同.

2.66　谐振子势场的突变

题 2.66　质量为 m 的粒子处于谐振子势 $V_1(x)=\frac{1}{2}kx^2(k>0)$ 的基态.

(1) 如弹性系数突然增大一倍，即势场突然变为 $V_2(x)=kx^2(k>0)$，随即测量粒子的能量，求粒子处于 V_2 势场的基态的概率.

(2) 势场由 V_1 突变为 V_2 后，不进行测量，经过一段时间 τ 后，让势场重新恢复成 V_1. 问 τ 取什么值时，粒子状态将周期性地恢复到最初的基态?

解答　(1) 粒子的波函数 $\psi(x,t)$ 随时间的变化应满足 Schrödinger 方程

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

因此当 V 发生突变 (由 V_1 突变为 V_2)，但变化量有限时，$\psi(x,t)$ 仍是 t 的连续函数，亦即 V 突变时 $\psi(x,t)$ 不变.

V_1 场和 V_2 场的基态波函数分别记为 ψ_0 和 ϕ_0，当势场突然由 V_1 变成 V_2 的瞬时，粒子的波函数仍为势场突变前所处的 ψ_0. 在 ψ_0 态测得粒子处于 ϕ_0 态的概率为 $|(\phi_0,\psi_0)|^2$.

将题给的势场突变前后的谐振子势 V_1 以及 V_2 如下用各自的自然频率表示：

$$V_1(x)=\frac{1}{2}kx^2=\frac{1}{2}m\omega_1^2x^2,\quad \omega_1^2=\frac{k}{m} \tag{2.304}$$

$$V_2(x)=kx^2=\frac{1}{2}m\omega_2^2x^2\quad \omega_2^2=\frac{2k}{m} \tag{2.305}$$

因而

$$\omega_2=\sqrt{2}\omega_1 \tag{2.306}$$

谐振子基态波函数可见教材[①]，这样 ψ_0 和 ϕ_0 如下写出：

$$\psi_0(x)=\frac{\sqrt{\alpha}}{\pi^{1/4}}\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2/2},\quad \alpha^2=m\omega_1/\hbar \tag{2.307}$$

$$\phi_0(x)=\frac{\sqrt{\beta}}{\pi^{1/4}}\mathrm{e}^{-\beta^2x^2/2},\quad \beta^2=m\omega_2/\hbar \tag{2.308}$$

这里 ψ_0 和 ϕ_0 均已经归一化. 由于 $\omega_2=\sqrt{2}\omega_1$，上面 β^2 与 α^2 满足

$$\beta^2=\sqrt{2}\alpha^2 \tag{2.309}$$

可计算在 ψ_0 态找到 ϕ_0 的概率幅为

$$\begin{aligned}\langle\phi_0\,|\psi_0\rangle&=\int_{-\infty}^{+\infty}\phi_0^*(x)\psi_0(x)\mathrm{d}x\\&=\sqrt{\frac{\alpha\beta}{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}(\alpha^2+\beta^2)x^2}\mathrm{d}x=\left(\frac{2\alpha\beta}{\alpha^2+\beta^2}\right)^{\frac{1}{2}}\end{aligned} \tag{2.310}$$

这样所求概率为

$$|\langle\phi_0\,|\psi_0\rangle|^2=\frac{2\alpha\beta}{\alpha^2+\beta^2}=\frac{2\beta/\alpha}{1+\beta^2/\alpha^2}$$

① 张永德, 量子力学 (第四版)[M], 北京: 科学出版社, 2017, P.59.

$$= \frac{2^{5/4}}{1+\sqrt{2}} = 0.9852 \tag{2.311}$$

(2) 取势场第一次发生突变 $(V_1 \to V_2)$ 的时刻为 $t=0$，这时波函数为

$$\psi(x,0) = \psi_0(x) \tag{2.312}$$

V_2 势场的第 n 个归一化能量本征态记为 ϕ_n，相应能级为

$$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_2 \tag{2.313}$$

将 ψ_0 用各 ϕ_n 展开，

$$\psi_0(x) = \sum_n C_n\phi_n(x) \tag{2.314}$$

由于 ψ_0 是偶宇称态，而 ϕ_n 的宇称为 $(-1)^n$，上面展开式中只可能出现偶宇称的 ϕ_n.

当 $0<t<\tau$ 时，态根据 Schrödinger 方程按照 V_2 势场的 Hamilton 量演化，因而

$$\psi(x,t) = \sum_n C_n\phi_n(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt/\hbar} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_2 t/2}\sum_n C_n\phi_n(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\omega_2 t} \tag{2.315}$$

按照题意，$\psi(x,\tau)$ 与 ψ_0 为同一个态，或者 $\psi(x,\tau)\sim\psi_0$，这要求

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\omega_2\tau} = 1, \quad n = 0,2,4,\cdots \tag{2.316}$$

亦即

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_2\tau} = \pm 1 \tag{2.317}$$

满足这个条件的 τ 值为

$$\tau = l\frac{\pi}{\omega_2} = l\pi\sqrt{\frac{m}{2k}} \tag{2.318}$$

其中，$l=1,2,3,\cdots$. 若满足此条件，则当 $t=\tau$ 时，势场又由 V_1 变成 V_2 后，粒子即又处于 V_1 势场的基态 ψ_0.

2.67　重力场中粒子的能量

题 2.67　对重力场中微观粒子的任何运动，证明其能量依赖于 m、g 和 h 的形式为 $E = Kmg\left(\dfrac{m^2g}{h^2}\right)^{\alpha}$，确定 α.

解答　粒子的势能为 $V=mgx$，Hamilton 量为

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + mgx$$

作量纲分析：

$$[H] = [E] = \left[\frac{\hbar^2}{mx^2}\right] = [mgx], \quad [x] = \left[\frac{m^2g}{h^2}\right]^{-1/3}$$

所以

$$[E]=\left[Kmg\left(\frac{m^2g}{h^2}\right)^{-1/3}\right]$$

也就是说必定有 $E=Kmg\left(\dfrac{m^2g}{h^2}\right)^{-1/3}$， K 是无量纲常数.

对照题目条件，可知 $\alpha=-1/3$.

2.68　一维 Ising 模型

题 2.68　对一个一维系统电子态，一简单模型的 Hamilton 量为

$$H=\sum_{n=1}^{N}E_0\left|n\right\rangle\left\langle n\right|+\sum_{n=1}^{N}W\left\{\left|n\right\rangle\left\langle n+1\right|+\left|n+1\right\rangle\left\langle n\right|\right\}$$

其中， $|n\rangle$ 是正交归一基， $\langle n|n'\rangle=\delta_{nn'}$； E_0 和 W 是参数. 假定有周期性边界条件使 $|N+j\rangle\equiv|j\rangle$，计算能级和波函数.

解答　体系的正交完备归一基为 $|n\rangle$， $n=1,2,\cdots,N$

$$H=\sum_{n=1}^{N}E_0\left|n\right\rangle\left\langle n\right|+\sum_{n=1}^{N}W\left\{\left|n\right\rangle\left\langle n+1\right|+\left|n+1\right\rangle\left\langle n\right|\right\}$$

也就是

$$H=E_0+W(A+A^+) \tag{2.319}$$

式中， $A\equiv\sum_{n=1}^{N}|n\rangle\langle n+1|$， $A^+\equiv\sum_{n=1}^{N}|n+1\rangle\langle n|$，且有关系式

$$A\left|n\right\rangle=\left|n-1\right\rangle,\qquad A^+\left|n\right\rangle=\left|n+1\right\rangle \tag{2.320}$$

$$AA^+=A^+A=1,\quad \text{或} A^+=A^{-1} \tag{2.321}$$

由式 (2.319) 和式 (2.320) 知道， H, A, A^+ 有共同的本征矢，于是我们仅需求 A^+ 的本征矢和本征值.

$$A_{k'k}=\left\langle k'\right|A\left|k\right\rangle=\delta_{k',k-1}$$

矩阵形式

$$A=\begin{pmatrix}0&1&&&\\0&0&1&&\\\vdots&&\ddots&\ddots&\\0&&&&1\\1&0&\cdots&&0\end{pmatrix}_{N\times N}$$

其本征值为久期方程 $\det(A-\lambda I)=0$ 的根，而

$$A-\lambda I=\begin{pmatrix}-\lambda & 1 & & & \\ 0 & -\lambda & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \\ 0 & & & & 1 \\ 1 & 0 & \cdots & & -\lambda\end{pmatrix}$$

因而 $\det(A-\lambda I)=0$ 可化为

$$\det(A-\lambda I)=(-\lambda)^N+(-1)^{N+1}=(-1)^N[\lambda^N-1]=0$$

它的根是

$$\lambda_i=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_i},\quad \theta_i=\frac{2\pi}{N}j,\quad j=0,1,2,\cdots,N-1$$

于是，可认为 $|E\rangle$ 是 A, A^+ 的共同本征态，并记为 $|E_i\rangle$：

$$A|E_i\rangle=\lambda_i|E_i\rangle,\quad A^+|E_i\rangle=\frac{1}{\lambda_i}|E_i\rangle$$

这样

$$\begin{aligned}H|E_i\rangle &= \left[E_0+W\left(\lambda_i+\frac{1}{\lambda_i}\right)\right]|E_i\rangle \\ &= (E_0+2W\cos\theta_i)|E_i\rangle\end{aligned}$$

故 H 的本征值为

$$E_i=E_0+2W\cos\theta_i,\quad \theta_i=\frac{2\pi}{N}j,\quad j=0,1,2,\cdots,N-1$$

对应的本征函数可从矩阵方程

$$(A-\lambda_j)|E_j\rangle=0$$

求得

$$|E_j\rangle=\frac{1}{\sqrt{N}}\begin{pmatrix}1\\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_j}\\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}2\theta_j}\\ \vdots\\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}(N-1)\theta_j}\end{pmatrix}$$

或者

$$|E_j\rangle=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{n=1}^{N}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(n-1)\theta_j}|n\rangle$$

2.69　关于 Dirac 梳的计算

题 2.69　一个质量为 m 的粒子在一个无限扩展的周期势中运动. 除了在相隔为 a、宽度为 b ($b \ll a$) 的区间内为 V_0 外，其他地方处处为 0. 这里 V_0 是一个大的正势. 可以把势当成 Dirac 函数之和：$V(x)=\sum\limits_{n=-\infty}^{\infty}(V_0 b)\delta(x-na)$. 或把间隔当成有限，然后取极限，从而得到同样的答案.

(1) 什么是波函数适当的边界条件？为什么？设可通过势传播的波的最低能量为 $E_0=\dfrac{\hbar^2 k_0^2}{2m}$(这是 k_0 的定义)；

(2) 给出一个可解出 k_0(即 E_0) 的超越方程；

(3) 给出能量为的波函数在 $0\leqslant x<a$ 的形式 (选择归一化和相因子为 $\psi(x=0)=1$). 在 $x=a$ 和 $x=a+b$ 间波函数如何？

(4) 证明：存在着 E 大于 E_0 的一些范围，其中不存在本征函数. 求第一个这样的能隙开始时的能量精确值.

解答　(1) Schrödinger 方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\sum_{n=-\infty}^{\infty}(V_0 b)\delta(x-ma)\right]\psi(x)=E\psi(x)$$

对这个方程从 $x=a-\varepsilon$ 到 $x=a+\varepsilon$ 积分. 然后令 $\varepsilon\to 0$，可得

$$\psi'(a^+)-\psi'(a^-)=\frac{2mV_0 b}{\hbar^2}\psi(a) \tag{2.322}$$

加上波函数的连续性条件

$$\psi(a^+)-\psi(a^-)=0 \tag{2.323}$$

式 (2.322)和式 (2.323)就是波函数适当的边界条件. 可适用于 $x=na$，n 为任意整数.

(2) 在 $x\neq na$ 处，Schrödinger 方程的两个基本解为

$$u_1(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx},\quad u_2=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$$

相应的能量为

$$E=\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{2.324}$$

可令

$$\psi(x)=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx},\quad 0\leqslant x\leqslant a$$

根据 Bloch 定理，在 $a\leqslant x\leqslant 2a$ 区间

$$\psi(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}\left[A\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x-a)}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(x-a)}\right]$$

代入式 (2.322)和式 (2.323)可得

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}(A+B)=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}$$

$$\mathrm{i}k\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}(A-B)=\mathrm{i}k(A\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}-B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka})+2\Omega(A\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka})$$

式中，$\Omega=\dfrac{mV_0b}{\hbar^2}$；这是关于 A、B 的二元一次线性方程组，有非零解的充要条件为

$$\begin{vmatrix} \mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}-\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} & \mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka} \\ \mathrm{i}k\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}-(\mathrm{i}k+2\Omega)\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} & -\mathrm{i}k\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}+(\mathrm{i}k-2\Omega)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka} \end{vmatrix}=0$$

经过计算化简，可得

$$\cos ka+\frac{\Omega}{k}\sin ka=\cos Ka$$

这是确定 Bloch 波数 K 的式子. 而 k 的允许值限制在下列范围中：

$$\left|\cos ka+\frac{\Omega}{k}\sin ka\right|\leqslant 1$$

也就是

$$|\cos[ka-\arctan\Omega/k]|\leqslant\frac{1}{\sqrt{1+\Omega^2/k^2}} \tag{2.325}$$

满足这个不等式的最小 k 值即为 k_0.

(3) 在 $E=E_0$ 时

$$\psi(x)=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0x}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_0x},\quad 0\leqslant x\leqslant a$$

由 $\psi(x=0)=1$ 得

$$\psi(x)=2\mathrm{i}A\sin k_0x+\mathrm{e}^{-k_0x},\quad 0\leqslant x\leqslant a$$

由边界条件可得

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}=2\mathrm{i}A\sin k_0a+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_0a} \tag{2.326}$$

$$2\mathrm{i}A=\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_0a}}{\sin k_0a} \tag{2.327}$$

所以

$$\psi(x)=(\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_0a})\frac{\sin k_0x}{\sin k_0a}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_0x}$$

$$\psi(a)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}\approx\psi(a+b)$$

$$\psi'(a+b)-\psi'(a)\approx 2\Omega\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka}$$

在 $x\in[a,a+b]$ 时，波函数具有 $\mathrm{e}^{\pm k_1x}$ 的形式，

$$k_1=\sqrt{2m(V_0-E_0)}/\hbar$$

由于 $b\ll a$，所以在此区间中，波函数可视为常数.

(4) 当 $ka=n\pi+\delta$ 时 (δ 是一个小正数)

$$ka=n\pi+\delta$$

式 (2.325)要求

$$\begin{aligned}|\cos[ka-\arctan(\Omega/k)]| &= |\cos[\delta-\arctan(\Omega/k)]| \\ &= \left|\cos\delta\cdot(1+\tan\delta\cdot\Omega/k)/\sqrt{1+\Omega^2/k^2}\right|\end{aligned}$$

其式中

$$|(1+\tan\delta\cdot\Omega/k)\cos\delta|\leqslant 1$$

当 δ 很小时，左边 $\approx 1+\dfrac{\Omega}{k}\delta>1$. 于是，在 $k>\dfrac{n\pi}{a}$ 的某一区间中，不对应着本征函数，而 $ka=n\pi$ 对应着本征值. 所以，第一个能隙的起点为 $ka=\pi$，即 $E=\dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$.

2.70　一个类谐振子能谱

题 2.70　设势场 (见图 2.26)

$$V(x)=V_0\left(\frac{a}{x}-\frac{x}{a}\right)^2,\quad a,x>0$$

求粒子能级与波函数. 证明其能谱形状与谐振子相似.

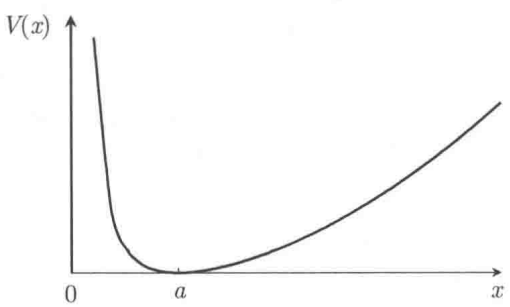


图 2.26　势函数 $V(x)=V_0\left(\dfrac{a}{x}-\dfrac{x}{a}\right)^2$

解答　设粒子质量为 m. 体系的定态 Schrödinger 方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi+V_0\left(\frac{a}{x}-\frac{x}{a}\right)^2\psi=E\psi \tag{2.328}$$

或者

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi+\frac{V_0}{a^2}\left(\frac{a^2}{x}-x\right)^2\psi=E\psi \tag{2.328$'$}$$

经观察，取能量量纲的参数

$$\Lambda=\left(\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{V_0}{a^2}\right)^{1/2}=\frac{\hbar}{a}\sqrt{\frac{V_0}{2m}} \tag{2.329}$$

式 (2.328′) 除以参数 Λ，将方程无量纲化. 我们定义如下无量纲参数和无量纲变量：

$$\epsilon=\frac{E}{\Lambda},\quad b=\sqrt{2mV_0}\frac{a}{\hbar}=\frac{V_0}{\Lambda},\quad y=\sqrt{\frac{V_0}{\Lambda a^2}}x=\frac{\sqrt{b}}{a}x \tag{2.330}$$

函数 $\psi(x)=\varphi(y)$，这样式 (2.328′) 变为

$$-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2}\varphi(y)+\left(\frac{b}{y}-y\right)^2\varphi(y)=\epsilon\varphi(y) \tag{2.331}$$

为了求解上述方程，我们可以先考察在 $y\to 0$、$y\to\infty$ 处波函数的渐近行为，当 $x\to\infty$ 时，方程 (2.331) 简化为

$$-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2}\varphi(y)+y^2\varphi(y)=0 \tag{2.332}$$

可以验证，$y\to\infty$ 时，$\varphi(y)$ 的渐近行为是

$$\varphi(y)\sim \mathrm{e}^{\pm y^2/2} \tag{2.333}$$

考虑到束缚态边界条件，只能取

$$\varphi\propto \mathrm{e}^{-y^2/2},\quad y\to\infty$$

当 $y\to 0$ 时，方程 (2.331) 简化为

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2}\varphi(y)-\frac{b^2}{y^2}\varphi(y)=0 \tag{2.334}$$

或者

$$y^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2}\varphi(y)-b^2\varphi(y)=0$$

对此方程，取 $\varphi(y)\sim y^\lambda$ 形式的解，代入方程得

$$\lambda(\lambda-1)=b^2$$

解得

$$\lambda=\frac{1\pm\sqrt{1+4b^2}}{2} \tag{2.335}$$

束缚态波函数可积条件要求 $\varphi(y)\sim y^\lambda$ 的 $\lambda>-1/2$. 当 $b\geqslant\sqrt{3}/2$ 时，束缚态波函数可积条件要求式 (2.335) 中只能取 “+”. 而当 $0<b<\sqrt{3}/2$ 时，两个 λ 均满足 $\lambda>-1/2$，即均可能给出束缚态解. 而对于束缚定态解，能量 E 是有限的，我们再注意到当 $x\to 0^+$ 时，$V\to+\infty$，故要求 $x\to 0^+$ 时，$\psi(x)\to 0$. 故式 (2.335) 要求 $\lambda>0$，因而 $\lambda<0$ 情况应排除. 总之我们取

$$\lambda=\frac{1+\sqrt{1+4b^2}}{2} \tag{2.335′}$$

通过以上分析，$\varphi(y)$ 在 $y\to 0$、∞ 的渐近行为分别是 $\varphi(y)\propto y^{\lambda}$ 与 $\varphi(y)\propto \mathrm{e}^{-y^2/2}$，这样可设

$$\varphi(y)=y^{\lambda}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}y^2}u(y) \tag{2.336}$$

将式 (2.336) 代入式 (2.331)，因

$$\begin{aligned}
\varphi'(y) &= \left[\lambda y^{\lambda-1}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}y^2}-y^{\lambda+1}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}y^2}\right]u(y)+y^{\lambda}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}y^2}u'(y)\\
\varphi''(y) &= y^{\lambda}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}y^2}u''(y)+2\left[\frac{\lambda}{y}-y\right]y^{\lambda}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}y^2}u'(y)\\
&\quad+\left[\lambda(\lambda-1)y^{\lambda-2}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}y^2}-\lambda y^{\lambda}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}y^2}-(\lambda+1)y^{\lambda}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}y^2}+y^{\lambda+2}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}y^2}\right]u(y)\\
&= y^{\lambda}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}y^2}u''(y)+2\left[\frac{\lambda}{y}-y\right]y^{\lambda}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}y^2}u'(y)+\left[\frac{b^2}{y^2}-(2\lambda+1)+y^2\right]y^{\lambda}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}y^2}u(y)
\end{aligned}$$

式 (2.331) 可化为

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2}u(y)-2\left(y-\frac{\lambda}{y}\right)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}y}u(y)+(\epsilon+2b-2\lambda-1)u(y)=0 \tag{2.337}$$

再令

$$\xi=y^2=\frac{b}{a^2}x^2 \tag{2.338}$$

并记 $u(y)=v(\xi)$. 利用 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}y}=\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\dfrac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}y}=2y\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}$ 以及 $\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2}=2\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}+4\xi\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}$，式 (2.337) 又可化为

$$\xi\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2}v(\xi)+\left(\lambda+\frac{1}{2}-\xi\right)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}v(\xi)-\left(\frac{\lambda}{2}+\frac{1}{4}-\frac{\epsilon+2b}{4}\right)v(\xi)=0 \tag{2.339}$$

此式为合流超几何方程[①]，其形式为

$$\xi\frac{\mathrm{d}^2v}{\mathrm{d}\xi^2}+(\gamma-\xi)\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\xi}-\beta v=0 \tag{2.339'}$$

其中，$\gamma=\lambda+\dfrac{1}{2}$，$\beta=\left(\dfrac{\lambda}{2}+\dfrac{1}{4}-\dfrac{\epsilon+2b}{4}\right)$.

在 $\xi=0$ 的邻域中式 (2.339') 的解析解表示为合流超几何函数 $\mathrm{F}(\beta,\gamma,\xi)$，要得到满足束缚态条件的解，$\mathrm{F}(\beta,\gamma,\xi)$ 须中断为一个多项式. 这要求 β 是一个小于或者等于 0 的整数，即

$$\beta=-n,\quad n=0,1,2,\cdots$$

因此有

$$\frac{\lambda}{2}+\frac{1}{4}-\frac{\epsilon+2b}{4}=-n$$

或者

$$\epsilon=4n+2\lambda+1-2b$$

① 曾谨言, 量子力学 (第四版)(卷 I)[M], 北京: 科学出版社, 2007, 附录五, P.522-523; 王竹溪, 郭敦仁, 特殊函数概论, 北京：北京大学出版社, 2000, 第六章.

其中 ϵ、λ 的定义见式 (2.330)、式 (2.335′). 这样解得能量 E 本征值为

$$E_n=\frac{2\hbar}{a}\sqrt{\frac{2V_0}{m}}\left[n+\frac{1}{2}+\frac{1}{4}\left(\sqrt{\frac{8mV_0a}{\hbar^2}+1}-\sqrt{\frac{8mV_0a}{\hbar^2}}\right)\right] \tag{2.340}$$

其中，$n=0,1,2,\cdots$. 若令

$$\omega=\frac{2\sqrt{2V_0/m}}{a} \tag{2.341}$$

则式 (2.340) 可简写为

$$E_n=\hbar\omega\left[n+\frac{1}{2}+\frac{1}{4}\left(\sqrt{1+\frac{8mV_0a^2}{\hbar^2}}-\sqrt{\frac{8mV_0a^2}{\hbar^2}}\right)\right] \tag{2.342}$$

式 (2.342) 即为粒子的定态能级，它与频率如式 (2.341) 所给 ω 的线性谐振子的能谱相同，只是零点能相应地增加了 $\frac{1}{4}\hbar\omega\left(\sqrt{1+8mV_0a^2/\hbar^2}-\sqrt{8mV_0a^2/\hbar^2}\right)$，与 E_n 相应的定态波函数是

$$\psi_n(x)=c_nx^{\lambda}\mathrm{e}^{-\frac{b}{2a^2}x^2}\mathrm{F}\left(-n,\lambda+\frac{1}{2},\frac{b}{a^2}x^2\right) \tag{2.343}$$

式中，c_n 为归一化常数，而 b、λ 的定义见式 (2.330) 和式 (2.335′).

2.71　氨分子钟的工作原理

题 2.71　氨分子钟作为时间标准和频率标准而受到人们的青睐，本题对其工作原理做简单解释. 氮原子 (N) 是 5 价的，其电子组态为 $1s^22s^22p^3$. 在 2p 轨道上的 3 个电子与 3 个氢原子具有三角锥的几何构型. 氮原子 N 在 3 个氢原子组成的平面两侧来回振动，其势能函数类似于双方势阱. 氢原子平面两边的两个平衡位置对应于两个势谷，氮原子 N 靠隧道效应穿过氢原子平面形成的势垒. 如图 2.27所示，可用双方势阱的简化模型来模拟. 试求解相应氮原子 N 的波函数和能级.

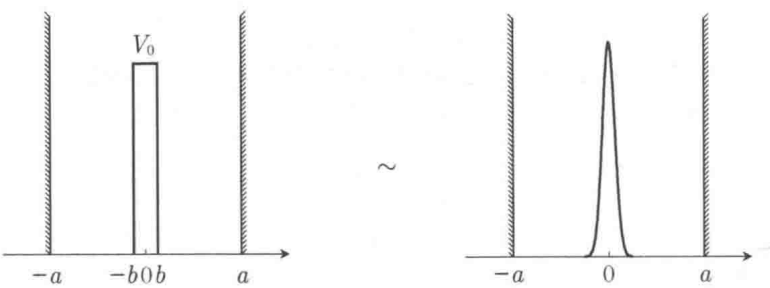


图 2.27　氨分子钟的氮原子穿过氢原子平面形成的势垒模型

解答　相应的定态 Schrödinger 方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi+V(x)\psi=E\psi \tag{2.344}$$

设 $0<E<V_0$

$$\psi(x)=\begin{cases}0, & x<-a\\ A\sin k_1(x+a), & -a<x<-b\\ B\cosh\kappa_2 x, & -b<x<b\\ C\sin k_1(x-a), & b<x<a\\ 0, & x>a\end{cases}\tag{2.345}$$

式中，$k_1=\sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$，$\kappa_2=\sqrt{\dfrac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)}$，并利用了边界条件 $\psi(\pm a)=0$. 再根据波函数 $\psi(x)$ 在 $\pm b$ 点的连续条件，可得氮原子能量 E 满足的超越方程为

$$k_1\cot k_1(b-a)=-\kappa_2\tanh(\kappa_2 b)$$

为了进一步得出氮原子的振荡频率和能级的关系，将双方势阱作如下近似处理：

$$V_0\to\infty,\qquad b\to 0,\qquad b/a\to 1$$

于是双方势阱中的小方势阱等价为 δ-势垒，使得 $\psi(x)$ 在 $\pm b$ 点的连续条件简化为

$$\begin{cases}A\sin k_1(b+a)=C\sin k_1(b-a)\\ A\sin k_1(-b+a)=C\sin k_1(-b-a)\end{cases}$$

得到

$$k_1(b+a)=k_1(b-a)+n\pi,\quad n=1,2,3,\cdots$$

因 $b\to 0$

$$k_1=\frac{n\pi}{2a},\quad E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2},\quad n=1,2,3,\cdots$$

当 $n=1$ 时，$k_1=\dfrac{\pi}{2a}$，由式 (2.345)可得

$$\psi_1(x)=\begin{cases}0, & x<-a\\ A\sin k_1(x+a)=A\cos k_1 x, & -a<x<-b\\ 0, & -b<x<b\\ C\sin k_1(x-a)=-C\cos k_1 x, & b<x<a\\ 0, & x>a\end{cases}$$

显然，$\psi_1(x)$ 具有偶宇称.

当 $n=2$ 时，$k_1=\dfrac{\pi}{a}$，得

$$\psi_2(x)=\begin{cases}0, & x<-a\\ A\sin k_1(x+a)=-A\sin k_1 x, & -a<x<-b\\ 0, & -b<x<b\\ C\sin k_1(x-a)=-A\sin k_1 x, & b<x<a\\ 0, & x>a\end{cases}$$

显然， $\psi_2(x)$ 具有奇宇称.

若在初始时刻 $t=0$，外界有一个微小的激发，使氮原子处于由 $\psi_1(x)$ 和 $\psi_2(x)$ 的叠加态之中

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

由于 $\psi_1(x)$ 和 $\psi_2(x)$ 的宇称相反， $\phi(x,0)$ 只在一个阱内有非零值，而在另一个阱内的值为零. 这表明在 $t=0$ 时刻，氮原子只在一个阱内，而在 $t>0$ 时刻，氮原子开始在两个阱内来回振荡，振荡频率由 t 时刻的波函数 $\phi(x,t)$ 决定

$$\begin{aligned}\phi(x,t) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_1(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_1t}+\psi_2(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_2t}\right]\\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_1t}\left[\psi_1(x)+\psi_2(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E_2-E_1)t}\right]\end{aligned}$$

t 时刻，在阱内找到粒子的概率为

$$\begin{aligned}|\phi(x,t)|^2 &= \frac{1}{2}\left[|\psi_1|^2+|\psi_2|^2+\psi_1^*\psi_2\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E_2-E_1)t}+\psi_1\psi_2^*\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E_2-E_1)t}\right]\\ &= \frac{1}{2}\left[|\psi_1|^2+|\psi_2|^2+2\psi_1\psi_2\cos\left(\frac{E_2-E_1}{\hbar}t\right)\right]\end{aligned}\tag{2.346}$$

式 (2.346)表明，粒子概率密度 $|\phi(x,t)|^2$ 的最大值在两势阱间振荡，即氮原子来回穿透势垒. 若振荡周期用 τ 表示，则

$$\frac{E_2-E_1}{\hbar}\tau=2\pi,\quad \tau=\frac{2\pi\hbar}{E_2-E_1}$$

振荡频率 ν 为

$$\nu=\frac{1}{\tau}=\frac{E_2-E_1}{2\pi\hbar}$$

由于 E_1、 E_2 是量子化的，只由分子内部结构决定， $2\pi\hbar$ 是常数，故 ν 是最稳定的，不会受空气阻力、黏滞性及温度等因素的影响.

2.72　在均匀力场中运动粒子 $\dfrac{\partial\rho}{\partial t}$ 与 $\dfrac{\partial\rho}{\partial p}$ 的关系

题 2.72　质量为 μ 的粒子在均匀力场 $f(x)=-F(F=\text{const.})$ 中运动， $\rho(p,t)$ 为其在动量空间的概率密度，求 $\dfrac{\partial\rho}{\partial t}$ 与 $\dfrac{\partial\rho}{\partial p}$ 的关系.

解答　在动量 p 表象中，粒子的势能为

$$\hat{V}=F\hat{x}=\mathrm{i}\hbar F\frac{\partial}{\partial p}\tag{2.347}$$

动量表象波函数 $\varphi(p,t)$ 满足方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(p,t)=\left(\frac{p^2}{2\mu}+\mathrm{i}\hbar F\frac{\partial}{\partial p}\right)\varphi(p,t)\tag{2.348}$$

式 (2.348) 的 Hermite 共轭为

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi^*(p,t)=\left(\frac{p^2}{2\mu}-\mathrm{i}\hbar F\frac{\partial}{\partial p}\right)\varphi^*(p,t) \tag{2.349}$$

$\varphi^*(p,t)\times$ 式 (2.348) $-\varphi(p,t)\times$ 式 (2.349) 的结果为

$$\frac{\partial}{\partial t}|\varphi|^2=F\frac{\partial}{\partial p}|\varphi|^2 \tag{2.350}$$

因 $\rho(p,t)=|\varphi(p,t)|^2$，即有

$$\frac{\partial\rho(p,t)}{\partial t}=F\frac{\partial\rho(p,t)}{\partial p} \tag{2.351}$$

2.73　粒子入射势垒的反射系数 (1)

题 2.73　设 $V(x)=\dfrac{-V_0}{\exp(x/a)+1}$(图 2.28)，其中 V_0、a 为正的常数量，试求该势垒对于质量为 m、能量为 E 的粒子的反射系数 R.

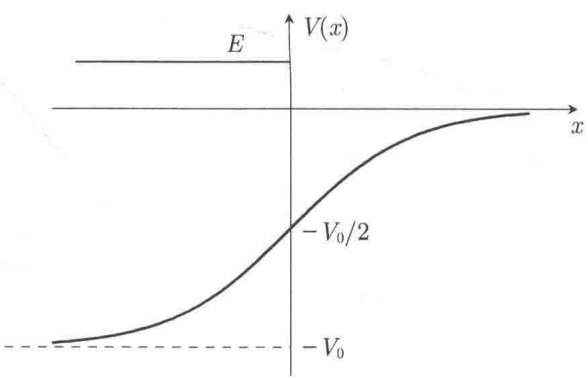


图 2.28　势垒 $V(x)=\dfrac{-V_0}{\exp(x/a)+1}$

解答　题给势场中，粒子散射定态 ψ 满足的 Schrödinger 方程为

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+\frac{V_0}{\mathrm{e}^{x/a}+1}\right)\psi=0 \tag{2.352}$$

散射边条件为

$$\psi=\begin{cases}C_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_2x}+C_2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_2x}, & x\to-\infty\\ \text{const}\times s\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1x}, & x\to+\infty\end{cases} \tag{2.353}$$

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

$$\xi=-\mathrm{e}^{-x/a},\quad -\infty<\xi<0 \tag{2.354}$$

同时令

$$\psi = \xi^{-\mathrm{i}k_2 a} u(\xi) \tag{2.355}$$

其中，$u(\xi)$ 当 $\xi \to 0$(即 $x \to \infty$) 时应趋于一个常数. 将式 (2.355) 代入式 (2.352)，注意 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} = \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\dfrac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}x} = -\dfrac{1}{a}\xi\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}$，通过演算可得

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

另外

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

结果式 (2.352) 化为如下关于 $u(\xi)$ 的方程：

$$\xi(1-\xi)u''-(1-2\mathrm{i}k_2 a)(1-\xi)u'+\left(k_2^2-k_1^2\right)a^2 u=0 \tag{2.356}$$

式 (2.356) 是一个超几何方程[①]

$$\mathrm{H}(\alpha,\beta,\gamma,\xi)=0 \tag{2.357}$$

它的参数如下给出：

$$\begin{cases}
\alpha+\beta+1=1-2\mathrm{i}k_2 a \\
\alpha\beta=(k_1^2-k_2^2)a^2 \\
\gamma=-(1+2\mathrm{i}k_2 a)
\end{cases}$$

或者

$$\begin{cases}
\alpha=\mathrm{i}(k_1-k_2)a \\
\beta=-\mathrm{i}(k_1+k_2)a \\
\gamma=-2\mathrm{i}k_2 a+1
\end{cases}$$

① 王竹溪, 郭敦仁, 特殊函数概论, 北京：北京大学出版社, 2000. 本题有关的超几何函数参考 P.131-133, P.157.

其解为超几何函数

$$u=\mathrm{F}\left[\mathrm{i}(k_1-k_2)a,-\mathrm{i}(k_1+k_2)a,-2\mathrm{i}k_2a+1,\xi\right] \tag{2.358}$$

超几何方程 (2.357) 的另一个解 $\xi^{1-\gamma}\mathrm{F}(\alpha-\gamma+1,\beta-\gamma+1,2-\gamma,\xi)$ 不满足边界条件，弃之.

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

$$\begin{aligned}\mathrm{F}(\alpha,\beta,\gamma;z) &= \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\beta-\alpha)}{\Gamma(\beta)\Gamma(\gamma-\alpha)}\left(-\frac{1}{z}\right)^{\alpha}\mathrm{F}\left(\alpha,\alpha+1-\gamma,\alpha+1-\beta,\frac{1}{z}\right)\\ &\quad+\frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\alpha-\beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\gamma-\beta)}\left(-\frac{1}{z}\right)^{\beta}\mathrm{F}\left(\beta,\beta+1-\gamma,\beta+1-\alpha,\frac{1}{z}\right)\end{aligned} \tag{2.359}$$

[要求 $|\arg(-z)|<\pi$] 以及 $\mathrm{F}(\alpha,\beta,\gamma;0)=1$，式 (2.355)、式 (2.358) 给出当 $\xi\to-\infty$(即 $x\to-\infty$) 时波函数 ψ 的渐近式为

$$\begin{aligned}\psi &\approx \xi^{-\mathrm{i}k_2a}\left[C_1(-\xi)^{\mathrm{i}(k_2-k_1)a}+C_2(-\xi)^{\mathrm{i}(k_2+k_1)a}\right]\\ &= (-\xi)^{-\mathrm{i}k_2a}\left[C_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1x}+C_2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1x}\right]\end{aligned} \tag{2.360}$$

其中

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

这样所求的反射系数 $R=|C_2/C_1|^2$. 利用公式

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

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

$$R=\left(\frac{\sinh[\pi(k_1-k_2)a]}{\sinh[\pi(k_1+k_2)a]}\right)^2 \tag{2.361}$$

由式 (2.361) 可见，当 $E\to0(k_1\to0)$ 时 R 变为 1，即全反射. 由 sinh 函数的性质，R 不存在零点，即不存在全透的情况，只有当 $E\to\infty$ 时，$k_2\approx k_1=\sqrt{2mE}/\hbar$，$k_1-k_2\approx-k_1\dfrac{V_0}{2E}\to0$，代入式 (2.361) 可知此时 R 按下面规律趋于零：

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

也就是在经典力学极限情形下 R 趋于 0.

2.74　粒子入射势垒的反射系数 (2)

题 2.74　设 $V(x)=\dfrac{V_0}{\cosh^2\alpha x}$(图 2.29)，其中 V_0、α 为正的常数量，试求该势垒对于质量为 m、能量为 $E<V_0$ 的粒子的反射系数 R.

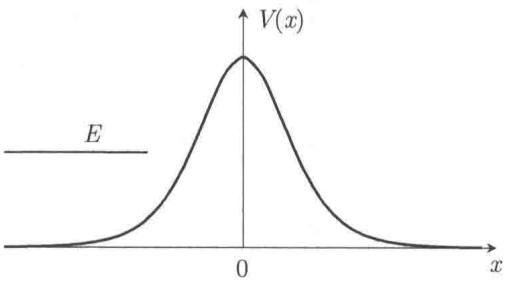


图 2.29　势垒 $V(x)=\dfrac{V_0}{\cosh^2\alpha x}$

解答　题给势场中，粒子散射定态 ψ 满足的 Schrödinger 方程为

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-\frac{V_0}{\cosh^2\alpha x}\right)\psi=0 \tag{2.362}$$

作变量代换 $y=\tanh\alpha x$，并令 $k=\dfrac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}$，$S=\dfrac{1}{2}\left(-1+\sqrt{1-\dfrac{8mU_0}{\alpha^2\hbar^2}}\right)$ 代入式 (2.362)，可得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left[(1-\eta^2)\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}\eta}\right]+\left[S(S+1)+\frac{k^2/\alpha^2}{1-\eta^2}\right]\psi=0$$

可令

$$\psi=(1-\eta^2)^{-\frac{\mathrm{i}k}{2\alpha}}u(\eta)$$

类似题 2.73 的计算，可知 $u(\eta)$ 为超几何函数，结果有

$$\psi=(1-\eta^2)^{-\frac{\mathrm{i}k}{2\alpha}}\mathrm{F}\left(-\frac{\mathrm{i}k}{\alpha}-S,-\frac{\mathrm{i}k}{\alpha}+S+1,-\frac{\mathrm{i}k}{\alpha}+1,\frac{1-\eta}{2}\right)$$

上述解在 $x\to\infty$(即 $\eta\to1$, $1-\eta\approx2\mathrm{e}^{-x}$) 时，$\psi$ 中只含透射波 $\left(\sim\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\right)$，由超几何函数的性质可知，当 $x\to-\infty$ (即 $\eta\to-1$) 时，ψ 的渐近式为

$$\psi\sim C_1\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}+C_2\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$$

其中

$$C_1=\frac{\Gamma\left(\mathrm{i}\frac{k}{\alpha}\right)\Gamma\left(1-\dfrac{\mathrm{i}k}{\alpha}\right)}{\Gamma(-s)\Gamma(1+s)},\quad C_2=\frac{\Gamma\left(-\mathrm{i}\frac{k}{\alpha}\right)\Gamma\left(1-\dfrac{\mathrm{i}k}{\alpha}\right)}{\Gamma\left(-\dfrac{\mathrm{i}k}{\alpha}-s\right)\Gamma\left(-\dfrac{\mathrm{i}k}{\alpha}+1+s\right)} \tag{2.363}$$

由式 (2.363)可得 $R=|C_1/C_2|^2$，而透射系数 $D=1-R$，结果是

$$D=\begin{cases}\dfrac{\sinh^2\dfrac{\pi k}{\alpha}}{\sinh^2\dfrac{\pi k}{\alpha}+\cos^2\left(\dfrac{\pi}{2}\sqrt{1-8mU_0/\hbar^2\alpha^2}\right)}, & \dfrac{8mU_0}{\hbar^2\alpha^2}<1\\ \dfrac{\sinh^2\dfrac{\pi k}{\alpha}}{\sinh^2\dfrac{\pi k}{\alpha}+\cos^2\left(\dfrac{\pi}{2}\sqrt{1-8mU_0/\hbar^2\alpha^2}\right)}, & \dfrac{8mU_0}{\hbar^2\alpha^2}>1\end{cases} \tag{2.364}$$

式 (2.364)中对 $U_0<0$ 也适用，这时粒子不是越过势垒而是越过势阱. 当

$$1+\frac{8m|U_0|}{\hbar^2\alpha^2}=(2n+1)^2$$

时 $D=1$. 越过势阱的粒子无反射.

2.75　入射至半壁无限高势阱粒子的入射波和出射波的相位关系

题 2.75　考虑一维方势阱 (图 2.26)

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

(1) 对 $E<0$，求出束缚在该势中粒子的波函数，写出确定 E 允许值的方程；

(2) 设一具有能量 $E>0$ 的粒子入射到该势上，求出入射波和出射波间的相位关系.

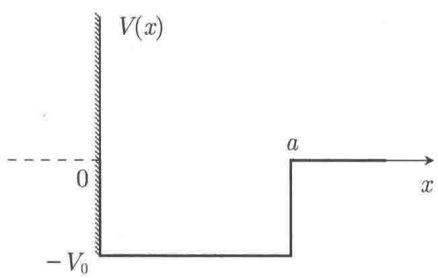


图 2.30　半壁无限高势阱

解答　Schrödinger 方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}-V_0-E\right]\psi(x)=0,\quad 0<x<a \tag{2.365}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}-E\right]\psi(x)=0,\quad x>a \tag{2.366}$$

(1) 对于 $E<0$,

i) 先讨论 $V_0<-E$ 情况. 此时可得分区间波函数形式为

$$\psi(x)=\begin{cases}0, & x<0\\ A\sinh(\kappa x), & 0<x<a\\ B\mathrm{e}^{-\kappa' x}, & x>a\end{cases}$$

其中

$$\kappa=\sqrt{\frac{2m(-V_0-E)}{\hbar^2}},\quad \kappa'=\sqrt{\frac{2m(-E)}{\hbar^2}}$$

由波函数连续条件，得

$$\begin{cases}A\sinh(\kappa a)=B\mathrm{e}^{-\kappa' a}\\ Ak\cosh(ka)=-B\kappa'\mathrm{e}^{-\kappa a}\\ k\mathrm{csch}(\kappa a)=-\kappa'\end{cases}$$

因为当 $x>0$ 时恒有 $\mathrm{csch}x>0$，故上面联立方程无解 (或说只有平凡解).

ii) 当 $V_0>-E$ 时, $\mathrm{i}\kappa\to k, k=\sqrt{2m(V_0+E)/\hbar^2}$，确定能级的方程化作 $k\cot(ka)=-\kappa'$

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

由波函数连续条件及归一化，得

$$A=\left[\frac{2}{\dfrac{1}{k'}\sin^2(ka)+a-\dfrac{1}{2k}\sin(2ka)}\right]^{1/2}$$

$$B=\left[\frac{2}{\dfrac{1}{k'}\sin^2(ka)+a-\dfrac{1}{2k}\sin(2ka)}\right]^{1/2}\mathrm{e}^{k' a}\sin(ka)$$

(2) 能量 $E>0$ 的粒子入射到该势上，分区间波函数形式

$$\psi(x)=\begin{cases}0, & x<0\\ A\sin kx, & 0<x<a\\ B\sin(k'x+\varphi), & x>a\end{cases}$$

其中

$$k=\sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}},\quad k'=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$x=a$ 处，$\dfrac{\partial \ln\psi}{\partial x}$ 连续，得

$$(ka)\cot(ka)=(k'a)\cot(k'a+\varphi)$$

所以

$$\varphi=\operatorname{arccot}\left(\frac{k}{k'}\cot(ka)\right)-k'a$$

在 $x>a$ 区域

$$\psi(x)=\frac{B}{2\mathrm{i}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'x-\mathrm{i}\varphi}-\frac{B}{2\mathrm{i}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'x+\mathrm{i}\varphi}$$

其中

$$\varphi_{\mathrm{inc}}(x)\propto\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k'x-\mathrm{i}\varphi},\quad \varphi_{\mathrm{out}}(x)\propto\mathrm{e}^{\mathrm{i}k'x+\mathrm{i}\varphi}$$

所以出射波相对于入射波的相移为

$$\delta=2\varphi=2\left[\operatorname{arccot}\left(\frac{k}{k'}\right)\cot(ka)-k'a\right]$$

2.76　在无限深方势阱内粒子动能平方三种办法的计算

题 2.76　设粒子处于归一化波函数 $\psi(x)$ 状态，并有某个算符 $\hat{\Omega}$ 的平方算符 $\hat{\Omega}^2$. 一般说，有以下三种办法计算 $\hat{\Omega}^2$ 的期望值：(1) $\int\psi^*(x)\hat{\Omega}^2\psi(x)\mathrm{d}x$；(2) $\int\left(\hat{\Omega}^{\dagger}\psi(x)\right)^*\hat{\Omega}\psi(x)\mathrm{d}x$；(3) 将给定 $\psi(x)$ 按 $\hat{\Omega}$ 本征函数族 $\left(\hat{\Omega}\psi_n(x)=\omega_n\psi_n(x),\forall n\right)$ 展开 $\psi(x)=\sum\limits_{n=1}^{\infty}a_n\psi_n(x)$，再用公式 $\overline{\hat{\Omega}^2}=\sum\limits_n|a_n|^2\omega_n^2$ 计算. 三者等价. 现在的问题是：设粒子在无限深方势阱内，处于归一化波函数 $\psi(x)=N(x+a)(a-x)$ 状态上，阱的范围为 $[-a,a]$. $\hat{H}$ 为体系 Hamilton 量算符. 要求：

(1) 验证：令 $\hat{\Omega}=\sqrt{\hat{H}}$ 时三种计算不出现矛盾，但令 $\hat{\Omega}=\hat{H}$ 时会出现矛盾；

(2) 解释：为什么后面情况的三种计算结果表面看起来不同？是否真是量子力学逻辑不自洽或不完整？

解答　对题给归一化波函数 $\psi(x)=N(x+a)(a-x)$，由归一化条件

$$\begin{aligned}1&=\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x)|^2\mathrm{d}x=\int_0^a|\psi(x)|^2\mathrm{d}x=\int_{-a}^{a}|N|^2(x+a)^2(a-x)^2\mathrm{d}x\\&=|N|^2\int_{-a}^{a}\mathrm{d}x\left(x^4-2a^2x^2+a^4\right)=2|N|^2\left(\frac{1}{5}a^5-2\frac{1}{3}a^5+a^5\right)=\frac{16}{15}|N|^2a^5\end{aligned}$$

可取归一化常数为

$$N=\sqrt{\frac{15}{16a^5}}\tag{2.367}$$

题给无限深势阱中粒子归一化的能量本征态为

$$\psi_n(x)=\frac{1}{\sqrt{a}}\cos\frac{n\pi x}{2a}\ (n=1,3,5,\cdots),\quad \frac{1}{\sqrt{a}}\sin\frac{n\pi x}{2a}\ (n=2,4,6,\cdots)\tag{2.368}$$

相应的能量 $E_n=\dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$，$n$ 为奇数或者偶数分别相应于偶宇称或者奇宇称态. 题给 $\psi(x)$ 可用这组完备的本征态展开

$$\psi(x)=\sum_n a_n\psi_n(x) \tag{2.369}$$

由于题给 $\psi(x)$ 具有偶宇称，上面展开式中只出现偶宇称的即 n 为奇数的 $\psi_n(x)$. 由 $\psi_n(x)$ 的正交归一性得

$$a_n=\int_{-a}^{a}\psi_n^*(x)\psi(x)\mathrm{d}x=\sqrt{\frac{15}{16a^5}}\int_{-a}^{a}(x+a)(a-x)\cos\frac{n\pi x}{2a}\mathrm{d}x \tag{2.370}$$

可类似题 3.3 进行分部积分，或者直接利用积分公式 (A.13)、(A.14) 两式完成上面积分即得

$$a_n=\frac{2\sqrt{60}}{\pi^3n^3}[1-(-1)^n] \tag{2.371}$$

此式当 n 为偶数时为零，只有当 n 为奇数时才不为 0. 故式 (2.369) 的求和只对奇数 n 求，即有

$$\psi(x)=\frac{1}{\pi^3}\sqrt{\frac{1920}{a}}\left\{\cos\frac{\pi x}{a}+\frac{1}{27}\cos\frac{3\pi x}{a}+\cdots+\frac{1}{(2k-1)^3}\cos\frac{(2k-1)\pi x}{a}+\cdots\right\} \tag{2.372}$$

粒子处于能量本征态 $\psi_n(x)=\dfrac{1}{\sqrt{a}}\cos\dfrac{n\pi x}{2a}$($n$ 为奇数) 的概率为

$$P_n=a_n^*a_n=\left(\frac{4\sqrt{60}}{\pi^3n^3}\right)^2=\frac{960}{\pi^6n^6} \tag{2.373}$$

若 n 为偶数，则 $P_n=0$. 特别是处于基态 ψ_1 的概率为 $P_1=\dfrac{960}{\pi^6}=0.998$. 由于 $1/n^6$ 因子，对于 $n>1$ 的奇数，相应概率 P_n 迅速减小.

(1) 对于 $\hat{\Omega}=\sqrt{\hat{H}}$，$\hat{\Omega}^2$ 的期望值的三种计算如下 (其中 $\hat{\Omega}^2$ 的下标各自相应于题给的三种办法)：

$$\begin{aligned}\overline{\hat{\Omega}^2}_{(1)} &= \int\psi^*(x)\hat{\Omega}^2\psi(x)\mathrm{d}x=\int\psi^*(x)\hat{H}\psi(x)\mathrm{d}x\\ &\triangleq \int_{-a}^{a}\psi^*(x)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\psi(x)\mathrm{d}x\\ &= |N|^2\int_{-a}^{a}(x+a)(a-x)\cdot\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)(x+a)(a-x)\mathrm{d}x\\ &= -\frac{15}{16a^5}\cdot\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-a}^{a}-2\left(a^2-x^2\right)\mathrm{d}x=\frac{5\hbar^2}{4ma^2}\end{aligned} \tag{2.374}$$

$$\overline{\hat{\Omega}^2}_{(2)} = \int\left(\hat{\Omega}^\dagger\psi(x)\right)^*\hat{\Omega}\psi(x)\mathrm{d}x=\int\left(\sqrt{\hat{H}}^\dagger\psi(x)\right)^*\sqrt{\hat{H}}\psi(x)\mathrm{d}x$$

$$\begin{aligned}&\triangleq \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-a}^{a}\left(-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)\right)^*\left(-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)\right)\mathrm{d}x\\&=\frac{\hbar^2}{2m}|N|^2\int_{-a}^{a}(-2x)^2\mathrm{d}x=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{15}{16a^5}\frac{4\times 2}{3}a^2=\frac{5\hbar^2}{4ma^2}\end{aligned}\tag{2.375}$$

$$\overline{\hat{\Omega}^2}_{(3)}=\sum_{n=1}^{\infty}c_n^*c_n\cdot E_n=\sum_{n(\mathrm{odd})=1}^{\infty}\frac{960}{\pi^6n^6}\cdot\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2}=\frac{120\hbar^2}{m\pi^4a^2}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{(2k-1)^4}\tag{2.376}$$

将式 (A.30) 的第二式 (可采用 Fourier 级数法计算) 代入式 (2.376) 得

$$\overline{\hat{\Omega}^2}_{(3)}=\frac{5\hbar^2}{4ma^2}\tag{2.377}$$

三种办法的计算结果一致.

对于 $\hat{\Omega}=\hat{H}$，$\hat{\Omega}^2$ 的期望值的三种计算如下：

$$\begin{aligned}\overline{\hat{\Omega}^2}_{(1)}&=\int\psi^*(x)\hat{\Omega}^2\psi(x)\mathrm{d}x=\int\psi^*(x)\hat{H}^2\psi(x)\mathrm{d}x\\&\triangleq\int_{-a}^{a}\psi^*(x)\frac{\hbar^4}{4m^2}\frac{\partial^4}{\partial x^4}\psi(x)\mathrm{d}x\\&=|N|^2\frac{\hbar^4}{4m^2}\int_{-a}^{a}(x+a)(a-x)\cdot\frac{\partial^4}{\partial x^4}(x+a)(a-x)\mathrm{d}x\\&=0\end{aligned}\tag{2.378}$$

$$\begin{aligned}\overline{\hat{\Omega}^2}_{(2)}&=\int\left(\hat{\Omega}^\dagger\psi(x)\right)^*\hat{\Omega}\psi(x)\mathrm{d}x=\int\left(\hat{H}^\dagger\psi(x)\right)^*\hat{H}\psi(x)\mathrm{d}x\\&\triangleq\frac{\hbar^4}{4m^2}\int_{-a}^{a}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x)\right)^*\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x)\right)\mathrm{d}x\\&=\frac{\hbar^4}{4m^2}|N|^2\int_{-a}^{a}(-2)^2\mathrm{d}x=\frac{\hbar^4}{4m^2}\frac{15}{16a^5}\times 8a=\frac{15\hbar^4}{8m^2a^4}\end{aligned}\tag{2.379}$$

$$\overline{\hat{\Omega}^2}_{(3)}=\sum_{n=1}^{\infty}a_n^*a_n\cdot E_n^2=\sum_{n(\mathrm{odd})=1}^{\infty}\frac{960}{\pi^6n^6}\cdot\frac{n^4\pi^4\hbar^4}{64m^2a^4}=\frac{15\hbar^4}{\pi^2m^2a^4}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{(2k-1)^2}\tag{2.380}$$

将式 (A.30) 的第一式 (可采用 Fourier 级数法计算) 代入式 (2.380) 得

$$\overline{\hat{\Omega}^2}_{(3)}=\frac{15\hbar^4}{8m^2a^4}\tag{2.381}$$

可见 $\overline{\hat{\Omega}^2}_{(2)}=\overline{\hat{\Omega}^2}_{(3)}\neq\overline{\hat{\Omega}^2}_{(1)}$，三种办法的计算结果并不完全一致.

(2) 对于 $\hat{\Omega}=\hat{H}$，$\hat{\Omega}^2$ 的期望值的三种计算结果不一致，原因只是式 (2.378)中标“Δ” 的等号处忽略了边界点的贡献，并不是量子力学逻辑不自洽或不完整.

题给波函数可以表示为

$$\psi(x)=\begin{cases}0, & x<-a, x>a\\ N(x+a)(a-x), & -a\leqslant x\leqslant a\end{cases}$$

其一阶导数为

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

在 $x=-a$、 a 两点处不连续，是有限跃变，则前面 $\hat{\Omega}^2$ 的计算中，涉及波函数一阶导数的计算在边界点处的贡献都可以忽略. $\psi(x)$ 二阶导数为

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

涉及波函数二阶以上导数的计算在边界点 $x=-a$、 a 处的贡献一般不可以忽略. 计算中出现的是 $\hat{H}\psi(x)$ 在边界点处的值，这是 "$(\infty-\infty)\times 0$" 不定型. 但可以将 $\psi(x)$ 按式 (2.372)展开，对于展开式的每一项 $\hat{H}\psi_n(x)$ 在边界点 $x=-a$、 a 处均为零，因此 $\hat{H}\psi(x)|_{x=-a}=\hat{H}\psi(x)|_{x=a}=0$，故对于 $\hat{H}\psi(x)$ 也可以忽略边界点处的贡献.

对于 $\hat{\Omega}=\hat{H}$， $\hat{\Omega}^2$ 的期望值的第一种计算涉及 $\psi^*(x)\hat{H}^2\psi(x)$ 在边界点处的值. 若仍将 $\psi(x)$ 按式 (2.372)展开， $\hat{H}^2$ 作用到展开式每一项，给出的级数不一致收敛，此种情形难以直接计算 $\psi^*(x)\hat{H}^2\psi(x)$ 在边界点处的值. 由于 Hamilton 量 $\hat{H}$ 在满足边条件的态空间是 Hermite 算符，上面第一种计算与第二种计算的结果 $\overline{\hat{\Omega}^2}_{(1)}$ 与 $\overline{\hat{\Omega}^2}_{(2)}$ 本来应相等，其差别就来自于 $\psi^*(x)\hat{H}^2\psi(x)$ 在边界点处的值.

第 3 章　中心场束缚态问题

3.1　轨道角动量量子数确定的定态中粒子平均位置必在原点

题 3.1　粒子在有心力场 $V(r)$ 中做定态运动，证明：在任何轨道角动量量子数确定的定态中，粒子平均位置必在原点.

证明　由于 Hamilton 量 $H=\dfrac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(r)$ 具有空间反演不变性. 对于轨道角动量量子数确定的状态 $|\psi\rangle$，具有确定的宇称，$\Pi|\psi\rangle=a|\psi\rangle, a=\pm1$. 这里 Π 为宇称算符 $\Pi\psi(\boldsymbol{r})=\psi(-\boldsymbol{r})$. 由于 $[\Pi,\boldsymbol{r}]_+=\Pi\boldsymbol{r}+\boldsymbol{r}\Pi=0$，即 $\Pi\boldsymbol{r}\Pi=-\boldsymbol{r}$，则

$$\langle\psi|[\Pi,\boldsymbol{r}]_+|\psi\rangle=2a\langle\psi|\boldsymbol{r}|\psi\rangle=2a\langle\boldsymbol{r}\rangle=0$$

故 $\langle\boldsymbol{r}\rangle_\psi=0$.

事实上，这一结果可由宇称选择定则直接给出，这是由于 $\boldsymbol{r}$ 为奇宇称算符，其在宇称相同两态之间的矩阵元为 0.

3.2　粒子在中心力场 $V(r)=-\dfrac{\alpha}{r^s}(\alpha>0)$ 中运动存在束缚态条件

题 3.2　质量为 μ 的粒子在中心力场 $V(r)=-\dfrac{\alpha}{r^s}(\alpha>0)$ 中运动. 证明：存在束缚态的必要条件为 $0<s\leqslant2$；再进一步证明对于 $0<s<2$ 情形，在 $E\sim0^-$ 附近存在无限多束缚态能级.

提示　用 Virial 定理. 但更精确全面的计算见文献[①].

证法一　按 Virial 定理，对于束缚定态有期望值关系 $2\langle T\rangle=\langle\boldsymbol{r}\cdot\nabla V\rangle$，代入题给势函数则有

$$2\langle T\rangle=-s\langle V\rangle=s\alpha\left\langle\frac{1}{r^s}\right\rangle \tag{3.1}$$

$\langle T\rangle>0$ 给出 $s>0$.

此时 $V=-\dfrac{\alpha}{r^s}<0$，且当 $|r|\to+\infty$ 时，$V=-\dfrac{\alpha}{r^s}\to0$，因而束缚态存在的必要条

---

①用 Virial 定理推导只能给出对 s 的限制，其实还存在对 α 的限制. 全面分析见，L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Course of Theoretical Physics*, *Volume* 3, *Quantum Mechanics : Non-Relativistic Theory* Third Edition (原版影印本), 北京：世界图书出版公司, 1999, §35；中译本：理论物理教程第 3 卷，量子力学——非相对论理论 (第 6 版)，北京：高等教育出版社，2008，§35. 但更简洁的全面论证见，张永德，北京：量子菜根谭 (第三版)，清华大学出版社，第 15 讲第 4 节，2016 年 (或 2012 年第二版第 18 讲第 4 节).

件是 $E \leqslant 0$，这给出

$$E = \langle T+V \rangle = \left(1-\frac{2}{s}\right)\langle T \rangle \leqslant 0 \tag{3.2}$$

综合上面两式给出束缚态存在的必要条件是

$$0 < s \leqslant 2 \tag{3.3}$$

在满足 $0 < s < 2$ 条件下，式 (3.2) 还可以写成

$$E = \langle T+V \rangle = \left(1-\frac{s}{2}\right)\langle V \rangle = -\alpha\left(1-\frac{s}{2}\right)\left\langle \frac{1}{r^s} \right\rangle \tag{3.4}$$

按 Bohr 对应原理，在大量子数极限下，量子体系的行为将趋向于与经典力学行为相同. 因而我们可考察粒子这样的一个大量子数极限的束缚定态，其经典对应是很大半径 r_0 的圆轨道运动，该束缚定态相应于其径向分布概率集中在很大半径 r_0 附近的 Δr 范围内的波包态，而且 $\Delta r \ll r_0$，则其能量为

$$E = -\alpha\left(1-\frac{s}{2}\right)\left\langle \frac{1}{r^s} \right\rangle \approx -\alpha\left(1-\frac{s}{2}\right)\frac{1}{r_0^s} \tag{3.5}$$

只要 r_0 足够大，$|E|$ 就可以小于任意小的正数. 对于这种定态，无论其能量是绝对值多么小的负值 $E \sim 0^-$，设

$$-\frac{\alpha}{r_{\mathrm{c}}^s} = E$$

则 $r_{\mathrm{c}} = \left(\dfrac{\alpha}{-E}\right)^{1/s}$ 很大，但在 $r > r_{\mathrm{c}}$ 处 $V > E$，这是经典禁区，粒子位置分布概率迅速衰减到零. 可见这种态确实是束缚态.

这样就表明存在无限多个密集在 $E \sim 0^-$ 附近的能级.

证法二 [①] 首先用对于束缚定态的 Virial 定理得到式 (3.1)，再结合 $\langle T \rangle > 0$ 给出 $s > 0$，这与证法一相同.

接下来，考虑 r 与 p_r 满足不确定性关系

$$\Delta r \Delta p_r \approx \hbar \tag{3.6}$$

对于束缚定态 $\langle p_r \rangle = 0$[②]. 考虑 s 态，则有

$$\left\langle \boldsymbol{p}^2 \right\rangle = \left\langle p_r^2 \right\rangle = (\Delta p_r)^2 \approx \hbar^2/(\Delta r)^2 \tag{3.7}$$

① 读者可参看 L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Course of Theoretical Physics, Volume* 3, *Quantum Mechanics : Non-Relativistic Theory* (原版影印本), Third Edition, 北京：世界图书出版公司, 1999, §18；中译本：理论物理教程第 3 卷，量子力学——非相对论理论 (第 6 版)，北京：高等教育出版社，2008，§18.

② 如对于 $(H, \boldsymbol{L}^2, L_z)$ 的共同本征函数 $\psi_{nlm} = \dfrac{1}{r}\chi(r)Y_{lm}$，其中 $\chi(r)$ 可取为实函数，这样

$$\langle p_r \rangle = \int \psi^* (-\mathrm{i}\hbar)\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)\psi \mathrm{d}^3\boldsymbol{x} = -\mathrm{i}\hbar \int \chi(r)\frac{\partial}{\partial r}\chi(r)\mathrm{d}r$$

由于 $\chi(r)$ 为实函数，则积分结果为一纯虚的量，但 p_r 是 Hermite 算符，$\langle p_r \rangle$ 应该为实数量. 这只能是 $\langle p_r \rangle = 0$.

假设粒子的一个波包态，其径向分布概率集中在离原点 r_0 的范围内，r_0 较小，$\Delta r \sim r_0$，则

$$E = \langle T+V \rangle \approx \frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2} - \frac{\alpha}{r_0^s} \tag{3.8}$$

假若 $s>2$，可见若 $r_0 \to 0$，则式 (3.8) 第二项占主导，使得 $E<0$ 可以取其绝对值任意大的负数，这种情况相当于粒子向原点坠落. 换句话说，$s>2$ 情况下粒子能量不存在下界，因而不存在稳定的定态. 只有当 $0<s<2$ 时，$E<0$ 不会取绝对值任意大的负数，由于不确定性关系阻止粒子向原点坠落[①]，因而可能会存在一些分立能级，这就是定态.

再考虑一个径向分布概率集中在 r_0 附近的 Δr 范围内的波包，r_0 足够大，而 $\Delta r \ll r_0$. 该波包态是束缚态，它按粒子能量本征态[②]展开式的主要项对应的定态也是概率集中在 r_0 附近的 Δr 范围内的波包，对于处于该定态粒子的能量为

$$E = \langle T+V \rangle \approx \frac{\hbar^2}{2\mu(\Delta r)^2} - \frac{\alpha}{r_0^s} \tag{3.9}$$

若 $0<s<2$，我们设想让 r_0 与 Δr 按同一比例增大，则对于足够大的 r_0，式 (3.9) 中第二项起主要作用，将给出 $E<0$，且当 $r_0 \to \infty$ 时，$E \to 0^-$. 这意味着粒子存在其绝对值可以任意小的负能量的定态. 对于某一 $E \sim 0^-$，设

$$-\frac{\alpha}{r_c^s} = E$$

则 $r_c = \left(\dfrac{\alpha}{-E}\right)^{1/s}$ 很大，但在 $r>r_c$ 处 $V>E$，这是经典禁区，粒子位置分布概率迅速衰减到零. 可见这种态确实是束缚态.

由上可知，在 $E \sim 0^-$ 附近存在无限多密集的负能量的束缚定态.

说明　本题解答可以与第 1.32 题相互参照.

对于 $n=-2$ 的临界情况，为避免 Landau 坠落而保证有束缚态存在的讨论，见：L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Course of Theoretical Physics*, *Volume* 3, *Quantum Mechanics : Non-Relativistic Theory* (原版影印本), Third Edition, 北京：世界图书出版公司, 1999, §35；中译本：理论物理教程第 3 卷，量子力学——非相对论理论 (第 6 版)，北京：高等教育出版社，2008，§35，P. 140-143. 其改进讨论见张永德，量子菜根谭——量子理论专题分析，北京：清华大学出版社，第 3 版，2016 年，§15，P.161-171.

3.3　原子单位

题 3.3　仿照自然单位制 ($\hbar = c = 1$)，引入原子单位制. 进入 Coulomb 场 Schrödinger 方程的物理常数共三个：$\hbar$，e，μ_e. 为简化表述，可在计算中形式上略去这三个常数，即相当于令它们为 1；在最后结果中，再加上它们适当幂次的组合，凑得量纲正确即可.

① 若是经典粒子，则没有阻止它向原点坠落的机制.

② 此种情形，Hamilton 量有下界，按照 Courant-Hilbert 定理，其本征态具有完备性.

解答　Coulomb 场中的粒子时间演化态满足 Schrödinger 方程

$$\begin{aligned}\hat{H}\psi &= E\psi \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu_{\mathrm{e}}}\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\psi-\frac{e^2}{r}\psi \\ &= \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi\end{aligned}$$

在一个等式中等号两边的项、一个式子中相加的各项量纲一定相等，由此写出如下量纲等式：

$$\frac{[\hbar]^2}{[\mu_{\mathrm{e}}][r]^2}=\frac{[e^2]}{[r]}=\frac{[\hbar]}{[t]}$$

由此可得各种特征单位，如质量特征单位 $[\mu_{\mathrm{e}}]$，长度特征单位 $[r]=\dfrac{[\hbar]^2}{[\mu_{\mathrm{e}}][e^2]}$，时间特征单位 $[t]=\dfrac{[\hbar]^3}{[\mu_{\mathrm{e}}][e^4]}$；可组成速度、动量、能量的特征单位.

如计算质量，在最后结果上乘以电子质量 μ_{e}.
计算长度，在最后结果上乘以 $a_0=\hbar^2/(\mu_{\mathrm{e}}e^2)$；
计算时间，在最后结果上乘以 $\hbar^3/(\mu_{\mathrm{e}}e^4)$；
计算速度，在最后结果上乘以 $e^2/\hbar$；
计算动量，在最后结果上乘以 $\mu_{\mathrm{e}}e^2/\hbar$；
计算能量，在最后结果上乘以 $\mu_{\mathrm{e}}e^4/\hbar^2$.

3.4　三维无限深势阱

题 3.4　一个电子被禁闭在一个三维立方体的无限深势阱中，边长为 L.
(1) 写出适当的 Schrödinger 方程；
(2) 写出相应于最低能量态的时间无关波函数；
(3) 给出具有能量小于某给定值 E 的态数目 N 的表达式，假定 $N\gg 1$.

解答　(1) 在三维无限深势阱外 $\psi(x,y,z)=0$，在势阱内 $(0<x,y,z<L)$ 波函数 $\psi(x,y,z)$ 满足定态 Schrödinger 方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi=E\psi,\quad E>0 \tag{3.10}$$

(2) 用分离变量法求解方程 (3.10)，三个方向为独立的一维无穷深方势阱问题解得归一化的粒子本征波函数为

$$\psi(x,y,z)=\frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{abc}}\sin k_1x\sin k_2y\sin k_3z \tag{3.11}$$

其中，$k_1=n_1\dfrac{\pi}{a},k_2=n_2\dfrac{\pi}{a},k_3=n_3\dfrac{\pi}{a},(n_1,n_2,n_3=1,2,\cdots)$. 能量本征值 E 为

$$E=\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\left(n_1^2+n_2^2+n_3^2\right),\quad n_1,n_2,n_3=1,2,\cdots \tag{3.12}$$

最低能量态的波函数为

$$\psi_{111}=\left(\frac{2}{L}\right)^{3/2}\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi y}{L}\right)\sin\left(\frac{\pi z}{L}\right) \tag{3.13}$$

相应能量为

$$E_{111}=\frac{3\hbar^2\pi^2}{2mL^2} \tag{3.14}$$

(3) 态 ψ_{nlm} 的能量如式 (3.12)所给，要求能量小于给定 E 的态数 N，实际上是要求满足下面不等式：

$$n_x^2+n_y^2+n_z^2\leqslant\frac{2mL^2}{\hbar^2\pi^2}E \tag{3.15}$$

这是一个求以 $\left(\dfrac{2mL^2}{\hbar^2\pi^2}E\right)^{1/2}$ 为半径的球体内整格点数的问题. $N\gg1$ 时，对于 $n_i>0$，该数为球体体积的 1/8 倍，因此

$$N=\frac{1}{8}\cdot\frac{4\pi}{3}\left(\frac{2mL^2}{\hbar^2\pi^2}E\right)^{3/2}=\frac{4\pi}{3}\left(\frac{mL^2}{2\hbar^2\pi^2}E\right)^{3/2} \tag{3.16}$$

3.5　“夸克”禁闭

题 3.5　一个“夸克”(质量 $=m_{\mathrm{p}}/3$) 禁闭在一个长 2fm=2×10^{-15}m 的立方盒子中. 求从基态到第一激发态的激发能，用 MeV 表示.

证明　三维盒子的能级由题 3.4 的式(3.12)所给为

$$E_{n_1n_2n_3}=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\left(n_1^2+n_2^2+n_3^2\right),\quad n_i=1,2,\cdots$$

基态能量为

$$E_{111}=\frac{3\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$$

第一激发态能量为

$$E_{211}=\frac{6\hbar^2\pi^2}{2ma^2}=\frac{3\hbar^2\pi^2}{ma^2}$$

从基态到第一激发态的激发能为

$$\Delta E=\frac{3\hbar^2\pi^2}{2ma^2}=4.58\times10^8\mathrm{eV}=458\mathrm{MeV}$$

3.6　被空穴束缚的电子吸收谱的最大波长

题 3.6　氯化钠晶体内有些负离子空穴，每个空穴束缚一个电子. 可将这些电子看成束缚在箱中，箱的长度具有晶格常数的量级. 晶体处于室温，粗略估计被这些电子强烈吸收的电磁波的最长波长.

解答　电磁波能量和波长的关系为

$$E = h\nu = hc/\lambda$$

氯化钠晶体中的电子能级由题 3.4 式 (3.12)所给，取 $a = 1\text{Å}$，电子的基态能级为

$$E_{111} = \frac{3\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \approx 112\text{eV}$$

对于处于室温的晶体，考虑热分布可知，电子几乎全部处于基态. 所以被强烈吸收的电磁波的最大波长满足

$$\frac{2\pi\hbar c}{\lambda_{\max}} = E_{211} - E_{111}$$

因而

$$\lambda_{\max} = \frac{hc}{\Delta E} = \frac{hc}{E_{211} - E_{111}} = 110\text{Å}$$

3.7　处于无限深球方势阱基态电子对器壁压力

题 3.7　一个电子被束缚在半径为 a 的匣子中，求处于基态的电子对匣壁的压力.

解答　无限深球方势阱中的 Schrödinger 方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{1}{2\mu r^2}\boldsymbol{L}^2 + V(r)\right]\psi = E\psi \tag{3.17}$$

因为势阱关于球对称，电子的角动量守恒，波函数可写为 $\psi = R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$，其中 $R(r)$ 为径向波函数，满足

$$\left[\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}r + \frac{2\mu(E-V)}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R_l = 0 \tag{3.18}$$

考虑基态，$l = 0$，作一变量代换，令 $\chi(r) = rR(r)$，代入式 (3.18) 得

$$\begin{cases}\chi'' + \dfrac{2\mu E}{\hbar^2}\chi = 0, & r < a\\ \chi = 0, & r \geqslant a\end{cases}$$

再利用自然边界条件 $\chi(0) = 0$，解得

$$\chi_n = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}r, \quad n = 1,2,3,\cdots$$

相应能量本征值 $E_n = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2 n^2}$. 对于基态 $(n = 1)$ 有 $E_1 = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}$.

设粒子所处的匣子势的高度为 V_0，选匣子中心为球坐标原点，则粒子所受力

$$\boldsymbol{f} = -\nabla V(\boldsymbol{r},a) = -\frac{\partial V}{\partial r}\boldsymbol{e}_r = -V_0\delta(r-a)\boldsymbol{e}_r \tag{3.19}$$

其中，$V(\boldsymbol{r},a)$ 表示 a 是该势函数的参数. 则

$$\boldsymbol{f}=\frac{\partial V}{\partial a}\boldsymbol{e}_r=\frac{\partial H}{\partial a}\boldsymbol{e}_r \tag{3.20}$$

式 (3.19)或者式 (3.20)表明粒子所受力大小与方位角无关，方向都沿径向指向内，按作用

力反作用力关系，粒子给匣壁向外的压力. 式 (3.20)表明粒子所受力大小为 $\dfrac{\partial H}{\partial a}$，因而粒子给匣壁向外的压力为 $-\dfrac{\partial H}{\partial a}$，这样由 Hellmann-Feynman 定理，匣壁受到总压力为

$$F=-\left\langle\frac{\partial H}{\partial a}\right\rangle=-\frac{\partial}{\partial a}\langle H\rangle=-\frac{\partial E}{\partial a}$$

电子处于基态，可知

$$F=-\frac{\partial E_1}{\partial a}=\frac{\pi^2\hbar^2}{\mu a^3} \tag{3.21}$$

从而压强 p 为

$$p=\frac{F}{4\pi a^2}=\frac{\pi\hbar^2}{4\mu a^5} \tag{3.22}$$

说明　式 (3.22)可作解释：匣壁缓慢向外移动微小距离 Δa，则粒子对外做功 $p\Delta V=4\pi a^2\Delta ap$，结果导致能级降低 ΔE_1，根据能量守恒定律 $\Delta E_1=-4\pi a^2\Delta ap$，故有

$$p=-\frac{1}{4\pi a^2}\frac{\partial E_1}{\partial a}$$

与式 (3.22)一致.

3.8　粒子在两个不可穿透的同心球壳中的运动

题 3.8　一个质量为 m 的粒子被限制在半径为 $r=a$ 和 $r=b$ 的两个不可透穿的同心球面之间运动，不存在其他势. 求粒子的基态能量和归一化波函数.

解答　类似题 3.7，设粒子的径向波函数为 $R(r)=\chi(r)/r$，则 $\chi(r)$ 满足方程

$$\frac{\mathrm{d}^2\chi(r)}{\mathrm{d}r^2}+\left\{\frac{2m}{\hbar^2}[E-V(r)]-\frac{l(l+1)}{r^2}\right\}\chi(r)=0 \tag{3.23}$$

其中，r 的范围为 $a\leqslant r\leqslant b$，对应边界条件 $\chi(a)=\chi(b)=0$. 对于基态，$l=0$. 由题设知 $V(r)=0$，若令

$$k=\sqrt{2mE/\hbar^2},$$

则问题化成求解下列边值问题：

$$\begin{cases}\chi''+k^2\chi=0\\ \chi(a)=\chi(b)=0\end{cases} \tag{3.24}$$

方程的解为 $\chi = A\sin k(r+\alpha)$. 由边界条件 $\chi(a)=0$， $\sin k(a+\alpha)=0$，故 $\alpha=-a$，由此知解的形式为

$$\chi(r) = A\sin k(r-a) \tag{3.25}$$

再由边界条件 $\chi(b)=0$，即 $\sin k(b-a)=0$，由此给出本征值

$$k = \frac{n\pi}{b-a}, \quad n=1,2,\cdots \tag{3.26}$$

相应能量本征值 $E_n = \dfrac{\hbar^2 n^2\pi^2}{2m(b-a)^2}$.

粒子处于基态时，相应的 $n=1$，于是得到基态能量

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m(b-a)^2} \tag{3.27}$$

所以基态径向波函数为

$$\chi = A\sin\frac{\pi(r-a)}{b-a}, \quad R = A\frac{1}{r}\sin\frac{\pi(r-a)}{b-a}$$

最后，由归一化条件

$$\int_a^b R^2(r)r^2\mathrm{d}r = \int_a^b \chi^2(r)\mathrm{d}r = 1$$

确定

$$A = \sqrt{\frac{2}{b-a}}$$

所以归一化的基态径向波函数为

$$R(r) = \sqrt{\frac{2}{b-a}}\frac{1}{r}\sin\frac{\pi}{b-a}(r-a)$$

而基态总的归一化波函数为

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\sqrt{\frac{2}{b-a}}\frac{1}{r}\sin\frac{\pi(r-a)}{b-a} \tag{3.28}$$

3.9 谐振子几个问题

题 3.9 (1) 对于一个谐振子 Hamilton 量为 $H = \dfrac{p^2}{2m} + \dfrac{m\omega^2}{2}x^2$，证明其基态能量具有与不确定性关系相容的最小值；

(2) 使不确定性关系取最小值的波函数是 Gauss 型 $\mathrm{e}^{-\alpha x^2}$ 波包. 利用这一事实，不解任何微分方程，求 α；

(3) 利用升降算符，不解微分方程，写出谐振子的第一激发态的波函数 (不归一)；

(4) 对于一个三维谐振子，在球极坐标中写出简并第一激发态的波函数，同时是 L_z 的本征态.

证明　(1) 谐振子基态是偶宇称的，所以

$$\bar{x} = \langle 0|\, x\, |0\rangle = 0, \quad \bar{p} = \langle 0|\, p\, |0\rangle = 0$$

这样

$$(\Delta x)^2 = \overline{x^2}, \quad (\Delta p)^2 = \overline{p^2}$$

由不确定性关系

$$(\Delta x)^2 \cdot (\Delta p)^2 \geqslant \frac{\hbar^2}{4}$$

所以

$$\begin{aligned} \overline{E} &= \frac{\overline{p^2}}{2m} + \frac{k}{2}\overline{x^2} \geqslant \sqrt{\frac{k}{m}}\sqrt{p^2 \cdot x^2} \\ &\geqslant \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{k}{m}} = \frac{\hbar\omega}{2} = E_0 \end{aligned}$$

即基态能量具有与不确定性关系相容的最小值.

(2) 代入题给 Gauss 型波函数 $\mathrm{e}^{-\alpha x^2}$ 计算，利用积分公式 (A.1) 与 (A.2) 得

$$\overline{x^2} = \frac{\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-2\alpha x^2} x^2 \mathrm{d}x}{\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-2\alpha x^2} \mathrm{d}x} = \frac{\dfrac{\sqrt{\pi}}{2(2\alpha)^{3/2}}}{\sqrt{\dfrac{\pi}{2\alpha}}} = \frac{1}{4\alpha}$$

$$\overline{p^2} = \frac{-\hbar^2 \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\alpha x^2} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} \mathrm{e}^{-\alpha x^2} \mathrm{d}x}{\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x \mathrm{e}^{-2\alpha x^2}} = \frac{4\hbar^2\alpha^2 \dfrac{\sqrt{\pi}}{2(2\alpha)^{3/2}}}{\sqrt{\dfrac{\pi}{2\alpha}}} = \hbar^2\alpha$$

这样

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\alpha + \frac{k}{2} \cdot \frac{1}{4\alpha}$$

当 $\alpha = \dfrac{1}{2}\sqrt{\dfrac{km}{\hbar^2}} = \dfrac{m\omega}{2\hbar}$ 时，能量最小，所以

$$\alpha = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{km}{\hbar^2}} = \frac{m\omega}{2\hbar}$$

(3) 利用升降算符

$$a = \mathrm{i}\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(p - \mathrm{i}m\omega x), \quad a^\dagger = -\mathrm{i}\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(p + \mathrm{i}m\omega x) \tag{3.29}$$

谐振子 Hamilton 量表示为

$$H = \left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{3.30}$$

基态记为 $|0\rangle$，则有

$$H\,|0\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega\,|0\rangle$$

也就是

$$a^\dagger a\,|0\rangle = 0$$

从而

$$H\left(a^\dagger\,|0\rangle\right) = \frac{1}{2}\hbar\omega a^\dagger\,|0\rangle + \hbar\omega a^\dagger a a^\dagger\,|0\rangle = \frac{3}{2}\hbar\omega a^\dagger\,|0\rangle$$

所以

$$|1\rangle = a^\dagger\,|0\rangle$$

其坐标表象波函数为

$$\langle x\,|1\rangle = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}x\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$

(4) 三维谐振子视为 3 个独立的谐振子，其波函数为

$$\psi_{n_1n_2n_3}(\boldsymbol{r}) = \psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(x)\psi_{n_3}(x)$$

基态 $(n_1,n_2,n_3)=(0,0,0)$. 第一激发态 $(n_1,n_2,n_3)=(1,0,0),(0,1,0),(0,0,1)$，其坐标表象波函数为

$$\psi_{100}(\boldsymbol{r}) = N_0^2N_1 2\alpha x\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2r^2\right)$$

$$\psi_{010}(\boldsymbol{r}) = N_0^2N_1 2\alpha y\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2r^2\right)$$

$$\psi_{001}(\boldsymbol{r}) = N_0^2N_1 2\alpha z\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2r^2\right)$$

利用球谐函数

$$\mathrm{Y}_{1,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\varphi} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta(\cos\varphi\pm\mathrm{i}\sin\varphi) = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{x\pm\mathrm{i}y}{r}$$

$$\mathrm{Y}_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{z}{r}$$

将 x, y, z 用球谐函数展开，重新组合可得 L_z 的本征态：

$$\psi_m(\boldsymbol{r}) = N_m\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2r^2\right)r\mathrm{Y}_{1m}(\theta,\varphi),\quad N_m = \frac{\alpha^2}{\sqrt{2}}$$

注　式中 $\alpha=\sqrt{\dfrac{m\omega}{\hbar}}$ 是通常的定义，与第 (2) 小题中不同.

3.10　中心力场运动粒子各能级径向波函数的节点数

题 3.10　图 3.1给出了在某个三维中心势中运动的无自旋粒子的 6 个最低能级及其相应的角动量. 这一能谱中不存在偶然简并，给出各能级相应径向波函数的节点数目(在节点两边波函数符号不同).

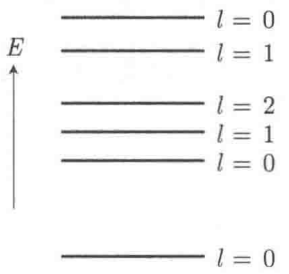


图 3.1　在某三维中心势中运动的无自旋粒子的 6 个最低能级及其相应角动量

解答　三维中心势中的粒子径向波函数 $R(r)=\dfrac{\chi(r)}{r}$，而 $\chi(r)$ 的方程当给定 l 值时，和一维 Schrödinger 方程相同. 因此，当其能谱不存在偶然简并时，其径向波函数的节点行为同一维波函数一样. 对于束缚态，仍然有斯特姆定理：基态径向波函数的节点数目为 0，第 n 激发态径向波函数的节点数目为 n.

现在考虑 $l=0$ 的 3 个能级，其径向波函数的节点数从下到上依次是：0、1、2，关于 $l=1$ 和 $l=2$ 的能级，在添加对应项 $\dfrac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}$ 改变位势之后，分别再按上述类似讨论.

总之，本题所给 6 个最低能态径向波函数的节点数从下到上依次是：0、1、0、0、1、2.

3.11　三维各向同性谐振子能级的占有数和简并度

题 3.11　一电荷为 q、质量为 m 的粒子被一个球对称线性回复力束缚在原点. 能级间距是 $\hbar\omega_0$，基态能量是 $E_0=\dfrac{3}{2}\hbar\omega_0$，态可由 Descartes 坐标 (三个一维谐振子) 或球坐标 (中心场，分解成径向运动和角向运动) 描述.

(1) 在 Descartes 坐标系中，将基态和前三个激发态的占有数列表，求出各个能级的简并度；

(2) 在球坐标中，写出径向运动方程 (不要求解)(注意在球坐标中 $\nabla^2=\dfrac{1}{r^2}\cdot\dfrac{\partial}{\partial r}r^2\dfrac{\partial}{\partial r}-\dfrac{\boldsymbol{L}^2}{r^2}$，$\boldsymbol{L}^2$ 是总轨道角动量算子的平方除以 $\hbar^2$)，指出并画出有效势. 对于给定的角动量，画出径向波函数的基态及相同 l 值的另两个态；

(3) 对于第 (1) 小题中的四个能级，写下这些能级中所含的角动量及宇称. 将总简并度与第 (1) 小题的结果比较；

(4) 第二激发态 ($E_2=7\hbar\omega_0/2$) 有线性 Stark 效应吗？为什么？比较这一谐振子能级与非相对论氢原子第二激发能级 ($n=3$) 之间的异同.

解答　(1) 在 Descartes 坐标系中，三维各向同性谐振子 Hamilton 量视为三个一维谐振子，基态和前三个激发态的占有数以及相应简并度见下表.

三维各向同性谐振子基态和前三个激发态的占有数以及相应简并度

能级	占有数	简并度
E_0	$\|0,0,0\rangle$	1
E_1	$\|1,0,0\rangle$, $\|0,1,0\rangle$, $\|0,0,1\rangle$	3
E_2	$\|2,0,0\rangle$, $\|0,2,0\rangle$, $\|0,0,2\rangle$, $\|1,1,0\rangle$, $\|1,0,1\rangle$, $\|0,1,1\rangle$	6
E_3	$\|3,0,0\rangle$, $\|0,3,0\rangle$, $\|0,0,3\rangle$, $\|2,1,0\rangle$, $\|0,2,1\rangle$, $\|1,0,2\rangle$ $\|1,2,0\rangle$, $\|0,1,2\rangle$, $\|2,0,1\rangle$, $\|1,1,1\rangle$	10

(2) 在球坐标中，波函数表示为 $\psi(r)=R(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$，其中径向波函数 R 满足如下方程：

$$\frac{1}{r^2}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}R\right)+\left[\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-\frac{m}{2}\omega^2r^2\right)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R=0$$

而有效势为

$$V_{\text{eff}}=\frac{1}{2}m\omega^2r^2+\frac{\hbar^2l(l+1)}{2mr^2}$$

图 3.2 的等效势曲线中 $r_0=\left[\dfrac{\hbar^2l(l+1)}{m^2\omega^2}\right]^{1/4}$. 图 3.3给出了相同 l(取 $l=1$) 的前三态的波函数形状. 注意波函数的节点数等于 n_r.

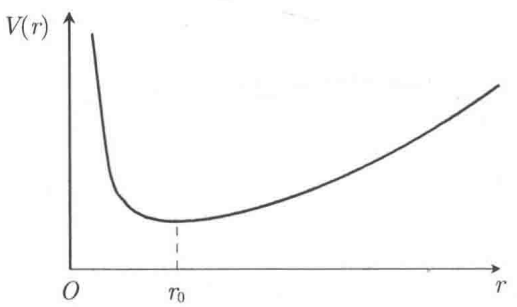


图 3.2　等效势曲线

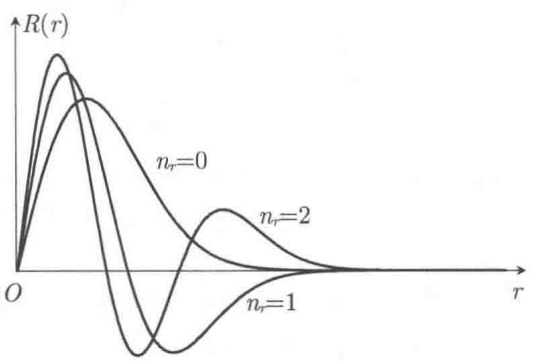


图 3.3　相同 l(取 $l=1$) 的能量最低三个态的波函数形状

(3) 四个能级所含态的角动量及宇称以及总简并度见下表.

四个能级所含态的角动量及宇称以及总简并度

E	l	m	Π	D
E_0	0	0	+	1
E_1	1	0, ±1	−	3
E_2	2	0, ±1, ±2	+	6
	0	0		
E_3	3	0, ±1, ±2, ±3	−	10
	1	0, ±1		

(4) 没有线性 Stark 效应. 因为 x 是奇算子，而 E_2 的所有简并态都具有偶宇称，因而 H' 的矩阵元在 E_2 能级子空间中为零.

对于氢原子第二激发态， $n=3$，它的简并态既有宇称为偶的态，又有奇宇称态. 存在线性 Stark 效应.

3.12　三维耦合谐振子

题 3.12　(1) 一个质量为 m 的非相对论粒子在一势场中运动，势为

$$V(x,y,z)=A\left(x^2+y^2+2\lambda xy\right)+B\left(z^2+2\mu z\right)$$

其中，$A>0, B>0$， $|\lambda|<1$， μ 是任意的实数量. 求能量的本征值.

(2) 现在使势变成 V_{new}，对于 $z>-\mu$，及任何 x、 y， $V_{\text{new}}=V$， V 与第 (1) 小题相同. 对于 $z<-\mu$，及任何 x、 y， $V_{\text{new}}=+\infty$，求基态能量.

解答　(1) 根据题给 Hamilton 量的特点，引入变量 ξ、 η，使

$$\begin{aligned}\xi&=\frac{1}{\sqrt{2}}(x+y)\\ \eta&=\frac{1}{\sqrt{2}}(x-y)\end{aligned}\tag{3.31}$$

其反解式

$$\begin{aligned}x&=\frac{1}{\sqrt{2}}(\xi+\eta)\\ y&=\frac{1}{\sqrt{2}}(\xi-\eta)\end{aligned}\tag{3.32}$$

则有

$$V(x,y,z)=A\left[\frac{1}{2}(\xi^2+\eta^2+2\xi\eta)+\frac{1}{2}(\xi^2+\eta^2-2\xi\eta)+2\lambda\cdot\frac{1}{2}(\xi^2-\eta^2)\right]+B(z^2+2\xi z)$$

$$= A\left[(1+\lambda)\xi^2+(1-\lambda)\eta^2\right]+B(z^2+2\xi z)$$

同样由式 (3.32)可得

$$\begin{cases} \dfrac{\partial}{\partial x}=\dfrac{\partial\xi}{\partial x}\dfrac{\partial}{\partial\xi}+\dfrac{\partial\eta}{\partial x}\dfrac{\partial}{\partial\eta}=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\dfrac{\partial}{\partial\xi}+\dfrac{\partial}{\partial\eta}\right) \\ \dfrac{\partial}{\partial y}=\dfrac{\partial\xi}{\partial y}\dfrac{\partial}{\partial\xi}+\dfrac{\partial\eta}{\partial y}\dfrac{\partial}{\partial\eta}=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\dfrac{\partial}{\partial\xi}-\dfrac{\partial}{\partial\eta}\right) \end{cases} \tag{3.33}$$

从而

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}=\left(\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}+\frac{\partial^2}{\partial\xi\partial\eta}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\frac{1}{\sqrt{2}}+\left(\frac{\partial^2}{\partial\eta\partial\xi}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}+\frac{\partial^2}{\partial\eta^2}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2}=\left(\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}-\frac{\partial^2}{\partial\xi\partial\eta}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\frac{1}{\sqrt{2}}-\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\partial^2}{\partial\eta\partial\xi}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}-\frac{\partial^2}{\partial\eta^2}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}\right)$$

这样

$$\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}=\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+\frac{\partial^2}{\partial\eta^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

进行上述变量代换后的 Schrödinger 方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+\frac{\partial^2}{\partial\eta^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]\psi+A\left[\xi^2(1+\lambda)+\eta^2(1-\lambda)\right]\psi+B\left(z^2+2\mu z\right)\psi=E\psi \tag{3.34}$$

用分离变量法，令 $\psi=\Xi(\xi)(\eta)Z(z)$，代入式 (3.34)，可得三个一维谐振子方程

$$\begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{2m}\left[\dfrac{\partial^2}{\partial\xi^2}+\xi^2A(1+\lambda)\right]\Xi(\xi)=E_1\Xi(\xi) \\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\left[\dfrac{\partial^2}{\partial\eta^2}+\xi^2A(1-\lambda)\right]Y(\eta)=E_2Y(\eta) \\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\left[\dfrac{\partial^2}{\partial z^2}+B\left(z^2+2\mu z\right)\right]Z(z)=E_3Z(z) \end{cases} \tag{3.35}$$

而 $E=E_1+E_2+E_3$. 令

$$\omega_1=\sqrt{\frac{2A}{m}(1+\lambda)};\quad \omega_2=\sqrt{\frac{2A}{m}(1+\lambda)};\quad \omega_3=\sqrt{\frac{2B}{m}}$$

根据一维谐振子定态问题的结果，有

$$E_1=\left(n_1+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_1,\quad E_2=\left(n_2+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_2,\quad E_3=\left(n_3+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_3-B\mu^2$$

而 n_1、n_2、n_3 均为非负整数. 从而体系的能级为

$$E=E_1+E_2+E_3=\left(n_1+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_1+\left(n_2+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_2+\left(n_3+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_3-B\mu^2 \tag{3.36}$$

(2) 已知一维谐振子定态波函数具有确定的宇称 (奇偶性由其量子数 n 定，当 n 为奇数时，波函数为奇宇称，否则，波函数为偶宇称). 题给 z 方向定态波函数关于 $z+\mu$

在量子数 n 下具有确定的“宇称”. 在新的势函数 V_{new} 下，对于 $z<-\mu$，及任何 x、y，$V_{\text{new}}=+\infty$，则 $Z(z)=0$. 对于 $z>-\mu$，及任何 x、y，$V_{\text{new}}=V$，V 与第 (1) 小题相同，则 $Z(-\mu)=0, Z(\infty)=0$. 与第 (1) 小题相同普通谐振子能量本征态比较知，此时粒子能量本征态为第 (1) 小题相同普通谐振子的所有奇宇称能量本征态，其基态相应于量子数 $n_1=0, n_2=0, n_3=1$. 这样体系基态能量为

$$E=\frac{1}{2}\hbar(\omega_1+\omega_2)+\frac{3}{2}\hbar\omega_3-B\mu^2$$

3.13　对数势中运动的粒子

题 3.13　一质量为 m 的粒子在对数势 $V(r)=c\ln(r/r_0)$ 中运动. 证明:

(1) 所有的束缚定态都有相同的方均速度，并求之;

(2) 任何两个束缚定态的能量间隔与质量 m 无关.

证明　(1) 设粒子的速度算符为 $\boldsymbol{v}=\boldsymbol{p}/m$，则能量本征态 ψ(设已经归一化) 下的方均速度为

$$\langle\boldsymbol{v}^2\rangle=\left\langle\frac{\boldsymbol{p}^2}{m^2}\right\rangle=\frac{1}{m^2}\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\psi^*\boldsymbol{p}^2\psi \tag{3.37}$$

对于束缚定态的 Virial 定理

$$2\langle T\rangle=\langle\boldsymbol{r}\cdot\nabla V\rangle$$

可知方均速度

$$\begin{aligned}\langle\boldsymbol{v}^2\rangle &= \left\langle\frac{\boldsymbol{p}^2}{m^2}\right\rangle=\frac{1}{m}\times 2\langle T\rangle=\frac{1}{m}\langle\boldsymbol{r}\cdot\nabla V\rangle\\ &= \frac{1}{m}\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\left(r\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}c\ln\frac{r}{r_0}\right)\psi^*\psi=\frac{c}{m}\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\,|\psi|^2=\frac{c}{m}\end{aligned} \tag{3.38}$$

对任何束缚定态均成立.

(2) 由 Hellmann-Feynman 定理，对于束缚定态 $|\psi_n\rangle$

$$\frac{\partial E_n}{\partial m}=\langle\psi_n|\frac{\partial H}{\partial m}|\psi_n\rangle=\langle\psi_n|-\frac{p^2}{2m^2}|\psi_n\rangle=-\frac{1}{2}\langle\psi_n|V^2|\psi_n\rangle=-\frac{1}{2}\cdot\frac{c}{m}$$

由式 (3.38)，可得

$$\frac{\partial E_n}{\partial m}=-\frac{1}{2}\frac{c}{m} \tag{3.39}$$

这样

$$\frac{\partial(E_n-E_{n-1})}{\partial m}=-\frac{1}{2}\frac{c}{m}+\frac{1}{2}\frac{c}{m}=0 \tag{3.40}$$

上式表明 (E_n-E_{n-1}) 与 m 无关.

说明　第 (2) 小题结果也可以如下采用标度变换证明. 粒子在对数中心势中运动的定态 Schrödinger 方程为

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

做尺度变换，令 $\boldsymbol{r}'=\sqrt{m/m_0}\boldsymbol{r}$，$m$ 是粒子质量，m_0 是某一特定的质量单位，如质子质量 m_p. 则式 (3.8) 变为

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

上面定态 Schrödinger 方程除了能量本征值中的 $\left(-\frac{1}{2}c\ln\frac{m}{m_0}\right)$ 外，与粒子质量 m 无关. 当然其任何两个能量本征态的能量间隔 (E_n-E_{n-1}) 与 m 无关.

3.14　氢原子受一无限高势壁的作用

题 3.14　假定孤立氢原子的本征态都已知，且按通常的记号，写为

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)=R_{nl}(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$$

设有一氢原子的原子核距无限高势壁为 d，显而易见，势壁力图使氢原子变形.

(1) 当 $d\to 0$ 时，写出这个氢原子基态波函数的形式；

(2) 求出所有其他半空间中该氢原子 $(d\to 0)$ 的本征函数，用 R_{nl} 和 Y_{lm} 表示.

解答　(1) 建立坐标系，原点取为原子核所在位置，Z 轴垂直于势壁表面. 由于 $d\to 0$，在半空间 $z>0$ 内，Schrödinger 方程的解仍是 $R_{nl}\mathrm{Y}_{lm}$，但须满足 $\theta=\dfrac{\pi}{2}$ 时 $\psi=0$ 的条件，即只有 $l+m=$ 奇数的那些解才是满足要求的，如

$$\mathrm{Y}_{1,0}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta\Big|_{\theta=\frac{\pi}{2}}=0$$

所以基态波函数为 $R_{21}\mathrm{Y}_{1,0}$.

(2) 所有其他本征态为 $R_{nl}\mathrm{Y}_{lm}$，$l+m=$ 奇数，即 $m=l-1,l-3,\cdots,-l+1$ 为 l 重简并.

注　这种做法同问题的对称性密切相关.

3.15　氢原子波函数随时间的演化

题 3.15　在 $t=0$ 时，氢原子的波函数为

$$\psi(\boldsymbol{r},0)=\frac{1}{\sqrt{10}}\left[2\psi_{100}+\psi_{210}+\sqrt{2}\psi_{211}+\sqrt{3}\psi_{2,1,-1}\right]$$

其中，脚标是量子数 n、l、m 的值. 忽略自旋和辐射跃迁，试求：

(1) 该体系能量的期望值?

(2) $t=0$ 时电子在位于距离质子 10^{-10}cm 之内的概率? 这里可采用近似结果；

(3) t 时刻体系处于 $l=1,m=+1$ 态的概率；

(4) 波函数随时间变化的规律，即求 $\psi(\boldsymbol{r},t)$；

(5) 假设一次测量发现 $L=1, L_x=1$，用上面的 ψ_{nlm} 描述这一测量后瞬间的波函数.

解答　(1) 体系的能量期望值

$$\begin{aligned} E &= \langle\psi|H|\psi\rangle = \frac{1}{10}(4E_1+6E_2) \\ &= \frac{11}{20}E_1 = -7.68\text{eV} \end{aligned}$$

(2) 令 $d=10^{-10}\text{cm}$，由 $\psi_{nlm}=R_{nl}\text{Y}_{lm}$，$\text{Y}_{lm}$ 正交归一，电子在 $d=10^{-10}\text{cm}$ 之内的概率为

$$\begin{aligned} P &= \int_0^d r^2\text{d}r\psi^*\psi\text{d}\Omega \\ &= \int_0^d r^2\text{d}r\frac{1}{10}\left(4|R_{10}|^2+6|R_{21}|^2\right) \end{aligned}$$

已知氢原子径向波函数为

$$R_{10}=\frac{2}{a_0^{3/2}}\text{e}^{-r/a_0}, \quad R_{21}=\frac{r}{2\sqrt{6}a_0^{5/2}}\text{e}^{-r/(2a_0)}$$

其中，Bohr 半径 $a_0=5.29\times10^{-9}\text{cm}$. 因为 $d\ll a_0$，所以 $\text{e}^{-r/a_0}\approx1-r/a_0$. 这样

$$\begin{aligned} P &\approx \frac{4}{10}\int_0^d r^2\text{d}r\frac{4}{a_0^3}\left(1-\frac{2r}{a_0}\right)+\frac{6}{10}\int_0^d r^2\text{d}r\frac{r^2}{24a_0^5}\left(1-\frac{r}{a_0}\right) \\ &= \left[\frac{4}{3}\left(\frac{d}{a_0}\right)^3-2\left(\frac{d}{a_0}\right)^4\right]\frac{4}{10}+\frac{6}{10}\left[\frac{1}{120}\left(\frac{d}{a_0}\right)^5-\frac{1}{144}\left(\frac{d}{a_0}\right)^6\right] \\ &\approx \frac{8}{15}\left(\frac{d}{a_0}\right)^3\approx3.6\times10^{-6} \end{aligned}$$

(3) t 时刻体系的状态为

$$|\psi(t)\rangle=\text{e}^{-\text{i}Ht/\hbar}|\psi(0)\rangle$$

t 时刻体系处于 $l=1,m=+1$ 态的概率幅为

$$\langle n11|\psi(t)\rangle=\delta_{n2}\langle211|\text{e}^{-\text{i}Ht/\hbar}|\psi(t)\rangle=\delta_{n2}\sqrt{\frac{1}{5}}\text{e}^{-\text{i}E_2t/\hbar}$$

所以概率为

$$P=|\langle n11|\psi(t)\rangle|^2=\frac{1}{5}\delta_{n2}$$

当 $n=2$ 时，$P=1/5$，其他情况 P 为零.

(4) t 时刻体系的波函数为

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\text{e}^{-\text{i}Ht/\hbar}\psi(\boldsymbol{r},0)$$

$$= \sqrt{\frac{1}{10}}\left(2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_1 t}\psi_{100}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_2 t}\psi_{210}+\sqrt{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_2 t}\psi_{211}+\sqrt{3}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_2 t}\psi_{21,-1}\right)$$

式中

$$\omega_1=\frac{E_1}{\hbar},\quad \omega_2=\frac{E_2}{\hbar}$$

(5) **解法一** 先考虑波函数角向部分，L_z 的本征态为

$$\mathrm{Y}_{1,0}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{z}{r},\quad \mathrm{Y}_{1,\pm1}=\mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{x\pm\mathrm{i}y}{r}$$

因为 x、y 和 z 是对称的，要求 L_x 的本征态，即将 x、y 和 z 轮换 $x\to y$、$y\to z$、$z\to x$，上述态经过这样的变换得

$$\mathrm{Y}'_{1,0}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{x}{r},\quad \mathrm{Y}'_{1,\pm1}=\mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{y\pm\mathrm{i}z}{r}$$

本题求用 L_z 的本征态 $\mathrm{Y}_{1,0}$，$\mathrm{Y}_{1,\pm1}$ 展开 $L=1,L_x=1$ 的态 $\mathrm{Y}'_{1,1}$，

$$\begin{aligned}\mathrm{Y}'_{1,1} &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\frac{y+\mathrm{i}z}{r}=\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\left[\frac{\mathrm{i}}{2}\left(\frac{x+\mathrm{i}y}{r}-\frac{x-\mathrm{i}y}{r}\right)-\mathrm{i}\frac{z}{r}\right]\\ &= \frac{\mathrm{i}}{2}\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\left(\frac{x+\mathrm{i}y}{r}\right)-\frac{\mathrm{i}}{2}\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\left(\frac{x-\mathrm{i}y}{r}\right)-\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\mathrm{i}\frac{z}{r}\\ &= -\mathrm{i}\left[\frac{1}{2}\mathrm{Y}_{1,1}+\frac{1}{2}\mathrm{Y}_{1,-1}+\frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{Y}_{1,0}\right]\end{aligned}$$

解法二 因为 $L_x=\dfrac{L_++L_-}{2}$，利用升降算符的性质

$$L_\pm\mathrm{Y}_{lm}=\sqrt{l(l+1)-m(m\pm1)}\mathrm{Y}_{lm\pm1}$$

设 $L=1,L_x=1$ 的态为 ψ，用 L_z 的本征态 Y_{lm} 展开

$$\psi=C_1\mathrm{Y}_{1,1}+C_{-1}\mathrm{Y}_{1,-1}+C_0\mathrm{Y}_{1,0}$$

L_x 作用在 ψ 上得

$$\begin{aligned}L_x\psi &= \frac{L_++L_-}{2}\psi=\frac{1}{2}\left[L_+C_{-1}\mathrm{Y}_{1,-1}+L_+C_0\mathrm{Y}_{1,0}+L_-C_1\mathrm{Y}_{1,1}+L_-C_0\mathrm{Y}_{1,0}\right]\\ &= \frac{1}{2}\left[C_{-1}\mathrm{Y}_{1,0}+C_0\mathrm{Y}_{1,1}+C_1\mathrm{Y}_{1,0}+C_0\mathrm{Y}_{1,-1}\right]\\ &= \frac{1}{2}\left[C_0\mathrm{Y}_{1,1}+C_0\mathrm{Y}_{1,-1}+(C_1+C_{-1})\mathrm{Y}_{1,0}\right]\end{aligned}$$

与 L_x 的本征方程

$$L_x\psi=C_1\mathrm{Y}_{1,1}+C_{-1}\mathrm{Y}_{1,-1}+C_0\mathrm{Y}_{1,0}$$

比较后得

$$C_1=\frac{1}{2}C_0,\quad C_{-1}=\frac{1}{2}C_0$$

由波函数归一得 $C_0=1/\sqrt{2}$. 这样

$$\psi=\frac{1}{2}\left[\mathrm{Y}_{1,1}+\mathrm{Y}_{1,-1}+\sqrt{2}\mathrm{Y}_{1,0}\right]$$

计入径向波函数，一次测量发现 $L=1, L_x=1$，这一测量后瞬间的波函数为

$$\psi'(\boldsymbol{r})=\frac{1}{2}\left[\psi_{211}+\sqrt{2}\psi_{210}+\psi_{21-1}\right]$$

说明　氢原子中电子处于球对称的库仑场中，而定态求解问题又没有初条件选择，但得出的解却不具有空间旋转不变性，甚至还可能绕所选 z 轴回转运动. 本来就没有考虑外场，这个 z 轴只是事先随便选择的，实际上并不特殊. 这种对称性缺失，恰恰揭示了对电子状态波函数的准确理解：当外场尚未加上，实验尚未进行，z 轴尚未真正指定时，电子状态波函数只是表示电子处于这种状态时，电子具有的“潜在能力”；当实验进行，某个 z 轴被赋予真实含义时，电子状态波函数就显示电子在测量中的“统计表现”. 微观粒子力学状态波函数，以复函数的形式、以相干性的方式、统一完备地描述了微观粒子力学状态的“潜在能力”和“统计表现”两个方面：在实验测量前，描述了微观粒子在力学运动中所具有的“潜在能力”；在实验测量时，描述着“统计表现”(表现具有力学量的数值及相应概率).

3.16　电子偶素

题 3.16　氢原子的基态能量和 Bohr 半径为

$$E_0=-\frac{e^2}{2a_0},\quad a_0=\frac{\hbar^2}{\mu e^2}$$

其中，μ 是系统的折合质量. $m_\mathrm{e}=9.11\times10^{-28}\mathrm{g}$，$m_\mathrm{p}=1.67\times10^{-24}\mathrm{g}$，$e=1.6\times10^{-19}\mathrm{C}$，$\hbar=1.05\times10^{-27}\mathrm{erg}$[①]$\cdot\mathrm{s}$.

(1) 计算电子偶素的基态能量和 Bohr 半径；

(2) 由于电子有自旋，电子偶素基态的简并度是多少？写出具有确定总自旋值的可能自旋波函数及其相应的本征值；

(3) 电子偶素的基态会发生衰变，湮灭为光子，计算这个过程中释放出的能量和角动量，证明终态至少有两个光子.

解答　(1) 电子偶素的折合质量为电子质量的一半 $\mu=\frac{1}{2}m_\mathrm{e}$，将所给数据代入题设所给公式，得到

$$a_0=1.06\times10^{-8}\mathrm{cm},\quad E_0=-6.8\mathrm{eV}$$

(2) 电子偶素基态的简并度为 4. 记正电子为粒子 1，电子为粒子 2，单个粒子的自旋在 z 方向分量的本征态为 α 和 β. α 和 β 分别对应于本征值 $-\frac{\hbar}{2}$ 和 $\frac{\hbar}{2}$. 则基态的具

① erg 为功的单位, $1\mathrm{erg}=10^{-7}\mathrm{J}$.

有确定总自旋 $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2$ 和总自旋 z 分量 $S_z=S_{1z}+S_{2z}$ 的本征态为

$$\begin{array}{lll}\alpha(1)\alpha(2), & S=\hbar, & S_z=\hbar\\ \dfrac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(2)\beta(2)+\beta(1)\alpha(2)], & S=\hbar, & S_z=0\\ \beta(1)\beta(2), & S=\hbar, & S_z=-\hbar\\ \dfrac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)], & S=0, & S_z=0\end{array}$$

(3) 正负电子湮灭时，放出的能量主要来自于两者的静质量

$$\Delta E=2m_{\mathrm{e}}c^2=1.02\mathrm{MeV}$$

释放出的角动量的大小取决于湮灭前电子偶素所处的状态. 在基态，轨道角动量为 0，没有贡献，所以对 $S=0$ 的态来说，释放的角动量为 0，即没有角动量放出. 对 $S=\hbar$ 的那些态来说，释放出的角动量沿 z 方向的大小可以为 $\hbar$、0、$-\hbar$.

下面来证明终态至少有两个光子. 假设电子偶素湮灭后只放出一个光子，则过程的能量和动量不可能守恒. 道理是这样的：光子只要有能量 E，就一定同时带有大小为 E/c 的动量. 于是光子在任何一个参考系中动量不为 0，而在电子偶素的静止参考系中，过程前后动量都应为 0，因此可以断定终态至少有两个光子.

3.17　电子在势场 $V=kr(k>0)$ 中运动

题 3.17　考虑电子在球对称势中的运动，$V=kr(k>0)$.

(1) 用不确定性关系估计基态能量；

(2) 用 Bohr-Sommerfeld 量子化条件计算基态能量；

(3) 用你选的尝试波函数通过变分原理重复上面的计算；

(4) 精确求解基态的能量本征值和本征函数 (提示：利用 Fourier 变换). 对于非零角动量的态，给出等效势.

解答　(1) 电子能量

$$E=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+kr$$

由不确定性关系可知

$$\overline{r^2}\cdot\overline{\boldsymbol{p}^2}\sim\frac{\hbar^2}{4},\quad \overline{r}\approx\sqrt{\overline{r^2}}$$

我们立刻可算出能量 E 的最小值为

$$E_0\approx\frac{3}{2}(k^2\hbar^2/4m)^{1/3}$$

(2) 按经典图像，设电子做圆轨道运动，Bohr-Sommerfeld 量子化条件为

$$\oint p_\phi\mathrm{d}\phi=n_\phi h$$

圆轨道，半径为 a，基态取 $n_\phi = 1$，

$$p_\phi = m\omega a^2 = \hbar$$

而 $m\omega^2 a = k$，所以

$$a = \left(\frac{\hbar^2}{mk}\right)^{1/3}$$

代入

$$E_0 = \frac{p_\phi^2}{2m}\cdot\frac{1}{a^2} + ka = \frac{3}{2}\left(k^2\hbar^2/m\right)^{1/3}$$

(3) 考虑尝试波函数为 $\psi(r) = \mathrm{e}^{-\lambda r}$，$\lambda$ 为变分参量

$$\bar{H} = \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \left[\frac{3}{2}\cdot\frac{k}{\lambda} + \frac{\hbar^2}{2m}\lambda^2\right]$$

$\dfrac{\delta\bar{H}}{\delta\lambda} = 0$，解得

$$\lambda_0 = \left(\frac{3}{2}\cdot\frac{km}{\hbar^2}\right)^{1/3}$$

所以

$$E_0 = \frac{3}{2}\left(\frac{9k^2\hbar^2}{4m}\right)^{1/3}$$

(4) Schrödinger 方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}\chi + (kr - E)\chi = 0$$

这里，$\chi = rR$，R 为径向波函数. 由于是基态，(θ,φ) 方向的波函数是常数. 作变换

$$y = \left(\frac{2mk}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}\left(r - \frac{E}{k}\right)$$

方程化为 $(\chi(r) = \chi(y))$

$$\frac{\mathrm{d}^2\chi(y)}{\mathrm{d}y^2} - y\chi(y) = 0, \quad y > 0$$

这是 Airy 函数方程.

角动量不为零时的有效势为

$$V_{\text{eff}} = kr + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$$

3.18　重夸克之间近似相互作用势 $V(r)=A+Br$

题 3.18　重夸克之间的相互作用经常用一个自旋无关的非相对论的势来近似，这个势是径向参数 r 的线性函数，这里 $\boldsymbol{r}$ 是夸克之间的相对位移，即 $V(r)=A+Br$. 著名的 J/ψ 粒子 ψ 和 ψ′(静止能量分别为 3.1GeV 和 3.7GeV) 就被认为是质量为 $1.5\mathrm{GeV}/c^2$ 的 c 夸克和相同质量的反夸克在上述线性势下构成的零角动量的 $n=0$ 和 $n=1$ 的束缚态. 类似地，新发现的 γ 和 γ′ 被认为是由 b 夸克及其反夸克在相同的作用势下构成的零角动量的 $n=0$ 和 $n=1$ 的束缚态. b 夸克的静止质量 $m_{\mathrm{b}}=4.5\mathrm{GeV}/c^2$，γ 的静止能量为 9.5GeV.

(1) 用量纲分析方法，推出 γ 和 γ′ 的能量间隔和 ψ 与 ψ′ 的能量间隔的关系；然后，推算静止能量 (所有能量单位均用 GeV 表示)；

(2) 将 $n=2$ 态 (轨道角动量为零) 上的粲粒子称为 ψ″，用 W.K.B 近似法估算 ψ′ 与 ψ″ 之间的能级间隔，并将这个能级间隔用 ψ 与 ψ′ 的能级间隔表示；然后，给出 ψ″ 的静止能量的数值估算.

解答　在夸克和反夸克所组成的质心系中，相对运动方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu^2}\nabla_r^2+V(r)\right]\psi(r)=E_{\mathrm{R}}\psi(r),\quad \mu=\frac{m_{\mathrm{q}}}{2}$$

式中，E_{R} 为相对运动能量，m_{q} 为夸克质量. 在零角动量的情况下，上述方程在球坐标系中的形式为

$$\left[-\frac{2\hbar}{2\mu}\cdot\frac{1}{r^2}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)+V(r)\right]R(r)=E_{\mathrm{R}}R(r)$$

令 $R(r)=\chi_0(r)/r$，则 χ_0 满足方程

$$\frac{\mathrm{d}^2\chi_0}{\mathrm{d}r^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}(E_{\mathrm{R}}-V(r))\chi_0=0 \tag{3.41}$$

以 $V(r)=A+Br$ 代入

$$\frac{\mathrm{d}^2\chi_0}{\mathrm{d}r^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}(E_{\mathrm{R}}-A-Br)\chi_0=0 \tag{3.42}$$

(1) 现在对上述方程作量纲分析

$$[B]=[E][L]^{-1},\quad [\hbar]=[E]^{1/2}[L][m]^{1/2}$$

两式相乘得[①]

$$[E]^{3/2}=[B\hbar][m]^{-1/2}$$

由此

$$E=f(n)(B\hbar)^{2/3}(\mu)^{-1/3}$$

① 一般量纲分析则是根据有关量的量纲表，列量纲指数的线性方程组求解给出量纲指数.

$f(n)$ 是仅与主量子数 n 有关的无量纲常数，则

$$\begin{aligned}\Delta E_{\psi} &= E_{\psi'} - E_{\psi} = f(1)\frac{(B\hbar)^{2/3}}{\mu_{\mathrm{c}}^{1/3}} - f(0)\frac{(B\hbar)^{2/3}}{\mu_{\mathrm{c}}^{1/3}} \\ &= \frac{(B\hbar)^{2/3}}{\mu_{\mathrm{c}}^{1/3}}[f(1)-f(0)]\end{aligned}$$

同理

$$\Delta E_{\mathrm{r}} = \frac{(B\hbar)^{2/3}}{\mu_{\mathrm{b}}^{1/3}}[f(1)-f(0)]$$

则有

$$\frac{\Delta E_{\mathrm{r}}}{\Delta E_{\psi}} = \left(\frac{\mu_{\mathrm{c}}}{\mu_{\mathrm{b}}}\right)^{1/3} = \left(\frac{1}{3}\right)^{1/3}$$

从而

$$E_{\mathrm{r}'} - E_{\mathrm{r}} \approx 0.42\mathrm{GeV}$$

于是

$$E_{\mathrm{r}'} = E_{\mathrm{r}} + 0.42 = 9.5 + 0.42 \approx 9.9(\mathrm{GeV})$$

(2) 由方程 (3.41)，用 W.K.B 近似法可得出 Bohr-Sommerfeld 量子化定则

$$2\int_0^a \sqrt{2\mu(E_{\mathrm{R}} - A - Br)}\mathrm{d}r = (n+\frac{3}{4})\hbar, \quad a = \frac{E_{\mathrm{R}} - A}{B}$$

得出

$$E_n = A + \frac{\left[3\left(n+\frac{3}{4}\right)B\hbar/4\right]^{2/3}}{(2\mu)^{1/3}}$$

由此求得

$$\begin{aligned}E_{\psi'} - E_{\psi} &= \frac{(B\hbar)^{2/3}}{(2\mu_{\mathrm{e}})^{1/3}}\left[\left(\frac{21}{16}\right)^{2/3} - \left(\frac{9}{16}\right)^{2/3}\right] \\ E_{\psi''} - E_{\psi'} &= \frac{(B\hbar)^{2/3}}{(2\mu_{\mathrm{e}})^{1/3}}\left[\left(\frac{33}{16}\right)^{2/3} - \left(\frac{21}{16}\right)^{2/3}\right]\end{aligned}$$

于是

$$\frac{E_{\psi''} - E_{\psi'}}{E_{\psi'} - E_{\psi}} = \frac{(33)^{2/3} - (21)^{2/3}}{(21)^{2/3} - (9)^{2/3}} \approx 0.81$$

从而

$$E_{\psi''} - E_{\psi'} = 0.81 \times (E_{\psi'} - E_{\psi}) = 0.81 \times (3.7 - 3.1) \approx 0.49(\mathrm{GeV})$$

即得 $E_{\psi''} = 3.7 + 0.49 \approx 4.2(\mathrm{GeV})$.

3.19　质子和中子通过交换 $\pi^{\pm}$ 介子产生近似的吸引势 $V(r)=\dfrac{g^2}{d}\exp(-r/d)$

题 3.19　假设质子和中子通过交换 $\pi^{\pm}$ 介子产生下面的近似势：

$$V(r)=\frac{g^2}{d}\exp(-r/d)$$

彼此互相吸引. 其中 $d=\hbar/mc$， m 为 $\pi^{\pm}$ 介子的质量， $mc^2=140\text{MeV}$，质子和中子的质量近似为 $Mc^2=940\text{MeV}$.

(1) 证明适当选取参数 α、β，通过变量代换 $x=\alpha\exp\{-\beta r\}$，可以将该体系 $l=0$ 时的径向 Schrödinger 方程化为 Bessel 方程

$$\frac{\mathrm{d}^2\mathrm{J}_\rho(x)}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{x}\frac{\mathrm{d}\mathrm{J}_\rho(x)}{\mathrm{d}x}+\left(1-\frac{\rho^2}{x^2}\right)\mathrm{J}_\rho(x)=0$$

(2) 假设已知该体系只有一个束缚态，结合能为 2.2MeV，计算 $g^2/\hbar c$ 的数值并指出其单位；

(3) 为使该体系具有两个 $l=0$ 的束缚态， $g^2/\hbar c$ 的最小值应等于多少? (d 和 M 不变.)

解答　(1) $l=0$ 时，径向波函数 $R(r)=\chi(r)/r$ 满足的 Schrödinger 方程为 (约化质量 $\mu=M/2$)

$$\frac{\mathrm{d}^2\chi(r)}{\mathrm{d}r^2}+\frac{M}{\hbar^2}\left(E+\frac{g^2}{d}\mathrm{e}^{-r/d}\right)\chi(r)=0 \tag{3.43}$$

按题意作变量代换，

$$r\to x=\alpha\mathrm{e}^{-\beta r},\quad 0\leqslant x\leqslant\alpha \tag{3.44}$$

α、β 为待定的正参量，并记 $\chi(r)=\mathrm{J}(x)$，则

$$\frac{\mathrm{d}^2\mathrm{J}(x)}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{x}\frac{\mathrm{d}\mathrm{J}(x)}{\mathrm{d}x}+\left[\frac{Mg^2}{\hbar^2d\beta^2}\left(\frac{x}{\alpha}\right)^{\frac{1}{\alpha\beta}}\frac{1}{x^2}+\frac{ME}{\hbar^2\beta^2}\frac{1}{x^2}\right]\mathrm{J}(x)=0 \tag{3.45}$$

若令

$$\alpha=\frac{2g}{\hbar}\sqrt{Md},\quad \beta=\frac{1}{2d} \tag{3.46}$$

并记

$$\rho^2=\frac{4d^2M|E|}{\hbar^2}=-\frac{4d^2ME}{\hbar^2} \tag{3.47}$$

则径向 Schrödinger 方程化成 ρ 阶 Bessel 方程:

$$\frac{\mathrm{d}^2\mathrm{J}(x)}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{x}\frac{\mathrm{d}\mathrm{J}(x)}{\mathrm{d}x}+\left(1-\frac{\rho^2}{x^2}\right)\mathrm{J}(x)=0 \tag{3.48}$$

其满足自然边界条件的解为 ρ 阶 Bessel 函数 $\mathrm{J}_\rho(x)$，图 3.4 绘出了若干 Bessel 函数自变量在 0~10 范围的曲线.

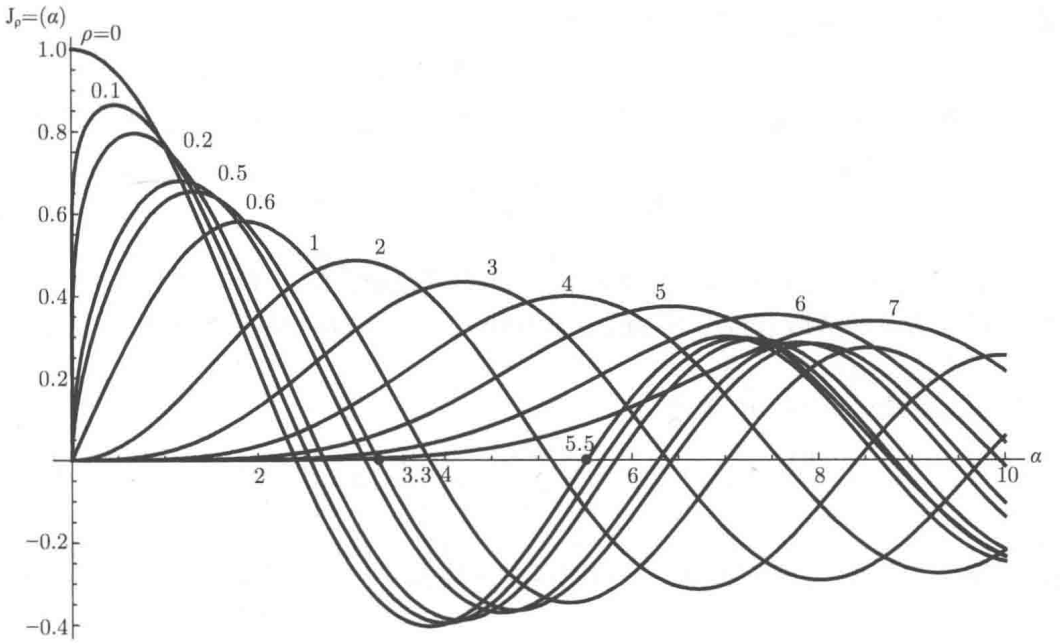


图 3.4　若干 Bessel 函数的自变量在 0 ∼ 10 范围内的曲线

(2) 对于束缚态，要求 $r \to \infty$ 时，$R(r) \to 0$. 满足该条件的解为 (不考虑归一)

$$\chi(r) = \mathrm{J}_\rho\left(\alpha \mathrm{e}^{-\beta r}\right), \quad \rho \geqslant 0 \tag{3.49}$$

另一方面，由 $\chi(0) = 0$，得 $\mathrm{J}_\rho(\alpha) = 0$. 现在已知

$$\rho = \frac{2d}{\hbar}\sqrt{M|E|} = \frac{2}{mc^2}\sqrt{Mc^2|E|} = \frac{2}{140}\sqrt{940 \times 2.2} \approx 0.6 \tag{3.50}$$

根据 $\mathrm{J}_\rho(x)$ 的数值曲线，可以看出 $\rho = 0.6$ 时，函数 $\mathrm{J}_\rho(x)$ 在正实轴上的第一个零点值为 3.3，这给出只具有一个束缚态的势阱的如下 α 值：

$$\alpha \approx 3.3 \tag{3.51}$$

于是，容易求出

$$\frac{g^2}{\hbar c} = \frac{\hbar\alpha^2}{4Mcd} = \frac{mc^2\alpha^2}{4Mc^2} = \frac{140 \times (3.3)^2}{4 \times 940} \approx 0.4 \tag{3.52}$$

(3) $\mathrm{J}_0(\alpha)$ 在正实轴上的第二个零点是 $\alpha = 5.5$. 观察图 3.4，不难发现，当 $\alpha < 5.5$ 时，给定 α 值，只存在一个正实数 ρ，使得 $\mathrm{J}_\rho(\alpha) = 0$，这时无论如何只能给出一个束缚态. 因此，要得到两个 $l = 0$ 的束缚态，必须 $\alpha \geqslant 5.5$，于是 $g^2/\hbar c$ 的最小值为

$$\left(\frac{g^2}{\hbar c}\right)_{\min} = \frac{mc^2\alpha_{\min}^2}{4Mc} = \frac{140 \times (5.5)^2}{4 \times 940} \approx 1.1 \tag{3.53}$$

3.20　中心力场束缚态的一个重要关系

题 3.20　证明在非相对论量子力学中，对于中心势场 $V(r)$ 中的任何单粒子束缚定态有下列关系式成立：

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right\rangle - \left\langle \frac{\boldsymbol{L}^2}{\mu r^3} \right\rangle = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu}|\psi_E(0)|^2 \tag{3.54}$$

其中，$\psi(0)$ 是原点波函数，$V(r)$ 为势能，μ 为粒子质量，$\boldsymbol{L}^2$ 为角动量平方 (令 $\hbar=1$). 在角动量不为零的情形下给出方程的经典解释 (设式 (3.54) 中各项均有意义，即 $\psi(0)$ 有限，期望值收敛).

证明　**证法一**　Hamilton 量为

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{2\mu r^2}\boldsymbol{L}^2 + V(r) \tag{3.55}$$

先计算算符 $\dfrac{\partial}{\partial r}$ 与 H 的对易式. 我们知道在球坐标下，角动量算符 $\boldsymbol{L}$ 只含有角度变量，因此

$$\left[\frac{\partial}{\partial r}, H\right] = \frac{\hbar^2}{\mu r^2}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\boldsymbol{L}^2}{\mu r^3} + \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \tag{3.56}$$

设粒子处在某一个任意选取的束缚定态 ψ_E(能量确定)，式 (3.56) 两边对该态取期望值，则由能量本征方程及其 Hermite 共轭式知左边贡献为 0，所以

$$\begin{aligned}\left\langle \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right\rangle - \left\langle \frac{\boldsymbol{L}^2}{\mu r^3} \right\rangle &= -\frac{\hbar^2}{\mu}\left\langle \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r} \right\rangle = -\frac{\hbar^2}{\mu}\int \psi_E^* \frac{1}{r^2}\frac{\partial \psi_E}{\partial r} r^2 \mathrm{d}r\mathrm{d}\Omega \\ &= -\frac{\hbar^2}{\mu}\int \mathrm{d}\Omega \int_0^\infty \psi_E^* \frac{\partial \psi_E}{\partial r}\mathrm{d}r \end{aligned} \tag{3.57}$$

上式左端之期望值为实数量，则右端也应当为实数量，因此，

$$\begin{aligned}\int_0^\infty \psi_E^* \frac{\partial \psi_E}{\partial r}\mathrm{d}r &= \int_0^\infty \psi_E \frac{\partial \psi_E^*}{\partial r}\mathrm{d}r = \frac{1}{2}\int_0^\infty \frac{\partial}{\partial r}(\psi_E^*\psi_E)\mathrm{d}r \\ &= \frac{1}{2}\psi_E^*\psi_E\Big|_{r=0}^{\infty} = -\frac{1}{2}|\psi_E(0)|^2 \end{aligned} \tag{3.58}$$

将式 (3.58) 代入式 (3.57)，并计及 $\int \mathrm{d}\Omega = 4\pi$，即得式 (3.54)，即为所证.

现考虑束缚定态波函数 ψ_E 是 $(H, \boldsymbol{L}^2, L_z)$ 的共同本征函数，即

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) \tag{3.59}$$

这时式 (3.54) 中 $\boldsymbol{L}^2$ 可以用本征值 $l(l+1)\hbar^2$ 代替. 由于只有 s 态 $(l=0)\psi_E(0)$ 才不等于 0，因此式 (3.54) 等价于

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right\rangle = \frac{2\pi\hbar^2}{\mu}|\psi_E(0)|^2, \quad l=0(\text{s 态}) \tag{3.60}$$

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right\rangle = \left\langle \frac{\boldsymbol{L}^2}{\mu r^3} \right\rangle = l(l+1)\frac{\hbar^2}{\mu}\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle, \quad l \neq 0 \tag{3.60'}$$

接下来我们尝试对上述结果的物理意义作一讨论. 式 (3.60) 显含 $\hbar$，所以是量子效应，没有经典对应. 下面讨论式 (3.60′) 可能的经典对应. 经典力学中，粒子在中心力场中运动时，能量 E、角动量 $\boldsymbol{L}$ 均守恒. 对于任何周期性轨道，均有

$$E=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}+V(r)=\frac{\mu}{2}\left(\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\right)^2+\frac{\boldsymbol{L}^2}{2\mu r^2}+V(r) \tag{3.61}$$

由于能量 E、角动量 $\boldsymbol{L}$ 守恒，上式对 r 求导，得到

$$\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}-\frac{\boldsymbol{L}^2}{\mu r^3}=-\frac{\mu}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\cdot\left(\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\right)^2=-\mu\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\right)=-\mu\frac{\mathrm{d}^2r}{\mathrm{d}t^2}$$

或者

$$-\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}+\frac{\boldsymbol{L}^2}{\mu r^3}=\mu\frac{\mathrm{d}^2r}{\mathrm{d}t^2}$$

此式即粒子在有心力场中运动的径向方程[①]，其中 $-\dfrac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}$ 为粒子所受有心力 (沿径向)，而 $\dfrac{\boldsymbol{L}^2}{\mu r^3}$ 为离心力. 对于圆轨道 $r=\text{const.}$，则有 $\dfrac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}=\dfrac{\boldsymbol{L}^2}{\mu r^3}$，也就是粒子所受有心力与离心力平衡. 对于周期运动，则对上式两边求周期期望值，即得

$$\left(\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right)_{\text{平均}}-\frac{\boldsymbol{L}^2}{\mu}\left(\frac{1}{r^3}\right)_{\text{平均}}=-\frac{\mu}{\oint\mathrm{d}t}\oint\mathrm{d}t\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\right)=-\mu\oint\mathrm{d}\left(\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\right)/\oint\mathrm{d}t=0$$

或者

$$\left(\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right)_{\text{平均}}=\frac{\boldsymbol{L}^2}{\mu}\left(\frac{1}{r^3}\right)_{\text{平均}} \tag{3.62}$$

可见粒子所受有心力与离心力的周期期望值相等. 对于非周期运动，如在平方反比力场中沿抛物线或者双曲线轨道运动，此时不存在式 (3.62) 这样的式子. 经典粒子在有心力场中做周期运动，粒子局限在有限区域中运动，且能量守恒，这是一种束缚定态. 我们可以说，式 (??) 或者式 (3.54) 是式 (3.62) 的量子力学推广.

本题解答到此已经完整. 下面关于式 (3.54) 我们再提出 3 种新证法，并附上对一般束缚态式 (3.54) 是否成立的讨论.

证法二　定态 Schrödinger 方程可写为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r+\frac{1}{2\mu r^2}\boldsymbol{L}^2+V(r)\right]\psi_E=E\psi_E \tag{3.63}$$

令 $\chi=r\psi_E$，则

$$\left[\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial r^2}-\frac{1}{2\mu r^2}\boldsymbol{L}^2+E-V(r)\right]\chi=0 \tag{3.64}$$

上式两边对 r 求导得

$$\left[\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial r^2}-\frac{1}{2\mu r^2}\boldsymbol{L}^2+E-V(r)\right]\frac{\partial}{\partial r}\chi=\left(\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}-\frac{1}{\mu r^3}\boldsymbol{L}^2\right)\chi \tag{3.65}$$

① 例如参见文献 Goldstein H., Poole C., Safko J., 经典力学 (影印版)(第 3 版)(Classical Mechanics (3rd Edition)), 北京: 高等教育出版社,2005, P.72-76.

上式两边左乘以 χ^*，并对全空间积分 $\int \mathrm{d}\Omega\mathrm{d}r$，因 $\chi = r\psi_E$ (不妨设 ψ_E 已归一化)，则等号右边给出 $\left\langle \dfrac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right\rangle - \left\langle \dfrac{\boldsymbol{L}^2}{\mu r^3} \right\rangle$，即式 (3.54) 的左边. 左边作全空间积分时，我们采用分部积分的办法，使得作用到 χ 上面的微分算符 $\dfrac{\partial^2}{\partial r^2}$ 与 $\boldsymbol{L}^2$ 全部改为作用到 χ^* 上，并利用式 (3.64) 的复数共轭式，给出零的结果. $\boldsymbol{L}$ 是 Hermite 算符，朝前作用与朝后作用相同. $-\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial r}$ 不是 Hermite 算符，朝前作用与朝后作用结果则不相同. 因此对积分变量 r 作分部积分时，我们须小心地保留边界项. 这样式 (3.65) 左边全空间积分后的结果是

$$\begin{aligned} &\frac{\hbar^2}{2\mu}\int \mathrm{d}\Omega \left(\chi^* \frac{\partial}{\partial r}\frac{\partial}{\partial r}\chi \Big|_{r=0}^{\infty} - \frac{\partial}{\partial r}\chi^* \cdot \frac{\partial}{\partial r}\chi \Big|_{r=0}^{\infty} \right) \\ = \ &\frac{\hbar^2}{2\mu}\int \mathrm{d}\Omega \left| \frac{\partial}{\partial r}\chi(0) \right|^2 = 4\pi\frac{\hbar^2}{2\mu}\left| \frac{\partial}{\partial r}\chi(0) \right|^2 \end{aligned} \tag{3.66}$$

由 $\chi = r\psi_E$ 知 $\dfrac{\partial}{\partial r}\chi(0) = \psi_E(0)$. 从而上式结果即式 (3.54) 的右边. 这样我们完成了式 (3.54) 的证明.

证法三　在球坐标下，角动量算符 $\boldsymbol{L}$ 只含有角度变量，故知 $\left[\dfrac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}, \boldsymbol{L}\right] = 0$ 以及 $\left[\dfrac{\boldsymbol{L}^2}{\mu r^3}, \boldsymbol{L}\right] = 0$，并有 $\left[\dfrac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}, \boldsymbol{L}^2\right] = 0$ 以及 $\left[\dfrac{\boldsymbol{L}^2}{\mu r^3}, \boldsymbol{L}^2\right] = 0$. 考虑 $\dfrac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}L_z$ 在不同角动量态下的矩阵元

$$\left\langle lm \left| \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}L_z \right| l'm' \right\rangle = m \left\langle lm \left| \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right| l'm' \right\rangle = m' \left\langle lm \left| \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right| l'm' \right\rangle$$

若 $m \neq m'$，则必有 $\left\langle lm \left| \dfrac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right| l'm' \right\rangle = 0$，同理 $\left\langle lm \left| \dfrac{\boldsymbol{L}^2}{\mu r^3} \right| l'm' \right\rangle = 0$. 考虑 $\left\langle lm \left| \dfrac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\boldsymbol{L}^2 \right| l'm' \right\rangle$，则可证若 $l \neq l'$，则必有 $\left\langle lm \left| \dfrac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \right| l'm' \right\rangle = 0$，同理 $\left\langle lm \left| \dfrac{\boldsymbol{L}^2}{\mu r^3} \right| l'm' \right\rangle = 0$.

归一化束缚定态 ψ_E 总可以用 $(H, \boldsymbol{L}^2, L_z)$ 的共同本征函数 ψ_{nlm} 展开，即

$$\psi_E = \sum_{lm} c_{lm}\psi_{nlm}$$

按上面结论得到

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} - \frac{\boldsymbol{L}^2}{\mu r^3} \right\rangle_E = \sum_{lm} |c_{lm}|^2 \left\langle \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} - \frac{\boldsymbol{L}^2}{\mu r^3} \right\rangle_{nlm} \tag{3.67}$$

上式期望值下标 E 表示对态 ψ_E 求平均，而下标 nlm 表示态 ψ_{nlm} 求平均. 在右边的求和中，不同角动量态的交叉项 ($l \neq l', m \neq m'$ 的项) 不出现. 再考虑到式 (3.54) 右边唯一非零的情形 s 态非简并，从上式知欲对束缚定态 ψ_E 式 (3.54) 成立，只需证明对每一个 ψ_{nlm} 式 (3.54) 成立即可.

现对态 ψ_{nlm} 证明式 (3.54) 成立. 这时算符 $\boldsymbol{L}^2$ 取本征值 $l(l+1)\hbar^2$，而波函数可以写成

$$\psi_{nlm}=\frac{1}{r}u(r)\mathrm{Y}_{lm} \tag{3.68}$$

其中，$u(r)$ 可取为实函数，即满足 $u(r)^*=u(r)$. $u(r)$ 满足方程

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}u+\left[\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]u=0 \tag{3.69}$$

或者

$$\frac{2\mu(V-E)}{\hbar^2}+\frac{l(l+1)}{r^2}=\frac{u''}{u}$$

此式两边再对 r 求导得

$$\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}-\frac{2l(l+1)}{r^3}=\left(\frac{u''}{u}\right)'$$

上面方程两边对 ψ_{nlm} 态取平均得

$$\begin{aligned}\frac{2\mu}{\hbar^2}\left\langle\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right\rangle-2l(l+1)\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle &= \int_0^\infty \mathrm{d}r u^2\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}=\int_0^\infty u^2\left(\frac{u''}{u}\right)'\mathrm{d}r\\ &= -2\int_0^\infty u''u'\mathrm{d}r=[u'(0)]^2\end{aligned} \tag{3.70}$$

式中用了束缚态所应满足的边界条件 $u|_{r\to\infty}=0$.

由式 (3.68)，$\psi+r\dfrac{\partial}{\partial r}\psi=u'\mathrm{Y}_{lm}$，故 $r=0$ 处，$u'(0)\mathrm{Y}_{lm}=\psi_{nlm}(0)$. 对于 $l=0$，因 $\mathrm{Y}_{00}=1/\sqrt{4\pi}$，故 $u'(0)=\sqrt{4\pi}\psi_{n00}(0)$；对于 $l\neq 0$，$\psi_{nlm}(0)=0$，故 $u'(0)=0$. 将 $u'(0)$ 的结果代入式 (3.70)，即得 ψ_{nlm} 满足式 (3.54). 综上我们完成了式 (3.54) 的证明.

证法四　上面证法三得到了式 (3.69)，该式两边乘以 $u'(r)$，并对 r 积分，得

$$\int u'(r)u''(r)\mathrm{d}r+\int\left[2m(E-V(r))-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\cdot\frac{1}{2}u^2(r)\mathrm{d}r=0$$

分部积分之，并利用 $u'(\infty)=0$，$u(\infty)=u(0)=0$，以及

$$u'(0)=[R_{nl}(r)+rR'_{nl}(r)]_{r=0}=R(0),\quad u(r)=rR_{nl}(r)$$

即可得

$$-\frac{1}{2}R_{nl}^2(0)+\frac{1}{2}\left[2m\int R_{nl}^2\frac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}r^2\mathrm{d}r-\int\frac{2l(l+1)}{r^3}R_{nl}^2r^2\mathrm{d}r\right]=0$$

对于 $l=0$，因 $\mathrm{Y}_{00}=1/\sqrt{4\pi}$，故 $\psi_{n00}(0)=\sqrt{4\pi}R_{n0}^2(0)$，而对于 $l\neq 0$，$\psi_{nlm}(0)=0$，所以

$$\begin{aligned}|\psi_{nlm}(0)|^2 &= \frac{1}{4\pi}R_{nl}^2(0)\\ &= \frac{m}{2\pi}\int|R_{nl}(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)|^2\frac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}r^2\mathrm{d}r\mathrm{d}\Omega\end{aligned}$$

$$-\frac{1}{2\pi}\int [R_{nl}(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)]\,\frac{\boldsymbol{L}^2}{r^3}\,[R_{nl}(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)]\cdot r^2\mathrm{d}r\mathrm{d}\Omega$$

即得 ψ_{nlm} 满足式 (3.54).

讨论　以上的证明用了束缚定态的条件. 若是一般束缚态，而不是束缚定态，我们来讨论式 (3.54) 是否成立. 若令

$$\Lambda=\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}-\frac{\boldsymbol{L}^2}{\mu r^3} \tag{3.71}$$

一般 $[\Lambda,H]\neq 0$，故 Λ 不是守恒量. 兹举氢原子的例子，其 Hamilton 量为 $H=\dfrac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}-\dfrac{e^2}{r}$，因而

$$\Lambda=\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}-\frac{\boldsymbol{L}^2}{\mu r^3}=\frac{e^2}{r^2}-\frac{\boldsymbol{L}^2}{\mu r^3} \tag{3.72}$$

这样

$$\begin{aligned}[\Lambda,H] &= \left[\Lambda,\frac{p_r^2}{2\mu}+\frac{1}{2\mu r^2}\boldsymbol{L}^2+V(r)\right]\\ &= \left[\frac{e^2}{r^2}-\frac{\boldsymbol{L}^2}{\mu r^3},\frac{p_r^2}{2\mu}\right]=\frac{e^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2},p_r^2\right]-\frac{\boldsymbol{L}^2}{2\mu^2}\left[\frac{1}{r^3},p_r^2\right]\end{aligned} \tag{3.73}$$

在坐标表象 $p_r=-\mathrm{i}\hbar\left(\dfrac{\partial}{\partial r}+\dfrac{1}{r}\right)$，因而

$$\begin{aligned}\left[\frac{1}{r^2},p_r^2\right] &= \left[\frac{1}{r^2},p_r\right]p_r+p_r\left[\frac{1}{r^2},p_r\right]=-2\mathrm{i}\hbar\left(p_r\frac{1}{r^3}+\frac{1}{r^3}p_r\right)\\ &= -2\mathrm{i}\hbar\left\{\left[p_r,\frac{1}{r^3}\right]+\frac{2}{r^3}p_r\right\}=-2\mathrm{i}\hbar\left\{\frac{3\mathrm{i}\hbar}{r^4}+\frac{2\mathrm{i}\hbar}{r^3}\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)\right\}\\ &= 4\hbar^2\frac{1}{r^3}\frac{\partial}{\partial r}+10\hbar^2\frac{1}{r^4}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\left[\frac{1}{r^3},p_r^2\right] &= \left[\frac{1}{r^3},p_r\right]p_r+p_r\left[\frac{1}{r^3},p_r\right]=-3\mathrm{i}\hbar\left(p_r\frac{1}{r^4}+\frac{1}{r^4}p_r\right)\\ &= -3\mathrm{i}\hbar\left\{\left[p_r,\frac{1}{r^4}\right]+\frac{2}{r^4}p_r\right\}=-3\mathrm{i}\hbar\left\{\frac{4\mathrm{i}\hbar}{r^5}+\frac{2\mathrm{i}\hbar}{r^4}\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)\right\}\\ &= 6\hbar^2\frac{1}{r^4}\frac{\partial}{\partial r}+12\hbar^2\frac{1}{r^5}\end{aligned}$$

把上面结果代入式 (3.73) 得

$$[\Lambda,H]=\frac{e^2\hbar^2}{\mu}\left[\frac{2}{r^3}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{5}{r^4}\right]-\frac{3e^2a\boldsymbol{L}^2}{\mu}\left[\frac{1}{r^4}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{2}{r^5}\right]\neq 0$$

可见 Λ 不是守恒量. 既然如此，它在体系非定态的时间演化态下的期望值一般随时间变化. 而式 (3.54) 对于 $l\neq 0$ 则意味着 Λ 的期望值总是零，这与 Λ 不是守恒量不一致. 因此，我们预想式 (3.54) 对于非定态情形不一定成立.

不妨举一个非定态的例子作具体计算. 设 $t=0$ 时，氢原子中的电子初态处于

$$\psi(\boldsymbol{x},0)=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{210}+\psi_{310}) \tag{3.74}$$

我们对此初态计算，则式 (3.54) 右边为

$$\frac{2\pi\hbar^2}{\mu}|\psi(\boldsymbol{0},0)|^2=0 \tag{3.75}$$

现计算左边. 对于束缚定态 ψ_{210} 以及 ψ_{310}，式 (3.54) 成立，这样在式 (3.74) 的态下

$$\begin{aligned}\left\langle\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right\rangle-\left\langle\frac{\boldsymbol{L}^2}{\mu r^3}\right\rangle &= \frac{1}{2}\left(\left\langle 210+310\left|\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right|210+310\right\rangle-\left\langle 210+310\left|\frac{\boldsymbol{L}^2}{\mu r^3}\right|210+310\right\rangle\right)\\ &= \frac{1}{2}\left(\left\langle 210\left|\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right|310\right\rangle-\left\langle 210\left|\frac{\boldsymbol{L}^2}{\mu r^3}\right|310\right\rangle+c.c.\right)\end{aligned} \tag{3.76}$$

式中，$\dfrac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}=\dfrac{e^2}{r^2}$，其中量子数 210、310 与 ψ_{210} 与 ψ_{310} 态一致. 在 ψ_{210} 与 ψ_{310} 态下，$\boldsymbol{L}^2=2\hbar^2$，这样 $\dfrac{\boldsymbol{L}^2}{\mu r^3}=\dfrac{2\hbar^2}{\mu r^3}=\dfrac{2e^2a}{r^3}$. $\psi_{210}=R_{21}\mathrm{Y}_{10}$，$\psi_{310}=R_{31}\mathrm{Y}_{10}$，而 R_{21} 与 R_{31} 如下给出[①]:

$$R_{21}=\frac{1}{2\sqrt{6}a^{3/2}}\frac{r}{a}\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a}},\quad R_{31}=\frac{8}{27\sqrt{6}a^{3/2}}\frac{r}{a}\left(1-\frac{r}{6a}\right)\mathrm{e}^{-\frac{r}{3a}} \tag{3.77}$$

因而

$$\begin{aligned}\left\langle 210\left|\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right|310\right\rangle &= \int\mathrm{d}\Omega\int_0^\infty\mathrm{d}r r^2R_{21}\mathrm{Y}_{10}^*\frac{e^2}{r^2}R_{31}\mathrm{Y}_{10}=e^2\int_0^\infty R_{21}R_{31}\mathrm{d}r\\ &= e^2\int_0^\infty\frac{8}{2\sqrt{6}\times27\sqrt{6}a^3}\frac{r}{a}\cdot\frac{r}{a}\left(1-\frac{r}{6a}\right)\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a}-\frac{r}{3a}}\mathrm{d}r\\ &= \frac{2e^2}{81a^2}\int_0^\infty\left(x^2-\frac{1}{6}x^3\right)\mathrm{e}^{-\frac{5}{6}x}\mathrm{d}x=\frac{2e^2}{81a^2}\left[2\cdot\left(\frac{6}{5}\right)^3-\frac{1}{6}\cdot6\cdot\left(\frac{6}{5}\right)^4\right]\\ &= \frac{64e^2}{1875a^2}\end{aligned} \tag{3.78}$$

上面用了积分公式 (A.10)，同样

$$\begin{aligned}\left\langle 210\left|\frac{\boldsymbol{L}^2}{\mu r^3}\right|310\right\rangle &= \int\mathrm{d}\Omega\int_0^\infty\mathrm{d}r r^2R_{21}\mathrm{Y}_{10}^*\frac{2e^2a}{r^3}R_{31}\mathrm{Y}_{10}=e^2\int_0^\infty R_{21}R_{31}\mathrm{d}r\\ &= 2e^2a\int_0^\infty\frac{8}{2\sqrt{6}\times27\sqrt{6}a^3}\frac{1}{a}\cdot\frac{r}{a}\left(1-\frac{r}{6a}\right)\mathrm{e}^{-\frac{r}{2a}-\frac{r}{3a}}\mathrm{d}r\\ &= \frac{4e^2}{81a^2}\int_0^\infty\left(x-\frac{1}{6}x^2\right)\mathrm{e}^{-\frac{5}{6}x}\mathrm{d}x=\frac{4e^2}{81a^2}\left[\left(\frac{6}{5}\right)^2-\frac{1}{6}\cdot2\cdot\left(\frac{6}{5}\right)^3\right]\\ &= \frac{16e^2}{375a^2}\end{aligned} \tag{3.79}$$

① 曾谨言, 量子力学 (第 5 版卷 I)[M], 北京: 科学出版社, 2013, P.218～219.

这样

$$\left\langle 210\left|\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right|310\right\rangle-\left\langle 210\left|\frac{\boldsymbol{L}^2}{\mu r^3}\right|310\right\rangle=-\frac{16e^2}{1875a^2} \tag{3.80}$$

结果是一个实数量，代入式 (3.76) 即得

$$\left\langle\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right\rangle-\left\langle\frac{\boldsymbol{L}^2}{\mu r^3}\right\rangle=-\frac{16e^2}{1875a^2}\neq 0 \tag{3.81}$$

这是式 (3.54) 的左边，它不等于零；但我们在式 (3.75) 给出式 (3.54) 的右边等于零. 可见对于我们构造的束缚定态的叠加态 $\psi(\boldsymbol{0},0)=\dfrac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{210}+\psi_{310})$，式 (3.54) 并不成立.

相应于式 (3.74) 初态的时间演化态为

$$\psi(\boldsymbol{x},t)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{210}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_2t/\hbar}+\psi_{310}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_3t/\hbar}\right) \tag{3.82}$$

其中，$E_2=-\dfrac{e^2}{8a}$，$E_3=-\dfrac{e^2}{18a}$. 我们对此演化态计算，则只需将式 (3.78)、式 (3.79) 的结果乘以因子

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_3-E_2)t/\hbar}$$

代入式 (3.76) 即得

$$\left\langle\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\right\rangle_t-\left\langle\frac{\boldsymbol{L}^2}{\mu r^3}\right\rangle_t=-\frac{16e^2}{1875a^2}\cos\omega_{23}t \tag{3.83}$$

其中，$\omega_{23}=(E_3-E_2)/\hbar$. 结果表现为随时间振荡的行为，这与我们预想的一致.

粒子束缚态定义为粒子出现概率集中在有限区域 (离开该有限区域足够远的区域内粒子出现总概率足够小) 的态，因此束缚态的叠加态仍是束缚态. 定态则是确定能量的态，因此不同能量定态的叠加就不再是定态. 我们上面举的例子中，式 (3.74) 或者式 (3.82) 为束缚定态的叠加态，它仍是束缚态，但不再是定态；在该态下，本题所讨论的关系式并不成立. 由此可知，对本题所讨论的关系式，束缚定态是其成立的必要条件.

说明　本题解答和讨论也见：张鹏飞等, 关于有心力场束缚定态的一个关系式, 大学物理, vol.30(12): 4-7(2011).

3.21　有限深球方势阱中的束缚态

题 3.21　一个质量为 m 的无自旋粒子，约束在一半径为 r_0 的有限深球方势阱内.

(1) 为了获得两个零角动量的束缚态，势阱的最小深度为多少?

(2) 在这个势阱深度下，属于零角动量的 Hamilton 量本征值为多少?

(3) 如果粒子处于基态，在坐标基下画出波函数和与之相应的概率分布. 详细解释后者的物理意义;

(4) 用这一波函数预言对粒子动能的单次测量的结果，可以将之表示成一维定积分的形式；

(5) 在不确定性关系基础上，给出 (3) 和 (4) 联系的定性分析.

解答　(1) 径向波函数 $R(r)=\chi(r)/r$ 满足的 Schrödinger 方程 ($l=0$)

$$\begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}r^2}-V_0\chi=E\chi, & 0<r<r_0 \\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}r^2}=E\chi, & r_0<r<\infty \end{cases} \tag{3.84}$$

边界条件 $\chi(0)=0$，$\chi(\infty)$ 有限. 于是，波函数应取

$$\chi(r)=\begin{cases} \sin\alpha r, & 0\leqslant r\leqslant r_0, \\ B\mathrm{e}^{-\beta r}, & r_0<r<\infty \end{cases} \tag{3.85}$$

其中，$\alpha=\sqrt{2m(V_0+E)}/\hbar$，$\beta=\sqrt{2m|E|}/\hbar$，相应于束缚态，能量本征值 E 为负，即 $E<0$. 由 $r=r_0$ 处波函数连续及波函数的一阶导数连续

$$\begin{aligned} A\sin\alpha r_0&=B\mathrm{e}^{-\beta r_0} \\ A\alpha\cos\alpha r_0&=-B\beta\mathrm{e}^{-\beta r_0} \end{aligned}$$

由此得

$$\beta=-\alpha\cot\alpha r_0$$

定义 $\xi=\alpha r_0$，$\eta=\beta r_0$ 则得出

$$\begin{aligned} \xi^2+\eta^2&=2mV_0r_0^2/\hbar^2 \\ -\xi\cot\xi&=\eta \end{aligned} \tag{3.86}$$

有两个束缚态的条件是式 (3.86)所描述的曲线半径大于等于 $3\pi/2$，可以求出势阱深度满足

$$\frac{2mV_0r_0^2}{\hbar^2}\geqslant\left(\frac{3\pi}{2}\right)^2$$

因此最小势阱深度为

$$(V_0)_{\min}=\frac{9\pi^2\hbar^2}{8mr_0^2} \tag{3.87}$$

(2) 在第 (1) 小题的势阱深度下，有 $\eta=0$，$\xi=3\pi/2$，所求 Hamilton 量的本征值 $E_2=0$. 另外设基态能量为

$$E_1=-\frac{\beta^2\hbar^2}{2m}$$

联立式 (3.86)、式 (3.87)，可得 β 满足的方程

$$-\frac{1}{r_0}\left(\frac{3\pi}{2}\right)\sqrt{1-\left(\frac{2\beta r_0}{3\pi}\right)^2}\cot\frac{3\pi}{2}\sqrt{1-\left(\frac{2\beta r_0}{3\pi}\right)^2}=\beta \tag{3.88}$$

(3) 归一化后的基态波函数为

$$\chi(r)=\begin{cases}A\sin\alpha r, & 0\leqslant r\leqslant r_0\\ A\sin\alpha r_0\cdot \mathrm{e}^{\beta(r_0-r)}, & r>r_0\end{cases} \tag{3.89}$$

归一化常数为

$$\frac{1}{A^2}=\frac{1}{2\alpha}(\alpha r_0-\sin\alpha r_0\cos\alpha r_0)+\frac{1}{2\beta}\sin^2\alpha r_0 \tag{3.90}$$

而 α、β 的意义已在第 (1)、第 (2) 小题中给出. 基态径向波函数和与之相应的概率分布如图 3.5所示. 由其波函数与概率分布可知，粒子在 $r<r_0$ 区域中的概率很大，在 r_0 外呈指数衰减，故可认为粒子被束缚在此球方势阱中.

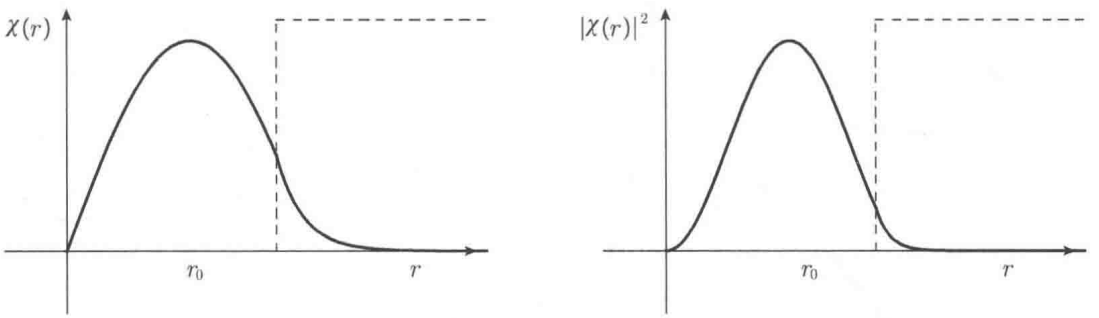


图 3.5　基态径向波函数和概率分布

(4) 粒子动能 $E_t=p^2/2m$ 是动量 p 的函数，故对粒子动能的测量概率等同于对动量大小 p 的测量概率 $|\psi(p)|^2$. $\psi(\boldsymbol{p})$ 是基态坐标波函数的 Fourier 变换，而 $\psi(p)$ 是对 $\psi(\boldsymbol{p})$ 在 4π 立体角内作积分，且因为 $\psi(\boldsymbol{p})$ 各向同性，故有 $|\psi(p)|^2=4\pi|\psi(\boldsymbol{p})|^2$，不妨设 $\boldsymbol{p}$ 沿 z 轴，则

$$\begin{aligned}|\psi(p)|^2 &= 4\pi|\psi(\boldsymbol{p})|^2=\left|\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\cdot\int\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\frac{\chi(r)}{r}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}\mathrm{d}\boldsymbol{r}\right|^2\\ &= \frac{1}{4\pi(2\pi\hbar)^3}\left|\int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi}\frac{\chi(r)}{r}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}pr\cos\theta/\hbar}\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi\cdot r^2\mathrm{d}r\right|^2\\ &= \frac{1}{2\pi^2\hbar^2}\left|\int_0^\infty\frac{\chi(r)}{r}\frac{\sin\left(\frac{pr}{\hbar}\right)}{\left(\frac{pr}{\hbar}\right)}r^2\mathrm{d}r\right|^2\end{aligned} \tag{3.91}$$

代入第 (3) 小题中的 $\chi(r)$ 表达式 (3.89)即可积出.

平均动能的数值为

$$\begin{aligned}\overline{E_k} &= \langle\psi_1|\frac{p^2}{2m}|\psi_1\rangle=E_1-\langle\psi_1|V|\psi_1\rangle\\ &= E_1+V_0\int_0^{r_0}A^2\sin^2\alpha r\cdot\frac{1}{r^2}\cdot r^2\mathrm{d}r\cdot 4\pi\\ &= E_1+2\pi V_0A^2\left(r_0-\frac{\sin 2\alpha r_0}{2\alpha}\right)\end{aligned} \tag{3.92}$$

(5) 由上述讨论可知，第 (3) 小题中的空间波函数给出了空间的概率分布，而第 (4) 小题中 p 空间波函数给出了动量的概率分布，这两者的弥散特征量之积应满足如下不确定性关系：

$$\Delta p \Delta r \geqslant \hbar/2$$

即两者的“胖瘦”应该是互补的.

3.22　有限深球方势阱存在束缚态的条件

题 3.22　(1) 一个质量为 m 的粒子在三维球方势阱中运动. 证明对于一个半径为 R 的方阱，只有当阱深大于某一极小值时，才可能有束缚态存在 (图 3.6(a)). 计算此极小值；

(2) 在一维问题中有一类似的结果 (图 3.6(b))，那个结果是什么?

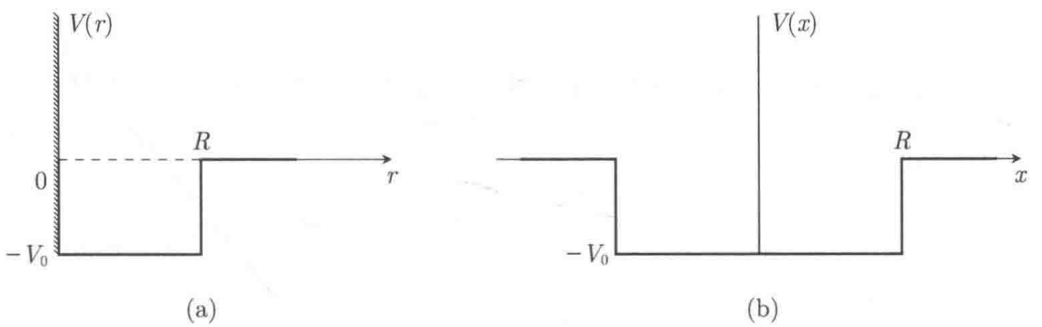


图 3.6　有限深球方势阱存在束缚态的条件与一维问题中相应类似的结果

(3) 你能证明第 (1)，(2) 小题结果中的一般性质对任意形状的势阱均成立吗? 例如，在第 (2) 小题一维情况 (2) 中. 当

$$V(x)=\begin{cases}\lambda f(x)<0, & a\leqslant x\leqslant b\\ 0, & x<a\text{或}x>b\end{cases}$$

时，保持 $f(x)$ 不变，讨论不同的 λ 值.

解答　(1) 假定存在一束缚态 $\psi(\boldsymbol{r})$，并假定它为基态 (基态必有角量子数 $l=0$)，$\psi(\boldsymbol{r})=\psi(r)$. 令 $\chi(r)=r\psi(r)$，Schrödinger 方程为 $(E<0)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\chi(r)}{\mathrm{d}r^2}+V(r)\chi(r)=E\chi(r) \tag{3.93}$$

其中

$$V(r)=\begin{cases}0, & r>R\\ -V_0, & 0<r<R\end{cases} \tag{3.94}$$

式 (3.93)与一维半壁无限高势垒情况完全相同，也与一维方势垒的奇宇称情况完全相同，解得

$$\chi(r)=\begin{cases}A\sin kr, & r<R\\ B\mathrm{e}^{-k'r}, & r>R\end{cases} \tag{3.95}$$

其中，A、B 是归一化常数，$k=\sqrt{2m(E+V_0)/\hbar^2}$，$k'=\sqrt{-2mE/\hbar^2}$. 利用在 $r=R$ 处的边界条件

$$[\ln(\chi(r))]'\big|_{r=R^-}=[\ln(\chi(r))]'\big|_{r=R^+}$$

得到

$$\cot kR=\frac{k'}{k} \tag{3.96}$$

再利用 3.21 题第 (1) 小题中的类似方法，可求出系统的能谱及可能存在束缚态的势阱的条件是

$$V_0\geqslant\frac{\pi^2\hbar^2}{8mR^2} \tag{3.97}$$

(2) 在一维方势阱中，无论阱深如何，总有一束缚态存在. 束缚态基态是偶宇称态，相应 Schrödinger 方程为 (取阱中心为原点)

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x)+\frac{2m}{\hbar^2}[E-V(x)]\psi(x)=0 \tag{3.98}$$

其中

$$V(x)=\begin{cases}-V_0, & |x|<R\\ 0, & |x|>R\end{cases} \tag{3.99}$$

由于 $\psi(-x)=\psi(x)$，解得

$$\psi(x)=\begin{cases}A\cos(kx), & |x|<R\\ B\mathrm{e}^{-k'|x|} & |x|>R\end{cases} \tag{3.100}$$

类似第 (1) 小题利用 $r=R$ 处的边界条件，有

$$\tan(kR)=\frac{k'}{k} \tag{3.101}$$

由上式可得

$$\sec^2(kR)=\frac{1}{k^2}\frac{2mV_0}{\hbar^2} \tag{3.102}$$

从而有

$$\cos(kR)=\pm\frac{k}{\sqrt{\dfrac{2mV_0}{\hbar^2}}} \tag{3.103}$$

可见对任何 V_0 均有解存在. 可用作图法求解.

如前所指出，式 (3.93)与一维方势阱的奇宇称情况完全相同，其确定能谱的方程以及存在解的条件也如式 (3.96)和式(3.97)所给.

(3) 对一维情况，定义一个方势阱 V_{s}(图 3.7)，使之满足

$$V_{\mathrm{s}}(x)\equiv\begin{cases}-V_0, & |x|<R\\ 0, & |x|>R\end{cases}\tag{3.104}$$

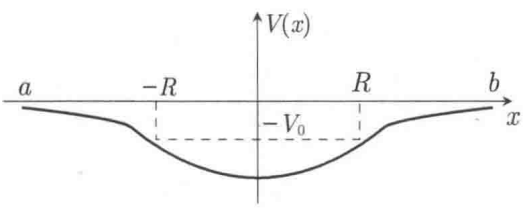


图 3.7　势阱内取一方势阱

且 $-V_0>V(x)$ 对任何 x 均成立. 从第 (2) 小题可知存在一个 $|\psi_0(x)\rangle$，是与 $V_{\mathrm{s}}(x)$ 相应的束缚定态，即

$$\langle\psi_0|\frac{p^2}{2m}+V_{\mathrm{s}}(x)|\psi_0\rangle<0\tag{3.105}$$

但是

$$\langle\psi_0|\frac{p^2}{2m}+V(x)|\psi_0\rangle<\langle\psi_0|\frac{p^2}{2m}+V_{\mathrm{s}}(x)|\psi_0\rangle\tag{3.106}$$

即题中所给的 $V(x)$ 形式的阱均有束缚态 (对其他形式的 $V(x)$，可能没有束缚态).

3.23　受反射壁影响粒子运动的 Green 函数及其复数模平方

题 3.23　对于在势

$$V(x,y,z)=\begin{cases}\infty, & x\leqslant 0,\ y,z\text{ 任意}\\ 0, & x>0,\ y,z\text{ 任意}\end{cases}$$

中运动的非相对论电子，计算其 Green 函数 $G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',t)$ 及其复数模平方，描述概率随时间的演变并给以物理解释.

解答　本题的势可用 $x=0$ 处 $G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',t)=0$ 的边界条件替代，而这一边值问题可由镜像法求解. 设 $\boldsymbol{r}''$ 为 $\boldsymbol{r}'$ 关于 $x=0$ 的镜像

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-H\right)G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',t)=\delta(t)\left[\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')-\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'')\right]\tag{3.107}$$

这一方程的解的 $x\geqslant 0$ 部分就是真实的 Green 函数的 $x\geqslant 0$ 部分，而后者在 $x\leqslant 0$ 时为零，令

$$G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',t)=\frac{1}{(2\pi)^4}\int\mathrm{d}^3k\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}\omega\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\mathrm{i}\omega t}\overline{G}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{r}',\omega)\tag{3.108}$$

代入式 (3.107)，可得

$$\overline{G}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{r}',\omega)=\frac{1}{\hbar\omega-\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}}\left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}''}\right]$$

代回式 (3.108)，得

$$G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',t)=\frac{1}{(2\pi)^4}\int\mathrm{d}^3k\mathrm{d}\omega\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\mathrm{i}\omega t}\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}''}}{h\omega-\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}}$$

先对 ω 积分，考虑到因果性要求，当 $t<0$ 时，$G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',t)=0$，我们使 ω 的极点作一移动 $\mathrm{i}\varepsilon$，ε 为一小正数，最后令 $\varepsilon\to0$，得到

$$\begin{aligned}G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',t)&=\frac{-\mathrm{i}}{\hbar(2\pi)^3}\int\mathrm{d}^3k\exp\left(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\mathrm{i}\frac{\hbar k^2}{2m}t\right)\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}''}\right)\\&=\frac{1}{\hbar}\left[\frac{m}{2\pi\hbar t}\right]^{3/2}\left\{\exp\left[\frac{\mathrm{i}m(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')^2}{2\hbar t}\right]-\exp\left[\frac{\mathrm{i}m(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'')^2}{2\hbar t}\right]\right\}\end{aligned}\tag{3.109}$$

所以，当 x,t 同时大于零时，Green 函数由式 (3.109)给出，否则为零. 在 $x>0,t>0$ 时

$$|G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',t)|^2=\frac{1}{\hbar^2}\left[\frac{m}{2\pi\hbar t}\right]^3\left\{2-2\mathrm{Re}\left\{\exp\left(\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar t}\left[\boldsymbol{r}'^2-\boldsymbol{r}''^2-2\boldsymbol{r}\cdot(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}'')\right]\right)\right\}\right\}$$

如果没有势 $V(x,y,z)$，没有反射壁，则自由空间的 Green 函数复数模平方 $|G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',t)|^2$ 正例于 t^{-3}. 现在由于反射壁的存在，因而出现了干涉项.

3.24　电子在不可穿入的导体表面上方的运动

题 3.24　一电子在一不可穿入的导体表面上方运动. 它被自身的像电荷吸向表面，因而经典地说它沿表面跳跃，如图 3.8(a) 所示.

(1) 写出该电子的能量本征值和能量本征函数所满足的 Schrödinger 方程. 忽略像电荷的惯性效应；

(2) 本征态与 x、z 的依赖关系是什么？

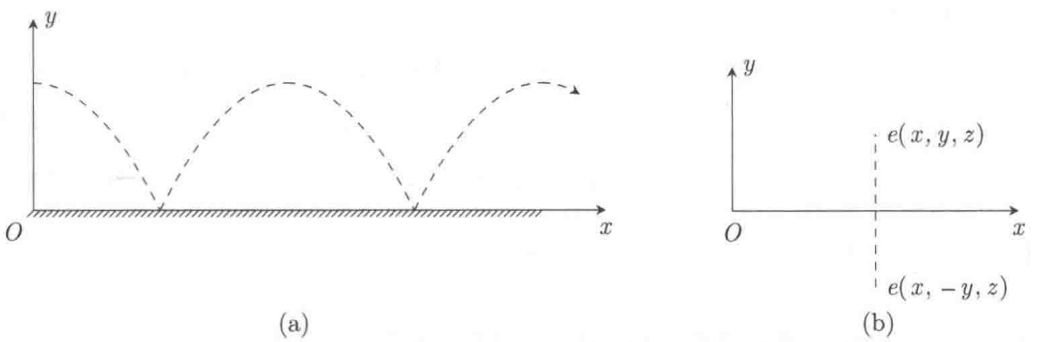
(3) 所保持的边界条件是什么？

(4) 求出基态和它的能量 (提示：它们与氢原子的基态及能量形成紧密相关)；

(5) 分立和 / 或连续能量本征值的完备集合是什么？

解答　(1) 如图 3.8(b) 所示，系统电能 $V(r)=\dfrac{1}{2}\sum\limits_i q_iV_i=\dfrac{-e^2}{4y}$，

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2-\frac{e^2}{4y}\right)\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z)$$



(a)　　(b)

图 3.8　一电子在一不可穿入的导体表面上方运动

(2) 对上述方程进行分离变量

$$\psi(x,y,z)=\psi_n(y)\psi(x,z) \tag{3.110}$$

$$\psi(x,z)=\frac{1}{2\pi\hbar}\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p_x x+p_z z)\right] \tag{3.111}$$

(3) 边界条件

$$\psi(x,y,z)=0,\quad y\leqslant 0$$

(4) 分离变量后，Schrödinger 方程化为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2\psi_n(y)}{\mathrm{d}y^2}-\frac{e^2}{4y}\psi_n(y)=E\psi_n(y) \tag{3.112}$$

氢原子径向 Schrödinger 方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{1}{r^2}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\right)-\frac{e^2}{r}R+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\cdot R=ER \tag{3.113}$$

令 $R=\dfrac{1}{r}\chi(r)$，则对于 $l=0$ 有

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}r^2}-\frac{e^2}{r}\chi=E\chi \tag{3.114}$$

比较式 (3.112)和式 (3.114)，则基态波函数为

$$\begin{aligned}\psi_1(y) &= y\cdot R_{10}(y)=y\cdot\frac{1}{a'^{3/2}}\mathrm{e}^{-y/a'}\\ &= 2y\left(\frac{me^2}{4\hbar^2}\right)^{3/2}\exp\left(-\frac{me^2y}{4\hbar^2}\right),\quad a'=\frac{4\hbar^2}{me^2}\end{aligned} \tag{3.115}$$

基态能量为

$$E_{1,0,0}=-\frac{me^4}{32\hbar^2}$$

可见这里 $y=a'=4\hbar^2/me^2=4a_0$(a_0 为 Bohr 半径)，表示电子基态最大概率位置之所在.

(5) 能量谱为

$$E_{n,p_x,p_z}=-\frac{me^4}{32\hbar^2n^2}+\frac{1}{2m}\left(p_x^2+p_y^2\right) \tag{3.116}$$

波函数为

$$\psi_{n,p_x,p_y}(\boldsymbol{r})=cyR_{n0}(y)\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(p_xx+p_zz\right)\right] \tag{3.117}$$

其中， c 为归一化常数.

3.25　非相对论电子在无限大接地、不可穿透导体上方的运动

题 3.25　一非相对论电子在一无限大的接地平面导体表面的上方运动 (图 3.9)，它被自己的像电荷所吸引，但电子不能穿透导体表面.

(1) 写出电子波函数所满足的边界条件；

(2) 求出电子的能级；

(3) 对基态，求出电子与导体表面之间的平均距离.

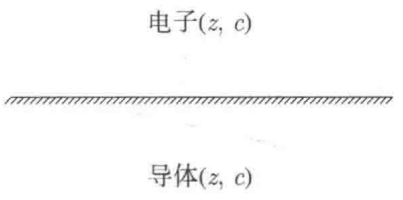


图 3.9　非相对论电子在一无限大的接地平面导体上方运动

解答　(1) 电子在一不可穿入的导体表面上方运动，其 Hamilton 量

$$H=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2-\frac{e^2}{4z}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)-\frac{e^2}{4z} \tag{3.118}$$

电子波函数需满足边界条件

$$\psi(x,y,z)=0,\quad z\leqslant 0 \tag{3.119}$$

(2) 解得电子能谱

$$E=\frac{1}{2\mu}\left(p_x^2+p_y^2\right)+E_{zn},\quad E_{zn}=-\frac{e^2}{8a'}\cdot\frac{1}{n^2} \tag{3.120}$$

这样

$$E=\frac{1}{2\mu}\left(p_x^2+p_y^2\right)-\frac{\mu e^4}{32\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2} \tag{3.121}$$

(3) 基态能量为 $E=\dfrac{-\mu e^4}{32\hbar^2}$，令

$$a'=\frac{\hbar^2}{\mu e'^2},\quad e'^2=\frac{e^2}{4}$$

基态波函数

$$\psi_{100}(x,y,z)=\frac{2z}{a'^{3/2}}\mathrm{e}^{-z/a'} \tag{3.122}$$

该态下电子与导体表面之间的平均距离为

$$\langle 0|z|0\rangle=\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\psi_{100}^*\psi_{100}z=\frac{4}{a'^3}\int_0^\infty z^3\mathrm{e}^{-2z/a'}\mathrm{d}z=\frac{3}{2}a'=\frac{6\hbar^2}{\mu e^2} \tag{3.123}$$

3.26　粒子在势场 $V(r)=-\dfrac{\lambda}{r^{2/3}}$ 中运动，由不确定性关系估计其基态能量

题 3.26　质量为 m 的粒子在势场 $V(r)=-\lambda r^{-3/2}(\lambda>0)$ 中运动，用不确定性关系估算其基态能量.

解答　在中心势场中，基态波函数仅是 r 的函数，与方向无关，则

$$\langle p^2\rangle=\langle p_r^2\rangle \tag{3.124}$$

我们知道在束缚定态下动量期望值为零，$\langle\boldsymbol{p}\rangle=0$，因而在角动量本征态的束缚定态下径向动量期望值为零，$\langle p_r\rangle=0$. 这样

$$\langle p^2\rangle=\langle p_r^2\rangle=(\Delta p_r)^2 \tag{3.125}$$

由径向位移 r 与径向动量 p_r 的不确定性关系 $\Delta p_r\Delta r\sim\hbar/2$，这样

$$\langle r^{-3/2}\rangle\sim(\Delta r)^{-3/2}\sim\left(\frac{\Delta p_r}{\hbar/2}\right)^{3/2} \tag{3.126}$$

由此得

$$\begin{aligned}\langle H\rangle &= \frac{\langle\boldsymbol{p}^2\rangle}{2m}-\lambda\langle r^{-3/2}\rangle\\ &= \frac{(\Delta p_r)^2}{2m}-\lambda\left(\frac{\Delta p_r}{\hbar/2}\right)^{3/2}\end{aligned} \tag{3.127}$$

式 (3.127)中 $\langle H\rangle$ 表示为径向动量涨落大小 Δp_r 的函数. 现对 $\langle H\rangle$ 求极值，

$$\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial\Delta p_r}=0 \tag{3.128}$$

给出唯一的极值点为

$$\Delta p_r=\frac{(3m\lambda/2)^2}{(\hbar/2)^3} \tag{3.129}$$

应为极小值点，这样代入式 (3.127)得基态能量的估算值为

$$E_0=-\frac{27}{32}\frac{m^3\lambda^4}{\hbar^6} \tag{3.130}$$

说明　本题可以采用量纲分析给出估算. 另外，假若将式 (3.127)另表示为粒子波包尺度的函数，则可类似求解极值问题，给出基态能量的估算.

3.27　质量为 μ 的粒子在球壳势阱中运动

题 3.27　质量为 μ 的粒子在球势阱 $V(r)=-\gamma\delta(r-a)$ 中运动，其中 γ、$a>0$ 都是正值的量，求该粒子存在束缚态的条件.

解答　由 Hellmann-Feynman 定理知 $\partial E_{n_r l}/\partial l>0$. 设想 γ 逐渐增加，则第一个束缚态必是 s 态 $(l=0)$. 基态为 s 态 $(l=0)$ 波函数可以写成

$$\psi(r)=\frac{u(r)}{r} \tag{3.131}$$

$u(r)$ 满足径向方程

$$u''+\frac{2\mu E}{\hbar^2}u+\frac{2\mu\gamma}{\hbar^2}\delta(r-a)u=0 \tag{3.132}$$

波函数的边界条件是 $u(0)=u(\infty)=0$.

由于 $r\to\infty$ 处 $V(r)\to 0$，所以束缚态能量 $E<0$. 现令

$$\kappa=\frac{\sqrt{-2\mu E}}{\hbar},\quad b=\frac{\hbar^2}{\mu\gamma} \tag{3.133}$$

式 (3.132) 可以改写成

$$u''-\kappa^2u+\frac{2}{b}\delta(r-a)u=0 \tag{3.134}$$

在 $r=a$ 附近对式 (3.134) 积分，可得 u 的跃变条件

$$u'(a+0^+)-u'(a-0^+)=-\frac{2}{b}\hbar^2u(a) \tag{3.135}$$

在 $r=a$ 处，u' 是有限跳跃，因而 u 连续.

在 $r\neq a$ 处，式 (3.134) 即

$$u''-\kappa^2u=0 \tag{3.136}$$

满足自然边界条件 $(u(0)=0)$ 以及束缚态条件 (在 $r\to\pm\infty$ 处 $u=0$) 的解为

$$u(r)=\begin{cases}\sinh kx=\dfrac{1}{2}(\mathrm{e}^{\kappa x}-\mathrm{e}^{-\kappa x}), & 0\leqslant r\leqslant a\\ A\mathrm{e}^{-\kappa x}, & r>a\end{cases} \tag{3.137}$$

$r=a$ 处 u 的连续条件以及 u' 的跃变条件 (3.135) 给出

$$\sinh\kappa a=A\mathrm{e}^{-\kappa a} \tag{3.138}$$

$$\kappa\cosh\kappa a+A\kappa\mathrm{e}^{-\kappa a}=\frac{2}{b}\sinh\kappa a \tag{3.139}$$

上面两式消去 A，即得[①]

$$(2-\kappa b)\sinh\kappa a=\kappa b\cosh\kappa a \tag{3.140}$$

① 这里所得结果与方势阱奇宇称态结果相同，这不奇怪. 原因在于求解 u 的方程以及在 $0\sim+\infty$ 的边界条件与方势阱奇宇称态完全相同.

或者

$$\kappa b = 1 - \mathrm{e}^{-2\kappa a} \tag{3.141}$$

定义无量纲量 $\varepsilon = \kappa b$，则上式又可表示为

$$\varepsilon = 1 - \mathrm{e}^{-\frac{2a}{b}\varepsilon} \tag{3.142}$$

构造函数 $f(\varepsilon) = \varepsilon - 1 + \mathrm{e}^{-\frac{2a}{b}\varepsilon}$，问题转化为求 $f(\varepsilon)$ 的正根，即求解

$$f(\varepsilon) = \varepsilon - 1 + \mathrm{e}^{-\frac{2a}{b}\varepsilon} = 0 \tag{3.143}$$

上面构造的函数 $f(\varepsilon)$ 满足 $f(0) = 0$[①]，以及 $f(+\infty) = +\infty$. $f'(\varepsilon) = 1 - \dfrac{2a}{b}\mathrm{e}^{-\frac{2a}{b}\varepsilon}$，当 $\varepsilon > 0$ 时 $f'(\varepsilon) > f'(0) = 1 - \dfrac{2a}{b}$. 故当 $b \geqslant 2a$ 时，$f'(\varepsilon)$ 在 $(0, +\infty)$ 上恒正，由此知 $f(\varepsilon)$ 在此区间上是增函数. 再结合 $f(0) = 0$ 知在 $(0, +\infty)$ 上 $f(\varepsilon) > 0$，故当 $b \geqslant 2a$ 时 $f(\varepsilon)$ 没有正根，因而此时不存在束缚态. 由上述分析可知存在束缚态的必要条件是 $b < 2a$. 类似于对方势阱奇宇称束缚态的分析，当 $b < 2a$ 时，必存在一个唯一的 s 态束缚态. 因此，$b < 2a$ 也是存在束缚态的充要条件. 根据式 (3.133)，这也就是

$$\gamma > \frac{\hbar^2}{2\mu a} \tag{3.144}$$

γ 从较小的值逐渐增加到 $\dfrac{\hbar^2}{2\mu a} + 0^+$，就开始出现束缚态，而其能量 $E = 0^-$.

说明　本题要求存在束缚态的条件，设想 γ 从较小的值逐渐增加，最先出现的束缚态必定能量 $E = 0^-$，而 $\kappa \sim 0$，代入式 (3.140)，$\sinh \kappa a \sim \kappa a$，$\sinh \kappa a \sim 1$，则 $2a = b$，这给出存在束缚态所要求 γ 的下限，这样同样给出式 (3.144).

3.28　Coulomb 吸引势与距离平方反比排斥势之和的势场中运动粒子的能量本征值和本征态

题 3.28　设 $V(r) = -\dfrac{a}{r} + \dfrac{A}{r^2}(a > 0,\ A > 0$ 为常数量)，粒子质量为 μ. 求粒子能量本征值和本征态.

解答　根据势场球对称性的特点，取粒子的束缚定态波函数为

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R_l(r) \mathrm{Y}_{lm}(\theta, \varphi) \tag{3.145}$$

这相当于选体系的 CSCO 为 $(H, \boldsymbol{L}^2, L_z)$. 上式中 Y_{lm} 为球谐函数，而径向波函数 $R_l(r)$ 满足如下径向 Schrödinger 方程：

$$\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} r^2 \frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r} + \left\{ \frac{2\mu}{\hbar^2}[E - V(r)] - \frac{l(l+1)}{r^2} \right\} R = 0 \tag{3.146}$$

① 即 $\varepsilon = 0$ 为 $f(\varepsilon)$ 的根，这相应于 $\kappa = 0 (E = 0)$，不是束缚态能量.

将势函数 $V(r)$ 代入得

$$\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}r^2\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}+\left\{\frac{2\mu E}{\hbar^2}+\frac{2\mu a}{\hbar^2 r}-\left[l(l+1)+\frac{2\mu A}{\hbar^2}\right]\frac{1}{r^2}\right\}R=0 \tag{3.147}$$

令 $R(r)=\chi(r)/r$ 代入式 (3.147) 得

$$\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}r^2}+\left\{\frac{2\mu E}{\hbar^2}+\frac{2\mu a}{\hbar^2 r}-\left[l(l+1)+\frac{2\mu A}{\hbar^2}\right]\frac{1}{r^2}\right\}\chi=0 \tag{3.148}$$

上式可写为

$$\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}r^2}+\left\{\frac{2\mu E}{\hbar^2}+\frac{2\mu a}{\hbar^2 r}-\frac{l'(l'+1)}{r^2}\right\}\chi=0 \tag{3.149}$$

其中，l' 满足 $\dfrac{2\mu A}{\hbar^2}+l(l+1)=l'(l'+1)$，从中解出 l' 得

$$l'=\pm\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2+\frac{2\mu A}{\hbar^2}}-\frac{1}{2}$$

这里 l' 应取正值，使得满足当 $\lambda\to 0$ 时，$l'\to l$. 因而

$$l'=\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2+\frac{2\mu A}{\hbar^2}}-\frac{1}{2} \tag{3.150}$$

式 (3.149) 除了 l' 值不同，与解氢原子束缚态的径向方程完全相同. 利用氢原子束缚态的求解办法和结果，定义主量子数为

$$n=n_r+l'+1 \tag{3.151}$$

其中，$n_r=0,1,2,\cdots$ 为径向波函数的节点个数，而 l' 由式 (3.150) 给出，故 n 一般不是整数. 粒子的能量本征值为

$$E_n=-\frac{\mu a^2}{2\hbar^2}\cdot\frac{1}{n^2}=-\frac{2\mu a^2}{\hbar^2}\left[n_r+1+\sqrt{(2l+1)^2+8\mu A/\hbar^2}\right]^{-2} \tag{3.152}$$

其中，μ 为粒子质量，$n_r=0,1,2,\cdots$，n 如式 (3.151)所给，相应的径向波函数为

$$R_{nl'}(r)=N'_{nl'}\mathrm{e}^{-\frac{\xi}{2}}\xi^l\mathrm{F}(-n+l'+1,2l'+2,\xi) \tag{3.153}$$

其中 F 为合流超几何函数，$N'_{nl'}$ 为归一化系数. 将此径向波函数代入式 (3.145) 即为粒子总的波函数.

3.29　三维各向同性谐振子与 Coulomb 场束缚态径向方程的联系

题 3.29　试将三维各向同性谐振子的径向方程和 Coulomb 场中束缚态的径向方程联系起来，并利用后者的本征解得出前者的本征解.

解答　谐振子势场为

$$V(r)=\lambda r^2,\quad \lambda>0$$

$(H,\boldsymbol{L}^2,L_z)$ 的共同本征态可以表示为

$$\psi=R(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{1}{r}\chi(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$$

$\chi(r)$ 满足径向方程

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}r^2}+\left[E-\lambda r^2-l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\right]\chi=0 \tag{3.154}$$

Coulomb 吸引场为

$$V(r)=\frac{\lambda'}{r},\quad \lambda'<0$$

$(H,\boldsymbol{L}^2,L_z)$ 的共同本征态可以表示为

$$\psi=\frac{1}{r}u(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$$

$u(r)$ 满足径向方程

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2}+\left[E'-\frac{\lambda'}{r}-l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u=0 \tag{3.155}$$

如式 (3.154)作变换

$$r^2=\rho,\quad \chi(r)=\rho^{-1/4}v(\rho) \tag{3.156}$$

可得 $v(\rho)$ 满足径向方程

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{\mathrm{d}^2v}{\mathrm{d}\rho^2}+\left[E''-\frac{\lambda''}{\rho}-l'(l'+1)\frac{\hbar^2}{2\mu\rho^2}\right]v=0 \tag{3.157}$$

其中

$$E''=-\lambda/4<0,\quad \lambda''=-E/4<0 \tag{3.158}$$

$$l'(l'+1)=\frac{1}{4}l(l+1)-\frac{3}{16} \tag{3.159}$$

式 (3.159)亦即

$$l'=\frac{l}{2}-\frac{1}{4} \tag{3.160}$$

式 (3.157)和式 (3.155)构造相同，其间对应关系为

$$u\sim v,\quad r\sim\rho,\quad l\sim l',\quad E'\sim E'',\quad \lambda'\sim\lambda''$$

众所周知，式 (3.155)的本征值 (束缚态，$E'<0$) 为

$$E'=-\frac{\mu}{2\hbar^2}(\lambda')^2(n_r+l+1)^{-2},\quad n_r=0,1,2,\cdots$$

相应本征函数为

$$u(r)=r^{l+1}\mathrm{F}\left(-n_r,2l+2,\frac{2\mu|\lambda'|r}{(n_r+l+1)\hbar^2}\right)\mathrm{e}^{-\mu|\lambda'|r/(n_r+l+1)\hbar^2} \tag{3.161}$$

因此，式 (3.156)的本征解为

$$E'=-\frac{\mu}{2\hbar^2}(\lambda'')^2(n_r+l'+1)^{-2},\quad n_r=0,1,2,\cdots \tag{3.162}$$

相应本征函数为

$$v(\rho)=\rho^{l'+1}\mathrm{F}\left(-n_r,2l'+2,\frac{2\mu|\lambda''|\rho}{(n_r+l+1)\hbar^2}\right)\mathrm{e}^{-\mu|\lambda''|\rho/(n_r+l'+1)\hbar^2} \tag{3.163}$$

式 (3.161)和式 (3.163)中 $\mathrm{F}(\alpha,\gamma,z)$ 是合流超几何级数.

将式 (3.158)及式 (3.160)代入式 (3.162)，即得到三维各向同性谐振子的能级公式

$$E=\left(\frac{2\hbar^2\lambda}{\mu}\right)^{1/2}\left(l+2n_r+\frac{3}{2}\right),\quad n_r=0,1,2,\cdots \tag{3.164}$$

通常，将谐振子势场写为

$$V(r)=\lambda r^2=\frac{1}{2}\mu\omega^2r^2$$

即 $\lambda=\dfrac{1}{2}\mu\omega^2$，如再令

$$N=l+2n_r$$

则式 (3.164)可以写为

$$E=\left(N+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega,\quad N=0,1,2,\cdots$$

将式 (3.163)代入式 (3.156)，则得到谐振子径向波函数为 (未归一化)

$$R(r)=\frac{\chi(r)}{r}=r^l\mathrm{F}\left(-n_r,l+\frac{3}{2},\frac{\mu\omega}{\hbar}r^2\right)\mathrm{e}^{-\mu\omega r^2/2\hbar} \tag{3.165}$$

如令 $\alpha=\sqrt{\mu\omega/\hbar}$，式 (3.165)即

$$R(r)=r^l\mathrm{F}\left(-n_r,l+\frac{3}{2},\alpha^2r^2\right)\mathrm{e}^{-a^2r^2/2}$$

这个结果也可以直接解式 (3.154)而得出.

3.30　幂函数型中心势场 $V(r)=\lambda r^\nu$ 束缚定态能量 $\nu>0$ 与 $-2<\nu<0$ 情形的对应

题 3.30　对于幂函数型中心势场

$$V(r)=\lambda r^\nu,\quad -2<\nu<\infty$$

试找一个变换，将 $\nu>0$ 和 $-2<\nu<0$ 的径向方程联系起来，并加以讨论.

解答　根据势场的球对称性，束缚定态可取为 $(H,\boldsymbol{L}^2,L_z)$ 共同本征态，相应的波函数可以写为

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)=R(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{1}{r}u(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) \tag{3.166}$$

其中 Y_{lm} 为球谐函数，$l=0,1,2,\cdots;m=0,\pm1,\pm2,\cdots\pm l$. 径向方程为

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}u''+\left[E-\lambda r^{\nu}-l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u=0 \tag{3.167}$$

作变换

$$\rho=r^{\alpha},\quad u(r)=\rho^{\beta}v(\rho) \tag{3.168}$$

α、β 待定. 因而 $\mathrm{d}\rho=\alpha r^{\alpha-1}\mathrm{d}r$，或者 $\mathrm{d}\rho/\mathrm{d}r=\alpha r^{\alpha-1}$，这样

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}&=\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}=\alpha r^{\alpha-1}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}=\alpha\rho^{1-\frac{1}{\alpha}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\\ \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}&=\alpha\rho^{1-\frac{1}{\alpha}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\alpha\rho^{1-\frac{1}{\alpha}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}=\alpha^2\rho^{2-\frac{2}{\alpha}}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}+\alpha(\alpha-1)\rho^{-\frac{1}{\alpha}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\end{aligned}$$

进而

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}u&=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\rho^{\beta}v(\rho)=\rho^{\beta}v'+\beta\rho^{\beta-1}v\\ \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}u&=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\left(\rho^{\beta}v'+\beta\rho^{\beta-1}v\right)=\rho^{\beta}v''+2\beta\rho^{\beta-1}v'+\beta(\beta-1)\rho^{\beta-2}v\end{aligned}$$

这样可算出

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2}=\alpha^2\rho^{2+\beta-\frac{2}{\alpha}}v''+\alpha^2\left(2\beta+1-\frac{1}{\alpha}\right)\rho^{1+\beta-\frac{2}{\alpha}}v'+\alpha^2\beta(\beta-\frac{1}{\alpha})\rho^{\beta-\frac{2}{\alpha}}v$$

若 $2\beta+1-\dfrac{1}{\alpha}=0$，则上式中 ν' 项消失. 我们可令

$$\alpha=-\frac{\nu}{\nu'},\quad \beta=-\frac{1}{2}\left(1+\frac{\nu'}{\nu}\right) \tag{3.169}$$

代入径向方程 (3.167) 得

$$\begin{aligned}&\frac{\hbar^2}{2\mu}\rho^{2+\nu'+2\nu'/\nu}v''+\left\{-\lambda\left(\frac{\nu'}{\nu}\right)^2+E\left(\frac{\nu'}{\nu}\right)^2\rho^{\nu'}\right\}v\\ &-\frac{\hbar^2}{2\mu}\rho^{-2}\left[l(l+1)\left(\frac{\nu'}{\nu}\right)^2+\frac{1}{4}\left(\frac{\nu'}{\nu}\right)^2-\frac{1}{4}\right]\rho^{2+\nu'+2\nu'/\nu}v=0\end{aligned} \tag{3.170}$$

如取

$$2+\nu+2\nu'/\nu=0,\quad \text{即}\nu'=-\frac{2\nu}{2+\nu} \tag{3.171}$$

则式 (3.170) 成为

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}v''+\left[E'-\lambda'\rho^{\nu'}-l'(l'+1)\frac{\hbar^2}{2\mu\rho^2}\right]v=0 \tag{3.172}$$

其中

$$\begin{aligned} \nu' &= -\frac{2\nu}{\nu+2}, \qquad l' = \frac{2l+1}{\nu+2} - \frac{1}{2} \\ \lambda' &= -\left(\frac{\nu'}{\nu}\right)^2 E, \quad E' = -\frac{\nu'}{\nu}\lambda E \end{aligned} \tag{3.173}$$

式 (3.172) 和式 (3.167) 构造相似，只是 λ'、ν'、E' 的正负性质分别与 λ、ν、E 相反，例如，

$$\nu, \lambda, E > 0 \Rightarrow \nu', \lambda', E' < 0$$

反之亦然. 由此可知，$\nu, \lambda > 0$ 时式 (3.167) 的本征解，可由式 (3.172) 中 $\nu, \lambda < 0$ 的本征解得出. $\nu, \lambda > 0$ 时显然有无限多个束缚态能级 $(0 < E < \infty)$，因此，$\nu, \lambda < 0$ 时也有无限多个能级 $(E < 0)$.

上面题 3.29 就是一个具体实例，而且是能量本征方程可以求解的唯一情形.

根据式 (3.168)、式 (3.169)、式 (3.171)，有

$$\rho = r^{1+v/2}$$

当 $-2 < v < \infty$ 时，必有 $1 + v/2 > 0$，因此

$$r \to 0 \quad \text{即} \rho \to 0, \quad r \to \infty \text{ 即} \rho \to \infty$$

由式 (3.172)可知

$$\rho \to 0\text{处}, v(\rho) \to \rho^{l'+1} = \rho^{\frac{2l+1}{2+v}+\frac{1}{2}}$$

则由式 (3.168)就有

$$r \to 0\text{处}, \quad u(r) \to \rho^{\frac{2l+2}{2+v}} = r^{l+1} \tag{3.174}$$

这个结果可以直接从式 (3.174)得出.

3.31　球对称幂律势场中运动粒子的能级量纲构造式

题 3.31　质量为 m 的粒子在中心势场

$$V(r) = \lambda r^{\nu}, \qquad -2 < \nu < \infty$$

中运动. 只讨论能够出现束缚态的情形，即 $\lambda\nu > 0$ 的情形.

(1) 找出特征长度的量纲构造式，将径向方程无量纲化；

(2) 将 $\hbar, \mu, \lambda$ 视为参量，确定能级构造和它们的关系；

(3) 分别就 $\nu = 2, 1, -1$ 三种特例作具体讨论.

解答　根据势场的球对称性，束缚定态可取为 $(H, \boldsymbol{L}^2, L_z)$ 共同本征态，相应的波函数可以写为

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{1}{r}u(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta, \varphi) \tag{3.175}$$

其中 Y_{lm} 为球谐函数，$l=0,1,2,\cdots;m=0,\pm1,\pm2,\cdots\pm l$. 径向方程为

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2}+\left[E-\lambda r^{\nu}-l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u=0 \tag{3.176}$$

方程中各项量纲相同，故特征长度的量纲构造式为

$$r\sim\left(\frac{\hbar^2}{\mu|\lambda|}\right)^{\frac{1}{2+\nu}}$$

特征能量的量纲构造式为

$$E\sim\frac{\hbar^2}{\mu r^2}\sim\left(\frac{\hbar^2}{\mu}\right)^{\frac{\nu}{2+\nu}}|\lambda|^{\frac{2}{2+\nu}} \tag{3.177}$$

据此，引入无量纲的径向距离及能量，定义为

$$\rho=r\left(\frac{2\mu|\lambda|}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2+\nu}} \tag{3.178}$$

$$\varepsilon=E\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(\frac{\hbar^2}{2\mu|\lambda|}\right)^{\frac{2}{2+\nu}} \tag{3.179}$$

并令

$$u(r)=\omega(\rho)$$

则径向方程 (3.176)变为

$$\frac{\mathrm{d}^2\omega}{\mathrm{d}\rho^2}+\left[\varepsilon-\frac{\lambda}{|\lambda|}\rho^{\nu}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]\omega=0 \tag{3.180}$$

现在径向方程已经和 $\hbar,\mu,\lambda$ 的数值无关，ε 作为式 (3.180)的本征值，当然与 $\hbar,\mu,\lambda$ 的值无关. 由式 (3.179)易知，任何两个能级之差 ΔE 必然和式 (3.177)具有相同的量纲构造，即

$$\Delta E\propto\left(\frac{\hbar^2}{2\mu}\right)^{\frac{\nu}{2+\nu}}|\lambda|^{\frac{2}{2+\nu}}$$

由此可见：

(1) 不论 ν 取什么值 ($\nu>-2$)，如作用强度 $|\lambda|$ 增大，ΔE 亦随之增大；

(2) 粒子质量 μ 和能级差 ΔE 的依赖关系为

$$\nu>0,\quad \mu\text{增大时}\Delta E\text{减少}$$

$$\nu<0,\quad \mu\text{增大时}\Delta E\text{增大}$$

(3) 具体来说，$\nu=2,1,-1$ 三种特例的规律如下：

(i) Coulomb 势 ($\nu=-1,\lambda<0$)

$$V(r)=\frac{\lambda}{r},\quad \Delta E\propto\frac{\mu\lambda^2}{\hbar^2}$$

事实上，能级公式为

$$E=-\frac{\mu\lambda^2}{2n^2\hbar^2},\quad n=1,2,3,\cdots$$

(ii) 谐振子势 ($\nu=2,\lambda>0$)

$$V(r)=\lambda r^2,\quad \Delta E\propto\hbar\left(\frac{\lambda}{\mu}\right)^{\frac{1}{2}}$$

事实上，能级公式为

$$E_N=\left(N+\frac{3}{2}\right)\left(\frac{2\lambda\hbar^2}{\mu}\right)^{1/2},\quad N=0,1,2,\cdots$$

(iii) 线性中心势 ($\nu=1,\lambda>0$)

$$V(r)=\lambda r,\qquad \Delta E\propto\left(\frac{\hbar^2\lambda^2}{\mu}\right)^{1/3}$$

能级公式没有简单表达式. s 态 ($l=0$) 能级的 W. K. B 近似为

$$E_n\approx\left[\frac{3}{2}\pi\left(n+\frac{3}{4}\right)\right]^{\frac{2}{3}}\left(\frac{\hbar^2\lambda^2}{2\omega}\right)^{\frac{1}{3}},\quad n=0,1,2,\cdots$$

另解 (关于第 (2) 小题，利用 Hellmann-Feynman 定理及 Virial 定理分析能级构造式对于 λ、μ、$\hbar$ 的依赖关系) 按 Virial 定理，对于束缚定态有期望值关系 $2\langle T\rangle=\langle\boldsymbol{r}\cdot\nabla V\rangle$，代入题给势函数则有

$$2\langle T\rangle=\nu\langle V\rangle,\quad \langle V\rangle=\frac{2}{\nu}\langle T\rangle \tag{3.181}$$

所以

$$E=\langle T+V\rangle=\frac{2+\nu}{\nu}\langle T\rangle \tag{3.182}$$

由式 (3.181) 和式 (3.182) 得

$$\langle T\rangle=\frac{\nu}{2+\nu}E,\quad \langle V\rangle=\frac{2}{2+\nu}E \tag{3.183}$$

在本题中，对取定的 ν，有关的参数为 λ、μ、$\hbar$. 由 HF 定理，在束缚定态下

$$\begin{aligned}\frac{\partial E}{\partial\lambda}&=\left\langle\frac{\partial H}{\partial\lambda}\right\rangle=\langle r^\nu\rangle=\frac{1}{\lambda}\langle V\rangle\\&=\frac{2}{2+\nu}\frac{1}{\lambda}E\end{aligned} \tag{3.184}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial E}{\partial\mu}&=\left\langle\frac{\partial H}{\partial\mu}\right\rangle=-\frac{1}{\nu}\langle T\rangle\\&=-\frac{\nu}{2+\nu}\frac{1}{\mu}E\end{aligned} \tag{3.185}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial E}{\partial\hbar}&=\left\langle\frac{\partial H}{\partial\hbar}\right\rangle=\frac{2}{\hbar}\langle T\rangle\\&=\frac{\nu}{2+\nu}\frac{2}{\hbar}E\end{aligned} \tag{3.186}$$

或者

$$\frac{\partial \ln E}{\partial \lambda}=\frac{2}{2+\nu}\frac{1}{\lambda},\quad \frac{\partial \ln E}{\partial \mu}=-\frac{\nu}{2+\nu}\frac{1}{\mu},\quad \frac{\partial \ln E}{\partial \hbar}=\frac{\nu}{2+\nu}\frac{2}{\hbar}$$

也就有

$$\mathrm{d}\ln E=\frac{2}{2+\nu}\frac{1}{\lambda}\mathrm{d}\lambda-\frac{\nu}{2+\nu}\frac{1}{\mu}\mathrm{d}\mu+\frac{\nu}{2+\nu}\frac{2}{\hbar}\mathrm{d}\hbar$$

对上式积分，即得

$$E=C\lambda^{\frac{2}{2+\nu}}\left(\frac{\hbar^2}{2\mu}\right)^{\frac{\nu}{2+\nu}}$$

其中，C 为积分常数，与 λ、μ、$\hbar$ 无关. 上式结果与式 (3.177)一致.

3.32　球对称幂律势场中运动粒子在半径为 a 的球面内出现的概率

题 3.32　粒子在中心力场中运动，处于束缚态

$$\psi(r,\theta,\varphi)=R(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{1}{r}u(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)\tag{3.187}$$

径向波函数的归一化条件为

$$\int_0^\infty R^2r^2\mathrm{d}r=\int_0^\infty u^2\mathrm{d}r=1\tag{3.188}$$

如以原点为球心、以给定的半径 a 画一个球面，则粒子在球内出现的概率为

$$P(a)=\int_0^a R^2r^2\mathrm{d}r=\int_0^a u^2\mathrm{d}r$$

如势能为幂函数型

$$V(r)=\lambda r^\nu,\quad -2<\nu<\infty$$

试证明：当粒子质量 μ 或作用强度 $|\lambda|$ 增大时，概率 $P(a)$ 只能增大，不会减小.

证明　以 $P(a)$ 和 μ 的关系为例. 令

$$G(a)=\frac{1}{2}\cdot\frac{\partial}{\partial\mu}P(a)=\int_0^\infty u(r)\frac{\partial u(r)}{\partial\mu}\mathrm{d}r\tag{3.189}$$

需要证明 $G(a)\geqslant 0$.

式 (3.187)中 $u(r)$ 满足径向方程

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2}+\left[E-\lambda r^v-l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u=0\tag{3.190}$$

按照题 3.32 分析，令

$$\rho=r\left(\frac{2\mu|\lambda|}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2+\nu}},\quad u(r)=C\omega(\rho)\tag{3.191}$$

$$\varepsilon = E\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(\frac{\hbar^2}{2\mu|\lambda|}\right)^{\frac{2}{2+\nu}} \tag{3.192}$$

则式 (3.190)就可以无量纲化，变为

$$\frac{\mathrm{d}^2\omega}{\mathrm{d}\rho^2} + \left[\varepsilon - \frac{\lambda}{|\lambda|}\rho^v - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]\omega = 0 \tag{3.193}$$

$\omega(\rho)$ 作为方程 (3.193) 的本征解，和 μ、$|\lambda|$ 之值没有直接关系. 如令 $\omega(\rho)$ 满足归一化条件

$$\int_0^\infty \omega^2 \mathrm{d}\rho = 1$$

则利用 $u(r)$ 的归一化条件 (3.188)容易确定式 (3.191)中的归一化常数 C，显然

$$C = \left(\frac{\rho}{r}\right)^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{2\mu|\lambda|}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2(2+v)}}$$

现在只需计算 $\partial u(r)/\partial r$，然后代入式 (3.189)，即可证明 $G(a) \geqslant 0$.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial u(r)}{\partial \mu} &= \frac{\partial C}{\partial \mu}w(\rho) + c\frac{\partial \rho}{\partial \mu}\cdot\frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}\rho} \\
&= \frac{c}{2(2+v)\mu}w(\rho) + \frac{c}{(2+v)\mu}\rho\frac{\mathrm{d}w}{\mathrm{d}\rho} \\
&= \frac{1}{2(2+v)\mu}\left[u(r) + 2r\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}r}\right] \\
&= \frac{1}{2(2+v)\mu}\cdot\frac{1}{u(r)}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left[ru^2(r)\right]
\end{aligned} \tag{3.194}$$

代入式 (3.189)，即得

$$G(a) = \frac{c}{2(2+v)}ru^2\Big|_{r=0}^{r=a} = \frac{1}{2(2+v)\mu}au^2(a) \tag{3.195}$$

由式 (3.195)易见

$$G(a) \geqslant 0$$

这正是所要证明的. 等号仅出现于 $u(a) = 0$ 的情况，即 $r = a$ 恰好是 $u(r)$ 的节点.

在 ρ-r 关系式 (3.193)中，μ 和 $|\lambda|$ 地位相同，所以 $P(a)$ 对 λ 的依赖关系可以仿照以上步骤进行推导、分析，结果为

$$\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial|\lambda|}P(a) = \int_0^a u(r)\frac{\partial u(r)}{\partial|\lambda|}\mathrm{d}r = \frac{1}{2(2+v)|\lambda|}au^2(a) \geqslant 0$$

即作用强度增大时，概率只能增大，不会减少.

式 (3.194) 中，如 $\nu \to \infty$，则 $G(a) \to 0$，这时 $P(a)$ 与 μ 无关，这正好反映如下事实：无限深势阱中的粒子，波函数与粒子质量无关，因此粒子的空间概率分布与质量无关.

本题证明的结论可以从量纲的角度给以简单解释如下：特征长度 r_0 和 μ、$|\lambda|$ 的关系 (参看题 3.32) 为

$$r_0 = \left(\frac{\hbar^2}{\mu|\lambda|}\right)^{\frac{1}{2+\nu}}$$

当 μ 或 $|\lambda|$ 变化时，如 a/r_0 保持不变，则概率 $P(a)$ 也不变. 本题的条件是 a 给定不变，因此 μ 或 $|\lambda|$ 增大时，r_0 变小，a/r_0 增大，亦即，如距离以特征长度 r_0 为单位，则 μ 或 $|\lambda|$ 增大时，球面半径 a/r_0 增大，故粒子在球内出现的概率增大.

3.33　若中心势场势函数 $V(r)$ 为单调上升函数，则任意半径球内势的期望值小于整个空间势的期望值

题 3.33　粒子在中心势场 $V(r)$ 中运动，处于能量本征态

$$\psi = R(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{1}{r}u(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$$

如 ψ 已经归一化，则势能期望值等于

$$\langle V\rangle = \int \psi^* V\psi \mathrm{d}^3x = \int_0^\infty V(r)u^2(r)\mathrm{d}r$$

试证明：如 $V(r)$ 为单调上升函数，即 $\dfrac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}$，则对于任意给定的距离 a，均有

$$\int_0^a [V-\langle V\rangle]u^2\mathrm{d}r < 0 \tag{3.196}$$

解答　由于 $V(r)$ 是单调上升的，显然对于粒子的任何状态，总可以找到某个 r_0，使

$$V(r_0) = \langle V\rangle$$

而且，当 $r < r_0$ 时，$V(r) < \langle V\rangle$；当 $r > r_0$ 时，$V(r) > \langle V\rangle$. 因此，如 $a < r_0$，式 (3.196)显然成立. 如 $a \geqslant r_0$，则

$$(V-\langle V\rangle)u^2\mathrm{d}r < 0$$

但因

$$\int_0^\infty (V-\langle V\rangle)u^2\mathrm{d}r = \langle V\rangle - \langle V\rangle = 0$$

所以仍得

$$\int_0^a (V-\langle V\rangle)u^2\mathrm{d}r < 0$$

3.34　对核电荷为 Ze 的类氢原子，计算处于束缚定态 ψ_{nlm} 下的电子的 $\langle r^{-1}\rangle$、$\langle r^{-2}\rangle$ 和 $\langle r^{-3}\rangle$

题 3.34　对于核电荷为 Ze 的类氢原子，计算处于束缚态 ψ_{nlm} 下的电子的 $\langle r^\lambda\rangle$，$\lambda = -1,-2,-3$.

解答　对于该类氢原子，令 $a_z=a_0/Z$，a_0 为 Bohr 半径. 按 Virial 定理

$$2\langle T\rangle=\langle \boldsymbol{r}\cdot\nabla V\rangle=\left\langle \boldsymbol{r}\cdot\nabla\frac{Ze}{r}\right\rangle=-\left\langle \boldsymbol{r}\cdot\frac{Ze\boldsymbol{r}}{r^3}\right\rangle=-\left\langle\frac{Ze}{r}\right\rangle=-\langle V\rangle$$

这样 $\langle V\rangle+\langle T\rangle=\dfrac{1}{2}\langle V\rangle$，束缚态 ψ_{nlm} 下 $\langle V\rangle=2E_n$，此式即

$$\langle r^{-1}\rangle=\frac{1}{n^2a_z}=\frac{Z}{n^2a_0} \tag{3.197}$$

对于类氢原子，

$$H_l=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+V(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}-\frac{Ze}{r}+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}$$

能量本征值为 $E_{nlm}=E_n=-Ze^2/2n^2a_z$，$n=n_r+l+1$. 用 Hellmann-Feynman 定理 $\dfrac{\partial E_n}{\partial\lambda}=\langle\psi_{nlm}\left|\dfrac{\partial H}{\partial\lambda}\right|\psi_{nlm}\rangle$，取 $\lambda=l$，

$$\frac{\partial E_n}{\partial l}=\frac{\partial E_n}{\partial n}=\frac{Ze^2}{n^3a_z},\quad \frac{\partial H}{\partial l}=\frac{(2l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}$$

这样给出

$$\langle r^{-2}\rangle=\frac{1}{(l+1/2)n^3a_z^2}=\frac{Z^2}{(l+1/2)n^3a_0^2} \tag{3.198}$$

最后，计算 $\langle r^{-3}\rangle$. 对于 s 态 ($l=0$)，$r\to0$ 处，$\psi\to C$(常数量)，所以

$$\langle r^{-3}\rangle_{n00}\to\infty \tag{3.199}$$

当 $l\neq0$ 时，利用题 3.20 的式 (3.54)，即得

$$\left\langle-\frac{\hbar^2}{\mu}\frac{l(l+1)}{r^3}+\frac{\partial}{\partial r}V\right\rangle=0$$

因此

$$\begin{aligned}\langle r^{-3}\rangle&=\frac{\mu}{\hbar^2l(l+1)}\left\langle\frac{\partial}{\partial r}V\right\rangle=\frac{\mu}{\hbar^2l(l+1)}\left\langle\frac{Ze^2}{r^2}\right\rangle\\&=\frac{1}{l(l+1)(2l+1)}\frac{2}{n^3a_z^3}=\frac{1}{l(l+1)(2l+1)}\frac{2Z^3}{n^3a_0^3}\end{aligned} \tag{3.200}$$

当 $l\to0$ 时，上式右端 $\to\infty$，所以上式实际上适用于所有 l 值 (包括 $l=0$).

讨论　由于总能量算符及径向方程均与磁量子数 m 无关，所以诸 $\langle r^\lambda\rangle$ 都与 m 无关. 而 $\langle r^{-1}\rangle$ 和能级一样，与角量子数 l 也无关，仅取决于主量子数 n. $\langle r^{-2}\rangle$ 与 $\langle r^{-3}\rangle$ 则与 n、l 均有关，亦即对于能级相同但“轨道形状”不同 (l 不同) 的各状态，$\langle r^{-2}\rangle$ 与 $\langle r^{-3}\rangle$ 具有不同的数值.

利用式 (3.198)，易得 ψ_{nlm} 态下离心势能的期望值为

$$\left\langle \frac{\boldsymbol{L}^2}{2\mu r^2} \right\rangle_{nlm} = \frac{l(l+1)Z^2e^2}{(2l+1)n^3a_0} = -\frac{l(l+1)}{(l+1/2)n}E_n \tag{3.201}$$

由于 $(-E_n)$ 为动能期望值，所以在动能中离心势能所占比例为 $l(l+1)/[(l+1/2)n]$，当 n 确定后，l 越大，这个比例越大. 当 l 取最大值 $(l=n-1)$ 时，这个比例为 $(n-1)/(n-1/2)$，这时径向动能仅占动能的 $1/(2n-1)$. 所以，如 $n\gg1$，$(n,n-1,m)$ 态中径向动能就很小，这种状态相当于 Bohr 量子论中的圆形轨道.

3.35　类氢离子束缚定态下 $\langle r^\lambda\rangle$ 的 Kramers 递推公式

题 3.35　核电荷为 Ze 的类氢原子处于 $(H,\boldsymbol{L}^2,L_z)$ 的共同本征态 ψ_{nlm}，试从径向方程证明 $\langle r^\lambda\rangle$ 之间的下列递推关系：

$$\frac{\lambda+1}{n^2}\langle r^\lambda\rangle-(2\lambda+1)\frac{a}{Z}\langle r^{\lambda-1}\rangle+\frac{\lambda}{4}\left[(2l+1)^2-\lambda^2\right]\frac{a^2}{Z^2}\langle r^{\lambda-2}\rangle=0 \tag{3.202}$$

给出此关系式成立的条件. 并计算 $\langle r^\lambda\rangle$，$\lambda=2,1,-1,-3,-4$.

参阅 H. A. Kramers, Quantum Mechanics, (North Holland, 1957), §59.

解答　$(H,\boldsymbol{L}^2,L_z)$ 的共同本征态 ψ_{nlm} 的球坐标表示式为

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)=R_{nl}(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{1}{r}\chi_{nl}(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) \tag{3.203}$$

其中，$\chi_{nl}(r)$ 可取为实函数. 这样在该态下 r^λ 的期望值为

$$\langle r^\lambda\rangle_{nlm}=\int r^\lambda|\psi_{nlm}|^2\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}=\int_0^\infty r^\lambda|\chi_{nl}|^2\,\mathrm{d}r \tag{3.204}$$

$\chi_{nl}(r)$ 满足径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\chi''+\left[l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}-\frac{Ze^2}{r}\right]\chi=E_n\chi \tag{3.205}$$

其中类氢原子能级为

$$E_n=-\frac{Z^2e^2}{2n^2a_0} \tag{3.206}$$

而 $a_0=\dfrac{\hbar^2}{\mu e^2}$ 为 Bohr 半径. 式 (3.205) 可以写成

$$\chi''+\left[\frac{2Z}{a_0r}-l(l+1)\frac{1}{r^2}-\left(\frac{Z}{na_0}\right)^2\right]\chi=0 \tag{3.207}$$

式 (3.207) 两边乘以 $r^\lambda\chi$，并对 r 从 0 到 $+\infty$ 积分，与式 (3.204) 对照，式 (3.207) 的 $[\cdots]$ 中的三项分别给出 $r^{\lambda-1}$、$r^{\lambda-2}$ 与 r^λ 的期望值，这样有

$$\int_0^\infty r^\lambda\chi\chi''\mathrm{d}r+\frac{2Z}{a_0}\langle r^{\lambda-1}\rangle-l(l+1)\langle r^{\lambda-2}\rangle-\left(\frac{Z}{na_0}\right)^2\langle r^\lambda\rangle=0 \tag{3.208}$$

上式左边第一项可化为

$$\begin{aligned}\int_0^\infty r^\lambda \chi\chi''\mathrm{d}r &= r^\lambda\chi\chi'\big|_0^\infty - \int_0^\infty \left(r^\lambda\chi' + \lambda r^{\lambda-1}\chi\right)\chi'\mathrm{d}r \\ &= \left(r^\lambda\chi\chi' - \frac{\lambda}{2}r^{\lambda-1}\chi^2\right)\Big|_0^\infty + \frac{\lambda(\lambda-1)}{2}\left\langle r^{\lambda-2}\right\rangle - \int_0^\infty r^\lambda(\chi')^2\mathrm{d}r \end{aligned} \tag{3.209}$$

这样式 (3.208) 可写为

$$\begin{aligned}&\left[\frac{\lambda(\lambda-1)}{2} - l(l+1)\right]\left\langle r^{\lambda-2}\right\rangle + \frac{2Ze^2}{a_0}\left\langle r^{\lambda-1}\right\rangle - \left(\frac{Z}{na_0}\right)^2\left\langle r^\lambda\right\rangle \\ &= \int_0^\infty r^\lambda(\chi')^2\mathrm{d}r + \left(\frac{\lambda}{2}r^{\lambda-1}\chi^2 - r^\lambda\chi\chi'\right)\Big|_0^\infty \end{aligned} \tag{3.210}$$

式 (3.207) 两边乘以 $2r^{\lambda+1}\chi'$，并对 r 从 0 到 $+\infty$ 积分，可依次得到

$$\begin{aligned}\int_0^\infty 2r^{\lambda+1}\chi'\chi''\mathrm{d}r &= r^{\lambda+1}(\chi')^2\big|_0^\infty - (\lambda+1)\int_0^\infty r^\lambda\chi'^2\mathrm{d}r \\ \int_0^\infty 2r^{\lambda+1}\chi'\chi\mathrm{d}r &= r^{\lambda+1}\chi^2\big|_0^\infty - (\lambda+1)\left\langle r^\lambda\right\rangle \\ \int_0^\infty 2r^{\lambda+1}\chi'\frac{\chi}{r}\mathrm{d}r &= r^\lambda\chi^2\big|_0^\infty - \lambda\left\langle r^{\lambda-1}\right\rangle \\ \int_0^\infty 2r^{\lambda+1}\chi'\frac{\chi}{r^2}\mathrm{d}r &= r^{\lambda-1}\chi^2\big|_0^\infty - (\lambda-1)\left\langle r^{\lambda-2}\right\rangle \end{aligned}$$

这样得到

$$(\lambda-1)l(l+1)\left\langle r^{\lambda-2}\right\rangle - 2\lambda\frac{Z}{a_0}\left\langle r^{\lambda-1}\right\rangle + (\lambda+1)\left(\frac{Z}{na_0}\right)^2\left\langle r^\lambda\right\rangle = (\lambda+1)\int_0^\infty r^\lambda(\chi')^2\mathrm{d}r + \mathrm{Res} \tag{3.211}$$

其中余项 Res 如下给出：

$$\mathrm{Res} = \left[-l(l+1)r^{\lambda-1}\chi^2 + \frac{2Z}{a_0}r^\lambda\chi^2 - \left(\frac{Z}{na_0}\right)^2 r^{\lambda+1}\chi^2 + r^{\lambda+1}(\chi')^2\right]\Big|_0^\infty$$

式 (3.210) 和式 (3.211) 中除了式 (3.202) 所含的 $\left\langle r^{\lambda-2}\right\rangle$、$\left\langle r^{\lambda-1}\right\rangle$、$\left\langle r^\lambda\right\rangle$ 以及相同的积分项外，还有上式所给的余项 Res，这实际上是若干项分部积分的边界项. 后者依赖于波函数在 $r=0$ 和 $r\to\infty$ 处的值. 波函数渐近条件如下：

$$\begin{aligned} &r\to 0 \quad \chi\sim r^{l+1} \\ &r\to\infty \quad \chi\sim r\mathrm{e}^{-Zr/na_0} \end{aligned} \tag{3.212}$$

可见分部积分的各边界项在 $r\to\infty$ 处全等于零，而在 $r=0$ 处 r 的幂次最低的三项为

$$r^\lambda\chi\chi',\quad \frac{\lambda}{2}r^{\lambda-1}\chi^2,\quad r^{\lambda+1}(\chi')^2$$

$r\to 0$ 处它们的渐近行为都是 $\sim r^{\lambda+2l+1}$. 由此知，当

$$\lambda > -(2l+1) \tag{3.213}$$

时，分部积分的各边界项在 $r=0$ 处均等于零. 此时式 (3.210) 和式 (3.211) 中消去右边的积分项即得到式 (3.202)，即为所证.

由上面证明过程知，式 (3.202) 成立条件为式 (3.213)，即 $\lambda>-(2l+1)$. 这也是使式 (3.202) 中的 $\langle r^{\lambda-2}\rangle$ 的值有限所要求的.

下面应用式 (3.202) 计算 $\langle r^{\lambda}\rangle$. 令 $\lambda=0$，并注意到 $\langle r^0\rangle=1$(单位算符在任意态下的期望值都等于 1)，立即得到

$$\langle r^{-1}\rangle = Z/n^2a_0$$

这与题 3.34 用 Virial 定理所得结果 [式 (3.197)] 相同. 再令 $\lambda=1,2$，可依次求得

$$\langle r\rangle = \frac{1}{2}\left[3n^2-l(l+1)\right]\frac{a_0}{Z} \tag{3.214}$$

$$\langle r^2\rangle = \frac{n^2}{2}\left[1+5n^2-3l(l+1)\right]\frac{a_0^2}{Z^2} \tag{3.215}$$

利用题 3.34 式 (3.198)，式 (3.202) 中令 $\lambda=-1$，可得 $\langle r^{-3}\rangle$，与题 3.34 式 (3.200) 结果相同.

再令 $\lambda=-2(l\geqslant 1)$，利用已知的 $\langle r^{-2}\rangle$ 和 $\langle r^{-3}\rangle$[见题 3.34 式 (3.198) 和式 (3.200)] 可得

$$\langle r^{-4}\rangle = \frac{Z^4}{2n^5(l-1/2)l(l+1/2)(l+1)(l+3/2)}\frac{1}{a_0^4} \tag{3.216}$$

3.36　三维各向同性谐振子的束缚定态中 $\langle r^{\lambda}\rangle$ 的递推关系

题 3.36　对于三维各向同性谐振子，$(H,\boldsymbol{L}^2,L_z)$ 的共同本征态为 ψ_{n_rlm}，求各 $\langle r^{\lambda}\rangle$ 的递推关系，并利用得到的递推关系计算 $\langle r^2\rangle$ 及 $\langle r^4\rangle$.

解答　ψ_{n_rlm} 可以表示为

$$\psi_{n_rlm}=R_{nl}(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{1}{r}u_{nl}(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) \tag{3.217}$$

其中，$u_{nl}(r)$ 可取为实函数，满足径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}u''+\left[\frac{1}{2}\mu\omega^2r^2+l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u=E_nu \tag{3.218}$$

利用能级公式

$$E_N=\left(N+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega$$

可将式 (3.218)改写为

$$u''+\left[(2N+3)\alpha^2-\alpha^4r^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]u=0 \tag{3.219}$$

其中，$\alpha^2=\mu\omega/\hbar$，$u_{nl}(r)$ 的渐近行为是

$$r\to 0,\qquad u\sim r^{l+1};\qquad r\to\infty,\quad u\sim r^{N+1}\mathrm{e}^{-\alpha^2r^2/2}$$

分别以 $r^{\lambda}u$ 和 $2r^{\lambda+1}u'$ 乘以式 (3.219)，再积分、相消，可得 $\langle r^{\lambda}\rangle$ 的递推关系为

$$(\lambda+2)a^4\langle r^{\lambda+2}\rangle-(\lambda+1)(2N+3)\alpha^2\langle r^{\lambda}\rangle+\frac{\lambda}{4}\left[(2l+1)^2-\lambda^2\right]\langle r^{\lambda-2}\rangle=0 \tag{3.220}$$

适用条件仍为

$$\lambda>-(2l+1)$$

式 (3.220)取 $\lambda=0$，立即得到

$$\langle r^2\rangle_{n_rlm}=\left(N+\frac{3}{2}\right)\alpha^{-2}=\left(N+\frac{3}{2}\right)\frac{\hbar}{\mu\omega} \tag{3.221}$$

这个结果很容易由 Virial 定理导出.

式 (3.220)中取 $\lambda=2$，并利用式 (3.221)，可得

$$\langle r^4\rangle_{n_rlm}=\frac{1}{8}\left[3(2N+3)^2-(2l+3)(2l-1)\right]\alpha^{-4} \tag{3.222}$$

例如， $N=0$(基态， $l=n_r=0$)

$$\langle r^2\rangle=\frac{3}{2}\alpha^{-2},\quad \langle r^4\rangle=\frac{15}{4}\alpha^{-4}$$

$N=1$(第一激发能级， $l=1,\ n_r=0$)

$$\langle r^2\rangle=\frac{5}{2}\alpha^{-2},\quad \langle r^4\rangle=\frac{35}{4}\alpha^{-4}$$

这些结果不难用直接积分的办法加以验证.

对于给定的能级 E_n， l 可取 $N,\ N-2,\ \cdots,\ 1,0$. 式 (3.221)表明 $\langle r^2\rangle$ 只与 N 直接有关，与 l 无关. 式 (3.222)则表明 $\langle r^4\rangle$ 与 N、l 都有关， N 给定后， l 越大， $\langle r^4\rangle$ 越大.

3.37　原子核的突然 β^- 衰变

题 3.37　设电荷为 Ze 的原子核突然发生 β^- 衰变，核电荷变成 $(Z+1)e$(图 3.10). 求衰变前原子 Z 中一个 K 电子 (1s 轨道上电子) 在衰变后仍然保持在新的原子 $(Z+1)$ 的 K 轨道的概率.

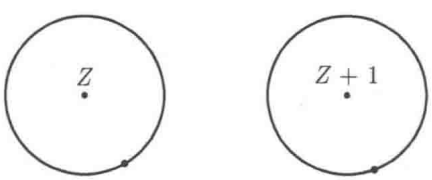


图 3.10　原子核突然发生 β^- 衰变前后的原子

解答　类氢原子 K 轨道 (基态) 波函数

$$\psi_{100}(r,\theta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{\pi}a_z^{3/2}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_z}} \tag{3.223}$$

其中，$a_z=a_0/Z$，a_0 为 Bohr 半径. 电子在 Ze 与 $(Z+1)e$ 的原子核势场中的 K 轨道波函数分别为

$$\psi_i(r,\theta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{\pi}a_z^{3/2}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_z}},\quad \psi_f(r,\theta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{\pi}a_{z+1}^{3/2}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_{z+1}}} \tag{3.224}$$

ψ_i 在 ψ_f 中的概率振幅为

$$\begin{aligned}\langle\psi_\mathrm{i}|\psi_\mathrm{f}\rangle &= \iiint\psi_\mathrm{i}^*(r,\theta,\varphi)\psi_\mathrm{f}(r,\theta,\varphi)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=4\pi\int_0^\infty\frac{1}{\pi a_z^{3/2}a_{z+1}^{3/2}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_z}-\frac{r}{a_{z+1}}}r^2\mathrm{d}r\\ &= 4[Z(Z+1)]^{3/2}\int_0^\infty\mathrm{e}^{-(2Z+1)\xi}\xi^2\mathrm{d}\xi=4\frac{[Z(Z+1)]^{3/2}}{(2Z+1)^3}\int_0^\infty\mathrm{e}^{-\lambda}\lambda^2\mathrm{d}\lambda\\ &= \frac{8[Z(Z+1)]^{3/2}}{(2Z+1)^3}=\frac{[Z(Z+1)]^{3/2}}{(Z+1/2)^3}\end{aligned} \tag{3.225}$$

这样所求的概率为

$$|\langle\psi_\mathrm{f}|\psi_\mathrm{i}\rangle|^2=\frac{[Z(Z+1)]^3}{(Z+1/2)^6} \tag{3.226}$$

当 $Z\gg1$ 时，上式可以近似取成

$$P_{100}\approx1-\frac{3}{4Z^2}$$

例如

$$Z=10,\quad P_{100}\approx0.9932;\quad Z=30,\quad P_{100}\approx0.9992$$

3.38　用不确定性关系估算氦原子的基态能量

题 3.38　利用不确定性关系估算氦原子的基态能量.

解答　氦原子中共有两个电子，电荷各为 $-e$，核电核为 $2e$，取 Oppenheimer 近似 (讨论电子运动时，原子核的动能可忽略不计)，Hamilton 量为

$$H=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}_1^2+\boldsymbol{p}_2^2\right)-2e^2\left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right)+\frac{e^2}{r_{12}} \tag{3.227}$$

设原子的最概然半径为 $r\sim R$，则在式 (3.227)的基态期望值中可取

$$\left\langle\frac{1}{r_1}\right\rangle=\left\langle\frac{1}{r_2}\right\rangle\approx\frac{1}{R},\qquad\left\langle\frac{1}{r_{12}}\right\rangle\approx\frac{1}{2R}$$

根据不确定性关系，可取

$$\left\langle\boldsymbol{p}_1^2\right\rangle=\left\langle\boldsymbol{p}_2^2\right\rangle\approx\hbar^2/R^2$$

因此基态能量约为

$$E=\langle H\rangle\approx\frac{\hbar^2}{mR^2}-\left(4-\frac{1}{2}\right)\frac{e^2}{R} \tag{3.228}$$

R 的取值应使 E 为极小. 由极值条件

$$\frac{\partial E}{\partial R}=0$$

求得

$$R=\frac{1}{2-1/4}\cdot\frac{\hbar^2}{me^2}=\frac{4}{7}a_0 \tag{3.229}$$

其中，$a_0=\hbar^2/me^2$ 为 Bohr 半径. 将式 (3.229)代入式 (3.228)，即得

$$E\approx-\left(\frac{7}{4}\right)^2\frac{e^2}{a_0}=-3.06\frac{e^2}{a_0}$$

核原子基态能量的实验值为 $-2.9035e^2/a_0$.

3.39　估算核力的力程

题 3.39　按照核力的介子理论，核力的较长程部分是通过核子间传递 π 介子实现的. 已知 π 介子质量 $m_\pi\sim 270m_\mathrm{e}$，试据此估算核力力程.

解法一　实验表明，核力与电荷无关. 因此在力程 r_0 的结构式中，除了介子质量 m_π 外，只能出现普适常数. 由于问题涉及介子的产生湮灭，有关的普适常数应该包含光速 c(代表相对论效应) 和 Planck 常量 $\hbar$(代表量子效应). 采用量纲分析，质量 m_π、光速 c、Planck 常量 $\hbar$，组合出长度量纲量的力程 $r_0=fc^\alpha m_\pi^\beta\hbar^\gamma$. 将其量纲列表如下：

	c	m_π	$\hbar$	r_0
M	0	1	1	0
L	1	0	2	1
T	−1	0	−1	0

若两个量相等，则其量纲必相等. 由此列出如下关于量纲指数的方程组：

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

解上面线性方程组，得 $\alpha=-1$，$\beta=-1$，$\gamma=1$. 因此，核力的较长程部分的力程大致是

$$r_0\approx\frac{\hbar}{m_\pi c}=\frac{\hbar c}{m_\pi c^2}=\frac{197\mathrm{MeV}\cdot\mathrm{fm}}{270\times 0.511\mathrm{MeV}}=1.4\mathrm{fm}$$

解法二　利用不确定性关系. 问题涉及的能量不定值约为

$$\Delta E\sim m_\pi c^2$$

动量不定值约为

$$\Delta p \sim \frac{\Delta E}{c} \sim m_\pi c$$

位置不定值约为

$$\Delta x \sim \frac{\hbar}{\Delta p} \sim \frac{\hbar}{m_\pi c}$$

Δx(按数量级说) 应该就是核力力程 r_0，所以

$$r_0 \approx \frac{\hbar}{m_\pi c} = 1.4\text{fm}$$

3.40　对于氢原子基态，验证不确定性关系

题 3.40　对于氢原子基态，计算 Δx、Δp_x，验证不确定性关系.

解法一　在坐标表象中氢原子归一化的基态波函数为

$$\psi(r,\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi} a_0^{3/2}} \mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}} \tag{3.230}$$

其中，$a_0 \equiv \dfrac{\hbar^2}{\mu e^2}$ 是 Bohr 半径. 现用波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$ 计算坐标的期望值.

$$\overline{x} = \iiint |\psi(\boldsymbol{r})|^2 x \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \frac{1}{\pi a_0^3} \iiint \mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}} (r\sin\theta\cos\varphi) \cdot r^2 \sin\theta \mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi \tag{3.231}$$

做关于 φ 的积分可知上式为零，即有 $\overline{x} = 0$. 而

$$\begin{aligned}
\overline{x^2} &= \iiint |\psi(\boldsymbol{r})|^2 x^2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \frac{1}{\pi a_0^3} \iiint \mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}} (r\sin\theta\cos\varphi)^2 \cdot r^2 \sin\theta \mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi \\
&= \frac{1}{\pi a^3} \int \mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}} r^4 \mathrm{d}r \int_0^\pi \sin^3\theta \mathrm{d}\theta \int_0^{2\pi} \cos^2\varphi \mathrm{d}\varphi \\
&= \frac{1}{\pi a_0^3} \int \mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}} r^4 \mathrm{d}r \cdot \int_0^\pi \left(\frac{3}{4}\sin\theta - \frac{1}{4}\sin 3\theta\right) \mathrm{d}\theta \int_0^{2\pi} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\cos 2\varphi\right) \mathrm{d}\varphi \\
&= \frac{1}{\pi a^3} \cdot \frac{4!}{(2/a_0)^5} \cdot \frac{8}{6} \cdot \pi = a_0^2
\end{aligned} \tag{3.232}$$

式 (3.231) 和式 (3.232) 给出

$$(\Delta x)^2 = \overline{(x - \overline{x})^2} = \overline{x^2} - \overline{x}^2 = a_0^2 - 0 = a_0^2 \tag{3.233}$$

因此氢原子中电子的 x 坐标不确定度为

$$\Delta x = a_0 \tag{3.234}$$

接下来用题 3.60 式 (3.362) 所给的动量波函数 $\varphi(\boldsymbol{p})$ 来计算与动量有关的期望值. 动量 $\boldsymbol{p}$ 是积分变量，对其采用球坐标，用 p、θ'、φ' 表示. 动量直角坐标分量 p_x、p_y、p_z 表示 $p_x = p\sin\theta'\cos\varphi'$，$p_y = p\sin\theta'\sin\varphi'$，$p_z = p\cos\theta'$，这样

$$\overline{p}_x = \iiint |\varphi(\boldsymbol{p})|^2 p_x \mathrm{d}^3\boldsymbol{p}$$

$$= \frac{(2a_0)^3\hbar^5}{\pi^2}\iiint \frac{p}{\left(a_0^2p^2+\hbar^2\right)^4}\sin\theta'\cos\varphi'\cdot p^2\mathrm{d}p\sin\theta'\mathrm{d}\theta'\mathrm{d}\varphi'$$

$$= \frac{(2a_0)^3\hbar^5}{\pi^2}\int_0^\infty \frac{p^3\mathrm{d}p}{\left(a_0^2p^2+\hbar^2\right)^4}\int_0^\pi \sin^2\theta'\mathrm{d}\theta'\int_0^{2\pi}\cos\varphi'\mathrm{d}\varphi' = 0 \tag{3.235}$$

而 p_x^2 的期望值为

$$\begin{aligned}\overline{p_x^2} &= \iiint |\varphi(\boldsymbol{p})|^2 p_x^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}\\ &= \frac{8a_0^3\hbar^5}{\pi^2}\iiint \frac{p^2}{\left(a_0^2p^2+\hbar^2\right)^4}\sin^2\theta'\cos^2\varphi'\cdot p^2\mathrm{d}p\sin\theta'\mathrm{d}\theta'\mathrm{d}\varphi'\\ &= \frac{8a_0^3\hbar^5}{\pi^2}\int_0^\infty \frac{p^4\mathrm{d}p}{\left(a_0^2p^2+\hbar^2\right)^4}\int_0^\pi \sin^3\theta'\mathrm{d}\theta'\int_0^{2\pi}\cos^2\varphi'\mathrm{d}\varphi'\end{aligned} \tag{3.236}$$

式 (3.236) 中关于 p 的积分可做变量代换 $a_0p=\hbar\tan\xi$ 得

$$\int_0^\infty \frac{p^4}{(a_0^2p^2+\hbar^2)^4}\mathrm{d}p = \frac{1}{a_0^5\hbar^3}\int_0^{\frac{\pi}{2}}\sin^4\xi\cos^2\xi\mathrm{d}\xi$$

$$= \frac{1}{16a_0^5\hbar^3}\int_0^{\frac{\pi}{2}}\left(1-\frac{\cos2\xi}{2}-\cos4\xi+\frac{\cos6\xi}{2}\right)\mathrm{d}\xi = \frac{\pi}{32}\frac{1}{a_0^5\hbar^3}$$

代入式 (3.236) 得

$$\begin{aligned}\overline{p_x^2} &= \frac{8^3\hbar^5}{\pi^2}\cdot\frac{\pi}{32}\frac{1}{a_0^5\hbar^3}\cdot\int_0^\pi\left(\frac{3}{4}\sin\theta'-\frac{1}{4}\sin3\theta'\right)\mathrm{d}\theta'\frac{1}{2}\int_0^{2\pi}(1+\cos2\varphi')\mathrm{d}\varphi'\\ &= \frac{\hbar^2}{32a_0^2\pi}\cdot\left[-3\cos\theta'+\frac{1}{3}\cos3\theta'\right]\Big|_0^\pi\cdot2\pi = \frac{\hbar^2}{3a_0^2}\end{aligned} \tag{3.237}$$

式 (3.231) 和式 (3.232) 给出

$$(\Delta p_x)^2 = \overline{(p_x-\overline{p}_x)^2} = \overline{p_x^2}-\overline{p_x}^2 = \frac{\hbar^2}{3a_0^2}-0 = \frac{\hbar^2}{3a_0^2} \tag{3.238}$$

因此 x 方向动量不确定度为

$$\Delta p_x = \frac{\hbar}{\sqrt{3}a_0} \tag{3.239}$$

这样由式 (3.234) 与式 (3.239) 得

$$\Delta x\Delta p_x = a_0\frac{\hbar}{\sqrt{3}a_0} = \frac{\hbar}{\sqrt{3}} > \frac{\hbar}{2}$$

可见 $\Delta x\Delta p_x$ 满足不确定性关系.

解法二　$\overline{x}$、$\overline{x^2}$ 的计算与解法一相同. 对 $\overline{p}_x$、$\overline{p_x^2}$ 若直接在坐标表象计算更为简单

$$\overline{p}_x = \iiint \psi(\boldsymbol{r})^*(-\mathrm{i}\hbar)\frac{\partial}{\partial x}\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \frac{-\mathrm{i}\hbar}{\pi a_0^3}\iiint \mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\frac{\partial}{\partial x}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$

$$= \frac{\mathrm{i}\hbar}{\pi a_0^3}\iiint \frac{x}{a_0 r}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z = 0$$

以及

$$\begin{aligned}
\overline{p_x^2} &= \iiint \psi(\boldsymbol{r})^* p_x^2 \psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \iiint [p_x\psi(\boldsymbol{r})]^* p_x\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \\
&= \iiint |p_x\psi(\boldsymbol{r})|^2\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \hbar^2\iiint \left|\frac{\partial}{\partial x}\psi(\boldsymbol{r})\right|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \\
&= \frac{\hbar^2}{\pi a_0^3}\iiint \left|\frac{\partial}{\partial x}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\right|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \frac{\hbar^2}{\pi a_0^5}\iiint \frac{x^2}{r^2}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \\
&= \frac{\hbar^2}{\pi a_0^5}\iiint \frac{1}{3r^2}\left(x^2+y^2+z^2\right)\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \frac{\hbar^2}{3\pi a^5}\iiint \mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \\
&= \frac{\hbar^2}{3a_0^2}\iiint |\psi(\boldsymbol{r})|^2\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \frac{\hbar^2}{3a_0^2}
\end{aligned}$$

最后一个等式用了波函数的归一化条件，下面答题与解法一同，略去. 与解法一比较，可见求解某个力学量在某个态下的期望值，不一定是在该力学量的表象下求解最方便.

解法三　氢原子归一化的基态波函数为 $\langle\boldsymbol{r}|100\rangle = \psi(r,\theta,\varphi) = \dfrac{1}{\sqrt{\pi}a_0^{3/2}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}$，可见具有空间反射与空间旋转的不变性. 这样

$$\langle\boldsymbol{r}\rangle = \langle 100|\boldsymbol{r}|100\rangle = \langle 100|\Pi^{-1}\Pi\boldsymbol{r}\Pi^{-1}\Pi|100\rangle = -\langle 100|\boldsymbol{r}|100\rangle = 0,$$

其中，Π 为宇称算符，而 Π^{-1} 为其逆算符. 同理得 $\langle\boldsymbol{p}\rangle = 0$. 因而 $\overline{x} = \overline{p}_x = 0$. 由波函数的旋转不变性得

$$\begin{aligned}
\overline{x^2} &= \overline{y^2} = \overline{z^2} = \frac{1}{3}\overline{\left(x^2+y^2+z^2\right)} = \frac{1}{3}\overline{r^2} \\
\overline{p_x^2} &= \overline{p_y^2} = \overline{p_z^2} = \frac{1}{3}\overline{\left(p_x^2+p_y^2+p_z^2\right)} = \frac{1}{3}\overline{p^2}
\end{aligned}$$

而 r^2 与 p^2 的期望值如下计算：

$$\begin{aligned}
\overline{r^2} &= \int \psi_{100}^* r^2\psi_{100}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \frac{1}{\pi a_0^3}\int \mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}r^4\mathrm{d}r\mathrm{d}^2\Omega \\
&= \frac{4\pi}{\pi a_0^3}\int \mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}r^4\mathrm{d}r = \frac{4}{a_0^3}\left(\frac{a_0}{2}\right)^5\int \mathrm{e}^{-x}x^4\mathrm{d}x = \frac{4}{a_0^3}\left(\frac{a_0}{2}\right)^5 4! \\
&= 3a_0^2 \qquad (3.240) \\
\overline{p^2} &= \int |\boldsymbol{p}\psi_{100}|^2\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \hbar^2\int |\nabla\psi_{100}|^2\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \hbar^2\int \left|\frac{\partial}{\partial r}\psi_{100}\right|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \\
&= \hbar^2\frac{1}{\pi a_0^5}\int \mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}r^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \frac{\hbar^2}{a_0^2}\iiint |\psi(\boldsymbol{r})|^2\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \frac{\hbar^2}{a_0^2} \qquad (3.241)
\end{aligned}$$

下面答题与解法一同，略去.

解法四　(关于 $\overline{p}_x$、$\overline{p_x^2}$ 的计算) 由题 5.12，束缚定态下动量期望值为零，故 $\overline{p}_x=0$. 氢原子问题势函数 $V=-e^2/r$，利用 Virial 定理得

$$2\overline{T}=\overline{\boldsymbol{r}\cdot\nabla V}=-\overline{V}$$

而 $\overline{T}+\overline{V}=E$，因而 $\overline{T}=-E$. 由此得 $\overline{p_x^2}=\dfrac{1}{3}\overline{p^2}=\dfrac{\hbar^2}{3a_0^2}$.

3.41　类氢离子“圆轨道”态的讨论

题 3.41　对于类氢原子 (核电荷为 Ze) 的“圆轨道”(指 $n_r=0$，即 $l=n-1$ 的轨道)，计算

(1) 最可几半径；

(2) 平均半径；

(3) 涨落 $\Delta r=\left[\langle r^2\rangle-\langle r\rangle^2\right]^{1/2}$，并和平均半径比较.

解答　类氢原子径向波函数为

$$R_{nl}=N_{nl}\mathrm{e}^{-\xi/2}\xi^l\mathrm{F}(-n_r,2l+2,\xi)$$

其中，$\xi=\dfrac{2r}{na}$，$N_{nl}=\dfrac{2}{a^{3/2}n^2(2l+1)!}\sqrt{\dfrac{(n+l)!}{(n-l-1)!}}$ 为归一化常数，而 $a=a_0/Z$，Z 为核电荷数，a_0 为 Bohr 半径. “圆轨道”对应于 $n_r=0$，则 $\mathrm{F}=1$，$l=n-1$. 这样

$$R_{nl}=N_{nl}\mathrm{e}^{-\xi/2}\xi^{n-1},\quad N_{nl}=\frac{2}{a^{3/2}n^2\sqrt{(2n-1)!}}\tag{3.242}$$

电子在 $r\sim r+\mathrm{d}r$ 处出现的概率为

$$p(r)\mathrm{d}r=R_{nl}^*R_{nl}r^2\mathrm{d}r=N_{nl}^2\mathrm{e}^{-\xi}\xi^{2n}\frac{n^2a^2}{4}\mathrm{d}r\tag{3.243}$$

对 $p(r)$ 求极值，由 $\mathrm{d}p(r)/\mathrm{d}r=0$ 得

$$\mathrm{e}^{-\xi}\left(-\xi^{2n}+2n\xi^{2n-1}\right)=0\tag{3.244}$$

即 $\xi=2n$，即得最可几半径 $r=n^2a_0/Z$. 平均半径如下给出：

$$\begin{aligned}\langle r\rangle &= \int_0^\infty rp(r)\mathrm{d}r=\frac{n^2a^2}{4}\int_0^\infty N_{nl}^2\mathrm{e}^{-\xi}\xi^{2n}r\mathrm{d}r=\frac{n^4a^4}{16}\frac{4}{a^3n^4(2n-1)!}\int_0^\infty\mathrm{e}^{-\xi}\xi^{2n+1}\mathrm{d}\xi\\ &= a\frac{2n(2n+1)}{4}=\left(n^2+\frac{n}{2}\right)a\end{aligned}\tag{3.245}$$

半径平方的平均如下给出：

$$\langle r^2\rangle = \int_0^\infty r^2p(r)\mathrm{d}r=\frac{n^2a^2}{4}\int_0^\infty N_{nl}^2\mathrm{e}^{-\xi}\xi^{2n}r^2\mathrm{d}r=\frac{n^5a^5}{32}\frac{4}{a^3n^4(2n-1)!}\int_0^\infty\mathrm{e}^{-\xi}\xi^{2n+2}\mathrm{d}\xi$$

$$= a^2\frac{2n^2(2n+1)(2n+2)}{8} = \left(n^4+\frac{3}{2}n^3+\frac{1}{2}n^2\right)a^2 \tag{3.246}$$

由式 (3.245) 和式 (3.246) 得径向位置的涨落为

$$\Delta r = \left[\langle r^2\rangle - \langle r\rangle^2\right]^{\frac{1}{2}} = \frac{n}{2}\sqrt{2n+1}a$$

其中，$a = a_0/Z$，a_0 为 Bohr 半径. 由上式可见，$\Delta r/\langle r\rangle = 1/\sqrt{2n+1}$. 可见，$n$ 越大，$\Delta r/\langle r\rangle$ 越小，量子力学的结果和 Bohr 量子化轨道的图像越接近.

3.42　对于氢原子中的“圆轨道”态，求电子在经典禁区 ($V > E$) 中的概率

题 3.42　对于氢原子中的“圆轨道”，即 $(n, n-1, m)$ 态，求电子在经典禁区 $(V > E)$ 中的概率.

解答　氢原子的“圆轨道” $(n, n-1, m)$ 态，其径向波函数节点数 $n_r = 0$，波函数为

$$\psi_{n,n-1,m} = Cr^{n-1}\mathrm{e}^{-r/na_0}\mathrm{Y}_{n-1,m}(\theta,\varphi) \tag{3.247}$$

其中 C 为归一化常数. 容易求得

$$C^2 = \frac{1}{(2n)!}\left(\frac{2}{na_0}\right)^{2n+1} \tag{3.248}$$

经典禁区就是 $V > E$ 的区域. 对于定态，能量 $E = E_n$ 是确定的. 经典允许区和禁区以球面 r_n 为分界，球外为禁区. r_n 由 $V = E_n$ 决定，即

$$V(r_n) = -\frac{e^2}{r_n} = E_n = \frac{-e^2}{2n^2a_0} \tag{3.249}$$

求得 $r_n = 2n^2a_0$，这是最概然半径的 2 倍. 可见经典禁区相当于 $r > r_n = 2n^2a$. 根据式 (3.247) 计算，电子在经典禁区 $(r > r_n)$ 出现的概率为

$$\begin{aligned} P_n &= \int_{r_n}^{\infty}\int \mathrm{d}\Omega\,|\psi_{n,n-1,m}|\,r^2\mathrm{d}r = \int_{r_n}^{\infty}(R_{n,n-1})^2r^2\mathrm{d}r \\ &= C^2\left(\frac{na_0}{2}\right)^{2n+1}\int_{4n}^{\infty}x^{2n}\mathrm{e}^{-x}\mathrm{d}x \end{aligned} \tag{3.250}$$

采用分部积分法完成上述积分，结果为

$$P_n = \left[1+4n+\frac{(4n)^2}{2!}+\frac{(4n)^3}{3!}+\cdots+\frac{(4n)^{2n}}{(2n)!}\right]\exp(-4n)$$

例如，

$n = 1$(基态)	$P_1 = 13\times\mathrm{e}^{-4} = 0.2381$
$n = 2$	$P_2 = 297\times\mathrm{e}^{-8} = 0.0996$
$n = 3$	$P_3 = 7457.8\times\mathrm{e}^{-12} = 0.0458$
$n = 4$	$P_4 = 195381\times\mathrm{e}^{-16} = 0.0220$
$n = 5$	$P_5 = 5244270\times\mathrm{e}^{-20} = 0.0108$
$n = 10$	$P_{10} = 8.669\times10^{13}\times\mathrm{e}^{-40} = 0.000368$
⋯	⋯

可见， n 很大时，量子力学结果和经典力学结果趋于一致.

3.43　对于氢原子的各 s 态计算 Δx、 Δp_x

题 3.43　对于氢原子的各 s 态 $(nlm=n00)$，计算 Δx、 Δp_x，讨论 $n\gg 1$ 情况.

解答　s 态各向同性，所以 $\langle x\rangle=0$， $\langle p_x\rangle=0$，并且有

$$\langle x^2\rangle=\langle y^2\rangle=\langle z^2\rangle=\frac{1}{3}\langle \boldsymbol{r}^2\rangle,\quad \langle p_x^2\rangle=\langle p_y^2\rangle=\langle p_z^2\rangle=\frac{1}{3}\langle \boldsymbol{p}^2\rangle \tag{3.251}$$

而 $\langle \boldsymbol{r}^2\rangle$ 的计算在题 3.35 给出，在式 (3.215) 中取 $Z=1,l=0$，给出

$$\langle r^2\rangle=\frac{n^2}{2}\left(1+5n^2\right)a_0^2 \tag{3.252}$$

其中， $a_0=\hbar^2/\mu e^2$ 为 Bohr 半径. 因此利用 s 态各向同性

$$\Delta x=\sqrt{\langle x^2\rangle}=\sqrt{\langle r^2\rangle}/\sqrt{3}=\frac{n}{\sqrt{6}}\sqrt{1+5n^2}a_0 \tag{3.253}$$

当 $n\gg 1$ 时，

$$\Delta x\approx\sqrt{\frac{5}{6}}n^2a_0 \tag{3.254}$$

根据 Virial 定理和氢原子能级公式

$$\frac{1}{2\mu}\langle \boldsymbol{p}^2\rangle_{n00}=|E_n|=\frac{e^2}{2n^2a_0} \tag{3.255}$$

因而

$$\langle \boldsymbol{p}^2\rangle_{n00}=\frac{\mu e^2}{n^2a_0}=\frac{\hbar^2}{n^2a_0^2} \tag{3.256}$$

因此利用 s 态各向同性

$$\Delta p_x=\sqrt{\langle p_x^2\rangle}=\sqrt{\langle \boldsymbol{p}^2\rangle}/\sqrt{3}=\hbar/\sqrt{3}na_0 \tag{3.257}$$

从而

$$\Delta x\Delta p_x=\sqrt{\frac{1+5n^2}{18}}\hbar$$

$n\gg 1$ 时， $\Delta x\Delta p_x\approx\sqrt{\dfrac{5}{18}}n\hbar=0.527n\hbar>\dfrac{n\hbar}{2}$. 这差不多是不确定性关系规定的下限 $\dfrac{\hbar}{2}$ 的 n 倍.

3.44　碱金属价电子受屏蔽势作用时的能级

题 3.44　设碱金属原子中的价电子所受原子实 (原子核 + 满壳电子) 的作用近似表示为

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

$a=\hbar^2/(\mu e^2)$ 为 Bohr 半径，试求价电子的能级，并与氢原子能级作比较.

解答　有心力场的径向波函数 R 满足径向 Schrödinger 方程

$$\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\right)+\left\{\frac{2\mu}{\hbar^2}[E-V(r)]-\frac{l(l+1)}{r^2}\right\}R=0 \tag{3.258}$$

将势函数 $V(r)$ 代入

$$\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\right)+\left\{\frac{2\mu E}{\hbar^2}+\frac{2}{ar}-[l(l+1)-2\lambda]\frac{1}{r^2}\right\}R=0 \tag{3.259}$$

令 $R(r)=\chi(r)/r$，代入式 (3.259) 得

$$\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}r^2}+\left\{\frac{2\mu E}{\hbar^2}+\frac{2}{ar}-[l(l+1)-2\lambda]\frac{1}{r^2}\right\}\chi=0 \tag{3.260}$$

上式可写为

$$\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}r^2}+\left\{\frac{2\mu E}{\hbar^2}+\frac{2}{ar}-\frac{l'(l'+1)}{r^2}\right\}\chi=0 \tag{3.261}$$

其中，l' 满足 $l(l+1)-2\lambda=l'(l'+1)$. 从中解出 l' 得 $l'=\pm\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2-2\lambda}-\frac{1}{2}$，这里 l' 应取正值，使得满足当 $\lambda\to 0$ 时，$l'\to l$. 也就是

$$l'=\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2-2\lambda}-\frac{1}{2} \tag{3.262}$$

式 (3.261) 除了 l' 值不同，与解氢原子束缚态的径向方程完全相同. 这样利用氢原子束缚态的结果得到碱金属原子中的价电子能级为

$$E_n=-\frac{e^2}{2a}\cdot\frac{1}{n'^2}=-\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}\cdot\frac{1}{n'^2} \tag{3.263}$$

式中的 n' 是主量子数，如下给出：

$$n'=n_r+l'+1,\quad n_r=0,1,2,\cdots$$

n' 一般不是整数. 相应的径向波函数为

$$R_{n'l'}(r)=N'_{n'l'}\mathrm{e}^{-\frac{\xi}{2}}\xi^l\mathrm{F}(-n+l'+1,2l'+2,\xi)$$

其中 F 为合流超几何函数，$N'_{n'l'}$ 为归一化系数，l' 由式 (3.262) 给出，取正值. 价电子总的波函数为 $R_{n'l'}(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$.

通常令

$$l'=l+\Delta l,\quad n'=n_r+l+\Delta l+1=n+\Delta l$$

称为量子数 l 和 n 的“修正数”. 由于式 (3.262) 中 $0<\lambda\ll 1$，

$$\Delta l\approx-\lambda/(l+1/2)\ll 1$$

由于 $0<\lambda\ll 1$，所以 $\Delta l\ll 1$. 因此，本题所得能级 E_{nl} 和氢原子能级仅有较小的差别，但是能级的“l 简并”已经消除，式 (3.262) 和碱金属光谱的实验资料大体一致，尤其是，修正数 Δl 随 l 升高而减小，和实验符合.

3.45　中心力场等效势的讨论

题 3.45　中心力场问题中，$V(r)$ 和离心势能之和为等效势能，记作

$$V_l(r)=V(r)+l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}$$

如 $V_l(r)$ 存在极小值，相应的距离称为“平衡距离”，对于类氢离子 (核电荷 Ze)，$l\gg 1$ 的情形，试按下列步骤处理径向方程：

(1) 求 $V_l(r)$ 的极小值及平衡距离 r_l；

(2) 将 $V_l(r)$ 在 r_l 附近作 Taylor 展开，保留 $(r-r_l)^2$ 项；

(3) 视电子的径向运动为 r_l 附近的小振动，对于确定的 $l(l\gg 1)$，求最低能级和激发能级，并和精确解比较.

解答　(1) 类氢离子的势能和等效势能为

$$V(r)=-\frac{Ze^2}{r},\qquad V_l(r)=l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}-\frac{Ze^2}{r}$$

由极值条件

$$\frac{\partial V_l}{\partial r}=0$$

求出

$$r_l=l(l+1)\frac{a_0}{Z}$$

其中，$a_0=\hbar^2/\mu e^2$ 为 Bohr 半径，$V_l(r)$ 的极小值为

$$V_l(r_l)=-\frac{Z^2e^2}{2l(l+1)a_0}=-\frac{Ze^2}{2r_l}$$

(2) 令 $r=r_l+\xi$，将 $V_l(r)$ 在 r_l 附近作 Taylor 展开

$$\begin{aligned}V_l(r)&=V_l(r_l+\xi)=V_l(r_l)+V_l''(r_l)\frac{\xi^2}{2!}+\cdots\\&=V_l(r_l)+\frac{1}{2}\mu\omega_l^2\xi^2+\cdots\end{aligned}\tag{3.264}$$

其中

$$\mu\omega_l^2=V_l''(r_l)=3l(l+1)\frac{\hbar^2}{\mu r_l^4}-\frac{2Ze^2}{r_l^3}=\frac{Ze^2}{r_l^3}$$

也就有

$$\omega_l=\sqrt{\frac{Ze^2}{\mu r_l^3}}=\sqrt{\frac{(Ze)^4}{l^3(l+1)^3\hbar^2a_0^2}}\tag{3.265}$$

(3) $(H,\boldsymbol{L}^2,L_z)$ 的共同本征态可以表示为

$$\psi=R(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{u(r)}{r}\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$$

其中，$u(r)$ 满足径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2}+V_l(r)u=Eu$$

将 $V_l(r)$ 的展开式 (3.264)代入上式，即得

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\xi^2}+\frac{1}{2}\mu\omega_l^2\xi^2u=[E-V_l(r_l)]\,u=E'u \tag{3.266}$$

式 (3.266)在形式上正是一维谐振子的能量本征方程，本征值为

$$E-V_l(r_l)=E'=\left(n_r+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_l,\quad n_r=0,1,2,\cdots \tag{3.267}$$

将式 (3.265)代入式 (3.267)，即得本题所求能级公式

$$E=V_l(r_l)+\left(n_r+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_l=-\frac{Z^2e^2}{2a_0}\left[\frac{1}{l(l+1)}-\frac{1+2n_r}{l^{3/2}(l+1)^{3/2}}\right]=E_{n_rl} \tag{3.268}$$

由于利用了近似展开式 (3.264)，所以式 (3.268)只适用于 n_r 较小的情形，即“小振动”. 式 (3.268)的特点是，能级间距是均匀的. 可以按照 $n_r=0,1,2,\cdots$，将它们依次记为 E_{0l}、E_{1l}、E_{2l}、$\cdots$

类氢离子能级的精确解为

$$E_n=-\frac{Z^2e^2}{2n^2a_0},\quad n=l+n_r+1 \tag{3.269}$$

现在将式 (3.268)和式 (3.269)在 $l\gg1$，$n_r\ll l$ 条件下加以比较. 对于给定的 l，精确解式 (3.269)中的最低能级 $(n_r=0)$ 为

$$E_n(n_r=0)=E_{l+1}=-\frac{Z^2e^2}{2(l+1)^2a_0} \tag{3.270}$$

低激发 $(n_r\ll l)$ 能级为

$$\begin{aligned}E_n&=E_{l+1+n_r}=-\frac{Z^2e^2}{2(l+1+n_r)^2a_0}\\&=E_{l+1}\left(1+\frac{n_r}{l+1}\right)^{-2}\approx E_{l+1}\left(1-\frac{2}{l+1}n_r\right)\end{aligned} \tag{3.271}$$

能级间距也是近似均匀的，相邻能级之差为

$$\Delta E\approx\frac{2}{l+1}|E_{l+1}|=\frac{Z^2e^2}{(l+1)^3a_0} \tag{3.272}$$

式 (3.268)的最低能级为

$$E_{0l}=-\frac{Z^2e^2}{2a_0}\left[\frac{1}{l(l+1)}-\frac{1}{l^{3/2}(l+1)^{3/2}}\right]$$

$$= -\frac{Z^2e^2}{2a_0(l+1)^2}\left(\frac{l+1}{l}-\frac{\sqrt{l+1}}{l^{3/2}}\right) \tag{3.273}$$

由于 $l\gg 1$，可以取近似

$$\frac{l+1}{l}-\frac{\sqrt{l+1}}{l^{3/2}}=1+\frac{1}{l}-\frac{1}{l}\sqrt{1+\frac{1}{l}}\approx 1-\frac{1}{2l^2}$$

因此

$$E_{0l}\approx E_{l+1}\left(1-\frac{1}{2l^2}\right)$$

和式 (3.270)很接近. 式 (3.268)的能级间距为

$$\hbar\omega_l=\frac{Z^2e^2}{a_0[l(l+1)]^{3/2}}=\frac{Z^2e^2}{a_0(l+1)^3}\left(\frac{l+1}{l}\right)^{\frac{3}{2}}\approx\frac{Z^2e^2}{a_0(l+1)^3}\left(1+\frac{3}{2l}\right)$$

和式 (3.272)很接近.

3.46　双原子分子内部运动能级的近似表达式

题 3.46　双原子分子中两原子的相对运动波函数 $(H,\boldsymbol{L}^2,L_z)$ 的共同本征函数可以表示为

$$\psi=R(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)=\frac{1}{r}u(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$$

其中球谐函数 Y_{lm} 描写分子的转动. u 满足径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}u''+\left[V(r)+l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u=Eu \tag{3.274}$$

其中，μ 为约化质量，$l=0,1,2,\cdots$ 为转动角动量量子数，$V(r)$ 为两个原子的相互作用势. 近似地取 $V(r)$ 为振子势能

$$V(r)=\frac{1}{2}\mu\omega_0^2(r-R)^2$$

R 为分子键长，即振动、转动完全停止时两个原子核间的距离. 设

$$\frac{1}{2}\mu\omega_0^2R^2\gg l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu R^2}=E_l \tag{3.275}$$

其中，E_l 是 $r=R$ 时分子的转动能级. 试求分子内部运动 (振动和转动) 能级 E 的近似表达式，并扼要说明各项的意义.

解答　径向方程 (3.274)中，等效势能为

$$V_l(r)=V(r)+l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}=\frac{1}{2}\mu\omega_0^2(r-R)^2+l(l+1)\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \tag{3.276}$$

在条件 (3.275)下，必然存在平衡点 r_0 使 $V_l(r_0)$ 取 V_l 的极小值. r_0 由极值条件

$$\left.\frac{\mathrm{d}V_l}{\mathrm{d}r}\right|_{r=r_0}=0 \tag{3.277}$$

确定如下：

$$\frac{\mathrm{d}V_l}{\mathrm{d}r}=\mu\omega_0^2(r-R)-l(l+1)\frac{\hbar^2}{\mu r^3}\approx\mu\omega_0^2(r-R)-l(l+1)\frac{\hbar^2}{\mu R^3}$$

利用式 (3.277)即得

$$r_0\approx R+l(l+1)\frac{\hbar^2}{\mu\omega_0^2R^3} \tag{3.278}$$

其中第二项是由于转动引起的键的伸长.

将 V_l 在平衡点 r_0 附近作 Taylor 展开，得到

$$V_l(r)=V_l(r_0)+\frac{1}{2}V_l''(r_0)(r-r_0)^2+\cdots$$

略去 $(r-r_0)^3$ 以上各项，并令

$$x=r-r_0,\quad V_l''(r_0)=\mu\omega^2 \tag{3.279}$$

即得

$$V_l(r)=V_l(r_0)+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2$$

代入径向方程 (3.274)，即得

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2u=[E-V_l(r_0)]u=E'u \tag{3.280}$$

式 (3.280)形式上和一维谐振子的能量本征方程完全一样，所以

$$E-V_l(r_0)=E'=\left(\nu+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\quad \nu=0,1,2,3,\cdots \tag{3.281}$$

ν 为振动量子数. 由式 (3.276)、式 (3.277)容易求出

$$V_l(r_0)=\frac{1}{2}\mu\omega_0^2\left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{\mu^2\omega_0^2R^3}\right]^2+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_0^2} \tag{3.282}$$

其中

$$\frac{1}{r_0^2}=\frac{1}{R^2}\left[1+\frac{l(l+1)\hbar^2}{\mu^2\omega_0^2R^4}\right]^{-2}\approx\frac{1}{R^2}-\frac{2l(l+1)\hbar^2}{\mu^2\omega_0^2R^6}$$

代入式 (3.282)得

$$V_l(r_0)\approx\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu R^2}-\frac{l^2(l+1)^2\hbar^4}{2\mu^2\omega_0^2R^6} \tag{3.283}$$

由式 (3.276)、式 (3.278)、式 (3.282)可得

$$\omega^2=\frac{1}{\mu}V_l''(r_0)=\omega_0^2+3l(l+1)\frac{\hbar^2}{\mu^2r_0^4}$$

也就是

$$\omega=\omega_0\left[1+3l(l+1)\frac{\hbar^2}{\mu^2\omega_0^2r_0^4}\right]^{\frac{1}{2}}\approx\omega_0+\frac{3l(l+1)\hbar^2}{2\mu\omega_0R^4}$$

将式 (3.283)代入式 (3.281)，即得分子能级的表达式

$$E_{\nu l}\approx\left(\nu+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega+E_l-\frac{l^2(l+1)^2\hbar^4}{2\mu^3\omega_0^2R^6},\quad \nu=0,1,2,3,\cdots,\ l=0,1,2,3,\cdots \tag{3.284}$$

其中，$E_l=\dfrac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu R^2}$. 式 (3.284)中第三项是由于分子键长可变而引起的振动-转动修正项.

3.47　Morse 势的 s 态解

题 3.47　双原子分子中两原子间的作用可以用 Morse 势

$$V(r)=V_0\left[1-\mathrm{e}^{-(r-R)/a}\right]^2-V_0 \tag{3.285}$$

来描写. 对于分子内部运动 (相对运动) 的 s 态 ($l=0$)，试设法解出径向方程，确定能级公式 (束缚态).

解答　s 态波函数可以写为

$$\psi(r)=\frac{u(r)}{r}$$

$u(r)$ 满足径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2}+V(r)u=Eu,\quad -V_0<E<0 \tag{3.286}$$

μ 为约化质量，r 为两原子核间距离.

由式 (3.285)可知，$r=R$ 时 $V(r)$ 取极小值 $-V_0$，故 R 相当于分子的键长. 根据实验测定，$R>a$(数量级相同)，所以将 $V(r)$ 在 $r=R$ 附近作 Taylor 展开的办法对于本题不适用. 试作变换

$$\xi=\mathrm{e}^{-(r-R)/a} \tag{3.287}$$

则有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}=\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}r}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}=-\frac{\xi}{a}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}$$

式 (3.286)变为

$$\xi\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\xi^2}+\xi\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\xi}+(2\alpha^2\xi-\alpha^2\xi^2-\beta^2)u=0 \tag{3.288}$$

其中

$$\alpha=\frac{a}{\hbar}\sqrt{2\mu V_0},\quad \beta=\frac{a}{\hbar}\sqrt{-2\mu E}$$

由定义式 (3.287)易见

$$r\to\infty,\ \xi\to 0;\quad r\to R,\ \xi\to 1;\quad r\to 0,\ \xi\to \mathrm{e}^{R/a}\gg 1$$

近似地可以认为 $r\to 0$ 相当于 $\xi\to\infty$，根据 $\xi\to 0,\infty$ 处式 (3.288)的渐近性质，令

$$u=\xi^{\beta}\mathrm{e}^{-\alpha\xi}\mathrm{F}(\xi)$$

代入式 (3.288)，得到 $\mathrm{F}(\xi)$ 满足的方程

$$\xi\frac{\mathrm{d}^2\mathrm{F}}{\mathrm{d}\xi^2}+(2\beta+1-2a\xi)\frac{\mathrm{dF}}{\mathrm{d}\xi}-(\alpha+2\alpha\beta-2\alpha^2)\mathrm{F}=0 \tag{3.289}$$

再令 $\eta=2a\xi$，式 (3.289)就变为合流超几何方程

$$\eta\frac{\mathrm{d}^2\mathrm{F}}{\mathrm{d}\eta^2}+(2\beta+1-\eta)\frac{\mathrm{dF}}{\mathrm{d}\eta}-\left(\beta-\alpha+\frac{1}{2}\right)\mathrm{F}=0 \tag{3.290}$$

式 (3.290)当 $\eta\to 0$ ($\xi\to 0, r\to\infty$) 时能使 $u\to 0$ 的解为

$$\mathrm{F}=\mathrm{F}\left(\beta+\frac{1}{2}-\alpha,2\beta+1,2\alpha\beta\right) \tag{3.291}$$

为了保证 $\xi\to\infty$ 处 $u\to 0$，合流超几何方程(3.291)必须中断成 ν 次多项式，其条件为

$$\beta+\frac{1}{2}-\alpha=-\nu,\quad \nu=0,1,2,\cdots$$

也就是

$$\beta=\alpha-\left(\nu+\frac{1}{2}\right)$$

即得能级公式

$$\begin{aligned}E_\nu &= -\beta^2\frac{\hbar^2}{2\mu a^2}=-\frac{\hbar^2}{2\mu a^2}\left[\alpha-\left(\nu+\frac{1}{2}\right)\right]^2\\ &=\left(\nu+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar}{a}\sqrt{\frac{2V_0}{\mu}}-V_0-\left(\nu+\frac{1}{2}\right)^2\frac{\hbar^2}{2\mu a^2}\\ &=\left(\nu+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega-V_0-\left(\nu+\frac{1}{2}\right)^2\frac{\hbar^2}{2\mu a^2}\end{aligned} \tag{3.292}$$

其中，$\omega=\sqrt{\dfrac{2V_0}{\mu a^2}}$，式 (3.292)中第一项相当于谐振子振动能级，第三项为 $V(r)$ 中的非谐成分引起的能级修正. 式 (3.292)仅当 ν 不太大时才成立，而且必须 $V_0a^2>\dfrac{\hbar^2}{32\mu}$，以保证 $E_\nu<-V_0$.

3.48　有限深球方势阱的一般讨论

题 3.48　质量为 μ 的粒子在球方势阱

$$V(r)=\begin{cases}0, & r<a\\ V_0, & r\geqslant a\end{cases}$$

中运动，其中 $V_0>0$. 只考虑束缚态 $(0<E<V_0)$，设 V_0 逐渐从小到大变化.

(1) 对角量子数 l 的每一个值 $(l=0,1,2,\cdots)$，求出现一个新的束缚能级 (即 $E_{n_r l}\approx V_0-0^+$) 的条件；

(2) 求出现第一个束缚态时 V_0a^2 的值；

(3) 求各能级出现的先后次序；

(4) 若 V_0 很大，估算束缚态总数 N.

解答　(1) 粒子在球对称势场中运动，选 CSCO 为 $(H,\boldsymbol{L}^2,L_z)$，而束缚定态为其共同本征态，波函数可以写为

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)=R(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)\tag{3.293}$$

其中径向波函数 $R(r)$ 满足的方程为

$$R''+\frac{2}{r}R'+\left[\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-V)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R=0\tag{3.294}$$

当 V_0 由小到大逐渐变化，出现新束缚态时，$E\approx V_0-0^+$，上式成为

$$R''+\frac{2}{r}R'+\left[\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R=0,\quad r<a(\text{阱内})\tag{3.295a}$$

$$R''+\frac{2}{r}R'-\frac{l(l+1)}{r^2}R=0,\qquad r\geqslant a(\text{阱外})\tag{3.295b}$$

不妨令

$$k_0=\sqrt{2\mu V_0}/\hbar\tag{3.296}$$

阱内方程 (3.295a) 正是球 Bessel 方程，$r\to0$ 处满足自然边界条件 $\lim\limits_{r\to0}rR_l(r)=0$ 的解为球 Bessel 函数

$$R(r)=\mathrm{j}_l(k_0r)\tag{3.297}$$

另一解球 Neuman 函数 $\mathrm{n}_l(k_0r)$ 不满足自然边界条件，故舍去.

阱外方程 (3.295b) 的解为

$$R(r)=\frac{C}{r^{l+1}}\tag{3.298}$$

另一解 r^l 不满足 $r\to\infty$ 处 $R(r)\to0$ 的束缚态边界条件，舍去. 阱外波函数 (3.298) 显然满足

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left[r^{l+1}R(r)\right]=0,\quad r\geqslant a\tag{3.299}$$

$r=a$ 处 $V(r)$ 为有限跳跃，R 及 R' 均应连续，因此对于阱内波函数 (3.297)，当 $r\to a$ 时也应满足条件 (3.299)，即

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left[r^{l+1}\mathrm{j}_l(k_0r)\right]_{r=a}=0 \tag{3.300}$$

利用球 Bessel 函数的递推关系

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[x^{l+1}\mathrm{j}_l(x)\right]=x^{l+1}\mathrm{j}_{l-1}(x)$$

式 (3.300) 可以化为

$$\mathrm{j}_{l-1}(k_0a)=0 \tag{3.301}$$

这就是所求的出现一个新束缚态 (角量子数 l，能级 $E_{n_r l}\approx V_0-0^+$) 的条件.

(2) 由 Hellmann-Feynman 定理[①]知 $\dfrac{\partial E_{nl}}{\partial l}>0$，则第一个束缚态必是 s 态 ($l=0$). 由式 (3.301) 即知出现 s 态束缚态的条件为

$$\mathrm{j}_{-1}(k_0a)=0 \tag{3.302}$$

由于

$$\mathrm{j}_{-1}(k_0a)=\frac{\cos k_0a}{k_0a}$$

故出现一条 s 态新能级 ($E\approx V_0-0^+$) 的条件为

$$\cos k_0a=0,\quad \text{即}k_0a=\frac{\pi}{2},\frac{3\pi}{2},\frac{5\pi}{2},\cdots \tag{3.303}$$

出现第一个束缚态时，$k_0a=\pi/2$，即

$$V_0a^2=\frac{\pi^2\hbar^2}{8} \tag{3.304}$$

这与一维方势垒的奇宇称情况完全相同.

(3) 设想 V_0 逐渐增大，每当满足式 (3.301) 就出现一条新能级 ($E_{n_r l}\approx V_0-0^+$). 根据球 Bessel 函数 $\mathrm{j}_l(x)=0$ 的正根数值，可以确定各能级的出现次序[②]为

$$1\mathrm{s},\ 1\mathrm{p},\ 1\mathrm{d},\ 2\mathrm{s},\ 1\mathrm{f},\ 2\mathrm{p},\ 1\mathrm{g},\ 2\mathrm{d},\ 3\mathrm{s},\ 1\mathrm{h},\ 2\mathrm{f},\ 1\mathrm{i},\ 3\mathrm{p},\ 2\mathrm{g},\ 1\mathrm{k},\ 3\mathrm{d},\ 4\mathrm{s},\cdots$$

各光谱符号与 l 值的对应为

光谱符号	s	p	d	f	g	h	i	j	k	⋯
l	0	1	2	3	4	5	6	7	8	⋯

① 参见张永德, 量子力学 (第 4 版)[M], 北京: 科学出版社, 2017, P.208-210.

② 参看 L.D.Landau, E.M.Lifshitz. *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory*, Volume 3(原版影印本), Third Edition; 北京：世界图书出版公司, 1999, §33；中译本：量子力学——非相对论理论 (第 6 版). 北京：高等教育出版社，2008, §33.

(4) V_0 很大时，可按“相空间中每 h^3 的体积内有一个束缚态”来估算束缚态总数. 处于束缚定态的粒子，在阱内的最大动量为

$$p_0 = \hbar k_0 = \sqrt{2\mu V_0} \tag{3.305}$$

因此，束缚态所占相空间总体积为

$$\frac{4\pi}{3}a^3 \cdot \frac{4\pi}{3}p_0^3 = \frac{16}{9}\pi^2 (a\hbar k_0)^3 = \Omega \tag{3.306}$$

束缚态总数为

$$\begin{aligned} N &\approx \Omega/(2\pi\hbar)^3 = \frac{2\pi^2}{9}\left(\frac{ak_0}{\pi}\right)^3 \\ &= \frac{2\pi^2}{9}\left(\frac{a}{\pi\hbar}\right)^3 (2\mu V_0)^{3/2} \end{aligned} \tag{3.307}$$

说明 1　上面给出了束缚态总数的估算. 如果要知道其确切的束缚态总数，需要知道 $E < V_0$ 有哪些束缚态 (所有能量不同，角动量不同的态)，需要一个个数.

例如，当 $ak_0 = 7\pi/2$ 时，最高能级为 4s，由能级序列具体数出由 1s 至 4s 的全部状态数为

$$N = 1+3+5+1+7+3+9+3+1+11+7+13+3+9+17+5+1 = 99$$

而由式 (3.307) 作估算则得 $N = 94$，与准确值很接近.

说明 2　(关于求解刚出现一个新束缚态条件的另一种方法) 束缚定态能量 $E < V_0$，设

$$k = \frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar}, \quad \kappa = \frac{\sqrt{2\mu(V_0 - E)}}{\hbar} \tag{3.308}$$

分区求解，各自满足的方程

$$R'' + \frac{2}{r}R' + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R = 0, \quad r < a(\text{阱内}) \tag{3.309a}$$

$$R'' + \frac{2}{r}R' - \left[\kappa^2 + \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R = 0, \quad r \geqslant a(\text{阱外}) \tag{3.309b}$$

类似式 (3.295b) 阱内球 Bessel 方程 (3.309a) 满足自然边界条件的解

$$R_l(r) = A_l \mathrm{j}_l(kr) \tag{3.310}$$

阱外方程 (3.309b) 的解为如下虚宗量的第一类球 Hankel 函数:

$$R_l(r) = B_l \mathrm{h}_l^{(1)}(\mathrm{i}\kappa r) \tag{3.311}$$

另一解 $\mathrm{h}_l^{(2)}(\mathrm{i}\kappa r)$ 不满足 $r \to \infty$ 处 $R(r) \to 0$ 的束缚态边界条件，舍去. $r = a$ 处 $V(r)$ 为有限跳跃，R 及 ∇R 均应连续. 这一连接条件也可表示为

$$\left.\frac{\mathrm{d}\ln rR_l}{\mathrm{d}r}\right|_{r=a-0^+} = \left.\frac{\mathrm{d}\ln rR_l}{\mathrm{d}r}\right|_{r=a+0^+}$$

也就是

$$\left.\frac{[rj_l(kr)]'}{rj_l(kr)}\right|_{r=a-0^+}=\left.\frac{\left[rh_l^{(1)}(i\kappa r)\right]'}{rh_l^{(1)}(i\kappa r)}\right|_{r=a+0^+} \tag{3.312}$$

对于特定的 V_0，这其实是确定能级 E_{n_rl} 的超越方程.

刚出现一个新束缚态 ($E_{n_rl}\approx V_0-0^+$)，按照式 (3.308)，此时

$$k\to k_0,\quad \kappa\to 0$$

故 $h_l^{(1)}(i\kappa r)$ 的宗量趋于零，利用渐近式

$$h_l^{(1)}(x)\sim -\frac{i(2l-1)!!}{x^{l+1}},\quad x\to 0$$

将此式代入式 (3.312) 右端得

$$\left.\frac{\left[rh_l^{(1)}(i\kappa r)\right]'}{rh_l^{(1)}(i\kappa r)}\right|_{r=a+0^+}\sim -\frac{l}{a},\quad \kappa\to 0 \tag{3.313}$$

因而

$$\left.\frac{[rj_l(k_0r)]'}{rj_l(k_0r)}\right|_{r=a-0^+}=-\frac{l}{a} \tag{3.314}$$

由此得出式 (3.300)，与前一致. 同样导致刚出现一个新束缚态 ($E_{n_rl}\approx V_0-0^+$) 的条件式 (3.301).

3.49　n-p 体系束缚态

题 3.49　氘核由质子和中子结合而成，是质子-中子体系唯一的束缚态. 根据实验测定，结合能为 2.23MeV，如 n-p 作用势近似地用球方势阱表示为

$$V(r)=\begin{cases}-V_0, & r<a\\ 0, & r\geqslant a\end{cases} \tag{3.315}$$

求力程和作用强度 V_0 的数值关系.

解答　n-p 体系既然只有唯一的束缚态，应该就是基态，$l=0$，也就是说，V_0a^2 的值，仅够形成一个 s 态能级，而不足以形成 p 态能级. 根据上题讨论，可知 V_0a^2 比 $\dfrac{\pi^2\hbar^2}{8\mu}$ 稍大. 作为粗略估算，可取

$$a^2\approx\frac{\pi^2\hbar^2}{8\mu V_0}=\frac{\pi^2(\hbar c)^2}{8\mu c^2V_0} \tag{3.316}$$

其中

$$\mu=\frac{m_nm_p}{m_n+m_p},\quad 2\mu c^2=939\text{MeV},\quad \hbar c=197\text{MeV}\cdot\text{fm}$$

由式 (3.316)给出的 $V_0 \sim a$ 数值关系如下表：

V_0/MeV	30	25	20
a/fm	1.84	2.02	2.26

下面作比较精确的计算，n-p 体系相对运动的 s 态波函数可以表示为

$$\psi(r) = \frac{u(r)}{r}$$

$u(r)$ 满足径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \cdot \frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}r^2} + V(r)u = Eu, \quad -V_0 < E < 0 \tag{3.317}$$

以式 (3.315)代入式 (3.317)，即得

$$\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}r^2} + \alpha^2 u = 0 \tag{3.318}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}r^2} - \beta^2 u = 0 \tag{3.319}$$

其中

$$\alpha = \sqrt{\frac{2\mu(V_0 + E)}{\hbar^2}}, \quad \beta = \sqrt{\frac{-2\mu E}{\hbar^2}} \tag{3.320}$$

边界条件为

$$\text{当} r \to 0 \text{时}，\ u \to 0；\ \text{当} r \to \infty \text{时}，\ u \to 0 \tag{3.321}$$

满足边界条件式 (3.321)的式 (3.318)的解为

$$u = A\sin\alpha r, \quad r < a$$

$$u = B\mathrm{e}^{-\beta r}, \quad r \geqslant a$$

利用 $r = a$ 处 u'/u 的连续条件，容易求得能级方程为

$$\cot(\alpha a) = -\frac{\beta}{\alpha} \tag{3.322}$$

式 (3.322)和式 (3.323) 等价

$$\sin^2(\alpha a) = \frac{\alpha^2}{\alpha^2 + \beta^2} = 1 + \frac{E}{V_0} \tag{3.323}$$

本题能级值已由实验给出，$E = -2.23\text{MeV}$，则指定一个 V_0 值，由式 (3.320)就可以算出 α，再由式 (3.322)就可以求出相应的 a 值. 数值结果如下表 (注意 $\pi/2 < a\alpha < \pi$).

V_0/MeV	30	25	20
a/fm	2.26	2.53	2.92

3.50　介子的弹性袋模型

题 3.50　有一个关于基本粒子的非常简单的“袋”模型，将介子描述成限制在弹性口袋的夸克-反夸克态. 袋为球形，半径 (可变)R，表面张力系数 $\sigma = 50\text{MeV}/(\text{fm})^2$. 夸克-反夸克均作为非相对论粒子处理，静质量取为 $200\text{MeV}/c^2$，不考虑相互作用.

(1) 当 R 固定，估算夸克 -反夸克体系基态能量 (不包括静止能量)；

(2) 允许 R 变化，计算基态的“袋”半径，并和公认的“介子”大小作比较.

解答　(1) 当半径 R 固定，夸克 -反夸克 (质量均为 m) 可以认为在无限深球方势阱中运动，基态 ($l=0$) 能级为

$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mR^2}$$

因此体系的基态能量为

$$E_0(R) = 2E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{mR^2}$$

(2) 当 R 可变化，还应该考虑弹性袋的表面能

$$E_\sigma(R) = 4\sigma\pi R^2$$

R 的取值应使 $(E_0(R)+E_\sigma(R))$ 为极小. 由极值条件

$$\frac{\partial(E_0(R)+E_\sigma(R))}{\partial r} = 0$$

求得

$$\begin{aligned} R &= \left(\frac{\pi\hbar^2}{4m\sigma}\right)^{1/4} = \left(\frac{\pi\hbar^2c^2}{4mc^2\sigma}\right)^{1/4} \\ &= \left(\frac{\pi}{4}\cdot\frac{(197\text{MeV}\cdot\text{fm})^2}{200\text{MeV}\times 50\text{MeV}\cdot(\text{fm})^{-2}}\right)^{\frac{1}{4}} = 1.3\text{fm} \end{aligned} \tag{3.324}$$

与粒子的尺度在量级上一致.

3.51　二维和三维中心力场能量本征值的对应关系

题 3.51　求二维和三维中心力场能量本征值问题的对应关系. 对于氢原子和各向同性谐振子，利用已知的三维问题能级公式，导出相应的二维问题的能级公式.

解答　众所周知，在三维中心力场问题中，$(H, \boldsymbol{L}^2, L_z)$ 的共同本征态可以表示为

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{u(r)}{r}\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$$

$u(r)$ 满足径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2} + \left[V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u = Eu \tag{3.325}$$

二维中心力场的能量本征方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi+V(\rho)\psi=E'\psi$$

Laplace 算符 ∇^2 的平面极坐标表示式为

$$\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

(H,L_z) 的共同本征态为

$$\psi(\rho,\varphi)=R(\rho)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\Lambda\varphi}$$

其中，$\Lambda=0,\pm1,\pm2,\cdots$，$R(\rho)$ 满足径向方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{\Lambda^2}{\rho^2}\right)R+V(\rho)=E'R$$

若令

$$R(\rho)=\frac{v(\rho)}{\rho^{1/2}}$$

可得 $v(\rho)$ 满足的方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{\mathrm{d}^2v}{\mathrm{d}\rho^2}+\left[V(\rho)+\left(\Lambda^2-\frac{1}{4}\right)\frac{\hbar^2}{2\mu\rho^2}\right]v=E'V \tag{3.326}$$

式 (3.325)和式 (3.326)的结构完全相似，其对应关系为

$$r\leftrightarrow\rho,\quad u\leftrightarrow v,\quad l\leftrightarrow|\Lambda|-\frac{1}{2},\quad E\leftrightarrow E'$$

由此可见，如将三维中心力场能级公式中的量子数 l 换为 $|\Lambda|-\frac{1}{2}$，即得相应的二维中心力场能级公式.

例如，三维氢原子，$V=-\frac{e^2}{r}$，束缚态能级为

$$E=-\frac{e^2}{2n^2a_0},\quad a_0=\frac{\hbar^2}{\mu e^2}(\text{Bohr 半径}),\quad n=n_r+l+1=1,2,3,\cdots$$

其中，$n_r=0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \cdots$ 为径向量子数 (径向波函数节点数)，和角量子数 l 互相对立，n_r 出现于径向方程 (3.325)的求解过程. 仿此，对于二维氢原子，$V=-\frac{e^2}{\rho}$，由式 (3.326)求解，必然得出束缚态能级为

$$E=-\frac{e^2}{2\left(n_\rho+|\Lambda|+\frac{1}{2}\right)^2a_0}$$

其中，$n_\rho=0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \cdots$ 为径向量子数 (径向波函数节点数).

又如，三维各向同性谐振子，$V=\frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2$，能级为

$$E=\left(n+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega,\quad n=L+2n_r=0,1,2,\cdots$$

其中，$n_r=0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \cdots$ 为径向量子数 (径向波函数节点数). 仿此，对于二维各向同性谐振子，$V=\frac{1}{2}\mu\omega^2\rho^2$，

$$E=(2n_\rho+|\Lambda|+1)\hbar\omega$$

其中，$n_\rho=0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \cdots$ 为径向量子数

3.52　在无限长圆筒中运动粒子的能量

题 3.52　设质量为 μ 的粒子在无限长的圆筒中运动，筒半径为 a，求粒子能量.

解答　以圆筒轴线为 z 轴建立柱坐标系，坐标用 (ρ,φ,z) 表示. Schrödinger 方程为 $H\psi=E\psi$，其中 Hamilton 量如下给出：

$$H=\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\right)+\frac{L_z^2}{2\mu\rho^2}+\frac{p_z^2}{2\mu}\right]\tag{3.327}$$

圆筒壁边界条件以及圆筒轴线上自然边界条件分别写为

$$\psi|_{\rho=a}=0,\quad \rho\psi|_{\rho\to0}\to0\tag{3.328}$$

选 CSCO 为 (H,L_z,p_z).　L_z 的本征态为

$$\Phi_m(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\varphi},\quad m=0,\pm1,\pm2,\cdots\tag{3.329}$$

相应的本征值为 $m\hbar$.

p_z 的本征态为平面波

$$Z_k(z)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kz}\tag{3.330}$$

相应的本征值为 $\hbar k$，而 k 为连续取值的实数量.

取束缚定态 ψ 为 (H,L_z,p_z) 的共同本征态

$$\psi=R(\rho)\Phi_m(\varphi)Z_k(z)\tag{3.331}$$

代入 Schrödinger 方程得径向波函数 $R(\rho)$ 满足的方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\right)+\frac{m^2\hbar^2}{2\mu\rho^2}+\frac{\hbar^2k^2}{2\mu}\right]R(\rho)=ER(\rho)\tag{3.332}$$

边界条件 (3.328) 用 R 表示，则为

$$R(a)=0,\quad \rho R(\rho)|_{\rho\to0}\to0\tag{3.328$'$}$$

现令

$$\kappa=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}-k^2} \tag{3.333}$$

式 (3.332) 可以化为

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\right)R(\rho)+\left(\kappa^2-\frac{m^2}{\rho^2}\right)R(\rho)=0 \tag{3.334}$$

这是一个 Bessel 方程，解得此式在圆筒轴线上 ($\rho=0$) 满足自然边界条件的解为

$$R(\rho)=A\mathrm{J}_{|m|}(\kappa\rho) \tag{3.335}$$

另一解 $\mathrm{N}_{|m|}(\kappa\rho)$ 因不满足自然边界条件舍去. R 还需要满足圆筒壁 ($\rho=a$) 边界条件 $R(a)=0$，这给出 $\mathrm{J}_{|m|}(\kappa a)=0$. 令 $\lambda_{|m|\nu}$ 是 $\mathrm{J}_{|m|}(\lambda)=0$ 的第 ν 个根，$\nu=1,2,\cdots$，则有

$$\kappa_1=\frac{\lambda_{|m|1}}{a},\quad \kappa_2=\frac{\lambda_{|m|2}}{a},\quad \kappa_3=\frac{\lambda_{|m|3}}{a},\cdots \tag{3.336}$$

由此确定粒子的能量

$$E_{k|m|\nu}=\frac{\hbar^2}{2m}\left(k^2+\kappa_\nu^2\right)=\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(k^2+\frac{\lambda_{|m|\nu}^2}{a^2}\right) \tag{3.337}$$

$m=0,\pm1,\pm2,\cdots$，k 为任意实数，故能谱是连续的. 当给定 E 值后，要求 $k^2\leqslant 2\mu E/\hbar^2$. 束缚定态径向波函数为

$$R(\rho)=\mathrm{J}_{|m|}(\kappa_\nu\rho) \tag{3.338}$$

而总的波函数如式 (3.331) 所给.

3.53　中心力场束缚态能级对磁量子数 m 简并

题 3.53　粒子在中心力场 $V(r)$ 中运动，试证明体系束缚态能级 E 对磁量子数 m 简并，简并度为 $2l+1$.

证明　在中心力场 $V(r)$ 中运动粒子的 Hamilton 算符为

$$H=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}+V(r)$$

由于

$$\begin{aligned}\left[L_z,\ \boldsymbol{p}^2\right] &= \left[(xp_y-yp_x),\ \left(p_x^2+p_y^2+p_z^2\right)\right]\\ &= \left[xp_y,\left(p_x^2+p_y^2+p_z^2\right)\right]-\left[yp_x,\left(p_x^2+p_y^2+p_z^2\right)\right]\\ &= \left[xp_y,p_x^2\right]-\left[yp_x,\ p_y^2\right]\end{aligned}$$

其中

$$\left[xp_y,p_x^2\right]=x\left[p_y,p_x^2\right]+\left[x,\ p_x^2\right]p_y=\left[x,\ p_x^2\right]p_y=2\mathrm{i}\hbar p_xp_y$$

同理

$$[yp_x, p_y] = 2\mathrm{i}\hbar p_y p_x$$

所以

$$\left[L_z,\ \boldsymbol{p}^2\right] = 2\mathrm{i}\hbar p_x p_y - 2\mathrm{i}\hbar p_y p_x = 0$$

同样

$$\left[L_x,\ \boldsymbol{p}^2\right] = 0; \quad \left[L_y,\ \boldsymbol{p}^2\right] = 0$$

也就是

$$\left[\boldsymbol{L},\ \boldsymbol{p}^2\right] = 0$$

于是

$$\left[\boldsymbol{L}^2,\ \boldsymbol{p}^2\right] = 0$$

又因为 $\boldsymbol{L}$ 只作用在角度空间①，从而

$$[\boldsymbol{L},\ V(r)] = 0$$

所以

$$[\boldsymbol{L}, H] = 0, \qquad \left[\boldsymbol{L}^2,\ H\right] = 0 \tag{3.339}$$

于是可取 $(H, \boldsymbol{L}^2, L_z)$ 作为体系的力学量完全集，它们的共同本征函数完备集为 $\{|E,l,m\rangle\}$

$$H|E,l,m\rangle = E|E,l,m\rangle \tag{3.340}$$

又由式 (3.339)知道

$$[H, L_\pm] = 0$$

所以

$$H(L_\pm|Elm\rangle) = L_\pm(H|Elm\rangle) = E(L_\pm|Elm\rangle) \tag{3.341}$$

比较式 (3.340)和式 (3.341)可知，若态 $|Elm\rangle$ 是 H 的相应于本征值 E 的本征矢，则 $L_\pm|Elm\rangle$ 是 H 的相应于同一本征值 $|Elm\rangle$ 的本征矢，即 $|Elm\rangle$ 与 $L_\pm|Elm\rangle$ 是互为简并的简并态，而

$$L_\pm|Elm\rangle = \sqrt{(l\mp m)(l\mp m+1)}\hbar|E,l,m\pm1\rangle$$

所以 $|Elm\rangle$ 与 $|Elm\pm1\rangle$ 是互为简并的简并态，即 E 关于磁量子数 m 简并. 又对于给定的 l 值而言，$m = 0, \pm1, \pm2, \cdots, \pm l$ 共有 $2l+1$ 个值，因而这样的简并态共有 $2l+1$ 个. 所以有心力场中运动的粒子，束缚定态能量具有 $2l+1$ 重简并.

说明　(关于式 (3.339)的简要推导) 由式 (4.92)，可知 $[\boldsymbol{L}, \boldsymbol{p}^2] = 0$，$[\boldsymbol{L}, \boldsymbol{r}^2] = 0$，并有 $[\boldsymbol{L}, f(r)] = 0$，这样 $[\boldsymbol{L}, H] = 0$，并有 $[\boldsymbol{L}^2, H] = 0$.

① 在球坐标下 $\boldsymbol{L}$ 的表达式为

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p} = -\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}\times\nabla = -\mathrm{i}\hbar\left(\boldsymbol{\varphi}_0\frac{\partial}{\partial\theta} - \boldsymbol{\theta}_0\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

其中，$\boldsymbol{\theta}_0$、$\boldsymbol{\varphi}_0$ 分别为 θ、φ 方向的单位矢量. 上式也可显见 $\boldsymbol{L}$ 只作用在角度空间.

3.54　中心力场存在束缚态的充分条件

题 3.54　粒子在中心力场 $V(r)$ 中运动，设势能函数满足条件 $V(r)\leqslant 0\ (0\leqslant r<\infty)$ 及 $V(r)\xrightarrow{r\to\infty}0$，试求体系存在束缚定态的充分条件. 再应用此条件于下列体系：

(1) $V(r)=-V_0\delta(r-a)\ (V_0>0)$;

(2) $V(r)=-V_0\mathrm{e}^{-r/a}\ \ (V_0>0)$;

(3) Yukawa 势 $-V_0\dfrac{\mathrm{e}^{-r/a}}{r}\ \ (V_0>0)$;

(4) $V(r)=-V_0\mathrm{e}^{-r^2/a^2}\ \ (V_0>0)$.

解答　假定体系存在一个束缚定态，即基态. 记基态能量为 E_0. 由题设条件

$$V(r)\leqslant 0\qquad 0\leqslant r<\infty,\quad V(r)\xrightarrow{r\to\infty}0$$

知体系束缚定态能量 $E_n<0$，即

$$E_0<0$$

又设相应的基态波函数为 $(l=0)$

$$\psi_0(\boldsymbol{r})=R_{10}(r)Y_{00}(\theta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}R_{10}(r)$$

(ψ_0 已经归一化) 有

$$E_0=\int\psi_0^*(\boldsymbol{r})\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}+V(r)\right)\psi_0(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\tau$$

现在取基态试探波函数 $\psi(\boldsymbol{r},\beta)$ 为

$$\psi(\boldsymbol{r},\beta)=\sqrt{\frac{\beta^3}{\pi}}\mathrm{e}^{-\beta r}$$

($\psi(\boldsymbol{r},\beta)$ 已经归一化)，其中实数 $\beta>0$ 为变分参量. 有

$$\begin{aligned}\overline{E(\beta)}&=\int\psi^*(\boldsymbol{r},\beta)\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}+V(r)\right)\psi(\boldsymbol{r},\beta)\mathrm{d}\tau\\&=\frac{\beta^3}{\pi}\iiint\mathrm{e}^{-\beta r}\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(r)\right)\mathrm{e}^{-\beta r}r^2\sin\theta\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi\\&=\frac{\hbar^2\beta^2}{2\mu}+4\beta^3\int_0^\infty r^2V(r)\mathrm{e}^{-2\beta r}\mathrm{d}r\end{aligned}\tag{3.342}$$

由于体系处于真实基态 $\psi_0(r)$ 下，能量 E_0 必定最低，而对试探波函数 $\psi(\boldsymbol{r},\beta)$ 的期望值 $\overline{E(\beta)}$，则不论实数 $\beta>0$ 取值如何均有 $\overline{E(\beta)}\geqslant E_0$. 由 $\overline{E(\beta)}\leqslant 0$ 出发即可得出体系存在束缚定态的充分条件, 具体如下.

由于

$$\overline{E(\beta)}=\frac{\hbar^2\beta^2}{2\mu}+4\beta^3\int_0^\infty r^2V(r)\mathrm{e}^{-2\beta r}\mathrm{d}r\leqslant 0$$

也就是

$$\beta\int_0^\infty r^2|V(r)|\mathrm{e}^{-2\beta r}\mathrm{d}r\geqslant\frac{\hbar^2}{8\mu}\tag{3.343}$$

适当选取式 (3.342) 中的变分参量 β，使得在最佳 β 值下 $\overline{E(\beta)}$ 取极小值. 故有

$$\overline{E(\beta)}_{\min}=\left[\beta^2\left(\frac{\hbar^2}{2\mu}+4\beta\int_0^V r^2V(r)\mathrm{e}^{-2\beta r}\mathrm{d}r\right)\right]_{\min}\leqslant 0$$

再由式 (3.343)得到体系存在束缚态的充分条件为

$$\left[\beta\int_0^\infty r^2\left|V(r)\right|\mathrm{e}^{-2\beta r}\mathrm{d}r\right]_{\max}\geqslant\frac{\hbar^2}{8\mu}\tag{3.344}$$

下面应用此条件于下列 4 种体系.

(1) δ-势

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

因为

$$\beta\int_0^\infty r^2\left|V(r)\right|\mathrm{e}^{-2\beta r}\mathrm{d}r=\beta\int_0^\infty r^2V_0\delta(r-a)\ \mathrm{e}^{-2\beta r}\mathrm{d}r=\beta V_0a^2\mathrm{e}^{-2\beta a}$$

再由 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\beta}\left(\beta V_0a^2\mathrm{e}^{-2\beta a}\right)=0$，得 $\beta=\dfrac{1}{2}a$ 时 $\left(V_0a^2\beta\mathrm{e}^{-2\beta a}\right)$ 的极大值

$$\left(V_0a^2\beta\mathrm{e}^{-2\beta a}\right)_{\max}\Big|_{\beta=\frac{1}{2}a}=\frac{V_0a}{2e}$$

也就是

$$\frac{\mu V_0a}{\hbar^2}\geqslant\frac{e}{4}\approx 0.68$$

体系存在束缚定态的必要条件是 $\dfrac{\mu V_0a}{\hbar^2}\geqslant 0.5$，而精确计算的结果是 $\dfrac{\mu V_0a}{\hbar^2}\geqslant 0.5$.

(2) 对于势函数

$$V(r)=-V_0\mathrm{e}^{-r/a},\quad V_0>0$$

按式 (3.344)

$$\beta\int_0^\infty r^2\left|V(r)\right|\mathrm{e}^{-2\beta r}\mathrm{d}r=\beta\int_0^\infty r^2\mathrm{e}^{-(2\beta+1/a)r}\mathrm{d}r=\frac{2\beta V_0}{(2\beta+1/a)^3}$$

再由 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\beta}\dfrac{2\beta V_0}{(2\beta+1/a)^3}=0$，知当 $\beta=\dfrac{1}{4}a$ 时 $\dfrac{2\beta V_0}{(2\beta+1/a)^3}$ 取得极大值

$$\left[\frac{2\beta V_0}{(2\beta+1/a)^3}\right]_{\max}=\frac{4V_0a^2}{27}$$

故体系存在束缚态的充分条件为

$$\frac{4V_0a^2}{27}\geqslant\frac{\hbar^2}{8\mu}$$

也就是

$$\frac{4V_0a^2}{\hbar^2}\geqslant\frac{27}{32}\approx 0.84$$

体系存在束缚定态的必要条件为 $\frac{\mu V_0 a}{\hbar^2} \geqslant 0.5$，而精确计算的结果是 $\frac{\mu V_0 a}{\hbar^2} \geqslant 0.72$.

(3) 对于 Yukawa 势

$$V(r) = -V_0 \frac{\mathrm{e}^{-r/a}}{r}, \qquad V_0 > 0$$

因为

$$\beta \int_0^\infty r^2 |V(r)| \mathrm{e}^{-2\beta r} \mathrm{d}r = \beta \int_0^\infty r^2 V_0 \mathrm{e}^{-\left(\frac{1}{a}+2\beta\right)r} \mathrm{d}r = \frac{\beta V_0}{(2\beta + 1/a)^2}$$

再由

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\beta}\left[\frac{\beta V_0}{(2\beta+1/a)^2}\right] = 0$$

知 $\beta = \frac{1}{2a}$ 时，$\frac{\beta V_0}{(2\beta+1/a)^2}$ 取极大值

$$\left[\frac{\beta V_0}{(2\beta+1/a)^2}\right]_{\max} = \frac{V_0 a}{8}$$

故体系存在束缚态的充分条件是

$$\frac{V_0 a}{8} \geqslant \frac{\hbar^2}{8\mu}, \quad \text{即} \frac{\mu V_0 a}{\hbar^2} \geqslant 1$$

体系存在束缚定态的必要条件是 $\frac{\mu V_0 a}{\hbar^2} \geqslant 0.5$，而数字计算的精确结果是 $\frac{\mu V_0 a}{\hbar^2} \geqslant 0.84$.

(4) 对于势函数

$$V(r) = -V_0 \mathrm{e}^{-r^2/a^2}, \quad V_0 > 0$$

取基态试探波函数

$$\psi(\boldsymbol{r}, \beta) = \left(\frac{8\beta^6}{\pi^3}\right)^{\frac{1}{4}} \mathrm{e}^{-\beta^2 r^2}$$

式中，实数 $\beta > 0$ 为变分参量，有

$$\begin{aligned}
\overline{E}(\beta) &= \langle \psi(\beta) \left| \frac{p^2}{2\mu} + V(r) \right| \psi(\beta) \rangle \\
&= \left(\frac{8\beta^6}{\pi^3}\right)^{\frac{1}{2}} \iiint \mathrm{e}^{-\beta^2 r^2} \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r)\right] \mathrm{e}^{-\beta^2 r^2} r^2 \mathrm{d}r \\
&= \frac{3\hbar^2\beta^2}{2\mu} + \frac{8\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}}\beta^3 \int_0^\infty r^2 V(r)\ \mathrm{e}^{-2\beta^2 r^2} \mathrm{d}r
\end{aligned}$$

取

$$\overline{E}(\beta) = \frac{3\hbar^2\beta^2}{2\mu} + \frac{8\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}}\beta^3 \int_0^\infty r^2 V(r)\ \mathrm{e}^{-2\beta^2 r^2} \mathrm{d}r \leqslant 0$$

也就是

$$\beta \int_0^\infty r^2 |V(r)|\ \mathrm{e}^{-2\beta^2 r^2} \mathrm{d}r \geqslant \frac{3\sqrt{\pi}}{16\sqrt{2}} \cdot \frac{\hbar^2}{\mu}$$

上式左边等于

$$\beta\int_0^\infty r^2V_0\mathrm{e}^{-r^2/a^2}\mathrm{e}^{-2\beta^2r^2}\mathrm{d}r=\frac{V_0\sqrt{\pi}}{4}\cdot\frac{\beta}{(2\beta^2+1/a^2)^{3/2}}$$

再由上式对 β 求导等于零得出，当 $\beta=\dfrac{1}{2a}$ 时，上式取得极大值 $\dfrac{\sqrt{2\pi}}{12\sqrt{3}}V_0a^2$，故体系存在束缚定态的必要条件是

$$\frac{\sqrt{2\pi}}{12\sqrt{3}}V_0a^2\geqslant\frac{3\sqrt{\pi}}{16\sqrt{2}}\cdot\frac{\hbar^2}{\mu}$$

也就是

$$\frac{\mu V_0a^2}{\hbar^2}\geqslant\frac{9\sqrt{3}}{8}\approx1.94$$

体系存在束缚定态的必要条件是 $\dfrac{\mu V_0a^2}{\hbar^2}\geqslant1.94$，而由数字计算得到的结果为 $\dfrac{\mu V_0a^2}{\hbar^2}\geqslant1.34$.

3.55　氢原子定态波函数径向部分在动量表象中的形式

题 3.55　已知有心力场中运动的粒子，其定态波函数的径向部分由坐标表象变换到动量表象的变换关系为

$$f_{n_rl}(p)=\sqrt{\frac{2}{\pi\hbar^3}}\mathrm{i}^{-l}\int_0^\infty\mathrm{j}_l\left(\frac{p}{\hbar}r\right)R_{n_rl}(r)r^2\mathrm{d}r\tag{3.345}$$

式中，$f_{n_rl}(p)$、$R_{n_rl}(r)$ 分别为径向波函数在动量表象及坐标表象中的表示，$\mathrm{j}_l\left(\dfrac{p}{\hbar}r\right)$ 为 l 阶的球 Bessel 函数. 试在动量表象中写出氢原子定态波函数的径向部分 $f_{n_rl}(p)$ 的表达式.

解答　氢原子定态波函数中的径向部分 $R_{n_rl}(r)$ 在坐标表象中的表达式为

$$R_{n_rl}(r)=N_{n_rl}\mathrm{e}^{-\xi/2}\xi^l\mathrm{F}(-n_r,2(l+1);\xi)\tag{3.346}$$

式中，F 函数为第一类合流超几何函数

$$N_{n_rl}=\frac{2}{a_0^{3/2}(n_r+l+1)^2(2l+1)!}\sqrt{\frac{(n_r+2l+1)!}{n_r!}}$$

$$\xi=\frac{2}{(n_r+l+1)a_0}r$$

$$a_0=\frac{\hbar^2}{\mu e^2},\quad n_r=0,1,2,\cdots;\quad l=0,1,2,\cdots$$

将式 (3.346)代入变换关系式 (3.345)中，即得 $f_{n_rl}(p)$ 的表达式. 例如，氢原子基态 (1s 态)：$n_r=0$，$l=0$，$R_{00}(r)=\dfrac{2}{a_0^{3/2}}\mathrm{e}^{-r/a}$，则

$$f_{00}(p)=\sqrt{\frac{2}{\pi\hbar^3}}\int_0^\infty\mathrm{j}_0\left(\frac{pr}{\hbar}\right)\frac{2}{a_0^{3/2}}\mathrm{e}^{-r/a}r^2\mathrm{d}r=\sqrt{\frac{8}{\pi\hbar^3a_0^3}}\int_0^\infty\frac{\sin(pr/\hbar)\mathrm{e}^{-r/a_0}}{pr/\hbar}r^2\mathrm{d}r$$

$$= \sqrt{\frac{32a_0^3}{\pi\hbar^3}} \cdot \frac{1}{\left[1+(a_0p/\hbar)^2\right]}$$

氢原子的 2s 态: $n_r=1,\ l=0,\ R_{10}(r)=\sqrt{\frac{1}{2a_0^3}}\left(1-\frac{r}{2a_0}\right)\mathrm{e}^{-r/2a_0}$, 则

$$\begin{aligned} f_{10}(p) &= \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar^3}}\int_0^\infty \mathrm{j}_0(pr/\hbar)\sqrt{\frac{1}{2a_0^3}}\left(1-\frac{r}{2a_0}\right)\mathrm{e}^{-r/2a_0}r^2\mathrm{d}r \\ &= \sqrt{\frac{1}{\pi\hbar^3a_0^3}}\int_0^\infty \frac{\sin(pr/\hbar)}{pr/\hbar}\left(1-\frac{r}{2a_0}\right)\mathrm{e}^{-r/2a_0}r^2\mathrm{d}r \\ &= \frac{32}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{a_0}{\hbar}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{4(a_0p/\hbar)^2-1}{\left[1+4(a_0p/\hbar)^2\right]^3} \end{aligned}$$

氢原子的 2p 态; $n_r=2,\ l=1,\ R_{21}(r)=\frac{1}{2\sqrt{6}a_0^{3/2}}\frac{r}{a_0}\mathrm{e}^{-r/2a_0}$, 则

$$\begin{aligned} f_{21}(p) &= \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar^3}}\mathrm{i}^{-1}\int_0^\infty \mathrm{j}_l\left(\frac{p}{\hbar}r\right)R_{21}(r)r^2\mathrm{d}r \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar^3}}\mathrm{i}^{-1}\int_0^\infty \left[\frac{\sin(pr/\hbar)}{(pr/\hbar)^2}-\frac{\cos(pr/\hbar)}{pr/\hbar}\right]\frac{1}{2\sqrt{6}a_0^{3/2}}\cdot\frac{r}{a_0}\mathrm{e}^{-r/2a_0}r^2\mathrm{d}r \\ &= -\mathrm{i}\frac{128}{\sqrt{3\pi}}\sqrt{\frac{a_0}{\hbar}}\cdot\frac{(a_0p/\hbar)^2}{p[1+4(a_0p/\hbar)^2]^3} \end{aligned}$$

3.56 粒子在 Kratzer 分子势中运动束缚态解

题 3.56 粒子在中心力场 (Kratzer 分子势)

$$V(r)=-V_0\left(\frac{2a}{r}-\frac{a_0}{r^2}\right)$$

中运动, 式中 $a>0,\ V_0>0$, 它近似描述某些双原子分子中一个较轻的原子绕着另一个重得多的原子做振动和转动. 试求体系束缚态的能量 $(E<0)$ 和相应的定态波函数.

解答 体系定态波函数 $\psi_{n_rlm}(r,\theta,\varphi)=R_{n_rl}(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$, 其中记径向函数为 $R_{n_rl}=\frac{u(r)}{r}$, $u(r)$ 满足方程

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}u+\left\{\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E+V_0\left(\frac{2a}{r}-\frac{a^2}{r^2}\right)\right]-\frac{l(l+1)}{r^2}\right\}u=0 \tag{3.347}$$

作变量变换 $x=\frac{r}{a}$, 并记

$$\beta=\sqrt{\frac{2m(-E)a^2}{\hbar^2}}>0,\quad \alpha=\sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}}>0$$

则方程 (3.347)写为

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}x^2}+\left[-\beta^2+\frac{2\alpha^2}{x}-\frac{\alpha^2+l(l+1)}{x^2}\right]u=0$$

再记 $\lambda=\dfrac{1}{2}+\sqrt{\alpha^2+(l+1/2)^2}$，取 $u=x^{\lambda}\mathrm{e}^{-\beta x}f(x)$，则 $f(x)$ 满足方程

$$x\frac{\mathrm{d}^2f}{\mathrm{d}x^2}+(2\lambda-2\beta x)\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}+(-2\lambda\beta+2\alpha^2)f=0 \tag{3.348}$$

再作变量变换： $y=2\beta x$，则方程变为合流超几何方程

$$y\frac{\mathrm{d}^2f}{\mathrm{d}y^2}+(2\lambda-y)\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}y}-\left(\lambda-\frac{\alpha^2}{\beta}\right)f=0 \tag{3.349}$$

方程 (3.349)在 $r\to 0$ 有界的解为合流超几何级数

$$f=\mathrm{F}\left(\lambda-\frac{\alpha^2}{\beta},2\lambda;2\beta\frac{r}{a}\right) \tag{3.350}$$

故体系定态波函数的径向函数为

$$R(r)=\left(\frac{r}{a}\right)^{\lambda-1}\mathrm{e}^{-\beta r/a}\mathrm{F}\left(\lambda-\frac{\alpha^2}{\beta},2\lambda;\frac{2\beta}{\alpha}r\right) \tag{3.351}$$

注意到 $r\to\infty$ 处 $R(r)\to 0$，这要求合流超几何级数中断为多项式，有

$$\lambda-\frac{\alpha^2}{\beta}=-n_r,\quad n_r=0,1,2,3,\cdots$$

由此确定体系束缚定态能级为

$$E_{n_rl}=-\frac{\hbar^2}{2ma^2}\cdot\frac{\alpha^4}{(\lambda+n_r)^2}=-\frac{\hbar^2\alpha^4}{2ma^2}\left[\left(n_r+\frac{1}{2}\right)+\sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)^2+\alpha^2}\right]^{-2} \tag{3.352}$$

式中

$$\alpha=\sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}}>0,\ n_r=0,1,2,3,\cdots,\ l=0,1,2,3,\cdots$$

对于大多数分子来说， $\alpha\gg 1$，故上面 E_{n_rl} 表示式可以按 $\dfrac{1}{\alpha}$ 的幂展开

$$\begin{aligned}
E_{n_rl} &= -V_0\left[\frac{n_r+1/2}{\alpha}+\sqrt{\left(\frac{l+1/2}{\alpha}\right)^2+1}\right]^{-2}\\
&= -V_0\left\{\frac{n_r+1/2}{\alpha}+1+\frac{1}{2}\left(\frac{l+1/2}{\alpha}\right)^2-\frac{1}{8}\left(\frac{l+1/2}{\alpha}\right)^4+\cdots\right\}^{-2}\\
&= -V_0\left\{1-2\left[\frac{n_r+1/2}{\alpha}+\frac{1}{2}\left(\frac{l+1/2}{\alpha}\right)^2-\frac{1}{8}\left(\frac{l+1/2}{\alpha}\right)^4+\cdots\right]\right.
\end{aligned}$$

$$+3\left[\frac{n_r+1/2}{\alpha}+\frac{1}{2}\left(\frac{l+1/2}{\alpha}\right)^2-\frac{1}{8}\left(\frac{l+1/2}{\alpha}\right)^4+\cdots\right]+\cdots\Bigg\}$$

$$=V_0\left[-1+2\frac{(n_r+1/2)}{\alpha^3}+\frac{(l+1/2)^2}{\alpha^2}-\frac{3(l+1/2)^3}{\alpha^2}\right.$$

$$\left.-3\frac{(n_r+1/2)(l+1/2)^2}{\alpha^3}-\frac{(l+1/2)^4}{\alpha^4}+\cdots\right] \tag{3.353}$$

其中，$n_r=0,1,2,\cdots$ $l=0,1,2,\cdots$. 若将势能函数 $V(r)$ 在 $r=a$ 点附近展开

$$\begin{aligned}V(r) &= -V_0\left(\frac{2a}{r}-\frac{a^2}{r^2}\right)=-V_0+V_0\frac{[(r-a)/a]^2}{1+[1+(r-a)/a]^2}\\ &= -V_0+V_0[(r-a_0)/a]^2\left\{1-2[(r-a)/a]+3[(r-a)/a]^2-\cdots\right\}\\ &= -V_0+\frac{V_0}{a^2}(r-a)^2-\frac{2V_0}{a^3}(r-a)^3+\frac{3V_0}{a^4}(r-a)^4-\cdots\end{aligned}$$

可知道体系小振动的经典角频率 ω 为

$$\omega=\sqrt{\frac{k}{m}}=\sqrt{\frac{2V_0}{ma^2}}$$

又记体系的转动惯量 I 为

$$I=ma^2 \tag{3.354}$$

代入体系能量 E_{n_rl} 表示式 (3.353)中，得到

$$\begin{aligned}E_{n_rl} &= -\frac{1}{2}I\omega^2+\hbar\omega\left(n_r+\frac{1}{2}\right)+\frac{\hbar^2}{2I}(l+\frac{1}{2})^2\\ &\quad -\frac{3\hbar^2}{2I}\left(n_r+\frac{1}{2}\right)^2-\frac{3\hbar^2}{2\omega I^2}(n_r+1/2\,)(l+\frac{1}{2})^2-\cdots\end{aligned} \tag{3.355}$$

其中，$n_r=0,1,2,\cdots$；$l=0,1,2,\cdots$.

从式 (3.355)看出，第一项是常量；第二项是体系谐振动能量，其中 $n_r=0,1,2,\cdots$；第三项可以写为 $\dfrac{l(l+1)\hbar^2}{2I}+\dfrac{1}{4}\cdot\dfrac{\hbar^2}{2I}$，是体系转动惯量为常量 I 的转动能量，其中 $l=0,1,2,\cdots$；第四项表示由于势能函数 $V(r)$ 的非谐性带来对振动能量的修正 (振动能量降低)；第五项表示由于势能函数 $V(r)$ 的非谐性所引起的振动与转动的耦合.

体系经典最低能量为 $-V_0=-\dfrac{1}{2}I\omega^2$(动能为零，势能取最低值)，即分子离解能为 $V_0=\dfrac{1}{2}I\omega^2$；而按照量子力学，体系最低能量对应于 $n_r=0$，$l=0$ 的能量值

$$\begin{aligned}E_{0,0} &= -V_0\left[\frac{1}{2\alpha}+\sqrt{\left(\frac{1}{2\alpha}\right)^2+1}\right]^{-2}\\ &= -V_0\left\{\frac{1}{2\alpha}+\left[1+\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2\alpha}\right)^2+\cdots\right]\right\}^{-2}\end{aligned}$$

$$= -\frac{1}{2}I\omega^2 + \left[\frac{1}{2}\hbar\omega - \frac{\hbar^2}{4I} - \frac{3\hbar^2}{16\omega I^2} + \cdots\right]$$

即分子离解能为

$$\frac{1}{2}I\omega^2 - \left[\frac{1}{2}\hbar\omega - \frac{\hbar^2}{4I} - \frac{3\hbar^2}{16\omega I^2} + \cdots\right]$$

3.57　三维中心力场的“反散射”问题 (1)

题 3.57　已知粒子在三维中心势场中运动，其束缚态径向波函数为

$$R_{n_r l}(r) = \frac{u_{n_r l}(r)}{r}$$

其中 $u_{n_r l}(r)$ 为

(1) $Nr^2\mathrm{e}^{-\alpha r^2}$;

(2) $A[\mathrm{e}^{-\alpha r} - \mathrm{e}^{-\beta r}]$ $(0 < \alpha < \beta)$

试分别求出体系的能量及粒子所处势场 $V(r)$.

解答　(1) 由径向方程有

$$V(r) = E_{n_r l} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{u_{n_r l}(r)}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}u_{n_r l}(r), \quad r \geqslant 0$$

可知

$$\frac{1}{u_{n_r l}(r)}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}u_{n_r l}(r) = \frac{2}{r^2} - 10\alpha + 4\alpha^2 r^2$$

故

$$\begin{aligned} V(r) &= E_{n_r l} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + \frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{2}{r^2} - 10\alpha + 4\alpha^2 r^2\right) \\ &= E_{n_r l} - \frac{5\alpha\hbar^2}{\mu} - \frac{(l+2)(l-1)\hbar^2}{2\mu r^2} + \frac{2\alpha^2\hbar^2}{\mu}r^2 \end{aligned}$$

若 $l = 0$, $E = \dfrac{5\alpha\hbar^2}{\mu}$, $V(r) = \dfrac{2\alpha^2\hbar^2}{\mu}r^2 + \dfrac{\hbar^2}{\mu r^2}$. 记 $\alpha = \dfrac{\mu\omega}{2\hbar}$, 则

$$E = \frac{5}{2}\hbar\omega, \quad V(r) = \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 + \frac{\hbar^2}{\mu r^2}$$

若 $l = 1$, 则

$$E = \frac{5}{2}\hbar\omega, \quad V(r) = \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2$$

(2) 若 $l = 0$, 有

$$V(r) = E + \frac{\hbar^2[\alpha^2\mathrm{e}^{-\alpha r} - \beta^2\mathrm{e}^{-\beta r}]}{2\mu[\mathrm{e}^{-\alpha r} - \mathrm{e}^{-\beta r}]}$$

再设定 $V(r)$ 的零点为 $V(r)\xrightarrow{r\to\infty}0$，有

$$0=E+\frac{\hbar^2\alpha^2}{2\mu},\text{因为}\alpha<\beta$$

得到

$$E=-\frac{\hbar^2\alpha^2}{2\mu}$$

这样

$$V(r)=\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{(\alpha^2-\beta^2)\mathrm{e}^{-\beta r}}{\mathrm{e}^{-\alpha r}-\mathrm{e}^{-\beta r}}$$

当 r 很小时，有

$$V(r)\sim\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{(\alpha^2-\beta^2)\mathrm{e}^{-\beta r}}{(\beta-\alpha)r}=-\frac{\hbar^2(\alpha+\beta)\mathrm{e}^{-\beta r}}{2\mu r}$$

为受屏蔽的 Coulomb 势场.

3.58　三维中心力场的“反散射”问题 (2)

题 3.58　设一质点波函数 $\psi(r,\theta,\varphi)=A\mathrm{e}^{-r/a_0}$，其中 A 和 a_0 均为常数，试求：

(1) 这个态的角动量如何?

(2) 设其为一定态，且当 $r\to\infty$ 时，$V(r)\to0$，求此定态的能量 E 和势函数 $V(r)$.

解答　(1) 由于 L_x, L_y, L_z, $\boldsymbol{L}^2$ 仅作用在角度变量 θ,φ 上，而题给波函数 $\psi(r,\theta,\varphi)$ 与 θ,φ 无关，故

$$L_x\psi=0,\quad L_y\psi=0,\quad L_z\psi=0,\quad \boldsymbol{L}^2\psi=0$$

即这个态的角动量及其各分量均为零，实际上 $\psi(r,\theta,\varphi)=\sqrt{4\pi}A\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\mathrm{Y}_{00}(\theta,\varphi)$.

(2) 有定态 Schrödinger 方程 $H\psi=E\psi$，在球坐标系中

$$H=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{r^2}\cdot\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\boldsymbol{L}^2}{\hbar^2r^2}\right)+V(r)\tag{3.356}$$

所以

$$[E-V(r)]\psi=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{r^2}\cdot\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}-\frac{\boldsymbol{L}^2}{\hbar^2r^2}\right)\psi$$

由第 (1) 小题中讨论可知

$$l=0,\quad V(r)-E=\frac{\hbar^2}{2\mu a_0^2}\left(1-\frac{2a_0}{r}\right)$$

由 $r\to\infty$ 时，$V(r)\to0$ 得

$$E=-\frac{\hbar^2}{2\mu a_0^2},\quad V(r)=-\frac{\hbar^2}{\mu a_0 r}$$

3.59　一维氢原子的束缚态解

题 3.59　一维氢原子 $V(x)=-\dfrac{e^2}{|x|}$，求其 $E<0$ 的束缚态能级和波函数.

解答　由于 $V(x)$ 具有空间反演对称性，故能量本征态可选为具有确定宇称，可以求解 $x>0$ 区域中的解，便可确定能量本征值，而 $x<0$ 区域中的解可由宇称性写出. 在 $x>0$ 区

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}-\frac{e^2}{x}\right]\psi=E\psi \tag{3.357}$$

令 $k^2=-\dfrac{2\mu E}{\hbar^2}$，$A=\dfrac{2\mu e^2}{\hbar^2}$，根据方程的渐近解行为可令

$$\psi(x)=x\mathrm{e}^{-kx}\theta(x) \tag{3.358}$$

代入式 (3.357)，得到

$$x\theta''(x)+(2-2kx)\theta'(x)+(A-2k)\theta=0 \tag{3.359}$$

作变换，令 $y=2kx$，式 (3.359)变为

$$y\theta''+(2-y)\theta'-\left(1-\frac{A}{2k}\right)\theta=0 \tag{3.360}$$

式 (3.360)在 $y=0$ 处有界解为合流超几何函数

$$\theta(y)=\mathrm{F}\left(1-\frac{A}{2k},2,y\right)$$

由束缚态边界条件有

$$\frac{A}{2k}=n,\quad n=1,2,3,\cdots$$

得到

$$E_n=-\frac{\mu e^4}{2\hbar^2n^2},\quad n=1,2,3,\cdots$$

相应的偶宇称态

$$\psi_{+,n}(x)=c|x|\mathrm{e}^{-\frac{\mu e^2}{n\hbar^2}|x|}\mathrm{F}\left(1-n,2,\frac{2\mu e^2}{n\hbar^2}|x|\right)$$

奇宇称态

$$\psi_{-,n}(x)=cx\mathrm{e}^{-\frac{\mu e^2}{n\hbar^2}|x|}\mathrm{F}\left(1-n,2,\frac{2\mu e^2}{n\hbar^2}|x|\right)$$

其中，$\psi_{+,n}(x)$，$\psi_{-,n}(x)$ 线性无关，所以能级是二重简并的.

说明　一般情况下，一维束缚定态无简并，但本题中势能在 $x=0$ 处发散，因此，出现了能级简并.

另外，可利用一维氢原子与三维氢原子 s 态所满足径向方程及边界条件的一致性求解此问题.

3.60　氢原子 1s、2s 和 2p 态在动量表象中的形式

题 3.60　氢原子 1s、2s 和 2p 态在动量表象中的形式.

解答　$\psi(\boldsymbol{r})$ 的 Fourier 变换为

$$\varphi(\boldsymbol{p})=F[\psi(\boldsymbol{r})]=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\iiint\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{3.361}$$

因为 $\psi_{1\mathrm{s}}(\boldsymbol{r})=\left(\dfrac{1}{\pi a_0^3}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}$，式 (3.361)中 $\boldsymbol{r}$ 是积分变量，我们不妨选其 z 轴沿动量 $\boldsymbol{p}$ 方向，这样 $\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}=pr\cos\theta$. 将式 (3.230) 代入式 (3.361)，进行积分，求得动量表象氢原子基态波函数为

$$\begin{aligned}\varphi(\boldsymbol{p}) &= \frac{1}{\pi^2(2\hbar a)^{3/2}}\iiint\mathrm{e}^{-\frac{r}{a}-\mathrm{i}pr\cos\theta/\hbar}r^2\sin\theta\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi\\ &= \frac{2}{\pi(2\hbar a)^{3/2}}\iint\mathrm{e}^{-\frac{r}{a}-\mathrm{i}pr\cos\theta/\hbar}\sin\theta\mathrm{d}\theta r^2\mathrm{d}r\\ &= \frac{2}{\pi(2\hbar a)^{3/2}}\int_0^\infty\frac{\hbar}{\mathrm{i}pr}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a}-\mathrm{i}pr\cos\theta/\hbar}\Big|_{\theta=0}^{\pi}r^2\mathrm{d}r\\ &= \frac{2}{\pi(2\hbar a)^{3/2}}\frac{\hbar}{\mathrm{i}p}\int_0^\infty\left(\mathrm{e}^{-\frac{r}{a}+\frac{\mathrm{i}pr}{\hbar}}-\mathrm{e}^{-\frac{r}{a}-\frac{\mathrm{i}pr}{\hbar}}\right)r\mathrm{d}r\\ &= \frac{2}{\pi(2\hbar a)^{3/2}}\cdot\frac{\hbar}{\mathrm{i}p}\left\{\frac{1}{(1/a-\mathrm{i}p/\hbar)^2}-\frac{1}{(1/a+\mathrm{i}p/\hbar)^2}\right\}\\ &= \frac{(2a\hbar)^{3/2}\hbar}{\pi(a^2p^2+\hbar^2)^2}\end{aligned} \tag{3.362}$$

同样的，有

$$\varphi_{2\mathrm{s}}(\boldsymbol{p})=\frac{1}{2\pi}\left(\frac{2a_0}{\hbar}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{p^2a_0^2}{\hbar^2}+\frac{1}{4}\right)^{-3}\left(\frac{p^2a_0^2}{\hbar^2}-\frac{1}{4}\right) \tag{3.363}$$

对于态 2p，$m=-1,0,1$，于是当 $m=0$ 时

$$\varphi_{2\mathrm{p}}(\boldsymbol{p})=-\frac{\mathrm{i}}{\pi}\left(\frac{a_0}{\hbar}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{p^2a_0^2}{\hbar^2}+\frac{1}{4}\right)^{-3}\frac{a_0p_z}{\hbar} \tag{3.364}$$

当 $m=\pm1$ 时

$$\varphi_{2\mathrm{p}}(\boldsymbol{p})=\frac{-\mathrm{i}}{\sqrt{2}\pi}\left(\frac{a_0}{\hbar}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{p^2a_0^2}{\hbar^2}+\frac{1}{4}\right)^{-3}\frac{a_0(p_x\pm\mathrm{i}p_y)}{\hbar} \tag{3.365}$$

3.61　氢原子中电子的电偶极矩

题 3.61　已知描述氢原子中电子运动状态的三种可能波函数在球坐标系中可以写为

$$\psi_1=A\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}r}(r-2),\quad\psi_2=A\mathrm{e}^{-\frac{r}{2}}r\cos\theta,\quad\psi_3=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1+\psi_2)$$

其中，ψ_1, ψ_2 已经正交归一化，常数 $A>0$，证明 ψ_1 和 ψ_2 态的电偶极矩为零，求出 ψ_3 态电偶极矩的表达式，并指出电偶极矩的取向.

证明　因为 $\boldsymbol{D}=-e\boldsymbol{r}$，

$$\langle \boldsymbol{D}\rangle=-e\int\psi^*\boldsymbol{r}\psi\mathrm{d}\boldsymbol{r}=-e\langle\boldsymbol{r}\rangle=-e[\langle x\rangle\boldsymbol{e}_x+\langle y\rangle\boldsymbol{e}_y+\langle z\rangle\boldsymbol{e}_z] \tag{3.366}$$

而其中

$$\begin{aligned}
\langle x\rangle_1 &= \iiint|\psi_1|^2r^3\sin^2\theta\cos\varphi\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi\\
&= \int_0^\infty|\psi_1|^2r^3\mathrm{d}r\int_0^\pi\sin^2\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\cos\varphi\mathrm{d}\varphi=0\\
\langle y\rangle_1 &= \int_0^\infty|\psi_1|^2r^3\mathrm{d}r\int_0^\pi\sin^2\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\sin\varphi\mathrm{d}\varphi=0\\
\langle z\rangle_1 &= \int_0^\infty|\psi_1|^2r^3\mathrm{d}r\int_0^\pi\sin\theta\cos\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi=0
\end{aligned}$$

所以 $\langle\boldsymbol{D}\rangle_1=0$，同理 $\langle\boldsymbol{D}\rangle_2=0$.

这一结果可以由对称性考虑直接给出，因为 $\boldsymbol{D}$ 为奇宇称算符，$|\psi_1\rangle$ 为偶宇称态，$|\psi_2\rangle$ 为奇宇称态.

$$\begin{aligned}
\langle x\rangle_3 &= \int_0^\infty|\psi_3|^2r^3\mathrm{d}r\int_0^\pi\sin^2\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\cos\varphi\mathrm{d}\varphi=0\\
\langle y\rangle_3 &= \int_0^\infty|\psi_3|^2r^3\mathrm{d}r\int_0^\pi\sin^2\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\sin\varphi\mathrm{d}\varphi=0\\
\langle z\rangle_3 &= \frac{1}{2}\int(\psi_1+\psi_2)^*z(\psi_1+\psi_2)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\int\psi_1^*z\psi_2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\\
&= A^2\int\mathrm{e}^{-r}(r-2)r^3\mathrm{d}r\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\int_0^\pi\cos^2\sin\theta\mathrm{d}\theta=16\pi A^2
\end{aligned}$$

这样

$$\langle\boldsymbol{D}\rangle_3=-16\pi eA^2\boldsymbol{e}_z$$

电偶极矩沿 z 轴.

3.62　刚性球半径突变时处于球内的粒子

题 3.62　在半径为 R 的硬刚性球内，有一质量为 m 的粒子处于基态，现突然将硬刚性球半径扩展为原来的 2 倍，求扩展后系统中的粒子处于基态的概率.

解答　处于半径为 R 的硬刚性球内运动粒子的基态为

$$\psi_0(r,\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{2}{R}}\frac{1}{r}\sin\frac{\pi r}{R}\mathrm{Y}_{00},\quad r<R$$

而半径为 $2R$ 的刚性球中粒子的基态为

$$\varphi_0(r,\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{1}{R}}\cdot\frac{1}{r}\sin\frac{\pi r}{2R}\mathrm{Y}_{00}$$

故粒子处于基态的概率幅为

$$\begin{aligned}|\langle\varphi_0|\psi_0\rangle| &= \frac{\sqrt{2}}{R}\int_0^R \sin\frac{\pi r}{R}\sin\frac{\pi r}{2R}\mathrm{d}r \\ &= \sqrt{2}\left[\left.\frac{\sin\left(\pi-\frac{\pi}{2}\right)\frac{r}{R}}{2\left(\pi-\frac{\pi}{2}\right)}\right|_0^R - \left.\frac{\sin\left(\pi+\frac{\pi}{2}\right)\frac{r}{R}}{2\left(\pi+\frac{\pi}{2}\right)}\right|_0^R\right] = \frac{4\sqrt{2}}{3\pi}\end{aligned}$$

相应概率为

$$P = |\langle\varphi_0|\psi_0\rangle|^2 = \frac{32}{9\pi^2}$$

3.63 粒子在 Hulthen 势中束缚态能级的不等式

题 3.63 粒子在 Hulthen 势场

$$V(r) = -\frac{V_0}{\exp(r/a)-1},\quad V_0, a>0$$

中运动，证明其束缚态能级 E_n 满足不等式

$$E_n > -\frac{\mu V_0^2 a^2}{2n^2\hbar^2},\quad n=1,2,3,\cdots$$

提示：与下面 Coulomb 势场中能级比较：

$$V_c(r) = -V_0 a/r$$

证明 将题给 Hulthen 势场分母里指数函数按幂级数展开

$$\begin{aligned}V(r) &= -V_0/\left[\frac{r}{a}+\frac{1}{2!}\left(\frac{r}{a}\right)^2+\cdots\right] \\ &= V_c(r)/\left[1+\frac{1}{2!}\left(\frac{r}{a}\right)+\frac{1}{3!}\left(\frac{r}{a}\right)^2+\cdots\right]\end{aligned} \tag{3.367}$$

上式分母恒大于 1，因此 ①

$$|V(r)| < |V_c(r)|,\quad V(r) > V_c(r) \tag{3.368}$$

和类氢离子能级公式比较，可以看出所证不等式

$$E_n > -\frac{\mu V_0^2 a^2}{2n^2\hbar^2},\quad n=1,2,3,\cdots$$

的右边正好是 Coulomb 势场中 $V_c(r) = -V_0 a/r$ 的束缚定态能级，其中

$$n = n_r + l + 1 \tag{3.369}$$

① 也可以构造函数 $f(x) = \mathrm{e}^x - 1 - x$. 考察其导数可知该函数在 $0 \sim +\infty$ 范围内是增函数，又 $f(0) = 0$，从而对于 $x > 0$，$f(x) = \mathrm{e}^x - 1 - x > 0$，或者 $\mathrm{e}^x - 1 > x$. 由此一样得到 $|V(r)| < |V_c(r)|$.

其中，$n_r=0,1,2,\cdots$ 为径向波函数的节点个数，而 $l=0,1,2,\cdots$ 为角量子数.

由于 $V(r)>V_c(r)$，根据 Hellmann-Feynman 定理[①]可以证明，(n_r,l) 相同的束缚态中，Hulthen 势场的能级高于 Coulomb 势场的能级. 因此所证不等式成立.

说明　Coulomb 势场存在偶然简并，$n_r+l+1=n$ 的所有束缚态能量相等. 本题的结论是对于所有满足 $n_r+l+1=n$ 的 (n_r,l) 对应的束缚态能量均高于 $-\dfrac{\mu V_0^2a^2}{2n^2\hbar^2}$.

3.64　无自旋粒子在柱对称势下运动的讨论

题 3.64　无自旋粒子在柱对称势 $V(\rho)$ 作用下运动 (柱坐标记号为 ρ,φ,z),

(1) 证明 $[H,L_z]=[H,p_z]=0$，写出径向定态方程;

(2) 设 π_y 描述 yOz 平面反射，则 π_y 与 H 是否对易? 证明 $[\pi_y,L_z]_+=0$，从而 $\{H,L_z,p_z\}$ 的共同本征矢在 π_y 的作用下仍为 L_z 的本征矢. 这对能级简并度有什么影响?

证明　(1) 由

$$H=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\right)+\frac{L_z^2}{2\mu\rho^2}+\frac{p_z^2}{2\mu}+V(\rho)$$

可得

$$[H,p_z]=[H,L_z]=0$$

令 $\psi(\rho,\varphi,z)=f(\rho)\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}$，得到

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}+\frac{1}{\rho}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\right)+\frac{m^2\hbar^2}{2\mu\rho^2}+\frac{\hbar^2k^2}{2\mu}+V(\rho)\right]f(\rho)=Ef(\rho)$$

(2) 在 π_y 作用下，$\varphi\to2\pi-\varphi$，ρ 及 z 不变，因而 ∇^2 不变，从而 H 不变，即 $\pi_yH\pi_y^\dagger=H$，因 $\pi_y^\dagger=\pi_y^{-1}$，得

$$[\pi_y,H]=0$$

另一方面，在 π_y 作用下，$\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\to-\dfrac{\partial}{\partial\varphi}$，即 $L_z\to-L_z$. 由于 $\pi_yL_z\pi_y^\dagger=-L_z$，得 $[\pi_y,L_z]_+=0$，由此 $\pi_y\psi_{nmk}=\psi_{n,-m,k}$，它导致对 m 的二重简并存在 ($m=0$ 除外).

① 张永德, 量子力学 (第 4 版)[M], 北京: 科学出版社, 2017, P.39.

第 4 章　算符、表象和表示

4.1　宇称 (空间反演) 算符

题 4.1　宇称 (空间反演) 算符 $\hat{\pi}$：$\hat{\pi}\psi(\boldsymbol{r})=\psi(-\boldsymbol{r})$.

(1) 证明 $\hat{\pi}^{\dagger}=\hat{\pi}$;

(2) 证明 $\hat{\pi}^2=1$，并求 $\hat{\pi}$ 的本征值、本征态.

证明　(1) 对任意的 $\psi(\boldsymbol{r})$，$\varphi(\boldsymbol{r})$

$$\int\psi^*(\boldsymbol{r})\hat{\pi}\varphi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\int\psi^*(\boldsymbol{r})\varphi(-\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

其中积分遍及全空间. 令上式右边 $\boldsymbol{r}=-\boldsymbol{r}'$，有

$$\int\psi^*(\boldsymbol{r})\hat{\pi}\varphi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\int\varphi(\boldsymbol{r}')[\hat{\pi}\psi(\boldsymbol{r}')]^*\mathrm{d}\boldsymbol{r}'$$

故 $\hat{\pi}^{\dagger}=\hat{\pi}$.

(2) 显然有 $\hat{\pi}^2\psi(\boldsymbol{r})=\hat{\pi}\psi(-\boldsymbol{r})=\psi(\boldsymbol{r})$，$\psi(\boldsymbol{r})$ 为任意的，故 $\hat{\pi}^2=1$，即 $\hat{\pi}^{-1}=\hat{\pi}=\hat{\pi}^{\dagger}$，宇称算符为 Hermite、自逆、幺正的. 由 $\hat{\pi}^2=1$ 可知 $\hat{\pi}$ 的本征值为 ±1，相应的本征态为

$$\hat{\pi}\psi_+(\boldsymbol{r})=\psi_+(\boldsymbol{r}),\quad \psi_+(-\boldsymbol{r})=\psi_+(\boldsymbol{r})\qquad \text{偶宇称态}$$

$$\hat{\pi}\psi_-(\boldsymbol{r})=-\psi_-(\boldsymbol{r}),\quad \psi_-(-\boldsymbol{r})=-\psi_-(\boldsymbol{r})\qquad \text{奇宇称态}$$

4.2　证明束缚定态中动量的期望值恒为零

题 4.2　在 Hamilton 量分立谱的定态为束缚定态，证明其动量的期望值恒为零.

证法一　设 Hamilton 量为 $H=\dfrac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(\boldsymbol{x})$，它的任意一个束缚定态为 $|\psi_n\rangle$，相应的本征值为 E_n，即

$$H|\psi_n\rangle=E_n|\psi_n\rangle \tag{4.1}$$

由于 H 的 Hermite 性，上式的 Hermite 共轭式为

$$\langle\psi_n|H=E_n\langle\psi_n| \tag{4.2}$$

我们考虑

$$[x,\,H]=\left[x,\,\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(\boldsymbol{x})\right]=\frac{1}{2m}\left[x,\,p_x^2\right]=\frac{\mathrm{i}\hbar}{m}p_x$$

两边对 $|\psi_n\rangle$ 取平均，得

$$\langle\psi_n|[x,H]|\psi_n\rangle=\frac{\mathrm{i}\hbar}{m}\langle\psi_n|p_x|\psi_n\rangle$$

利用式 (4.1) 和式 (4.2)，上式左边为

$$\begin{aligned}\langle\psi_n|xH-Hx|\psi_n\rangle &= \langle\psi_n|xH|\psi_n\rangle-\langle\psi_n|Hx|\psi_n\rangle\\ &= E_n\langle\psi_n|x|\psi_n\rangle-E_n\langle\psi_n|x|\psi_n\rangle=0\end{aligned}$$

因此 $\langle\psi_n|p_x|\psi_n\rangle=0$，即 x 方向动量期望值 $\langle p_x\rangle=0$. 同理，$\langle p_y\rangle=\langle p_z\rangle=0$. 因而 $\langle\boldsymbol{p}\rangle=0$.

证法二　在定态下力学量的期望值不随时间改变，则在 $|\psi_n\rangle$ 下，$\langle x\rangle=\text{const.}$，再利用[①]

$$\langle p_x\rangle=m\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle x\rangle$$

因而 $\langle\psi_n|p_x|\psi_n\rangle=0$.

若是在一维的情况下，则还有下面的证法三 (Landau).

证法三　在坐标表象 $\hat{p}=-\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$，因而

$$\overline{p}=\int\psi_n^*(x)\hat{p}\psi_n(x)\mathrm{d}x=-\mathrm{i}\hbar\int\psi_n^*(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_n(x)\mathrm{d}x$$

力学量 $\hat{p}$ 的期望值 $\overline{p}$ 一定为实数，但由于一维束缚定态波函数总可以取为实函数，上式右边是一纯虚数，因此一定有 $\overline{p}=0$.

4.3　$\left[\hat{A},\hat{B}\right]_+=0$ 时，在 Hermite 算符 $\hat{A}$ 的分立谱本征态下 $\hat{B}$ 的期望值为零

题 4.3　若 $\hat{A}$ 为 Hermite 算符，且 $\left[\hat{A},\hat{B}\right]_+=0$，证明在 $\hat{A}$ 的分立谱本征态下，$\hat{B}$ 的期望值为零.

证明　题给 $\hat{A}$ 为 Hermite 算符，即 $\hat{A}=\hat{A}^\dagger$，$\hat{A}$ 的本征方程为

$$\hat{A}|\varphi_n\rangle=a_n|\varphi_n\rangle$$

因而

$$\langle\varphi_n|\left[\hat{A},\hat{B}\right]_+|\varphi_n\rangle=2a_n\langle B\rangle_n=0$$

故若 $a_n\neq0$，必有

$$\left\langle\hat{B}\right\rangle_n=0$$

讨论　$\hat{B}$ 为任意算符，但要求 $\hat{B}|\varphi_n\rangle$ 在 $\hat{A}$ 的 Hermite 算符定义域中.

① 例如在 Heisenberg 图像下，利用 Heisenberg 方程得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}x=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[x,H]=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[x,\frac{p_x^2}{2m}\right]=\frac{p_x}{m}$$

对于一个特定的 Heisenberg 图像下的态 $|\psi\rangle$，满足 $\dfrac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle=0$，这样即有 $\langle p_x\rangle=m\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle x\rangle$.

4.4 $\left[\hat{A},\hat{H}\right]_+=0$ 时能量本征态的性质

题 4.4 若系统的 Hamilton 量 $\hat{H}$ 与某个力学量 $\hat{A}$ 反对易 $\left[\hat{H},\hat{A}\right]_+=\hat{H}\hat{A}+\hat{A}\hat{H}=0$，$|E\rangle$ 为 $\hat{H}$ 的本征值为 E 的本征态，若 $\hat{A}|E\rangle\neq 0$，则 $\hat{A}|E\rangle$ 也是 $\hat{H}$ 的本征态，本征值为 $-E$.

证明 证明是直接的，这一结果表明，除了 $\hat{A}$ 的零本征值外，此系统的所有能级都是正负值成对出现的.

说明 一个简单的例子是 $S=\dfrac{1}{2}\hbar$ 的带电粒子在磁场中运动

$$\hat{H}=-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}=-\lambda\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}$$

其中，$\boldsymbol{\mu}$ 为磁矩，$\boldsymbol{B}$ 为磁感应强度，$\boldsymbol{\sigma}$ 为 Pauli 矩阵. 若 $\boldsymbol{N}$ 为另一与 $\boldsymbol{B}$ 垂直的矢量

$$\boldsymbol{N}\cdot\boldsymbol{B}=\sum_i N_iB_i=0$$

则 $\hat{H}$ 与算符 $\hat{G}=\boldsymbol{N}\cdot\boldsymbol{\sigma}$ 反对易

$$\begin{aligned}\left[\hat{H},\hat{G}\right]_+ &= -\lambda[\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{N}]_+=-\lambda\sum_{ij}[\sigma_i,\sigma_j]_+B_iN_j\\ &= -\lambda\sum_{ij}2\delta_{ij}B_iN_j=-2\lambda\sum_i B_iN_i=0\end{aligned}$$

故这个 $\hat{H}$ 的本征值一般是正负成对出现的，事实上，此系统的两个本征能量差一负号.

4.5 算符函数 $\hat{F}^N$ 的展开

题 4.5 设一个力学量算符 $\hat{F}$ 有 N 个不同的本征值. 试证明算符 $\hat{F}^N$ 可以写成算符 $\hat{I},\hat{F},\hat{F}^2,\cdots,\hat{F}^{N-1}$ 的线性叠加，其中 $\hat{I}$ 为单位算符.

证明 记力学量 $\hat{F}$ 的 N 个不同的本征值为 $f_1,f_2,\cdots,f_N$，$\hat{F}$ 的正交归一化本征函数完备集为 $\{\phi_k\}$. 现构造一个算符 $\hat{G}$ 为

$$\hat{G}=(\hat{F}-f_1)(\hat{F}-f_2)\cdots(\hat{F}-f_N)$$

将 $\hat{G}$ 作用在任一波函数 ψ 上，有

$$\begin{aligned}\hat{G}\psi &= \hat{G}\left(\sum_k c_k\phi_k\right)=\sum_k c_k(\hat{G}\phi_k)\\ &= \sum_k c_k(\hat{F}-f_1)(\hat{F}-f_2)\cdots(\hat{F}-f_N)\phi_k=0\end{aligned}$$

得 $\hat{G}=0$，即

$$(\hat{F}-f_1)(\hat{F}-f_2)\cdots(\hat{F}-f_N)=0 \tag{4.3}$$

也就有

$$\hat{F}^N-\sum_i f_i\hat{F}^{N-1}+\frac{1}{2}\sum_{i\neq k}f_if_k\hat{F}^{N-2}+\cdots+(-1)^N\prod_i^N f_i=0$$

或者

$$\hat{F}^N=\sum_i f_i\hat{F}^{N-1}-\frac{1}{2}\sum_{i\neq k}f_if_k\hat{F}^{N-2}+\cdots+(-1)^{N+1}\prod_i^N f_i \tag{4.4}$$

式 (4.4)表明 $\hat{F}^N$ 可以写为算符 $\hat{I},\hat{F},\hat{F}^2,\cdots,\hat{F}^{N-1}$ 的线性叠加，其中 $\hat{I}$ 为单位算符，命题得证.

讨论 1　Dirac《量子力学原理》上面有如下问题:

设力学量算符 $\hat{A}$ 满足的最简单的代数方程为

$$f(\hat{A})=\hat{A}^n+C_1\hat{A}^{n-1}+C_2\hat{A}^{n-2}+\cdots+C_n=0 \tag{4.5}$$

C_1、C_2、$\cdots$、C_n 是常系数. 证明 $\hat{A}$ 有 n 个本征值，它们都是 $f(x)=0$ 的根.

参阅 P.A.M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*, 4th ed., Oxford University Press, 1958, §9.

证明　将式 (4.5) 作用于体系任意状态的波函数 ψ 上，均应有

$$f(\hat{A})\psi=0 \tag{4.6}$$

现取 ψ 为 $\hat{A}$ 的本征函数 ψ_a，本征值为 a，即有 $\hat{A}\psi_a=a\psi_a$，代入式 (4.6)，$f(A)\psi_a=f(a)\psi_a$，也就是

$$f(a)\psi_a=\left(a^n+C_1a^{n-1}+C_2a^{n-2}+\cdots+C_n\right)\psi_a=0 \tag{4.7}$$

$f(a)$ 是一个数，ψ_a 非零态，因此上式给出

$$f(a)=a^n+C_1a^{n-1}+C_2a^{n-2}+\cdots+C_n=0 \tag{4.8}$$

设 $\{\psi_{a_1},\psi_{a_2},\cdots,\psi_{a_m}\}$ 是 A 的所有本征态，相应的本征值为 a_1、a_2、$\cdots$、a_m. 根据式 (4.8)，这些本征值都是 $f(a)=0$ 的根 (实根). 由代数学基本定理，$m\leqslant n$，且

$$f(a)=\prod_{k=1}^m(a-a_k)\cdot g(a)$$

因而

$$\begin{aligned}f(A)&=\prod_{k=1}^m(A-a_k)\cdot g(A)\\&=\hat{A}^n+C_1\hat{A}^{n-1}+C_2\hat{A}^{n-2}+\cdots+C_n\end{aligned}$$

题给，式 (4.5) 中的 $f(A)$ 是 $\hat{A}$ 满足的最简单的代数方程，上式中只能是 $g(A)=1$，由此知 $m=n$. 故式 (4.8) 应有 n 个根，它们都是 $\hat{A}$ 的本征值.

反之，如已知力学量算符 $\hat{A}$ 的 n 个本征值 a_1、a_2、$\cdots$、a_n，则 $\hat{A}$ 的任何一个本征函数显然满足方程

$$\left(\hat{A}-a_1\right)\left(\hat{A}-a_2\right)\cdots\left(\hat{A}-a_n\right)\psi_a=0 \tag{4.9}$$

力学量算符 $\hat{A}$ 的所有本征态具有完备性，或者说任何波函数都可以表示为 $\hat{A}$ 的所有本征态波函数的线性叠加，所以式 (4.9) 对任意波函数都成立，因此

$$\left(\hat{A}-a_1\right)\left(\hat{A}-a_2\right)\cdots\left(\hat{A}-a_n\right)=0 \tag{4.10}$$

上式应该和式 (4.5) 等价.

讨论 2　本题可见力学量算符 $\hat{A}$ 满足的最简单的代数方程阶数是 n 与 $\hat{A}$ 有 n 个本征值等价. 而从式 (4.5) 看出，若 $\hat{A}$ 有 n 个本征值，则 $\hat{A}$ 的任何非负幂次 (从而任意 $\hat{A}$ 的整函数) 都可以用 $\hat{A}^{n-1}$、$\hat{A}^{n-2}$、$\cdots$、$\hat{A}$、$\hat{I}$ 的线性叠加表示，其中 $\hat{I}$ 为单位算符.

例 1　若 $\hat{F}$ 只有两个不同的本征值 f_1 和 f_2，则由式 (4.3)可得

$$(\hat{F}-f_1)(\hat{F}-f_2)=0$$

即有

$$\hat{F}^2=(f_1+f_2)\hat{F}-f_1f_2$$

例 2　若 $\hat{F}$ 有三个不同的本征值 f_1、f_2 和 f_3，则由式 (4.3)可得

$$(\hat{F}-f_1)(\hat{F}-f_2)(\hat{F}-f_3)=0$$

即有

$$\hat{F}^3=(f_1+f_2+f_3)\hat{F}^2-(f_1f_2+f_1f_3+f_2f_3)\hat{F}+f_1f_2f_3$$

例如，轨道角动量算符 $\hat{\boldsymbol{l}}$ 的三个直角坐标分量为 $\hat{l}_i(i=x,y,z)$，对于 $l=1$，$\hat{l}_i$ 的本征值有 3 个，分别为 1、0、-1(取 $\hbar=1$)，因此 $\left(\hat{l}_i-1\right)\hat{l}_i\left(\hat{l}_i+1\right)=0$，这样

$$\hat{l}_i^3=\hat{l}_i,\quad \hat{l}_i^4=\hat{l}_i^2,\quad \hat{l}_i^5=\hat{l}_i^3=\hat{l}_i,\cdots,\quad \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi\hat{l}_i}=\left(\hat{I}-\hat{l}_i^2\right)-\hat{l}_i\sin\varphi+\hat{l}_i^2\cos\varphi$$

对于 $l=2$，$\hat{l}_i$ 的本征值为 $2,1,0,-1,-2$(取 $\hbar=1$)，因而

$$\left(\hat{l}_i-2\right)\left(\hat{l}_i-1\right)\hat{l}_i\left(\hat{l}_i+1\right)\left(\hat{l}_i+2\right)=0$$

这样

$$\hat{l}_i^5=5\hat{l}_i^3-4\hat{l}_i,\ \hat{l}_i^6=5\hat{l}_i^4-4\hat{l}_i^2,\ \hat{l}_i^7=5\hat{l}_i^5-4\hat{l}_i^3=21\hat{l}_i^3-20\hat{l}_i,\ \cdots$$

4.6　坐标算符本征值谱的讨论

题 4.6　从基本量子化条件出发，求坐标算符的本征值谱 (讨论一维情况).

解答　设坐标算符 $\hat{x}$ 的本征值方程为

$$\hat{x}\psi_{x_0} = x_0\psi_{x_0}$$

引入线性幺正算符

$$\hat{U}(\xi) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\xi\hat{p}} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(-\dfrac{\mathrm{i}}{\hbar}\xi\right)^n}{n!}\hat{p}^n$$

式中，$\hat{p}$ 是动量算符；ξ 是实参数，在区间 $(-\infty, \infty)$ 内连续可变. 利用基本对易关系 $[\hat{x},\hat{p}] = \mathrm{i}\hbar$(量子化条件)，有

$$\begin{aligned}
[\hat{x},\hat{U}(\xi)] &= \sum_{n=0}^{\infty}\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\right)^n \frac{\xi^n}{n!}[\hat{x},\hat{p}^n] = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{\xi}{\mathrm{i}\hbar}\right)^n [\hat{x},\hat{p}^n] \\
&= \mathrm{i}\hbar\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{\xi}{\mathrm{i}\hbar}\right)^n (n\hat{p}^{n-1}) = \mathrm{i}\hbar\left(\frac{\xi}{\mathrm{i}\hbar}\right)\left[\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\xi\right)^n \hat{p}^n\right] \\
&= \xi\hat{U}(\xi)
\end{aligned}$$

即有

$$\hat{x}\hat{U}(\xi) = \hat{U}(\xi)(\hat{x}+\xi) \tag{4.11}$$

把式 (4.11)左右两边同时作用到 $\hat{x}$ 的本征函数 ψ_{x_0} 上，有

$$\begin{aligned}
\hat{x}\hat{U}(\xi)\psi_{x_0} &= \hat{U}(\xi)(\hat{x}+\xi)\psi_{x_0} = \hat{U}(\xi)(x_0+\xi)\psi_{x_0} \\
&= (x_0+\xi)\hat{U}(\xi)\psi_{x_0}
\end{aligned} \tag{4.12}$$

比较式 (4.11)的左右两边可知，$\hat{U}(\xi)\psi_{x_0}$ 也是坐标算符 $\hat{x}$ 的本征函数，相应的本征值为 $(x_0+\xi)$，表明若 x_0 是 $\hat{x}$ 的一个本征值，则 x_0 加上任意的实参数 ξ 也是 $\hat{x}$ 的一个本征值，而 ξ 取区间 $(-\infty, \infty)$ 内的一切实数值，加上 $\hat{x}$ 是线性 Hermite 算符，本征值 x_0 已是实数，所以 $\hat{x}$ 的本征值取 $(-\infty, \infty)$ 内的一切实数值，构成连续谱.

4.7　动量算符本征值谱的讨论

题 4.7　从基本对易关系 (量子化条件) 出发，求动量算符的本征值谱 (讨论一维情况).

解答　动量算符 $\hat{p}$ 的本征值方程为

$$\hat{p}\psi_{p_0} = p_0\psi_{p_0}$$

引入线性幺正算符

$$\hat{U}(\eta)=\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\eta\hat{x}}\equiv\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\eta\right)^{n}}{n!}\hat{x}^{n}$$

式中，$\hat{x}$ 是坐标算符，它与动量算符之间遵从基本对易关系 $[\hat{x},\hat{p}]=\mathrm{i}\hbar$；$\eta$ 为实参数，在区间 $(-\infty,\infty)$ 内连续可变. 有

$$\left[\hat{p},\hat{U}(\eta)\right]=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\hat{x}}\hat{U}(\eta)=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\hat{x}}\exp(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\eta\hat{x})=\eta\hat{U}(\eta)$$

也就是

$$\hat{p}\hat{U}(\eta)=\hat{U}(\eta)(\hat{p}+\eta)$$

将 $\hat{U}(\eta)$ 作用到 $\hat{p}$ 的本征函数上

$$\hat{p}\hat{U}(\eta)\psi_{p_0}=\hat{U}(\mu)(\hat{p}+\eta)\psi_{p_0}=\hat{U}(\eta)(p_0+\eta)\psi_{p_0}$$

也就是

$$\hat{p}\hat{U}(\eta)\psi_{p_0}=(p_0+\eta)\hat{U}(\eta)\psi_{p_0}$$

表明 $\hat{U}(\eta)\psi_{p_0}$ 是动量算符 $\hat{p}$ 对应于本征值 $(p_0+\eta)$ 的本征函数，即 $\hat{p}$ 的本征值可为 $(p_0+\eta)$，而 η 取区间 $(-\infty,\infty)$ 内的一切实数值，故 $\hat{p}$ 的本征值谱为连续谱，取区间 $(-\infty,\infty)$ 内的一切实数值.

4.8　坐标平移算符的本征值及本征态

题 4.8　试求算符 $\hat{T}(a)\equiv\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}a\hat{p}}$ 的本征值谱和本征函数集. 其中 $\hat{p}=\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ 为动量算符，a 为一个给定的实常量.

解答　(1) 先求 $\hat{T}(a)$ 的本征值谱. 由算符的本征值方程

$$\hat{T}(a)\psi_\lambda(x)=\lambda\psi_\lambda(x)\tag{4.13}$$

出发，将算符 $\left[\hat{T}(a)\right]^{\dagger}\left[\hat{T}(a)\right]^{-1}$ 左乘方程 (4.13)两边再作积分运算 $\int\mathrm{d}x\psi_\lambda^*(x)$ 得

$$\int\psi_\lambda^*(x)\left[\hat{T}(a)\right]^{\dagger}\hat{T}(a)\psi_\lambda(x)\mathrm{d}x=\int\psi_\lambda^*(x)\left[\hat{T}(a)\right]^{\dagger}\lambda\psi_\lambda(x)\mathrm{d}x$$

也就是

$$\int|\psi_\lambda(x)|^2\mathrm{d}x=\lambda\int\psi_\lambda(x)\left[\hat{T}(a)\psi_\lambda(x)\right]^{*}\mathrm{d}x=\lambda\lambda^*\int|\psi_\lambda(x)|^2\mathrm{d}x$$

由此得

$$|\lambda|^2=1,\quad\text{即}\lambda=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta}\xrightarrow{\text{记为}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}\tag{4.14}$$

式中，a 为算符 $\hat{T}(a)$ 中给定的实常量，k 为标记本征值 λ 的“量子数”，它可取区间 $(-\infty,\infty)$ 中的一切实数值. 事实上，由 $\hat{T}(a)\equiv\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}a\hat{p}}$ 是动量算符 $\hat{p}$ 的函数直接可知，它的本征值为动量算符的本征值 $p=\hbar k$，本征值谱为连续谱.

(2) 再求 $\hat{T}(a)$ 的本征函数集. 将式 (4.14)代入式 (4.13)有

$$\hat{T}(a)\psi_k(x)=\mathrm{e}^{-a\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}}\psi_k(x)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}\psi_k(x) \tag{4.15}$$

而另一方面

$$\mathrm{e}^{-a\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}}\psi_k(x)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-a)^n}{n!}\cdot\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\psi_k(x)=\psi_k(x-a) \tag{4.16}$$

再引入函数 $u_k(x)$

$$u_k(x)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\psi_k(x),\quad \psi_k(x)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}u_k(x) \tag{4.17}$$

联合式 (4.15)、式 (4.16)、式 (4.17)，有

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x-a)}u_k(x-a)=\psi_k(x-a)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}\psi_k(x)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}u_k(x)$$

由此得到函数 $u_k(x)$ 满足的条件为

$$u_k(x)=u_k(x-a) \tag{4.18}$$

式 (4.15)表明，$u_k(x)$ 是 x 的周期函数，周期为 a. 于是算符 $\hat{T}(a)$ 的本征函数为

$$\psi_k(x)=u_k(x)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$$

此即调幅平面波.

4.9　轨道角动量算符 $\hat{L}_z$ 的 Hermite 性条件

题 4.9　(1) 证明：为了保证 $\hat{L}_z=-\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial\varphi}$ 是 Hermite 算符，波函数 $\psi(r,\theta,\varphi)$ 必须满足单值性条件

$$\psi(r,\theta,\varphi)=\psi(r,\theta,\varphi+2\pi) \tag{4.19}$$

(2) 在球坐标系中，粒子角动量的 z 分量 $\hat{L}_z=-\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial\varphi}$，于是按照关于 $\hat{x}$ 和 $\hat{p}$ 的对易规则来推论，人们期望下列对易关系和不确定性关系或许会成立

$$\left[\varphi,\hat{L}_z\right]=\mathrm{i}\hbar \tag{4.20}$$

$$\Delta\hat{L}_z\cdot\Delta\varphi\geqslant\frac{\hbar}{2} \tag{4.21}$$

试说明：式 (4.20)在一般情况下是不成立的，而式 (4.21)是和 Heisenberg 不确定性关系矛盾的.

解答　(1) 证明：若 $\hat{L}_z$ 是 Hermite 算符，则它应该满足 Hermite 算符的定义式，即对于任意两个波函数 ψ、ϕ 有

$$\int\phi^*\hat{L}_z\psi\mathrm{d}\tau=\int(\hat{L}_z\phi^*)\psi\mathrm{d}\tau \tag{4.22}$$

若 $\phi=\phi(r,\theta)$ 与 φ 无关，则由于 $\hat{L}_z=-\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial\varphi}$，有 $\hat{L}_z\phi=0$，因此由式 (4.22)给出

$$\int\phi^*\hat{L}_z\psi\mathrm{d}\tau=0$$

也就是

$$\int_0^\infty r^2\mathrm{d}r\int_0^\pi\sin\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\phi^*(r,\theta)\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi(r,\theta,\varphi)\mathrm{d}\varphi=0$$

由于被积函数中 $\phi^*(r,\theta)$ 有任意性，因此要求

$$\int_0^{2\pi}\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi(r,\theta,\varphi)\mathrm{d}\varphi=\psi(r,\theta,\varphi)\Big|_0^{2\pi}=0$$

又由于 φ 的零点可以任意选择，故上式亦即周期性边界条件 (4.19).

(2) 由第 (1) 小题所述，欲保证 $\hat{L}_z=-\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial\varphi}$ 的 Hermite 性，函数必须满足周期性边界条件 (4.19). 但是一般说来，如果函数 $\psi(r,\theta,\varphi)$ 满足条件 (4.19)，则 ψ 乘以自变量 φ 后的结果 $\psi\varphi$ 就一定不满足条件 (4.19)，除非 $\psi(r,\theta,\varphi)=\psi(r,\theta,\varphi+2\pi)=0$. 故将式 (4.20)左边作用于函数 ψ 上，有

$$[\varphi,\hat{L}_z]\psi=\varphi(\hat{L}_z\psi)-\hat{L}_z(\varphi\psi)$$

由于 $\varphi\psi$ 不满足条件 (4.19)，故 $L_z\varphi\psi$ 不能表示可观测量. 这样就把对易关系式 (4.20)的正确性仅仅只限制在要求 $\psi(r,\theta,\varphi)=\psi(r,\theta,\varphi+2\pi)=0$ 这样一类特殊的函数上，故式 (4.20)在一般情况下不成立，且 φ 与 $\hat{L}_z$ 也不是一对正则共轭变量.

显然式 (4.21)与 Heisenberg 不确定性关系也是不一致的. 因为在球坐标系内，φ 的取值范围是 $[0,2\pi]$，φ 属于有限空间，使得不确定量 $\Delta\varphi$ 也必须是有限的. 于是，如果 $\Delta L_z\to0$，则 $\Delta\varphi\Delta L_z=0$，导致式 (4.21)变为 $0\geqslant\dfrac{\hbar}{2}$ 的错误结果. 既然不能建立 φ 与 L_z 间的对易关系式 $[\varphi,\hat{L}_z]=\mathrm{i}\hbar$，也就不会有 $\Delta\hat{L}_z\cdot\Delta\varphi\geqslant\dfrac{\hbar}{2}$ 的不确定性关系式. 但是用 φ 的一个周期函数 $f(\varphi)$(周期为 2π) 去代替 φ，就可以建立 φ 与 $f(\varphi)$ 之间的不确定关系. 例如，$\sin\varphi$ 和 $\cos\varphi$ 是与 $\hat{L}_z$ 同域的 Hermite 算符，有

$$[\sin\varphi,\hat{L}_z]=\mathrm{i}\hbar\cos\varphi$$
$$[\cos\varphi,\hat{L}_z]=-\mathrm{i}\hbar\sin\varphi$$

由此得

$$(\Delta\hat{L}_z)^2(\Delta\sin\varphi)^2\geqslant\frac{\hbar^2}{4}\overline{\cos^2\varphi}$$
$$(\Delta\hat{L}_z)^2(\Delta\cos\varphi)^2\geqslant\frac{\hbar^2}{4}\overline{\sin^2\varphi}$$

4.10　流密度算符

题 4.10　证明流密度算符

$$\hat{\boldsymbol{j}}=\frac{1}{2}\left[\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{m}+\frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{m}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\right] \tag{4.23}$$

是 Hermite 算符.

证法一　由 Hermite 算符的定义可知，当算符 $\hat{A}$ 满足下列关系式时为 Hermite 算符：

$$\int\psi^*(\boldsymbol{r})\hat{A}\varphi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\int\varphi(\boldsymbol{r})\left[\hat{A}\psi(\boldsymbol{r})\right]^*\mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{4.24}$$

其中，$\psi(\boldsymbol{r})$、$\varphi(\boldsymbol{r})$ 为两个任意的波函数. 现将 $\hat{\boldsymbol{j}}$ 代替上式中的 $\hat{A}$，并将 $\hat{\boldsymbol{p}}=-\mathrm{i}\hbar\nabla$ 代入，这时

$$\begin{aligned}\text{等式左边}&=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(\boldsymbol{r})\frac{1}{2}\left[\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\frac{-\mathrm{i}\hbar}{m}\nabla+\frac{-\mathrm{i}\hbar}{m}\nabla\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\right]\varphi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}\\&=\oint_S\psi^*(\boldsymbol{r})\left[\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\left(\frac{-\mathrm{i}\hbar}{m}\right)\varphi(\boldsymbol{r})\right]\mathrm{d}S\\&\quad+\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(\boldsymbol{r})\frac{1}{2}\left[\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\frac{\mathrm{i}\hbar}{m}\nabla+\frac{\mathrm{i}\hbar}{m}\nabla\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\right]\psi^*(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}\end{aligned}$$

上式右边第一项为在全空间的边界面上的积分，该面积分因 $\boldsymbol{r}'$ 不在积分面上而消失，第二项正好是 $\int\varphi(\boldsymbol{r})\left[\hat{\boldsymbol{j}}\psi(\boldsymbol{r})\right]^*\mathrm{d}\boldsymbol{r}$，等于式 (4.24)的右边，因此式 (4.24)成立. 上面用到了矢量微分公式：

$$\psi^*(\boldsymbol{r})\nabla\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\varphi(\boldsymbol{r})=\nabla\left[\psi^*(\boldsymbol{r})\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\varphi(\boldsymbol{r})\right]-\left[\nabla\psi^*(\boldsymbol{r})\right]\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\varphi(\boldsymbol{r})$$

以及

$$\psi^*(\boldsymbol{r})\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\nabla\varphi(\boldsymbol{r})=\nabla\left[\psi^*(\boldsymbol{r})\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\varphi(\boldsymbol{r})\right]-\left[\nabla\psi^*(\boldsymbol{r})\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\right]\varphi(\boldsymbol{r})$$

上面证明了式 (4.24)，且其中 $\psi(\boldsymbol{r})$、$\varphi(\boldsymbol{r})$ 是任意的，这意味着式 (4.23)的 $\hat{\boldsymbol{j}}$ 为 Hermite 算符.

说明　同理可证

$$\left\langle\hat{\boldsymbol{j}}\right\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(\boldsymbol{r}')\hat{\boldsymbol{j}}\psi(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}'=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left[\psi^*(\boldsymbol{r})\nabla\psi(\boldsymbol{r})-\psi(\boldsymbol{r})\nabla\psi^*(\boldsymbol{r})\right]$$

即粒子概率流密度算符在 $\psi(\boldsymbol{r})$ 中的期望值给出相应的粒子概率流密度.

证法二　$\hat{\boldsymbol{r}}$ 是 Hermite 的，其函数 $\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ 也是 Hermite 的. $\hat{\boldsymbol{p}}$ 是 Hermite 的，从而按照 Hermite 共轭的运算法则，直接验算

$$\hat{\boldsymbol{j}}^\dagger=\frac{1}{2}\left[\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{m}\right]^\dagger+\frac{1}{2}\left[\frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{m}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\right]^\dagger$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{1}{2}\left(\frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{m}\right)^{\dagger}[\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')]^{\dagger}+\frac{1}{2}[\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')]^{\dagger}\left(\frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{m}\right)^{\dagger}\\
&= \frac{1}{2}\frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{m}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')+\frac{1}{2}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{m}\\
&= \frac{1}{2}\left[\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{m}+\frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{m}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\right]=\hat{\boldsymbol{j}}
\end{aligned}
$$

可见 $\hat{\boldsymbol{j}}$ 是 Hermite 算符.

4.11 压缩算符的转置及 Hermite 共轭算符

题 4.11 定义压缩算符 $\hat{M}_c$, $\hat{M}_c\psi(x)=\dfrac{1}{\sqrt{c}}\psi\left(\dfrac{x}{c}\right)$, $c>0$. 证明

$$\hat{M}_c^T=\hat{M}_{1/c},\quad \hat{M}_c^{\dagger}=\hat{M}_{1/c}=\hat{M}_c^{-1}$$

证明 算符 $\hat{F}$ 的转置算符的定义为，对任意的 $\psi(x)$, $\phi(x)$，有

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)\hat{F}^{\mathrm{T}}\phi(x)\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\hat{F}\psi^*(x)\right]\phi(x)\mathrm{d}x$$

故按题设

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)\hat{M}_c^T\phi(x)\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\hat{M}_c\psi^*(x)\right]\phi(x)\mathrm{d}x=\frac{1}{\sqrt{c}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\left(\frac{x}{c}\right)\phi(x)\mathrm{d}x$$

上式中令 $\dfrac{x}{c}\to x$，故上式右边又可写为

$$\sqrt{c}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)\phi(cx)\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)\hat{M}_{1/c}\phi(x)\mathrm{d}x$$

故有 $\hat{M}_c^T=\hat{M}_{1/c}$，进一步，$\hat{M}_c^{\dagger}=\left(\hat{M}_c^*\right)^T=\hat{M}_{1/c}=\hat{M}_c^{-1}$.

4.12 算符 $\mathrm{i}\dfrac{\partial}{\partial r}$ 的转置及 Hermite 共轭算符

题 4.12 求算符 $\mathrm{i}\dfrac{\partial}{\partial r}$ 的转置及 Hermite 共轭算符 $(0\leqslant r<\infty)$.

解答 对任意的 $\psi(x)$, $\phi(x)$

$$
\begin{aligned}
\int\psi^*\left(\frac{\partial}{\partial r}\phi\right)r^2\mathrm{d}r\mathrm{d}\Omega &= \int\mathrm{d}\Omega(\psi^*\phi r^2)\Big|_0^{\infty}-\int\left[\left(\frac{2}{r}+\frac{\partial}{\partial r}\right)\psi^*\right]\phi r^2\mathrm{d}r\mathrm{d}\Omega\\
&= -\int\left[\left(\frac{2}{r}+\frac{\partial}{\partial r}\right)\psi^*\right]\phi\mathrm{d}V=\int\left[\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^{\mathrm{T}}\psi^*\right]\phi\mathrm{d}V
\end{aligned}
$$

其中，$\mathrm{d}V=r^2\mathrm{d}r\mathrm{d}\Omega$. 所以

$$\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)^{\mathrm{T}}=-\left(\frac{2}{r}+\frac{\partial}{\partial r}\right),\qquad \left(\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial r}\right)^{\dagger}=\mathrm{i}\left(\frac{2}{r}+\frac{\partial}{\partial r}\right)$$

以上推导过程中要求 $\psi^* r^2\big|_0^\infty = 0$，$\psi$、$\varphi$ 满足平方可积，并且在 $r=0$ 处满足自然边界条件.

4.13　对 Hermite 算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$，算符 $(\hat{A}+\mathrm{i}\hat{B})^2$ Hermite 性的条件

题 4.13　已知 $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$，$\hat{B}^\dagger = \hat{B}, \hat{F} \equiv \hat{A}+\mathrm{i}\hat{B}$，在什么条件下 $\hat{F}^2$ 为 Hermite 算符?

解答　按题设

$$\hat{F}^2 = \hat{A}^2 - \hat{B}^2 + \mathrm{i}(\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A})$$

$\hat{A}$, $\hat{B}$ 为 Hermite 算符，$\hat{F}^2$ 的 Hermite 共轭为

$$\hat{F}^{2\dagger} = \hat{A}^2 - \hat{B}^2 - \mathrm{i}(\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A})$$

若 $\hat{F}^2$ 为 Hermite 算符，要求 $\hat{F}^2 = \hat{F}^{2\dagger}$，则有 $[\hat{A},\hat{B}]_+ = \hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A} = 0$，即 $\hat{A}$, $\hat{B}$ 反对易.

4.14　压缩算符在 x 表象中的表示

题 4.14　定义压缩算符 $\hat{M}_c$(其中 $c = \mathrm{e}^\lambda$)

$$\hat{M}_c = \exp\left[-\frac{\mathrm{i}\lambda}{2\hbar}(\hat{p}\hat{x}+\hat{x}\hat{p})\right] = \exp\left[-\frac{\lambda}{2}\left(1+2x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\right]$$

证明：

(1) $\hat{M}_c\hat{x}\hat{M}_c^{-1} = \dfrac{\hat{x}}{c}$，$\hat{M}_c\hat{p}\hat{M}_c^{-1} = c\hat{p}$;

(2) $\hat{M}_c\psi(x) = \dfrac{1}{\sqrt{c}}\psi\left(\dfrac{x}{c}\right)$.

证明　(1) 利用 Baker-Hausdorff 公式 (4.54)

$$\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}} = \hat{B} + \lambda\left[\hat{A},\hat{B}\right] + \frac{\lambda^2}{2!}\left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right] + \cdots$$

以及 $[\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x},\hat{x}] = -2\mathrm{i}\hbar x$，有

$$\begin{aligned}\hat{M}_c\hat{x}\hat{M}_c^{-1} &= \left(1+\frac{\lambda^2}{2!}+\frac{\lambda^4}{4!}+\cdots\right)\hat{x} - \left(\lambda+\frac{\lambda^3}{3!}+\cdots\right)\hat{x} \\ &= \mathrm{e}^{-\lambda}\hat{x} = \frac{\hat{x}}{c}\end{aligned}$$

同理利用 Baker-Hausdorff 公式 (4.54)以及 $[\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x},\hat{p}] = 2\mathrm{i}\hbar p$ 可得

$$\hat{M}_c\hat{p}\hat{M}_c^{-1} = c\hat{p}$$

(2) 将 ψ 按幂级数展开

$$\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n x^n$$

由题设

$$\hat{M}_c = \exp\left[-\frac{\mathrm{i}\lambda}{2\hbar}(\hat{p}\hat{x}+\hat{x}\hat{p})\right] = \exp\left[-\frac{\lambda}{2}\left(1+2x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\right]$$

可得

$$\begin{aligned}\hat{M}_c\psi(x) &= \sum_{m,n} C_n \frac{(-\lambda/2)^m}{m!}\left(1+2x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^m x^n \\ &= \sum_n C_n \sum_m \frac{1}{m!}\left(-\frac{\lambda}{2}\right)^m (1+2n)^m x^n \\ &= \sum_n C_n x^n \exp\left[-\lambda\left(n+\frac{1}{2}\right)\right] = \mathrm{e}^{-\frac{\lambda}{2}}\sum_n C_n(\mathrm{e}^{-\lambda}x)^n \\ &= \frac{1}{\sqrt{c}}\psi\left(\frac{x}{c}\right)\end{aligned}$$

4.15　压缩相干态在 x 表象中的表示

题 4.15　位移谐振子的基态也是一个相干态，

$$\psi_0(x-x_0) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}x_0\hat{p}}\psi_0(x) = \left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{1/4}\mathrm{e}^{-\frac{\alpha^2}{2}(x-x_0)^2}$$

其中，$\alpha = \left(\dfrac{\mu\omega}{\hbar}\right)^{1/2}$. 定义压缩相干态 $\psi_c(x) \equiv \hat{M}_c\psi_0(x-x_0)$.

(1) 求 ψ_c 在 x 表象中的形式；

(2) 在该态下求 Δx，Δp 及 $\Delta x\cdot\Delta p$，并与相干态情况比较.

解答　(1) 按题设

$$\begin{aligned}\psi_c(x) &\equiv \hat{M}_c\psi_0(x-x_0) = \frac{1}{\sqrt{c}}\psi_0\left(\frac{x}{c}-x_0\right) \\ &= \left(\frac{\alpha^2}{\pi c^2}\right)^{1/4}\exp\left[-\frac{\alpha^2(x-cx_0)^2}{2c^2}\right]\end{aligned}$$

(2) 在该态下谐振子的概率密度为

$$|\psi_c(x)|^2 = \left(\frac{\alpha^2}{\pi c^2}\right)^{1/2}\exp\left[-\frac{\alpha^2(x-cx_0)^2}{c^2}\right]$$

可见为 Gauss 分布，由此得 $\Delta x = \dfrac{c}{\sqrt{2}\alpha}$, $\bar{x} = cx_0$, $\overline{x^2} = \dfrac{c^2}{2\alpha^2} + c_0^2x_0^2$.

或者由

$$\begin{aligned}\langle x\rangle_c &= \int\left[\hat{M}_c\psi_0(x-x_0)\right]^* x\left[\hat{M}_c\psi_0(x-x_0)\right]\mathrm{d}x \\ &= \int\psi_0^*(x-x_0)(\hat{M}_c^\dagger x\hat{M}_c)\psi_0(x-x_0)\mathrm{d}x\end{aligned}$$

$$= \int \psi_0^*(x-x_0)(cx)\psi_0(x-x_0)\mathrm{d}x = cx_0$$

$$\langle x^2\rangle_c = c^2\int \psi_0^*(x-x_0)x^2\psi_0(x-x_0)\mathrm{d}x = c^2\langle x^2\rangle_{\psi_0}$$

故得

$$(\Delta x)_c = \frac{c}{\sqrt{2}\alpha} = c(\Delta x)_{\psi_0}$$

同样由

$$\langle p\rangle_c = \int \psi_0^*(x-x_0)\frac{\hat{p}}{c}\psi_0(x-x_0)\mathrm{d}x = \frac{1}{c}\langle p\rangle_{\psi_0}$$

$$\langle p^2\rangle_c = c^2\int \psi_0^*(x-x_0)p^2\psi_0(x-x_0)\mathrm{d}x = \frac{1}{c^2}\langle p^2\rangle_{\psi_0}$$

可得

$$(\Delta p)_c = \frac{1}{c}(\Delta p)_{\psi_0} = \frac{\alpha\hbar}{\sqrt{2}c}$$

因而

$$(\Delta x)_c\cdot(\Delta p)_c = (\Delta x)_{\psi_0}(\Delta p)_{\psi_0} = \frac{\hbar}{2}$$

与相干态一样，为最小不确定态，但可调节 c 使 Δx 和 Δp 中一个量增大 (减小) 而另一个量减小 (增大)，故称为压缩相干态.

4.16　压缩态的另一种形式

题 4.16　压缩态的另外一种形式 $\varphi_c(x)$ 为

$$\varphi_c(x) = \hat{D}_{x_0}\hat{M}_c\psi_0(x)$$

其中，$\psi_0(x) = \left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\mathrm{e}^{-\frac{\alpha^2x^2}{2}}$ 为谐振子基态，$\hat{D}_{x_0} = \mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}x_0\hat{p}}$ 为坐标平移算符.

(1) 求 $\varphi_c(x)$ 在 x 表象中的形式；

(2) 证明 $\varphi_c(x)$ 也是压缩态；

(3) 证明 $\hat{M}_c\hat{D}_{x_0} = \hat{D}_{cx_0}\hat{M}_c$.

解答　(1) 按题设

$$\varphi_c(x) = \hat{D}_{x_0}\left(\frac{\alpha^2}{\pi c^2}\right)^{1/4}\mathrm{e}^{-\frac{\alpha^2x^2}{2c^2}} = \left(\frac{\alpha^2}{\pi c^2}\right)^{1/4}\mathrm{e}^{-\frac{\alpha^2(x-x_0)^2}{2c^2}}$$

(2) 同上面题 4.15，$(\Delta x)_c = \frac{c}{\sqrt{2}\alpha}$，$(\Delta p)_c = \frac{\alpha\hbar}{\sqrt{2}c}$，满足 $(\Delta x)_c(\Delta p)_c = \frac{\hbar}{2}$，也为最小不确定态，与 ψ_0 相应量相比，Δx 和 Δp 中一个量增大 (减小) 而另一个量减小 (增大)，故为压缩相干态.

(3) **证明** 由 $\hat{M}_c\hat{p}\hat{M}_c^\dagger = c\hat{p}$，

$$\hat{M}_c\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}x_0\hat{p}}\hat{M}_c^\dagger = \mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}cx_0\hat{p}}$$

因而

$$\hat{M}_c\hat{D}_{x_0}=\hat{D}_{cx_0}\hat{M}_c$$

4.17 Fourier(积分) 变换的性质

题 4.17 证明 Fourier 变换性质，若

$$F[\psi(x)]=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{d}x=\phi(p)$$

则：(1) $F[x^n\psi(x)]=\left(\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial p}\right)^n\phi(p)$；

(2) $F\left[\left(-\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}\right)^n\psi(x)\right]=p^n\phi(p)$；

(3) $F[\psi(x+x_0)]=\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px_0}\phi(p)$；

(4) $F[\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}xp_0}\psi(x)]=\phi(p-p_0)$.

解答 (1) 直接演算

$$\begin{aligned}\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)^n\phi(p) &= \left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)^n\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{d}x\\ &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)^n\psi(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{d}x\\ &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{+\infty}x^n\psi(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{d}x\end{aligned}$$

可见

$$F[x^n\psi(x)]=\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)^n\phi(p)\tag{4.25}$$

(2) 由 Fourier 变换的定义直接演算

$$\begin{aligned}p^n\phi(p) &= p^n\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{d}x\\ &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)p^n\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{d}x\\ &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^n\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{d}x\\ &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^n\psi(x)\mathrm{d}x\end{aligned}$$

最后一步经过 n 次分部积分. 可见

$$F\left[\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^n\psi(x)\right]=p^n\phi(p)\tag{4.26}$$

(3) 利用平移算符

$$\begin{aligned}\psi(x+x_0) &= \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{p}x_0}\psi(x)\\ &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{\mathrm{i}x_0}{\hbar}\right)^n\hat{p}^n\psi(x)\end{aligned}$$

再由式 (4.26)

$$\begin{aligned}F[\psi(x+x_0)] &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{\mathrm{i}x_0}{\hbar}\right)^n p^n\phi(p)\\ &= \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px_0}\phi(p)\end{aligned}$$

可见

$$F[\psi(x+x_0)] = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px_0}\phi(p) \tag{4.27}$$

(4) 由 Fourier 变换的定义直接演算

$$\begin{aligned}F[\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}xp_0}\psi(x)] &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}xp_0}\psi(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{d}x\\ &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p-p_0)x}\mathrm{d}x = \phi(p-p_0)\end{aligned}$$

可见

$$F[\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}xp_0}\psi(x)] = \phi(p-p_0) \tag{4.28}$$

说明　上面式 (4.25)～ 式 (4.28)也都可以利用 Fourier 反变换来证明.

4.18　动量空间的 Schrödinger 方程

题 4.18　一个质量为 m 的粒子受力 $F(\boldsymbol{r}) = -\nabla V(\boldsymbol{r})$ 作用，使其波函数满足动量空间的 Schrödinger 方程：

$$\left[\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu} - a\nabla_p^2\right]\varphi(\boldsymbol{p},t) = \mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\varphi(\boldsymbol{p},t)$$

上面已令 $\hbar = 1$，a 是某一实常数，且

$$\nabla_p^2 = \frac{\partial^2}{\partial p_x^2} + \frac{\partial^2}{\partial p_y^2} + \frac{\partial^2}{\partial p_z^2}$$

求力 $F(\boldsymbol{r})$.

解答　将动量空间的 Schrödinger 方程进行逆 Fourier 变换到坐标空间

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}\left\{\left[\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} - a\nabla_p^2\right]\varphi(\boldsymbol{p},t) = \mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\varphi(\boldsymbol{p},t)\right\}\mathrm{d}\boldsymbol{p}$$

由逆 Fourier 变换性质，即有

$$F^{-1}[\varphi(\boldsymbol{p},t)]=\psi(\boldsymbol{r},t);\quad F^{-1}\left[-\nabla_p^2\varphi(\boldsymbol{p},t)\right]=\boldsymbol{r}^2\psi(\boldsymbol{r},t)$$

以及

$$F^{-1}\left[\boldsymbol{p}^2\varphi(\boldsymbol{p},t)\right]=-\nabla_r^2\psi(\boldsymbol{r},t)$$

因而

$$-\frac{1}{2m}\nabla_r^2\psi(\boldsymbol{r},t)+a\boldsymbol{r}^2\psi(\boldsymbol{r},t)=\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t)$$

所以 $V(\boldsymbol{r})=ar^2$，$F(\boldsymbol{r})=-\nabla_r V(\boldsymbol{r})=-2a\boldsymbol{r}$.

4.19 $F=\alpha p+\beta x$ 的本征态

题 4.19 求 Hermite 算符 $F=\alpha p+\beta x$ 的本征值为 f 的本征态.

解答 F 的本征方程为

$$-\mathrm{i}\hbar\alpha\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_f(x)+\beta x\psi_f(x)=f\psi_f(x)$$

其解为

$$\psi_f(x)=C\ \exp\left(-\frac{\mathrm{i}(\beta x-f)^2}{2\hbar\alpha\beta}\right)$$

归一化常数为 C，由归一化条件

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_{f'}^*(x)\psi_f(x)\mathrm{d}x=\delta(f-f')$$

确定 $C=(2\pi\hbar\alpha)^{-\frac{1}{2}}$.

4.20 算符 $x+\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ 的本征态

题 4.20 求算符 $x+\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ 的本征值为 f 的本征态.

解答 本征方程为

$$\left(x+\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\psi_f(x)=f\psi_f(x)$$

解为

$$\psi_f(x)=C\exp\left[-\frac{(x-f)^2}{2}\right]$$

由于算符 $x+\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ 非 Hermite，故其本征值一般为复数，设 $f=f_1+\mathrm{i}f_2$，归一化的本征函数为

$$\overline{\psi}_f(x)=\frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}}\exp\left[-\frac{(x-f_1)^2}{2}+\mathrm{i}f_2x\right]$$

4.21　两反对易算符存在共同本征态的条件

题 4.21　算符 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 反对易，$\left[\hat{A},\ \hat{B}\right]_+=0$，若 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 存在共同的本征态 ψ_{ab}，

$$\hat{A}\psi_{ab}=a\psi_{ab},\ \hat{B}\psi_{ab}=b\psi_{ab}$$

则必有 $ab=0$.

证明　由 $\left[\hat{A},\ \hat{B}\right]_+\psi_{ab}=2ab\psi_{ab}=0$，有 $ab=0$.

例如宇称算符 $\hat{\pi}$ 和坐标算符 $\hat{x}$，$\left[\hat{\pi},\ \hat{x}\right]_+=0$，它们存在共同的本征态 $\delta(x)$，且 $\pi=1,\ x=0$.

4.22　线性算符在连续谱表象中的矩阵元——积分核

题 4.22　线性算符 $\hat{A}$ 在 $\hat{Q}$ 表象 (本征值 Q 为连续谱) 对 ψ 态的作用如下给出：

$$\psi'(Q)=\hat{A}\psi(Q)=\int A(Q,Q')\psi(Q')\mathrm{d}Q'$$

其中，$A(Q,Q')$ 为算符 $\hat{A}$ 的积分核，是一个普通的二元函数 (实际上是 $\hat{A}$ 在 $\hat{Q}$ 表象中的矩阵元)，求线性算符 $\hat{A}$ 在 x 表象中的积分核 $A(x,x')$ 与在 p 表象中的积分核 $A(p,p')$ 之间的关系.

解答　对任一态矢 $|\psi\rangle$，在 x 表象中

$$\psi'(x)=\hat{A}\psi(x)=\int A(x,x')\psi(x')\mathrm{d}x' \tag{4.29}$$

在 p 表象中

$$\phi'(p)=\hat{A}\phi(p)=\int A(p,p')\phi(p')\mathrm{d}p' \tag{4.30}$$

注意到

$$\psi(x)=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{1/2}\int\phi(p)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{d}p \tag{4.31}$$

把式 (4.31)代入式 (4.29)，两边左乘以 $\left(\dfrac{1}{2\pi\hbar}\right)^{1/2}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}$，对 x 积分

$$\begin{aligned}\phi'(p)&=\frac{1}{2\pi\hbar}\int\psi'(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{d}x\\&=\int\mathrm{d}x\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\int\mathrm{d}x'A(x,x')\int\mathrm{d}p'\phi(p')\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p'x'}\end{aligned}$$

对照式 (4.30)，可知

$$A(p,p')=\frac{1}{2\pi\hbar}\iint A(x,x')\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p'x'-px)}\mathrm{d}x\mathrm{d}x' \tag{4.32}$$

同理

$$A(x,x')=\frac{1}{2\pi\hbar}\iint A(p,p')\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p'x'-px)}\mathrm{d}p\mathrm{d}p' \tag{4.33}$$

对三维的情况有

$$A(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3\iint A(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})}\mathrm{d}\boldsymbol{r}\mathrm{d}\boldsymbol{r}' \tag{4.34}$$

$$A(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3\iint A(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})}\mathrm{d}\boldsymbol{p}\mathrm{d}\boldsymbol{p}' \tag{4.35}$$

4.23 算符 $\frac{1}{r}$ 和 $\frac{1}{r^2}$ 的积分核

题 4.23 算符 $\frac{1}{r}$ 和 $\frac{1}{r^2}$ 在坐标与动量表象中的表示.

解答 在坐标表象中，显然有，算符 $\frac{1}{r}$ 的积分核

$$A_1(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')=\frac{1}{r}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$$

算符 $\frac{1}{r^2}$ 的积分核

$$A_2(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')=\frac{1}{r^2}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$$

按式 (4.34)在动量表象中

$$\begin{aligned}A_1(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}') &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3\iint\frac{1}{r}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})}\mathrm{d}\boldsymbol{r}\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\\ &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3\int\frac{1}{r}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}\boldsymbol{r}\\ &= \frac{1}{2\pi^2\hbar\left|\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}\right|^2}\end{aligned}$$

上面最后一步利用积分公式 $\int\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}}{r}\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\frac{4\pi}{k^2}$. 按式 (4.34)得

$$\begin{aligned}A_2(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}') &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3\iint\frac{1}{r^2}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})}\mathrm{d}\boldsymbol{r}\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\\ &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3\int\frac{1}{r^2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}\boldsymbol{r}\\ &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3\int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi}\frac{1}{r^2}\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left|\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}\right|r\cos\theta\right]r^2\sin\theta\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi\\ &= \frac{1}{4\pi\hbar^2\left|\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}\right|}\end{aligned}$$

积分中利用公式

$$\int_0^\infty\frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x=\frac{\pi}{2}$$

注意到 $\hat{A}_2=\hat{A}_1^2$，可以验证有 $A_2(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')=\int A_1(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}'')\cdot A_1(\boldsymbol{p}'',\boldsymbol{p}')d\boldsymbol{p}''$，一般地，设 $\hat{A}$ 的核为 $A(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')$，则 $\hat{A}^2$ 的核为

$$A^2(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')=\int A(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}'')\cdot A(\boldsymbol{p}'',\boldsymbol{p}')\mathrm{d}\boldsymbol{p}''$$

4.24　算符 $\hat{L}$ 的 $\hat{L}^*,\hat{L}^{\mathrm{T}},\hat{L}^{\dagger}$ 的积分核

题 4.24　线性算符 $\hat{L}$ 的积分核为 $L(\xi,\xi')$，求 $\hat{L}^*,\hat{L}^{\mathrm{T}},\hat{L}^{\dagger}$ 的积分核，分别讨论下列算符：宇称算符 $\hat{\pi}$，压缩算符 $\hat{M}_c$，坐标平移算符 $\hat{T}_a$，$\hat{x}=x,\hat{p}=-\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$.

解答　$\hat{L}^*,\hat{L}^{\mathrm{T}},\hat{L}^{\dagger}$ 的积分核分别如下表示：

$$L^*(\xi,\xi')=[L(\xi,\xi')]^* \tag{4.36}$$

$$L^{\mathrm{T}}(\xi,\xi')=L(\xi',\xi) \tag{4.37}$$

$$L^{\dagger}(\xi,\xi')=L^*(\xi',\xi) \tag{4.38}$$

其中，式 (4.37)的证明如下：由 $\hat{L}^{\mathrm{T}}$ 的定义

$$\int\varphi^*(\xi)\hat{L}^{\mathrm{T}}\psi(\xi)\mathrm{d}\xi=\int[\hat{L}\varphi^*(\xi)]\psi(\xi)\mathrm{d}\xi \tag{4.39}$$

$$\int\varphi^*(\xi)\hat{L}^{\mathrm{T}}\psi(\xi)\mathrm{d}\xi=\iint\varphi^*(\xi)L^{\mathrm{T}}(\xi,\xi')\psi(\xi')\mathrm{d}\xi'\mathrm{d}\xi \tag{4.40}$$

$$\int[\hat{L}\varphi^*(\xi)]\psi(\xi)\mathrm{d}\xi=\iint L(\xi,\xi')\varphi^*(\xi')\psi(\xi)\mathrm{d}\xi'\mathrm{d}\xi \tag{4.41}$$

在式 (4.41)右边，令 ξ 和 ξ' 互换

$$\int[\hat{L}\varphi^*(\xi)]\psi(\xi)d\xi=\iint\varphi^*(\xi)L(\xi',\xi)\psi(\xi')\mathrm{d}\xi'\mathrm{d}\xi \tag{4.42}$$

由式 (4.39)、式 (4.40)、式 (4.42)，且 ψ,φ 是任意的，有

$$L^{\mathrm{T}}(\xi,\xi')=L(\xi',\xi)$$

对于宇称算符，$\hat{\pi}\psi(x)=\psi(-x)$，即

$$\int\pi(x,x')\psi(x')\mathrm{d}x'=\psi(-x)=\int\delta(x+x')\,\psi(x')\mathrm{d}x'$$

所以

$$\pi(x,x')=\delta(x+x')$$

对于压缩算符 $\hat{M}_c\psi(x)=\dfrac{1}{\sqrt{c}}\psi\left(\dfrac{x}{c}\right)$，

$$\int M_c(x,x')\psi(x')\mathrm{d}x'=\frac{1}{\sqrt{c}}\int\delta\left(\frac{x}{c}-x'\right)\psi(x')\mathrm{d}x'$$

所以

$$M_c(x,x')=\frac{1}{\sqrt{c}}\delta\left(\frac{x}{c}-x'\right)$$

同理

$$\hat{T}_a\psi(x)=\psi(x-a),\quad T_a(x,x')=\delta(x-a-x')$$
$$X(x,x')=x\delta(x-x'),\quad P(x,x')=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x')$$

4.25　已知算符 $\hat{L}$ 积分核的形式，讨论 $\hat{L}$ 的 Hermite 条件

题 4.25　$L(x,x')$ 为 $\hat{L}$ 的积分核，若：

(1) $L=f(x+x')$；

(2) $L=f(x-x')$；

(3) $L=f(x)g(x')$.

当 f、g 满足什么条件时，$\hat{L}$ 为 Hermite 算符.

解答　当 $\hat{L}=\hat{L}^\dagger$ 时，有 $L^\dagger(x,x')=L^*(x',x)=L(x,x')$，$\hat{L}$ 为 Hermite 算符的条件是：

(1) $f(x)$ 为实函数；

(2) $f(x)$ 是偶宇称的实函数；

(3) $f(x)=cg^*(x)$，其中 c 为实常数.

4.26　两对易算符的积分核之间的关系

题 4.26　$\hat{L}$ 的积分核为 $L(x,x')$，$\left[\hat{G},\hat{L}\right]=0$. 若 $\hat{L}$ 为：

(1) $\hat{x}=x$；

(2) $\hat{p}=-\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$

求 $\hat{G}$ 的积分核.

解答　若 $\hat{C}=\hat{A}\hat{B}$，则

$$C(x,x')=\int A(x,x'')B(x'',x')\mathrm{d}x'' \tag{4.43}$$

(1) 算符 $\hat{x}=x$ 的积分核 $X(x,x')=x\delta(x-x')$，若 $\hat{G}\hat{x}=\hat{x}\hat{G}$，由式 (4.43)

$$\int[G(x,x'')x''\delta(x''-x')-x\delta(x-x'')G(x'',x')]\mathrm{d}x''=(x-x')G(x,x')=0$$

有 $G(x,x')=g(x)\delta(x-x')$，这里 $g(x)$ 是任意函数.

(2) 由 $\hat{G}\hat{P}=\hat{P}\hat{G}$，且 $P(x,x')=-\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\delta(x-x')$，有

$$\left(\frac{\partial}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial x'}\right)G(x,x')=0$$

因而

$$G(x,x')=g(x-x')$$

4.27　与 $\hat{x}$、$\hat{p}$ 都对易的算符为常数算符

题 4.27　证明：若 $\hat{F}$ 与 $\hat{x}$、$\hat{p}$ 都对易，则 $\hat{F}$ 为常数算符，即 $\hat{F}=F_0$.

证明　由 $\left[\hat{F},\hat{x}\right]=0$ 以及 $\left[\hat{F},\hat{p}\right]=0$，有

$$F(x,x')=f(x)\delta(x-x') \tag{4.44}$$

$$F(p,p')=g(p)\delta(p-p') \tag{4.45}$$

从而由题 4.22 中的式 (4.33)可得

$$\begin{aligned} F(x,x') &= \frac{1}{2\pi\hbar}\iint g(p)\delta(p-p')\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p'x'-px)}\mathrm{d}p\mathrm{d}p' \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar}\iint g(p)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p(x'-x)}\mathrm{d}p \\ &= g(x-x') \end{aligned} \tag{4.46}$$

由式 (4.44)、式 (4.46)得 $f(x)=F_0=\text{const}$，故

$$F(x,x')=F_0\delta(x-x')$$

所以 $\hat{F}=F_0$.

另证　由 $\left[\hat{F},\hat{x}\right]=0$ 以及 $\left[\hat{F},\hat{p}\right]=0$，

$$\left[\hat{x},\hat{F}(x,p)\right]=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\hat{F}}{\partial p}=0$$

$$\left[\hat{p},\hat{F}(x,p)\right]=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\hat{F}}{\partial x}=0$$

故 $\hat{F}=F_0$.

4.28　积分核形如 $F(x,x')=f(x)f^*(x')$ 算符的本征值、本征态

题 4.28　算符积分核形如 $F(x,x')=f(x)f^*(x')$，求其本征值、本征态.

解答　由本征方程 $\hat{F}\psi(x)=f\psi(x)$，有

$$f(x)\int_{-\infty}^{+\infty}f^*(x')\psi(x')\mathrm{d}x'=f\psi(x) \tag{4.47}$$

方程 (4.47)的一个解为 $\psi_0(x)=cf(x)$，相应的本征值为

$$f_0=\int|f(x)|^2\mathrm{d}x>0$$

方程 (4.47)的另一个可能解 $\psi_1(x)$ 满足

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

相应的本征值 $f_1=0$，即 $\psi_0(x)$ 与 $\psi_1(x)$ 正交.

4.29　若 $\hat{\pi}\psi(x)=\psi(-x)$ 则 $\hat{\pi}\varphi(p)=\varphi(-p)$

题 4.29　$\hat{\pi}$ 为宇称算符 $\hat{\pi}\psi(x)=\psi(-x)$，若 $\varphi(p)=F[\psi(x)]$ 为 $\psi(x)$ 在 p 表象中的表示，证明 $\hat{\pi}\varphi(p)=\varphi(-p)$.

证明　在 x 表象中 $\hat{\pi}$ 的积分核 $\delta(x+x')$，则在 p 表象中 $\hat{\pi}$ 的积分核为

$$\begin{aligned}\pi(p,p') &= \frac{1}{2\pi\hbar}\iint\delta(x+x')\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p'x'-px)\right]\mathrm{d}x\mathrm{d}x' \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar}\int\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p'+p)x\right]\mathrm{d}x=\delta(p+p')\end{aligned}$$

因此

$$\hat{\pi}\varphi(p)=\int\delta(p+p')\,\varphi(p')\mathrm{d}p'=\varphi(-p)$$

4.30　算符函数在连续谱表象中的矩阵元——积分核

题 4.30　$\hat{A}^{\dagger}=\hat{A}$ 且 $\hat{A}\varphi_n(q)=A_n\varphi_n(q)$，$F\left(\hat{A}\right)$ 为 $\hat{A}$ 的整函数，求 $F(q,q')$.

解答　任意函数 $\psi(q)=\sum\limits_n a_n\varphi_n(q)$，$\hat{F}\left(\hat{A}\right)=\sum\limits_m C_m\hat{A}^m$

$$\psi'=\hat{F}\psi=\sum_{mn}C_m a_n A_n^m\varphi_n(q)=\sum_n a_n\varphi_n(q)\sum_m C_m A_n^m=\sum_n C_n F(A_n)\varphi_n(q)\tag{4.48}$$

$$\hat{F}\psi(q)=\sum_n C_n\int F(q,q')\varphi_n(q')\mathrm{d}q'\tag{4.49}$$

由式 (4.48)，式 (4.49)有

$$F(q,q')=\sum_m F(A_m)\varphi_m^*(q')\varphi_m(q)\tag{4.50}$$

4.31　投影定理

题 4.31　算符 $\hat{F}$ 的本征值为 f_i，相应的本征态为 $\psi_i(i=1,2,3,\cdots)$，如下定义投影算符 $\hat{p}_i$:

$$\hat{p}_i\psi_k=\delta_{ik}\psi_i=\begin{cases}\psi_i, & f_i=f_k\\ 0, & f_i\neq f_k\end{cases}\tag{4.51}$$

证明 $\hat{p}_i^{\dagger}=\hat{p}_i$，$\hat{p}_i^2=\hat{p}_i$.

证明　对任意的 ψ,φ，$\psi=\sum\limits_k a_k\psi_k$，$\varphi=\sum\limits_k b_k\psi_k$.

$$\int\varphi^*\hat{p}_i\psi\mathrm{d}\tau=\int\varphi^*\hat{p}_i\sum_k a_k\psi_k\mathrm{d}\tau=a_i\int\varphi^*\psi_i\mathrm{d}\tau=a_i b_i^*=\int[\hat{p}_i\varphi]^*\psi\mathrm{d}\tau$$

故 $\hat{p}_i^{\dagger}=\hat{p}_i$.

因为 $\hat{p}_i\psi=a_i\psi_i$, $\hat{p}_i^2\psi=a_i\psi_i$, 故 $\hat{p}_i^2=\hat{p}_i$.

4.32　投影算子

题 4.32　构造投影算子 $\hat{p}(x\geqslant 0)$, 要求满足

$$\hat{p}\psi(x)=\begin{cases}\psi(x), & x\geqslant 0\\ 0, & x<0\end{cases}$$

证明

$$\hat{p}=\theta(x)=\begin{cases}1, & x\geqslant 0\\ 0, & x<0\end{cases}$$

显然 $\hat{p}^{\dagger}=\hat{p}$, $\hat{p}^2=\hat{p}$, 且

$$\hat{p}\psi(x)=\begin{cases}\psi(x), & x\geqslant 0\\ 0, & x<0\end{cases}$$

4.33　投影算子的积分核

题 4.33　投影算子 $\hat{p}^{\dagger}=\hat{p}$, $\hat{p}^2=\hat{p}$, 求其积分核.

解答　投影算子 $|f\rangle\langle f|$ 在坐标表象中的矩阵元 (积分核) 为

$$p(x,\ x')=cf(x)f^*(x')$$

其中, $f(x)=\langle x|f\rangle$, 而 $c^{-1}=\int|f(x)|^2\mathrm{d}x$, 显然有 $\hat{p}^{\dagger}=\hat{p}$. 这是因为

$$[p(x,x')]^{\dagger}=p^*(x',x)=p(x,x')$$

以及 $\hat{p}^2=\hat{p}$, 因为

$$p^2(x,x')=\int p(x,x'')p(x'',x')\mathrm{d}x''=p(x,x')$$

且 $\hat{p}f(x)=c\int f(x)f^*(x')f(x')\mathrm{d}x'=f(x)$, 即 $f(x)$ 为 $\hat{p}$ 的本征值为 1 的本征态. 所有满足 $\int f^*(x)\psi(x)\mathrm{d}x=0$ 的 $\psi(x)$ 态 (与 $f(x)$ 正交) 为 $\hat{p}$ 的零本征值的本征态.

4.34　投影算子的形式

题 4.34　Hermite 算符 $\hat{F}$ 有 n 个不同的本征值, $f_i(i=1,2,3,\cdots,n)$, 算子 $\hat{p}_i$ 是向 $\hat{F}$ 的本征值为 f_i 的本征态 φ_i 上投影的投影算子, 求 $\hat{p}_i$ 的形式.

解答　如下写出：

$$\hat{p}_i = \prod_{k=1}^{n}{}' \frac{(\hat{F}-f_k)}{(f_i-f_k)}$$

式中，连积号 $\prod_{k=1}^{n}{}'$ 中不含有 $k=i$ 的因子.

设任意函数 $\psi = \sum_j C_j\varphi_j$，只需证明 $\hat{p}_i\psi = C_i\varphi_i$，事实上

$$\hat{p}_i\psi = \prod_{k=1}^{n}{}' \frac{(\hat{F}-f_k)}{(f_i-f_k)} \cdot \sum_j C_j\varphi_j = \sum_j C_j \left[\prod_{k=1}^{n}{}' \frac{(\hat{F}-f_k)}{(f_i-f_k)}\varphi_j\right]$$

上式右边方括号内，若 $j=i$，则分子、分母相同其值为 1，若 $j\neq i$，则分子中 $n-1$ 个因子中必有一个为零，即

$$\prod_{k=1}^{n}{}' \frac{(\hat{F}-f_k)}{(f_i-f_k)}\varphi_j = \delta_{ij}$$

从而

$$\hat{p}_i\psi = C_i\varphi_i$$

4.35　力学量期望值对时间的二次微商

题 4.35　设力学量 A 不显含 t，试证明关于 A 在态下期望值 $\bar{A}$ 满足的关系式为

$$-\hbar^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\bar{A} = \overline{[[A,H],H]} \tag{4.52}$$

H 为不含时体系的 Hamilton 量.

证法一　在 Schrödinger 图像中，态随时间演化满足 Schrödinger 方程，而力学量不随时间变化. 力学量 A 在任意 $|\psi\rangle$ 态的期望值 $\overline{A} = \langle\psi|A|\psi\rangle$ 随时间变化的方程为

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{A} &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int\psi^*(x)A\psi(x)\mathrm{d}x = \int\frac{\partial}{\partial t}[\psi^*(x)A\psi(x)]\,\mathrm{d}x \\
&= \int\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}A\psi + \psi^*A\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)\mathrm{d}x \\
&= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int[\psi^*AH\psi - (H\psi^*)A\psi]\,\mathrm{d}x = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int[\psi^*AH\psi - \psi^*HA\psi]\,\mathrm{d}x \\
&= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[A,H]}
\end{aligned}$$

可见不显含 t 的算符 A 的期望值的时间导数由其时间导数算符[①]

$$\widehat{\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}} = \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(AH-HA) \tag{4.53}$$

① 导数算符定义见张永德, 量子力学 (第四版)[M], 北京: 科学出版社, 2017, P.70. 注意与题 4.50 的式 (4.119)不同.

在同一态下的期望值给出.

题给 A、H 不显含 t，则 $\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[A,H]$ 也不含时. 同理可知，A 期望值的二次时间微商为

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\overline{A}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[A,H]}\right)=-\frac{1}{\hbar^2}\overline{[[A,H],H]}$$

即得所证的式 (4.52).

证法二　在 Heisenberg 图像中，力学量 A 随时间的变化满足 Heisenberg 方程，而态不随时间变化，

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}A=[A,H]$$

由此

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\cdot\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}A=\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}[A,H]=[[A,H],H]$$

或者

$$-\hbar^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}A=[[A,H],H]$$

上式对给定态取平均，即得所证的式 (4.52)，该式对任意态都成立.

4.36　坐标算符平方期望值对时间的二次微商

题 4.36　证明：对于一组波包，有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{\hat{x}^2}=\frac{1}{m}\overline{[\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x}]}$$

证明　由题 4.35，设 $A=\hat{x}^2$，考虑到 $H=\dfrac{p^2}{2m}+V(x)$，算符 A 的期望值的时间导数由其导数算符的期望值给出，有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{\hat{x}^2}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[\hat{x}^2,H]}=\frac{1}{2m\mathrm{i}\hbar}\overline{[\hat{x}^2,\hat{p}^2]}=\frac{1}{m}\overline{[\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x}]}$$

4.37　算符整函数与 x、p 的对易关系

题 4.37　设 $F(x,p)$ 是 x_k,p_k 的正规函数，证明：

$$[p_k,F]=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial F}{\partial x_k},\quad [x_k,F]=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial F}{\partial p_k}$$

$F(x,p)$ 是正规函数指 $F(x,p)$ 可以展开成正幂级数的形式

$$F(x,p)=\sum_{m,n=0}^{\infty}\sum_{k,l=1}^{3}C_{kl}^{mn}x_k^m p_l^n$$

而 C_{kl}^{mn} 是数值系数.

证明　利用量子力学基本对易关系式 $[x_k,p_l]=\mathrm{i}\hbar\delta_{kl}$，用数学归纳法易证

$$[x_k,p_l^n]=n\mathrm{i}\hbar p_l^{n-1}\delta_{k,l},\quad [p_k,x_l^m]=-m\mathrm{i}\hbar x_l^{m-1}\delta_{k,l}$$

参见题 1.41，或者也可以直接演算

$$\begin{aligned}[p_k,x_i^m] &= \sum_{l=0}^{m-1}x_i^l[p_k,x_i]x_i^{m-l-1}=[p_k,x_i]x_i^{m-l-1}\\ \left[x_k,p_j^n\right] &= \sum_{l=0}^{m-1}x_i^l[x_k,p_j]p_j^{n-l-1}=[p_k,x_i]x_i^{m-l-1}\end{aligned}$$

这样

$$\begin{aligned}[p_k,F] &= [p_k,\sum_{m,n=0}^{\infty}\sum_{i,j=1}^{3}C_{ij}^{mn}x_i^mp_j^n]=\sum_{m,n=0}^{\infty}\sum_{i,j=1}^{3}[p_k,x_i^mp_j^n]\\ &=\sum_{m,n=0}^{\infty}\sum_{i,j=1}^{3}C_{ij}^{mn}[p_k,x_i^m]p_j^n=\sum_{m,n=0}^{\infty}\sum_{i,j=1}^{3}C_{ij}^{mn}(-\mathrm{i}\hbar\delta_{ki})mx_i^{m-1}p_j^n\\ &=\sum_{m,n=0}^{\infty}C_{mn}(-\mathrm{i}\hbar)\frac{\partial x_i^m}{\partial x_k}p_j^n=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x_k}\sum_{m,n=0}^{\infty}\sum_{i,j=1}^{3}C_{ij}^{mn}x_i^mp_j^n=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial F}{\partial x_k}\end{aligned}$$

以及

$$\begin{aligned}[x_k,F] &= [x_k,\sum_{m,n=0}^{\infty}\sum_{i,j=1}^{3}C_{ij}^{mn}x_i^mp_j^n]=\sum_{m,n=0}^{\infty}\sum_{i,j=1}^{3}C_{ij}^{mn}[x_k,x^mp^n]\\ &=\sum_{m,n=0}^{\infty}\sum_{i,j=1}^{3}C_{ij}^{mn}x_i^m[x_k,p_j^n]=\sum_{m,n=0}^{\infty}\sum_{i,j=1}^{3}C_{ij}^{mn}x_i^m\mathrm{i}\hbar\delta_{kj}np_j^{n-1}\\ &=\sum_{m,n=0}^{\infty}\sum_{i,j=1}^{3}C_{ij}^{mn}x_i^m\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p_k}p_j^n=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p_k}\sum_{m,n=0}^{\infty}\sum_{i,j=1}^{3}C_{ij}^{mn}x_i^mp_j^n=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial F}{\partial p_k}\end{aligned}$$

即得所证结果.

4.38　Baker–Hausdorff 公式

题 4.38　给定算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$，令 $\hat{C}_0=\hat{B}$，$\hat{C}_1=[\hat{A},\hat{B}]$，$\hat{C}_2=[\hat{A},\hat{C}_1]$，$\cdots$，$\hat{C}_n=[\hat{A},\hat{C}_{n-1}]$，$\cdots$，若 λ 为常数，则有如下 Baker-Hausdorff 公式：

$$\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n}{n!}\hat{C}_n=\hat{B}+\lambda\left[\hat{A},\hat{B}\right]+\frac{\lambda^2}{2!}\left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right]+\cdots \tag{4.54}$$

先用 $\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}$ 的指数定义式直接验证此公式的前三项，接着作一般性证明.

提示　一般性证明是将公式左边对参数 λ 作 Taylor 级数展开.

证法一　令 $f(\lambda)=\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}}$，将 $f(\lambda)$ 按 λ 作 Taylor 级数展开，有

$$f(\lambda)=\sum_n f^{(n)}(0)\frac{\lambda^n}{n!} \tag{4.55}$$

对照上式，只须证明如下关系即可：

$$\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}\lambda^n}f(\lambda=0)=\hat{C}_n \tag{4.56}$$

下面用数学归纳法证明之. 先验证前三项. 将 $f(\lambda)$ 按 λ 展开，有

$$\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}}=\left(1+\lambda\hat{A}+\frac{1}{2}\lambda^2\hat{A}^2+\cdots\right)\hat{B}\left(1-\lambda\hat{A}+\frac{1}{2}\lambda^2\hat{A}^2-\cdots\right)$$

上式右边只含 λ^0 的项的系数：

$$\hat{B}=\hat{C}_0$$

只含 λ^1 的项的系数：

$$\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}=[\hat{A},\hat{B}]=\hat{C}_1$$

只含 λ^2 的项的系数：

$$-\hat{A}\hat{B}\hat{A}+\frac{1}{2}\hat{A}^2\hat{B}+\frac{1}{2}\hat{B}\hat{A}^2=\frac{1}{2}[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]=\frac{1}{2}\hat{C}_2$$

……. 由此可知,

$$f(\lambda)=\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\hat{C}_0\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}},\quad f^{(0)}(0)=\hat{C}_0 \tag{4.57}$$

$$\frac{\mathrm{d}f(\lambda)}{\mathrm{d}\lambda}=\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\hat{C}_1\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}},\quad f^{(1)}(0)=\hat{C}_1 \tag{4.58}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2f(\lambda)}{\mathrm{d}\lambda^2}=\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\hat{C}_2\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}},\quad f^{(2)}(0)=\hat{C}_2 \tag{4.59}$$

假设

$$\frac{\mathrm{d}^{n-1}}{\mathrm{d}\lambda^{n-1}}f(\lambda)=\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\hat{C}_{n-1}\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}},\quad f^{(n-1)}(0)=\hat{C}_{n-1}$$

则有

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}\lambda^n}f(\lambda) &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\left[\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\hat{C}_{n-1}\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}}\right]\\ &= \hat{A}\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\hat{C}_{n-1}\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}}-\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\hat{C}_{n-1}\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}}\hat{A}\\ &= \mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\left[\hat{A},\hat{C}_{n-1}\right]\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}}=\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\hat{C}_n\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}}\end{aligned}$$

上式中取 $\lambda=0$ 即给出式 (4.56)，得证.

证法二　设 $f(\lambda)=\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}}$，其中 λ 为参数. $f(\lambda)$ 的 Taylor 展开式为

$$f(\lambda)=f(0)+f'(0)\lambda+f''(0)\frac{\lambda^2}{2!}+\cdots+f^{(n)}(0)\frac{\lambda^n}{n!}+\cdots \tag{4.60}$$

式中，$f(0)=\hat{B}$. $f(\lambda)$ 对 λ 依次求各阶导数得

$$\begin{aligned}
f'(\lambda) &= \mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\left[\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}\right]\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}}, \quad f'(0)=\left[\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}\right] \\
f''(\lambda) &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}f'(\lambda)=\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\left[\hat{A},\left[\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}\right]\right]\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}}, \quad f''(0)=\left[\hat{A},\left[\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}\right]\right] \\
&\cdots \\
f^{(n)}(\lambda) &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}f^{(n-1)}(\lambda)=\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\underbrace{[\hat{A},[\hat{A},\cdots,[\hat{A}}_{n},[\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}]]\underbrace{\cdots]]}_{n}\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}} \\
f^{(n)}(0) &= \underbrace{[\hat{A},[\hat{A},\cdots,[\hat{A}}_{n},[\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}]]\underbrace{\cdots]]}_{n} \\
&\cdots
\end{aligned}$$

把上面各式代入式 (4.60) 即得

$$\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}}=\hat{B}+\lambda\left[\hat{A},\hat{B}\right]+\frac{\lambda^2}{2!}\left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right]+\cdots$$

即为所证的 Baker-Hausdorff 公式 (4.54).

4.39 Glauber 公式

题 4.39 证明

$$\mathrm{e}^{\lambda\left(\hat{A}+\hat{B}\right)}=\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\mathrm{e}^{-\frac{\lambda^2}{2}C}=\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\frac{\lambda^2}{2}C} \tag{4.61}$$

其中 $\hat{C}=[\hat{A},\hat{B}]$，且与 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 都对易. 此式称为 Glauber[①]公式，验证它是上面 Baker-Hausdorff 公式的特殊情况.

此公式的特殊情况 $\mathrm{e}^{\hat{A}}\mathrm{e}^{\hat{B}}=\mathrm{e}^{\hat{B}}\mathrm{e}^{\hat{A}}\mathrm{e}^{[\hat{A},\hat{B}]}$ 很常用.

证法一 设 $f(\lambda)=\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}$，对 λ 求导得

$$\begin{aligned}
f'(\lambda) &= \hat{A}\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}+\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}=\left[\hat{A}+\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}}\right]\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}} \\
&= \left[\hat{A}+\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}}\right]f(\lambda)=\left[\hat{A}+g(\lambda)\right]f(\lambda)
\end{aligned} \tag{4.62}$$

令 $g(\lambda)=\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}}$，对 λ 求导得

$$g'(\lambda)=\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A})\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}}=\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\hat{C}\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}}=\hat{C} \tag{4.63}$$

由 $\lambda=0$ 初始条件 $g(0)=\hat{B}$，根据上式解得

$$g(\lambda)=\hat{B}+\hat{C}\lambda \tag{4.64}$$

上式也可以由 $g(\lambda)$ 的表达式利用 Baker-Hausdorff 公式直接给出. 将式 (4.64)代入式 (4.62)得 $f'(\lambda)=\left(\hat{A}+\hat{B}+\hat{C}\lambda\right)f(\lambda)$. 同理可证 $f'(\lambda)=f(\lambda)\left(\hat{A}+\hat{B}+\hat{C}\lambda\right)$. 也就有

$$f'(\lambda)=f(\lambda)\left(\hat{A}+\hat{B}+\hat{C}\lambda\right)=\left(\hat{A}+\hat{B}+\hat{C}\lambda\right)f(\lambda)$$

① Roy Jay Glauber，2005 年 Nobel 物理学奖获得者.

由此知 $\left(\hat{A}+\hat{B}+\hat{C}\lambda\right)$ 与 $f(\lambda)$ 对易. 这样关于 $f(\lambda)$ 的微分方程为

$$\frac{f'(\lambda)}{f(\lambda)}=\hat{A}+\hat{B}+\hat{C}\lambda \tag{4.65}$$

由 $\lambda=0$ 初始条件 $f(0)=1$，根据上式解得

$$f(\lambda)=\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}+\lambda\hat{B}+\frac{1}{2}\lambda^2\hat{C}} \tag{4.66}$$

这样

$$\mathrm{e}^{\lambda\left(\hat{A}+\hat{B}\right)}=\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\mathrm{e}^{-\frac{\lambda^2}{2}C} \tag{4.67}$$

式 (4.67) 中 $\hat{A}\leftrightarrow\hat{B}$，即得 $\mathrm{e}^{\lambda\left(\hat{A}+\hat{B}\right)}=\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\frac{\lambda^2}{2}\hat{C}}$，这样

$$\mathrm{e}^{\lambda\left(\hat{A}+\hat{B}\right)}=\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\mathrm{e}^{-\frac{\lambda^2}{2}\hat{C}}=\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\frac{\lambda^2}{2}\hat{C}} \tag{4.68}$$

上式称为 Glauber 公式. 对于 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 对易情况，即 $\hat{C}=0$，显然

$$\mathrm{e}^{\lambda\left(\hat{A}+\hat{B}\right)}=\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}=\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}$$

证法二　设 $f(\lambda)=\mathrm{e}^{-\lambda\left(\hat{A}+\hat{B}\right)}\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}$，对 λ 求导得

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\lambda}&=-\mathrm{e}^{-\lambda\left(\hat{A}+\hat{B}\right)}\left(\hat{A}+\hat{B}\right)\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}+\mathrm{e}^{-\lambda\left(\hat{A}+\hat{B}\right)}\hat{A}\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}+\mathrm{e}^{-\lambda\left(\hat{A}+\hat{B}\right)}\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\\&=\mathrm{e}^{-\lambda\left(\hat{A}+\hat{B}\right)}\left(\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\hat{B}-\hat{B}\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\right)\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\\&=-\mathrm{e}^{-\lambda\left(\hat{A}+\hat{B}\right)}\lambda\left[\hat{B},\hat{A}\right]\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\\&=\lambda\left[\hat{A},\hat{B}\right]\mathrm{e}^{-\lambda\left(\hat{A}+\hat{B}\right)}\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\\&=\lambda\hat{C}f\end{aligned}$$

其中，$\hat{C}=\left[\hat{A},\hat{B}\right]$ 与 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 都对易. 也就是

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\lambda}=\lambda\hat{C}f,\quad\frac{\mathrm{d}\ln f}{\mathrm{d}\lambda}=\lambda\hat{C} \tag{4.69}$$

利用 $\lambda=0$ 初条件 $f(0)=1$ 积分得

$$f=\mathrm{e}^{\frac{1}{2}\lambda^2\hat{C}}$$

也就是

$$f(\lambda)=\mathrm{e}^{-\lambda\left(\hat{A}+\hat{B}\right)}\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}=\mathrm{e}^{\frac{1}{2}\lambda^2\hat{C}} \tag{4.70}$$

由上式即给出

$$\mathrm{e}^{\lambda\left(\hat{A}+\hat{B}\right)}=\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\lambda^2\hat{C}} \tag{4.71}$$

取 $\lambda=1$，即得

$$\mathrm{e}^{\hat{A}+\hat{B}}=\mathrm{e}^{\hat{A}}\mathrm{e}^{\hat{B}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\hat{C}}$$

与式 (4.67) 同. 再作互换 $\hat{A}\leftrightarrow\hat{B}$，即得另一式.

证法三　设 $f(\lambda)=\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}$，对 λ 求导得

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}f(\lambda) &= \hat{A}f(\lambda)+\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\\ &= \hat{A}f(\lambda)+\sum_n\frac{\lambda^n}{n!}\hat{A}^n\hat{B}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\end{aligned}\tag{4.72}$$

题给 $[\hat{A},\hat{B}]$ 与 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 对易，易证

$$\left[\hat{A}^n,\hat{B}\right]=n\left[\hat{A},\hat{B}\right]\hat{A}^{n-1}$$

即有

$$\hat{A}^n\hat{B}=\hat{B}\hat{A}^n+n\left[\hat{A},\hat{B}\right]\hat{A}^{n-1}$$

代入上面式 (4.72)得

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}f(\lambda) &= \hat{A}f(\lambda)+\hat{B}\sum_n\frac{\lambda^n}{n!}\hat{A}^n\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}+\left[\hat{A},\hat{B}\right]\sum_n n\frac{\lambda^n}{n!}\hat{A}^{n-1}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\\ &= \left(\hat{A}+\hat{B}+\hat{C}\lambda\right)f(\lambda)\end{aligned}\tag{4.73}$$

同理，可证明

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}f(\lambda)=f(\lambda)\left(\hat{A}+\hat{B}+\lambda\hat{C}\right)$$

因为 $\left[f(\lambda),\left(\hat{A}+\hat{B}+\lambda\hat{C}\right)\right]=0$，所以可对上式积分，利用 $\lambda=0$ 初条件 $f(0)=1$ 得

$$f(\lambda)=\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}+\lambda\hat{B}+\frac{1}{2}\lambda^2\hat{C}}\tag{4.74}$$

这样

$$\mathrm{e}^{\lambda\left(\hat{A}+\hat{B}\right)}=\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\mathrm{e}^{-\frac{\lambda^2}{2}C}\tag{4.75}$$

又可按如下方法证 $\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\lambda^2\hat{C}}=\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\frac{1}{2}\lambda^2\hat{C}}$. 按题 4.38 中的 Baker-Hausdorff 公式

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}} &= \sum_n\frac{\lambda^n}{n!}\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\hat{B}^n\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}}=\sum_n\frac{\lambda^n}{n!}\left(\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}}\right)^n\\ &= \sum_n\frac{\lambda^n}{n!}\left(\lambda\hat{C}_0+\lambda^2\hat{C}_1\right)^n=\mathrm{e}^{\lambda\hat{C}_0+\lambda^2\hat{C}_1}=\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}+\lambda^2\hat{C}}\end{aligned}$$

其中利用了本题题设 $\hat{C}$ 与 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 对易. 也就有

$$\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}}=\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}+\lambda^2\hat{C}}$$

再因 $\hat{C}$ 与 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 对易，所以

$$\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}=\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\lambda^2\hat{C}},\quad \text{即}\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\lambda^2\hat{C}}=\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\mathrm{e}^{\frac{1}{2}\lambda^2\hat{C}}\tag{4.76}$$

这样就完成了式 (4.67) 的证明.

4.40　Kubo 恒等式

题 4.40　设两个算符 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 不对易，即 $\left[\hat{A},\hat{B}\right]\neq 0$，而 a、λ 为参变数，试证明：

$$-\left[\hat{A},\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\right]=\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\int_0^a \mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\left[\hat{A},\hat{B}\right]\mathrm{e}^{-\lambda\hat{B}}\mathrm{d}\lambda \tag{4.77}$$

上式叫作 Kubo 恒等式.

证明　若 $a=0$，则式 (4.77)两边均等于零，Kubo 恒等式成立.

若 $a\neq 0$，则对式 (4.77)左边作运算 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}a}$，有

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}a}\left\{-\left[\hat{A},\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\right]\right\} &= -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}a}\left(\hat{A}\mathrm{e}^{-a\hat{B}}-\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\hat{A}\right)=\hat{A}\hat{B}\mathrm{e}^{-a\hat{B}}-\hat{B}\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\hat{A}\\ &= -\hat{B}\left(\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\hat{A}-\hat{A}\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\right)-\hat{B}\hat{A}\mathrm{e}^{-a\hat{B}}+\hat{A}\hat{B}\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\\ &= -\hat{B}\left(\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\hat{A}-\hat{A}\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\right)+[\hat{A},\hat{B}]\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\\ &= \hat{B}\left[\hat{A},\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\right]+[\hat{A},\hat{B}]\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\end{aligned} \tag{4.78}$$

对式 (4.77)右边作运算 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}a}$，有

$$\begin{aligned}&\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}a}\left\{\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\int_0^a \mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}[\hat{A},\hat{B}]\mathrm{e}^{-\lambda\hat{B}}\mathrm{d}\lambda\right\}\\ &= (-\hat{B})\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\int_0^a \mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}[\hat{A},\hat{B}]\mathrm{e}^{-\lambda\hat{B}}\mathrm{d}\lambda+\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}a}\left\{\int_0^a \mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}[\hat{A},\hat{B}]\mathrm{e}^{-\lambda\hat{B}}\mathrm{d}\lambda\right\}\\ &= (-\hat{B})\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\int_0^a \mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}[\hat{A},\hat{B}]\mathrm{e}^{-\lambda\hat{B}}\mathrm{d}\lambda+\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\mathrm{e}^{a\hat{B}}[\hat{A},\hat{B}]\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\\ &= -\hat{B}\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\int_0^a \mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}[\hat{A},\hat{B}]\mathrm{e}^{-\lambda\hat{B}}\mathrm{d}\lambda+[\hat{A},\hat{B}]\mathrm{e}^{-a\hat{B}}\end{aligned} \tag{4.79}$$

比较式 (4.78)和式 (4.79)，看出式 (4.77)的左、右两边满足相同的微分方程，且当 $a=0$ 时 Kubo 恒等式 (4.77)成立，故式 (4.77)成立.

说明　Kubo 恒等式也可通过等式

$$\hat{B}(t)=\hat{B}_0+\mathrm{i}\left[\hat{A},\int_0^t \hat{B}(\tau)\mathrm{d}\tau\right]=\exp(\mathrm{i}\hat{A}t)\hat{B}_0\exp(-\mathrm{i}\hat{A}t)$$

给出证明.

4.41　对易关系的一个重要结果

题 4.41　设 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 不对易，令 $\hat{C}=[\hat{A},\hat{B}]$，设 $\hat{C}$ 与 $\hat{B}$ 对易，即 $[\hat{B},\hat{C}]=0$. 证明

$$[\hat{A},\hat{B}^n]=n\hat{C}\hat{B}^{n-1},\quad [\hat{A},\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}]=\lambda\hat{C}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}$$

特例

$$[\hat{A},\mathrm{e}^{\hat{B}}]=\hat{C}\mathrm{e}^{\hat{B}},\quad [\hat{A},f(\hat{B})]=\hat{C}f'(\hat{B})$$

其中，$f(x)$ 是可以表示成 x 正幂级数展开的函数.

证明　用数学归纳法. 因为 $n=1$ 时式子成立，假设 $n>1$ 时也成立，即

$$[\hat{A},\hat{B}^{n-1}]=(n-1)\hat{C}\hat{B}^{n-2}$$

则得

$$\begin{aligned}[\hat{A},\hat{B}^n] &= [\hat{A},\hat{B}\hat{B}^{n-1}]=[\hat{A},\hat{B}]\hat{B}^{n-1}+\hat{B}[\hat{A},\hat{B}^{n-1}]\\ &= \hat{C}\hat{B}^{n-1}+(n-1)\hat{B}\hat{C}\hat{B}^{n-2}\end{aligned}$$

因为 $\hat{C}$ 与 $\hat{B}$ 对易，$[\hat{A},\hat{B}^n]=n\hat{C}\hat{B}^{n-1}$，证毕. 所以

$$\begin{aligned}[\hat{A},\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}] &= [\hat{A},\sum_n\frac{1}{n!}\lambda^n\hat{B}^n]=\sum_n\frac{1}{n!}\lambda^n[\hat{A},\hat{B}^n]\\ &= \sum_n\frac{1}{n!}\lambda^n n\hat{C}\hat{B}^{n-1}=\lambda\hat{C}\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\end{aligned}$$

对于特例 $[\hat{A},\mathrm{e}^{\hat{B}}]$，只需令上式中 $\lambda=1$，即可得证.

对于 $\left[\hat{A},f(\hat{B})\right]$

$$\begin{aligned}\left[\hat{A},f(\hat{B})\right] &= \left[\hat{A},\sum_{n=0}^{\infty}a_n\hat{B}^n\right]=a_0\left[\hat{A},\hat{B}^0\right]+\sum_{n=1}^{\infty}a_n\left[\hat{A},\hat{B}^n\right]\\ &= \sum_{n=1}^{\infty}na_n\hat{C}\hat{B}^{n-1}=\hat{C}f'(\hat{B})\end{aligned}$$

4.42　矢量算符的点乘积、叉乘积与标量算符的对易关系

题 4.42　设 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$ 为矢量算符，F 为标量算符. 证明：

$$\begin{aligned}[F,\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}] &= [F,\boldsymbol{A}]\cdot\boldsymbol{B}+\boldsymbol{A}\cdot[F,\boldsymbol{B}]\\ [F,\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}] &= [F,\boldsymbol{A}]\times\boldsymbol{B}+\boldsymbol{A}\times[F,\boldsymbol{B}]\end{aligned}$$

证法一　直接利用对易运算的关系式进行演算

$$\begin{aligned}[F,\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}] &= [F,A_\alpha B_\alpha]=A_\alpha[F,B_\alpha]+[F,A_\alpha]B_\alpha\\ &= A_\alpha[F,\boldsymbol{B}]_\alpha+[F,\boldsymbol{A}]_\alpha B_\alpha=\boldsymbol{A}\cdot[F,\boldsymbol{B}]+[F,\boldsymbol{A}]\cdot\boldsymbol{B}\\ [F,\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}]_\alpha &= [F,(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})_\alpha]=[F,\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\beta B_\gamma]\\ &= \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\beta[F,B_\gamma]+\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}[F,A_\beta]B_\gamma\\ &= \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\beta[F,\boldsymbol{B}]_\gamma+\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}[F,\boldsymbol{A}]_\beta B_\gamma\\ &= \{[F,\boldsymbol{A}]\times\boldsymbol{B}+\boldsymbol{A}\times[F,\boldsymbol{B}]\}_\alpha\end{aligned}$$

上面采用了 Einstein 求和约定，以后也一直采用.

证法二　可直接演算

$$\begin{aligned}[F,\boldsymbol{A}]\cdot\boldsymbol{B}+\boldsymbol{A}\cdot[F,\boldsymbol{B}] &= F\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}-\boldsymbol{A}F\cdot\boldsymbol{B}+\boldsymbol{A}\cdot F\boldsymbol{B}-\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}F\\ &= F\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}-\boldsymbol{A}F\cdot\boldsymbol{B}+\boldsymbol{A}F\cdot\boldsymbol{B}-\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}F=[F,\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}]\end{aligned}$$

以及

$$\begin{aligned}[F,\boldsymbol{A}]\times\boldsymbol{B}+\boldsymbol{A}\times[F,\boldsymbol{B}] &= F\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}-\boldsymbol{A}F\times\boldsymbol{B}+\boldsymbol{A}\times F\boldsymbol{B}-\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}F\\ &= F\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}-\boldsymbol{A}F\times\boldsymbol{B}+\boldsymbol{A}F\cdot\boldsymbol{B}-\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}F=[F,\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}]\end{aligned}$$

4.43　轨道角动量算符与整函数算符的对易子

题 4.43　设 F 是由 $\hat{\boldsymbol{r}}$、$\hat{\boldsymbol{p}}$ 构成的整函数算符，证明：

$$[\hat{\boldsymbol{L}},F]=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial F}{\partial\hat{\boldsymbol{p}}}\times\hat{\boldsymbol{p}}-\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{r}}\times\frac{\partial F}{\partial\hat{\boldsymbol{r}}}$$

并考察何时等于零.

证明　利用角动量算符的定义式 $\hat{\boldsymbol{L}}=\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{p}$，即得

$$\left[\hat{\boldsymbol{L}},F\right]=[\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{p},F]=-[F,\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{p}]$$

因而

$$\begin{aligned}\left[\hat{\boldsymbol{L}},F\right]_\alpha &= [\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}},F]=[\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{x}_\beta\hat{p}_\gamma,F]\\ &= \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}[\hat{x}_\beta,F]\hat{p}_\gamma+\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{x}_\beta[\hat{p}_\gamma,F]\\ &= \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}[\hat{\boldsymbol{r}},F]_\beta\hat{p}_\gamma+\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{x}_\beta[\hat{\boldsymbol{p}},F]_\gamma\\ &= \{[\hat{\boldsymbol{r}},F]\times\hat{\boldsymbol{p}}+\hat{\boldsymbol{r}}\times[\hat{\boldsymbol{p}},F]\}_\alpha\end{aligned}$$

由题 4.37 结果可知

$$\left[\hat{\boldsymbol{L}},F\right]=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial F}{\partial\hat{\boldsymbol{p}}}\times\hat{\boldsymbol{p}}-\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{r}}\times\frac{\partial F}{\partial\hat{\boldsymbol{r}}}$$

当 F 是 $\boldsymbol{r}^2$ 或者 $\boldsymbol{p}^2$ 或者 $\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}$ 的函数，或者是这些量的组合的函数时，$\left[\hat{\boldsymbol{L}},F\right]=0$.

4.44　轨道角动量与动量算符的两个代数关系

题 4.44　证明：

$$\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}+\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}=2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}} \tag{4.80}$$

$$\mathrm{i}\hbar(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}-\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})=\left[\hat{\boldsymbol{L}}^2,\hat{\boldsymbol{p}}\right] \tag{4.81}$$

注　在证明这一类题时，切记算符不可随便交换顺序. 利用三个关系式：

$$\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})=(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\cdot\boldsymbol{C} \tag{4.82}$$

$$\boldsymbol{A}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})=\boldsymbol{A}_\alpha\boldsymbol{B}\boldsymbol{C}_\alpha-(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})\boldsymbol{C} \tag{4.83}$$

$$(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\times\boldsymbol{C}=\boldsymbol{A}_\alpha\boldsymbol{B}\boldsymbol{C}_\alpha-\boldsymbol{A}(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{C}) \tag{4.84}$$

其中，$\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$、$\boldsymbol{C}$ 是矢量算符. 再给出几个常用的对易子

$$\begin{array}{lll}[x_i,x_j]=0, & [p_i,p_j]=0, & [x_i,p_j]=\mathrm{i}\hbar\delta_{ij}\\ [L_i,x_j]=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}x_k, & [L_i,p_j]=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}p_k, & [L_i,L_j]=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}L_k\end{array}$$

以及

$$\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{r}=0,\quad \boldsymbol{p}\times\boldsymbol{p}=0,\quad \boldsymbol{L}\times\boldsymbol{L}=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{L}$$

其中，$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$.

证法一　考察 x 方向分量式

$$\begin{aligned}(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}+\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})_x &= \hat{p}_y\hat{L}_z-\hat{p}_z\hat{L}_y+\hat{L}_y\hat{p}_z-\hat{L}_z\hat{p}_y\\ &= [\hat{p}_y,\hat{L}_z]+[\hat{L}_y,\hat{p}_z]=2\mathrm{i}\hbar\hat{p}_x\end{aligned}$$

也就有

$$(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}+\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})_x=2\mathrm{i}\hbar\hat{p}_x$$

此结果与坐标选取无关，所以对于 y、z 方向分量式有类似的等式. 因而式 (4.80)成立.

对于角动量平方与动量的对易关系，同样先考察 x 方向分量式

$$\begin{aligned}[\hat{\boldsymbol{L}}^2,\hat{\boldsymbol{p}}]_x &= [\hat{L}_x^2+\hat{L}_y^2+\hat{L}_z^2,\hat{p}_x]\\ &= [\hat{L}_y,\hat{p}_x]\hat{L}_y+\hat{L}_y[\hat{L}_y,\hat{p}_x]+[\hat{L}_z,\hat{p}_x]\hat{L}_z+\hat{L}_z[\hat{L}_z,\hat{p}_x]\\ &= \mathrm{i}\hbar[-\hat{p}_z\hat{L}_y-\hat{L}_y\hat{p}_z+\hat{p}_y\hat{L}_z+\hat{L}_z\hat{p}_y]\\ &= \mathrm{i}\hbar(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}-\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})_x\end{aligned}$$

也就是

$$[\hat{\boldsymbol{L}}^2,\hat{\boldsymbol{p}}]_x=\mathrm{i}\hbar(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}-\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})_x$$

同理，动量在 y、z 方向的分量，也具有上面的对易关系. 因而式 (4.81)成立.

证法二　对式 (4.80)，直接将角动量算符的定义式 $\hat{L}_i=\varepsilon_{ijk}\hat{x}_j\hat{p}_k$ 代入

$$\begin{aligned}\left[\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}+\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right]_\alpha &= \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}(\hat{p}_\beta\hat{L}_\gamma+\hat{L}_\beta\hat{p}_\gamma)=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}(\hat{p}_\beta\hat{L}_\gamma-\hat{L}_\gamma\hat{p}_\beta)\\ &= \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\gamma\mu\nu}(\hat{p}_\beta\hat{x}_\mu\hat{p}_\nu-\hat{x}_\mu\hat{p}_\nu\hat{p}_\beta)=(\delta_{\alpha\mu}\delta_{\beta\nu}-\delta_{\alpha\nu}\delta_{\beta\mu})(\hat{p}_\beta\hat{x}_\mu\hat{p}_\nu-\hat{x}_\mu\hat{p}_\nu\hat{p}_\beta)\\ &= \hat{p}_\beta\hat{x}_\alpha\hat{p}_\beta-\hat{x}_\alpha\hat{p}_\beta\hat{p}_\beta-\hat{p}_\beta\hat{x}_\beta\hat{p}_\alpha+\hat{x}_\beta\hat{p}_\alpha\hat{p}_\beta=[\hat{p}_\beta,\hat{x}_\alpha]\hat{p}_\beta-[\hat{p}_\beta,\hat{x}_\beta]\hat{p}_\alpha\\ &= -\mathrm{i}\hbar\delta_{\alpha\beta}\hat{p}_\beta+3\mathrm{i}\hbar\hat{p}_\alpha=2\mathrm{i}\hbar\hat{p}_\alpha\end{aligned}$$

上面用到了本题附录中的式 (4.86b). 这样得到式 (4.80).

利用角动量与动量的对易关系式

$$\begin{aligned}\left[\hat{\boldsymbol{L}}^2,\hat{\boldsymbol{p}}\right]_\alpha &= \left[\hat{\boldsymbol{L}}^2,\hat{p}_\alpha\right]=[\hat{L}_\beta\hat{L}_\beta,\hat{p}_\alpha]=\hat{L}_\beta[\hat{L}_\beta,\hat{p}_\alpha]+[\hat{L}_\beta,\hat{p}_\alpha]\hat{L}_\beta\\ &= \mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\beta\alpha\gamma}\hat{L}_\beta\hat{p}_\gamma+\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\beta\alpha\gamma}\hat{p}_\gamma\hat{L}_\beta=-\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{L}_\beta\hat{p}_\gamma+\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\gamma\beta}\hat{p}_\gamma\hat{L}_\beta\\ &= \mathrm{i}\hbar(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}-\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})_\alpha\end{aligned}$$

这样得到式 (4.81).

附录　(Levi-Civita 全反对称张量的乘及其缩并)Levi-Civita 全反对称张量表示为 $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$，其分量由 $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}=-\varepsilon_{\beta\alpha\gamma}=-\varepsilon_{\alpha\gamma\beta}=-\varepsilon_{\gamma\alpha\beta}$，$\varepsilon_{123}=1$ 确定. 当 $\alpha=1$，$\beta=2$，$\gamma=3$ 及它们的循环排列时，$\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}=+1$；当 α、β、γ 按其他次序排列时，$\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}=-1$；当两个或两个以上指标相同时，$\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}=0$.

Levi-Civita 全反对称张量的乘积有如下等式:

$$\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{i'j'k'}=\begin{vmatrix}\delta_{ii'} & \delta_{ji'} & \delta_{ki'}\\ \delta_{ij'} & \delta_{jj'} & \delta_{kj'}\\ \delta_{ik'} & \delta_{jk'} & \delta_{kk'}\end{vmatrix} \tag{4.85}$$

对上式我们可从右边理解 / 证明. 利用行列式的性质，上式右边任意交换两行或者两列出负号，大小不变，所以上式右边必定含有 $\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{i'j'k'}$ 因子. 再取 $(i,j,k)=(1,2,3)$ 以及 $(i',j',k')=(1,2,3)$，右边结果为 1，所以上式成立.

从式 (4.85)出发，有如下缩并关系 (按照 Einstein 求和约定):

$$\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{i'j'k}=\delta_{ii'}\delta_{jj'}-\delta_{ij'}\delta_{i'j} \tag{4.86a}$$

$$\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{i'jk}=2\delta_{ii'} \tag{4.86b}$$

$$\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{ijk}=6 \tag{4.86c}$$

上面式 (4.85)与式 (4.86)在一些计算中会用到.

4.45　矢量算符与角动量算符的一般代数关系

题 4.45　证明:

$$\begin{aligned}&\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}=\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}=0, && \hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}=\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}=0\\ &(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\cdot\hat{\boldsymbol{p}}=0, && \hat{\boldsymbol{p}}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})=0\\ &(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})\cdot\hat{\boldsymbol{L}}=0, && \hat{\boldsymbol{L}}\cdot(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})=0\\ &(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\cdot\hat{\boldsymbol{L}}=0, && \hat{\boldsymbol{L}}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})=0\\ &(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})\cdot\hat{\boldsymbol{p}}=\hat{\boldsymbol{p}}\cdot(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})=2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}^2 && \hat{\boldsymbol{p}}\times(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})=-(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\times\hat{\boldsymbol{p}}=\hat{\boldsymbol{L}}\hat{\boldsymbol{p}}^2\end{aligned}$$

证法一　由 $\hat{\boldsymbol{L}}$ 的定义

$$\begin{aligned}&\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}=\hat{\boldsymbol{r}}\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}})=(\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{r}})\cdot\hat{\boldsymbol{p}}=0\\ &\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}=-(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{r}})\cdot\hat{\boldsymbol{r}}=\hat{\boldsymbol{p}}\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{r}})=0\end{aligned}$$

同理可得

$$\begin{aligned}
&\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}=\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}=0\\
&(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\cdot\hat{\boldsymbol{p}}=\hat{\boldsymbol{L}}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{p}})=0\\
&\hat{\boldsymbol{p}}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})=(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\cdot\hat{\boldsymbol{L}}=0\\
&(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})\cdot\hat{\boldsymbol{L}}=\hat{\boldsymbol{p}}\cdot(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{L}})=\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}=0\\
&\hat{\boldsymbol{L}}\cdot(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})=(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{L}})\cdot\hat{\boldsymbol{p}}=\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}=0
\end{aligned}$$

下面用到题 4.44 结论：

$$\begin{aligned}
(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\cdot\hat{\boldsymbol{L}} &= (2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}-\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})\cdot\hat{\boldsymbol{L}}=2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}=0\\
\hat{\boldsymbol{L}}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}) &= (\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\cdot\hat{\boldsymbol{L}}=0\\
(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})\cdot\hat{\boldsymbol{p}} &= (2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}-\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\cdot\hat{\boldsymbol{p}}=2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}^2=\hat{\boldsymbol{p}}\cdot(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\\
\Big[\hat{\boldsymbol{p}}\times(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\Big]_i &= \hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{L}_i\hat{\boldsymbol{p}}-\hat{p}_i(\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})=\hat{p}_j\hat{L}_i\hat{p}_j\\
&= (\hat{L}_i\hat{p}_j-\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{p}_k)\hat{p}_j=\hat{L}_i\hat{p}_j\hat{p}_j\hat{L}_i\hat{\boldsymbol{p}}^2\\
\Big[(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\times\hat{\boldsymbol{p}}\Big]_i &= \hat{\boldsymbol{L}}\cdot(\hat{p}_i\hat{\boldsymbol{p}})-\hat{L}_i(\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})=(\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})\hat{p}_i-\hat{L}_i(\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})=-\hat{L}_i\hat{\boldsymbol{p}}^2
\end{aligned}$$

证法二　利用 ε_{ijk} 的全反对称性质，根据 $\boldsymbol{L}$ 的定义 $L_i=\varepsilon_{ijk}x_jp_k$ 得

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{L} &= x_iL_i=x_i\varepsilon_{ijk}x_jp_k=\varepsilon_{ijk}x_ix_jp_k\\
&= \varepsilon_{ijk}x_jx_ip_k=-\varepsilon_{ijk}x_ix_jp_k=0\\
\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{r} &= L_ix_i=\varepsilon_{ijk}x_jp_kx_i=\varepsilon_{ijk}x_jx_ip_k=0
\end{aligned}$$

类似可证 $\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{L}=\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{p}=0$，$(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{p}=0$，$\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L})=0$，$(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L})\cdot\boldsymbol{L}=0$ 以及 $\boldsymbol{L}\cdot(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})=0$. 它们有一个共同特点，在分量乘积求和式中，相邻同一个力学量的分量指标 (当然是交换对称的) 与全反对称张量 2 个指标缩并求和，必然给出 0 结果.

利用题 4.44 式 (4.80)，这样

$$\begin{aligned}
(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L})\cdot\boldsymbol{p} &= (2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{p}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}^2\\
\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p}) &= \boldsymbol{p}\cdot(2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L})=\boldsymbol{p}\cdot2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}^2\\
(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{L} &= (2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L})\cdot\boldsymbol{L}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{L}=0\\
\boldsymbol{L}\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}) &= \boldsymbol{L}\cdot(2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})=\boldsymbol{L}\cdot2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}=0
\end{aligned}$$

最后

$$\begin{aligned}
[\boldsymbol{p}\times(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})]_i &= \varepsilon_{ijk}p_j\,(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})_k=\varepsilon_{ijk}p_j\varepsilon_{kmn}p_jL_mp_n\\
&= (\delta_{im}\delta_{jn}-\delta_{in}\delta_{jm})\,p_jL_mp_n=p_jL_ip_j-p_m\hat{L}_mp_i=[p_j,L_i]\,p_j+L_ip_jp_j+0\\
&= \mathrm{i}\varepsilon_{jik}p_kp_j+L_i\boldsymbol{p}^2=L_i\boldsymbol{p}^2\\
[(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})\times\boldsymbol{p}]_i &= \varepsilon_{ijk}\,(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})_j\,p_k=\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{jmn}L_mp_np_k\\
&= (\delta_{in}\delta_{km}-\delta_{im}\delta_{kn})\,L_mp_np_k=L_kp_ip_k-L_ip_np_n=-L_i\boldsymbol{p}^2
\end{aligned}$$

其中，对 Levi-Civita 全反对称张量的缩并用到了题 4.44 附录中的式 (4.86a). 也就有

$$\boldsymbol{p}\times(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})=-(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})\times\boldsymbol{p}=\boldsymbol{L}p^2$$

讨论 (更一般的结果) 矢量算符 $\boldsymbol{A}$ 一般是由矢量算符 $\boldsymbol{r}$、$\boldsymbol{p}$ 和 $\boldsymbol{L}$ 本身以及它们的矢积所组成的矢量函数 (可能还要乘它们的标量函数). 它的各分量在空间转动下将按线性代数中的正交矩阵改变. 可以证明:

$$[\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L},\boldsymbol{A}]=-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{A}$$

也即

$$\left[\hat{L}_\alpha,\hat{A}_\beta\right]=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{A}_\gamma,\alpha,\beta,\gamma=1,2,3 \tag{4.87}$$

则有

$$[\hat{\boldsymbol{L}}^2,\hat{\boldsymbol{A}}]=\mathrm{i}\hbar(\hat{\boldsymbol{A}}\times\hat{\boldsymbol{L}}-\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{A}}) \tag{4.88}$$

$$\hat{\boldsymbol{A}}\times\hat{\boldsymbol{L}}+\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{A}}=2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{A}} \tag{4.89}$$

上面式 (4.88)的证明如下:

$$\begin{aligned}[\hat{\boldsymbol{L}}^2,\hat{\boldsymbol{A}}] &= [\hat{L}_\alpha\hat{L}_\alpha,\hat{A}_\beta\boldsymbol{e}_\beta]=\hat{L}_\alpha[\hat{L}_\alpha,\hat{A}_\beta]\boldsymbol{e}_\beta+[\hat{L}_\alpha,\hat{A}_\beta]\hat{L}_\alpha\boldsymbol{e}_\beta\\ &= \mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{L}_\alpha\hat{A}_\gamma\boldsymbol{e}_\beta+\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{A}_\gamma\hat{L}_\alpha\boldsymbol{e}_\beta=\mathrm{i}\hbar(\hat{\boldsymbol{A}}\times\hat{\boldsymbol{L}}-\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{A}})\end{aligned}$$

其中利用了

$$\hat{\boldsymbol{A}}\times\hat{\boldsymbol{B}}=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{A}_\alpha\hat{B}\beta\boldsymbol{e}_\gamma=-\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{A}_\beta\hat{B}_\alpha\boldsymbol{e}_\gamma$$

要证明式 (4.89)，利用式 (4.87)，$\hat{L}_\alpha\hat{A}_\beta=\hat{A}_\beta\hat{L}_\alpha+\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\theta}\hat{A}_\theta$，可知

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{A}} &= \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{A}_\alpha\hat{L}_\beta\boldsymbol{e}_\gamma=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{L}_\beta\hat{A}_\alpha\boldsymbol{e}_\gamma+\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\alpha\beta\theta}\hat{A}_\theta\boldsymbol{e}_\gamma\\ &= -\hat{\boldsymbol{A}}\times\hat{\boldsymbol{L}}+2\mathrm{i}\hbar\delta_{\theta,\gamma}\hat{A}_\theta\boldsymbol{e}_\gamma=-\hat{\boldsymbol{A}}\times\hat{\boldsymbol{L}}+2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{A}}\end{aligned}$$

其中，对 Levi-Civita 全反对称张量的缩并用到了题 4.44 附录中的式 (4.86b).

利用式 (4.87)及 Baker-Hausdorff 公式 (4.54)，可证在 $U(\boldsymbol{n}\varphi)$ 转动下，有

$$\begin{aligned}&\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L}\varphi\right\}\boldsymbol{A}\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L}\varphi\right\}\\ =\ &\boldsymbol{A}-\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{A}\varphi+\frac{1}{2!}\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{A})\varphi^2-\frac{1}{3!}\boldsymbol{n}\times[\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{A})]\varphi^3+\cdots\\ =\ &\boldsymbol{n}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{A})-\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{A}\sin\varphi+(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{A})\times\boldsymbol{n}\cos\varphi\end{aligned}$$

附录　(关于矢量算符 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 与角动量 $\hat{\boldsymbol{L}}$ 的一些代数结果) 若

$$\hat{\boldsymbol{L}}=\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}},\quad[\hat{L}_\alpha,\hat{A}_\beta]=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{A}_\gamma$$

则有

$$[\hat{\boldsymbol{L}}^2,\hat{\boldsymbol{A}}]=\mathrm{i}\hbar(\hat{\boldsymbol{A}}\times\hat{\boldsymbol{L}}-\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{A}}) \tag{4.90}$$

$$\hat{\boldsymbol{A}}\times\hat{\boldsymbol{L}}+\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{A}}=2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{A}} \tag{4.91}$$

$$[\hat{\boldsymbol{L}},\hat{\boldsymbol{A}}^2]=0 \tag{4.92}$$

由式 (4.88)、式(4.89)、式(4.92)进一步得到结果,

$$\begin{aligned}
(\hat{\boldsymbol{A}}\times\hat{\boldsymbol{L}})\cdot\hat{\boldsymbol{L}} &= \hat{\boldsymbol{A}}\cdot(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{L}})=\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{A}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}\\
\hat{\boldsymbol{L}}\cdot(\hat{\boldsymbol{A}}\times\hat{\boldsymbol{L}}) &= \mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{A}}\\
(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{A}})\cdot\hat{\boldsymbol{A}} &= \hat{\boldsymbol{L}}\cdot(\hat{\boldsymbol{A}}\times\hat{\boldsymbol{A}})\\
\hat{\boldsymbol{A}}\cdot(\hat{\boldsymbol{A}}\times\hat{\boldsymbol{L}}) &= (\hat{\boldsymbol{A}}\times\hat{\boldsymbol{A}})\cdot\hat{\boldsymbol{L}}\\
(\hat{\boldsymbol{A}}\times\hat{\boldsymbol{L}})\cdot\hat{\boldsymbol{A}} &= -\hat{\boldsymbol{L}}\cdot(\hat{\boldsymbol{A}}\times\hat{\boldsymbol{A}})+2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{A}}^2\\
\hat{\boldsymbol{A}}\cdot(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{A}}) &= -(\hat{\boldsymbol{A}}\times\hat{\boldsymbol{A}})\cdot\hat{\boldsymbol{L}}+2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{A}}^2\\
\hat{\boldsymbol{L}}\cdot(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{A}}) &= \mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{A}}\\
(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{A}})\cdot\hat{\boldsymbol{L}} &= \mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{A}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}\\
\hat{\boldsymbol{A}}\times(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{A}}) &= \hat{\boldsymbol{A}}^2\hat{\boldsymbol{L}}+\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{A}}\times\hat{\boldsymbol{A}}-(\hat{\boldsymbol{A}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}})\hat{\boldsymbol{A}}\\
(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{A}})\times\hat{\boldsymbol{A}} &= -\hat{\boldsymbol{A}}^2\hat{\boldsymbol{L}}+\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{A}}\times\hat{\boldsymbol{A}}+\hat{\boldsymbol{A}}(\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{A}})
\end{aligned}$$

不难看出本题结果是上述各式之特例，其中 $\hat{\boldsymbol{A}}=\hat{\boldsymbol{p}}$. 另可参见题 5.12.

4.46　$\hat{\boldsymbol{L}}^2$、$\hat{\boldsymbol{p}}^2$ 的代数结果

题 4.46　证明:

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2 = \hat{\boldsymbol{r}}^2\hat{\boldsymbol{p}}^2-(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})^2+\mathrm{i}\hbar(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}) \tag{4.93}$$

$$\hat{\boldsymbol{p}}^2 = \frac{1}{r^2}\hat{\boldsymbol{L}}^2+p_r^2=\frac{1}{r^2}\hat{\boldsymbol{L}}^2-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) \tag{4.94}$$

注　$p_r=\dfrac{1}{2}\left(\dfrac{1}{r}\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}\dfrac{1}{r}\right)$.

证法一　直接演算得

$$\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{L}}^2 &= (\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}})=[(\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\times\hat{\boldsymbol{r}}]_i\hat{p}_i\\
&= \hat{\boldsymbol{r}}\cdot(\hat{p}_i\hat{\boldsymbol{r}})\hat{p}_i-\hat{r}_i(\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{r}})\hat{p}_i=\hat{r}_j\hat{p}_i\hat{r}_j\hat{p}_i-\hat{r}_i\hat{p}_j\hat{r}_j\hat{p}_i\\
&= \hat{r}_j(\hat{r}_j\hat{p}_i-\mathrm{i}\hbar\delta_{ij})\hat{p}_i-(\hat{p}_j\hat{r}_i+\mathrm{i}\hbar\delta_{ij})\hat{r}_j\hat{p}_i\\
&= \hat{\boldsymbol{r}}^2\hat{\boldsymbol{p}}^2-\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}-\hat{p}_j\hat{r}_j\hat{r}_i\hat{p}_i-\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\\
&= \hat{\boldsymbol{r}}^2\hat{\boldsymbol{p}}^2-\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}-(\hat{r}_j\hat{p}_j-\mathrm{i}\hbar\delta_{jj})\hat{r}_i\hat{p}_i-\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\\
&= \hat{\boldsymbol{r}}^2\hat{\boldsymbol{p}}^2+\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}-(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})^2
\end{aligned}$$

其中，用到了 $\delta_{jj}=3$. 也就有所证的式 (4.93).

设 ψ 为任意波函数，由径向动量的定义

$$\begin{aligned}\hat{p}_r\psi &= \frac{1}{2}\left(\frac{1}{r}\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}\frac{1}{r}\right)\psi \\ &= -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\left[\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\nabla+\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\nabla+\left(\nabla\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)\right]\psi \\ &= -\mathrm{i}\hbar\left[\boldsymbol{e}_r\cdot\nabla+\frac{1}{2}(\nabla\cdot\boldsymbol{e}_r)\right]\psi \end{aligned} \tag{4.95}$$

径向单位矢量 $\boldsymbol{e}_r$ 的散度可如下计算：

$$\begin{aligned}(\nabla\cdot\boldsymbol{e}_r) &= \left(\nabla\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)=\frac{1}{r}(\nabla\cdot\boldsymbol{r})+\boldsymbol{r}\cdot\left(\nabla\frac{1}{r}\right) \\ &= \frac{3}{r}+\boldsymbol{r}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r^3}=\frac{2}{r}\end{aligned}$$

即有

$$(\nabla\cdot\boldsymbol{e}_r)=\frac{2}{r} \tag{4.96}$$

代入上面式 (4.95)可得

$$\hat{p}_r\psi=-\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)\psi$$

由 ψ 的任意性

$$\hat{p}_r=-\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right) \tag{4.97}$$

进而

$$\begin{aligned}{p_r}^2 &= -\hbar^2\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)^2=-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{\partial}{\partial r}\frac{1}{r}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\right) \\ &= -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{\partial}{\partial r}\frac{1}{r}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\right)=-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)\end{aligned}$$

这样

$$\hat{p}_r^2=-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)\triangleq-\hbar^2\nabla_r^2 \tag{4.98}$$

因为 $\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}=-\mathrm{i}\hbar r\dfrac{\partial}{\partial r}$，$(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})^2=-\hbar^2\left(r^2\dfrac{\partial^2}{\partial r^2}+r\dfrac{\partial}{\partial r}\right)$，由上面式 (4.93)得

$$\begin{aligned}\frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{r^2} &= \hat{\boldsymbol{p}}^2-\frac{(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})^2}{r^2}+\mathrm{i}\hbar\frac{\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}}{r^2}=\hat{\boldsymbol{p}}^2+\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)+\hbar^2\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} \\ &= \hat{\boldsymbol{p}}^2+\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)=\hat{\boldsymbol{p}}^2-p_r^2\end{aligned}$$

也就有所证的式 (4.94).

证法二　利用角动量算符的定义式 $\hat{L}_i=\varepsilon_{ijk}\hat{r}_j\hat{p}_k$ 直接演算

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2 = \hat{L}_i\hat{L}_i=\varepsilon_{ijk}\hat{r}_j\hat{p}_k\cdot\varepsilon_{ij'k'}\hat{r}_{j'}\hat{p}_{k'}$$

$$
\begin{aligned}
&= (\delta_{jj'}\delta_{kk'} - \delta_{jk'}\delta_{kj'})\hat{r}_j\hat{p}_k\hat{r}_{j'}\hat{p}_{k'} = \hat{r}_j\hat{p}_k\hat{r}_j\hat{p}_k - \hat{r}_j\hat{p}_k\hat{r}_k\hat{p}_j \\
&= \hat{r}_j\{\hat{r}_j\hat{p}_k + [\hat{p}_k, \hat{r}_j]\}\hat{p}_k - \hat{r}_j\{\hat{r}_k\hat{p}_k + [\hat{p}_k, \hat{r}_k]\}\hat{p}_j \\
&= \hat{r}_j\hat{r}_j\hat{p}_k\hat{p}_k - \mathrm{i}\hbar\delta_{kj}\hat{r}_j\hat{p}_k + 3\mathrm{i}\hbar\hat{r}_j\hat{p}_j - \hat{r}_k\{\hat{p}_k\hat{r}_j + [\hat{r}_j, \hat{p}_k]\}\hat{p}_j \\
&= \hat{r}_j\hat{r}_j\hat{p}_k\hat{p}_k - \mathrm{i}\hbar\hat{r}_j\hat{p}_j + 3\mathrm{i}\hbar\hat{r}_j\hat{p}_j - (\hat{r}_j\hat{p}_j)\hat{r}_k\hat{p}_k - \mathrm{i}\delta_{kj}\hbar\hat{r}_k\hat{p}_j \\
&= \hat{\boldsymbol{r}}^2\hat{\boldsymbol{p}}^2 - (\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})^2 + \mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}
\end{aligned}
$$

其中，对 Levi-Civita 全反对称张量的缩并用到了题 4.44 附录中的式 (4.86a). 利用坐标表象动量算符表达式 $\hat{\boldsymbol{p}} = -\mathrm{i}\hbar\nabla$，可知

$$
\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{p}}^2 &= -\hbar^2\nabla^2 = -\hbar^2\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\} \\
&= -\hbar^2\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{r^2} = \hat{p}_r^2 + \frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{r^2}
\end{aligned}
$$

说明 1 直接利用题 4.44 所列的关系式，可得题中式 (4.93)的另一种证法

$$
\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{L}}^2 &= (\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}}) = [(\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\times\hat{\boldsymbol{r}}]\cdot\hat{\boldsymbol{p}} \\
&= -[(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{r}})\times\hat{\boldsymbol{r}}]\cdot\hat{\boldsymbol{p}} = -[(\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{r}})\hat{\boldsymbol{r}} - \hat{\boldsymbol{p}}(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{r}})]\cdot\hat{\boldsymbol{p}} \\
&= -\{(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} - 3\mathrm{i}\hbar)\hat{\boldsymbol{r}} - [(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{r}})\hat{\boldsymbol{p}} - 2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{r}}]\}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} \\
&= \hat{\boldsymbol{r}}^2\hat{\boldsymbol{p}}^2 - (\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})^2 + \mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}
\end{aligned}
$$

说明 2 关于式 (4.94)也可如下证明：由于

$$
\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} = \hat{\boldsymbol{r}}\cdot(-\mathrm{i}\hbar)\nabla = -\mathrm{i}\hbar r\frac{\partial}{\partial r}, \quad (\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})^2 = -\hbar^2\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)^2
$$

这样利用式 (4.93)，可得

$$
\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{L}}^2 &= \hat{\boldsymbol{r}}^2\hat{\boldsymbol{p}}^2 - (\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})^2 + \mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} = \hat{\boldsymbol{r}}^2\hat{\boldsymbol{p}}^2 + \hbar^2\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)^2 + \hbar^2 r\frac{\partial}{\partial r} \\
&= r^2\hat{\boldsymbol{p}}^2 + \hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) = \hat{\boldsymbol{r}}^2\hat{\boldsymbol{p}}^2 - \hat{\boldsymbol{r}}^2\hat{p}_r^2
\end{aligned}
$$

或者 $\hat{\boldsymbol{L}}^2 = \hat{\boldsymbol{r}}^2\hat{\boldsymbol{p}}^2 - \hat{\boldsymbol{r}}^2\hat{p}_r^2$，此式两边左乘 r^{-2}，即得 $\hat{\boldsymbol{p}}^2 = \hat{p}_r^2 + r^{-2}\hat{\boldsymbol{L}}^2$.

说明 3 在证明算符恒等式时可考虑将其作用到任意波函数上，这不是必须的，但有助于初学者运算时不漏项，如本题对于式 (4.97)的导出.

若采用球坐标，式 (4.97)也可如下导出：在球坐标下

$$
\hat{\boldsymbol{p}} = -\mathrm{i}\hbar\nabla = -\mathrm{i}\hbar\left(\boldsymbol{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \boldsymbol{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \boldsymbol{e}_\varphi\frac{1}{r\sin\varphi}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)
$$

这样

$$
\boldsymbol{e}_r\cdot\nabla = \boldsymbol{e}_r\cdot\left(\boldsymbol{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \boldsymbol{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \boldsymbol{e}_\varphi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) = \frac{\partial}{\partial r}
$$

$$\begin{aligned}\nabla\cdot\boldsymbol{e}_r &= \boldsymbol{e}_r\cdot\nabla+(\nabla\cdot\boldsymbol{e}_r)=\frac{\partial}{\partial r}+\left(\boldsymbol{e}_r\frac{\partial}{\partial r}+\boldsymbol{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}+\boldsymbol{e}_\varphi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\cdot\boldsymbol{e}_r\\ &= \frac{\partial}{\partial r}+\boldsymbol{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\cdot\boldsymbol{e}_r+\boldsymbol{e}_\varphi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\cdot\boldsymbol{e}_r\\ &= \frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}(\boldsymbol{e}_\theta\cdot\boldsymbol{e}_\theta+\boldsymbol{e}_\varphi\cdot\boldsymbol{e}_\varphi)=\frac{\partial}{\partial r}+\frac{2}{r}\end{aligned}$$

因而

$$\begin{aligned}p_r &= \frac{1}{2}[\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{e}_r+\boldsymbol{e}_r\cdot\hat{\boldsymbol{p}}]=-\frac{\mathrm{i}}{2}\hbar[\boldsymbol{e}_r\cdot\nabla+\nabla\cdot\boldsymbol{e}_r]\\ &= -\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)\end{aligned}$$

说明 4　由于

$$\hat{p}_r^2=\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)=-\hbar^2\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}=-\hbar^2\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r$$

式 (4.94)有另外的形式

$$\hat{\boldsymbol{p}}^2=\frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{r^2}+p_r^2=\frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{r^2}-\hbar^2\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}=\frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{r^2}-\hbar^2\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r \tag{4.94′}$$

4.47　$\hat{\boldsymbol{L}}$、$\hat{\boldsymbol{r}}$ 与 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 的混合积与三重叉积

题 4.47　证明

$$\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)\cdot\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}=-\frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{r} \tag{4.99}$$

$$\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\cdot\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)=-\frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{r}+2\hbar^2\frac{\partial}{\partial r} \tag{4.100}$$

$$\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\times\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)+\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)\times\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}=2\mathrm{i}\hbar\frac{\hat{\boldsymbol{L}}}{r} \tag{4.101}$$

证法一　我们首先注意角动量算符

$$\hat{\boldsymbol{L}}=\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}}=-\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{r}}\times\nabla=-\mathrm{i}\hbar\left(\boldsymbol{\varphi}_0\frac{\partial}{\partial\theta}-\boldsymbol{\theta}_0\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

只作用于角度变量. 利用[①] $(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\cdot\boldsymbol{C}=\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})$ 得

$$\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)\cdot\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}=\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)\cdot\hat{\boldsymbol{r}}\frac{1}{r}=\hat{\boldsymbol{L}}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{r}})\frac{1}{r}$$

① 也可利用 $\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)\cdot\hat{\boldsymbol{r}}=\varepsilon_{ijk}\hat{L}_j\hat{p}_k\hat{r}_i$ 直接验证.

$$= -\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}\frac{1}{r} = -\hat{\boldsymbol{L}}^2\frac{1}{r} = -\frac{1}{r}\hat{\boldsymbol{L}}^2 = -\frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{r}$$

这给出式 (4.99). 由式 (4.80)可得

$$\begin{aligned}\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\cdot\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right) &= \frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\cdot\left(-\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}+2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}\right)\\ &= -\frac{1}{r}(\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\cdot\hat{\boldsymbol{L}}+2\hbar^2\frac{\partial}{\partial r}\\ &= -\frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{r}+2\hbar^2\frac{\partial}{\partial r}\end{aligned}$$

这给出式 (4.100). 再由[①]

$$\begin{aligned}&[\boldsymbol{A}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})]_\alpha = \boldsymbol{A}\cdot(B_\alpha\boldsymbol{C})-(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})C_\alpha,\\ &[(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\times\boldsymbol{C}]_\alpha = \boldsymbol{A}\cdot(B_\alpha\boldsymbol{C})-A_\alpha(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{C})\end{aligned}\tag{4.102}$$

直接演算

$$\begin{aligned}&\left[\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\times\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)+\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)\times\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\right]_k\\ =\ &\frac{1}{r}\left[\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\left(\hat{L}_k\hat{\boldsymbol{p}}\right)-\left(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}\right)\hat{p}_k\right]+\left[\hat{\boldsymbol{L}}\cdot(\hat{p}_k\hat{\boldsymbol{r}})-\hat{L}_k(\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{r}})\right]\frac{1}{r}\\ =\ &\frac{1}{r}\hat{r}_j\hat{L}_k\hat{p}_j-\hat{L}_k\hat{p}_j\frac{1}{r}\hat{r}_j+\left[\hat{\boldsymbol{L}}\cdot(\hat{p}_k\hat{\boldsymbol{r}})-\left(\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\right)\hat{r}_k\right]\frac{1}{r}\\ =\ &\left[\frac{1}{r}\hat{r}_j,\hat{L}_k\hat{p}_j\right]+\left[\hat{\boldsymbol{L}}\times(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{r}})\right]_k\frac{1}{r}\\ =\ &\left[\frac{1}{r}\hat{r}_j,\hat{L}_k\hat{p}_j\right]-\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{L}}\right)_k\frac{1}{r} = \left[\frac{1}{r}\hat{r}_j,\hat{L}_k\hat{p}_j\right]-\mathrm{i}\hbar\hat{L}_k\frac{1}{r}\end{aligned}\tag{4.103}$$

上面用了 $\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}=\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}=0$[②]等，式中采用 Einstein 求和约定，而对 Levi-Civita 全反对称张量的缩并用到了题 4.44 附录中的式 (4.86b). 而

$$\begin{aligned}\left[\frac{1}{r}\hat{r}_j,\hat{L}_k\hat{p}_j\right] &= \frac{1}{r}\left[\hat{r}_j,\hat{L}_k\hat{p}_j\right]+\left[\frac{1}{r},\hat{L}_k\hat{p}_j\right]\hat{r}_j = \frac{1}{r}\hat{L}_k[\hat{r}_j,\hat{p}_j]+\frac{1}{r}\left[\hat{r}_j,\hat{L}_k\right]\hat{p}_j+\hat{L}_k\left[\frac{1}{r},\hat{p}_j\right]\hat{r}_j\\ &= \frac{3\mathrm{i}\hbar}{r}\hat{L}_k+\frac{\mathrm{i}\hbar}{r}\varepsilon_{jki}\hat{r}_i\hat{p}_j-\mathrm{i}\hbar\frac{\hat{L}_k}{r} = \frac{3\mathrm{i}\hbar}{r}\hat{L}_k\end{aligned}$$

① 借助 Levi-Civita 全反对称张量直接演算 [注意对 q 数乘积不能无条件交换位置，其中对全反对称张量的缩并用题 4.44 附录中的式 (4.86a)]

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{A}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})]_\alpha &= \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\beta(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})_\gamma = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\beta\varepsilon_{\gamma\mu\nu}B_\mu C_\nu\\ &= \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\mu\nu\gamma}A_\beta B_\mu C_\nu = (\delta_{\alpha\mu}\delta_{\beta\nu}-\delta_{\alpha\nu}\delta_{\beta\mu})A_\beta B_\mu C_\nu\\ &= A_\beta B_\alpha C_\beta - A_\beta B_\beta C_\alpha = \boldsymbol{A}\cdot(B_\alpha\boldsymbol{C})-(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})C_\alpha,\\ [(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\times\boldsymbol{C}]_\alpha &= \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})_\beta C_\gamma = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\beta\mu\nu}A_\mu B_\nu C_\gamma\\ &= -\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\mu\beta\nu}A_\mu B_\nu C_\gamma = (-\delta_{\alpha\mu}\delta_{\gamma\nu}+\delta_{\alpha\nu}\delta_{\gamma\mu})A_\mu B_\nu C_\gamma\\ &= A_\gamma B_\alpha C_\gamma - A_\alpha B_\gamma C_\gamma = \boldsymbol{A}\cdot(B_\alpha\boldsymbol{C})-A_\alpha(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{C})\end{aligned}$$

② 见第 4.45 题.

代入式 (4.103) 即得

$$\left[\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\times\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)+\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)\times\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\right]_k=\frac{2\mathrm{i}\hbar}{r}\hat{L}_k$$

这给出式 (4.101).

证法二　下面各式采用 Einstein 求和约定.

$$\begin{aligned}\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)\cdot\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}&=\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)_i\frac{\hat{r}_i}{r}=\varepsilon_{ijk}\hat{L}_j\hat{p}_k\frac{\hat{r}_i}{r}\\&=\hat{L}_j\varepsilon_{ijk}\hat{r}_i\hat{p}_k\frac{1}{r}=-\hat{L}_j\varepsilon_{jik}\hat{r}_i\hat{p}_k\frac{1}{r}\\&=-\hat{L}_j\hat{L}_j\frac{1}{r}=-\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}\frac{1}{r}=-\hat{\boldsymbol{L}}^2\frac{1}{r}=-\frac{1}{r}\hat{\boldsymbol{L}}^2=-\frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{r}\end{aligned}$$

这给出式 (4.99). 而

$$\begin{aligned}\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\cdot\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)&=\frac{\hat{r}_i}{r}\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)_i=\frac{\hat{r}_i}{r}\varepsilon_{ijk}\hat{L}_j\hat{p}_k\\&=\frac{1}{r}\varepsilon_{ijk}\hat{r}_i\left\{\hat{p}_k\hat{L}_j+\left[\hat{L}_j,\hat{p}_k\right]\right\}\\&=\frac{1}{r}\varepsilon_{ijk}\hat{r}_i\hat{p}_k\hat{L}_j+\frac{1}{r}\varepsilon_{ijk}\hat{r}_i\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{jkl}\hat{p}_l\\&=-\frac{1}{r}\varepsilon_{jik}\hat{r}_i\hat{p}_k\hat{L}_j+\frac{1}{r}\varepsilon_{ijk}\hat{r}_i\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ljk}\hat{p}_l=-\frac{1}{r}\hat{\boldsymbol{L}}^2+2\mathrm{i}\hbar\delta_{il}\hat{r}_i\hat{p}_l\\&=-\frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{r}+2\hbar^2\frac{\partial}{\partial r}\end{aligned}$$

这给出式 (4.100). 最后

$$\begin{aligned}&\left[\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\times\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)+\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)\times\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\right]_k\\=&\varepsilon_{ijk}\frac{\hat{r}_i}{r}\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)_j+\varepsilon_{ijk}\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)_i\frac{\hat{r}_j}{r}\\=&\varepsilon_{ijk}\frac{\hat{r}_i}{r}\varepsilon_{jlm}\hat{L}_l\hat{p}_m+\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{ilm}\hat{L}_l\hat{p}_m\frac{\hat{r}_j}{r}\\=&\left(\delta_{im}\delta_{kl}-\delta_{il}\delta_{km}\right)\frac{\hat{r}_i}{r}\hat{L}_l\hat{p}_m+\left(\delta_{jl}\delta_{km}-\delta_{jm}\delta_{kl}\right)\hat{L}_l\hat{p}_m\frac{\hat{r}_j}{r}\\=&\frac{\hat{r}_i}{r}\hat{L}_k\hat{p}_i-\frac{\hat{r}_i}{r}\hat{L}_i\hat{p}_k+\hat{L}_j\hat{p}_k\frac{\hat{r}_j}{r}-\hat{L}_k\hat{p}_j\frac{\hat{r}_j}{r}\\=&\frac{\hat{r}_i}{r}\hat{p}_i\hat{L}_k+\frac{\hat{r}_i}{r}\left[\hat{L}_k,\hat{p}_i\right]-0+\left[\hat{L}_j,\hat{p}_k\right]\frac{\hat{r}_j}{r}+\hat{p}_k\hat{L}_j\frac{\hat{r}_j}{r}-\hat{L}_k\hat{p}_j\frac{\hat{r}_j}{r}\\=&\hat{L}_k\left(\frac{\hat{r}_i}{r}\hat{p}_i-\hat{p}_i\frac{\hat{r}_i}{r}\right)+\frac{\hat{r}_i}{r}\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{kij}\hat{p}_j-0+\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{jki}\hat{p}_i\frac{\hat{r}_j}{r}+0\\=&2\mathrm{i}\hbar\frac{\hat{L}_k}{r}\end{aligned}$$

其中，利用了 $\left[\hat{\boldsymbol{L}},\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\right]=0$ 以及式 (4.96)，对 Levi-Civita 全反对称张量的缩并用到了题 4.44 附录中的式 (4.86). 由上式即可得到式 (4.101).

证法三　[关于式 (4.101)] 利用式 (4.80)，即得

$$\hat{\boldsymbol{r}}\times\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)=2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{L}}-\hat{\boldsymbol{r}}\times\left(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}\right)\tag{4.104}$$

再由式 (4.102)，即得

$$\begin{aligned}\left[\hat{\boldsymbol{r}}\times\left(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}\right)\right]_k &= \hat{\boldsymbol{r}}\hat{p}_k\cdot\hat{\boldsymbol{L}}-(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})\,\hat{L}_k\\ &= \{\hat{p}_k\hat{\boldsymbol{r}}+[\hat{\boldsymbol{r}},\hat{p}_k]\}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}-(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})\,\hat{L}_k\\ &= \hat{p}_k\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}+\mathrm{i}\hbar\hat{L}_k-(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})\,\hat{L}_k\\ &= (\mathrm{i}\hbar-\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})\,\hat{L}_k\end{aligned}$$

也就是

$$\hat{\boldsymbol{r}}\times\left(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}\right)=(\mathrm{i}\hbar-\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})\,\hat{\boldsymbol{L}}\tag{4.105}$$

代入式 (4.104)，立得

$$\hat{\boldsymbol{r}}\times\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)=\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{L}}+(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})\,\hat{\boldsymbol{L}}\tag{4.106}$$

上式两边左乘 $\dfrac{1}{r}$，即得

$$\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\times\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)=\mathrm{i}\hbar\frac{\hat{\boldsymbol{L}}}{r}+\frac{1}{r}(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})\,\hat{\boldsymbol{L}}\tag{4.107}$$

类似的，由式 (4.80) 得

$$\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)\times\hat{\boldsymbol{r}}=-2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{L}}-\left(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}\right)\times\hat{\boldsymbol{r}}\tag{4.104$'$}$$

上式两边右乘 $\dfrac{1}{r}$，即得

$$\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)\times\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}=-2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{L}}\frac{1}{r}-\left(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}\right)\times\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\tag{4.108}$$

对式 (4.107) 取 Hermite 共轭得

$$\begin{aligned}\left(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}\right)\times\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r} &= -\mathrm{i}\hbar\frac{\hat{\boldsymbol{L}}}{r}+\hat{\boldsymbol{L}}\left(\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\right)=-\mathrm{i}\hbar\frac{\hat{\boldsymbol{L}}}{r}+\hat{\boldsymbol{L}}\left(\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}-2\mathrm{i}\hbar\frac{1}{r}\right)\\ &= \hat{\boldsymbol{L}}\left(\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\right)-3\mathrm{i}\hbar\frac{\hat{\boldsymbol{L}}}{r}=\left(\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\right)\hat{\boldsymbol{L}}-3\mathrm{i}\hbar\frac{\hat{\boldsymbol{L}}}{r}\end{aligned}\tag{4.109}$$

其中，利用了式 (4.96)，最后一个等号是由于 $\dfrac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}=-\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial r}$ 和 $\hat{\boldsymbol{L}}$ 对易. 把式 (4.109) 代入式 (4.108)，即可得到

$$\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)\times\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}=-\left(\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\right)\hat{\boldsymbol{L}}+\mathrm{i}\hbar\frac{\hat{\boldsymbol{L}}}{r}\tag{4.110}$$

式 (4.107) 加式 (4.110)，即给出所要证的式 (4.101).

4.48　关于 $\hat{\boldsymbol{L}}$、$\hat{\boldsymbol{p}}$ 的几个代数关系

题 4.48　证明

$$
\begin{aligned}
&(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})^2=(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})^2=-(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})=\hat{\boldsymbol{L}}^2\hat{\boldsymbol{p}}^2\\
&(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})\cdot(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})=-\hat{\boldsymbol{L}}^2p^2-4\hbar^2\hat{\boldsymbol{p}}^2\\
&(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\times(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})=-\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{L}}\hat{\boldsymbol{p}}^2
\end{aligned}
$$

证法一　直接演算，依次利用式 (4.80)、式(4.82)，可得

$$
\begin{aligned}
\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)^2&=\left(2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}-\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}\right)^2\\
&=(2\mathrm{i}\hbar)^2\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\left(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}\right)^2-2\mathrm{i}\hbar\left[\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\left(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}\right)+\left(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}\right)\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\right]\\
&=(2\mathrm{i}\hbar)^2\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\left(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}\right)^2-2\mathrm{i}\hbar\left[\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\left(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}\right)+\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)\right]\\
&=(2\mathrm{i}\hbar)^2\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\left(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}\right)^2-2\mathrm{i}\hbar\left[\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\left(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}\right)+\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\left(2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}-\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}\right)\right]\\
&=\left(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}\right)^2
\end{aligned}
$$

再利用式 (4.81)，可得

$$
\begin{aligned}
\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)^2&=\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)\cdot\left(2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}-\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}\right)\\
&=-\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)\cdot\left(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}\right)
\end{aligned}
$$

利用式 (4.81)、式(4.82)，可得

$$
\begin{aligned}
\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)^2&=\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)\cdot\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)=\left[\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)\times\hat{\boldsymbol{L}}\right]\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\\
&=\left[\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\left(\hat{p}_i\hat{\boldsymbol{L}}\right)-\hat{L}_i\left(\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}\right)\right]\hat{p}_i\\
&=\hat{L}_j\hat{p}_i\hat{L}_j\hat{p}_i=\hat{L}_j\left(\hat{L}_j\hat{p}_i-\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{p}_k\right)\hat{p}_i=\hat{\boldsymbol{L}}^2\hat{\boldsymbol{p}}^2
\end{aligned}
$$

从而有

$$
(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})^2=(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})^2=-(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})=\hat{\boldsymbol{L}}^2\hat{\boldsymbol{p}}^2 \tag{4.111}
$$

接下来利用式 (4.80)，可得

$$
\begin{aligned}
-\left(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}\right)\cdot\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)&=-\left(2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}-\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)\cdot\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)\\
&=-2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\left(2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}-\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}\right)+\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)^2\\
&=4\hbar^2\hat{\boldsymbol{p}}^2+\hat{\boldsymbol{L}}^2\hat{\boldsymbol{p}}^2
\end{aligned}
$$

也就是

$$
(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})\cdot(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})=-\hat{\boldsymbol{L}}^2\hat{\boldsymbol{p}}^2-4\hbar^2\hat{\boldsymbol{p}}^2 \tag{4.112}
$$

最后利用式 (4.83)

$$\begin{aligned}\left[\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)\times\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)\right]_i &= \hat{\boldsymbol{L}}\cdot\left[\hat{p}_i\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)\right]-\hat{L}_i[\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)]\\ &= \hat{L}_j\hat{p}_i\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)_j-\hat{L}_i\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\left(2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}-\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}\right)\\ &= \left(\hat{p}_i\hat{L}_j-\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{p}_k\right)\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{p}\right)_j-2\mathrm{i}\hbar\hat{L}_i\hat{\boldsymbol{p}}^2\\ &= \hat{p}_i\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)+\mathrm{i}\hbar\left[\hat{\boldsymbol{p}}\times\left(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}\right)\right]_i-2\mathrm{i}\hbar\hat{L}_i\hat{\boldsymbol{p}}^2\\ &= \mathrm{i}\hbar\left[\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\left(\hat{L}_i\hat{\boldsymbol{p}}\right)-\left(\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}\right)\hat{p}_i\right]-2\mathrm{i}\hbar\hat{L}_i\hat{\boldsymbol{p}}^2\\ &= \mathrm{i}\hbar\hat{p}_j\hat{L}_i\hat{p}_j-2\mathrm{i}\hbar\hat{L}_i\hat{\boldsymbol{p}}^2\\ &= \mathrm{i}\hbar\left(\hat{L}_i\hat{p}_j-\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{p}_k\right)\hat{p}_j-2\mathrm{i}\hbar\hat{L}_i\hat{\boldsymbol{p}}^2\\ &= -\mathrm{i}\hbar\hat{L}_i\hat{\boldsymbol{p}}^2\end{aligned}$$

也就有

$$(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\times(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})=-\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{L}}\hat{\boldsymbol{p}}^2 \tag{4.113}$$

证法二　利用 $\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})=(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\cdot\boldsymbol{C}$[①] 知

$$\begin{aligned}(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\cdot(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}) &= \left[(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\times\hat{\boldsymbol{L}}\right]\cdot\hat{\boldsymbol{p}}=\left[\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{p}_i\hat{\boldsymbol{L}}-\hat{L}_i(\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}})\right]\hat{p}_i\\ &= \hat{L}_k\hat{p}_i\hat{L}_k\hat{p}_i=\hat{L}_k\left\{\hat{L}_k\hat{p}_i+\left[\hat{p}_i,\hat{L}_k\right]\right\}\hat{p}_i\\ &= \hat{\boldsymbol{L}}^2p^2-\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{kij}\hat{L}_k\hat{p}_j\hat{p}_i=\hat{\boldsymbol{L}}^2\hat{\boldsymbol{p}}^2\end{aligned}$$

以及

$$\begin{aligned}(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}) &= \left[(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})\times\hat{\boldsymbol{p}}\right]\cdot\hat{\boldsymbol{L}}=\left[\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{L}_i\hat{\boldsymbol{p}}-\hat{p}_i(\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})\right]\hat{L}_i\\ &= \hat{p}_k\hat{L}_i\hat{p}_k\hat{L}_i=\hat{p}_k\left\{\hat{p}_k\hat{L}_i+\left[\hat{L}_i,\hat{p}_k\right]\right\}\hat{L}_i\\ &= \hat{\boldsymbol{p}}^2\hat{\boldsymbol{L}}^2-\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{kij}\hat{p}_k\hat{p}_j\hat{L}_i=\hat{\boldsymbol{L}}^2\hat{\boldsymbol{p}}^2\end{aligned}$$

再由题 4.44 式 (4.80)，即有 $(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})=(2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}-\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})=-(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})$. 而

$$\begin{aligned}(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})\cdot(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}) &= \varepsilon_{ijk}\hat{p}_j\hat{L}_k\cdot\varepsilon_{ij'k'}\hat{L}_{j'}\hat{p}_{k'}\\ &= [\delta_{jj'}\delta_{kk'}-\delta_{jk'}\delta_{kj'}]\hat{p}_j\hat{L}_k\hat{L}_{j'}\hat{p}_{k'}=\hat{p}_j\hat{L}_k\hat{L}_j\hat{p}_k-\hat{p}_j\hat{L}_k\hat{L}_k\hat{p}_j\\ &= \hat{p}_j\{\hat{L}_j\hat{L}_k+[\hat{L}_k,\hat{L}_j]\}\hat{p}_k-\{\hat{L}_k\hat{p}_j+[\hat{p}_j,\hat{L}_k]\}\hat{L}_k\hat{p}_j\\ &= 0+\hat{p}_j(\mathrm{i}\hbar)\varepsilon_{ikj}\hat{L}_i\hat{p}_k-\hat{L}_k\hat{p}_j\hat{L}_k\hat{p}_j+\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ikj}\hat{p}_i\hat{L}_k\hat{p}_j\end{aligned}$$

① 对标量三重积直接演算

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C}) &= A_\alpha(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})_\alpha=A_\alpha\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}B_\beta C_\gamma=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\alpha B_\beta C_\gamma,\\ (\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\cdot\boldsymbol{C} &= (\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})_\gamma C_\gamma=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\alpha B_\beta C_\gamma=\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C}).\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= -\hat{L}_k\{\hat{L}_k\hat{p}_j+[\hat{p}_j,\hat{L}_k]\}\hat{p}_j+2\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{p}_i\hat{L}_j\hat{p}_k\\
&= -\hat{L}_k\hat{L}_k\hat{p}_j\hat{p}_j-\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k\hat{p}_i\hat{p}_j+2\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}\{\hat{L}_j\hat{p}_i+[\hat{p}_i,\hat{L}_j]\}\hat{p}_k\\
&= -\hat{\boldsymbol{L}}^2\hat{\boldsymbol{p}}^2+0+0+2\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}(\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk'}\hat{p}_{k'})\hat{p}_k\\
&= -\hat{\boldsymbol{L}}^2\hat{\boldsymbol{p}}^2-4\delta_{kk'}\hbar^2\hat{p}_{k'}\hat{p}_k=-\hat{\boldsymbol{L}}^2\hat{\boldsymbol{p}}^2-4\hbar^2\hat{\boldsymbol{p}}^2
\end{aligned}
$$

以上推导过程一些地方用了全反对称张量 ε_{ijk} 的性质. 倒数第二个等号用到了题 4.44 附录中的式 (4.86b)；倒数第三个等号用到了 ε_{ijk} 的反对称性质，使得 $\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k\hat{p}_i\hat{p}_j=-\varepsilon_{jik}\hat{L}_k\hat{p}_i\hat{p}_j=-\varepsilon_{jik}\hat{L}_k\hat{p}_j\hat{p}_i=-\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k\hat{p}_i\hat{p}_j$. 即有 $\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k\hat{p}_i\hat{p}_j=-\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k\hat{p}_i\hat{p}_j$，对一个量取负等于其本身，这个量只能为零，也就是 $\varepsilon_{ijk}\hat{L}_k\hat{p}_i\hat{p}_j=0$. 我们可注意 $[\hat{\boldsymbol{L}}^2,\hat{p}_i]\neq 0$，虽然 $[\hat{\boldsymbol{L}}^2,\hat{L}_i]=0$. 现在验证最后一个等式

$$
\begin{aligned}
\Big[(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\times(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\Big]_i &= \hat{L}_k\hat{p}_i(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})_k-\hat{L}_i\hat{\boldsymbol{p}}\cdot(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\\
&= \{\hat{p}_i\hat{L}_k+[\hat{L}_k,\hat{p}_i]\}(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})_k-\hat{L}_i\hat{\boldsymbol{p}}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}}+\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\\
&= 0+\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{kij}\hat{p}_j\varepsilon_{ki'j'}\hat{L}_{i'}\hat{p}_{j'}-\hat{L}_i\hat{\boldsymbol{p}}\cdot(2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}})\\
&= \mathrm{i}(\delta_{ii'}\delta_{jj'}-\delta_{ij'}\delta_{ji'})\hat{p}_j\hat{L}_{i'}\hat{p}_{j'}-\hat{L}_i\hat{\boldsymbol{p}}\cdot(2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}})\\
&= \mathrm{i}\hbar\{\hat{p}_j\hat{L}_i\hat{p}_j-\hat{p}_j\hat{L}_j\hat{p}_i\}-2\mathrm{i}\hbar\hat{L}_i\hat{\boldsymbol{p}}^2\\
&= \mathrm{i}\hbar\{\hat{L}_i\hat{p}_j+[\hat{p}_j,\hat{L}_i]\}\hat{p}_j-0-2\mathrm{i}\hbar\hat{L}_i\hat{\boldsymbol{p}}^2\\
&= \mathrm{i}\hbar\hat{L}_i\hat{\boldsymbol{p}}^2+\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{kij}\hat{p}_k\hat{p}_j-0-2\mathrm{i}\hbar\hat{L}_i\hat{\boldsymbol{p}}^2=-\mathrm{i}\hbar\hat{L}_i\hat{\boldsymbol{p}}^2
\end{aligned}
$$

即 $(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\times(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})=-\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{L}}\hat{\boldsymbol{p}}^2$.

4.49　算符的逆

题 4.49　设 λ 是一个小量，算符 $\hat{A}$ 之逆 $\hat{A}^{-1}$ 存在，证明：

$$(\hat{A}-\lambda\hat{B})^{-1}=\hat{A}^{-1}+\lambda\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\lambda^2\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\cdots$$

证法一　根据算符逆运算的法则

$$
\begin{aligned}
\left(\hat{A}-\lambda\hat{B}\right)^{-1} &= \left[\left(1-\lambda\hat{B}\hat{A}^{-1}\right)\hat{A}\right]^{-1}=\hat{A}^{-1}\left(1-\lambda\hat{B}\hat{A}^{-1}\right)^{-1}\\
&= \hat{A}^{-1}f(\lambda\hat{B}\hat{A}^{-1})
\end{aligned}
\tag{4.114}
$$

其中，$f(\lambda\hat{B}\hat{A}^{-1})=\left(1-\lambda\hat{B}\hat{A}^{-1}\right)^{-1}$，也就是函数 $f(x)=\dfrac{1}{1-x}$ 的自变量取为 $x=\lambda\hat{B}\hat{A}^{-1}$. 由于 $f(x)$ 有如下级数展开式 (整函数)：

$$f(x)=1+x+x^2+\cdots+x^n+\cdots$$

$f(\lambda\hat{B}\hat{A}^{-1})=\left(1-\lambda\hat{B}\hat{A}^{-1}\right)^{-1}$ 也可如下表示为级数形式：

$$f(\lambda\hat{B}\hat{A}^{-1}) = \left(1-\lambda\hat{B}\hat{A}^{-1}\right)^{-1}$$

$$= 1+\lambda\hat{B}\hat{A}^{-1}+\lambda^2\left(\hat{B}\hat{A}^{-1}\right)^2+\cdots+\lambda^n\left(\hat{B}\hat{A}^{-1}\right)^n+\cdots \tag{4.115}$$

将上式代入式 (4.114)，即得

$$\left(\hat{A}-\lambda\hat{B}\right)^{-1}=\hat{A}^{-1}+\lambda\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\lambda^2\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\cdots \tag{4.116}$$

证法二　(直接验算，需要考察左逆与右逆两种情形)

$$\begin{aligned}&\left(\hat{A}-\lambda\hat{B}\right)\left(\hat{A}^{-1}+\lambda\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\lambda^2\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\cdots\right)\\ =\ &1+\lambda\hat{B}\hat{A}^{-1}+\lambda^2\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\lambda^3\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\cdots\\ &-\lambda\hat{B}\hat{A}^{-1}-\lambda^2\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\lambda^3\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}-\cdots\\ =\ &1\end{aligned} \tag{4.117}$$

$$\begin{aligned}&\left(\hat{A}^{-1}+\lambda\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\lambda^2\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\cdots\right)\left(\hat{A}-\lambda\hat{B}\right)\\ =\ &1+\lambda\hat{A}^{-1}\hat{B}+\lambda^2\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}+\lambda^3\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}+\cdots\\ &-\lambda\hat{A}^{-1}\hat{B}-\lambda^2\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}-\lambda^3\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}-\cdots\\ =\ &1\end{aligned} \tag{4.118}$$

根据式 (4.117) 以及式 (4.118)，同样得到式 (4.116). 得证.

说明 1　在证法二中，可利用

$$\hat{A}^{-1}+\lambda\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\lambda^2\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\cdots=\hat{A}^{-1}\sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n\left(\hat{B}\hat{A}^{-1}\right)^n$$

这样

$$\begin{aligned}&\left(\hat{A}-\lambda\hat{B}\right)\left(\hat{A}^{-1}+\lambda\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\lambda^2\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\cdots\right)\\ =\ &\left(\hat{A}-\lambda\hat{B}\right)\hat{A}^{-1}\sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n\left(\hat{B}\hat{A}^{-1}\right)^n\\ =\ &\sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n\left(\hat{B}\hat{A}^{-1}\right)^n-\lambda\hat{B}\hat{A}^{-1}\sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n\left(\hat{B}\hat{A}^{-1}\right)^n\\ =\ &\sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n\left(\hat{B}\hat{A}^{-1}\right)^n-\sum_{n=1}^{\infty}\lambda^n\left(\hat{B}\hat{A}^{-1}\right)^n\\ =\ &\lambda^0\left(\hat{B}\hat{A}^{-1}\right)^0=1\end{aligned}$$

这给出式 (4.117). 同样利用

$$\hat{A}^{-1}+\lambda\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\lambda^2\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\cdots=\sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n\left(\hat{A}^{-1}\hat{B}\right)^n\hat{A}^{-1}$$

可给出式 (4.118)，因而式 (4.116) 成立.

说明 2　在证法二中，需要考察左逆与右逆两种情形. 和有限维空间情况不同，一个算符 U 的逆 U^{-1} 需要证明 U^{-1} 既是对 U 右乘的逆又是对 U 左乘的逆. 无限维空间情况下，任一算符 U 的逆算符有四种情况:

(i)　不存在左逆算符但有无穷多右逆算符;

(ii)　不存在右逆算符但有无穷多左逆算符;

(iii)　既无左逆也无右逆;

(iv)　有一个左逆算符和一个右逆算符，并且它俩相等，唯有此时可简单地写为 U^{-1}.

见张永德, 量子力学 (第 4 版)[M], 北京: 科学出版社, 2017, P.111.

4.50　算符的导数

题 4.50　设算符 $\hat{A}(\xi)$ 依赖于一个连续变化的参数 ξ，如果下式右边极限存在:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\hat{A}(\xi)\equiv\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{\hat{A}(\xi+\varepsilon)-\hat{A}(\xi)}{\varepsilon} \tag{4.119}$$

就称 $\hat{A}(\xi)$ 对 ξ 是可微的，并定义 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\hat{A}(\xi)$ 为 $\hat{A}(\xi)$ 对 ξ 的导数. 下面证明:

(1) 设 $\hat{A}(\xi)$ 与 $\hat{B}(\xi)$ 对 ξ 可微，则

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left(\hat{A}\hat{B}\right)=\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}\xi}\hat{B}+\hat{A}\frac{\mathrm{d}\hat{B}}{\mathrm{d}\xi} \tag{4.120}$$

(2) 算符指数函数的导数关系

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\exp\left(\mathrm{i}\hat{O}\xi\right)=\mathrm{i}\hat{O}\exp\left(\mathrm{i}\hat{O}\xi\right) \tag{4.121}$$

(3) 设 $\hat{A}(\xi)$ 之逆 $\hat{A}^{-1}$ 存在，$\hat{A}(\xi)$ 对 ξ 可微，则

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\hat{A}^{-1}=-\hat{A}^{-1}\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}\xi}\hat{A}^{-1} \tag{4.122}$$

提示　(3) 令 $\hat{A}=\hat{A}\hat{A}^{-1}\hat{A}$.

证明　(1) 根据题给定义

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left(\hat{A}\hat{B}\right)&=\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{\hat{A}(\xi+\varepsilon)\hat{B}(\xi+\varepsilon)-\hat{A}(\xi)\hat{B}(\xi)}{\varepsilon}\\&=\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{\hat{A}(\xi+\varepsilon)\hat{B}(\xi+\varepsilon)-\hat{A}(\xi)\hat{B}(\xi+\varepsilon)+\hat{A}(\xi)\hat{B}(\xi+\varepsilon)-\hat{A}(\xi)\hat{B}(\xi)}{\varepsilon}\\&=\lim_{\varepsilon\to 0}\left\{\frac{\hat{A}(\xi+\varepsilon)-\hat{A}(\xi)}{\varepsilon}\hat{B}(\xi+\varepsilon)+\hat{A}(\xi)\frac{\hat{B}(\xi+\varepsilon)-\hat{B}(\xi)}{\varepsilon}\right\}\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{\hat{A}(\xi+\varepsilon)-\hat{A}(\xi)}{\varepsilon}\lim_{\varepsilon\to 0}\hat{B}(\xi+\varepsilon)+\hat{A}(\xi)\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{\hat{B}(\xi+\varepsilon)-\hat{B}(\xi)}{\varepsilon}\\
&= \frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}\xi}\hat{B}+\hat{A}\frac{\mathrm{d}\hat{B}}{\mathrm{d}\xi}
\end{aligned}
$$

即得所证的式 (4.120). 上面最后一步还用了可微函数的连续性.

(2) 按题 4.39

$$
\exp\left[\mathrm{i}\hat{O}(\xi+\varepsilon)\right]=\exp\left(\mathrm{i}\hat{O}\xi+\mathrm{i}\hat{O}\varepsilon\right)=\exp\left(\mathrm{i}\hat{O}\xi\right)\exp\left(\mathrm{i}\hat{O}\varepsilon\right)
$$

这样利用题给定义得

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\exp\left(\mathrm{i}\hat{O}\xi\right) &= \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{\exp\left[\mathrm{i}\hat{O}(\xi+\varepsilon)\right]-\exp\left(\mathrm{i}\hat{O}\xi\right)}{\varepsilon}\\
&= \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{\exp\left(\mathrm{i}\hat{O}\xi\right)\exp\left(\mathrm{i}\hat{O}\varepsilon\right)-\exp\left(\mathrm{i}\hat{O}\xi\right)}{\varepsilon}\\
&= \lim_{\varepsilon\to 0}\exp\left(\mathrm{i}\hat{O}\xi\right)\frac{\exp\left(\mathrm{i}\hat{O}\varepsilon\right)-1}{\varepsilon}\\
&= \exp\left(\mathrm{i}\hat{O}\xi\right)\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1+\mathrm{i}\hat{O}\varepsilon+O(\varepsilon^2)-1}{\varepsilon}\\
&= \exp\left(\mathrm{i}\hat{O}\xi\right)\mathrm{i}\hat{O}=\mathrm{i}\hat{O}\exp\left(\mathrm{i}\hat{O}\xi\right)
\end{aligned}
$$

即得所证的式 (4.121).

(3) 设 $\hat{A}(\xi)$ 之逆 $\hat{A}^{-1}$ 存在, 则

$$
AA^{-1}=A^{-1}A=1
$$

此式对 ξ 微分得

$$
\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}\xi}A^{-1}+A\frac{\mathrm{d}A^{-1}}{\mathrm{d}\xi}=0
$$

上式两边左乘 A^{-1}, 即得所证的式 (4.122).

4.51　关于有限阶矩阵行列式、迹的几个等式

题 4.51　设有有限阶矩阵 A、B、C 与 S 等, 证明:

$$
\begin{aligned}
&\det(AB)=\det A\cdot\det B\\
&\det(S^{-1}AS)=\det A\\
&\mathrm{tr}(AB)=\mathrm{tr}(BA)\\
&\mathrm{tr}(ABC)=\mathrm{tr}(CAB)=\mathrm{tr}(BCA)\\
&\mathrm{tr}(S^{-1}AS)=\mathrm{tr}A
\end{aligned}
$$

证法一　设矩阵为 $n\times n$ 方阵，$A=(A)_{n\times n}=(a_{ij})_{n\times n}$，$B=(B)_{n\times n}=(b_{ij})_{n\times n}$. 欲证 $\det(AB)=\det A\cdot\det B$，如下构造 $2n\times 2n$ 矩阵：

$$D=\begin{pmatrix} A & 0 \\ -I_n & B \end{pmatrix}$$

显然 $\det D=\det A\cdot\det B$，下证 $\det D=\det(AB)$.

$$\begin{aligned} D &= \begin{pmatrix} A & 0 \\ -I & B \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & & & & \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & & & & \\ \vdots & & & \vdots & & & & \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & & & & \\ -1 & & & & b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1n} \\ & -1 & & & b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2n} \\ & & \ddots & & \vdots & & & \vdots \\ & & & -1 & b_{n1} & b_{n2} & \cdots & b_{nn} \end{pmatrix} \\ &\to \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2n} \\ \vdots & & & \vdots & \vdots & & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & c_{n1} & c_{n2} & \cdots & c_{nn} \\ -1 & & & & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ & -1 & & & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ & & \ddots & & \vdots & & & \vdots \\ & & & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & C \\ -I & 0 \end{pmatrix} = D' \end{aligned}$$

上面通过将第 1 列元素乘 $b_{1k}+$ 第 2 列元素乘 $b_{2k}+\cdots+$ 第 n 列元素乘 b_{nk} 的和加到第 $n+k$ 列得到. 故

$$(C)_{kl}=\sum_m (A)_{km}(B)_{ml}=(AB)_{kl}$$

这样有

$$\begin{aligned} \det D &= \det D' \\ &= \det\begin{pmatrix} A & C \\ -I & 0 \end{pmatrix} = (-1)^n \det\begin{pmatrix} -I & 0 \\ A & C \end{pmatrix} \\ &= (-1)^n\det(-I)\cdot\det C = (-1)^n(-1)^n\cdot\det(AB) \\ &= \det(AB) \end{aligned}$$

综合上面结果，即有

$$\det(AB)=\det A\cdot\det B \tag{4.123}$$

按照 tr 的定义得

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}(AB) &= \sum_n (AB)_{n,n} = \sum_n \sum_k a_{nk} b_{kn} \\ &= \sum_k \sum_n b_{kn} a_{nk} = \sum_k (BA)_{k,k} = \mathrm{tr}(BA)\end{aligned}$$

如此有

$$\mathrm{tr}(AB) = \mathrm{tr}(BA) \tag{4.124}$$

根据式 (4.123)，式 (4.124)，可以有下述推论：

$$\begin{gathered}\det(S^{-1}AS) = \det(ASS^{-1}) = \det A \\ \mathrm{tr}(S^{-1}AS) = \mathrm{tr}(ASS^{-1}) = \mathrm{tr}A \\ \mathrm{tr}(ABC) = \mathrm{tr}(BCA) = \mathrm{tr}(CAB)\end{gathered}$$

关于 $\det D = \det(AB) = \det A \cdot \det B$ 还有下面的证法二.

证法二　矩阵 A 的行列式可如下给出：

$$\det A = \sum_{p \in \mathcal{S}} \delta_p a_{i_1,1} a_{i_2,2} \cdots a_{i_n,n}$$

其中，$p = \begin{pmatrix} 12\cdots n \\ i_1 i_2 \cdots i_n \end{pmatrix}$ 为排列 $(12\cdots n)$ 变到 $(i_1 i_2 \cdots i_n)$ 的置换，而 $\mathcal{S}$ 为所有 n 阶置换的全体 (置换群)，δ_p 定义为对偶排列 p 取 $+1$，对奇排列 p 取 -1. 这样

$$\begin{aligned}\det(AB) &= \sum_{p \in \mathcal{S}} \delta_p (AB)_{i_1,1} (AB)_{i_2,2} \cdots (AB)_{i_n,n} \\ &= \sum_{p \in \mathcal{S}} \sum_{j_1, j_2, \cdots, j_n = 1}^{n} \delta_p a_{i_1,j_1} b_{j_1,1} a_{i_2,j_2} b_{j_2,2} \cdots a_{i_n,j_n} b_{j_n,n} \\ &= \sum_{j_1, j_2, \cdots, j_n = 1}^{n} b_{j_1,1} b_{j_2,2} \cdots b_{j_n,n} \sum_{p \in \mathcal{S}} \delta_p a_{i_1,j_1} a_{i_2,j_2} \cdots a_{i_n,j_n} \\ &= \sum_{j_1, j_2, \cdots, j_n = 1}^{n} b_{j_1,1} b_{j_2,2} \cdots b_{j_n,n} \sum_{p \in \mathcal{S}} \delta_{p'} \delta_p a_{i_1,1} a_{i_2,2} \cdots a_{i_n,n}\end{aligned}$$

其中，排列 $p' = \begin{pmatrix} 12\cdots n \\ j_1 j_2 \cdots j_n \end{pmatrix}$，因而

$$\begin{aligned}\det(AB) &= \sum_{j_1, j_2, \cdots, j_n = 1}^{n} \delta_{p'} b_{j_1,1} b_{j_2,2} \cdots b_{j_n,n} \sum_{p \in \mathcal{S}} \delta_p a_{i_1,1} a_{i_2,2} \cdots a_{i_n,n} \\ &= \sum_{p' \in \mathcal{S}} \delta_{p'} b_{j_1,1} b_{j_2,2} \cdots b_{j_n,n} \sum_{p \in \mathcal{S}} \delta_p a_{i_1,1} a_{i_2,2} \cdots a_{i_n,n} = \det A \cdot \det B\end{aligned}$$

说明 1　注意一般 $\mathrm{tr}(ABC) \neq \mathrm{tr}(BAC)$，读者可以自行举例.

说明 2　根据 Schur 定理，任意矩阵 A 可通过幺正变换化为上或者下三角矩阵. 本题结论是矩阵的行列式、迹在幺正变换下不变. 据此可得题 4.52 所证的矩阵 A 的行列式的一个常用关系式 (4.127).

说明 3　本题结果只适用于有限阶矩阵，正如题中已指明的. 理由如下:

关于无限矩阵 $\det(AB)=\det(BA)$ 不一定成立，我们可举如下例子. 考虑 Fock 空间中的算符 Ω: $|n\rangle\to|n+1\rangle$, $n=0,1,2,\cdots$. Ω 可表示为 $\Omega=\sum\limits_{n=0}^{\infty}|n+1\rangle\langle n|$. 可以验算 $\Omega^{\dagger}\Omega=\boldsymbol{I}$，但 $\Omega\Omega^{\dagger}=\boldsymbol{I}-|0\rangle\langle 0|$. 这样，$\det(\Omega^{\dagger}\Omega)=\det(\boldsymbol{I})=1$，但 $\det(\Omega\Omega^{\dagger})=\det(\boldsymbol{I}-|0\rangle\langle 0|)=0$，可见 $\det(\Omega\Omega^{\dagger})\neq\det(\Omega^{\dagger}\Omega)$.

关于无限矩阵迹的关系，我们考虑 $xp-px=\mathrm{i}\hbar$. 假如 $\mathrm{tr}(AB)=\mathrm{tr}(BA)$ 对无限阶矩阵仍成立，则对此式两边取 tr 得左边 $=0$，右边 $=\mathrm{i}\hbar\mathrm{tr}1=\mathrm{i}\hbar\infty$. 由矛盾知，$\mathrm{tr}(AB)=\mathrm{tr}(BA)$ 对无限阶矩阵不一定成立.

这提醒我们注意有限维的结论在无限维情形不一定成立.

4.52　关于有限阶矩阵行列式和迹的一个关系式

题 4.52　设 A 为任意矩阵，证明在任何表象中 $\det A=\mathrm{e}^{(\mathrm{tr}\ln A)}$.

提示　利用 Schur 定理，任意矩阵 A 可通过幺正变换化为上 (下) 三角矩阵，且其对角元为 A 的本征值.

证明　按提示，根据 Schur 定理，任意矩阵 A 可通过幺正变换化为上或者下三角矩阵. 故存在幺正矩阵 U，使得 $UAU^{\dagger}=A_{\mathrm{D}}$，而 A_{D} 为上或者下三角矩阵，且其对角元为 A 的本征值. 设 A 的本征值为 $\lambda_k(k=1,2,\cdots)$，则

$$\det A=\det UAU^{\dagger}=\prod_k\lambda_k \tag{4.125}$$

另一方面

$$\mathrm{e}^{\mathrm{tr}(\ln A)}=\mathrm{e}^{\sum\limits_k\langle k|\ln A|k\rangle}=\mathrm{e}^{\sum\limits_k\ln\lambda_k}=\prod_k\lambda_k \tag{4.126}$$

比较式 (4.125)，式 (4.126) 即得

$$\det A=\mathrm{e}^{\mathrm{tr}(\ln A)} \tag{4.127}$$

可见，本题结论对于任意的有限矩阵都成立.

4.53　由算符满足的最低阶方程求本征值

题 4.53　设二维 Hermite 算符 A 满足二次方程 $A^2-3A+2=0$，且知这是 A 满足的最低阶方程. 问:

(1) A 的本征值为何?

(2) A 的本征态为何?

解答　(1) 由题设知 A 的矩阵是 2×2 的，且本征值是方程 $\lambda^2-3\lambda+2=0$ 的根，所以

$$\lambda_1=1,\quad \lambda_2=2$$

(2) 在 A 自身表象中，$A=\begin{pmatrix}1&0\\0&2\end{pmatrix}$. 相应于本征值 $\lambda=1$，$\lambda=2$ 的本征态分别是

$$\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\quad \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

4.54　电荷算符与“电荷共轭”算符

题 4.54　如果 $|\psi_q\rangle$ 是电荷算符 Q 的相应于本征值 q 的本征态中的任意一个，即

$$Q|\psi_q\rangle=q|\psi_q\rangle$$

“电荷共轭”算符 c 作用到 $|\psi_q\rangle$ 上使之成为 Q 的、本征值为 $-q$ 的本征态：

$$c|\psi_q\rangle=|\psi_{-q}\rangle$$

(1) 求算符 Q 的本征值；

(2) 一个态可以同时是 c 和 Q 的本征态吗?

解答　(1) 设 $|\psi\rangle=\sum\limits_q c_q|\psi_q\rangle$，则

$$(cQ+Qc)|\psi_q\rangle=q|\psi_{-q}\rangle-q|\psi_{-q}\rangle=0$$

所以本征值为 0.

(2) 由于 c 是电荷共轭变换，$cQc^{-1}=-Q$，即 $cQ+Qc=0$，故 c 和 Q 没有共同的本征态 (除非 $q=0$，而这是不带电情况，引入 c 也就没有意义了).

4.55　算符本征态的完备性与可观测量 Hermite 性的应用

题 4.55　已知一量子体系，除了能量之外，还包括另外三个可观测量，称为 P、Q、R. 设该体系只有两个 (归一化的) 能量本征态 $|1\rangle$、$|2\rangle$，它们未必是 P、Q、R 的本征态. 基于下列各组“实验数据”，尽可能多地定出 P、Q、R 的本征值 (注意：有一组数据是非物理的，下面设 $\hbar=1$).

(1) $\langle 1|P|1\rangle=1/2$, $\langle 1|P^2|1\rangle=1/4$;

(2) $\langle 1|Q|1\rangle=1/2$, $\langle 1|Q^2|1\rangle=1/6$;

(3) $\langle 1|R|1\rangle=1$, $\langle 1|R^2|1\rangle=5/4$, $\langle 1|R^3|1\rangle=7/4$.

解答　(1) 因为 $\langle 1|P|1\rangle=1/2$，可设

$$P|1\rangle=\frac{1}{2}|1\rangle+\alpha|2\rangle \tag{4.128}$$

由态的正交归一和 P 的 Hermite 性，得 $\langle 1|P|2\rangle=\alpha^*$. 于是可设

$$P|2\rangle=\alpha^*|1\rangle+\beta|2\rangle \tag{4.129}$$

因而

$$P^2|1\rangle=P\left(\frac{1}{2}|1\rangle+\alpha|2\rangle\right)=\left(\frac{1}{4}+\alpha^*\alpha\right)|1\rangle+\left(\frac{1}{2}\alpha+\alpha\beta\right)|2\rangle \tag{4.130}$$

由 $\langle 1|P^2|1\rangle=1/4$，得 $\alpha^*\alpha=0$，因而 $\alpha=0$. 所以，

$$P|1\rangle=\frac{1}{2}|1\rangle,\quad P|2\rangle=\beta|2\rangle \tag{4.131}$$

可见， $|1\rangle$ 是 P 的本征值为 1/2 的本征态， $|2\rangle$ 是 P 的本征值为 β 的本征态，但 β 值未知.

(2) 按题设，令

$$Q|1\rangle=\frac{1}{2}|1\rangle+\gamma|2\rangle \tag{4.132}$$

同 (1)，得 $\gamma^*\gamma=(1/6-1/4)<0$，所以这组数据是非物理的.

(3) 我们设

$$R|1\rangle=|1\rangle+\lambda|2\rangle \tag{4.133}$$

由 $\langle 1|R^2|1\rangle=5/4$ 可得

$$\lambda^*\lambda=1/4,\quad \text{因而 } \lambda=\frac{1}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta} \tag{4.134}$$

通过 $|1\rangle$、 $|2\rangle$ 间适当的相对相位约定，可取 $\delta=0$. 即

$$R|1\rangle=|1\rangle+\frac{1}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}|2\rangle \tag{4.135}$$

因为 $\langle 1|R|2\rangle=\langle 2|R|1\rangle^*=\frac{1}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta}$，可设

$$R|2\rangle=\frac{1}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta}|1\rangle+\eta|2\rangle \tag{4.136}$$

则有

$$R^2|1\rangle=\frac{5}{4}+\frac{1}{2}(1+\eta)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}|2\rangle \tag{4.137}$$

以及

$$R^3|1\rangle=\frac{5}{4}|1\rangle+\frac{1}{4}(1+\eta)\,|1\rangle+\frac{5}{8}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}|2\rangle+\frac{1}{2}(1+\eta)\,\eta\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}|2\rangle \tag{4.138}$$

由 $\langle 1|R^3|1\rangle=7/4$，得 $\eta=1$. 所以在基 $|1\rangle$、 $|2\rangle$ 下， R 的矩阵为

$$\begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta} \\ \frac{1}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta} & 1 \end{pmatrix} \tag{4.139}$$

由此可得 R 的本征值为 1/2、 3/2.

4.56　能量表象中的求和规则 (1)

题 4.56　利用坐标动量对易关系证明：

$$\sum_n (E_n - E_m)\,|\langle n|x|0\rangle|^2 = \text{const.}$$

其中，E_n 是本征态 $|n\rangle$ 的能量. 再求出该常数的值. Hamilton 量为 $H = \dfrac{p^2}{2\mu} + V(x)$.

证法一　先演算 $[[H,x],x]$，

$$\begin{aligned}[H,x] &= \left[\frac{p^2}{2\mu} + V(x), x\right] = \left[\frac{1}{2\mu}p^2, x\right] \\ &= \frac{1}{2\mu}\{p_x[p_x,x] + [p_x,x]p_x\} = \frac{-\mathrm{i}\hbar}{\mu}p_x \qquad (4.140)\end{aligned}$$

$$[[H,x],x] = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu}[p_x,x] = -\frac{\hbar^2}{\mu} \qquad (4.141)$$

现在求 $[[H,x],x]$ 在设 Hamilton 量 H 的束缚定态 $|0\rangle$ 下的期望值，不妨假设各束缚定态 $|m\rangle$ 均已归一化，即 $\langle m|m\rangle = 1$，相应的全部束缚定态的完备性关系可表示为 $\sum\limits_m |m\rangle\langle m| = 1$. 这样

$$\begin{aligned}&\langle 0|[[H,x],x]|0\rangle = \langle 0|[H,x]x|0\rangle - \langle 0|x[H,x]|0\rangle \\ &= \sum_n \{\langle 0|[H,x]|n\rangle\langle n|x|0\rangle - \langle 0|x|n\rangle\langle n|[H,x]|0\rangle\} \\ &= \sum_n \{(E_0 - E_n)\langle 0|x|n\rangle\langle n|x|0\rangle - (E_n - E_0)\langle 0|x|k\rangle\langle n|x|0\rangle\} \\ &= 2\sum_n (E_0 - E_n)\langle 0|x|n\rangle\langle n|x|0\rangle = 2\sum_n (E_0 - E_n)\,|\langle n|x|0\rangle|^2 \qquad (4.142)\end{aligned}$$

式中利用了 H 的本征方程 $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ 及其 Hermite 共轭式 $\langle n|H = E_n\langle n|$. 由式 (4.141)，式 (4.142) 立得

$$\sum_n (E_n - E_0)\,|\langle n|x|0\rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{2\mu} \qquad (4.143)$$

得证. 上面证明过程中看到等式对于任意第 m 个束缚态也成立，也就是等式中 0 若换为 m，等式一样成立.

证法二　(直接演算) $|m\rangle$ 与 $|n\rangle$ 均为 Hamilton 量的本征态，即

$$H|m\rangle = E_m|m\rangle, \quad H|n\rangle = E_n|n\rangle$$

这样

$$\sum_n (E_n - E_m)\,|\langle n|x|m\rangle|^2 = \sum_n \{E_n\langle m|x|n\rangle\langle n|x|m\rangle - E_m\langle m|x|n\rangle\langle n|x|m\rangle\}$$

$$
\begin{aligned}
&= \sum_n \{\langle m|xE_n|n\rangle\langle n|x|m\rangle - \langle m|x|n\rangle\langle n|xE_m|m\rangle\} \\
&= \sum_n \{\langle m|xH|n\rangle\langle n|x|m\rangle - \langle m|x|n\rangle\langle n|xH|m\rangle\} \\
&= \{\langle m|xHx|m\rangle - \langle m|x^2H|m\rangle\} \\
&= \langle m|[x,[H,x]]|m\rangle
\end{aligned}
$$

上面用到了完备性关系 $\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$. 再将式 (4.141)代入上式即得

$$\sum_n (E_n - E_m)|\langle n|x|m\rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{2\mu} \tag{4.144}$$

4.57　能量表象中的求和规则 (2)

题 4.57　粒子做一维运动，Hamilton 量为 $H = \dfrac{p^2}{2\mu} + V(x)$，定态波函数为 $|n\rangle$，则

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle, \quad n = 1,2,3,\cdots$$

(1) 证明

$$\langle n|p|m\rangle = a_{nm}\langle n|x|m\rangle \tag{4.145}$$

并求系数 a_{nm}；

(2) 利用式 (4.145)推导求和公式

$$\sum_n (E_n - E_m)^2|\langle n|x|m\rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{\mu^2}\langle m|p^2|m\rangle \tag{4.146}$$

(3) 证明

$$\sum_n (E_n - E_m)|\langle n|x|m\rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{2\mu} \tag{4.147}$$

证明　(1) 直接演算

$$[x,H] = \left[x, \frac{p^2}{2\mu} + V(x)\right] = \left[x, \frac{p^2}{2\mu}\right] = \frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu}p$$

即得

$$p = \frac{\mu}{\mathrm{i}\hbar}[x,H] \tag{4.148}$$

(2) 利用式 (4.148)，可得

$$
\begin{aligned}
\langle n|p|m\rangle &= \langle n|\frac{\mu}{\mathrm{i}\hbar}[x,H]|m\rangle = \frac{\mu}{\mathrm{i}\hbar}\langle n|xH - Hx|m\rangle \\
&= \frac{\mu}{\mathrm{i}\hbar}(E_n - E_m)\langle n|x|m\rangle
\end{aligned} \tag{4.149}
$$

式 (4.149)可以表示为

$$(E_n - E_m)\langle n|x|m\rangle = -\frac{\mu}{\mathrm{i}\hbar}\langle n|p|m\rangle \tag{4.150}$$

利用式 (4.150),

$$\begin{aligned}\sum_n (E_n - E_m)|\langle n|x|m\rangle|^2 &= -\sum_n (E_m - E_n)\langle m|x|n\rangle(E_n - E_m)\langle n|x|m\rangle \\ &= -\left(-\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu}\right)^2 \sum_n \langle m|p|n\rangle\langle n|p|m\rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{\mu^2}\langle m|p\sum_n|n\rangle\langle n|p|m\rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{\mu}\langle m|p^2|m\rangle\end{aligned}$$

式 (4.146)得证. 以上利用了完备性关系

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$$

(3) 直接演算,

$$\begin{aligned}\sum_n (E_n - E_m)|\langle n|x|m\rangle|^2 &= \sum_n (E_n - E_m)\langle m|x|n\rangle\langle n|x|m\rangle \\ &= \frac{1}{2}\Big[\langle m|xH\sum_n|n\rangle\langle n|x|m\rangle + \langle m|x\sum_n|n\rangle\langle n|Hx|m\rangle \\ &\quad - \langle m|Hx\sum_n|n\rangle\langle n|x|m\rangle - \langle m|x\sum_n|n\rangle\langle n|xH|m\rangle\Big] \\ &= \frac{1}{2}\langle m|xHx + xHx - Hxx - xxH|m\rangle \\ &= \frac{1}{2}\langle m|x[H,\ x] + [x,H]x|m\rangle\end{aligned}$$

再由

$$[x,H] = -[H,x] = \frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu}p$$

因此

$$\sum_n (E_n - E_m)\left|\langle n|x|m\rangle\right|^2 = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2\mu}\langle m|xp - px|m\rangle = \frac{\hbar^2}{2\mu}$$

得证.

说明 1　这里给出了与题 4.56 不同的证明.

说明 2　式 (4.147)的变形

$$\sum_n \frac{2\mu}{\hbar^2}(E_n - E_m)\left|\langle n|x|m\rangle\right|^2 = 1 \tag{4.151}$$

称为 Thomas-Reieh-Kuhn 求和公式.

4.58　能量表象中的求和规则 (3)

题 4.58　对于一维运动粒子，$H=\dfrac{p^2}{2\mu}+V(x)$，证明在能量表象 (基矢均已归一化) 中的求和规则

$$\sum_n (E_n-E_k)^2|x_{nk}|^2=-2\hbar^2\frac{\partial E_k}{\partial \mu} \tag{4.152}$$

证明　对于任意算符 F，利用完备性关系

$$\begin{aligned}
&\langle k|[H,F][H,F]^\dagger|k\rangle \\
=&\sum_n \langle k|[H,F]|n\rangle\langle n|[H,F]^\dagger|k\rangle \\
=&\sum_n (E_k-E_n)\langle k|F|n\rangle(E_k-E_n)\langle n|F^\dagger|k\rangle \\
=&\sum_n (E_k-E_n)^2|\langle k|F|n\rangle|^2
\end{aligned} \tag{4.153}$$

取 $F=x$，则

$$[H,x]=\frac{1}{2\mu}[p^2,x]=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu}p \tag{4.154}$$

$$-[H,x]^2=\frac{\hbar^2}{\mu^2}p^2 \tag{4.155}$$

这样式 (4.153) 给出

$$\sum_n (E_k-E_n)^2|x_{kn}|^2=\frac{\hbar^2}{\mu^2}\langle p^2\rangle_k \tag{4.156}$$

将 H 中粒子质量 μ 视为参量 ($H=H(\mu)$)，Hellmann-Feynman 定理 (H-F 定理)[①]给出

$$\frac{\partial E_k}{\partial \mu}=\left\langle\frac{\partial H}{\partial \mu}\right\rangle_k=-\frac{1}{2\mu^2}\langle p^2\rangle_k \tag{4.157}$$

把上式代入式 (4.156) 即给出式 (4.152).

说明　本题还可利用 Virial 定理证明，请读者自行考虑.

4.59　能量表象中的求和规则 (4)

题 4.59　设 $F(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$ 为体系的一个可观测量 (Hermite 算符)，H 为体系的 Hamilton 量，证明在能量表象中的求和规则

$$\sum_n (E_n-E_k)|F_{nk}|^2=\frac{1}{2}\langle k|[F,[H,F]]|k\rangle$$

① 张永德, 量子力学 (第四版)[M], 北京: 科学出版社, 2015, P.39.

证明　已知 F 为 Hermite 算符，则

$$\begin{aligned}
&\langle k|[F,[H,F]]|k\rangle = \langle k|F[H,F]-[H,F]F|k\rangle \\
=&\sum_n\{\langle k|F|n\rangle\langle n|[H,F]|k\rangle-\langle k|[H,F]|n\rangle\langle n|F|k\rangle\} \\
=&\sum_n\{(E_n-E_k)\langle k|F|n\rangle\langle n|F|k\rangle-(E_k-E_n)\langle k|F|n\rangle\langle n|F|k\rangle\} \\
=&\ 2\sum_n(E_n-E_k)\langle n|F^\dagger|k\rangle^*\langle n|F|k\rangle = 2\sum_n(E_n-E_k)\langle n|F|k\rangle^*\langle n|F|k\rangle \\
=&\ 2\sum_n(E_n-E_k)|F_{nk}|^2
\end{aligned}$$

即有 $\sum\limits_n(E_n-E_k)|F_{nk}|^2=\dfrac{1}{2}\langle k|[F,[H,F]]|k\rangle$.

说明　如题 6.8，本题也可用直接演算的办法证明. 读者可以自行完成.

4.60　由不确定性关系求最小不确定性态

题 4.60　设 $\Delta x=\sqrt{\overline{(x-\overline{x})^2}},\Delta p_x=\sqrt{\overline{(p_x-\overline{p}_x)^2}}$. 对于一维粒子，试证明：使粒子坐标与动量不确定度之积 $\Delta x\cdot\Delta p$ 取最小值 $\dfrac{\hbar}{2}$ 的波包必为 Gauss 型波包.

证明　对于内积空间任意的态矢量 ψ,ϕ，定义内积 (ψ,ϕ)，则有如下 Schwarz 不等式：

$$|(\psi,\phi)|^2\leqslant(\psi,\psi)(\phi,\phi) \tag{4.158}$$

式中等号成立的条件为 $\psi=C\phi$，其中 C 为任意复数常数. 对于任意的力学量 $\hat{A}$、$\hat{B}$，我们对态矢量 $\hat{A}|\psi\rangle$、$\hat{B}|\psi\rangle$ 用 Schwarz 不等式得

$$\langle\psi|\hat{A}^2|\psi\rangle\langle\psi|\hat{B}^2|\psi\rangle\geqslant|\langle\psi|\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle|^2 \tag{4.159}$$

上式等号成立的条件为 $\hat{A}|\psi\rangle=c\hat{B}|\psi\rangle$. 由于 $\hat{A}\hat{B}=\dfrac{\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}}{2}+\dfrac{\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}}{2}=\hat{C}_1+\mathrm{i}\hat{C}_2$ (其中 $\hat{C}_1,\hat{C}_2$ 均为 Hermite 算符)，这样式 (4.159) 右边为

$$\begin{aligned}
|\langle\psi|\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle|^2 =&\left|\langle\psi|\frac{\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}}{2}|\psi\rangle+\langle\psi|\frac{\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}}{2}|\psi\rangle\right|^2 \\
=&\left(\langle\psi|\frac{\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}}{2}|\psi\rangle^*+\langle\psi|\frac{\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}}{2}|\psi\rangle^*\right) \\
&\times\left(\langle\psi|\frac{\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}}{2}|\psi\rangle+\langle\psi|\frac{\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}}{2}|\psi\rangle\right) \\
=&\left(\langle\psi|\frac{\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}}{2}|\psi\rangle-\langle\psi|\frac{\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}}{2}|\psi\rangle\right)
\end{aligned}$$

$$\times\left(\langle\psi|\frac{\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}}{2}|\psi\rangle+\langle\psi|\frac{\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}}{2}|\psi\rangle\right)$$

$$=\left|\langle\psi|\frac{\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}}{2\mathrm{i}}|\psi\rangle\right|^2+\left|\langle\psi|\frac{\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}}{2}|\psi\rangle\right|^2 \tag{4.160}$$

这样由 (4.159)、(4.160) 两式得

$$\langle\psi|\hat{A}^2|\psi\rangle\langle\psi|\hat{B}^2|\psi\rangle\geqslant\left|\langle\psi|\frac{\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}}{2\mathrm{i}}|\psi\rangle\right|^2+\left|\langle\psi|\frac{\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}}{2}|\psi\rangle\right|^2\geqslant\left|\langle\psi|\frac{\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}}{2\mathrm{i}}|\psi\rangle\right|^2 \tag{4.161}$$

第二个大于等于号的等号成立的条件为 $\langle\psi|\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}|\psi\rangle=0$，即 $\langle\psi|\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle=-\langle\psi|\hat{B}\hat{A}|\psi\rangle=-\langle\psi|\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle^*$，也就是 $\langle\psi|\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle$ 为纯虚数. 这样综合以上结果

$$\langle\psi|\hat{A}^2|\psi\rangle\langle\psi|\hat{B}^2|\psi\rangle\geqslant\left|\langle\psi|\frac{\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}}{2\mathrm{i}}|\psi\rangle\right|^2 \tag{4.162}$$

等号成立的条件为 $\hat{A}|\psi\rangle=c\hat{B}|\psi\rangle$ 且 $\langle\psi|\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle$ 为纯虚数，也就是 $\hat{A}|\psi\rangle=c\hat{B}|\psi\rangle$ 而且 c 是纯虚数，令 $c=\mathrm{i}\lambda(\lambda$ 为实数).

现在取 $\hat{A}=\hat{x}-\bar{x}$，$\hat{B}=\hat{p}-\bar{p}$，其中 $\bar{x},\bar{p}$ 分别为坐标和动量 $\hat{x},\hat{p}$ 在 $|\psi\rangle$ 的期望值. $[\hat{x}-\bar{x},\hat{p}-\bar{p}]=[\hat{x},\hat{p}]=\mathrm{i}\hbar$. 这样式 (4.162) 给出在 $|\psi\rangle$ 态下的不确定关系：

$$\Delta x\Delta p\geqslant\frac{\hbar}{2}$$

等号成立条件为 $(\hat{p}-\bar{p})|\psi\rangle=c(\hat{x}-\bar{x})|\psi\rangle$，而且 c 是纯虚数，可令 $c=\mathrm{i}\lambda\hbar(\lambda$ 为实数). 此式在坐标表象中写为

$$\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}-\bar{p}\right)\psi(x)=\mathrm{i}\lambda\hbar(x-\bar{x})\psi(x) \tag{4.163}$$

上式解得

$$\psi(x)=A\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\lambda x^2+\lambda\bar{x}x+\frac{\mathrm{i}\bar{p}}{\hbar}x}$$

其中，A 为归一化因子，波函数条件要求实数 λ 取正值，即 $\lambda>0$. 由上式可见，粒子波包为 Gauss 型波包，此时粒子所处的状态为相干态或者压缩态. 若坐标、动量期望值为零，则粒子波包为 $\psi(x)\sim\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\lambda x^2}$.

附录　(Schwarz 不等式) 证明对于任何两个量子态 ψ 及 φ，满足下述 Schwarz 不等式：

$$|(\psi,\varphi)|\leqslant\sqrt{(\psi,\psi)(\varphi,\varphi)}$$

证法一　由内积的性质，对任何两个波函数 ψ，φ，下面不等式成立：

$$0\leqslant(\psi-\varphi,\psi-\varphi)=(\psi,\psi)+(\varphi,\varphi)-[(\psi,\varphi)+(\varphi,\psi)] \tag{4.164}$$

上式给出 $(\psi,\varphi)+(\varphi,\psi)\leqslant(\psi,\psi)+(\varphi,\varphi)$. 我们可以选 α, $\psi'=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\psi$, 使得 $(\psi',\varphi)=(\varphi,\psi')\geqslant 0$. 对于 ψ'、φ, 式 (4.164) 也成立, 即有

$$|(\psi,\varphi)|=(\psi',\varphi)\leqslant\frac{1}{2}[(\psi',\psi')+(\varphi,\varphi)]=\frac{1}{2}[(\psi,\psi)+(\varphi,\varphi)]$$

也就是

$$|(\psi,\varphi)|\leqslant\frac{1}{2}[(\psi,\psi)+(\varphi,\varphi)] \tag{4.165}$$

下面分 ψ 与 φ 是否归一两种情形讨论.

(a) 若 $(\psi,\psi)=(\varphi,\varphi)=1$, 则式 (4.165) 给出 $|(\psi,\varphi)|\leqslant 1=\sqrt{(\psi,\psi)(\varphi,\varphi)}$. 此即 Schwarz 不等式;

(b) 若 $(\psi,\psi),(\varphi,\varphi)$ 不全为 1, 则将 ψ,φ 归一化, 令

$$\psi_1=\frac{1}{\sqrt{(\psi,\psi)}}\psi,\quad \varphi_1=\frac{1}{\sqrt{(\varphi,\varphi)}}\varphi \tag{4.166}$$

可见 ψ_1,φ_1 满足 (a) 的条件, 故 $|(\psi_1,\varphi_1)|\leqslant 1=\sqrt{(\psi_1,\psi_1)(\varphi_1,\varphi_1)}$, 由此即得 $|(\psi,\varphi)|\leqslant\sqrt{(\psi,\psi)(\varphi,\varphi)}$. 此即 Schwarz 不等式.

讨论 1　(Schwarz 不等式等号成立的条件): 若存在 ψ,φ 满足

$$|(\psi,\varphi)|=\sqrt{(\psi,\psi)(\varphi,\varphi)}$$

将 ψ,φ 如式 (4.166) 归一化为 ψ_1,φ_1. 再如前, 选 α, $\psi_1'=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\psi_1$, 使得 $(\psi_1',\varphi_1)=(\varphi_1,\psi_1')\geqslant 0$. 则上面式子给出

$$(\psi_1',\varphi_1)=(\varphi_1,\psi_1')=1$$

我们可用反证法证明必有 $\psi_1'=\varphi_1$. 假设 $\psi_1'\neq\varphi_1$, 则 $\psi_1'-\varphi_1$ 为一非零态, 其模平方必大于零, 即 $(\psi_1'-\varphi_1,\psi_1'-\varphi_1)>0$. 但由上可得

$$\begin{aligned}(\psi_1'-\varphi_1,\psi_1'-\varphi_1) &= (\psi_1',\psi_1')+(\varphi_1,\varphi_1)-(\psi_1',\varphi_1)-(\varphi_1,\psi_1')\\ &= 1+1-1-1=0\end{aligned}$$

这与前面 $(\psi_1'-\varphi_1,\psi_1'-\varphi_1)>0$ 矛盾. 由矛盾知 $\psi_1'=\varphi_1$.

由 $\psi_1'=\varphi_1$ 以及式 (4.166) 和 $\psi_1'=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\psi_1$, 可知 $\varphi=c\psi$, 即 φ 与 ψ 为同一个态.

讨论 2　$\forall\psi,\varphi$, 将 ψ,φ 如式 (4.166) 归一化为 ψ_1,φ_1, 则 ψ 态下处于 φ 态的概率为

$$P_\psi(\varphi)=|(\varphi_1,\psi_1)|^2=\left|\left(\frac{1}{\sqrt{(\varphi,\varphi)}}\varphi,\frac{1}{\sqrt{(\psi,\psi)}}\psi\right)\right|^2$$

$P_\psi(\varphi)\leqslant 1$, 由此即得 Schwarz 不等式 $|(\psi,\varphi)|\leqslant\sqrt{(\psi,\psi)(\varphi,\varphi)}$. 这表明量子力学测量假设与 Schwarz 不等式一致.

证法二　令 $(\psi,\psi)=a$, $(\varphi,\varphi)=b$, $(\psi,\varphi)=c$, a、b 均是大于零的实数, c 为复数. 构造

$$\chi=\varphi-\frac{c}{a}\psi \tag{4.167}$$

则

$$\begin{aligned}(\chi,\chi) &= \left(\varphi-\frac{c}{a}\psi,\varphi-\frac{c}{a}\psi\right)\\ &= (\varphi,\varphi)-\frac{c^*}{a}(\psi,\varphi)-\frac{c}{a}(\varphi,\psi)+\frac{cc^*}{a^2}(\psi,\psi)\\ &= b-\frac{cc^*}{a}\end{aligned}$$

而 $(\chi,\chi)\geqslant 0$，故

$$cc^*\leqslant ab \tag{4.168}$$

也就是

$$|(\psi,\varphi)|^2\leqslant(\psi,\psi)(\varphi,\varphi) \tag{4.169}$$

由此即得欲证的不等式.

上面等号当且仅当 $(\chi,\chi)=0$，即 $\chi=0$ 是零态时成立. 这也就是 $\varphi=\dfrac{c}{a}\psi$，因此，当且仅当 ψ 与 φ 是同一个状态时 Schwarz 不等式取等号. 这与先前的结论相同.

证法三　由内积的性质，对下面不等式成立:

$$I=(\psi-\lambda\varphi,\psi-\lambda\varphi)=|\psi-\lambda\varphi|^2\geqslant 0 \tag{4.170}$$

其中，λ 为任意复数，将上式展开得

$$I=(\psi,\psi)-\lambda(\psi,\varphi)-\lambda^*(\varphi,\psi)+\lambda^*\lambda(\varphi,\varphi)$$

式中第一、四项恒正. 我们现在这样选取 λ，使 I 的三、四项抵消，

$$I=(\psi,\psi)-\lambda(\psi,\varphi)-\lambda^*[(\varphi,\psi)-\lambda(\varphi,\varphi)]\geqslant 0 \tag{4.171}$$

选取 λ 使方括号内项为零，得 $\lambda=\dfrac{(\varphi,\psi)}{(\varphi,\varphi)}$，代入式 (4.171) 得

$$I=(\psi,\psi)-\frac{(\varphi,\psi)}{(\varphi,\varphi)}(\psi,\varphi)\geqslant 0 \tag{4.172}$$

由此式即得欲证的不等式.

我们从上面证明过程可以看出，Schwarz 不等式正是如下不等式的直接结果:

$$\left|\psi-\frac{(\varphi,\psi)}{(\varphi,\varphi)}\varphi\right|^2\geqslant 0$$

从式 (4.170) 知，当且仅当 $\psi-\lambda\varphi=0$ 时，不等号中的等号成立. 也同样可见 Schwarz 不等式等号成立的条件是 φ 与 ψ 为同一个态.

Schwarz 不等式有很多种证法，也许读者还能给出更好的证法.

4.61　力学量的时间导数算符在能量表象的矩阵元

题 4.61　设体系能量本征态记为 $|n\rangle, H|n\rangle = E_n|n\rangle$，力学量 (算符，不显含时间)$A$ 在能量表象中矩阵元记为 $A_{kn} = \langle k|A|n\rangle$，证明：

$$\left(\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}\right)_{kn} = \mathrm{i}\omega_{kn}A_{kn}$$

其中，$\omega_{kn} = (E_n - E_k)/\hbar$.

证明　在 Heisenberg 图像，态不随时间变化，不显含时间力学量 A 随时间的变化满足如下 Heisenberg 方程：

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t} = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial A}{\partial t} + [A, H] = [A, H]$$

左边的 $\dfrac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}$ 称为 A 的时间导数算符 [见式(4.53)，这里略去算符标识 $\hat{}$]，上式两边对题给的基矢 $\{|n\rangle\}$ 求矩阵元，

$$\mathrm{i}\hbar\langle k|\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}|n\rangle = \langle k|[A, H]|n\rangle = (E_k - E_n)\langle k|A|n\rangle$$

即有

$$\left(\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}\right)_{nn'} = \mathrm{i}\omega_{kn}A_{kn}$$

其中，$\omega_{kn} = (E_n - E_k)/\hbar$.

说明　本题还可在 Schrödinger 图像中证明，请读者自行考虑完成.

4.62　在动量表象中求解均匀力场中运动粒子的定态波函数

题 4.62　质量为 μ 的粒子在一维均匀力场 $f(x) = -F(F > 0)$ 中运动. 试在动量表象中求解定态波函数 $\varphi(p)$.

解答　因为作用力 $f(x) = -\nabla V(x)$，故由题意可知，粒子在势场 $V(x) = Fx$ 中运动，故动量空间的定态 Schrödinger 方程可写为

$$+\mathrm{i}\hbar F\frac{\mathrm{d}\varphi(p)}{\mathrm{d}p} + \frac{p^2}{2m}\varphi(p) = E\varphi(p) \tag{4.173}$$

由于 $x \to +\infty$ 时 $V(x)$ 趋于 $+\infty$，$x \to -\infty$ 时，$V(x) \to -\infty$，不存在束缚态. 各能级构成连续谱，能量值 E 的取值范围为从 $-\infty$ 到 $+\infty$ 的整个区域. 所对应的运动沿 $x = -\infty$ 方向为有限. 由式 (4.173) 容易解出

$$\varphi_E(p) = A\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar F}\left(\frac{p^3}{6\mu} - Ep\right)\right] \tag{4.174}$$

由归一化条件

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi_E^*(p)\varphi_{E'}(p)\mathrm{d}p = \delta(E' - E)$$

归一化系数 A 可取为 $A=1/\sqrt{2\pi\hbar F}$，故所求波函数为

$$\varphi_E(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar F}}\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar F}\left(\frac{p^3}{6\mu}-Ep\right)\right]$$

4.63　中子与反中子互相转变

题 4.63　中子 n 和反中子 $\bar{n}$ 的质量都是 m，它们的态 $|n\rangle$ 和 $|\bar{n}\rangle$ 可看成是一个自由 Hamilton 量 $\hat{H}_0$ 的简并态：

$$\hat{H}_0|n\rangle=mc^2|n\rangle,\quad \hat{H}_0|\bar{n}\rangle=mc^2|\bar{n}\rangle \tag{4.175}$$

设有某种相互作用 $\hat{H}'$ 能使中子与反中子互相转变：

$$\hat{H}'|n\rangle=\alpha|\bar{n}\rangle,\quad \hat{H}'|\bar{n}\rangle=\alpha|n\rangle, \tag{4.176}$$

其中，$\alpha=\alpha^*$. 试求初始时刻 $(t=0)$ 的一个中子在 t 时刻变成反中子的概率.

解答　取 $\hat{H}_0$ 表象，基矢为 $|1\rangle=|n\rangle$，$|2\rangle=|\bar{n}\rangle$，满足 $\langle i|j\rangle=\delta_{ij}(i,j=1,2)$. 体系 Hamilton 量 $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}'$，在 $\hat{H}_0$ 表象的矩阵元

$$\begin{aligned}
H_{11} &= \langle 1|\hat{H}_0+\hat{H}'|1\rangle=\langle n|\hat{H}_0+\hat{H}'|n\rangle=mc^2\\
H_{12} &= \langle 1|\hat{H}_0+\hat{H}'|2\rangle=\langle n|\hat{H}_0+\hat{H}'|\bar{n}\rangle=\alpha, H_{21}=H_{12}^*=\alpha\\
H_{22} &= \langle 2|\hat{H}_0+\hat{H}'|2\rangle=\langle \bar{n}|\hat{H}_0+\hat{H}'|\bar{n}\rangle=mc^2
\end{aligned}$$

定态方程为 $\hat{H}|\psi\rangle=E|\psi\rangle$，或者

$$\begin{pmatrix} mc^2 & \alpha \\ \alpha & mc^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}=E\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \tag{4.177}$$

解之得能量本征值 $E_1=mc^2+\alpha$，$E_2=mc^2-\alpha$，相应的能量本征态为

$$|\psi_1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}(|n\rangle+|\bar{n}\rangle) \tag{4.178}$$

$$|\psi_2\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}(|n\rangle-|\bar{n}\rangle) \tag{4.179}$$

$t=0$ 时刻的一个中子态为

$$|\psi(0)\rangle=A|\psi_1\rangle+B|\psi_2\rangle=\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{4.180}$$

其中

$$A=\langle\psi_1|\psi(0)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(1,1)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$B = \langle\psi_2|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,-1)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

在 t 时刻的态

$$\begin{aligned}|\psi(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_1t/\hbar}|\psi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_2t/\hbar}|\psi_2\rangle\\ &= \frac{1}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}mc^2t/\hbar}\left\{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha t/\hbar}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha t/\hbar}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}\right\}\\ &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}mc^2t/\hbar}\begin{pmatrix}\cos\frac{\alpha t}{\hbar}\\-\mathrm{i}\sin\frac{\alpha t}{\hbar}\end{pmatrix}\\ &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}mc^2t/\hbar}\left\{\cos\frac{\alpha t}{\hbar}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} - \mathrm{i}\sin\frac{\alpha t}{\hbar}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\right\}\\ &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}mc^2t/\hbar}\left\{\cos\frac{\alpha t}{\hbar}|n\rangle - \mathrm{i}\sin\frac{\alpha t}{\hbar}|\bar{n}\rangle\right\}\end{aligned} \tag{4.181}$$

即有 $|\psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}mc^2t/\hbar}\left\{\cos\dfrac{\alpha t}{\hbar}|n\rangle - \mathrm{i}\sin\dfrac{\alpha t}{\hbar}|\bar{n}\rangle\right\}$，由此式知 t 时刻 $n\to\bar{n}$ 的概率为 $\sin^2\dfrac{\alpha t}{\hbar}$.

4.64　表象与表象变换例 (1)

题 4.64　有一量子体系，其态矢空间三维，选择基矢 $\{|1\rangle,|2\rangle,|3\rangle\}$. 体系的 Hamilton 量 H 及另两个力学量 A 与 B 为

$$H = \hbar\omega_0\begin{pmatrix}1&0&0\\0&2&0\\0&0&2\end{pmatrix},\quad A = \alpha\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{pmatrix},\quad B = \beta\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix} \tag{4.182}$$

设 $t=0$ 时体系的态矢为

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle + \frac{1}{2}|2\rangle + \frac{1}{2}|3\rangle \tag{4.183}$$

(1) 试问在 $t=0$ 时测量体系能量 H 可得哪些结果? 相应概率多大? 并请计算 H 期望值 $\bar{H}$ 及 $\Delta H = \sqrt{\overline{H^2} - (\bar{H})^2}$;

(2) 如在 $t=0$ 时测量 A，可能值与相应概率多大? 写出测量后体系的态矢量;

(3) 计算任意 t 时刻 A 与 B 的期望值 $\overline{A(t)}$ 与 $\overline{B(t)}$.

解答　(1) 能量的可能值为 $E_1 = \hbar\omega_0$，$E_2 = E_3 = 2\hbar\omega_0$，相应的概率均为 $\dfrac{1}{2}$. 这样

$$\bar{H} = \frac{3}{2}\hbar\omega_0,\quad \overline{H^2} = \frac{5}{2}\hbar^2\omega_0^2,\quad \Delta H = \sqrt{\overline{H^2} - (\bar{H})^2} = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$$

(2) 求解 A 的本征方程 $A|\varphi\rangle = a|\varphi\rangle$(其中 $|\varphi\rangle = (c_1, c_2, c_3)^{\mathrm{T}}$ 待解)，或者

$$\alpha \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} \tag{4.184}$$

解得本征值为 $a_1 = -\alpha$， $a_2 = \alpha$， $a_3 = \alpha$，相应的本征态分别为

$$|\varphi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad |\varphi_2\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\varphi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{4.185}$$

由于 $a_2 = a_3 = \alpha$， $|\varphi_2\rangle$ 与 $|\varphi_3\rangle$ 简并. 题给 $t = 0$ 时体系的态矢为

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{4.186}$$

再由于

$$\langle\varphi_1|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(0, 1, -1)\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = 0 \tag{4.187}$$

测量 A 取值 $-\alpha$ 的概率 $|\langle\varphi_1|\psi(0)\rangle|^2$ 为 0，故 $t = 0$ 时测量 A 得唯一的 α 值. 测量 A 后，体系的态矢为 $|\varphi_2\rangle$ 与 $|\varphi_3\rangle$ 的任意线性组合.

(3) 任意 t 时体系的态矢为

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_1 t/\hbar}|1\rangle + \frac{1}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_2 t/\hbar}|2\rangle + \frac{1}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_3 t/\hbar}|3\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t} \\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\omega_0 t} \\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\omega_0 t} \end{pmatrix} \tag{4.188}$$

利用式 (4.188) 与式 (4.182) 可以算出任意 t 时刻 A 与 B 的期望值为

$$\begin{aligned} \overline{A(t)} &= \langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle \\ &= \frac{\alpha}{4}(\sqrt{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t}, \mathrm{e}^{\mathrm{i}2\omega_0 t}, \mathrm{e}^{\mathrm{i}2\omega_0 t}) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t} \\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\omega_0 t} \\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\omega_0 t} \end{pmatrix} \\ &= \alpha \end{aligned} \tag{4.189}$$

$$\begin{aligned} \overline{B(t)} &= \langle\psi(t)|B|\psi(t)\rangle \\ &= \frac{\beta}{4}\left(\sqrt{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t}, \mathrm{e}^{\mathrm{i}2\omega_0 t}, \mathrm{e}^{\mathrm{i}2\omega_0 t}\right) \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t} \\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\omega_0 t} \\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\omega_0 t} \end{pmatrix} \\ &= \frac{\beta}{4}\left(2\sqrt{2}\cos\omega_0 t + 1\right) \end{aligned} \tag{4.190}$$

可见期望值 $\overline{A(t)}$ 不随 t 变化，原因在于力学量 A 与 Hamilton 量 H 对易，从而 A 为守恒量.

4.65　表象与表象变换例 (2)

题 4.65　Hermite 算符 A 与 B，满足 $A^2=B^2=1$，$AB+BA=0$，A、B 均无简并. 求：

(1) 在 A 表象中 A 与 B 的矩阵表示式，并求 B 的本征函数表示式；

(2) 在 B 表象中 A 与 B 的矩阵表示式，并求 A 的本征函数表示式；

(3) A 表象到 B 表象的幺正变换矩阵 S.

解答　(1) 题给 $AB+BA=0$，所以 A、B 都不可能是单位矩阵. 设 A 与 B 均无简并. $A^2=1$，即 $(A-1)(A+1)=0$，由矩阵的 Hamilton 原理，可知 A 的本征值只有 1 和 -1. A 表象只有 2 个基矢，而 A 的矩阵表示为

$$A=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \tag{4.191}$$

现在设 $B=\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}$，则 $AB+BA=0$ 给出

$$\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2a & 0\\ 0 & 2d\end{pmatrix}=0$$

上式给出 $a=d=0$. 再 $B^2=1$ 给出

$$\begin{pmatrix}0 & b\\ c & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & b\\ c & 0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}bc & 0\\ 0 & bc\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$$

上式给出 $bc=1$. 再 B 为 Hermite 算符，$B^\dagger=B$，因而 $c=b^*$. 这样 $b=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}$，$c=b^*=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta}$，故

$$B=\begin{pmatrix}0 & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta}\\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta} & 0\end{pmatrix} \tag{4.192}$$

其中，δ 为任意实数. 由于 $B^2=1$，B 的本征值也为 ±1. 相应于矩阵形式 (4.191)，A 的本征态记为

$$|1\rangle_a=\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix},\quad |-1\rangle_a=\begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix} \tag{4.193}$$

通过矩阵形式 (4.192)，求解 $B|\lambda\rangle_b=\lambda|\lambda\rangle_b$ 得 B 的归一化本征态

$$|1\rangle_b=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta}\end{pmatrix},\quad |-1\rangle_b=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta}\end{pmatrix} \tag{4.194}$$

相应的本征值分别为 1、-1.

(2) 同第 (1) 小题，只需将 A 与 B 的地位相互交换一下即可.

(3) 第 (1) 小题求得了 A 与 B 的归一化本征态，从而 A 表象到 B 表象的幺正变换矩阵元为 ${}_b\langle\lambda'|\lambda\rangle_a$，从而写出这一幺正变换矩阵如下：

$$S=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}\\ 1 & -\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}\end{pmatrix} \tag{4.195}$$

满足 $S^{\dagger}=S^{-1}$.

4.66　幺正算符与幺正矩阵

题 4.66　(1) 给定一个本征值为 a_n，本征函数为 $u_n(x)(n=1,2,3,\cdots,N;\ 0\leqslant x\leqslant L)$ 的 Hermite 算符 A，说明算符 $\exp\{\mathrm{i}A\}$ 是幺正算符；

(2) 用任意算符的矩阵构造出一 Hermite 算符的矩阵；

(3) 给定另一 Hermite 算符 B 其本征值为 b_m，本征函数为 $v_m(x)$，构造出一幺正算符 V 的表示，使它把 B 的本征矢量转换成 A 的本征矢量.

解答　(1) A 为 Hermite 算符，则 $A^{\dagger}=A$.

$$(\mathrm{e}^{\mathrm{i}A})^{\dagger}=\left[\sum_n\frac{(\mathrm{i}A)^n}{n!}\right]^{\dagger}=\sum_n\frac{\left(-\mathrm{i}A^{\dagger}\right)^n}{n!}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}A^{\dagger}}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}A}=(\mathrm{e}^{\mathrm{i}A})^{-1}$$

所以 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}A}$ 是幺正矩阵；

(2) 设 U_{mn} 为一般算符矩阵，令 $S_{mn}=U_{mn}+U_{mn}^{\dagger}$，则

$$(S^{\dagger})_{mn}=U_{mn}^{\dagger}+U_{mn}=S_{mn}$$

S 是 Hermite 矩阵.

(3) 设有幺正算符 $\hat{V}$ 的表示 V_{mn}，使得

$$u_n(x)=V_{mn}v_m(x)$$

利用 $u_n(x)$、$v_m(x)$ 的正交归一性

$$\int_0^L u_n(x)v_l^*(x)\mathrm{d}x=V_{nm}\int_0^L v_m(x)v_l^*(x)\mathrm{d}x=V_{nm}\delta_{ml}$$

即得

$$V_{nl}=\int_0^L u_n(x)v_l^*(x)\mathrm{d}x$$

4.67　Heisenberg 表象中算符方程

题 4.67　考虑 Hamilton 量为 $H=\dfrac{p^2}{2m}+\dfrac{1}{2}m\omega^2x^2$ 的一维谐振子.

(1) 求出“初始位置”和“初始动量”算符

$$x_0=x\cos\omega t-\frac{p}{m\omega}\sin\omega t$$

$$p_0 = p\cos\omega t + m\omega x\sin\omega t$$

的期待值对时间的依赖关系.

(2) 这两个算符与 Hamilton 量对易吗?

(3) 第 (1) 和 (2) 小题的结果相容吗? 试讨论之;

(4) 在 Heisenberg 表象中算符的运动方程为何?

(5) 计算对易子 $[p_0, x_0]$, 在测量理论中它有什么意义?

解答 (1) 直接演算

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle x_0\rangle &= \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle x\rangle\right)\cos\omega t - \omega\langle x\rangle\sin\omega t = -\frac{1}{m\omega}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle p\rangle\right)\sin\omega t - \frac{\langle p\rangle}{m\omega}\cos\omega t \\
&= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[x,H]}\cos\omega t - \omega\langle x\rangle\sin\omega t = -\frac{1}{m\omega}\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[p,H]}\sin\omega t - \frac{1}{m}\langle p\rangle\cos\omega t \\
&= 0 \\
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle p_0\rangle &= \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle p\rangle\right)\cos\omega t - \omega\langle p\rangle\sin\omega t + m\omega\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle x\rangle\right)\sin\omega t + m\omega^2\langle x\rangle\cos\omega t \\
&= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[p,H]}\cos\omega t - \omega\langle p\rangle\sin\omega t m\omega\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[x,H]}\sin\omega t + m\omega^2\langle x\rangle\cos\omega t \\
&= 0
\end{aligned}$$

故 $\langle x_0\rangle$ 和 $\langle p_0\rangle$ 都不随时间变化.

(2) 仍直接演算

$$\begin{aligned}
[x_0, H] &= [x,H]\cos\omega t - \frac{[p,H]}{m\omega}\sin\omega t \\
&= \frac{\mathrm{i}\hbar p}{m}\cos\omega t + \mathrm{i}\hbar\omega x\sin\omega t \\
[p_0, H] &= [p,H]\cos\omega t + m\omega[x,H]\sin\omega t \\
&= -\mathrm{i}\hbar m\omega^2 x\cos\omega t + \mathrm{i}\hbar\omega p\sin\omega t
\end{aligned}$$

即 x_0, p_0 不与 H 对易.

(3) (1) 和 (2) 的结果是相容的. 由于 x_0, p_0 的定义式中显含时间 t, 因此 x_0, p_0 不与 H 对易并不说明它们不是守恒量. 正确的关系是

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle x_0\rangle = \left\langle\frac{\partial x_0}{\partial t}\right\rangle + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle[x_0,H]\rangle, \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle p_0\rangle = \left\langle\frac{\partial p_0}{\partial t}\right\rangle + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle[p_0,H]\rangle,$$

(4) 在 Heisenberg 表象中算符的运动方程为 $\dfrac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t} = \dfrac{\partial A}{\partial t} + \dfrac{1}{\mathrm{i}\hbar}[A,H]$, 可知这时 x_0, p_0 的运动方程为

$$\frac{\mathrm{d}x_0}{\mathrm{d}t} = 0, \qquad \frac{\mathrm{d}p_0}{\mathrm{d}t} = 0$$

(5) $[x_0, p_0] = \mathrm{i}\hbar$. 这表明 $\sqrt{\overline{\Delta p_0^2}}\sqrt{\overline{\Delta x_0^2}} \geqslant \dfrac{\hbar}{2}$, 即规定了同时测量这两个物理量时, 它们可能达到的精度上限之间的联系.

4.68　幺正算符的时间导数

题 4.68　(1) 设 $U(t)$ 为幺正算符，对 t 可微，证明 $\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t}$ 可以表示成

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t}=HU$$

其中，H 为 Hermite 算符.

(2) 设 $\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t}=HU$ 成立，H 为 Hermite 算符，证明 $UU^{\dagger}$ 满足方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}UU^{\dagger}=\left[H,UU^{\dagger}\right]$$

进而再证明，当 $t=t_0$ 时 $U(t_0)$ 为幺正算符，则 $U(t)$ 总是幺正算符.

证明　(1) $U(t)$ 为幺正算符，满足 $UU^{\dagger}=U^{\dagger}U=1$. 两边对 $UU^{\dagger}=1$ 求时间导数，得 $\dfrac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t}U^{\dagger}+U\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U^{\dagger}=0$，或者 $\dfrac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t}U^{\dagger}=-U\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U^{\dagger}$. 由此即得 $\left[\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t}U^{\dagger}\right]^{\dagger}=\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t}U^{\dagger}$，意味着 $\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t}U^{\dagger}$ 为一 Hermite 算符，令其等于 H，即

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t}U^{\dagger}=H$$

上式两边右乘 U 即得

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t}=HU \tag{4.196}$$

(2) 式 (4.196) 中 H 为 Hermite 算符，该式的 Hermite 共轭式为

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}U^{\dagger}}{\mathrm{d}t}=U^{\dagger}H^{\dagger}=U^{\dagger}H \tag{4.197}$$

这样

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}UU^{\dagger}=\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t}U^{\dagger}+\mathrm{i}\hbar U\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U^{\dagger}=HUU^{\dagger}-UU^{\dagger}H=\left[H,UU^{\dagger}\right]$$

也就是

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}UU^{\dagger}=\left[H,UU^{\dagger}\right] \tag{4.198}$$

由此关于 $UU^{\dagger}$ 的一阶微分方程式及其 Hermite 共轭可得，当 $t=t_0$ 时 $U(t_0)$ 为幺正算符，则任意 t 时刻 $U(t)$ 总是幺正算符. 论证如下.

将 $t_0\sim t$ 的时间均分为 N 段，每段间隔为 Δt，满足 $N\Delta t=t-t_0$(若 $t\geqslant t_0$，则 $\Delta t\geqslant 0$，否则 $\Delta t<0$). 取 N 足够大，使得 Δt 可以任意小. 这样 $t_0\sim t$ 的时间均分为 t_0，$t_0+\Delta t,t_0+2\Delta t,\cdots,t-\Delta t,t$. $t=t_0$ 时 $U(t_0)$ 为幺正算符，满足 $UU^{\dagger}\big|_{t=t_0}=U^{\dagger}U\big|_{t=t_0}=1$，由式 (4.198) 得，$\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}UU^{\dagger}\Big|_{t=t_0}=0$. 因而 $t_0+\Delta t$ 时刻 $UU^{\dagger}\big|_{t=t_0+\Delta t}=1$，进而 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}UU^{\dagger}\Big|_{t=t_0+\Delta t}=0$. 如此可一直递推下去，可知 t 时刻 $U(t)U^{\dagger}(t)=1$. 从式 (4.198) 的 Hermite 共轭式出发，同理可证 t 时刻 $U^{\dagger}(t)U(t)=1$. 因此 $U(t)$ 是幺正算符.

说明 1　利用时间演化算符 $\mathrm{T}\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t}H(t')\mathrm{d}t'\right\}$(记为 $u(t)$，也是幺正算符. T 表示编时乘积)，式 (4.198) 的解可表示为

$$UU^{\dagger}(t)=u(t)UU^{\dagger}(t_0)u^{\dagger}(t)$$

因此，若 $UU^{\dagger}(t_0)=1$，则 $UU^{\dagger}(t)=u(t)UU^{\dagger}(t_0)u^{\dagger}(t)=u(t)u^{\dagger}(t)=1$. 同理可证 $U^{\dagger}(t)U(t)=1$.

说明 2　若不用式 (4.198)，则 U 的幺正性可如下证明：利用

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U^{-1}=-U^{-1}\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t}U^{-1}$$

可得

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U^{-1}=\mathrm{i}\hbar U^{-1}\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t}U^{-1}=U^{-1}HUU^{-1}=U^{-1}H$$

上式与式 (4.197) 比较，可见 U^{-1} 与 $U^{\dagger}$ 满足同样的一阶微分方程. 再按题设 $t=t_0$ 时 $U(t_0)$ 为幺正算符，即 $U^{-1}(t_0)=U^{\dagger}(t_0)$，可见 U^{-1} 与 $U^{\dagger}$ 在 $t=t_0$ 时相等. 综上可知 $U^{-1}(t)=U^{\dagger}(t)$，即 $U(t)$ 是幺正算符.

这种证明需要用到 $U(t)$ 存在逆，这里给予补充说明. 不妨设 $t>t_0$. 按题设 $U(t_0)$ 是幺正算符，$|\det U(t_0)|=1$，因 U 满足微分方程 (4.196)，U 从而 $\det U$ 是时间的连续函数，故必存在 $\tau_1>0$，使得 $t_0\sim t_0+\tau_1$，$\det U\neq 0$，即在 $t_0\sim t_0+\tau_1$ 的范围内 U 存在逆，从而按前所证，在此范围内 U 均是幺正算符. 再利用 $U(t_0+\tau_1)$ 是幺正算符以及 U 的连续性，可知必存在 $\tau_2>\tau_1$，使得 $t_0\sim t_0+\tau_2$ 的范围内 U 均是幺正算符. 如此递推，逐渐逼近并到达 t，使得在 $t_0\sim t$ 之间 U 均是幺正算符.

4.69　积分方程 $\hat{B}(t)=\hat{B}_0+\mathrm{i}\left[\hat{A},\int_0^t\hat{B}(\tau)\mathrm{d}\tau\right]$ 的解

题 4.69　验证积分方程

$$\hat{B}(t)=\hat{B}_0+\mathrm{i}\left[\hat{A},\int_0^t\hat{B}(\tau)\mathrm{d}\tau\right] \tag{4.199}$$

有下列解：

$$\hat{B}(t)=\exp(\mathrm{i}\hat{A}t)\hat{B}_0\exp(-\mathrm{i}\hat{A}t) \tag{4.200}$$

其中，$\hat{A}$ 与时间无关.

证法一　不妨先记

$$\hat{B}_1(t)=\exp(\mathrm{i}\hat{A}t)\hat{B}_0\exp(-\mathrm{i}\hat{A}t) \tag{4.201}$$

积分方程两边对时间 t 求导数得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{B}(t)=\mathrm{i}\left[\hat{A},\hat{B}(t)\right] \tag{4.202}$$

另一方面，式 (4.201) 两边对时间 t 求导数，得

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{B}_1(t) &= \mathrm{i}\hat{A}\exp(\mathrm{i}\hat{A}t)\hat{B}_0\exp(-\mathrm{i}\hat{A}t)-\mathrm{i}\exp(\mathrm{i}\hat{A}t)\hat{B}_0\exp(-\mathrm{i}\hat{A}t)\hat{A}\\ &= \mathrm{i}\left[\hat{A},\hat{B}_1(t)\right]\end{aligned}\tag{4.203}$$

可见式 (4.199)，式 (4.201) 所定义的 $\hat{B}(t)$、$\hat{B}_1(t)$ 满足同样的一阶微分方程.

$t=0$ 时，式 (4.199) 给出

$$\hat{B}(t)\Big|_{t=0}=\hat{B}(0)$$

式 (4.201) 给出

$$\hat{B}_1(t)\Big|_{t=0}=\hat{B}(0)$$

可见 $t=0$ 时刻 $\hat{B}(t)$、$\hat{B}_1(t)$ 的初始值也相等，因此 $\hat{B}(t)=\hat{B}_1(t)$. 或者说式 (4.200) 是积分方程 (4.199) 的解.

证法二　式 (4.200) 两边对时间 t 求导数，得

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{B}(t) &= \mathrm{i}\hat{A}\exp(\mathrm{i}\hat{A}t)\hat{B}_0\exp(-\mathrm{i}\hat{A}t)-\mathrm{i}\exp(\mathrm{i}\hat{A}t)\hat{B}_0\exp(-\mathrm{i}\hat{A}t)\hat{A}\\ &= \mathrm{i}\left[\hat{A},\hat{B}(t)\right]\end{aligned}$$

也就是

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{B}(t)=\mathrm{i}\left[\hat{A},\hat{B}(t)\right]\tag{4.204}$$

上式两边对时间 t 积分即得式 (4.199).

说明　根据上面结论

$$\hat{B}(t)=\hat{B}_0+\mathrm{i}\left[\hat{A},\int_0^t\hat{B}(\tau)\mathrm{d}\tau\right]=\exp(\mathrm{i}\hat{A}t)\hat{B}_0\exp(-\mathrm{i}\hat{A}t)$$

令上式中 $\mathrm{i}\hat{A}\to\hat{B},\hat{B}\to\hat{A}$，$t\to\beta,\tau\to\lambda$，可得

$$\left[\hat{A},\mathrm{e}^{-\beta\hat{B}}\right]=-\mathrm{e}^{-\beta\hat{B}}\int_0^\beta\mathrm{e}^{\lambda\hat{B}}\left[\hat{A},\hat{B}\right]\mathrm{e}^{-\lambda\hat{B}}\mathrm{d}\lambda\tag{4.205}$$

此式在文献里称为 Kubo 恒等式，见题 4.40 的式 (4.77).

第 5 章　轨道及自旋角动量问题

5.1　角动量的对易关系

题 5.1　$\boldsymbol{J}$ 为角动量算符，$\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J}=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{J}$，即

$$[J_\alpha,A_\beta]=\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\gamma,\quad \alpha,\beta,\gamma=1,2,3,\quad \hbar=1$$

若 $\boldsymbol{m}$ 和 $\boldsymbol{n}$ 为任意方向的矢量，皆与 $\boldsymbol{J}$ 对易，证明：

(1) $[\boldsymbol{J},\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}]=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J}$;

(2) $[\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{m},\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}]=\mathrm{i}\hbar(\boldsymbol{m}\times\boldsymbol{n})\times\boldsymbol{J}$;

(3) $[\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}]=0$.

证法一　(1) 记 $\boldsymbol{J}=(J_x,J_y,J_z)=(J_1,J_2,J_3)$，$\boldsymbol{n}=(n_x,n_y,n_z)=(n_1,n_2,n_3)$，

$$\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}=\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}=n_jJ_j$$

利用角动量对易关系

$$[J_i,J_j]=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}J_k$$

按分量式计算

$$\begin{aligned}[J_i,\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}] &= [J_i,n_jJ_j]=n_j[J_i,J_j]\\ &= \mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}n_jJ_k=\mathrm{i}\hbar(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J})_i\end{aligned}$$

也就是

$$[\boldsymbol{J},\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}]=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{J}\tag{5.1}$$

(2) 直接演算

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{m},\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}] &= [J_\alpha,J_\beta]m_\alpha n_\beta=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\boldsymbol{J}_\gamma m_\alpha n_\beta\\ &= \mathrm{i}\hbar\boldsymbol{J}\cdot(\boldsymbol{m}\times\boldsymbol{n})\end{aligned}$$

(3) 直接演算

$$\begin{aligned}\left[\boldsymbol{J}^2,J_n\right] &= [J_\alpha J_\alpha,J_\beta]n_\beta=[J_\alpha,J_\beta]J_\alpha n_\beta+J_\alpha[J_\alpha,J_\beta]n_\beta\\ &= \mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}(J_\gamma J_\alpha J_\beta+J_\alpha J_\gamma J_\beta)=\mathrm{i}\hbar[\boldsymbol{J}\cdot(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{n})-\boldsymbol{J}\cdot(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{n})]=0\end{aligned}$$

证法二　(关于第 (1) 小题) 利用矢量算符三重积公式[①]

$$[\boldsymbol{A}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})]_\alpha=\boldsymbol{A}\cdot(B_\alpha\boldsymbol{C})-(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})C_\alpha$$

① 见题 5.4.

可见当 $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{B}$ 对易时，

$$\boldsymbol{A}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})=\boldsymbol{B}(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{C})-(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})\boldsymbol{C}$$

由上式即得

$$[\boldsymbol{J},\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}]=\boldsymbol{J}(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n})-(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n})\boldsymbol{J}=\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J})$$

再利用角动量对易关系 $\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J}=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{J}$，同样给出式 (5.1).

5.2　角动量的升降算符

题 5.2　$\boldsymbol{J}$ 为角动量算符，满足 $\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J}=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{J}$；定义升降算符

$$J_{\pm}=J_x\pm\mathrm{i}J_y$$

$|j,m_j\rangle$ 为 $\boldsymbol{J}^2$，J_z 的共同本征态，证明

$$J_{\pm}|j,m_j\rangle=\sqrt{j(j+1)-m_j(m_j\pm1)}\hbar|j,m_j\pm1\rangle$$

证明　分两步，第一步先证 $J_{\pm}|j,m_j\rangle$ 是 $\boldsymbol{J}^2$，J_z 的本征值分别为 $j(j+1)\hbar^2$，$(m_j\pm1)\hbar$ 的本征态. 由于 $[\boldsymbol{J}^2,J_z]=0$，所以

$$\boldsymbol{J}^2J_{\pm}|j,m_j\rangle=J_{\pm}\boldsymbol{J}^2|j,m_j\rangle=j(j+1)\hbar^2J_{\pm}|j,m_j\rangle$$

另外，由于 $[J_z,J_{\pm}]=\pm\hbar J_{\pm}$，所以

$$J_zJ_{\pm}|j,m_j\rangle=J_{\pm}(J_z\pm\hbar)|j,m_j\rangle=(m_j\pm1)\hbar J_{\pm}|j,m_j\rangle$$

所以 $J_{\pm}|j,m_j\rangle$ 是 $\boldsymbol{J}^2$ 本征值为 $j(j+1)\hbar^2$、J_z 的本征值为 $(m_j\pm1)\hbar$ 的共同本征态. 所以

$$J_{\pm}|j,m_j\rangle=\alpha_{\pm}|j,m_j\pm1\rangle$$

第二步再求 $\alpha_{\pm}$，由上式作内积

$$|\alpha_+|^2=\langle j,m_j|J_-J_+|j,m_j\rangle$$

由于 $J_-J_+=\boldsymbol{J}^2-J_z^2-\hbar J_z$，有

$$|\alpha_+|^2=[j(j+1)-m_j(m_j+1)]\hbar^2$$

通过合适的相位约定[①]，使得 α_+ 是一个正数，则得

$$\alpha_+=\sqrt{j(j+1)-m_j(m_j\pm1)}\hbar$$

也就有

$$J_+|j,m_j\rangle=\sqrt{j(j+1)-m_j(m_j+1)}\hbar|j,m_j+1\rangle$$

同理有

$$J_-|j,m_j\rangle=\sqrt{j(j+1)-m_j(m_j-1)}\hbar|j,m_j-1\rangle$$

① 称为 Condon-Shortley 相因子约定.

5.3 在角动量平方、z 方向分量的共同本征态下，求角动量 x 分量的期望值、均方值和涨落

题 5.3 $|j,m_j\rangle$ 为 $\boldsymbol{J}^2$、J_z 的共同本征态，证明在该态下：

(1) $\langle J_x\rangle=\langle J_y\rangle=0$;

(2) $\langle J_x^2\rangle=\langle J_y^2\rangle=\dfrac{1}{2}\left[j(j+1)-m_j^2\right]\hbar^2$;

(3) $\Delta J_x\cdot\Delta J_y=\dfrac{1}{2}\left[j(j+1)-m_j^2\right]\hbar^2$.

证明 (1) $\boldsymbol{J}^2$、J_z 的本征态 $|j,m_j\rangle$ 满足 $J_z|j,m_j\rangle=m\hbar|j,m_j\rangle$. 因

$$J_yJ_z-J_zJ_y=\mathrm{i}\hbar J_x \tag{5.2}$$

两边对 $|j,m_j\rangle$ 求期望值

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\langle j,m_j|J_x|j,m_j\rangle&=\langle j,m_j|J_yJ_z-J_zJ_y|j,m_j\rangle\\&=m\hbar\langle j,m_j|J_y|j,m_j\rangle-m\hbar\langle j,m_j|J_y|j,m_j\rangle=0\end{aligned}$$

可见 $\langle J_x\rangle=0$. 同理 $\langle J_y\rangle=0$.

(2) **证法一** 利用式 (5.2)，可得

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar J_x^2&=[J_y,J_z]J_x=J_y(J_xJ_z+\mathrm{i}\hbar J_y)-J_zJ_yJ_x\\&=\mathrm{i}\hbar J_y^2+J_yJ_xJ_z-J_zJ_yJ_x\end{aligned}$$

也就是

$$\mathrm{i}\hbar J_x^2=\mathrm{i}\hbar J_y^2+J_yJ_xJ_z-J_zJ_yJ_x$$

上式在 $|j,m_j\rangle$ 态下求平均时，后两项贡献互抵，因此

$$\langle J_x^2\rangle=\langle J_y^2\rangle$$

由于

$$\langle J_x^2+J_y^2\rangle=\langle\boldsymbol{J}^2-J_z^2\rangle=\left[j(j+1)-m_j^2\right]\hbar^2$$

所以

$$\langle J_x^2\rangle=\langle J_y^2\rangle=\frac{1}{2}\left[j(j+1)-m_j^2\right]\hbar^2$$

证法二 由角动量态的升、降算符的定义式

$$J_+=J_x+\mathrm{i}J_y,\quad J_-=J_x-\mathrm{i}J_y=J_+^\dagger$$

可知

$$J_x=\frac{1}{2}(J_++J_-),\quad J_y=\frac{1}{2\mathrm{i}}(J_+-J_-)$$

这样

$$J_x^2=\frac{1}{4}\left(J_+^2+J_-^2+J_+J_-+J_-J_+\right)$$

上式在 $|j,m_j\rangle$ 态下求平均时，右边前两项贡献为零，且

$$J_+J_-+J_-J_+=2\left(\boldsymbol{J}^2-J_z^2\right)$$

所以

$$\left\langle J_x^2\right\rangle=\frac{1}{2}\left[j(j+1)-m_j^2\right]\hbar^2$$

同样由

$$J_y=\frac{1}{2\mathrm{i}}\left(J_+-J_-\right)$$

可得

$$J_y^2=\frac{1}{4}\left(-J_+^2-J_-^2+J_+J_-+J_-J_+\right)$$

上式在 $|j,m_j\rangle$ 态下求平均给出

$$\left\langle J_y^2\right\rangle=\frac{1}{2}\left[j(j+1)-m_j^2\right]\hbar^2$$

(3) 由第 (1)、(2) 小题有

$$\Delta J_x=\Delta J_y=\left\langle J_x^2\right\rangle^{1/2}=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\left[j(j+1)-m_j^2\right]^{1/2}$$

从而

$$\Delta J_x\cdot\Delta J_y=\frac{1}{2}\left[j(j+1)-m_j^2\right]\hbar^2$$

5.4　在角动量平方和其第三分量的共同本征态下角动量沿空间某一方向分量及其平方的期望值

题 5.4　$\boldsymbol{J}$ 为角动量算符，$\boldsymbol{n}$ 为 θ,φ 方向单位矢量. $|j,m_j\rangle$ 是 $\boldsymbol{J}^2$、J_z 的共同本征态，在该态下求：

(1) $\langle\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}\rangle=\langle J_n\rangle$;

(2) $\langle J_n^2\rangle$.

解答　(1) 由题 5.3 结果

$$\langle J_n\rangle=n_x\langle J_x\rangle+n_y\langle J_y\rangle+n_z\langle J_z\rangle=n_zm_j\hbar=m_j\hbar\cos\theta \tag{5.3}$$

(2) 由于

$$\begin{aligned}J_n^2=&\left(n_x^2J_x^2+n_y^2J_y^2+n_z^2J_z^2\right)+n_xn_y\left(J_xJ_y+J_yJ_x\right)\\&+n_xn_z\left(J_xJ_z+J_zJ_x\right)+n_yn_z\left(J_yJ_z+J_zJ_y\right)\end{aligned} \tag{5.4}$$

以及

$$J_xJ_y+J_yJ_x=\frac{1}{2\mathrm{i}}\left(J_+^2-J_-^2\right)$$

因式 (5.4)在 $|j,m_j\rangle$ 态下求平均时，只有右边第一个括号有贡献. 由题 5.3 结果给出

$$\left\langle J_n^2\right\rangle=\frac{\hbar^2}{2}\left[j(j+1)-m_j^2\right]\sin^2\theta+m_j^2\hbar^2\cos^2\theta \tag{5.5}$$

5.5 在角动量平方、z 方向分量表象的 $J=1$ 的子空间，角动量 x 方向分量、y 方向分量的矩阵表示及本征值与本征态

题 5.5 在 $\boldsymbol{J}^2$、J_z 表象的 $J=1$ 的子空间中：
(1) 求 J_+, J_-, J_x, J_y, J_n 的矩阵表示；
(2) 求 J_x、J_y 的本征值和本征态.

解答 $j=1$ 的三个基矢量张成维数为 3 的子空间.
如题 5.2，对正交归一的角动量态 $|jm\rangle$ 采用 Condon-Shortley 相因子约定，则有

$$\begin{aligned} J_+|jm\rangle &= \sqrt{(j+m+1)(j-m)}|j,m+1\rangle \\ &= \sqrt{j(j+1)-m(m+1)}|j,m+1\rangle, \\ J_-|jm\rangle &= \sqrt{(j-m+1)(j+m)}|j,m-1\rangle \\ &= \sqrt{j(j+1)-m(m-1)}|j,m-1\rangle, \end{aligned} \tag{5.6}$$

其中，$J_+ = J_x + \mathrm{i}J_y, J_- = J_x - \mathrm{i}J_y$，加上 $J_z|jm\rangle = m\hbar|jm\rangle$. 据此对 $J=1$ 写出 J_+、J_-、J_x、J_y, J_z 的矩阵分别为

$$J_+ = \sqrt{2}\hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_- = J_+^\dagger = \sqrt{2}\hbar\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{5.7}$$

以及

$$J_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \quad J_z = \hbar\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{5.8}$$

并有

$$\begin{aligned} J_n &= \sin\theta\cos\varphi J_x + \sin\theta\sin\varphi J_y + \cos\theta J_z \\ &= \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \sqrt{2}\cos\theta & \sin\theta\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} & 0 \\ \sin\theta\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} & 0 & \sin\theta\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} \\ 0 & \sin\theta\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} & -\sqrt{2}\cos\theta \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{5.9}$$

现设 $\psi = (a_1, a_2, a_3)^{\mathrm{T}}$ 为 $\boldsymbol{J}^2$、J_z 表象中 J_x 的本征态，相应的本征值为 λ. 我们如下写出本征方程：

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

上式非零解条件给出如下关于 J_x 本征方程的久期方程：

$$\begin{vmatrix} -\lambda & \frac{\hbar}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{\hbar}{\sqrt{2}} & -\lambda & \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{\hbar}{\sqrt{2}} & -\lambda \end{vmatrix} = 0$$

即 $-\lambda^3+\hbar^2\lambda=0$，得其根为 $\lambda_1=\hbar,\lambda_2=0,\lambda_3=-\hbar$，即得 J_x 的 3 个本征值. 当 $\lambda_1=\hbar$ 时， J_x 的本征方程为

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

也就是

$$\begin{pmatrix} a_2 \\ a_1+a_3 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{2}a_1 \\ \sqrt{2}a_2 \\ \sqrt{2}a_3 \end{pmatrix}$$

可得 $a_2=\sqrt{2}a_1, a_2=\sqrt{2}a_3, a_3=a_1$，这样我们得到 J_x 的本征值为 $\hbar$ 的本征态为 $\psi_{+1}=\left(a_1,\sqrt{2}a_1,a_1\right)^{\mathrm{T}}$，再由归一化条件

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

可取 $a_1=1/2$，这样归一化的本征态为

$$\psi_{+1}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}$$

当 $\lambda_2=0$ 时 J_x 的本征方程为

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

也就是

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

由此得 $a_2=0, a_1=-a_3$，故 $\psi_0=(a_1,0,-a_1)^{\mathrm{T}}$. 由归一化条件

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

故可取 $a_1=\dfrac{1}{\sqrt{2}}$，这样得 J_x 的归一化本征态为

$$\psi_0=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\\-1\end{pmatrix}$$

对应于 J_x 的本征值 0. 当 $\lambda_3=-\hbar$ 时， J_x 的本征方程为

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

也就是

$$\begin{pmatrix}a_2\\a_1+a_3\\a_2\end{pmatrix}=\sqrt{2}\begin{pmatrix}-a_1\\-a_2\\-a_3\end{pmatrix}$$

解得 $a_2=-\sqrt{2}a_1, a_2=-\sqrt{2}a_3, a_3=a_1$，给出本征态 $\psi_{-1}=\left(a_1,-\sqrt{2}a_1,a_1\right)^{\mathrm{T}}$，由归一化条件

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

可以取 $a_1=1/2$，这样得 J_x 的归一化本征态为

$$\psi_{-1}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\-\sqrt{2}\\1\end{pmatrix}$$

对应于 J_x 的本征值 $-\hbar$. 由以上结果可知，从 $(\boldsymbol{J}^2,J_z)$ 表象到 J_x 表象的变换矩阵为

$$S=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&\sqrt{2}&1\\\sqrt{2}&0&-\sqrt{2}\\1&-\sqrt{2}&1\end{pmatrix}$$

对角化的矩阵为 $J_x'=S^{\dagger}J_xS$，它等于

$$\begin{aligned}J_x' &= \frac{\hbar}{4\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1&\sqrt{2}&1\\\sqrt{2}&0&-\sqrt{2}\\1&-\sqrt{2}&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&\sqrt{2}&1\\\sqrt{2}&0&-\sqrt{2}\\1&-\sqrt{2}&1\end{pmatrix}\\ &= \frac{\hbar}{4\sqrt{2}}\begin{pmatrix}\sqrt{2}&2&\sqrt{2}\\0&0&0\\-\sqrt{2}&2&-\sqrt{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&\sqrt{2}&1\\\sqrt{2}&0&-\sqrt{2}\\1&-\sqrt{2}&1\end{pmatrix}\end{aligned}$$

$$= \frac{\hbar}{4\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 4\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -4\sqrt{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hbar & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\hbar \end{pmatrix}$$

说明　按照与上同样的方法可得 J_y 的本征值为 $\hbar$、0、 $-\hbar$，归一化的本征态为

$$\phi_{+1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \mathrm{i}\sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \phi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \phi_{-1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -\mathrm{i}\sqrt{2} \\ -1 \end{pmatrix}$$

从 $(\boldsymbol{J}^2, J_z)$ 表象到 J_y 表象的变换矩阵为

$$S' = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} & 1 \\ \mathrm{i}\sqrt{2} & 0 & -\mathrm{i}\sqrt{2} \\ -1 & \sqrt{2} & -1 \end{pmatrix} \Rightarrow S'^{\dagger} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -\mathrm{i}\sqrt{2} & -1 \\ \sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} \\ 1 & \mathrm{i}\sqrt{2} & -1 \end{pmatrix}$$

利用 S' 可使 J_y 对角化，得到

$$J'_y = S'^{\dagger} J_y S' = \begin{pmatrix} \hbar & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\hbar \end{pmatrix}$$

5.6　在 $J=1$ 的子空间中，证明 $J_x^3 = J_x$

题 5.6　在 $|j, m_j\rangle$ 态矢量空间的 $J=1$ 的子空间中，取 $\hbar = 1$，

(1) 证明 $J_x^3 = J_x$；

(2) 证明 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta J_x} = 1 + \mathrm{i}J_x \sin\theta - J_x^2(1-\cos\theta)$.

证明　(1) 在 $J=1$ 的子空间中， $\boldsymbol{J}^2$、 J_x 的本征态 $|\phi_{1m}\rangle (m = 1, 0, -1)$ 是一组完备基，即对任意 $|\psi\rangle$

$$|\psi\rangle = C_1 |\phi_{11}\rangle + C_0 |\phi_{10}\rangle + C_{-1} |\phi_{1-1}\rangle$$

均有

$$(J_x - 1)(J_x - 0)(J_x + 1)|\psi\rangle = 0$$

也就是

$$\left(J_x^3 - J_x\right)|\psi\rangle = 0$$

因为 $|\psi\rangle$ 是任意的，所以有 $J_x^3 = J_x$. 这一结果对 $\boldsymbol{J}$ 在任何方向 $\boldsymbol{n}$ 的投影 J_n 亦成立.

(2) **证法一**　直接演算

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta J_x} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\mathrm{i}\theta)^n}{n!} J_x^n$$

$$
\begin{aligned}
&= 1+J_x\left[i\theta+\frac{(\mathrm{i}\theta)^3}{3!}+\frac{(\mathrm{i}\theta)^5}{5!}+\cdots\right]+J_x^2\left[\frac{(\mathrm{i}\theta)^2}{2!}+\frac{(\mathrm{i}\theta)^4}{4!}+\frac{(\mathrm{i}\theta)^6}{6!}+\cdots\right]\\
&= 1+\mathrm{i}J_x\left[\theta-\frac{\theta^3}{3!}+\frac{\theta^5}{5!}+\cdots\right]+J_x^2\left[-\frac{\theta^2}{2!}+\frac{\theta^4}{4!}-\frac{\theta^6}{6!}+\cdots\right]\\
&= 1+\mathrm{i}J_x\sin\theta-J_x^2(1-\cos\theta)
\end{aligned}
$$

证法二　由线性代数中的 Hamilton-Cayley 定理，在 $J=1$ 的子空间中 J_x 为 3×3 方阵，故 J_x 的任意整函数 $f(J_x)$ 可表示为 I,J_x,J_x^2 的线性组合，令

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta J_x}=C_0+C_1J_x+C_2J_x^2$$

让上式作用至 $J_x=1,0,-1$ 的本征态上有

$$\begin{cases}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}=C_0+C_1+C_2\\ 1=C_0\\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta}=C_0-C_1+C_2\end{cases}$$

联立求解有

$$C_0=1,\quad C_1=\frac{1}{2}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta}\right)=\mathrm{i}\sin\theta,\quad C_2=-(1-\cos\theta)$$

从而

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta J_x}=1+\mathrm{i}J_x\sin\theta-J_x^2(1-\cos\theta)$$

5.7　在角动量平方、z 方向分量共同本征态下，测量角动量 x 方向分量或 y 方向分量取 $\pm m'$ 的概率相等

题 5.7　在 $(\boldsymbol{J}^2,J_z)$ 归一化共同本征态 $|jm\rangle$ 下，证明：

(1) J_x 和 J_y 的任何奇幂次式的期望值为 0；

(2) 在 $|jm\rangle$ 态下，测量 J_x 或 J_y 的可能取值为 $m'=j,j-1,\cdots,-j+1,-j$，证明 J_x 或 J_y 取 $\pm m'$ 的概率相等.

证明　(1)J_x 和 J_y 可以用如下升降算符表示：

$$J_x=\frac{1}{2}(J_++J_-),\quad J_y=\frac{1}{2\mathrm{i}}(J_+-J_-)\tag{5.10}$$

因此 J_x 和 J_y 的任何奇幂次式 (如 J_x、J_x^3、$J_xJ_y^2$、J_y^3 等) 均可表示成 J_+ 和 J_- 的奇幂次式，因而它们作用于 $|jm\rangle$，将得到各种 $|jm'\rangle$，而 $m'-m$ 为奇数，因此各 $|jm'\rangle$ 的 $m'\neq m$. 由此可见

$$\langle jm|\,(J_x\text{和}J_y)\text{的奇幂次式}\,|jm\rangle=\sum_{m'\neq m}C_{m'}\langle jm|\,jm'\rangle=0$$

可见 J_x 和 J_y 的任何奇幂次式的期望值为 0.

(2) 设在 $|jm\rangle$ 态中测得 $J_x=m'$ 的概率为 $P(m')$，测得 $J_x=-m'$ 的概率为 $P(-m')$，需证明 $P(m')=P(-m')$.

$j=0$ 的情况无须证明. 如 j 为正整数，作 J_x 的奇幂次 $(2j-1$ 次) 式

$$f(J_x)=J_x\left(J_x^2-1^2\right)\left(J_x^2-2^2\right)\cdots\left(J_x^2-j^2\right) \tag{5.11}$$

其中不含因子 $(J_x^2-m'^2)$，则

$$f(m')=-f(-m')\neq 0$$
$$f(m'')=0,\quad m''\neq\pm m'$$

根据第 (1) 小题中证明的结果，在 $|jm\rangle$ 态下 $f(J_x)$ 期望值应等于 0，因此

$$\langle f(J_x)\rangle=\sum_{m''}f(m'')\,P(m'')=f(m')\left[P(m')-P(-m')\right]=0$$

所以 $P(m')=P(-m')$.

如 j 为半奇数，作 J_x 的奇幂次 $(2j$ 次) 式

$$f(J_x)=J_x\left[J_x^2-\left(\frac{1}{2}\right)^2\right]\left[J_x^2-\left(\frac{3}{2}\right)^2\right]\cdots\left[J_x^2-j^2\right] \tag{5.12}$$

其中不含因子 $(J_x^2-m'^2)$. 由此同样证明 $P(m')=P(-m')$.

利用第 (1) 小题中证明的结果，同样可以证明对 J_y 取 $\pm m'$ 的概率相等.

讨论　可证明在 $|jm\rangle$ 态测得 $J_x=m'$ 的概率与测得 $J_y=m'$ 的概率相等. 更一般的，在 $|jm\rangle$ 态，测得任何垂直于 z 轴的方向角动量投影 $J_n=m'$ 的概率都相等. 其证明如下:

对于任何垂直于 z 轴的方向 $\boldsymbol{n}$(方位角为 $\theta_0=\pi/2,\varphi_0$ 任意)，$J_n=\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}$ 取本征值 m' 的本征态[①]为

$$|J_n=m'\rangle=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi_0 J_z}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{2}J_y}|jm'\rangle$$

因此，在 $|jm\rangle$ 态下测得 $J_n=m'$ 的概率为

$$P(J_n=m')=\left|\langle jm|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi_0 J_z}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{2}J_y}|jm'\rangle\right|^2$$

由于

$$\langle jm|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi_0 J_z}=\langle jm|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\varphi_0}$$

因而

$$P(J_n=m')=\left|\langle jm|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{2}J_y}|jm'\rangle\right|^2$$

可见概率 $P(J_n=m')$ 与 φ_0 无关，因此在 $|jm\rangle$ 态，测得沿任何垂直于 z 轴方向的角动量投影 $J_n=m'$ 的概率都相等.

① 可参考题 6.4.

5.8 在角动量平方、z 方向分量的共同本征态中，求 x 方向分量四次幂的期望值

题 5.8 (1) 在轨道角动量的 $l=1$ 子空间中，在 $\boldsymbol{L}^2$、L_z 的共同本征态 $|lm\rangle$ 下 (取 $\hbar=1$) 证明

$$\langle L_x^n\rangle=\langle L_y^n\rangle=\begin{cases}0, & n\text{为奇数}\\ \dfrac{1}{2}(2-m^2), & n\text{为偶数}\end{cases}$$

(2) 在 $|lm\rangle$ 态下求 L_x^4 的期望值.

证明 (1) 在 $|lm\rangle$ 态下有

$$\langle L_x^2\rangle=\langle L_y^2\rangle=\begin{cases}0, & n\text{为奇数}\\ \dfrac{1}{2}[l(l+1)-m^2], & n\text{为偶数}\end{cases}$$

且在 $l=1$ 子空间中有

$$L_x^3=L_x,\quad L_y^3=L_y \tag{5.13}$$

由式 (5.13)有

$$L_x^{2m+1}=L_x^{2m-1}=\cdots=L_x,\quad L_x^{2m}=L_x^{2(m-1)}=\cdots=L_x^2$$

所以有

$$\langle L_x^{2m+1}\rangle=\langle L_x\rangle=0,\quad \langle L_x^{2m}\rangle=\langle L_x^2\rangle=\frac{1}{2}(2-m^2)$$

对 L_y 的证明同上.

(2) 由 $L_\pm=L_x\pm\mathrm{i}L_y$，有

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

则得

$$L_x^4=\frac{1}{16}(L_++L_-)^4$$

上式在 $|lm\rangle$ 态下求平均时，右边不为零的项为

$$L_+^2L_-^2,\quad L_-^2L_+^2,\quad (L_+L_-)^2,\quad (L_-L_+)^2,\quad L_+L_-L_-L_+,\quad L_-L_+L_+L_-$$

由于

$$L_-L_+|lm\rangle=[l(l+1)-m(m+1)]|lm\rangle,\quad L_+L_-|lm\rangle=[l(l+1)-m(m-1)]|lm\rangle$$

$$L_+^2|lm\rangle=[l(l+1)-m(m+1)]^{1/2}[l(l+1)-m(m+1)(m+2)]^{1/2}|l,m+2\rangle$$

$$L_-^2|lm\rangle=[l(l+1)-m(m-1)]^{1/2}[l(l+1)-m(m-1)(m-2)]^{1/2}|l,m-2\rangle$$

$$\left[L_+^2|lm\rangle\right]^\dagger=\langle lm|L_-^2,\quad \left[L_-^2|lm\rangle\right]^\dagger=\langle lm|L_+^2$$

所以在 $|lm\rangle$ 态下

$$\langle L_x^4\rangle=\frac{1}{16}\left\{6[l(l+1)]^2-4l(l+1)(3m^2+1)+2m^2(3m^2+5)\right\}$$

对于 $l=2$ 时，有

$$\langle L_x^4\rangle_{2m}=\frac{1}{8}\left(96-31m^2+3m^4\right)$$

$l=2$，$m=0$ 时，

$$\langle L_x^4\rangle_{20}=12$$

$l=2$，$m=1$ 时

$$\langle L_x^4\rangle_{21}=\frac{17}{2}$$

5.9　在 Y_{20} 态下，L_x 的可能值及相应概率

题 5.9　设粒子处于 $(\boldsymbol{L}^2,L_z)$ 共同本征态为 Y_{20}，求 L_x 的可能测值及相应的概率.

解法一　要求 L_x 的可能测值及相应概率，我们要将 ψ 按 L_x 的本征态展开. 我们这里暂不用 d 函数或升降算符的矩阵表示，而采用轮换法. 已知 $\boldsymbol{L}^2$，L_z 的共同本征态，我们可以如下通过轮换 $x\to y$，$y\to z$，$z\to x$ 得到 $\boldsymbol{L}^2$ 与 L_x 的共同本征态，即由

$$\mathrm{Y}_{2,\pm2}=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\frac{(x\pm\mathrm{i}y)^2}{r^2}$$

$$\mathrm{Y}_{2,\pm1}=\mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\frac{(x\pm\mathrm{i}y)z}{r^2}$$

$$\mathrm{Y}_{2,0}=\sqrt{\frac{5}{16\pi}}\frac{2z^2-x^2-y^2}{r^2}$$

通过轮换 $x\to y,y\to z,z\to x$ 得到

$$\mathrm{Y}^x_{2,\pm2}=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\frac{(y\pm\mathrm{i}z)^2}{r^2}=-\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}\mathrm{Y}_{2,0}\mp\frac{1}{2}(\mathrm{Y}_{2,1}+\mathrm{Y}_{2,-1})-\frac{1}{4}(\mathrm{Y}_{2,-2}+\mathrm{Y}_{2,2})$$

$$\mathrm{Y}^x_{2,\pm1}=\mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\frac{(y\pm\mathrm{i}z)x}{r^2}=\pm\frac{\mathrm{i}}{2}(\mathrm{Y}_{2,2}-\mathrm{Y}_{2,-2})+\frac{\mathrm{i}}{2}(\mathrm{Y}_{2,1}-\mathrm{Y}_{2,-1})$$

$$\mathrm{Y}^x_{2,0}=\sqrt{\frac{5}{16\pi}}\frac{2x^2-y^2-z^2}{r^2}=-\frac{1}{2}\mathrm{Y}_{2,0}+\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}(\mathrm{Y}_{2,-2}+\mathrm{Y}_{2,2})$$

上式将 Y^x 表示为 Y 的叠加，这可通过对分子的多项式分解得到；对 $l=2$ 只需注意 z^2 仅出现在 $\mathrm{Y}_{2,0}$ 中，而 z 的一次项仅出现在 $\mathrm{Y}_{2,\pm1}$ 中. 由上面结果

$$\begin{aligned}\mathrm{Y}_{2,0}&=\sum_{m=-2}^{2}\mathrm{Y}^x_{2,m}(\mathrm{Y}^x_{2,m},\mathrm{Y}_{2,0})=\sum_{m=-2}^{2}\mathrm{Y}^x_{2,m}(\mathrm{Y}_{2,0},\mathrm{Y}^x_{2,m})^*\\&=-\frac{1}{2}\mathrm{Y}^x_{2,0}-\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}(\mathrm{Y}^x_{2,-2}+\mathrm{Y}^x_{2,2})\end{aligned}\tag{5.14}$$

上面结果表明在 Y_{20} 下，L_x 的可能测值为 0、$\hbar$、$-\hbar$、$2\hbar$ 与 $-2\hbar$，相应的概率幅分别为 $-\frac{1}{2}$、0、0、$-\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}$、$-\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}$，而相应的概率分别为 $\frac{1}{4}$、0、0、$\frac{3}{8}$、$\frac{3}{8}$.

解法二　在角动量态即 $(\boldsymbol{J}^2, J_z)$ 共同本征态 $|jm\rangle$ 下，J_x 或 J_y 取 $\pm m$ 的概率相等，严格证明见题 5.7. 在 Y_{20} 态，$L_x(L_y)$ 的可能测值为 0、$\pm\hbar$、$\pm 2\hbar$，设相应的概率分别为 $P_0^{(20)}$、$P_1^{(20)}$、$P_2^{(20)}$，则概率归一以及角动量平方的关系给出

$$P_0^{(20)} + 2P_1^{(20)} + 2P_2^{(20)} = 1 \tag{5.15}$$

$$2\left[2P_1^{(20)} \cdot 1 + P_0^{(20)} \cdot 0 + 2P_2^{(20)} \cdot 4\right] = 6 \tag{5.16}$$

三个未知数，两个方程，还少一个方程. 考虑 l_x^4 在 Y_{20} 态的期望值. 由 $L_x = \frac{1}{2}(L_+ + L_-)$，则

$$L_x^4 = \frac{1}{16}(L_+ + L_-)^4$$

上式在 Y_{20} 态下取平均，右边不为零的项为

$$L_+^2 L_-^2,\quad L_-^2 L_+^2,\quad (L_+ L_-)^2,\quad (L_- L_+)^2,\quad L_+ L_- L_- L_+,\quad L_- L_+ L_+ L_-$$

一般角动量态 $|jm\rangle$(采用 Condon-Shortley 相位约定)，在升降算符作用下的行为如下给出：

$$J_\pm |jm\rangle = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}\hbar\, |j, m \pm 1\rangle \tag{5.17}$$

据此我们可以写出

$$L_- L_+ |lm\rangle = [l(l+1) - m(m+1)]\,|lm\rangle,\quad L_+ L_- |lm\rangle = [l(l+1) - m(m-1)]\,|lm\rangle$$
$$L_+^2 |lm\rangle = [l(l+1) - m(m+1)]^{1/2}\,[l(l+1) - (m+1)(m+2)]\,|l, m+2\rangle$$
$$L_-^2 |lm\rangle = [l(l+1) - m(m-1)]^{1/2}\,[l(l+1) - (m-1)(m-2)]\,|l, m-2\rangle$$
$$\left[L_+^2 |lm\rangle\right]^\dagger = \langle lm| L_-^2,\quad \left[L_-^2 |lm\rangle\right]^\dagger = \langle lm| l_+^2$$

利用上述各式，取 $l = 2, m = 0$，求得

$$\langle L_x^4 \rangle = 12\hbar^4$$

即得

$$2\left[2P_1^{(20)} \cdot 1 + P_0^{(20)} \cdot 0 + 2P_2^{(20)} \cdot 16\right] = 12 \tag{5.18}$$

式 (5.15)、式 (5.16)、式 (5.18) 联立求解得

$$P_0^{(20)} = \frac{1}{4},\quad P_1^{(20)} = 0,\quad P_2^{(20)} = \frac{3}{8} \tag{5.19}$$

解法三　式 (5.14) 将 Y 表示为 Y^x 的叠加，这是从球谐函数 Y 的表达式通过轮换 $x \to y, y \to z, z \to x$ 得到的. 下面给出一种不同的做法，为了书写方便，采用 Dirac 符号. 对于 $|20\rangle$ 态，设

$$|20\rangle = \sum_k B_k |2k\rangle_x = B_2 |22\rangle_x + B_1 |21\rangle_x + B_0 |20\rangle_x + B_{-1} |2, -1\rangle_x + B_{-2} |2, -2\rangle_x \tag{5.20}$$

$\boldsymbol{L}^2, L_z$ 的共同本征态集合中，升降算符为 $L_\pm = L_x \pm \mathrm{i}L_y$，我们做轮换 $x \to y, y \to z, z \to x$ 知，$\boldsymbol{L}^2, L_x$ 的共同本征态集合中，升降算符为 $L'_\pm = L_y \pm \mathrm{i}L_z$，因而

$$L_z = \frac{1}{2\mathrm{i}}\left(L'_+ - L'_-\right) \tag{5.21}$$

将式 (5.21) 作用到上式，假设各角动量态都采用 Condon-Shortley 相位约定，利用式 (5.17) 给出

$$\begin{aligned} 0 \;=\; & -2B_2\left|21\right\rangle_x + 2B_1\left|22\right\rangle_x - \sqrt{6}B_1\left|20\right\rangle_x + \sqrt{6}B_0\left|21\right\rangle_x - \sqrt{6}B_0\left|2,-1\right\rangle_x \\ & + \sqrt{6}B_{-1}\left|20\right\rangle_x - 2B_{-1}\left|2,-2\right\rangle_x + 2B_{-2}\left|2,-1\right\rangle_x \end{aligned}$$

由各 $\left|2m\right\rangle_x$ 的正交性得

$$\begin{aligned} & 2B_1 = 0, \quad \sqrt{6}B_0 - 2B_2 = 0, \quad \sqrt{6}B_{-1} - \sqrt{6}B_1 = 0 \\ & 2B_{-2} - \sqrt{6}B_0 = 0, \quad -2B_{-1} = 0 \end{aligned}$$

另有归一化条件

$$\left|B_2\right|^2 + \left|B_1\right|^2 + \left|B_0\right|^2 + \left|B_{-1}\right|^2 + \left|B_{-2}\right|^2 = 1$$

以上 6 式联立求得

$$B_2 = -\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}, \quad B_1 = 0, \quad B_0 = -\frac{1}{2}, \quad B_{-1} = 0, \quad B_{-2} = -\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}$$

由此同样给出式 (5.14).

解法四　在 $(\boldsymbol{L}^2, L_z)$ 表象的 $l = 2$ 的子空间中，给出

$$L_x = \frac{1}{2}\left(L_+ + L_-\right)$$

的矩阵表示，然后求出 $L_x = 2\hbar$，$\hbar$，0，$-\hbar$，$-2\hbar$ 的本征态

$$\phi_{22} = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ \sqrt{6} \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \phi_{21} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \phi_{20} = \sqrt{\frac{3}{8}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -\sqrt{\frac{2}{3}} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\phi_{2-1} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \phi_{2-2} = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ \sqrt{6} \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

即给出各 Y_{20} 表示为 Y^x_{2m} 的叠加系数，

$$B_2 = -\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}, \quad B_1 = 0, \quad B_0 = -\frac{1}{2}, \quad B_{-1} = 0, \quad B_{-2} = -\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}$$

由此同样给出式 (5.14).

5.10　与角动量对易的标量算符在角动量本征态下的期望值与磁量子数无关

题 5.10　设算符 F 与角动量算符 $\boldsymbol{J}$ 对易，即 F 为标量算符，证明：

(1) 在 $(\boldsymbol{J}^2, J_z)$ 共同本征态 $|jm\rangle$ 下，F 期望值与磁量子数 m 无关；

(2) 在给定 j 的态所张开的 $(2j+1)$ 维子空间中，F 可表示成常数矩阵.

证明　(1) 在 $(\boldsymbol{J}^2, J_z)$ 的正交归一共同本征态 $|jm\rangle$ 下，不妨对 $|jm\rangle$ 采用 Condon-Short 相因子约定 (为通常所采用)，则有

$$\begin{cases} J_+|jm\rangle &= \sqrt{(j+m+1)(j-m)}|j,m+1\rangle \\ &= \sqrt{j(j+1)-m(m+1)}|j,m+1\rangle \\ J_-|jm\rangle &= \sqrt{(j-m+1)(j+m)}|j,m-1\rangle \\ &= \sqrt{j(j+1)-m(m-1)}|j,m-1\rangle \end{cases} \tag{5.22}$$

其中，$J_+ = J_x + \mathrm{i}J_y, J_- = J_x - \mathrm{i}J_y = J_+^\dagger$. 这样

$$\begin{aligned} \langle jm+1|F|jm+1\rangle &= \frac{1}{n}j(j+1)-m(m+1)\langle jm|J_-FJ_+|jm\rangle \\ &= \frac{1}{j(j+1)-m(m+1)}\langle jm|FJ_-J_+|jm\rangle \\ &= \frac{1}{j(j+1)-m(m+1)}\langle jm|F\left(\boldsymbol{J}^2-J_z^2-J_z\right)|jm\rangle \\ &= \langle jm|F|jm\rangle \end{aligned}$$

即有 $\langle jm|F|jm\rangle = \langle jm+1|F|jm+1\rangle$. 依此类推，对于属于同一个 j 的 m 与 m'，总有

$$\langle jm'|F|jm'\rangle = \langle jm|F|jm\rangle$$

因此 $\langle jm|F|jm\rangle$ 与 m 无关，仅是 j 的函数，可以记为

$$\langle jm|F|jm\rangle = \langle F\rangle_j \tag{5.23}$$

(2) 按题设 $[F, J_z] = 0$，因而

$$0 = \langle jm'|[F, J_z]|jm\rangle = (m-m')\langle jm'|F|jm\rangle$$

可见，只有当 $m = m'$ 时，$\langle jm'|F|jm\rangle$ 才不为零. 这样

$$\langle jm'|F|jm\rangle = \langle F\rangle_j \delta_{mm'}, \tag{5.24}$$

即在属于同一个 j 的 $\{|jm\rangle\}$ 子空间中，F 等价于常数量 $\langle F\rangle_j$. 也就是说，F 的矩阵表示为

$$F = \langle F\rangle_j I$$

(I 为单位矩阵) 为一常数矩阵.

说明　我们记得，群论中有一条 Schur 定理. 本题算符 F 与角动量算符 $\boldsymbol{J}$ 对易，则在属于同一个 j 的 $\{|jm\rangle\}$ 子空间中，F 等价于一个常数量. 也可以说，这是 Schur 定理的结果.

5.11　角动量的投影定理

题 5.11　$\boldsymbol{J}$ 为角动量算符，$\boldsymbol{A}$ 为矢量算符，满足 $[J_\alpha, A_\beta] = \mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\gamma$，$(\alpha,\beta,\gamma = 1,2,3, \hbar = 1)$. 在 $(\boldsymbol{J}^2, J_z)$ 表象下，证明：

(1) 在 $|jm\rangle$ 下，$\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{J}$ 的期望值与磁量子数 m 无关；

(2) $\boldsymbol{A}$ 的矩阵元

$$\langle jm'|\boldsymbol{A}|jm\rangle = \langle jm'|\boldsymbol{J}|jm\rangle \frac{\langle \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{J}\rangle_j}{j(j+1)}$$

证明　(1) 下面题 5.12 式 (5.30) 表明，$\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}$ 是标量算符. 在属于同一个 j 的 $\{|jm\rangle\}$ 子空间中，$\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{J}$ 等价于常数量 $\langle \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{J}\rangle_j$. 因而在 $(\boldsymbol{J}^2, J_z)$ 共同本征态 $|jm\rangle$ 下，$\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{J}$ 的期望值与磁量子数 m 无关.

(2) 题 5.12 式 (5.35) 可写为

$$\boldsymbol{J}^4\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}\boldsymbol{J}^4 - 2\boldsymbol{J}^2\boldsymbol{A}\boldsymbol{J}^2 = 2(\boldsymbol{J}^2\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}\boldsymbol{J}^2) - 4\boldsymbol{J}(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{J}) \tag{5.25}$$

此式两边取矩阵元 $\langle jm'|\cdots|jm\rangle$，则 $\boldsymbol{J}^2 \to j(j+1)$，$\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{J} \to \langle \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{J}\rangle_j$. 上式左边取矩阵元为零，这样得到

$$\langle jm'|\boldsymbol{A}|jm\rangle = \langle jm'|\boldsymbol{J}|jm\rangle \frac{\langle \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{J}\rangle_j}{j(j+1)} \tag{5.26}$$

如取 $m = m'$，即得期望值公式

$$\langle \boldsymbol{A}\rangle_{jm} = \langle \boldsymbol{J}\rangle_{jm} \frac{\langle \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{J}\rangle_j}{j(j+1)} \tag{5.27}$$

式 (5.26)和式 (5.27)称为投影定理. 式 (5.27)不仅对 $|jm\rangle$ 态成立，而且对于 $\boldsymbol{J}$ 在任何 $\boldsymbol{n}$ 方向的投影 J_n 的任何一个本征态 $|j, J_n = m\rangle$ 也是成立的.

5.12　角动量算符和矢量算符的几个代数关系

题 5.12　设 $\boldsymbol{J}$ 为角动量算符，$\boldsymbol{A}$ 为矢量算符，则有关系

$$[J_\alpha, A_\beta] = \mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\gamma, \quad \alpha,\beta,\gamma = 1,2,3,\ \hbar = 1 \tag{5.28}$$

(1) 试计算 $\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J} + \boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A}$；

(2) 试计算 $[\boldsymbol{J}, \boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}]$, $[\boldsymbol{J}^2, \boldsymbol{A}]$；

(3) 试证明：

$$\boldsymbol{J}\times(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A}) = (\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A})\boldsymbol{J} - \boldsymbol{J}^2\boldsymbol{A} + \mathrm{i}\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A}, (\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J})\times\boldsymbol{J} = \boldsymbol{J}(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{J}) - \boldsymbol{A}\boldsymbol{J}^2 + \mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J}$$

(4) 试证明：$[\boldsymbol{J}^2, [\boldsymbol{J}^2, \boldsymbol{A}]] = 2(\boldsymbol{J}^2\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}\boldsymbol{J}^2) - 4\boldsymbol{J}(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{J})$.

解答　(1) 根据题给式 (5.28)，得

$$(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J} + \boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A})_\alpha = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}(A_\beta J_\gamma + J_\beta A_\gamma) = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}(-A_\gamma J_\beta + J_\beta A_\gamma)$$

$$= \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}[J_\beta, A_\gamma] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\mathrm{i}\varepsilon_{\beta\gamma\gamma'}A_{\gamma'} = 2\mathrm{i}\delta_{\alpha\gamma'}A_{\gamma'} = 2\mathrm{i}A_\alpha,$$

也就是

$$\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J} + \boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A} = 2\mathrm{i}\boldsymbol{A} \tag{5.29}$$

(2) 根据式 (5.28)，得

$$\begin{aligned}[J_\alpha, \boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}] &= [J_\alpha, J_\beta A_\beta] = J_\beta[J_\alpha, A_\beta] + [J_\alpha, J_\beta]A_\beta \\ &= \mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}J_\beta A_\gamma + \mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}J_\gamma A_\beta = \mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}(J_\gamma A_\beta + J_\beta A_\gamma) \\ &= \mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}(J_\gamma A_\beta - J_\gamma A_\beta) = 0\end{aligned}$$

也就是

$$[\boldsymbol{J}, \boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}] = 0 \tag{5.30}$$

可见 $\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}$ 转动不变，是标量算符. 其次

$$\begin{aligned}\left[\boldsymbol{J}^2, A_\alpha\right] &= [J_\beta J_\beta, A_\alpha] = J_\beta[J_\beta, A_\alpha] + [J_\beta, A_\alpha]J_\beta = \mathrm{i}\varepsilon_{\beta\alpha\gamma}(J_\beta A_\gamma + A_\gamma J_\beta) \\ &= -\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}(J_\beta A_\gamma + A_\gamma J_\beta) = -\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}(J_\beta A_\gamma - A_\beta J_\gamma) \\ &= \mathrm{i}(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J} - \boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A})_\alpha\end{aligned}$$

也就是

$$\left[\boldsymbol{J}^2, \boldsymbol{A}\right] = \mathrm{i}(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J} - \boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A}) \tag{5.31}$$

(3) 用 $\boldsymbol{J}$ 对式 (5.29) 两端分别从左边与右边作点乘，即得[①]

$$(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A})\cdot\boldsymbol{J} = \boldsymbol{J}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J}) = \mathrm{i}\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A} \tag{5.32}$$

利用题 5.4 所给的算符公式 $[\boldsymbol{A}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})]_\alpha = \boldsymbol{A}\cdot(B_\alpha\boldsymbol{C}) - (\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})C_\alpha$ 可得

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{J}\times(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A})]_\alpha &= \boldsymbol{J}\cdot(J_\alpha\boldsymbol{A}) - \boldsymbol{J}^2A_\alpha \\ &= J_\beta J_\alpha A_\beta - \boldsymbol{J}^2A_\alpha = J_\alpha J_\beta A_\beta + [J_\beta, J_\alpha]A_\beta - \boldsymbol{J}^2A_\alpha \\ &= J_\alpha(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}) + \mathrm{i}\varepsilon_{\beta\alpha\gamma}J_\gamma A_\beta - \boldsymbol{J}^2A_\alpha \\ &= J_\alpha(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}) + \mathrm{i}(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A})_\alpha - \boldsymbol{J}^2A_\alpha\end{aligned}$$

即有

$$\boldsymbol{J}\times(\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A}) = \mathrm{i}\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A} + \boldsymbol{J}(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}) - \boldsymbol{J}^2\boldsymbol{A} \tag{5.33}$$

类似地，利用题 5.4 所给的算符公式 $[(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\times\boldsymbol{C}]_\alpha = \boldsymbol{A}\cdot(B_\alpha\boldsymbol{C}) - A_\alpha(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{C})$，可证[②]

$$(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J})\times\boldsymbol{J} = \mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J} + \boldsymbol{J}(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A}) - \boldsymbol{A}\boldsymbol{J}^2 \tag{5.34}$$

其中用到了式 (5.30).

① 由于式 (5.28)，$\boldsymbol{J}$ 与 $\boldsymbol{A}$ 的相同分量对易，故有 $\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{J}$.

② 对式 (5.33) 取 Hermite 共轭，并将该 Hermite 共轭式中的 $A^\dagger$ 全部换为 A 一样给出式 (5.34).

(4) 利用式 (5.31) 以及 $\boldsymbol{J}^2$ 和 $\boldsymbol{J}$ 的对易性，可得

$$\begin{aligned}\left[\boldsymbol{J}^2,\left[\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{A}\right]\right] &= \mathrm{i}\left[\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J}\right]-\mathrm{i}\left[\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A}\right]=\mathrm{i}\left[\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{A}\right]\times\boldsymbol{J}-\mathrm{i}\boldsymbol{J}\times\left[\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{A}\right]\\ &= -(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J}-\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A})\times\boldsymbol{J}+\boldsymbol{J}\times(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{J}-\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{A})\end{aligned}$$

再利用式 (5.29)、式 (5.33) 与式 (5.34)，上式可简化为

$$\left[\boldsymbol{J}^2,\left[\boldsymbol{J}^2,\boldsymbol{A}\right]\right]=2(\boldsymbol{J}^2\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\boldsymbol{J}^2)-4\boldsymbol{J}(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{J}) \tag{5.35}$$

即为所证.

5.13　σ_n 的本征值与本征态

题 5.13　给定 (θ,φ) 方向的单位矢量

$$\boldsymbol{n}=(\sin\theta\cos\varphi,\sin\theta\sin\varphi,\cos\theta)$$

在 σ_z 表象中，求 $\sigma_n=\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$ 的本征值和本征函数.

解法一　设 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$ 算符的本征矢是

$$\xi=c_1\alpha+c_2\beta \tag{5.36}$$

相应的本征值是 λ. 题给的算符即

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}=\sin\theta\cos\varphi\sigma_x+\sin\theta\sin\varphi\sigma_y+\cos\theta\sigma_z \tag{5.37}$$

它的本征方程如下：

$$(\sin\theta\cos\varphi\sigma_x+\sin\theta\sin\varphi\sigma_y+\cos\theta\sigma_z)(c_1\alpha+c_2\beta)=\lambda(c_1\alpha+c_2\beta) \tag{5.38}$$

按 Pauli 矩阵表式，σ_x、σ_y 与 σ_z 对 σ^2、σ_z 的共同本征态 α、β 的作用如下：

$$\begin{cases}\sigma_x\alpha=\beta, & \sigma_x\beta=\alpha\\ \sigma_y\alpha=\mathrm{i}\beta, & \sigma_y\beta=-\mathrm{i}\alpha\\ \sigma_z\alpha=\alpha, & \sigma_z\beta=-\beta\end{cases} \tag{5.39}$$

将上式代入式 (5.38)，比较此式两边 α，β 的系数，可得

$$\begin{aligned}\cos\theta c_1+(\sin\theta\cos\varphi-\mathrm{i}\sin\theta\sin\varphi)c_2&=\lambda c_1\\ (\sin\theta\cos\varphi+\mathrm{i}\sin\theta\sin\varphi)c_1-\cos\theta c_2&=\lambda c_2\end{aligned} \tag{5.40}$$

也就是

$$\begin{aligned}(\cos\theta-\lambda)c_1+\sin\theta\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\cdot c_2&=0\\ \sin\theta\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\cdot c_1-(\cos\theta+\lambda)c_2&=0\end{aligned} \tag{5.41}$$

式 (5.41) 为关于 c_1、c_2 的二阶线性方程组，它有非平凡解 (也就是 c_1 与 c_2 不全为零) 的条件是其系数行列式为零，即得如下久期方程式：

$$\begin{vmatrix} \cos\theta-\lambda & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta-\lambda \end{vmatrix}=0 \tag{5.42}$$

它的解为 $\lambda=\pm1$. 当 $\lambda=1$ 时，代入式 (5.41) 得

$$c_2=\tan\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}c_1 \tag{5.43}$$

式 (5.36) 的归一化条件是

$$|c_1|^2+|c_2|^2=1 \tag{5.44}$$

将式 (5.43) 代入式 (5.44)，求得

$$c_1=e^{i\delta}\cos\frac{\theta}{2},\quad c_2=e^{i(\delta+\varphi)}\sin\frac{\theta}{2}$$

其中，δ 为任意实数，即不定相位. 由此得归一化本征态是

$$\chi_1=e^{i\delta}\left\{\cos\frac{\theta}{2}\alpha+\sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\beta\right\} \tag{5.45}$$

当 $\lambda=-1$ 时，c_1 与 c_2 之间满足 $c_2=-\cot\dfrac{\theta}{2}e^{-i\varphi}c_1$. 同样解得归一化本征态是

$$\chi_2=e^{i\delta'}\left\{-e^{-i\varphi}\sin\frac{\theta}{2}\alpha+\cos\frac{\theta}{2}\beta\right\} \tag{5.46}$$

解法二　(矩阵方法)$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})^2=1$，所以 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$ 的本征值为 ±1.

根据 Pauli 矩阵表达式 [见式 (5.122)]，我们可以写出 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}=\sin\theta\cos\varphi\sigma_x+\sin\theta\sin\varphi\sigma_y+\cos\theta\sigma_z$ 的如下矩阵：

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}=\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix} \tag{5.47}$$

这样，$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$ 的本征方程写为

$$\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \tag{5.48}$$

其余步骤与上面方法相同，求得 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$ 的归一化本征态如下：

$$\chi_1=\begin{pmatrix} \cos\dfrac{\theta}{2}e^{i\delta} \\ \sin\dfrac{\theta}{2}e^{i(\delta+\varphi)} \end{pmatrix},\quad \chi_2=\begin{pmatrix} \sin\dfrac{\theta}{2}e^{i(\delta'-\varphi)} \\ -\cos\dfrac{\theta}{2}e^{i\delta'} \end{pmatrix} \tag{5.49}$$

与前面结果相同.

说明 1　归一化态可以差一个整体相位，故式 (5.49) 中可以取 $\delta=\delta'=0$，而将其表示为

$$\chi_1=\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\end{pmatrix},\quad \chi_2=\begin{pmatrix}\sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\\ -\cos\dfrac{\theta}{2}\end{pmatrix} \tag{5.50}$$

还有一种等价的对称表示

$$\chi_1=\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}}\end{pmatrix},\quad \chi_2=\begin{pmatrix}-\sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}}\\ \cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}}\end{pmatrix} \tag{5.51}$$

而 $\chi_1=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi\sigma_z/2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\sigma_y/2}\chi_{1/2}(s_z)$，$\chi_2=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi\sigma_z/2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\sigma_y/2}\chi_{-1/2}(s_z)$. 方位角 (θ,φ) 的取值范围为 $0\leqslant\theta\leqslant\pi$，$0\leqslant\varphi<2\pi$，在该范围内 χ_1、χ_2 均是 (θ,φ) 的单值函数.

说明 2　自旋为 $\hbar/2$ 粒子的任意归一化自旋态为

$$\chi=\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix} \tag{5.52}$$

满足 $|a|^2+|b|^2=1$. 故 a、b 的可能值为

$$a=\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi_1},\quad b=\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi_2}$$

归一化态可以差一个整体相位，故式 (5.52) 的态可表示为

$$\chi=\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}}\end{pmatrix}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi\sigma_z/2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\sigma_y/2}\chi_{1/2}(s_z)$$

其中 $\varphi=\varphi_2-\varphi_1$. 对于 a、b 的任意取值，上述表达式中参变量 (θ,φ) 的取值范围为 $0\leqslant\theta\leqslant\pi$，$0\leqslant\varphi<4\pi$，在该范围内 χ 是 (θ,φ) 的单值函数. 这里 (θ,φ) 的取值范围比方位角的取值范围扩大了一倍. $2\pi\leqslant\varphi<4\pi$ 的自旋态与 $0\leqslant\varphi<2\pi$ 的自旋态相比，仅差一个负号 (相差 π)，如果忽略这个整体相位差[①]，则参变量 (θ,φ) 的取值范围可取为 $0\leqslant\theta\leqslant\pi$，$0\leqslant\varphi<2\pi$，也就是上面的方位角的取值范围. 这样与式 (5.51) 比较，可知任意 $\hbar/2$ 自旋态必可唯一表示为 $\boldsymbol{\sigma}$ 在 (θ,φ) 方向的投影 σ_n 的本征态 (本征值为 1)，或者说自旋沿 (θ,φ) 方向的本征态. 若设该方向的单位矢量为 $\boldsymbol{n}$，则按照后面题 5.14 式 (5.69)，在该态下的极化矢量 $\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle=\boldsymbol{n}$.

说明 3　有时 $\boldsymbol{n}$ 用直角分量来表示 $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{e}_xn_x+\boldsymbol{e}_yn_y+\boldsymbol{e}_zn_z$，则

$$\sigma_n=\sigma_xn_x+\sigma_yn_y+\sigma_zn_z=\begin{pmatrix}n_z & n_x-\mathrm{i}n_y\\ n_x+\mathrm{i}n_y & -n_z\end{pmatrix} \tag{5.53}$$

① 在拓扑相位有关的一些场合，这个相差不能忽略!

此时可求得 [可以直接利用式 (5.50) 或式 (5.51) 所给波函数的 2 分量比值化简]

$$\chi_1=\frac{1}{\sqrt{2(1+n_z)}}\begin{pmatrix}1+n_z\\ n_x+\mathrm{i}n_y\end{pmatrix},\quad \chi_2=\frac{1}{\sqrt{2(1+n_z)}}\begin{pmatrix}n_x-\mathrm{i}n_y\\ -1-n_z\end{pmatrix} \tag{5.54}$$

或者

$$\chi_1=\frac{1}{\sqrt{2(1-n_z)}}\begin{pmatrix}n_x-\mathrm{i}n_y\\ 1-n_z\end{pmatrix},\quad \chi_2=\frac{1}{\sqrt{2(1-n_z)}}\begin{pmatrix}-1+n_z\\ n_x+\mathrm{i}n_y\end{pmatrix} \tag{5.55}$$

如果 $n_z\neq\pm1$，则式 (5.54) 与式 (5.55) 等价 (仅差一个整体相因子). 如 $\boldsymbol{n}=(0,0,1)$ 用式 (5.54)；如 $\boldsymbol{n}=(0,0,-1)$ 则应用式 (5.55).

5.14　1/2 自旋沿正 z 轴，求自旋沿空间方向分量的可能值及相应概率

题 5.14　(1) 设电子处于 s_z 本征态 $\chi_{1/2}$ 下，求 $\sigma_n=\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$ 的可能测值及相应的概率，其中 $\boldsymbol{n}=(n_x,n_y,n_z)$ 是单位矢量；

(2) 对于处于 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}=+1$ 的自旋态，求 $\boldsymbol{\sigma}$ 的各分量的可能测值及相应的概率以及 $\boldsymbol{\sigma}$ 的期望值.

解法一　(1) 题 5.13 求得 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$ 的本征矢是

$$\chi_1=\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}\end{pmatrix},\quad \chi_2=\begin{pmatrix}\sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\\ -\cos\dfrac{\theta}{2}\end{pmatrix} \tag{5.56}$$

它们分别为 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$ 的本征值为 ±1 的本征矢. 而

$$\begin{aligned}\langle\chi_1|\chi_{\frac12}\rangle&=\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}\end{pmatrix}^{\dagger}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\left(\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi},\sin\frac{\theta}{2}\right)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\\&=\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\\ \langle\chi_2|\chi_{\frac12}\rangle&=\begin{pmatrix}\sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\\ -\cos\dfrac{\theta}{2}\end{pmatrix}^{\dagger}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\left(\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi},-\cos\frac{\theta}{2}\right)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\\&=\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\end{aligned}$$

由此得

$$\begin{cases}|\langle\chi_1|\chi_{\frac12}\rangle|^2=\cos^2\dfrac{\theta}{2}=\dfrac12(1+\cos\theta)=\dfrac12(1+n_z)\\ |\langle\chi_2|\chi_{\frac12}\rangle|^2=\sin^2\dfrac{\theta}{2}=\dfrac12(1-\cos\theta)=\dfrac12(1-n_z)\end{cases} \tag{5.57}$$

这样 $\chi_{\frac{1}{2}}$ 下 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$ 的可能测值为 $+1$, -1，而相应的概率分别为 $\frac{1}{2}(1+n_z)$ 和 $\frac{1}{2}(1-n_z)$.

(2) $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$ 取本征值 1 的自旋态为式 (5.56) 列出的 χ_1. σ_z 的本征态已知为

$$\alpha=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\quad \beta=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \tag{5.58}$$

分别相应于 σ_z 的 $+1$, -1 两个本征值. 而

$$\langle\alpha|\chi_1\rangle=\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi},\quad \langle\beta|\chi_1\rangle=\sin\frac{\theta}{2}$$

因此

$$\begin{aligned}|\langle\alpha|\chi_1\rangle|^2&=\cos^2\frac{\theta}{2}=\frac{1}{2}(1+\cos\theta)=\frac{1}{2}(1+n_z)\\ |\langle\beta|\chi_1\rangle|^2&=\sin^2\frac{\theta}{2}=\frac{1}{2}(1-\cos\theta)=\frac{1}{2}(1-n_z)\end{aligned} \tag{5.59}$$

分别为测 σ_z 为 $+1$, -1 的概率，故 σ_z 的期望值为

$$\langle\sigma_z\rangle=\frac{1}{2}(1+n_z)-\frac{1}{2}(1-n_z)=n_z. \tag{5.60}$$

而 σ_x 的本征态由题 9.1 给出，可取为

$$\chi_{\frac{1}{2}}(x)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix},\quad \chi_{-\frac{1}{2}}(x)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$$

本征值分别为 $+1$, -1. 由

$$\begin{aligned}\langle\chi_{\frac{1}{2}}(x)|\chi_1\rangle&=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}+\sin\frac{\theta}{2}\right)\\ \langle\chi_{-\frac{1}{2}}(x)|\chi_1\rangle&=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}-\sin\frac{\theta}{2}\right)\end{aligned}$$

得相应的概率为

$$\begin{cases}|\langle\chi_{\frac{1}{2}}(x)|\chi_1\rangle|^2=\frac{1}{2}(1+\sin\theta\cos\varphi)=\frac{1}{2}(1+n_x)\\ |\langle\chi_{-\frac{1}{2}}(x)|\chi_1\rangle|^2=\frac{1}{2}(1-\sin\theta\cos\varphi)=\frac{1}{2}(1-n_x)\end{cases} \tag{5.61}$$

故 σ_x 的期望值为

$$\langle\sigma_x\rangle=\frac{1}{2}(1+n_x)-\frac{1}{2}(1-n_x)=n_x \tag{5.62}$$

在式 (5.56) 中取 $\theta=\varphi=\frac{\pi}{2}$ 得 σ_y 的本征态为

$$\chi_{\frac{1}{2}}(y)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}-\mathrm{i}\\1\end{pmatrix},\quad \chi_{-\frac{1}{2}}(y)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}-\mathrm{i}\\-1\end{pmatrix}$$

本征值分别为 $+1$, -1. 由

$$\langle\chi_{\frac{1}{2}}(y)|\chi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\mathrm{i}\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}+\sin\frac{\theta}{2}\right)$$
$$\langle\chi_{-\frac{1}{2}}(y)|\chi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\mathrm{i}\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}-\sin\frac{\theta}{2}\right)$$

得相应的概率为

$$\begin{cases} |\langle\chi_{\frac{1}{2}}(y)|\chi_1\rangle|^2=\dfrac{1}{2}(1+\sin\theta\sin\varphi)=\dfrac{1}{2}(1+n_y) \\ |\langle\chi_{-\frac{1}{2}}(y)|\chi_1\rangle|^2=\dfrac{1}{2}(1-\sin\theta\sin\varphi)=\dfrac{1}{2}(1-n_y) \end{cases} \tag{5.63}$$

故 σ_y 的期望值为

$$\langle\sigma_y\rangle=\frac{1}{2}(1+n_y)-\frac{1}{2}(1-n_y)=n_y \tag{5.64}$$

如前面式 (5.59)$\sim$ 式 (5.64) 所给，在 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}=+1$ 的自旋态下，$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle=\boldsymbol{n}$；对于 $\alpha=x,y,z$，该态下 σ_α 取值为 ±1 的概率分别为 $\dfrac{1}{2}(1\pm n_\alpha)$.

解法二　(1) 在 $\sigma_z=1$ 的自旋态 $\chi_{\frac{1}{2}}$，σ_n 的可能测值为本征值 ±1；设相应概率为 P_+ 及 P_-，则

$$\langle\sigma_n\rangle=1\cdot P_++(-1)\cdot P_-=P_+-P_- \tag{5.65}$$

另外，在 σ_z 本征态 $\chi_{\frac{1}{2}}$ 下，σ_x 与 σ_y 的期望值为零，因而在该态下

$$\langle\sigma_n\rangle=\langle\sigma_xn_x+\sigma_yn_y+\sigma_zn_z\rangle=\langle\sigma_z\rangle n_z=n_z=\cos\theta \tag{5.66}$$

式 (5.65), 式 (5.66) 给出

$$P_+-P_-=n_z=\cos\theta \tag{5.67}$$

上式与归一化条件 $P_++P_-=1$ 联立求解得

$$P_+=\frac{1}{2}(1+n_z),\quad P_-=\frac{1}{2}(1-n_z) \tag{5.68}$$

上式与解法一的式 (5.57) 一致.

(2) 在式 (5.66) 中，θ 是 z 轴和 $\boldsymbol{n}$ 的夹角. z 轴和 $\boldsymbol{n}$ 的选取是任意的，我们也可将它们互换，使得原来的 z 轴作为新的 $\boldsymbol{n}$，原来的 $\boldsymbol{n}$ 取作新的 z 轴，二者夹角当然没有变. 由此可知，在 $\sigma_n=1$ 的自旋态，σ_z 的期望值也为 $\cos\theta$，即 n_z. 我们将 x、y、z 轮换，即得在 $\sigma_n=1$ 的自旋态 χ_1 下 Pauli 算符的期望值为

$$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle=\boldsymbol{n} \tag{5.69}$$

这与解法一的式 (5.60)、式 (5.62)、式 (5.64) 一致. 在 χ_1 态，$\boldsymbol{\sigma}$ 各分量的取值当然也为 ±1，仿照 (1) 小题中计算，可得

$$\sigma_x=\pm1\text{的概率分别为}\frac{1}{2}(1\pm n_x)$$

$$\sigma_y = \pm 1\text{的概率分别为}\frac{1}{2}(1 \pm n_y)$$
$$\sigma_z = \pm 1\text{的概率分别为}\frac{1}{2}(1 \pm n_z) \tag{5.70}$$

这与解法一的式 (5.59)、式 (5.61)、式 (5.63) 一致.

5.15　与 Pauli 算符的三个分量都对易的非零二维矩阵必为常数矩阵

题 5.15　记 2×2 矩阵为 A. 试证明：若 A 与 Pauli 矩阵 $\boldsymbol{\sigma}$ 的三个分量都对易，则 A 必为常数矩阵.

证法一　Pauli 矩阵加上单位矩阵 I(记为 σ_0) 共 4 个矩阵，构成了 2×2 的复矩阵空间的一组完备基，因此对于任意 2×2 矩阵 A，A 可表示为

$$A = \sum_{\alpha=0}^{3} C_\alpha \sigma_\alpha = C_0\sigma_0 + C_1\sigma_1 + C_2\sigma_2 + C_3\sigma_3 \tag{5.71}$$

其中，$C_\alpha = \frac{1}{2}\mathrm{tr}A\sigma_\alpha(\alpha = 0,1,2,3)$ 均为复数.

以 σ_1 分别左乘和右乘式 (5.71) 得到

$$\begin{aligned} \sigma_1 A &= C_0\sigma_1 + C_1 + \mathrm{i}C_2\sigma_3 - \mathrm{i}C_3\sigma_2 \\ A\sigma_1 &= C_0\sigma_1 + C_1 - \mathrm{i}C_2\sigma_3 + \mathrm{i}C_3\sigma_2 \end{aligned}$$

按题给条件 $\sigma_1 A = A\sigma_1$，故有

$$C_2\sigma_3 - C_3\sigma_2 = 0$$

上式两边分别乘 σ_3 和 σ_2 并取 tr 得

$$C_2 = 0, \quad C_3 = 0$$

类似地，以 σ_2 分别左乘和右乘式 (5.71)，可证

$$C_1 = 0, \quad C_3 = 0$$

因此 $A = C_0 I$，即 A 为常量矩阵.

证法二　$[(\Lambda\cdot\boldsymbol{\sigma}), \sigma_1] = [(\Lambda\cdot\boldsymbol{\sigma}), (\boldsymbol{e}_1\cdot\boldsymbol{\sigma})] = 2\mathrm{i}(\Lambda\times\boldsymbol{e}_1)\cdot\boldsymbol{\sigma}$，其中 $\boldsymbol{e}_1$ 表示沿 x 方向的单位矢量，而 Λ 与 $\boldsymbol{\sigma}$ 对易. 这样 $(\Lambda\cdot\boldsymbol{\sigma})$ 与 σ_1 对易意味着 $\Lambda\times\boldsymbol{e}_1 = 0$，或者说 Λ 与 $\boldsymbol{e}_1$ 平行. $(\Lambda\cdot\boldsymbol{\sigma})$ 与 $\boldsymbol{\sigma}$ 的三个分量都对易意味着 $\Lambda\times\boldsymbol{n}_a = 0$，其中 $\boldsymbol{n}_a$ 是三维空间任意方向单位矢量. 或者说 Λ 可以指向任意方向，故只能为零.

由式 (5.71)，A 可表示为

$$A = C_0\sigma_0 + \boldsymbol{C}\cdot\boldsymbol{\sigma}$$

设其中 $\boldsymbol{C}=\boldsymbol{C}_R+\mathrm{i}\boldsymbol{C}_I$. 设 $\boldsymbol{C}_R$ 指向 $\boldsymbol{n}$ 方向，另任取和 $\boldsymbol{n}$ 正交的单位矢量 $\boldsymbol{k}$，按题设和上述结论

$$0=[\boldsymbol{C}_R\cdot\boldsymbol{\sigma},\ (\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{\sigma}]=[C_R\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{k})]\cdot\boldsymbol{\sigma}=-C_R\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\sigma}$$

即有 $C_R=0$. 同样可证 $\boldsymbol{C}_I=0$. 因此 $A=C_0I$，即 A 为常量矩阵.

5.16　角动量的对易关系

题 5.16　证明不存在与 $\boldsymbol{\sigma}$ 的三个分量都反对易的非零二维矩阵.

证明　**证法一**　设矩阵 A 与 $\boldsymbol{\sigma}$ 的三个分量都反对易，也就是

$$\sigma_1A\ =\ -A\sigma_1 \tag{5.72}$$

$$\sigma_2A\ =\ -A\sigma_2 \tag{5.73}$$

$$\sigma_3A\ =\ -A\sigma_3 \tag{5.74}$$

由于 $\sigma_1\sigma_2=\mathrm{i}\sigma_3$，再利用式 (5.72)、式 (5.73) 得

$$\mathrm{i}\sigma_3A=\sigma_1\sigma_2A=-\sigma_1A\sigma_2=A\sigma_1\sigma_2=\mathrm{i}A\sigma_3$$

或者 $A\sigma_3=\sigma_3A$，可见 A 与 σ_1、σ_2 反对易导致 A 与 σ_3 对易，再与式 (5.74) 联立即得

$$A\sigma_3=-A\sigma_3$$

上式两边同时右乘 σ_3 即得 $A=-A$，因而必有 $A=0$.

证法二　设矩阵 A 与 $\boldsymbol{\sigma}$ 的三个分量都反对易，也就是

$$A\sigma_i+\sigma_iA=0$$

其中，$i=1,2,3$. 两边取 tr，即得 $\mathrm{tr}A\sigma_i=0$，因而 A 按式 (5.71) 展开的式中 $C_1=C_2=C_3=0$，故只能是常量矩阵. 既然是常量矩阵，$A\sigma_1=\sigma_1A$，但题给 $A\sigma_1=-\sigma_1A$，故 $A\sigma_1=-A\sigma_1$，此式两边右乘 σ_1 得 $A=-A$，因而必有 $A=0$.

5.17　SU_2 矩阵的一般形式

题 5.17　满足 $U^\dagger U=UU^\dagger=1$(幺正)，$\det U=1$(幺模) 的 n 维矩阵称为 SU(N) 矩阵. 求 SU(2) 矩阵的一般形式.

解答　可设

$$U=\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix},\quad U^\dagger=\begin{pmatrix}a^* & c^*\\ b^* & d^*\end{pmatrix} \tag{5.75}$$

条件 $U^\dagger U=1$ 给出

$$aa^*+cc^*=bb^*+dd^*=1 \tag{5.76a}$$

$$a^*b+c^*d=ab^*+cd^*=0 \tag{5.76b}$$

条件 $UU^\dagger=1$ 给出

$$aa^*+bb^*=cc^*+dd^*=1 \tag{5.77a}$$

$$ac^*+bd^*=a^*c+b^*d=0 \tag{5.77b}$$

条件 $\det U=1$ 给出

$$ad-bc=1 \tag{5.78}$$

由式 (5.76a) 以及式 (5.77a) 易得

$$bb^*=cc^*,\quad aa^*=dd^*$$

由上式，综合式 (5.76a)~ 式 (5.78)，可以令

$$\begin{cases} a=\cos\omega e^{i\alpha}, & b=\sin\omega e^{i\beta} \\ d=\cos\omega e^{i\gamma}, & c=\sin\omega e^{i\delta} \end{cases} \tag{5.79}$$

上面 α、β、γ、δ 和 ω 为实参量. 将上式代入式 (5.78) 得

$$\cos^2\omega e^{i(\alpha+\gamma)}-\sin^2\omega e^{i(\beta+\delta)}=1 \tag{5.80}$$

上式左边最大值为 1，这只有当

$$e^{i(\alpha+\gamma)}=1,\quad e^{i(\beta+\delta)}=-1$$

时取到，或者

$$e^{i\gamma}=e^{-i\alpha},\quad e^{i\delta}=-e^{i\beta}$$

代入式 (5.79)，进而得

$$U=\begin{pmatrix} \cos\omega e^{i\alpha} & \sin\omega e^{i\beta} \\ -\sin\omega e^{-i\beta} & \cos\omega e^{-i\alpha} \end{pmatrix}$$

α、β、ω 为三个实参量. 这是所求 SU(2) 的一般形式.

说明　2×2 的幺正、幺模矩阵一般表达式的另一种表示法为

$$e^{i\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\theta}}=e^{i\theta\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}}$$

其意义是将自旋态绕 $\boldsymbol{n}$ 方向旋转 -2θ，它有 3 个独立参数.

5.18　同位旋算符

题 5.18　为统一描述中子和质子，引入同位旋算符 $\boldsymbol{\tau}$，设其三个分量 τ_1，τ_2，τ_3 的本征值都是 ±1，即 $\tau_1^2=\tau_2^2=\tau_3^2=1$，且有 $[\tau_1,\tau_2]_+=[\tau_2,\tau_3]_+=[\tau_3,\tau_1]_+=0$，记

$$\tau_3=\begin{cases} +1, & \text{中子态} \\ -1, & \text{质子态} \end{cases}$$

在 τ_3 表象中求 τ_1， τ_2 的矩阵.

解答　在 τ_3 表象中

$$\tau_3=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$$

设 $\tau_1=\begin{pmatrix}a&b\\c&d\end{pmatrix}$，由 $\tau_3\tau_1+\tau_1\tau_3=0$ 及 $\tau_1^{\dagger}=\tau_1$， $\tau_1^2=1$ 有

$$\tau_1=\begin{pmatrix}0&\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\\\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}&0\end{pmatrix}$$

由 $\tau_2\tau_3+\tau_3\tau_2=0$， $\tau_2^{\dagger}=\tau_2$， $\tau_2^2=1$ 有

$$\tau_2=\begin{pmatrix}0&\mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta}\\\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta}&0\end{pmatrix}$$

再由 $\tau_1\tau_2+\tau_2\tau_1=0$，有 $\cos(\alpha-\beta)=0$，从而

$$\alpha-\beta=\frac{\pi}{2}+k\pi$$

其中， $k=0,\pm1,\pm2,\cdots$. 通过适当的相位约定，使得 $\alpha=0$， $\beta=-\dfrac{\pi}{2}$ 有

$$\tau_1=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\quad \tau_2=\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{pmatrix}$$

可见，通过适当的相位约定，在 τ_3 表象中， τ_1， τ_2， τ_3 恰是 Pauli 矩阵.

5.19　C 数矢量算符与 Pauli 算符的一个关系式

题 5.19　设 $\boldsymbol{A}$、 $\boldsymbol{B}$ 是与 $\boldsymbol{\sigma}$ 对易的任何矢量算符，证明：

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})$$

证明　采用 Einstein 求和约定

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})=\sigma_\alpha\sigma_\beta A_\alpha B_\beta$$

利用 Pauli 矩阵的代数关系

$$\sigma_\alpha\sigma_\beta=\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_\gamma+\delta_{\alpha\beta}\tag{5.81}$$

即得

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})=\delta_{\alpha\beta}A_\alpha B_\beta+\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_\gamma A_\alpha B_\beta=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\tag{5.82}$$

5.20　Pauli 算符有关的几个求迹的运算

题 5.20　计算 $\mathrm{tr}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}),\mathrm{tr}[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})]$ 以及 $\mathrm{tr}[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{C})]$，其中 $\boldsymbol{\sigma}$ 为 Pauli 矩阵，$\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$、$\boldsymbol{C}$ 为与 $\boldsymbol{\sigma}$ 对易的算符或常矢量.

解答　由于

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}=\sigma_iA_i=\sigma_xA_x+\sigma_yA_y+\sigma_zA_z$$

利用 Pauli 矩阵零迹性

$$\mathrm{tr}\sigma_i=0,\quad i=1,2,3$$

显然有

$$\mathrm{tr}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})=0 \tag{5.83}$$

利用前面题 5.19 结果式 (5.82)，并利用式 (5.83) 得

$$\mathrm{tr}[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})]=2\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B} \tag{5.84}$$

由式 (5.82)有

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{C})=(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{C})+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{C})$$

上式求迹，第一项为 $\boldsymbol{\sigma}$ 线性项，迹为零，因此

$$\mathrm{tr}[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{C})]=\mathrm{i}\,\mathrm{tr}[\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})](\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{C})$$

再利用式 (5.84)，有

$$\mathrm{tr}[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{C})]=2(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\cdot\boldsymbol{C}$$

5.21　一个 C 数矢量算符与 Pauli 算符的关系式

题 5.21　设 $\boldsymbol{A}$ 为任意与 $\boldsymbol{\sigma}$ 对易的矢量，证明

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})-\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}-(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\boldsymbol{\sigma}=\mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma}$$

解答　设 $\boldsymbol{A}$ 为任意与 $\boldsymbol{\sigma}$ 对易的矢量，利用 Pauli 算符的代数关系 $\sigma_i\sigma_j=\delta_{ij}+\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_k$，

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})-\boldsymbol{A}&=\boldsymbol{e}_i\sigma_i\sigma_jA_j-\boldsymbol{A}=\boldsymbol{e}_iA_j(\delta_{ij}+\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_k)-\boldsymbol{A}\\&=\boldsymbol{e}_iA_i+\mathrm{i}\boldsymbol{e}_i(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma})_i-\boldsymbol{A}\\&=\mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma}\end{aligned}$$

也就是

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})-\boldsymbol{A}=\mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma}$$

对上式取 Hermite 共轭给出

$$\boldsymbol{A}-(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\boldsymbol{\sigma}=\mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma}$$

因而

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})-\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}-(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\boldsymbol{\sigma}=\mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma} \tag{5.85}$$

进一步有

$$[\boldsymbol{\sigma},(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})]=2\mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma}$$

5.22 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}=\cos\lambda+\mathrm{i}\sigma_z\sin\lambda$

题 5.22 设 λ 为常数，证明：

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}=\cos\lambda+\mathrm{i}\sigma_z\sin\lambda \tag{5.86}$$

证法一 由于 $\sigma_j^2=1$ $(j=x,\ y,\ z)$，则有

$$\sigma_j^0=\sigma_j^2=\sigma_j^4=\cdots=1,\quad \sigma_j^1=\sigma_j^3=\sigma_j^5=\cdots=\sigma_j \tag{5.87}$$

这样

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\sigma_j\lambda}&=\sum_n\frac{(\mathrm{i}\sigma_j\lambda)^n}{n!}=\left\{1-\frac{\lambda^2}{2!}+\frac{\lambda^4}{4!}+\cdots\right\}I+\mathrm{i}\left\{\lambda-\frac{\lambda^3}{3!}+\frac{\lambda^5}{5!}\cdots\right\}\sigma_j\\&=\cos\lambda+\mathrm{i}\sigma_j\sin\lambda\end{aligned}$$

证法二 由于 $\sigma_z^2=1$，故 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}$ 可表示为

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}=a+b\sigma_z$$

将此式分别作用到 σ_z 的本征值为 ±1 的本征态 $\chi_{\pm1/2}$ 上，有

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda}=a+b,\quad \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda}=a-b$$

解上面两式即得 $a=\cos\lambda$，$b=\mathrm{i}\sin\lambda$，故 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}=\cos\lambda+\mathrm{i}\sigma_z\sin\lambda$.

证法三 取 σ_z 表象，$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}$ 为如下对角阵：

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}=\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda}&0\\0&\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\lambda+\mathrm{i}\sin\lambda&0\\0&\cos\lambda-\mathrm{i}\sin\lambda\end{pmatrix}$$

由此写出 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}=\cos\lambda+\mathrm{i}\sigma_z\sin\lambda$.

说明 以上证明过程中，主要利用了 $\sigma_z^2=1$，如果将 σ_z 换为 $\sigma_n=\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}$，由于 $\sigma_n^2=1$，同样可以证明

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_n}=\cos\lambda+\mathrm{i}\sigma_n\sin\lambda \tag{5.88}$$

5.23　1/2 旋量空间转动算符的关系式

题 5.23　设 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$ 为实常数矢量，试将 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}}$ 和 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}}$ 表示成 I 及 σ_x、σ_y、σ_z 的线性叠加，并计算它们的迹.

解答　令 $\boldsymbol{A}=A\boldsymbol{n}$，其中 $\boldsymbol{n}=\dfrac{\boldsymbol{A}}{A}$，则

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\sigma_n\cdot A}$$

利用上题式 (5.88)，即得

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}}=\cos A+\mathrm{i}\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}}{A}\sin A$$

上式中第二项为 $\boldsymbol{\sigma}$ 线性项，其迹为零，因此

$$\mathrm{tr}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}}=2\cos A$$

再利用上题式 (5.88)，

$$\begin{aligned}
\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}} &= \left(\cos A+\frac{\mathrm{i}}{A}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}\sin A\right)\left(\cos B+\frac{\mathrm{i}}{B}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}\sin B\right)\\
&= \cos A\cos B-(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})\frac{1}{AB}\sin A\sin B\\
&\quad+\mathrm{i}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\frac{1}{A}\sin A\cos B+\mathrm{i}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})\frac{1}{B}\cos A\sin B\\
&= \cos A\cos B-\frac{\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}}{AB}\sin A\sin B-\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\frac{1}{AB}\sin A\sin B\\
&\quad+\mathrm{i}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\frac{1}{A}\sin A\cos B+\mathrm{i}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})\frac{1}{B}\cos A\sin B
\end{aligned}$$

上式中后三项为 $\boldsymbol{\sigma}$ 的线性项，迹为 0，所以

$$\mathrm{tr}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}})=2\cos A\cos B-2\frac{\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}}{AB}\sin A\sin B$$

5.24　自旋空间中绕 z 轴的转动下 Pauli 算符的变换

题 5.24　化简 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_\alpha\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}$，脚标 $\alpha=x,y$，而 λ 为常数.

解法一　$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}$ 仍是 2×2 矩阵，故可令

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}=C_0+C_1\sigma_x+C_2\sigma_y+C_3\sigma_z \tag{5.89}$$

将式 (5.89) 作用于 σ_z 的本征态 $\chi_{1/2}$，利用

$$\begin{cases}
\sigma_z\chi_{1/2}=\chi_{1/2},\quad \sigma_x\chi_{1/2}=\chi_{-1/2},\quad \sigma_y\chi_{1/2}=\mathrm{i}\chi_{-1/2}\\
\sigma_z\chi_{-1/2}=-\chi_{1/2},\quad \sigma_x\chi_{-1/2}=\chi_{1/2},\quad \sigma_y\chi_{-1/2}=-\mathrm{i}\chi_{1/2}
\end{cases} \tag{5.90}$$

即得

$$\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\lambda}\chi_{-1/2}=(C_0+C_3)\chi_{1/2}+(C_1+\mathrm{i}C_2)\chi_{-1/2}$$

比较上式两端关于 $\chi_{\pm1/2}$ 的系数，有

$$C_0+C_3 = 0 \tag{5.91}$$

$$C_1+\mathrm{i}C_2 = \mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\lambda} \tag{5.92}$$

再将式 (5.89) 作用于 σ_z 的本征态 $\chi_{-1/2}$，利用式 (5.90)，即得

$$\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\lambda}\chi_{1/2}=(C_1-\mathrm{i}C_2)\chi_{1/2}+(C_0-C_3)\chi_{-1/2}$$

比较上式两端关于 $\chi_{\pm1/2}$ 的系数，有

$$C_0-C_3 = 0 \tag{5.93}$$

$$C_1-\mathrm{i}C_2 = \mathrm{e}^{2\mathrm{i}\lambda} \tag{5.94}$$

式 (5.91)~ 式 (5.93) 与式 (5.94) 联立求解得

$$C_0=C_3=0,\quad C_1=\cos2\lambda,\quad C_2=-\sin2\lambda$$

故代入式 (5.89)，即有 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}=\sigma_x\cos2\lambda-\sigma_y\sin2\lambda$.

类似的，令

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_y\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}=D_0+D_1\sigma_x+D_2\sigma_y+D_3\sigma_z \tag{5.95}$$

分别作用到 χ_+、χ_-，利用式 (5.90) 得到

$$\mathrm{i}\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\lambda}\chi_{-1/2}=(D_0+D_3)\chi_{1/2}+(D_1+\mathrm{i}D_2)\chi_{-1/2}$$

$$-\mathrm{i}\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\lambda}\chi_{1/2}=(D_1-\mathrm{i}D_2)\chi_{1/2}+(D_0-D_3)\chi_{-1/2}$$

比较上式两端关于 $\chi_{\pm1/2}$ 的系数，有

$$D_0+D_3=0$$

$$D_1+\mathrm{i}D_2=\mathrm{i}\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\lambda}$$

$$D_1-\mathrm{i}D_2=-\mathrm{i}\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\lambda}$$

$$D_0-D_3=0$$

上面四式联立求解，即得

$$D_0=D_3=0,\quad D_1=\sin2\lambda,\quad D_2=\cos2\lambda$$

故代入式 (5.95)，即有 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_y\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}=\sigma_y\cos2\lambda+\sigma_x\sin2\lambda$.

下面再列出 3 种不同解法 (以计算 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}$ 为例)，并附上 3 个讨论.

解法二　利用题 5.22 式 (5.88)，即 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}=\cos\lambda+\mathrm{i}\sigma_z\sin\lambda$，则有

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z} = (\cos\lambda+\mathrm{i}\sigma_z\sin\lambda)\sigma_x(\cos\lambda-\mathrm{i}\sigma_z\sin\lambda)$$

$$
\begin{aligned}
&= (\sigma_x\cos\lambda+\mathrm{i}\sigma_z\sigma_x\sin\lambda)(\cos\lambda-\mathrm{i}\sigma_z\sin\lambda)\\
&= (\sigma_x\cos\lambda-\sigma_y\sin\lambda)(\cos\lambda-\mathrm{i}\sigma_z\sin\lambda)\\
&= \sigma_x\cos^2\lambda-\sigma_y\sin\lambda\cos\lambda-\mathrm{i}\sigma_x\sigma_z\sin\lambda\cos\lambda+\mathrm{i}\sigma_y\sigma_z\sin^2\lambda\\
&= \sigma_x\cos^2\lambda-\sigma_y\sin\lambda\cos\lambda-\sigma_y\sin\lambda\cos\lambda-\sigma_x\sin^2\lambda\\
&= \sigma_x\cos 2\lambda-\sigma_y\sin 2\lambda
\end{aligned}
$$

解法三　题 4.38 给出 Baker-Hausdorff 公式 (4.54)

$$\mathrm{e}^{A}B\mathrm{e}^{-A}=B+[A,B]+\frac{1}{2!}[A,[A,B]]+\cdots$$

取 $A=\mathrm{i}\lambda\sigma_z$，$B=\sigma_x$，再利用 $[\sigma_i,\sigma_j]=2\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_k$，得

$$
\begin{aligned}
\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z} &= \sigma_x+[\mathrm{i}\lambda\sigma_z,\sigma_x]+[\mathrm{i}\lambda\sigma_z,[\mathrm{i}\lambda\sigma_z,\sigma_x]]+\cdots\\
&= \sigma_x\left(1-\frac{(2\lambda)^2}{2!}+\cdots+(-1)^k\frac{(2\lambda)^{2k}}{(2k)!}+\cdots\right)\\
&\quad -\sigma_y\left(2\lambda-\frac{(2\lambda)^3}{3!}+\cdots+(-1)^k\frac{(2\lambda)^{2k+1}}{(2k+1)!}+\cdots\right)\\
&= \sigma_x\cos 2\lambda-\sigma_y\sin 2\lambda
\end{aligned}
$$

解法四　设 $f(\lambda)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}$，对 $f(\lambda)$ 求微商得

$$
\begin{aligned}
f' &= \frac{\partial f}{\partial\lambda}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}(\mathrm{i}\sigma_z\sigma_x-\mathrm{i}\sigma_x\sigma_z)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}=\mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}[\sigma_z,\sigma_x]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\\
&= -2\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_y\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\\
f^{(2)} &= \frac{\partial^2 f}{\partial\lambda^2}=\frac{\partial f'}{\partial\lambda}\\
&= -2\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}(\mathrm{i}\sigma_z\sigma_y-\mathrm{i}\sigma_y\sigma_z)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}=-2\mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}[\sigma_z,\sigma_y]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\\
&= -4\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}=-4f
\end{aligned}
$$

这样得 f 关于 λ 的微分方程

$$\frac{\partial^2 f}{\partial\lambda^2}+4f=0$$

解方程得

$$f(\lambda)=C_1\cos 2\lambda+C_2\sin 2\lambda$$

由 $\lambda=0$ 处 $f(\lambda)$、$f'(\lambda)$ 的值即得

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}=f(\lambda)=\sigma_x\cos 2\lambda-\sigma_y\sin 2\lambda$$

解法五　因为 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}$ 是自旋空间中绕 z 轴转动角度为 -2λ 的转动算符，如图 5.1所示，所以直接写出

$$
\begin{aligned}
\sigma_x' &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}=\sigma_x\cos 2\lambda-\sigma_y\sin 2\lambda\\
\sigma_y' &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_y\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}=\sigma_x\sin 2\lambda+\sigma_y\cos 2\lambda
\end{aligned}
$$

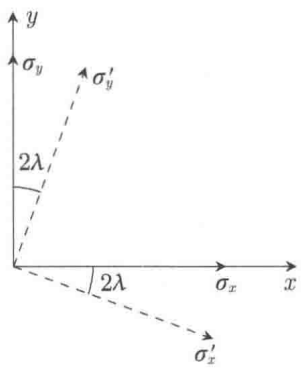


图 5.1　自旋空间中绕 z 轴转动角度为 -2λ 的转动算符

类似地可写出

$$\begin{cases} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_y}\sigma_x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_y} = \sigma_x\cos 2\lambda + \sigma_z\sin 2\lambda \\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_y}\sigma_z\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_y} = \sigma_z\cos 2\lambda - \sigma_x\sin 2\lambda \end{cases}$$

以及

$$\begin{cases} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_x}\sigma_y\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_x} = \sigma_y\cos 2\lambda - \sigma_z\sin 2\lambda \\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_x}\sigma_z\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_x} = \sigma_y\sin 2\lambda + \sigma_z\cos 2\lambda \end{cases}$$

讨论 1　上面计算了 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}$、$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_y\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}$，通过 x，y，z 的轮换又可写出另外四个关系式，当然还有 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_k}\sigma_k\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_k} = \sigma_k (k=1,2,3)$. 这 9 个式子可以统一写为

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_k}\boldsymbol{\sigma}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_k} = \boldsymbol{e}_k\sigma_k + \boldsymbol{e}_k\times\boldsymbol{\sigma}\sin 2\lambda + (\boldsymbol{e}_k\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{e}_k\cos 2\lambda$$

其中，$k=1$，2 或 3. 上述结果意味着 σ_1、σ_2 以及 σ_3 分别是使得算符 (当然也是自旋态) 绕 x、y 及 z 旋转的变换生成元.

讨论 2　由于绕 k 轴的转动为 $U(k) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_k} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{e}_k\cdot\boldsymbol{\sigma}}$，$k=1,2$ 或 3. 我们可写出绕空间 $\boldsymbol{n}$ 方向的转动算符为 $U(\boldsymbol{n}) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}$，且可对照讨论 1 直接写出

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{\sigma}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}} = \boldsymbol{n}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}) + \boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin 2\lambda + (\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n}\cos 2\lambda$$

参见题 5.25 的证明和讨论.

讨论 3　本题的四种证法中，第一种与第二种要用到 1/2 自旋的特殊性质. 但第三种与第四种只用到对易关系，据此通过第三种或第四种的证明过程可知，可以直接写出

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L}}\boldsymbol{A}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L}}\ (A=x,p,L,\cdots),\quad \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}}\boldsymbol{B}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}}\ (B=x,p,L,\sigma,J,\cdots),\quad \cdots$$

的结果. 有时直接通过对易关系计算较麻烦甚至不可能，此时可考虑计算 1/2 自旋的特殊情形，然后根据对易关系相同，可直接写出结果. 这也是一种非常有用的计算技巧.

5.25　自旋空间中绕空间某方向转动下 Pauli 算符的变换

题 5.25　设 λ 为常数，$\boldsymbol{n}$ 为任意方向的单位矢量，证明

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{\sigma}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}=\boldsymbol{n}\sigma_n+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin 2\lambda+(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n}\cos 2\lambda \tag{5.96}$$

式中，$\sigma_n=\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}$.

证法一　利用公式

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_n}=\cos\lambda+\mathrm{i}\sigma_n\sin\lambda \tag{5.97}$$

可得

$$\begin{aligned}\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}},\boldsymbol{\sigma}\right] &= \left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_n},\boldsymbol{\sigma}\right]=\mathrm{i}\sin\lambda\left[\sigma_n,\boldsymbol{\sigma}\right]\\ &= \mathrm{i}\sin\lambda(-2\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})=2\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin\lambda\end{aligned} \tag{5.98}$$

其中，利用了 $[\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\sigma}]=-2\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}$. 因此

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{\sigma}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}} &= \left(\boldsymbol{\sigma}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}+2\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin\lambda\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}\\ &= \boldsymbol{\sigma}+2(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\sin\lambda\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}\\ &= \boldsymbol{\sigma}+2(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})(\cos\lambda-\mathrm{i}\sigma_n\sin\lambda)\sin\lambda\end{aligned}$$

也就是

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{\sigma}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}=\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin 2\lambda-2\mathrm{i}(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\sigma_n\sin^2\lambda \tag{5.99}$$

上式取共轭，由于 $\boldsymbol{\sigma}$、σ_n 均为厄米算符，可得

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{\sigma}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}=\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin 2\lambda+2\mathrm{i}\sigma_n(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\sin^2\lambda \tag{5.100}$$

式 (5.99)、式 (5.100) 两式相加除以 2，即得

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{\sigma}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}} &= \boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin 2\lambda+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times[\sigma_n,\boldsymbol{\sigma}]\sin^2\lambda\\ &= \boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin 2\lambda+2\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\sin^2\lambda\\ &= \boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin 2\lambda+(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n}(\cos 2\lambda-1)\end{aligned} \tag{5.101}$$

再利用 $(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n}=\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{n}\sigma_n$，即得式 (5.96).

证法二　视 λ 为参变量，$\boldsymbol{n}$ 则固定不变，令

$$U(\lambda) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}},\quad U^{\dagger}(\lambda)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}} \tag{5.102}$$

$$\boldsymbol{f}(\lambda) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{\sigma}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}=U^{\dagger}(\lambda)\boldsymbol{\sigma}U(\lambda) \tag{5.103}$$

初始条件

$$\boldsymbol{f}(0)=\boldsymbol{\sigma} \tag{5.104}$$

式 (5.103) 两边对参变量 λ 求导，可得

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{f}}{\mathrm{d}\lambda} = \mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}[\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\sigma}]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}$$

$$= \mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}(-2\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}} = 2\boldsymbol{n}\times \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{\sigma}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}$$

也就是

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{f}}{\mathrm{d}\lambda} = 2\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f} \tag{5.105}$$

由式 (5.103)

$$\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{f} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}} = \sigma_n \tag{5.106}$$

用 $\boldsymbol{n}$ 从左边对式 (5.105) 作叉乘得到

$$\begin{aligned}\boldsymbol{n}\times\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{f}}{\mathrm{d}\lambda} &= 2\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}) = 2\boldsymbol{n}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{f}) - 2\boldsymbol{f}\\ &= 2\boldsymbol{n}\sigma_n - 2\boldsymbol{f}\end{aligned} \tag{5.107}$$

式 (5.105)+i× 式 (5.107) 即得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}(\boldsymbol{f}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}) = -2\mathrm{i}(\boldsymbol{f}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}-\boldsymbol{n}\sigma_n)$$

因 $\boldsymbol{n}$ 为常矢量，上式也即

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}(\boldsymbol{f}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}-\boldsymbol{n}\sigma_n) = -2\mathrm{i}(\boldsymbol{f}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}-\boldsymbol{n}\sigma_n) \tag{5.108}$$

上式作为 λ 的一阶微分方程，积分即得

$$\begin{aligned}\boldsymbol{f}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}-\boldsymbol{n}\sigma_n &= [\boldsymbol{f}(0)+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(0)-\boldsymbol{n}\sigma_n]\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\lambda}\\ &= (\boldsymbol{\sigma}+\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{n}\sigma_n)\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\lambda}\end{aligned} \tag{5.109}$$

上式取共轭，由于 σ_n、$\boldsymbol{f}(\lambda)$ 以及 $\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}(\lambda)$ 均为厄米算符，可得

$$\boldsymbol{f}-\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{f}-\boldsymbol{n}\sigma_n = (\boldsymbol{\sigma}-\mathrm{i}\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{n}\sigma_n)\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\lambda} \tag{5.110}$$

式 (5.109)、式 (5.110) 相加并除以 2，即得

$$\boldsymbol{f}(\lambda) = \boldsymbol{\sigma}\cos 2\lambda + \boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin 2\lambda + \boldsymbol{n}\sigma_n(1-\cos 2\lambda) \tag{5.111}$$

由于 $(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n} = \boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{n}\sigma_n$，上式又可以化为

$$\boldsymbol{f}(\lambda) = \boldsymbol{n}\sigma_n + (\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n}\cos 2\lambda + \boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma}\sin 2\lambda \tag{5.112}$$

此即所要证明的式 (5.96).

讨论　如取 $\boldsymbol{n}$ 沿 z 轴，即取 $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{e}_z$，则 $\sigma_n=\sigma_z$，$\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{e}_y\sigma_x - \boldsymbol{e}_x\sigma_y$，$(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{\sigma})\times\boldsymbol{n} = \boldsymbol{e}_x\sigma_x + \boldsymbol{e}_y\sigma_y$，此时式 (5.96) 为

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\boldsymbol{\sigma}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z} = \boldsymbol{e}_z\sigma_z + \boldsymbol{e}_x(\sigma_x\cos 2\lambda - \sigma_y\sin 2\lambda) + \boldsymbol{e}_y(\sigma_x\sin 2\lambda + \sigma_y\cos 2\lambda)$$

此式等价于

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_x\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z} = \sigma_x\cos 2\lambda - \sigma_y\sin 2\lambda$$

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_y\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z} = \sigma_y\cos 2\lambda+\sigma_x\sin 2\lambda$$

与题 9.5 的结果相同.

说明　本题第一种证法用到了 1/2 自旋的特殊性质，但第二种只用到对易关系. 所以本题结果可以推广到一般的角动量算符. 与题 9.5 的解法 (题 9.6 又给出题 9.5 的一种新解法) 相比，这里的第一种证法与题 9.5 的第二种类似，其余几种做法两题不重复，但都可以互用.

5.26　$\sigma_\pm=\sigma_x\pm\mathrm{i}\sigma_y$ 的一些代数结果

题 5.26　设 $f(\sigma_z)$ 是可以展开成 σ_z 幂级数的任意函数. 证明

$$f(\sigma_z)\sigma_\pm=\sigma_\pm f(\sigma_z\pm 2)$$

特例

$$\mathrm{e}^{\xi\sigma_z}\sigma_\pm=\sigma_\pm\mathrm{e}^{\xi\sigma_z}\mathrm{e}^{\pm 2\xi}$$

定义

$$\sigma_\pm=\sigma_x\pm\mathrm{i}\sigma_y$$

(1) 计算对易关系 $[\sigma_+,\ \sigma_-]$ 和 $[\sigma_z,\ \sigma_\pm]$;
(2) 计算 $\sigma_+^2,\ \sigma_-^2$;
(3) 证明 $\mathrm{e}^{\xi\sigma_z}\sigma_\pm\mathrm{e}^{-\xi\sigma_z}=\sigma_\pm\mathrm{e}^{\pm 2\xi}$，其中 ξ 为常数;
(4) 化简 $\mathrm{e}^{\xi\sigma_z}\sigma_x\mathrm{e}^{-\xi\sigma_z}$ 和 $\mathrm{e}^{\xi\sigma_z}\sigma_y\mathrm{e}^{-\xi\sigma_z}$.

解答　(1) 利用 Pauli 算符的代数关系 $\sigma_i\sigma_j=\delta_{ij}+\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_k$，得

$$\begin{aligned}\sigma_+\sigma_- &= (\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y)(\sigma_x-\mathrm{i}\sigma_y)=\sigma_x^2+\sigma_y^2-\mathrm{i}[\sigma_x,\sigma_y]=2(1+\sigma_z)\\ \sigma_-\sigma_+ &= (\sigma_x-\mathrm{i}\sigma_y)(\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y)=\sigma_x^2+\sigma_y^2+\mathrm{i}[\sigma_x,\sigma_y]=2(1-\sigma_z)\end{aligned}$$

这样

$$[\sigma_+,\sigma_-]=4\sigma_z \tag{5.113}$$

并有

$$[\sigma_z,\sigma_+]=[\sigma_z,\sigma_x]+\mathrm{i}[\sigma_z,\sigma_y]=2\mathrm{i}\sigma_y+2\sigma_x=2\sigma_+ \tag{5.114}$$

此式的 Hermite 共轭为

$$[\sigma_z,\sigma_-]=-2\sigma_- \tag{5.115}$$

(2) 接下来

$$\sigma_+^2=(\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y)^2=\sigma_x^2-\sigma_y^2+\mathrm{i}(\sigma_x\sigma_y+\sigma_y\sigma_x)=0$$

即 $\sigma_+^2=0$，再对此式取 Hermite 共轭得 $\sigma_-^2=0$.

(3) 式 (5.114)、式 (5.115) 可改写为

$$\sigma_z\sigma_\pm=\sigma_\pm(\sigma_z\pm 2) \tag{5.116}$$

这样对于正整数 n，

$$\sigma_z^n\sigma_\pm=\sigma_z^{n-1}\sigma_\pm(\sigma_z\pm2)=\cdots=\sigma_\pm(\sigma_z\pm2)^n \tag{5.117}$$

上式对于 $n=0$ 也成立. 对于可以写成对 σ_z 的幂级数形式的函数 $f(\sigma_z)$，利用式 (5.117) 结果

$$f(\sigma_z)\sigma_\pm=\sigma_\pm f(\sigma_z\pm2)$$

因而对于 $f(\sigma_z)=\mathrm{e}^{\xi\sigma_z}$ 有

$$\mathrm{e}^{\xi\sigma_z}\sigma_\pm=\sigma_\pm\mathrm{e}^{\xi\sigma_z}\mathrm{e}^{\pm2\xi}$$

或者

$$\mathrm{e}^{\xi\sigma_z}\sigma_\pm\mathrm{e}^{-\xi\sigma_z}=\sigma_\pm\mathrm{e}^{\pm2\xi} \tag{5.118}$$

(4) 利用式 (5.118)，可得

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{\xi\sigma_z}\sigma_x\mathrm{e}^{-\xi\sigma_z}&=\frac{1}{2}(\sigma_+\mathrm{e}^{2\xi}+\sigma_-\mathrm{e}^{-2\xi})\\&=\frac{1}{2}\sigma_x(\mathrm{e}^{2\xi}+\mathrm{e}^{-2\xi})+\frac{\mathrm{i}}{2}\sigma_y(\mathrm{e}^{2\xi}-\mathrm{e}^{-2\xi})\\&=\sigma_x\cosh(2\xi)+\mathrm{i}\sigma_y\sinh(2\xi)\end{aligned} \tag{5.119}$$

类似地，有

$$\mathrm{e}^{\xi\sigma_z}\sigma_y\mathrm{e}^{-\xi\sigma_z}=\sigma_y\cosh(2\xi)-\mathrm{i}\sigma_x\sinh(2\xi)$$

说明　在式 (5.118) 中取 $\xi=\mathrm{i}\lambda$(其中 λ 为实数) 则为

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}=\sigma_+\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\lambda},\quad \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda\sigma_z}\sigma_-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\sigma_z}=\sigma_-\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\lambda}$$

此两式相加和相减，即为题 5.24 的又一种解法. 或者反过来，从题 5.24 的结果，令 $\mathrm{i}\lambda=\xi$，也可得出此处的结果.

5.27　自旋态 $|\lambda\rangle$ 的投影算子

题 5.27　向自旋态 $|\lambda\rangle$ 的投影算子，$\Pi_\lambda=|\lambda\rangle\langle\lambda|$，证明：向 $\sigma_n=1,-1$ 的本征态 α_n，β_n 的投影算子为

$$\Pi(\sigma_n=1)=|\alpha_n\rangle\langle\alpha_n|=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})$$

$$\Pi(\sigma_n=-1)=|\beta_n\rangle\langle\beta_n|=\frac{1}{2}(1-\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})$$

证明　在 σ_z 表象中，

$$|\alpha_n\rangle=\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\varphi}{2}}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\varphi}{2}}\end{pmatrix},\quad |\beta_n\rangle=\begin{pmatrix}\sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\varphi}{2}}\\ -\cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\varphi}{2}}\end{pmatrix}$$

向 α_n 的投影算子

$$\begin{aligned}\Pi(\sigma_n=1) &= |\alpha_n\rangle\langle\alpha_n| = \begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}}\end{pmatrix}\left(\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}},\ \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}}\right)\\ &= \begin{pmatrix}\cos^2\dfrac{\theta}{2} & \sin\dfrac{\theta}{2}\cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}\cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} & \sin^2\dfrac{\theta}{2}\end{pmatrix} = \frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})\end{aligned} \tag{5.120}$$

也就是

$$\Pi(\sigma_n=1)=|\alpha_n\rangle\langle\alpha_n|=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})$$

同样

$$\Pi(\sigma_n=-1)=|\beta_n\rangle\langle\beta_n|=\frac{1}{2}(1-\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})$$

5.28　自旋极化矢量在均匀磁场中的动力学方程 (1)

题 5.28　在自旋态 $|\lambda\rangle$ 中，定义自旋极化矢量 $\boldsymbol{P}_\lambda=\langle\lambda|\sigma|\lambda\rangle$，由于 $\boldsymbol{P}_\lambda$ 是一个经过态平均的矢量，其具有一些经典性质，可以对它作普通的几何分解. 自旋 $s=\dfrac{1}{2}$ 粒子 (旋磁比 $\gamma<0$)，置于磁场 $\boldsymbol{B}_0$ 中，证明自旋角动量绕磁场方向匀速进动，进动角频率 $\omega_0=-\gamma B_0$.

证明　设 $\boldsymbol{B}=B_0\boldsymbol{n}$，则 $H=-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}=-\gamma B_0 S_n=\dfrac{\hbar}{2}\omega_0\sigma_n$，由于

$$[\boldsymbol{S},\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{n}]=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{S}$$

因而

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{S}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{S},H]=\omega_0(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{S})$$

这是 $\boldsymbol{S}$ 绕 $\boldsymbol{n}$(磁场方向) 以角速度 ω_0 的进动方程. 同样地，自旋极化矢量 $\boldsymbol{P}_\lambda=\langle\lambda|\sigma|\lambda\rangle$ 也遵循同样的规律

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{P}_\lambda=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\lambda|[\sigma,H]|\lambda\rangle=\omega_0(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{P}_\lambda)$$

5.29　自旋极化矢量在均匀磁场中的动力学方程 (2)

题 5.29　自旋为 1/2 粒子 (系综) 自旋态的密度矩阵为 $\rho(0)=\dfrac{1}{2}(1+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{P})$，其中 $\boldsymbol{P}$ 是一个实数矢量.

(1) 请给出粒子自旋的极化方向和极化度. 上述自旋态什么情况是纯态? 什么情况是混合态?

(2) 试计算测量粒子自旋沿 z 轴以及沿 z 轴反方向的概率;

(3) 从 $t=0$ 时刻开始在空间加一均匀恒定磁场 $\boldsymbol{B}$，试求此后粒子自旋态的密度矩阵，并请给出相应的粒子自旋极化方向和极化度. 已知 Hamilton 量为 $H=-g\mu_B\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}$.

解答　(1) 直接演算

$$\mathrm{tr}\left[\rho(0)\sigma_i\right]=\frac{1}{2}\mathrm{tr}\left[(1+\sigma_jP_j)\,\sigma_i\right]=\frac{1}{2}\mathrm{tr}\left[(\sigma_i+P_j(\delta_{ij}+\mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}\sigma_k))\right]=P_i$$

即有 $\mathrm{tr}(\rho(0)\boldsymbol{\sigma})=\boldsymbol{P}$. 可见极化方向为 $\boldsymbol{P}/P$，极化度为 P.

根据纯态判据，需计算 $\mathrm{tr}\rho(0)^2$. 而

$$\rho(0)^2=(1+\sigma_iP_i)^2=\frac{1}{4}(1+2\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{P}+\sigma_iP_i\sigma_jP_j)=\frac{1}{4}\left(1+2\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{P}+P^2\right)$$

根据密度矩阵性质，$\mathrm{tr}\rho(0)^2\leqslant 1$，可见 $P\leqslant 1$. 当 $P=1$ 时，$\rho(0)^2=\rho(0)$，此时自旋态是纯态. 对其他情况的密度矩阵 $P<1$，$\mathrm{tr}\rho(0)^2<\mathrm{tr}\rho(0)$，因而都是混合态.

(2) $P_+=\langle\uparrow|\rho(0)|\uparrow\rangle=\dfrac{1}{2}(1+P_z)$，$P_-=\langle\downarrow|\rho(0)|\downarrow\rangle=\dfrac{1}{2}(1-P_z)$.

(3) 设密度算符为 $\rho(t)=\dfrac{1}{2}(1+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{P}(t))$，时间演化方程为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\rho(t)=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[H,\rho(t)\right]$$

即得

$$\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{P}(t)\cdot\boldsymbol{\sigma}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[-g\mu_B\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B},\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{P}(t))\right]=-\frac{g\mu_B}{2\hbar}2(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{P}(t))\cdot\boldsymbol{\sigma}$$

两边乘 σ_i 取tr，并令 $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{B}/B$，$\omega=\dfrac{2g\mu_BB}{\hbar}$ 得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{P}(t)=\boldsymbol{P}(t)\times\boldsymbol{n}\omega$$

表示矢量 $\boldsymbol{P}(t)$ 以角速度 ω 绕磁场 $\boldsymbol{B}$ 匀速旋转. 设 $P_1=\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{n},P_2=\boldsymbol{P}-\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}$，即有

$$\boldsymbol{P}(t)=\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{P}+(\boldsymbol{P}-\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{P})\cos\omega t+\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{P}\sin\omega t$$

易知 $P(t)=P$，可见极化度 P 不随时间改变，而自旋极化方向为 $\boldsymbol{P}(t)/P$ 绕磁场 $\boldsymbol{B}$ 以角速度 ω 匀速旋转.

5.30　在 σ_n 本征态下的自旋极化矢量

题 5.30　证明：在 $\sigma_n=1,-1$ 的本征态 α_n，β_n 下，自旋极化矢量为

$$\boldsymbol{P}_+=\langle\alpha_n|\,\sigma\,|\alpha_n\rangle=\boldsymbol{n},\quad\boldsymbol{P}_-=\langle\beta_n|\,\sigma\,|\beta_n\rangle=-\boldsymbol{n}$$

证法一　在 σ_z 表象中，

$$|\alpha_n\rangle=\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\varphi}{2}}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\varphi}{2}}\end{pmatrix},\quad |\beta_n\rangle=\begin{pmatrix}\sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\varphi}{2}}\\ -\cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\varphi}{2}}\end{pmatrix} \tag{5.121}$$

Pauli 矩阵形式可取为

$$\sigma_x=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\quad \sigma_y=\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}\\ \mathrm{i}&0\end{pmatrix},\quad \sigma_z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix} \tag{5.122}$$

这样

$$\begin{aligned}P_{+x}&=\langle\alpha_n|\sigma_x|\alpha_n\rangle=\left(\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}},\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}}\right)\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}\varphi}{2}}\end{pmatrix}\\&=\sin\theta\cos\varphi=n_x\end{aligned}$$

同样地

$$P_{+y}=\sin\theta\sin\varphi=n_y,\quad P_{+z}=\cos\theta$$

也就是

$$\boldsymbol{P}_+=\langle\alpha_n|\boldsymbol{\sigma}|\alpha_n\rangle=\boldsymbol{n}$$

同理

$$\boldsymbol{P}_-=\langle\beta_n|\boldsymbol{\sigma}|\beta_n\rangle=-\boldsymbol{n}$$

证法二　在 σ_z 表象中，$\sigma_n=1,-1$ 的本征态 α_n，β_n 如式 (5.121)所给. σ_z 的本征态已知为

$$\alpha=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\quad \beta=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \tag{5.123}$$

分别相应于 σ_z 的 $+1$, -1 两个本征值. 而

$$\langle\alpha|\alpha_n\rangle=\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi},\quad \langle\beta|\alpha_n\rangle=\sin\frac{\theta}{2}$$

因此

$$\begin{cases}|\langle\alpha|\alpha_n\rangle|^2=\cos^2\dfrac{\theta}{2}=\dfrac{1}{2}(1+\cos\theta)=\dfrac{1}{2}(1+n_z)\\ |\langle\beta|\alpha_n\rangle|^2=\sin^2\dfrac{\theta}{2}=\dfrac{1}{2}(1-\cos\theta)=\dfrac{1}{2}(1-n_z)\end{cases} \tag{5.124}$$

分别为测 σ_z 为 $+1$, -1 的概率，故 σ_z 的期望值为

$$\langle\sigma_z\rangle=\frac{1}{2}(1+n_z)-\frac{1}{2}(1-n_z)=n_z \tag{5.125}$$

而 σ_x 的本征态由题 8.1 给出，可取为

$$\chi_{\frac{1}{2}}(x)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix},\quad \chi_{-\frac{1}{2}}(x)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$$

本征值分别为 $+1$、-1. 由

$$\begin{aligned}\langle\chi_{\frac{1}{2}}(x)|\alpha_n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}+\sin\frac{\theta}{2}\right)\\ \langle\chi_{-\frac{1}{2}}(x)|\alpha_n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}-\sin\frac{\theta}{2}\right)\end{aligned}$$

得相应的概率为

$$\begin{aligned}|\langle\chi_{\frac{1}{2}}(x)|\alpha_n\rangle|^2&=\frac{1}{2}(1+\sin\theta\cos\varphi)=\frac{1}{2}(1+n_x)\\ |\langle\chi_{-\frac{1}{2}}(x)|\alpha_n\rangle|^2&=\frac{1}{2}(1-\sin\theta\cos\varphi)=\frac{1}{2}(1-n_x)\end{aligned}\tag{5.126}$$

故 σ_x 的期望值为

$$\langle\sigma_x\rangle=\frac{1}{2}(1+n_x)-\frac{1}{2}(1-n_x)=n_x\tag{5.127}$$

在式 (5.56) 中取 $\theta=\varphi=\dfrac{\pi}{2}$ 得 σ_y 的本征态为

$$\chi_{\frac{1}{2}}(y)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}-\mathrm{i}\\1\end{pmatrix},\quad \chi_{-\frac{1}{2}}(y)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}-\mathrm{i}\\-1\end{pmatrix}$$

本征值分别为 $+1$、-1. 由

$$\begin{aligned}\langle\chi_{\frac{1}{2}}(y)|\alpha_n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\mathrm{i}\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}+\sin\frac{\theta}{2}\right)\\ \langle\chi_{-\frac{1}{2}}(y)|\alpha_n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\mathrm{i}\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}-\sin\frac{\theta}{2}\right)\end{aligned}$$

得相应的概率为

$$\begin{cases}|\langle\chi_{\frac{1}{2}}(y)|\alpha_n\rangle|^2=\dfrac{1}{2}(1+\sin\theta\sin\varphi)=\dfrac{1}{2}(1+n_y)\\ |\langle\chi_{-\frac{1}{2}}(y)|\alpha_n\rangle|^2=\dfrac{1}{2}(1-\sin\theta\sin\varphi)=\dfrac{1}{2}(1-n_y)\end{cases}\tag{5.128}$$

故 σ_y 的期望值为

$$\langle\sigma_y\rangle=\frac{1}{2}(1+n_y)-\frac{1}{2}(1-n_y)=n_y\tag{5.129}$$

如前面式 (5.124)$\sim$ 式 (5.129) 所给，在 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}=+1$ 的自旋态下，$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle=\boldsymbol{n}$；对于 $\alpha=$

x,y,z，该态下 σ_α 取值为 ±1 的概率分别为 $\frac{1}{2}(1\pm n_\alpha)$.

证法三　在式 (5.66) 中，θ 是 z 轴和 $\boldsymbol{n}$ 的夹角. z 轴和 $\boldsymbol{n}$ 的选取是任意的，我们也可将它们互换，使得原来的 z 轴作为新的 $\boldsymbol{n}$，原来的 $\boldsymbol{n}$ 取作新的 z 轴，二者夹角当然没有变. 由此可知，在 $\sigma_n=1$ 的自旋态下，σ_z 的期望值也为 $\cos\theta$，即 n_z. 我们将 x、y、z 轮换，即得在 $\sigma_n=1$ 的自旋态 χ_1 下

$$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle=\boldsymbol{n} \tag{5.130}$$

这与证法二的式 (5.125)、式 (5.127)、式 (5.129) 一致.

5.31　$s=\frac{1}{2}$ 时极化矢量与投影算子的关系

题 5.31　$s=\frac{1}{2}$ 粒子在自旋态 $|\lambda\rangle$ 中，极化矢量 $\boldsymbol{P}_\lambda$ 与投影算子 Π_λ 的关系为

$$\Pi_\lambda=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{P}_\lambda) \tag{5.131}$$

证明 Π_λ 是投影算子.

证明　纯态极化矢量 $\boldsymbol{P}_\lambda$ 满足 $\boldsymbol{P}_\lambda^2=1$，这样

$$\begin{aligned}\Pi_\lambda^2 &= \frac{1}{4}\left[1+2\boldsymbol{P}_\lambda\cdot\sigma+(\boldsymbol{P}_\lambda\cdot\sigma)^2\right]=\frac{1}{4}\left[1+2\boldsymbol{P}_\lambda\cdot\sigma+\boldsymbol{P}_\lambda^2+\mathrm{i}(\boldsymbol{P}\times\boldsymbol{P})\cdot\sigma\right]\\ &= \frac{1}{2}(1+\boldsymbol{P}_\lambda\cdot\sigma)=\Pi_\lambda\end{aligned}$$

可见 Π_λ 是投影算子.

说明　实际上，可以直接验算关系式 (5.131)，只要令任意自旋态为

$$|\lambda\rangle=\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\varphi}{2}}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\varphi}{2}}\end{pmatrix}$$

于是

$$\begin{aligned}\Pi_\lambda &= |\lambda\rangle\langle\lambda|=\begin{pmatrix}\cos^2\dfrac{\theta}{2} & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\cos\dfrac{\theta}{2}\sin\dfrac{\theta}{2}\\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\cos\dfrac{\theta}{2}\sin\dfrac{\theta}{2} & \sin^2\dfrac{\theta}{2}\end{pmatrix}\\ &= \frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}\cdot\sigma)=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{P}_\lambda\cdot\sigma)\end{aligned}$$

5.32　$\frac{1}{2}$ 粒子自旋态为 $|x\rangle$，测得其处于 $|\lambda\rangle$ 态的概率

题 5.32　证明：对 $s=\frac{1}{2}$ 粒子，在自旋态 $|x\rangle$ 中，测得其处于 $|\lambda\rangle$ 态的概率为

$$W_{\lambda x}=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{P}_\lambda\cdot\boldsymbol{P}_x) \tag{5.132}$$

证明　直接演算

$$\begin{aligned}|\langle\lambda|x\rangle|^2 &= \langle x|\lambda\rangle\langle\lambda|x\rangle=\langle x|\Pi_\lambda|x\rangle=\langle x|\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{P}_\lambda\cdot\sigma)|x\rangle\\ &=\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\langle x|\boldsymbol{P}_\lambda\cdot\sigma|x\rangle=\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\boldsymbol{P}_\lambda\cdot\langle x|\sigma|x\rangle=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{P}_\lambda\cdot\boldsymbol{P}_x)=W_{\lambda x}\end{aligned}$$

即为所证.

说明　作为式 (5.132)的应用，考虑在 $|\alpha\rangle=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ 态中，测 $\sigma_n=+1$ 的概率为

$$W_{\alpha_n\alpha}=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{P}_\alpha\cdot\boldsymbol{P}_{\alpha_n})$$

所以

$$W_{\alpha_n\alpha}=\frac{1}{2}(1+n_z)=\cos^2\frac{\theta}{2}$$

5.33　由测量结果确定自旋态

题 5.33　在某自旋态 $|\lambda\rangle$ 中，测得 $S_z=\frac{\hbar}{2}$ 的概率为 $\frac{1}{3}$，测得 $S_x=\frac{\hbar}{2}$ 的概率为 $\frac{1}{6}$，求 $|\lambda\rangle$ 及 $\langle\lambda|S_y|\lambda\rangle$.

解法一　由于在 $|\lambda\rangle$ 态中，测 $S_z=\frac{\hbar}{2}$ 的概率为 $\frac{1}{3}$，所以在 S_z 表象中

$$|\lambda\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix}1\\\sqrt{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}\end{pmatrix}$$

其中，δ 为待定的实参数. 又因为 S_x 的本征值 $\frac{\hbar}{2}$ 对应的本征态 $|\alpha_x\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$，则由在 $|\lambda\rangle$ 态下测得 $S_x=\frac{\hbar}{2}$ 的概率为 $\frac{1}{6}$，即有

$$\langle\alpha_x|\lambda\rangle^2=\frac{1}{6}\left|(1,1)\begin{pmatrix}1\\\sqrt{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}\end{pmatrix}\right|^2=\frac{1}{6}$$

给出

$$\cos\delta=-\frac{\sqrt{2}}{2},\quad \delta=\pm\frac{3}{4}\pi$$

因此

$$|\lambda_{\pm}\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix}1\\ \sqrt{2}\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\frac{3}{4}\pi}\end{pmatrix}$$

由此通过演算得到

$$\langle\lambda_{\pm}|S_y|\lambda_{\pm}\rangle=\pm\frac{\hbar}{3}$$

解法二　设

$$\boldsymbol{P}_{\lambda}=\langle\lambda|\sigma|\lambda\rangle=\boldsymbol{n}$$

由题设

$$\frac{1}{2}(1+n_z)=\frac{1}{3},\quad \frac{1}{2}(1+n_x)=\frac{1}{6}$$

解出

$$\boldsymbol{n}=\left(-\frac{2}{3},\pm\frac{2}{3},-\frac{1}{3}\right)$$

因而

$$\langle\lambda|S_y|\lambda\rangle=\frac{\hbar}{2}\langle\lambda|\sigma_y|\lambda\rangle=\frac{\hbar}{2}n_y=\pm\frac{\hbar}{3}$$

由于 $\sigma_n=+1$ 的本征态，可由 n_x、n_y、n_z 表示为

$$\phi_1(n)=\frac{1}{\sqrt{2(1+n_z)}}\begin{pmatrix}1+n_z\\ n_x+\mathrm{i}n_y\end{pmatrix}$$

因此

$$|\lambda\rangle=\phi_1(\boldsymbol{n})=\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix}1\\ \sqrt{2}\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\frac{3}{4}\pi}\end{pmatrix}$$

5.34　轨道、自旋和总角动量之间的一些代数关系

题 5.34　以 $\boldsymbol{S}$、$\boldsymbol{L}$、$\boldsymbol{J}$ 表示电子的自旋、轨道及总角动量 ($\hbar=1$)，则

$$\boldsymbol{J}=\boldsymbol{S}+\boldsymbol{L}=\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{L}$$

$$\boldsymbol{J}^2=\frac{3}{4}+\boldsymbol{L}^2+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}$$

(1) 计算 $[\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}]$，$[\boldsymbol{L},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}]$，$[\boldsymbol{J},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}]$，$\left[\boldsymbol{J},\boldsymbol{L}^2\right]$；

(2) 求 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}$ 的本征值.

解答　(1) 由于 $\boldsymbol{\sigma}$ 与 $\boldsymbol{L}$ 属不同的自由度，它们互相对易，所以

$$[\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}]=2\mathrm{i}\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{\sigma}=-2\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{L}\tag{5.133}$$

而

$$[\boldsymbol{L},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}]=\boldsymbol{e}_{\alpha}\left[L_{\alpha},\sigma_{\beta}L_{\beta}\right]=\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\boldsymbol{e}_{\alpha}\sigma_{\beta}L_{\gamma}=\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{L}\tag{5.134}$$

由式 (5.133)、式 (5.134)，有

$$[\boldsymbol{J},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}]=[\boldsymbol{L},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}]+\frac{1}{2}[\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}]=0 \tag{5.135}$$

另外

$$[\boldsymbol{J},\boldsymbol{L}^2]=[\boldsymbol{L},\boldsymbol{L}^2]+[\boldsymbol{S},\boldsymbol{L}^2]=0 \tag{5.136}$$

$$[\boldsymbol{L}^2,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}]=\boldsymbol{\sigma}\cdot[\boldsymbol{L}^2,\boldsymbol{L}]+[\boldsymbol{L}^2,\boldsymbol{\sigma}]\cdot\boldsymbol{L}=0 \tag{5.137}$$

(2) 利用公式

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})$$

即可得

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})^2=\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{L}+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{L})=\boldsymbol{L}^2-\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}$$

对于 $\boldsymbol{J}^2$， J_z、 $\boldsymbol{L}^2$、 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}$ 的共同本征态

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})^2+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}^2=(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})^2+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}-l(l+1)=0$$

也就是

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}-l)(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}+l+1)=0$$

因此， $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}$ 本征值为

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}=\begin{cases}l, & j=l+\dfrac{1}{2}\\ -(l+1), & j=l-\dfrac{1}{2}\end{cases}$$

5.35 总角动量的投影算子

题 5.35 自旋为 $\hbar/2$ 的粒子， $(\boldsymbol{L}^2,\boldsymbol{J}^2,j_z)$ 的共同本征函数记为 ϕ_{ljm_j}，相应的本征值 (取 $\hbar=1$) 为

$$\boldsymbol{L}^2=l(l+1),\quad l=0,1,2,\cdots$$

$$\boldsymbol{J}^2=j(j+1),\quad j=l+\frac{1}{2},\quad l-\frac{1}{2}$$

$$J_z=m_j,\quad m_j=j,j-1,\cdots,-j$$

在属于同一个 l 值的态矢量子空间，定义算符

$$\Pi_l^+=\frac{l+1+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}}{2l+1},\quad \Pi_l^-=\frac{l-\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}}{2l+1} \tag{5.138}$$

证明： (1) $\Pi_l^++\Pi_l^-=1$；

(2) $(\Pi_l^+)^2=\Pi_l^+$， $(\Pi_l^-)^2=\Pi_l^-$， $\Pi_l^+\Pi_l^-=\Pi_l^-\Pi_l^+=0$；

(3) $\Pi_l^+\phi_{l,l+1/2,m_j}=\phi_{l,l+1/2,m_j}$， $\Pi_l^+\phi_{l,l-1/2,m_j}=0$，

$\Pi_l^-\phi_{l,l-1/2,m_j}=\phi_{l,l-1/2,m_j}$， $\Pi_l^-\phi_{l,l+1/2,m_j}=0$.

说明 $\Pi_l^\pm$ 的物理意义.

证明　(1) 由定义式 (5.138) 直接计算，立得

$$\Pi_l^+ + \Pi_l^- = 1$$

(2) 利用 Pauli 算符的代数关系 $\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij} + \mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_k$，得

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})^2 &= (\sigma_i L_i)(\sigma_j L_j) = (\sigma_i\sigma_j)L_iL_j = (\delta_{ij}+\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_k)L_iL_j = L_iL_i + \mathrm{i}\varepsilon_{ijk}L_iL_j\sigma_k \\ &= \boldsymbol{L}^2 + \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{l}\times\boldsymbol{L}) = \boldsymbol{L}^2 - \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L} \end{aligned} \tag{5.139}$$

上面取 $\hbar = 1$，因而在 l 取确定值的态空间中

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})^2 = l(l+1) - \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L} \text{ 或 } (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L} - l)(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L} + l + 1) = 0 \tag{5.140}$$

因而

$$\begin{aligned}\left(\Pi_l^+\right)^2 &= \frac{(l+1)^2 + 2(l+1)(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}) + (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l})^2}{(2l+1)^2} \\ &= \frac{(l+1)^2 + 2(l+1)(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}) + l(l+1) - \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}}{(2l+1)^2} = \frac{l+1+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}}{2l+1} = \Pi_l^+ \\ \left(\Pi_l^-\right)^2 &= \frac{l^2 - 2l(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}) + (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l})^2}{(2l+1)^2} \\ &= \frac{l^2 - 2l(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}) + l(l+1) - \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}}{(2l+1)^2} = \frac{l-\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}}{2l+1} = \Pi_l^- \\ \Pi_l^+\Pi_l^- &= \Pi_l^-\Pi_l^+ = 0\end{aligned}$$

也就是

$$\left(\Pi_l^+\right)^2 = \Pi_l^+, \quad \left(\Pi_l^-\right)^2 = \Pi_l^-, \quad \Pi_l^+\Pi_l^- = \Pi_l^-\Pi_l^+ = 0 \tag{5.141}$$

(3) ϕ_{ljm_j} 通过 L-S 耦合得到，该态也是 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}$ 的本征态，因

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l} = 2\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{l} = \boldsymbol{j}^2 - \boldsymbol{s}^2 - \boldsymbol{L}^2 = \boldsymbol{j}^2 - \boldsymbol{L}^2 - \frac{3}{4}$$

这样

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}\phi_{l,l+1/2,m_j} &= \left[(l+1/2)(l+3/2) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right]\phi_{l,l+1/2,m_j} = l\phi_{l,l+1/2,m_j} \\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}\phi_{l,l-1/2,m_j} &= \left[(l-1/2)(l+1/2) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right]\phi_{l,l+1/2,m_j} = -(l+1)\phi_{l,l-1/2,m_j}\end{aligned}$$

应该说，本题 $\Pi_l^\pm$ 正是根据上式构造的. 由此可得

$$\begin{aligned}\Pi_l^+\phi_{l,l+1/2,m_j} &= \frac{l+1+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}}{2l+1}\phi_{l,l+1/2,m_j} = \frac{l+1+l}{2l+1}\phi_{l,l+1/2,m_j} = \phi_{l,l+1/2,m_j} \\ \Pi_l^+\phi_{l,l-1/2,m_j} &= \frac{l+1+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}}{2l+1}\phi_{l,l-1/2,m_j} = \frac{l+1-l-1}{2l+1}\phi_{l,l-1/2,m_j} = 0 \\ \Pi_l^-\phi_{l,l+1/2,m_j} &= \frac{l-\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}}{2l+1}\phi_{l,l+1/2,m_j} = \frac{l-l}{2l+1}\phi_{l,l+1/2,m_j} = 0\end{aligned}$$

$$\Pi_l^- \phi_{l,l-1/2,m_j} = \frac{l-\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}}{2l+1}\phi_{l,l-1/2,m_j} = \frac{l+l+1}{2l+1}\phi_{l,l-1/2,m_j} = \phi_{l,l-1/2,m_j}$$

由上可知，Π_l^+ 是 $j=l+\frac{1}{2}$ 态的投影算符，Π_l^- 是 $j=l-\frac{1}{2}$ 态的投影算符.

5.36 Pauli 算符径向分量对自旋 –轨道耦合表象基矢的作用

题 5.36 给定 j、m_j 后，$(\boldsymbol{L}^2,\boldsymbol{J}^2,J_z)$ 的共同本征态记为 ϕ_{ljm_j} 有两种，相应于 $l=j\pm1/2$，在 (θ,φ,s_z) 表象中可表示成

$$\phi^A_{jm_j} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}}\begin{pmatrix}\sqrt{l+m+1}Y_{lm}\\ \sqrt{l-m}Y_{l,m+1}\end{pmatrix},\quad l=j-1/2, m_j=m+1/2$$

$$\phi^B_{jm_j} = \frac{1}{\sqrt{2l'+1}}\begin{pmatrix}-\sqrt{l'-m}Y_{l'm}\\ \sqrt{l'+m+1}Y_{l',m+1}\end{pmatrix},\quad l'=j+1/2, l'\neq 0, m_j=m+1/2$$

分别相应于两种不同宇称，定义

$$\sigma_r = \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}/r$$

证明取适当相角后，

$$\sigma_r\phi^A_{jm_j} = -\phi^B_{jm_j},\quad \sigma_r\phi^B_{jm_j} = -\phi^A_{jm_j}$$

提示 σ_r 为奇宇称算符 (赝标量)，

$$[\boldsymbol{\sigma},\sigma_r] = 2\mathrm{i}\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\sigma},\quad [\boldsymbol{L},\sigma_r] = -\mathrm{i}\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\sigma},\quad [\boldsymbol{J},\sigma_r]=0$$

证明 设 $\boldsymbol{A}$ 为任意与 $\boldsymbol{\sigma}$ 对易的矢量，则有

$$[\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A}] = 2\mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma} \tag{5.142}$$

这是题 5.38 中式 (5.157) 的一个直接结果[①]. 上式中取 $\boldsymbol{A}=\frac{1}{r}\boldsymbol{r}$，即给出

$$[\boldsymbol{\sigma},\sigma_r] = 2\mathrm{i}\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\sigma} \tag{5.143}$$

另外

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{L},\sigma_r] &= \frac{1}{r}[\boldsymbol{e}_iL_i,\sigma_jx_j] = \frac{1}{r}\boldsymbol{e}_i\sigma_j[L_i,x_j] = \frac{1}{r}\boldsymbol{e}_i\sigma_j\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}x_j\\ &= \mathrm{i}\frac{1}{r}\boldsymbol{e}_i(\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{r})_i = -\mathrm{i}\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{\sigma}\end{aligned} \tag{5.144}$$

由式 (5.143)、式 (5.144) 即得

$$[\boldsymbol{J},\sigma_r] = \left[\boldsymbol{L}+\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma},\sigma_r\right] = 0 \tag{5.145}$$

① 利用 Pauli 算符代数关系按照分量形式计算也非常直接.

因此 σ_r 与 $\boldsymbol{J}$ 对易，从而也与 $\boldsymbol{J}^2$ 对易. 因而 σ_r 作用到 ϕ_{ljm_j} 上，量子数 j 和 m_j 均不变.

如题所给，对于给定的 j、m_j，$(\boldsymbol{L}^2,\boldsymbol{J}^2,J_z)$ 的共同本征函数记为 ϕ_{ljm_j} 有两种，相应于 $l=j\pm1/2$，在 (θ,φ,s_z) 表象中可表示成

$$\phi^A_{jm_j}=\frac{1}{\sqrt{2l+1}}\begin{pmatrix}\sqrt{l+m+1}\,\mathrm{Y}_{lm}\\ \sqrt{l-m}\,\mathrm{Y}_{l,m+1}\end{pmatrix},\quad l=j-1/2,m_j=m+1/2 \tag{5.146a}$$

$$\phi^B_{jm_j}=\frac{1}{\sqrt{2l'+1}}\begin{pmatrix}-\sqrt{l'-m}\,\mathrm{Y}_{l'm}\\ \sqrt{l'+m+1}\,\mathrm{Y}_{l',m+1}\end{pmatrix},\quad l'=j+1/2,l'\neq0,m_j=m+1/2 \tag{5.146b}$$

对于同一个 j 值，上式中 $l'=l+1$，因为 Y_{lm} 的宇称为 $(-1)^l$，所以式 (5.146) 中两种波函数的宇称相反.

$\sigma_r=\boldsymbol{\sigma}\cdot\dfrac{\boldsymbol{r}}{r}$ 是奇宇称算符，受它作用后，波函数的宇称要改变. $\dfrac{\boldsymbol{r}}{r}$ 与轨道波函数乘，考虑角动量耦合，l 可能改变 0、±1. σ_r 作用后波函数的宇称要改变，所以 l 的改变只有 ±1. 对于 $\phi^A_{jm_j}$ 态，$j=l+1/2$，σ_r 作用以后，l 不能减 1，否则无法保证 j 不变，这样 l 只能是加 1，结果只能是 $\phi^B_{jm_j}$ 态. 同样分析知，σ_r 作用到 $\phi^B_{jm_j}$，结果只能是 $\phi^A_{jm_j}$ 态. 这样可令

$$\sigma_r\phi^A_{jm_j}=C\phi^B_{jm_j},\quad \sigma_r\phi^B_{jm_j}=C'\phi^A_{jm_j} \tag{5.147}$$

其中 C、C' 为常数. 由于 $\sigma_r^2=1$，则

$$\phi^A_{jm_j}=(\sigma_r)^2\phi^A_{jm_j}=\sigma_rC\phi^B_{jm_j}=CC'\phi^A_{jm_j} \tag{5.148}$$

因此

$$CC'=1 \tag{5.149}$$

由于 σ_r 是厄米算符，式 (5.146) 中两个波函数又都是归一化的，

$$C'=\left\langle\phi^A_{jm_j}\middle|\sigma_r\middle|\phi^B_{jm_j}\right\rangle=C^*\left\langle\phi^B_{jm_j}\middle|\phi^B_{jm_j}\right\rangle=C^* \tag{5.150}$$

因此

$$CC^*=C'C'^*=1 \tag{5.151}$$

若在 $\phi^A_{jm_j}$ 与 $\phi^B_{jm_j}$ 间选取适当的相位差，使得 $C=-1$，则 $C'=C^*=-1$，因而有

$$\sigma_r\phi^A_{jm_j}=-\phi^B_{jm_j},\quad \sigma_r\phi^B_{jm_j}=-\phi^A_{jm_j} \tag{5.152}$$

讨论　为了考察对题给的 $(\boldsymbol{L}^2,\boldsymbol{J}^2,J_z)$ 的共同本征函数作什么样的调整，才能满足式 (5.152). 我们从式 (5.147) 出发，做具体计算. 在 σ_z 表象中

$$\sigma_r=\frac{1}{r}(x\sigma_x+y\sigma_y+z\sigma_z)=\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\\ \sin\theta\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} & -\cos\theta\end{pmatrix} \tag{5.153}$$

式 (5.147) 的第一式是两分量方程，为了确定 C 我们只要关心第一个分量，这给出

$$-C\frac{\sqrt{l'-m}}{\sqrt{2l'+1}}\mathrm{Y}_{l'm}=\frac{\sqrt{l+m+1}}{\sqrt{2l+1}}\cos\theta\mathrm{Y}_{lm}+\frac{\sqrt{l-m}}{\sqrt{2l+1}}\sin\theta\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\mathrm{Y}_{l,m+1} \tag{5.154}$$

式中 $l'=l+1$. 设球谐函数的相位约定按照教材附录四[①]定义 (与 Condon-Shortley 约定一致，使得升降算符矩阵元全是非负实数)，则有递推公式

$$\begin{aligned}\cos\theta\mathrm{Y}_{lm} &= \sqrt{\frac{(l+1)^2-m^2}{(2l+1)(2l+3)}}\mathrm{Y}_{l+1,m}+\sqrt{\frac{l^2-m^2}{(2l-1)(2l+1)}}\mathrm{Y}_{l-1,m},\\ \sin\theta\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\mathrm{Y}_{l,m+1} &= -\sqrt{\frac{(l+m+1)(l+m+2)}{(2l-1)(2l+1)}}\mathrm{Y}_{l-1,m}+\sqrt{\frac{(l-m)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}\mathrm{Y}_{l+1,m}\end{aligned}$$

我们只要关注式 (5.154) 中 $\mathrm{Y}_{l+1,m}$ 项系数 (全是实数) 的正负号即得出 $C=-1$，从而由式 (5.150) 知 $C'=-1$. 这样结合式 (5.147) 即给出式 (5.152). 可见，若球谐函数的相位选取作如上所述的约定，则本题所给的共同本征函数 $\phi^A_{jm_j}$ 与 $\phi^B_{jm_j}$ 的相位选取已经使得它们满足式 (5.152).

说明　本题还有一种证法，即将式 (5.153) 作用到 $\phi^A_{jm_j}$ 与 $\phi^B_{jm_j}$ 上，利用球谐函数的递推公式直接验算.

5.37　在态 $\alpha\mathrm{Y}_{l0}$ 下总角动量平方及第三分量的可能值及相应概率

题 5.37　$s=\dfrac{1}{2}$ 粒子，S_z 的本征态常记为 $\alpha=\chi_{1/2}$，$\beta=\chi_{-1/2}$，求在态 $\alpha\mathrm{Y}_{l0}$ 下，$\boldsymbol{J}^2$、J_z 的可能值及相应概率 (取 $\hbar=1$).

解法一　$\alpha\mathrm{Y}_{l0}$ 显然是 $\boldsymbol{L}^2$，L_z，σ_z，J_z 的共同本征态 (无耦合表象)，本征值为

$$\boldsymbol{L}^2=l(l+1),\quad L_z=0,\quad \sigma_z=1;\quad j_z=\frac{1}{2}$$

$\boldsymbol{J}^2$ 本征值为 $j(j+1)$,$j=l\pm\dfrac{1}{2}$，将 $\alpha\mathrm{Y}_{l0}$ 表示为 $(\boldsymbol{L}^2,\boldsymbol{J}^2,J_z)$ 的共同本征态的线性叠加，必为

$$\alpha\mathrm{Y}_{l0}=C_1\phi_{l,l+\frac{1}{2},\frac{1}{2}}+C_2\phi_{l,l-\frac{1}{2},\frac{1}{2}}$$

由于

$$\begin{aligned}\phi_{l,l+\frac{1}{2},\frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{l+1}{2l+1}}\alpha\mathrm{Y}_{l0}+\sqrt{\frac{l}{2l+1}}\beta\mathrm{Y}_{l1}\\ \phi_{l,l-\frac{1}{2},\frac{1}{2}} &= -\sqrt{\frac{l}{2l+1}}\alpha\mathrm{Y}_{l0}+\sqrt{\frac{l+1}{2l+1}}\beta\mathrm{Y}_{l1}\end{aligned}$$

可有

$$C_1=\left\langle\phi_{l,l+\frac{1}{2},\frac{1}{2}}|\alpha\mathrm{Y}_{l0}\right\rangle=\sqrt{\frac{l+1}{2l+1}},\quad C_2=\left\langle\phi_{l,l-\frac{1}{2},\frac{1}{2}}|\alpha\mathrm{Y}_{l0}\right\rangle=-\sqrt{\frac{l}{2l+1}}$$

① 曾谨言, 量子力学 (第四版卷 I)[M], 北京: 科学出版社, 2007, P.520.

因此，测得 $\boldsymbol{J}^2=\left(l+\frac{1}{2}\right)\left(l+\frac{3}{2}\right)$ 的概率为 $\frac{l+1}{2l+1}$，测得 $\boldsymbol{J}^2=\left(l-\frac{1}{2}\right)\left(l+\frac{1}{2}\right)$ 的概率为 $\frac{l}{2l+1}$.

解法二　设 $j=l+\frac{1}{2}$ 的概率为 P，则 $j=l-\frac{1}{2}$ 的概率为 $1-P$.

$$\begin{aligned}\left\langle \boldsymbol{J}^2\right\rangle &= \left(l+\frac{1}{2}\right)\left(l+\frac{3}{2}\right)P+\left(l-\frac{1}{2}\right)\left(l+\frac{1}{2}\right)(1-P)\\ &= (2l+1)P+l^2-\frac{1}{4}\end{aligned}\tag{5.155}$$

因为

$$\boldsymbol{J}^2=\boldsymbol{L}^2+\frac{3}{4}+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}$$

由于在态 $\alpha\mathrm{Y}_{l0}$ 中 $\langle L_x\rangle=\langle L_y\rangle=\langle L_z\rangle=0$，所以

$$\langle\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}\rangle=\langle\alpha|\sigma|\alpha\rangle\cdot\langle\mathrm{Y}_{l0}|\boldsymbol{L}|\mathrm{Y}_{l0}\rangle=0$$

于是

$$\left\langle \boldsymbol{J}^2\right\rangle=l(l+1)+\frac{3}{4}\tag{5.156}$$

由式 (5.155)、式 (5.156)可得

$$P=\frac{l+1}{2l+1}$$

即为 $j=l+\frac{1}{2}$ 的概率，而 $j=l-\frac{1}{2}$ 的概率为

$$1-P=\frac{l}{2l+1}$$

5.38　自旋轨道耦合表象总角动量态下的自旋期望值

题 5.38　自旋为 $\hbar/2$ 的粒子，处于 $(\boldsymbol{L}^2,\boldsymbol{J}^2,J_z)$ 的共同本征态 ϕ_{ljm_j} 下，证明：

$$\hbar\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle=\langle\boldsymbol{J}\rangle\frac{j(j+1)-l(l+1)+3/4}{j(j+1)}$$

提示　ϕ_{jm_j} 也是 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}$ 的本征态，并利用

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})+(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})\boldsymbol{\sigma}=2\boldsymbol{L},\quad(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})^2+\hbar(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})-\boldsymbol{L}^2=0$$

证明　为方便采用 Dirac 符号，题给 $(\boldsymbol{L}^2,\boldsymbol{J}^2,J_z)$ 的共同本征态记为 $|l,1/2,j,m_j\rangle$. 设 $\boldsymbol{A}$ 为任意与 $\boldsymbol{\sigma}$ 对易的矢量，利用 Pauli 算符的代数关系 $\sigma_i\sigma_j=\delta_{ij}+\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_k$，

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})-\boldsymbol{A} &= \boldsymbol{e}_i\sigma_i\sigma_jA_j-\boldsymbol{A}=\boldsymbol{e}_iA_j\left(\delta_{ij}+\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_k\right)-\boldsymbol{A}\\ &= \boldsymbol{e}_iA_i+\mathrm{i}\boldsymbol{e}_i(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma})_i-\boldsymbol{A}\end{aligned}$$

$$= \mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma}$$

也就是

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})-\boldsymbol{A}=\mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma}$$

对上式取 Hermite 共轭给出

$$\boldsymbol{A}-(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\boldsymbol{\sigma}=\mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma}$$

因而

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})-\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}-(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\boldsymbol{\sigma}=\mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma} \tag{5.157}$$

取 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}$，即有

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})+(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})\boldsymbol{\sigma}=2\boldsymbol{L} \tag{5.158}$$

而 $\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}=\left(\boldsymbol{L}+\dfrac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}\right)^2-\boldsymbol{L}^2-\dfrac{\hbar^2}{4}\boldsymbol{\sigma}^2=\boldsymbol{J}^2-\boldsymbol{L}^2-\boldsymbol{s}^2$. 可见 $|l,1/2,j,m_j\rangle$ 也是 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{l}$ 的本征态.

现在式 (5.158) 两边对 $|l,1/2,j,m_j\rangle$ 求期望值，因为

$$\begin{aligned}\langle l,\frac{1}{2},j,m_j|\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})|l,\frac{1}{2},j,m_j\rangle &= \langle l,\frac{1}{2},j,m_j|(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})\boldsymbol{\sigma}|l,\frac{1}{2},j,m_j\rangle\\ &= \hbar\left[j(j+1)-l(l+1)-\frac{3}{4}\right]\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle.\end{aligned}$$

则有

$$\langle\boldsymbol{l}\rangle=\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})_{\mathrm{eigv}} \tag{5.159}$$

式中下标 “eigv” 表示本征值. 进而

$$\langle\boldsymbol{J}\rangle=\langle\boldsymbol{L}+\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}\rangle=\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}+\frac{\hbar}{2}\right)_{\mathrm{eigv}} \tag{5.160}$$

利用 Pauli 算符的代数关系得

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})^2 &= (\sigma_iL_i)(\sigma_jL_j)=(\sigma_i\sigma_j)L_iL_j=(\delta_{ij}+\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_k)L_iL_j=L_iL_i+\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}L_iL_j\sigma_k\\ &= \boldsymbol{L}^2+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{L})=\boldsymbol{L}^2-\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}\end{aligned}$$

也就是

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})^2+\hbar(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})-\boldsymbol{L}^2=0 \tag{5.161}$$

可得

$$\begin{aligned}\boldsymbol{J}^2 &= \boldsymbol{L}^2+\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}+\frac{3}{4}\hbar^2=(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L})^2+2\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}+\frac{3}{4}\hbar^2\\ &= \left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}+\frac{\hbar}{2}\right)\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}+\frac{3\hbar}{2}\right)\end{aligned} \tag{5.162}$$

因此，式 (5.160) 两边乘以 $\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}+\frac{3}{2}\hbar\right)_{\text{eigv}}$，得

$$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle\left(\boldsymbol{J}^2\right)_{\text{eigv}}=\langle\boldsymbol{J}\rangle\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}+\frac{3}{2}\hbar\right)_{\text{eigv}}=\frac{1}{\hbar}\langle\boldsymbol{j}\rangle\left(\boldsymbol{J}^2-\boldsymbol{L}^2+\frac{3}{4}\hbar^2\right)_{\text{eigv}}\tag{5.163}$$

由此即有

$$\hbar\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle=\langle\boldsymbol{J}\rangle\frac{j(j+1)-l(l+1)+\frac{3}{4}}{j(j+1)}\tag{5.164}$$

说明　还有一种证法是分自旋–轨道“平行”与“反平行”两种情况，利用总角动量态 $|l,1/2,j,m_j\rangle$ 的具体形式进行直接计算，参考题 5.39 的解法二.

5.39　在自旋–轨道耦合表象基矢下求总磁矩分量的期望值

题 5.39　电子的磁矩算符可表为 $\boldsymbol{\mu}=-\dfrac{e}{2mc}(\boldsymbol{L}+2\boldsymbol{s})$. 磁矩的观测值定义为

$$\mu=\langle ljm_j|\mu_z|ljm_j\rangle\big|_{m_j=j}=\langle ljj|\mu_z|ljj\rangle$$

而 $|ljm_j\rangle$ 是 $(\boldsymbol{L}^2,\boldsymbol{s}^2,j_z)$ 的共同本征态，计算 μ.

解法一　由 $\boldsymbol{\mu}=-\dfrac{e}{2mc}(\boldsymbol{L}+2\boldsymbol{s})=-\dfrac{e}{2mc}(\boldsymbol{J}+\boldsymbol{s})$，得

$$\mu=\langle ljj|\mu_z|ljj\rangle=-\frac{e}{2mc}\langle ljj|j_z+s_z|ljj\rangle=-\frac{ej}{2mc}-\frac{e}{2mc}\langle ljj|s_z|ljj\rangle\tag{5.165}$$

根据题 5.38 的式 (5.164)，

$$\langle\boldsymbol{s}\rangle=\langle\boldsymbol{j}\rangle\frac{j(j+1)-l(l+1)+\frac{3}{4}}{2j(j+1)}\tag{5.166}$$

结合式 (5.165)、式 (5.166)，得 $\mu=-gj\mu_{\text{B}}$，其中 $\mu_{\text{B}}=\dfrac{e\hbar}{2mc}$ 为 Bohr 磁子，而 g 为 Landè因子，如下给出：

$$g=1+\frac{j(j+1)-l(l+1)+\frac{3}{4}}{2j(j+1)}$$

即有

$$\mu=\begin{cases}-(j+1/2)\mu_{\text{B}}, & j=l+\dfrac{1}{2}\\[2ex] -j(2j+1)\mu_{\text{B}}/(2j+2), & j=l-\dfrac{1}{2},l\neq 0\end{cases}$$

解法二　总角动量态 $|l,1/2,j,m_j\rangle$ 按非耦合表象基矢展开式为

$$\begin{cases}\left|l,\frac{1}{2},j,m_j\right\rangle=\sqrt{\frac{j+m_j}{2j}}\left|j-\frac{1}{2},m_j-\frac{1}{2}\right\rangle|\uparrow\rangle+\sqrt{\frac{j-m_j}{2j}}\left|j-\frac{1}{2},m_j+\frac{1}{2}\right\rangle|\downarrow\rangle\\ j=l+\frac{1}{2},\quad m_j=m+\frac{1}{2}\end{cases}\tag{5.167}$$

$$\begin{cases} \left|l,\frac{1}{2},j,m_j\right\rangle = -\sqrt{\frac{j-m_j+1}{2j+2}}\left|j+\frac{1}{2},m_j-\frac{1}{2}\right\rangle|\uparrow\rangle + \sqrt{\frac{j+m_j+1}{2j+2}}\left|j+\frac{1}{2},m_j+\frac{1}{2}\right\rangle|\downarrow\rangle \\ j=l-\frac{1}{2}, \quad m_j=m+\frac{1}{2}, l\neq 0 \end{cases} \tag{5.168}$$

由式 (5.167)、式 (5.168) 得

$$\begin{aligned} \langle ljj|s_z|ljj\rangle &= \frac{\hbar}{2}, && j=l+\frac{1}{2} \\ \langle ljj|s_z|ljj\rangle &= \frac{\hbar}{2}\left(\frac{1}{2j+2}-\frac{2j+1}{2j+2}\right)=-\frac{j\hbar}{2j+2}, && j=l-\frac{1}{2} \end{aligned}$$

再结合式 (5.165) 即得

$$\mu=\begin{cases} -(j+1/2)\mu_{\mathrm{B}}, & j=l+1/2 \\ -j(2j+1)\mu_{\mathrm{B}}/(2j+2), & j=l-1/2, l\neq 0 \end{cases}$$

与解法一得到的结果一致.

5.40　两个 1/2 自旋 Pauli 算符标量积满足的最简单代数关系

题 5.40　$\boldsymbol{\sigma}_1$，$\boldsymbol{\sigma}_2$ 分别是两个自旋为 $\frac{1}{2}$ 粒子的 Pauli 算符，

(1) 证明 $(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)^2+2\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2-3=0$;

(2) 求 $\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$ 的本征值，本征态.

解答　(1) 利用公式

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})$$

其中，$\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$ 皆与 $\boldsymbol{\sigma}$ 对易. 令 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}=\boldsymbol{\sigma}_2$，$\boldsymbol{\sigma}=\boldsymbol{\sigma}_1$ 且 $\boldsymbol{\sigma}_2^2=3$ 以及 $\boldsymbol{\sigma}_2\times\boldsymbol{\sigma}_2=2\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_2$，故

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)^2=3-2\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{5.169}$$

(2) 式 (5.169)为算符 $\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$ 满足的最简单的代数关系，也是其本征值满足的代数方程，所以 $\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$ 的本征值为 1，-3，相应的本征态为 $\boldsymbol{S}^2$、S_z $\left(\boldsymbol{S}=\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2=\frac{\hbar}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)\right)$ 的共同本征态 χ_{SM_S}，

$$\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2\chi_{1M_S}=\chi_{1M_S}, \quad \boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2\chi_{00}=-3\chi_{00}$$

5.41　自旋交换算符

题 5.41　对于两个 1/2 自旋的粒子体系，定义算符

$$P_{12}=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)$$

其中，$\boldsymbol{\sigma}_1$、$\boldsymbol{\sigma}_2$ 分别为两个粒子的 Pauli 算符，

(1) 试利用 Pauli 算符的代数关系证明 $P_{12}^2=1$；

(2) 试证明 $P_{12}=\boldsymbol{S}^2/\hbar^2-1$，其中 $\boldsymbol{S}$ 为两粒子的总自旋；

(3) 试证明 $P_{12}\chi_{SS_z}=(-1)^{S+1}\chi_{SS_z}$，其中 χ_{SS_z} 为总自旋及第三分量的共同本征态；

(4) 证明 $P_{12}\boldsymbol{\sigma}_1P_{12}=\boldsymbol{\sigma}_2$ 以及 $P_{12}\boldsymbol{\sigma}_2P_{12}=\boldsymbol{\sigma}_2$；

(5) 请指出 P_{12} 的物理意义.

解答　(1) 按题设定义，$P_{12}=\dfrac{1}{2}(1+\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)=\dfrac{1}{2}(1+\sigma_{1i}\sigma_{2i})$. 由 Pauli 算符的代数关系

$$\sigma_i\sigma_j=\delta_{ij}+\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_k$$

以及属于两个不同粒子的 Pauli 算符互相对易的性质可得

$$\begin{aligned}
P_{12}^2 &= \frac{1}{4}(1+\sigma_{1i}\sigma_{2i})(1+\sigma_{1j}\sigma_{2j})\\
&= \frac{1}{4}(1+2\sigma_{1i}\sigma_{2i}+\sigma_{1i}\sigma_{2i}\sigma_{1j}\sigma_{2j})=\frac{1}{4}(1+2\sigma_{1i}\sigma_{2i}+\sigma_{1i}\sigma_{1j}\sigma_{2i}\sigma_{2j})\\
&= \frac{1}{4}[1+2\sigma_{1i}\sigma_{2i}+(\delta_{ij}+\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_{1k})(\delta_{ij}+\mathrm{i}\varepsilon_{ijl}\sigma_{2l})]\\
&= \frac{1}{4}\left[1+2\sigma_{1i}\sigma_{2i}+\delta_{ii}+0+0+\mathrm{i}^2\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{ijl}\sigma_{1k}\sigma_{2l}\right]=\frac{1}{4}[1+2\sigma_{1i}\sigma_{2i}+3-2\delta_{kl}\sigma_{1k}\sigma_{2l}]\\
&= 1
\end{aligned}$$

(2) $\boldsymbol{\sigma}_1^2=\sigma_{1i}\sigma_{1i}=3$，同样 $\boldsymbol{\sigma}_2^2=3$，这样

$$\begin{aligned}
P_{12} &= \frac{1}{2}(1+\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)=\frac{1}{4}(2+2\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)=\frac{1}{4}\left(\boldsymbol{\sigma}_1^2+\boldsymbol{\sigma}_2^2+2\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2\right)-1\\
&= \frac{1}{4}(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)^2-1=\boldsymbol{S}^2/\hbar^2-1
\end{aligned}$$

(3) 由第 (2) 小题的结论，得

$$P_{12}\chi_{SS_z}=\left(\frac{\boldsymbol{S}^2}{\hbar^2}-1\right)\chi_{SS_z}=\left(S^2+S-1\right)\chi_{SS_z}$$

因而 $S=1$ 时，$P_{12}\chi_{SS_z}=\chi_{SS_z}$；$S=0$ 时，$P_{12}\chi_{SS_z}=-\chi_{SS_z}$. 故 $P_{12}\chi_{SS_z}=(-1)^{S+1}\chi_{SS_z}$.

(4) 利用 Pauli 算符的代数关系式，

$$\sigma_{1i}(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)=\sigma_{1i}\sigma_{1j}\sigma_{2j}=(\delta_{ij}+\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_{1k})\sigma_{2j}=\sigma_{2i}-\mathrm{i}(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)_i$$

或者

$$\boldsymbol{\sigma}_1(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)=\boldsymbol{\sigma}_2-\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{5.170}$$

同理得

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)\boldsymbol{\sigma}_2=\boldsymbol{\sigma}_1-\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{5.171}$$

这样

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma}_1 P_{12} &= \frac{1}{2}[\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_1(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)]=\frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2-\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)\\ &= \frac{1}{2}[\boldsymbol{\sigma}_2+(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)\boldsymbol{\sigma}_2]=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)=P_{12}\boldsymbol{\sigma}_2\end{aligned}\tag{5.172}$$

由于式 (5.170)， P_{12} 的自逆性质 $P_{12}^{-1}=P_{12}$. 式 (5.172) 两边左乘或者右乘 P_{12} 即得

$$P_{12}\boldsymbol{\sigma}_1 P_{12}=\boldsymbol{\sigma}_2,\quad P_{12}\boldsymbol{\sigma}_2 P_{12}=\boldsymbol{\sigma}_1$$

也可写为

$$P_{12}\boldsymbol{\sigma}_1 P_{12}^{-1}=\boldsymbol{\sigma}_2,\quad P_{12}\boldsymbol{\sigma}_2 P_{12}^{-1}=\boldsymbol{\sigma}_1$$

(5) 第 (3) 小题 $S=1$ 和 $S=1$ 分别对两个电子的自旋交换是对称和反对称，据此 P_{12} 是两个电子态的自旋交换算符. 第 (4) 小题又指出， P_{12} 是两个电子自旋算符的交换算符. 总之， P_{12} 是两个电子的自旋交换算符.

另证　(关于第 (1) 小题) 利用 Pauli 算符的代数关系式，得

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}+\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})$$

其中， $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$ 与 $\boldsymbol{\sigma}$ 对易. 现令 $\boldsymbol{\sigma}=\boldsymbol{\sigma}_1$， $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}=\boldsymbol{\sigma}_2$，则由 $\boldsymbol{\sigma}_2^2=3$ 及 $\boldsymbol{\sigma}_2\times\boldsymbol{\sigma}_2=2\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_2$ 得

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)^2=3-2(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)$$

这样得到

$$\begin{aligned}P_{12}^2 &= \frac{1}{4}(1+\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)^2=\frac{1}{4}\left[1+2\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2+(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)^2\right]\\ &= \frac{1}{4}[1+2\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2+(3-2\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)]=1\end{aligned}$$

5.42　两个 1/2 自旋粒子的一个两体算符的展开

题 5.42　展开两个 $\dfrac{1}{2}$ 自旋粒子的两体算符 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2}$.

提示　用自旋交换算符 P_{12} 代换 $\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$.

解法一　设 $\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2=2P_{12}-1$ 代入，级数展开

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2} &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\alpha P_{12}}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(2\mathrm{i}\alpha)^n}{n!}P_{12}^n\\ &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}(\cos 2\alpha+\mathrm{i}P_{12}\sin 2\alpha)\\ &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}\left[\cos 2\alpha+\frac{\mathrm{i}}{2}\sin 2\alpha(1+\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)\right]\end{aligned}$$

也就是

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}\left[\cos 2\alpha+\frac{\mathrm{i}}{2}\sin 2\alpha(1+\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)\right]\tag{5.173}$$

解法二　因为 $P_{12}^2=1$，故 P_{12} 的本征值为 ±1. 类似于题 5.22 的求导，取

$$\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\alpha P_{12}}=C_0+C_1P_{12}$$

将其作用到 P_{12} 的本征值为 ±1 的本征态上有

$$C_0+C_1=\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\alpha},\quad C_0-C_1=\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\alpha}$$

解出

$$C_0=\cos2\alpha,\quad C_1=\mathrm{i}\sin2\alpha$$

这样

$$\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\alpha P_{12}}=\cos2\alpha+\mathrm{i}P_{12}\sin2\alpha$$

同样给出式 (5.173).

5.43　两个自旋 1/2 粒子的 Pauli 算符的一些代数结果

题 5.43　两个自旋 1/2 粒子组成的体系，$\boldsymbol{\sigma}_1$、$\boldsymbol{\sigma}_2$ 分别为两个粒子的 Pauli 算符，证明

$$\boldsymbol{\sigma}_1\cdot(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)=2\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{5.174}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_2\cdot(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)=-2\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{5.175}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_1(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)=\boldsymbol{\sigma}_2-\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{5.176}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_2(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)=\boldsymbol{\sigma}_1+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{5.177}$$

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)\boldsymbol{\sigma}_1=\boldsymbol{\sigma}_2+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{5.178}$$

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)\boldsymbol{\sigma}_2=\boldsymbol{\sigma}_1-\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{5.179}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_1\times(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)=\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2-2\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{5.180}$$

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)\times\boldsymbol{\sigma}_1=\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2+2\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{5.181}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_2\times(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)=\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2+2\boldsymbol{\sigma}_1 \tag{5.182}$$

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)\times\boldsymbol{\sigma}_2=\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2-2\boldsymbol{\sigma}_1 \tag{5.183}$$

证明　注意到 $\boldsymbol{\sigma}_1$、$\boldsymbol{\sigma}_2$ 互易

$$\boldsymbol{\sigma}_1\cdot(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)=(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_1)\cdot\boldsymbol{\sigma}_2=2\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$$

$$\boldsymbol{\sigma}_2\cdot(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)=-\boldsymbol{\sigma}_2\cdot(\boldsymbol{\sigma}_2\times\boldsymbol{\sigma}_1)=-(\boldsymbol{\sigma}_2\times\boldsymbol{\sigma}_2)\cdot\boldsymbol{\sigma}_1=-2\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$$

这给出了式 (5.174)与式 (5.175)的证明.

利用 Pauli 算符的代数关系 $\sigma_i\sigma_j=\delta_{ij}+\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_k$，若 $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{\sigma}$ 对易，则有

$$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})-\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}-(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})\boldsymbol{\sigma}=\mathrm{i}\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{\sigma} \tag{5.184}$$

在上式中，令 $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{\sigma}$ 一个等于 $\boldsymbol{\sigma}_1$，另一个等于 $\boldsymbol{\sigma}_2$，则有

$$\boldsymbol{\sigma}_1(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)=\boldsymbol{\sigma}_2-\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{5.185}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_2(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)=\boldsymbol{\sigma}_1+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{5.186}$$

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)\boldsymbol{\sigma}_1=\boldsymbol{\sigma}_2+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{5.187}$$

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)\boldsymbol{\sigma}_2=\boldsymbol{\sigma}_1-\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2 \tag{5.188}$$

另外，式 (5.178)和式 (5.176)相减，式 (5.179)和式 (5.177)相减，有

$$[\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2,\boldsymbol{\sigma}_1]=2\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2$$

$$[\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2,\boldsymbol{\sigma}_2]=-2\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2$$

利用公式

$$\boldsymbol{A}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C})=\boldsymbol{A}_\alpha\boldsymbol{B}\boldsymbol{C}_\alpha-(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})\boldsymbol{C} \tag{5.189}$$

$$(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\times\boldsymbol{C}=\boldsymbol{A}_\alpha\boldsymbol{B}\boldsymbol{C}_\alpha-\boldsymbol{A}(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{C}) \tag{5.190}$$

且注意到 $\boldsymbol{\sigma}_1$、 $\boldsymbol{\sigma}_2$ 互易，则

$$\boldsymbol{\sigma}_1\times(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)=(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)\boldsymbol{\sigma}_1-(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_1)\boldsymbol{\sigma}_2=(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)\boldsymbol{\sigma}_1-3\boldsymbol{\sigma}_2$$

再利用式 (5.178)有

$$\boldsymbol{\sigma}_1\times(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)=\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2-2\boldsymbol{\sigma}_2$$

则式 (5.180)得证. 式 (5.181)、式 (5.182)、式 (5.183)的证明，完全类似.

5.44　两个自旋 1/2 粒子自旋算符和总自旋算符的一些代数结果

题 5.44　对两个自旋 1/2 粒子组成的体系，总自旋 $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2$，证明 (取 $\hbar=1$)：

$$\boldsymbol{S}(\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2)=(\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2)\boldsymbol{S}=\frac{1}{4}\boldsymbol{S} \tag{5.191}$$

$$\boldsymbol{S}\cdot(\boldsymbol{S}_1\times\boldsymbol{S}_2)=(\boldsymbol{S}_1\times\boldsymbol{S}_2)\cdot\boldsymbol{S}=0 \tag{5.192}$$

$$\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^2=\boldsymbol{S}^2\boldsymbol{S}=2\boldsymbol{S} \tag{5.193}$$

$$S_n^4=S_n^2 \tag{5.194}$$

证明　因

$$\boldsymbol{S}=\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2=\frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2),\quad \boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2=\frac{1}{4}\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$$

利用题 5.43 式 (5.176)、式 (5.177)、式 (5.178)和式 (5.179)，得

$$\begin{aligned}\boldsymbol{S}(\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2)&=\frac{1}{8}(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)=\frac{1}{8}(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)\\&=\frac{1}{4}\boldsymbol{S}=(\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2)\boldsymbol{S}\end{aligned}$$

利用题 5.43 公式 (5.174)和式 (5.175)容易得出

$$\boldsymbol{S}\cdot(\boldsymbol{S}_1\times\boldsymbol{S}_2)=\frac{1}{8}(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)\cdot(\boldsymbol{\sigma}_1\times\boldsymbol{\sigma}_2)=0$$

上式两边取 Hermite 共轭，有

$$(\boldsymbol{S}_1\times\boldsymbol{S}_2)\cdot\boldsymbol{S}=0$$

由于 $\boldsymbol{S}^2=\frac{3}{2}+\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$，$\left[\boldsymbol{S}^2,\boldsymbol{S}\right]=0$，故

$$\begin{aligned}\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^2 &= \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)\left(\frac{3}{2}+\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2\right)\\ &= \frac{3}{4}(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)+\frac{1}{4}(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)\end{aligned}$$

利用题 5.43 式 (5.176)和式 (5.177)，有

$$(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)=\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2$$

因此

$$\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^2=\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2=2\boldsymbol{S}=\boldsymbol{S}^2\boldsymbol{S}$$

由于

$$S_n=\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{n}=\frac{1}{2}(\sigma_{1n}+\sigma_{2n})$$

所以

$$\begin{aligned}S_n^2&=\frac{1}{4}\left(\sigma_{1n}^2+\sigma_{2n}^2+2\sigma_{1n}\sigma_{2n}\right)=\frac{1}{2}(1+\sigma_{1n}\sigma_{2n})\\ S_n^4&=\frac{1}{4}\left(1+\sigma_{1n}^2\sigma_{2n}^2+2\sigma_{1n}\sigma_{2n}\right)=\frac{1}{2}(1+\sigma_{1n}\sigma_{2n})=S_n^2\end{aligned}$$

另外式 (5.193)两边以 $\boldsymbol{S}$ 点乘，有

$$S^4=2S^2$$

5.45　两个 1/2 自旋粒子张量算符的本征值

题 5.45　对于两个自旋 $\frac{1}{2}$ 的粒子系，令 $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{n}=\frac{\boldsymbol{r}}{r}$，定义张量算符 (取 $\hbar$)

$$S_{12}=3(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{n})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{n})-\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$$

(1) 证明 $S_{12}^2=4S^2-2S_{12}$，其中 $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2$；

(2) 求 S_{12} 的本征值.

解法一　(1) 由于

$$\boldsymbol{S}=\boldsymbol{S}_1+\boldsymbol{S}_2=\frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)$$

则有

$$\boldsymbol{S}^2=\frac{3}{2}+\frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)$$

而

$$S_n = \boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{n} = \frac{1}{2}(\sigma_{1n}+\sigma_{2n}) \tag{5.195}$$

$$S_n^2 = \frac{1}{2}(1+\sigma_{1n}\sigma_{2n}) \tag{5.196}$$

所以， S_{12} 可表示为

$$S_{12} = 3\sigma_{1n}\sigma_{2n} - \boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2 = 6S_n^2 - 2\boldsymbol{S}^2 \tag{5.197}$$

于是

$$(S_{12})^2 = 36S_n^4 + 4S^4 - 12(S_n^2\boldsymbol{S}^2 + \boldsymbol{S}^2S_n^2) \tag{5.198}$$

由题 5.44 结果

$$S_n^4 = S_n^2 \tag{5.199}$$

$$\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^2 = \boldsymbol{S}^2\boldsymbol{S} = 2\boldsymbol{S} \tag{5.200}$$

$$S^4 = 2\boldsymbol{S}^2 \tag{5.201}$$

式 (5.200)两端取 $\boldsymbol{n}$ 方向投影，得到

$$S_n\boldsymbol{S}^2 = \boldsymbol{S}^2S_n = 2S_n \tag{5.202}$$

将上述关系代入式 (5.198)，有

$$S_{12}^2 = 4\boldsymbol{S}^2 - 2S_{12} \tag{5.203}$$

(2) 式 (5.197)和式 (5.203)表明 S_{12}、 S_n 及 S^2 均对易，以 S^2 乘式 (5.197)并利用式 (5.201)和式 (5.202)，可得

$$S_{12}\boldsymbol{S}^2 = \boldsymbol{S}^2S_{12} = 2S_{12} \tag{5.204}$$

以 S_{12} 乘式 (5.203)，并利用式 (5.204)，即得 S_{12} 满足的最简单代数方程

$$(S_{12})^2 + 2(S_{12})^2 - 8S_{12} = 0$$

由此解出 S_{12} 的本征值为

$$S_{12} = 2,\ 0,\ -4$$

解法二　(关于第 (1) 小题) 由于 $\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{n} = 2\Pi_{n1} - 1$，这里 Π_{n1} 是第一个粒子自旋态向极化矢量在 $\boldsymbol{n} = \dfrac{\boldsymbol{r}}{r}$ 方向的态投影的投影算子，于是 S_{12} 改写为

$$S_{12} = 3(2\Pi_{n1}-1)(2\Pi_{n2}-1) - (2\Pi_{12}-1)$$

考虑到 $\Pi_{ni}^2 = \Pi_{ni}$，及 $P_{12}^2 = 1$ 和 $S_{12}\Pi_{12} = \Pi_{12}S_{12}$，有

$$\begin{aligned} S_{12}^2 &= 9(2\Pi_{n1}-1)^2(2\Pi_{n2}-1)^2 - 6(2\Pi_{n1}-1)(2\Pi_{n2}-1)(2\Pi_{12}-1) + (2\Pi_{12}-1)^2 \\ &= 9 - 6(2\Pi_{n1}-1)(2\Pi_{n2}-1)(2\Pi_{12}-1) + (2\Pi_{12}-1)^2 \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= 9-2\left[S_{12}+(2\Pi_{12}-1)\right](2\Pi_{12}-1)+(2\Pi_{12}-1)^2\\
&= 9-2(2\Pi_{12}-1)S_{12}-(5-4\Pi_{12})\\
&= 6+2\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2-2\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2S_{12}
\end{aligned}
$$

由于

$$\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2S_{12}=S_{12} \tag{5.205}$$

所以有

$$(S_{12})^2=4\boldsymbol{S}^2-2S_{12}$$

其中式 (5.205)的证明如下：

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2\sigma_{1n}\sigma_{2n} &= \boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{n}\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{n}\\
&= \sigma_{1\alpha}\sigma_{2\alpha}\sigma_{1\beta}\sigma_{2\gamma}n_\beta n_\gamma=\left(\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\theta}\sigma_{1\theta}+\delta_{\alpha\beta}\right)\left(\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\gamma\tau}\sigma_{2\tau}+\delta_{\alpha\gamma}\right)n_\beta n_\gamma\\
&= -\varepsilon_{\alpha\beta\theta}\varepsilon_{\alpha\gamma\tau}\sigma_{1\theta}\sigma_{2\tau}n_\beta n_\gamma+\delta_{\alpha\beta}\delta_{\alpha\gamma}n_\beta n_\gamma+\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\theta}\delta_{\alpha\gamma}\sigma_{1\theta}n_\beta n_\gamma\\
&\quad +\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\gamma\tau}\delta_{\alpha\beta}\delta_{2\tau}n_\beta n_\gamma
\end{aligned}
\tag{5.206}
$$

式 (5.206)第三项为 $\boldsymbol{\sigma}_1\cdot(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{n})=0$，第四项为 $\boldsymbol{\sigma}_2\cdot(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{n})=0$，第二项为 $\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{n}=1$，第一项利用公式 (4.86a)，计算结果为 $\sigma_{1n}\sigma_{2n}-\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$，即

$$\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2\sigma_{1n}\sigma_{2n}=\sigma_{1n}\sigma_{2n}-\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2+1 \tag{5.207}$$

利用式 (5.206)、式 (5.207)以及 $(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)^2=3-2\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$，立即可得式 (5.205).

5.46　两个 1/2 自旋粒子张量算符的本征值和本征态

题 5.46　求解算符 $S_{12}=3(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{n})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{n})-\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$ 的本征值和本征态.

提示　用这两个粒子的 4 个态组成对称化和反对称化态. 证明它们就是 S_{12} 的 4 个本征态，本征值为 -4、0、2、 2.

解法一　定义四个正交归一的双粒子自旋态

$$|+,+\rangle=\left|\chi^{(+)}(\boldsymbol{n})\right\rangle_1\left|\chi^{(+)}(\boldsymbol{n})\right\rangle_2 \tag{5.208}$$

$$|+,-\rangle=\left|\chi^{(+)}(\boldsymbol{n})\right\rangle_1\left|\chi^{(-)}(\boldsymbol{n})\right\rangle_2 \tag{5.209}$$

$$|-,+\rangle=\left|\chi^{(-)}(\boldsymbol{n})\right\rangle_1\left|\chi^{(+)}(\boldsymbol{n})\right\rangle_2 \tag{5.210}$$

$$|-,-\rangle=\left|\chi^{(-)}(\boldsymbol{n})\right\rangle_1\left|\chi^{(-)}(\boldsymbol{n})\right\rangle_2 \tag{5.211}$$

再将 S_{12} 的第二项用自旋交换算符 P_{12} 表示有

$$S_{12}=3(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{n})(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{n})+1-2P_{12} \tag{5.212}$$

将它作用到上面四个态上

$$S_{12}|+,+\rangle=3|+,+\rangle+|+,+\rangle-2|+,+\rangle=2|+,+\rangle$$

$$S_{12}|+,-\rangle=-3|+,-\rangle+|+,-\rangle 2|-,+\rangle=2|+,-\rangle-2|-,+\rangle$$
$$S_{12}|-,+\rangle=-3|-,+\rangle+|-,+\rangle-2|+,-\rangle=-2|-,+\rangle+2|+,-\rangle$$
$$S_{12}|-,-\rangle=3|+,+\rangle+|+,+\rangle-2|+,+\rangle=2|+,+\rangle$$

式中四个态可组成对称化与反对称化的四个态，即

$$|\phi^{\pm}\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|+,+\rangle\pm|-,-\rangle) \tag{5.213}$$
$$|\psi^{\pm}\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|+,-\rangle\pm|-,+\rangle) \tag{5.214}$$

由上易得

$$S_{12}|\phi^{\pm}\rangle=2|\phi^{\pm}\rangle \tag{5.215}$$
$$S_{12}|\psi^{+}\rangle=-4|\psi^{+}\rangle \tag{5.216}$$
$$S_{12}|\psi^{-}\rangle=0 \tag{5.217}$$

所以，$|\phi^{+}\rangle$、$|\phi^{-}\rangle$、$|\psi^{+}\rangle$ 与 $|\psi^{-}\rangle$ 均为 S_{12} 的本征态，其相应本征值分别为 $2,2,-4,0$.

解法二　算符 S_{12} 可以表示为

$$S_{12}=\frac{4}{\hbar^2}(\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2-3s_{1z}s_{2z}) \tag{5.218}$$

若令

$$\boldsymbol{S}=\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2 \tag{5.219}$$

则有

$$\boldsymbol{S}^2=(\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2)^2=\boldsymbol{s}_1^2+\boldsymbol{s}_2^2+2\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2=2\times\frac{3}{4}\hbar^2+2\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2 \tag{5.220}$$

以及

$$S_z^2=(s_{1z}+s_{2z})^2=s_{1z}^2+s_{2z}^2+2s_{1z}s_{2z}=2\times\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2+2s_{1z}s_{2z} \tag{5.221}$$

因而

$$2\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2=\boldsymbol{S}^2-\frac{3}{2}\hbar^2,\quad 2s_{1z}s_{2z}=S_z^2-\frac{1}{2}\hbar^2 \tag{5.222}$$

这样 S_{12} 可以表示为

$$\begin{aligned}S_{12}&=\frac{2}{\hbar^2}(2\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2-6s_{1z}s_{2z})=\frac{2}{\hbar^2}\left[\boldsymbol{S}^2-\frac{3}{2}\hbar^2-3\left(S_z^2-\frac{1}{2}\hbar^2\right)\right]\\&=\frac{2}{\hbar^2}(\boldsymbol{S}^2-3S_z^2)\end{aligned} \tag{5.223}$$

因此完备力学量组 (CSCO) 可以选为 $\boldsymbol{S}^2$、S_z. 其本征态即为已知的两 1/2 自旋耦合的自旋单态与三重态，将相应能量一并分别列表如下：

本征态	S	M_S	S_{12}
χ_{11}	1	1	-2
χ_{10}	1	0	4
$\chi_{1,-1}$	1	-1	-2
χ_{00}	0	0	0

说明　本题张量算符正是两个中子磁矩之间的相互作用形式. 两个 1/2 自旋相互作用的问题一般情况是求解 4×4 矩阵的本征值和本征矢量的问题，本题利用相互作用势的特点，求解时得到大大简化. 对于解法二，读者还可试着自行考察

$$V=a(\sigma_{1z}+\sigma_{2z})+b\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$$
$$V=a\sigma_{1z}\sigma_{2z}+b\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$$
$$V=a(\sigma_{1z}+\sigma_{2z})+b\sigma_{1z}\sigma_{2z}+c\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$$

等形式的相互作用情形的本征值和本征态的问题.

若只是求本征值，本题另有其他解法，例如可参见前一题 5.45，通过考察由算符满足的最简单代数方程给出本征值.

5.47　两电子原子处于自旋单态时，L-S 耦合对能量无贡献

题 5.47　具有两个电子的原子处于自旋单态 $(S=0)$，证明自旋 – 轨道耦合作用 $\xi(r)\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}$ 对能量无贡献.

证明　双电子的原子自旋单态记为 $|\psi;00\rangle$，其中 ψ 标志空间状态. 自旋单态是自旋算符 S_x、S_y 以及 S_z 的零本征值本征态，即

$$\boldsymbol{S}|\psi;00\rangle=\boldsymbol{0}$$

因而

$$\xi(r)\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}|\psi;00\rangle=\xi(r)\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}|\psi;00\rangle=0$$

上式表明自旋 – 轨道耦合作用 $\xi(r)\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}$ 对能量无贡献.

5.48　两个 $s=1/2$ 非全同粒子的自旋状态中，$\boldsymbol{S}^2$ 的可能测量值及相应概率

题 5.48　某物理体系由两个自旋 $\dfrac{1}{2}$ 的非全同粒子组成. 已知粒子 1 处于 $S_{1z}=\dfrac{1}{2}$ 的本征态，粒子 2 处于 $S_{2x}=\dfrac{1}{2}$ 的本征态，求体系总自旋 $\boldsymbol{S}^2$ 的可能测量值及相应的概率 (取 $\hbar=1$).

解答　$S_{1z}=\pm\dfrac{1}{2}$ 的单粒子自旋态记为 $\alpha(1)$, $\beta(1)$，在 S_{1z} 表象中

$$\alpha=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\quad \beta=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

$S_{2x}=\dfrac{1}{2}$ 的单自旋态为

$$\psi(2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}_2=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(2)+\beta(2)]$$

因此，体系的自旋态为

$$\chi(1,2)=\alpha(1)\psi(2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\alpha(2)+\beta(1)\beta(2)]$$

总自旋 $\boldsymbol{S}^2$ 共有两个本征值：0 和 2. $\boldsymbol{S}^2=0$ 的本征态为

$$\chi_{00}(1,2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)]$$

在体系的自旋态 χ 中测得 $\boldsymbol{S}^2=0$ 的概率为 $|\langle\chi_{00}|\chi\rangle|^2$. 根据 α,β 的正交归一性

$$\langle\alpha|\alpha\rangle=\langle\beta|\beta\rangle=1,\quad \langle\alpha|\beta\rangle=\langle\beta|\alpha\rangle=0$$

容易求出

$$\langle\chi_{00}|\chi\rangle=\frac{1}{2}$$

因此，测得 $\boldsymbol{S}^2=0$ 的概率为 $\frac{1}{4}$，从而测得 $\boldsymbol{S}^2=2$ 的概率为 $\left(1-\frac{1}{4}\right)=\frac{3}{4}$.

5.49　两个自旋 1/2 粒子系受均匀外磁场作用时的能级

题 5.49　两个自旋为 1/2 粒子组成的体系，置于均匀外磁场中，取磁场方向为 z 轴方向，则体系 Hamilton 量可表示成 (忽略轨道运动)$H=a\sigma_{1z}+b\sigma_{2z}+c\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$，$a$、$b$、$c$ 为常数量，H 中第一、二项表示粒子内禀磁矩与外磁场的相互作用，第三项表示两个粒子之间自旋 – 自旋相互作用. 求 H 的本征值.

解答　本题可在自旋态空间中，用矩阵方法求解. 基矢可以取为 $(\sigma_{1z},\sigma_{2z})$ 的共同本征态 (非耦合表象)

$$\alpha(1)\alpha(2),\ \alpha(1)\beta(2),\ \beta(1)\alpha(2),\ \beta(1)\beta(2) \tag{5.224}$$

也可以取为总自旋算符 $(\boldsymbol{S}^2,\boldsymbol{S}_z)$ 的共同本征态 χ_{SM_S}(即两自旋耦合表象). 对于本题而言，考虑到 Hamilton 量 H 中的 $\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$ 项，为便于 H 对角化，采用 χ_{SM_S} 作为基矢较为方便. 为叙述方便，4 个基矢的编号顺序如下：

$$\begin{cases}\chi_1=\chi_{11}=\alpha(1)\alpha(2)\\ \chi_2=\chi_{1,-1}=\beta(1)\beta(2)\\ \chi_3=\chi_{10}=\dfrac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)+\beta(1)\alpha(2)]\\ \chi_4=\chi_{00}=\dfrac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)]\end{cases} \tag{5.225}$$

将题给 Hamilton 量改写成

$$H=c\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2+c_1(\sigma_{1z}+\sigma_{2z})+c_2(\sigma_{1z}-\sigma_{2z}) \tag{5.226}$$

其中，$c_1=\frac{1}{2}(a+b), c_2=\frac{1}{2}(a-b)$. 四个基矢都是 $(\boldsymbol{S}^2,\boldsymbol{S}_z)$ 的共同本征态，即都是 $\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$ 和 $(\sigma_{1z}+\sigma_{2z})$ 的共同本征态. 容易看出 χ_1 和 χ_2 也是 $(\sigma_{1z}-\sigma_{2z})$ 的本征态 (本征值为 0)，因而 χ_1 和 χ_2 已经是 H 的本征态，

$$H\chi_1 = (c+2c_1)\chi_1=(c+a+b)\chi_1 \tag{5.227}$$

$$H\chi_2 = (c-2c_1)\chi_2=(c-a-b)\chi_2 \tag{5.228}$$

这样，我们就得到了体系的两个能级 $E=c\pm 2c_1$.

χ_3 和 χ_4 不是 $(\sigma_{1z}-\sigma_{2z})$ 的本征态. $(\sigma_{1z}-\sigma_{2z})$ 对于 χ_3 和 χ_4 的作用如下给出：

$$(\sigma_{1z}-\sigma_{2z})\chi_3=2\chi_4,\quad (\sigma_{1z}-\sigma_{2z})\chi_4=2\chi_3 \tag{5.229}$$

由此写出在 $\{\chi_3,\chi_4\}$ 子空间中 $(\sigma_{1z}-\sigma_{2z})$ 的矩阵元

$$(\sigma_{1z}-\sigma_{2z})_{33}=(\sigma_{1z}-\sigma_{2z})_{44}=0$$
$$(\sigma_{1z}-\sigma_{2z})_{34}=(\sigma_{1z}-\sigma_{2z})_{43}=2$$

χ_3 和 χ_4 都是 $(\sigma_{1z}+\sigma_{2z})$ 的零本征值本征态，故 $(\sigma_{1z}+\sigma_{2z})$ 矩阵元全部为 0. 这样基矢 $\{\chi_3,\chi_4\}$ 张成的子空间中 H 的矩阵表示为

$$H=\begin{pmatrix} c & 2c_2 \\ 2c_2 & -3c \end{pmatrix} \tag{5.230}$$

设能量本征态为

$$\chi=f_3\chi_3+f_4\chi_4$$

代入能量本征方程 $H\chi=E\chi$ 得

$$\begin{pmatrix} c-E & 2c_2 \\ 2c_2 & -3c-E \end{pmatrix}\begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix}=0$$

能级 E 由下式决定：

$$\det(H-E)=0$$

根据在基矢 $\{\chi_3,\chi_4\}$ 张成的子空间中 H 的矩阵表示 (5.230)，上式即

$$\begin{vmatrix} c-E & 2c_2 \\ 2c_2 & -3c-E \end{vmatrix}=(E-c)(E+3c)-4c_2^2=0$$

解得

$$E=-c\pm 2\sqrt{c^2+c_2^2}$$

综上，本题共有四个能级 (不考虑偶然简并)，它们是

$$E=c\pm 2c_1,\ -c\pm 2\sqrt{c^2+c_2^2}$$

其中，$c_1=\frac{1}{2}(a+b), c_2=\frac{1}{2}(a-b)$. 前两个能级的能量本征态分别为 $\chi_1=\chi_{11}$ 和 $\chi_2=\chi_{1-1}$，后两个能级的能量本征态为 $\chi_3=\chi_{00}$ 和 $\chi_4=\chi_{10}$ 的线性叠加.

说明 若采用式 (5.224) 的非耦合表象，则因为 $\alpha(1)\alpha(2)$ 与 $\beta(1)\alpha(2)$ 已经是 H 的本征态. 接下来需要在基矢 $\{\alpha(1)\beta(2),\beta(1)\alpha(2)\}$ 张成的子空间中将 H 对角化，该空间与基矢 $\{\chi_3,\chi_4\}$ 张成的子空间其实是一个空间.

5.50 三个自旋 1/2(非全同) 粒子系统的能级和简并度 (1)

题 5.50 考虑三个自旋为 1/2 的非全同粒子组成的体系，Hamilton 量为

$$H=A\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2+B(\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2)\cdot\boldsymbol{s}_3$$

A 与 B 为实常量 $(A\neq B)$，请找出体系的守恒量，求出体系的能级和简并度.

解答 粒子 1、2 自旋之和记为 $\boldsymbol{S}_{12}$，粒子 1、2、3 自旋之和记为 $\boldsymbol{S}_{123}$，即

$$\boldsymbol{S}_{12}=\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2,\quad \boldsymbol{S}_{123}=\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2+\boldsymbol{s}_3=\boldsymbol{S}_{12}+\boldsymbol{s}_3 \tag{5.231}$$

由角动量耦合，$\boldsymbol{S}_{12},\boldsymbol{S}_{123}$ 仍是角动量，具有角动量的性质，满足如下对易关系：

$$\boldsymbol{S}_{12}\times\boldsymbol{S}_{12}=\mathrm{i}\boldsymbol{S}_{12},\quad \left[\boldsymbol{S}_{12}^2,\boldsymbol{S}_{12}\right]=0 \tag{5.232}$$

$$\boldsymbol{S}_{123}\times\boldsymbol{S}_{123}=\mathrm{i}\boldsymbol{S}_{123},\quad \left[\boldsymbol{S}_{123}^2,\boldsymbol{S}_{123}\right]=0 \tag{5.233}$$

$\boldsymbol{s}_1,\boldsymbol{s}_2,\boldsymbol{s}_3$ 两两相互对易，而且 $\boldsymbol{s}_1^2=\boldsymbol{s}_2^2=\boldsymbol{s}_3^2=\frac{3}{4}$，因此

$$\boldsymbol{S}_{12}^2=\boldsymbol{s}_1^2+\boldsymbol{s}_2^2+2\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2=\frac{3}{2}+2\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2 \tag{5.234}$$

$$\boldsymbol{S}_{123}^2=\frac{9}{4}+2(\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2+\boldsymbol{s}_2\cdot\boldsymbol{s}_3+\boldsymbol{s}_3\cdot\boldsymbol{s}_1) \tag{5.235}$$

这样 Hamilton 量可写为

$$\begin{aligned}H&=(A-B)\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2+B(\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2+\boldsymbol{s}_2\cdot\boldsymbol{s}_3+\boldsymbol{s}_3\cdot\boldsymbol{s}_1)\\&=\frac{1}{2}(A-B)\boldsymbol{S}_{12}^2+\frac{B}{2}\boldsymbol{S}_{123}^2-\frac{3}{8}(2A+B)\end{aligned} \tag{5.236}$$

由于 $\boldsymbol{S}_{12}^2$ 和 $\boldsymbol{S}_{12}$ 对易，$\boldsymbol{S}_{12}$ 又和 $\boldsymbol{s}_3$ 对易，所以 $\boldsymbol{S}_{12}^2$ 和 $\boldsymbol{S}_{123}$ 对易. 再由式 (5.236) 容易看出，$\boldsymbol{S}_{12}^2$、$\boldsymbol{S}_{123}$、$\boldsymbol{S}_{123}^2$ 都与 H 对易. 这样系统的 CSCO 可取 $\{\boldsymbol{S}_{12}^2,\boldsymbol{S}_{123}^2,(\boldsymbol{S}_{123})_z\}$，前两者的本征值为

$$\boldsymbol{S}_{12}^2=S'(S'+1),\quad S'=0,1 \tag{5.237}$$

$$\boldsymbol{S}_{123}^2=S(S+1),\quad S=\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{3}{2} \tag{5.238}$$

代入式 (5.236)，就可得到能级的大小，可记为 $E_{SS'}$. 由于 $[H,\boldsymbol{S}_{123}]=0$，体系能量与 $(\boldsymbol{S}_{123})_z$ 即总自旋 z 分量无关，故能级 $E_{SS'}$ 简并度为 $(2S+1)$. 根据 (S,S') 组合，体

系的能级和简并度列表如下：

S'	1	1	0
S	3/2	1/2	1/2
$E_{SS'}$	$A/4+B/2$	$A/4-B$	$-3A/4$
$f_{SS'}=2S+1$	4	2	2

如不出现偶然简并，一般情况下体系将有 3 条能级，其能量分别为 $\left(\frac{A}{4}+\frac{B}{2}\right)$、$\left(\frac{A}{4}-B\right)$ 与 $-\frac{3A}{4}$.

5.51　三个自旋 1/2(非全同) 粒子系统的能级和简并度 (2)

题 5.51　同上题，但 $A=B$，即 Hamilton 量为

$$H=A(\boldsymbol{s}_1\cdot\boldsymbol{s}_2+\boldsymbol{s}_2\cdot\boldsymbol{s}_3+\boldsymbol{s}_3\cdot\boldsymbol{s}_1)$$

A 为实常量.

(1) 求体系的能级和简并度；

(2) 找一组守恒量完全集，求出其共同本征态.

解答　采用上一题的算符以及量子数记号，Hamilton 量可以写为

$$H=\frac{A}{2}\left(\boldsymbol{S}_{123}^2-\frac{9}{4}\right) \tag{5.239}$$

因此，能级为 (取 $\hbar=1$)

$$E_S=\frac{A}{2}\left[S(S+1)-\frac{9}{4}\right] \tag{5.240}$$

同上题，系统的 CSCO 可取 $\{\boldsymbol{S}_{12}^2,\boldsymbol{S}_{123}^2,(\boldsymbol{S}_{123})_z\}$，相应的本征值为

$$\begin{cases}\boldsymbol{S}_{12}^2=S'(S'+1), & S'=1,0\\ \boldsymbol{S}_{123}^2=S(S+1), & S=\dfrac{3}{2},\dfrac{1}{2},\dfrac{1}{2}\\ (S_{123})_z=M, & M=S,S-1,\cdots,-S\end{cases} \tag{5.241}$$

根据 $\boldsymbol{S}_{12}$ 与 $\boldsymbol{s}_3$ 耦合，量子数 S、S' 的可能组合为 $S=S'\pm\frac{1}{2}$，即

$$\begin{aligned}&S=3/2,\quad S'=1\\ &S=1/2,\quad S'=1,0\end{aligned}$$

对于给定的 (S,S')，状态由 $(\boldsymbol{S}_{123})_z=M$ 区分，故能级简并度为 $(2S+1)$，所以

$$\begin{aligned}&E_{3/2}=\frac{3}{4}A,\quad S=\frac{3}{2},S'=1,\quad \text{简并度 }=4\\ &E_{1/2}=-\frac{3}{4}A,\quad S=\frac{1}{2},S'=1,0,\quad \text{简并度 }=4\end{aligned} \tag{5.242}$$

下面确定 CSCO$\{\boldsymbol{S}_{12}^2,\boldsymbol{S}_{123}^2,(\boldsymbol{S}_{123})_z\}$ 的共同本征态，它们由 3 个粒子自旋耦合而成. 可以先由粒子 1、2 的自旋耦合，再由 1、2 的总自旋与粒子 3 的自旋耦合. 粒子 $i(i=1,2,3)$ 相对于 z 轴自旋“向上”和“向下”态记为 $\alpha(i),\beta(i)$，相应的本征值 $s_{iz}=\pm\hbar/2$. 根据两个 1/2 自旋耦合的结果，粒子 1、2 的耦合表象自旋态 $[(\boldsymbol{S}_{12}^2,(\boldsymbol{S}_{12})_z)$ 的共同本征态] 为

$$\begin{cases}\chi_{11}(1,2)=\alpha(1)\alpha(2), & S'=1,\ (S_{12})_z=1\\ \chi_{10}(1,2)=\dfrac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)+\beta(1)\alpha(2)], & S'=1,\ (S_{12})_z=0\\ \chi_{1,-1}(1,2)=\beta(1)\beta(2), & S'=1,\ (S_{12})_z=-1\\ \chi_{00}(1,2)=\dfrac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)], & S'=0,\ (S_{12})_z=0\end{cases}\tag{5.243}$$

$\{\boldsymbol{S}_{12}^2,\boldsymbol{S}_{123}^2,(\boldsymbol{S}_{123})_z\}$ 的共同本征态记为 $\chi_{S'SM}(1,2,3)$. $s_{iz}(i=1,2,3)$ 的本征值均取最大值时，本征态显然是

$$\chi_{1\frac{3}{2}\frac{3}{2}}=\chi_{11}(1,2)\alpha(3)=\alpha(1)\alpha(2)\alpha(3)$$

$S=3/2$ 时，M 共有 4 种取值，与 $M=\dfrac{1}{2},-\dfrac{1}{2},-\dfrac{3}{2}$ 相应的本征态可以用降算符 $[(S_{123})_x-\mathrm{i}(S_{123})_y]$ 重复作用于 $\chi_{1\frac{3}{2}\frac{3}{2}}$ 而求出. 由于降算符以及 $\chi_{1\frac{3}{2}\frac{3}{2}}$ 对于粒子间的交换是对称的，因此，由此而得到的各 $\chi_{1\frac{3}{2}M}$ 都是全对称态. 根据这个判断，再考虑到 M 的取值，立即可以写出这几个态的唯一可能的构造式:

$$\chi_{1\frac{3}{2}\frac{3}{2}}=\chi_{11}(1,2)\alpha(3)=\alpha(1)\alpha(2)\alpha(3)\tag{5.244a}$$

$$\chi_{1\frac{3}{2}\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{3}}[\alpha(1)\alpha(2)\beta(3)+\beta(1)\alpha(2)\alpha(3)+\alpha(1)\beta(2)\alpha(3)]\tag{5.244b}$$

$$\chi_{1\frac{3}{2},-\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{3}}[\alpha(1)\beta(2)\beta(3)+\beta(1)\alpha(2)\beta(3)+\beta(1)\beta(2)\alpha(3)]\tag{5.244c}$$

$$\chi_{1\frac{3}{2},-\frac{3}{2}}=\beta(1)\beta(2)\beta(3)\tag{5.244d}$$

$S'=0$ 的 1、2 粒子自旋态只能是 $\chi_{00}(1,2)$，再考虑到 M 的取值，可以写出

$$\chi_{0\frac{1}{2}\frac{1}{2}}=\chi_{00}(1,2)\alpha(3)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)\alpha(3)-\beta(1)\alpha(2)\alpha(3)]\tag{5.245a}$$

$$\chi_{0\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}=\chi_{00}(1,2)\beta(3)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)\beta(3)-\beta(1)\alpha(2)\beta(3)]\tag{5.245b}$$

现在只剩 $\chi_{1\frac{1}{2}\frac{1}{2}}$ 和 $\chi_{1\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}$ 有待确定. $\chi_{1\frac{1}{2}\frac{1}{2}}$ 的构造式中，每一项应包含两个 α 态，一个 β 态，它应该是 $\chi_{11}(1,2)\beta(3)$ 和 $\chi_{10}(1,2)\alpha(3)$ 的线性叠加，它和 $\chi_{1\frac{3}{2}\frac{1}{2}}$ 的 S 值不同，所以应该互相正交. $\chi_{1\frac{3}{2}\frac{1}{2}}$ 由式 (5.244b) 给出，它可以表示成

$$\chi_{1\frac{3}{2}\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{3}}\left[\chi_{11}(1,2)\beta(3)+\sqrt{2}\chi_{10}(1,2)\alpha(3)\right]$$

因此，$\chi_{1\frac{1}{2}\frac{1}{2}}$ 的构造式只能是

$$\begin{aligned}\chi_{1\frac{1}{2}\frac{1}{2}} &= \frac{1}{\sqrt{3}}\left[\sqrt{2}\chi_{11}(1,2)\beta(3)-\chi_{10}(1,2)\alpha(3)\right]\\ &= \frac{1}{\sqrt{6}}[2\alpha(1)\alpha(2)\beta(3)-\alpha(1)\beta(2)\alpha(3)-\beta(1)\alpha(2)\beta(3)]\end{aligned}\tag{5.246}$$

类似地，式 (5.244c) 可以表示成

$$\chi_{1\frac{3}{2},-\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{3}}\left[\sqrt{2}\chi_{10}(1,2)\beta(3)+\chi_{1,-1}(1,2)\alpha(3)\right]$$

$\chi_{1\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}$ 应该用同样的项叠加而成，但和上式正交，所以

$$\begin{aligned}\chi_{1\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} &= \frac{1}{\sqrt{3}}\left[\chi_{10}(1,2)\beta(3)-\sqrt{2}\chi_{1-1}(1,2)\alpha(3)\right]\\ &= \frac{1}{\sqrt{6}}[\alpha(1)\beta(2)\beta(3)+\beta(1)\alpha(2)\beta(3)-2\beta(1)\beta(2)\alpha(3)]\end{aligned}\tag{5.247}$$

以上式 (5.244)～式 (5.247) 就是全部共同本征函数. 容易验证它们的确互相正交. 它们的总个数为 8，与非耦合表象独立自旋态数 $2\times2\times2=8$ 相等，因此式 (5.244)～式 (5.247) 正是所求的一组正交完备的能量本征态.

说明　按照角动量耦合的理论，利用 C.G. 系数表，也可得到同样的结果. 这里只需要查角动量 1 与角动量 1/2 耦合的 C.G. 系数. 事实上，一般角动量理论中，C.G. 系数的计算也是大体按照上述步骤进行的.

上题与本题选取的 CSCO 相同，都为 $\{\boldsymbol{S}_{12}^2,\boldsymbol{S}_{123}^2,(\boldsymbol{S}_{123})_z\}$. 因此，这里构造的共同本征态也可用于上题.

5.52　对于两个自旋 1/2 粒子系的自旋单态 χ_{00}，$S_n\chi_{00}=0$及$\langle\chi_{00}|\sigma_i|\chi_{00}\rangle=0$

题 5.52　两个自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子构成的体系，处于自旋单态为 χ_{00}

$$\chi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)]$$

请证明：

(1) χ_{00} 为总自旋在 $\boldsymbol{n}$ 方向投影 $S_n=\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{n}$ 的零本征值的本征态，即 $S_n\chi_{00}=0$；

(2) σ_i 为粒子 1、2 的 Pauli 算符，$\langle\chi_{00}|\sigma_i|\chi_{00}\rangle=0$.

证明　由于 (取 $\hbar=1$)

$$\sigma_x\alpha=\beta,\quad \sigma_x\beta=\alpha;\quad \sigma_y\alpha=\mathrm{i}\beta,\quad \sigma_y\beta=-\mathrm{i}\alpha$$

以及

$$S_x=\frac{1}{2}[\sigma_x(1)+\sigma_x(2)],\quad S_y=\frac{1}{2}[\sigma_y(1)+\sigma_y(2)]$$

则可得

$$\begin{aligned} S_x\chi_{00} &= \frac{1}{2\sqrt{2}}[\sigma_x(1)+\sigma_x(2)][\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)] \\ &= \frac{1}{2\sqrt{2}}[\beta(1)\beta(2)+\alpha(1)\alpha(2)-\alpha(1)\alpha(2)-\beta(1)\beta(2)]=0 \end{aligned}$$

同样有

$$S_y\chi_{00}=0$$

因为

$$S_n=n_xS_x+n_yS_y+n_zS_z$$

立即有

$$S_n\chi_{00}=0$$

再有

$$\begin{aligned} \sigma_x(1)|\chi_{00}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\sigma_x(1)[|\alpha(1)\beta(2)\rangle-|\beta(1)\alpha(2)\rangle] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|\beta(1)\beta(2)\rangle-|\alpha(1)\alpha(2)\rangle] \\ \sigma_y(1)|\chi_{00}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\sigma_y(1)[|\alpha(1)\beta(2)\rangle-|\beta(1)\alpha(2)\rangle] \\ &= \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}[|\beta(1)\beta(2)\rangle+|\alpha(1)\alpha(2)\rangle] \\ \sigma_z(1)|\chi_{00}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|\alpha(1)\beta(2)\rangle+|\beta(1)\alpha(2)\rangle] \end{aligned}$$

所以

$$\langle\chi_{00}|\boldsymbol{\sigma}_1|\chi_{00}\rangle=0$$

同样地，有

$$\langle\chi_{00}|\boldsymbol{\sigma}_2|\chi_{00}\rangle=0$$

5.53　两个自旋 1/2 粒子各自沿空间方向自旋分量之间的关联

题 5.53　两个自旋 1/2 粒子构成的体系，处于自旋单态为 χ_{00}，设 $\boldsymbol{n}_1$ 与 $\boldsymbol{n}_2$ 是空间任意两个方向，粒子 1 的自旋沿 $\boldsymbol{n}_1$ 的分量 $\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{n}_1$ 与粒子 2 的自旋沿 $\boldsymbol{n}_2$ 的分量 $\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{n}_2$ 有确切的关联. 试求 $(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{n}_1)(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{n}_2)$ 的期望值.

解法一　两个电子的归一化的自旋单态 χ_{00} 表示为

$$\chi_{00}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)] \tag{5.248}$$

其中，$\alpha(i)$、$\beta(i)(i=1,2)$ 分别是单电子自旋 σ_{iz} 表象的基矢，也即 $\boldsymbol{\sigma}_i^2,\sigma_{iz}$ 的共同本征态，本征值分别为 $3/4,\pm1/2$. $\boldsymbol{\sigma}_i$ 对基矢的作用如下给出：

$$\begin{cases} \sigma_{ix}\alpha(i)=\beta(i), & \sigma_{ix}\beta(i)=\alpha(i) \\ \sigma_{iy}\alpha(i)=\mathrm{i}\beta(i), & \sigma_{iy}\beta(i)=-\mathrm{i}\alpha(i) \\ \sigma_{iz}\alpha(i)=\alpha(i), & \sigma_{iz}\beta(i)=-\beta(i) \end{cases} \tag{5.249}$$

其中，$i=1,2$. 由式 (5.248)与式 (5.249) 可见

$$\langle\chi_{00}|\boldsymbol{\sigma}_1|\chi_{00}\rangle=\langle\chi_{00}|\boldsymbol{\sigma}_2|\chi_{00}\rangle=\langle\chi_{00}|\boldsymbol{S}|\chi_{00}\rangle=0 \tag{5.250}$$

以及

$$\sigma_{1x}\chi_{00}=-\sigma_{2x}\chi_{00},\quad \sigma_{1y}\chi_{00}=-\sigma_{2y}\chi_{00},\quad \sigma_{1z}\chi_{00}=-\sigma_{2z}\chi_{00} \tag{5.251}$$

或者 $\boldsymbol{\sigma}_1\chi_{00}=-\boldsymbol{\sigma}_2\chi_{00}$. 由此得

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{n}_1)(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{n}_2)\chi_{00}=-(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{n}_1)(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{n}_2)\chi_{00} \tag{5.252}$$

式中

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{n}_1)(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{n}_2) &= \sigma_{1i}n_{1i}\sigma_{1j}n_{2j}=n_{1i}n_{2j}(\sigma_{1i}\sigma_{1j}) \\ &= \frac{1}{2}n_{1i}n_{2j}\left([\sigma_{1i},\sigma_{1j}]+\{\sigma_{1i},\sigma_{1j}\}\right) \\ &= \frac{1}{2}n_{1i}n_{2j}\left(2\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_{1k}+2\delta_{ij}\right)=n_{1i}n_{2j}\delta_{ij}+\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}n_{1i}n_{2j}\sigma_{1k} \\ &= \boldsymbol{n}_1\cdot\boldsymbol{n}_2+(\boldsymbol{n}_1\times\boldsymbol{n}_2)\cdot\boldsymbol{\sigma}_1 \end{aligned} \tag{5.253}$$

利用式 (5.250)、式(5.252)与式(5.253)得

$$\begin{aligned} \langle(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{n}_1)(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{n}_2)\rangle &= \langle\chi_{00}|(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{n}_1)(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{n}_2)|\chi_{00}\rangle \\ &= -\langle\chi_{00}|\boldsymbol{n}_1\cdot\boldsymbol{n}_2+(\boldsymbol{n}_1\times\boldsymbol{n}_2)\cdot\boldsymbol{\sigma}_1|\chi_{00}\rangle \\ &= -\langle\chi_{00}|\boldsymbol{n}_1\cdot\boldsymbol{n}_2|\chi_{00}\rangle-(\boldsymbol{n}_1\times\boldsymbol{n}_2)\cdot\langle\chi_{00}|\boldsymbol{\sigma}_1|\chi_{00}\rangle \\ &= -\boldsymbol{n}_1\cdot\boldsymbol{n}_2-(\boldsymbol{n}_1\times\boldsymbol{n}_2)\cdot\boldsymbol{0}=-\boldsymbol{n}_1\cdot\boldsymbol{n}_2 \end{aligned}$$

即 $\langle(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{n}_1)(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{n}_2)\rangle=-\boldsymbol{n}_1\cdot\boldsymbol{n}_2$.

解法二　两个电子的归一化的自旋单态 χ_{00} 如式 (5.248) 给出，单电子自旋算符对式中单电子自旋态的作用如式 (5.249) 给出. 而题中 $(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{n}_1)(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{n}_2)$ 可以表示为如下形式：

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{n}_1)(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{n}_2) &= (\sigma_{1x}\sigma_{2x}n_{1x}n_{2x}+\sigma_{1y}\sigma_{2y}n_{1y}n_{2y}+\sigma_{1z}\sigma_{2z}n_{1z}n_{2z}) \\ &\quad+(\sigma_{1x}\sigma_{2z}n_{1x}n_{2z}+\sigma_{1x}\sigma_{2y}n_{1x}n_{2y}+\sigma_{1y}\sigma_{2z}n_{1y}n_{2z} \\ &\quad+\sigma_{1y}\sigma_{2x}n_{1y}n_{2x}+\sigma_{1z}\sigma_{2x}n_{1z}n_{2x}+\sigma_{1z}\sigma_{2z}n_{1x}n_{2y}) \end{aligned} \tag{5.254}$$

根据式 (5.248)与式(5.249)，自旋单态 χ_{00} 是 $\sigma_{1z}\sigma_{2z}$ 的本征态，满足 $\sigma_{1z}\sigma_{2z}\chi_{00}=-\chi_{00}$. 由于 χ_{00} 各向同性，可知 $\sigma_{1x}\sigma_{2x}\chi_{00}=-\chi_{00},\sigma_{1y}\sigma_{2y}\chi_{00}=-\chi_{00}$. 因此 χ_{00} 是式 (5.254)前 3 项每项的本征态，即

$$\sigma_{1z}\sigma_{2z}\chi_{00}=\sigma_{1x}\sigma_{2x}\chi_{00}=\sigma_{1y}\sigma_{2y}\chi_{00}=-\chi_{00} \tag{5.255}$$

这样式 (5.254) 前三项的期望值为

$$\begin{aligned}&\langle\sigma_{1x}\sigma_{2x}n_{1x}n_{2x}+\sigma_{1y}\sigma_{2y}n_{1y}n_{2y}+\sigma_{1z}\sigma_{2z}n_{1z}n_{2z}\rangle\\&=-n_{1x}n_{2x}-n_{1y}n_{2y}-n_{1z}n_{2z}\\&=-\boldsymbol{n}_1\cdot\boldsymbol{n}_2\end{aligned} \tag{5.256}$$

接下来，同样根据式 (5.248)与式(5.249)得

$$\begin{aligned}\sigma_{1x}\sigma_{2z}\chi_{00}&=\frac{1}{\sqrt{2}}[-\beta(1)\beta(2)-\alpha(1)\alpha(2)]\\&=-\frac{1}{\sqrt{2}}[\chi_{1,-1}+\chi_{11}]\end{aligned} \tag{5.257}$$

$$\sigma_{1x}\sigma_{2y}\chi_{00}=\frac{1}{\sqrt{2}}[-\mathrm{i}\beta(1)\alpha(2)-\mathrm{i}\alpha(1)\beta(2)]=-\mathrm{i}\chi_{10} \tag{5.258}$$

可见 $\sigma_{1x}\sigma_{2z},\sigma_{1x}\sigma_{2y}$ 作用到自旋单态 χ_{00} 上，使之变成自旋三重态. 再利用 χ_{00} 各向同性，式 (5.254) 后六项作用到自旋单态 χ_{00} 上，均使之变成自旋三重态，它们与 χ_{00} 正交. 因此式 (5.254) 后六项在 χ_{00} 态下的期望值为零. 这样结合式 (5.256) 可得 $\langle(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{n}_1)(\boldsymbol{\sigma}_2\cdot\boldsymbol{n}_2)\rangle=-\boldsymbol{n}_1\cdot\boldsymbol{n}_2$.

5.54　轨道角动量平方和分量与空间单位矢量分量的对易关系

题 5.54　设 $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{r}/r$ 为位置方向单位矢量，定义 $n_\pm=n_1\pm\mathrm{i}n_2$，计算 $\boldsymbol{L}^2$, L_z, $L_\pm$ 与 $n_\pm$, n_3 的对易关系，并证明

$$\begin{aligned}n_+|ll\rangle&=-\sqrt{\frac{2(l+1)}{(2l+3)}}|l+1,l+1\rangle\\n_3|ll\rangle&=|l+1,l\rangle\end{aligned}$$

式中，$|lm\rangle$ 为 $\boldsymbol{L}^2$ 与 L_z 的本征态.

解答　演算下列对易子:

$$\begin{aligned}[L_\alpha,n_\beta]&=\left[L_\alpha,x_\beta\frac{1}{r}\right]=[L_\alpha,x_\beta]\frac{1}{r}+x_\beta\left[L_\alpha,\frac{1}{r}\right]\\&=\frac{\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}x_\gamma}{r}=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}n_\gamma\\[\boldsymbol{L}^2,n_\beta]&=[L_\alpha L_\alpha,n_\beta]=[L_\alpha,n_\beta]L_\alpha+L_\alpha[L_\alpha,n_\beta]\end{aligned} \tag{5.259}$$

$$= \mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}n_\gamma L_\alpha + \mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}L_\alpha n_\gamma \tag{5.260}$$

因为

$$L_\alpha n_\gamma = n_\gamma L_\alpha + \mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\gamma\theta}n_\theta, \quad \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\alpha\gamma\theta} = -2\delta_{\beta\theta}$$

所以

$$\begin{aligned}
&\left[\boldsymbol{L}^2, n_\beta\right] = 2\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}n_\gamma L_\alpha + 2\hbar^2 n_\beta \\
&\left[\boldsymbol{L}^2, n_3\right] = 2\mathrm{i}\hbar(n_1L_2 - n_2L_1) + 2\hbar^2 n_3 = \hbar(n_-L_+ - n_+L_-) + 2\hbar^2 n_3 \\
&\left[\boldsymbol{L}^2, n_+\right] = \left[\boldsymbol{L}^2, n_1 + \mathrm{i}n_2\right] = 2\hbar(n_+L_3 - n_3L_+) + 2\hbar^2 n_+ \\
&\left[\boldsymbol{L}^2, n_-\right] = -2\hbar(n_-L_3 - n_3L_-) + 2\hbar^2 n_- \\
&[L_+, n_3] = [L_1 + \mathrm{i}L_2 n_3] = -\hbar n_+ \\
&[L_+, n_+] = [L_1 + \mathrm{i}L_2, n_1 + \mathrm{i}n_2] = \mathrm{i}[L_1, n_2] + \mathrm{i}[L_2, n_1] = 0 \\
&[L_+, n_-] = 2\hbar n_3 \\
&[L_3, n_3] = 0 \\
&[L_3, n_+] = \hbar n_+ \\
&[L_3, n_-] = -[L_3, n_+]^\dagger = -\hbar n_- \\
&[L_-, n_+] = -[L_+, n_-]^\dagger = -2\hbar n_3 \\
&[L_-, n_-] = 0 \\
&[L_-, n_3] = \hbar n_-
\end{aligned}$$

由于

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{L}^2 n_+ |ll\rangle &= \left[n_+\boldsymbol{L}^2 + 2\hbar(n_+L_3 - n_3L_+) + 2\hbar^2 n_+\right] |ll\rangle \\
&= (l+1)(l+2)\hbar^2 n_+ |ll\rangle \\
L_3 n_+ |ll\rangle &= \left([L_3, n_+] + n_+L_3\right) |ll\rangle = (l+1)\hbar n_+ |ll\rangle
\end{aligned}$$

即 $n_+|ll\rangle$ 也是 $\boldsymbol{L}^2$, L_z 的量子数分别为 $l+1$, $l+1$ 的共同本征态，即

$$n_+ |ll\rangle = a_+ |l+1, l+1\rangle$$

a_+ 由归一化条件确定. 由于

$$L_3 n_3 |ll\rangle = \left([L_3, n_3] + n_3L_3\right) |ll\rangle = l\hbar n_3 |ll\rangle$$

即 $n_3|ll\rangle$ 的磁量子数仍为 l

$$L_+ n_3 |ll\rangle = \left([L_+, n_3] + n_3L_+\right) |ll\rangle = -\hbar n_+ |ll\rangle = -a_+\hbar |l+1, l+1\rangle \tag{5.261}$$

由于 L_+ 为升算符，与 L_3 作用结果合起来可能有

$$n_3 |ll\rangle = a_3 |l+1, l\rangle \tag{5.262}$$

把式 (5.262)代入式 (5.261)，利用升算符作用的结果，则

$$\begin{aligned}-a_+\hbar|l+1,l+1\rangle &= L_+n_3|ll\rangle = a_3L_+|l+1,l\rangle\\ &= a_3\hbar\sqrt{(l+1-l)(l+1+l+1)}|l+1,l+1\rangle\\ &= a_3\hbar\sqrt{2l+2}|l+1,l+1\rangle\end{aligned}$$

即得

$$a_+ = -a_3\sqrt{2(l+1)}$$

因为 $n^2 = 1 = n_-n_+ + n_3^2$，$n_- = n_+^\dagger$，$n_3 = n_3^\dagger$，可得

$$1 = \langle ll|ll\rangle = \langle ll|n_-n_+|ll\rangle + \langle ll|n_3n_3|ll\rangle = |a_+|^2 + |a_3|^2 = [2(l+1)+1]|a_3|^2$$

在取定 $|lm\rangle$ 的位相下，a_+，a_3 都需要是实数，于是

$$a_3 = \frac{1}{\sqrt{2l+3}},\quad a_+ = -\sqrt{\frac{2(l+1)}{2l+3}}$$

也就是

$$\begin{aligned}n_3|ll\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2l+3}}|l+1,l\rangle\\ n_+|ll\rangle &= -\sqrt{\frac{2(l+1)}{2l+3}}|l+1,l+1\rangle\end{aligned}$$

类似地有

$$\begin{aligned}n_-|l,-l\rangle &= \sqrt{\frac{2(l+1)}{2l+3}}|l+1,-(l+1)\rangle\\ n_3|l,-l\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2l+3}}|l+1,-l\rangle\\ n_3|l,m\rangle &= a_{lm}|l+1,m\rangle + a_{l-1,m}|l-1,m\rangle\\ a_{lm} &= \sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}\end{aligned}$$

5.55　Pauli 矩阵的一些性质

题 5.55　设有四个 2×2 Hermite 矩阵 I，σ_1、σ_2、σ_3，其中 I 是单位矩阵，其他三个满足关系 $\{\sigma_i,\sigma_j\} = \sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 2\delta_{ij}$. 不用任何具体表示，证明下列性质：

(1) $\mathrm{tr}(\sigma_i) = 0$；

(2) σ_i 本征值为 ±1，$\det\sigma_i = -1$；

(3) 四个矩阵线性无关，因此，任何 2×2 矩阵都可以用它们表示出来；

(4) 从 (3) 知道 $M = mI + \sum_{i=1}^{3} m_i\sigma_i$，其中 M 是任意 2×2 矩阵. 导出 m_i 的表达式.

证明　(1) 依题意得 $\sigma_i\sigma_j=-\sigma_j\sigma_i\ (i\neq j)$，　$\sigma_i^2=I$，所以对于 $i\neq j$，有

$$\sigma_i=-\sigma_j\sigma_i\sigma_j$$

两边取迹，

$$\mathrm{tr}\sigma_i=-\mathrm{tr}(\sigma_j\sigma_i\sigma_j)=-\mathrm{tr}(\sigma_j\sigma_j\sigma_i)=-\mathrm{tr}\sigma_i$$

所以

$$\mathrm{tr}(\sigma_i)=0 \tag{5.263}$$

(2) 因为 $\sigma_j^2=1$，故本征值满足 $\lambda_m^2=1$. 所以 $\lambda_m=\pm1$，由式 (5.263)知 $\lambda_1=1$，$\lambda_2=-1$，于是

$$\det\sigma_i=\lambda_1\lambda_2=-1 \tag{5.264}$$

(3) 假设四个矩阵线性相关，即存在 m_0,m_1,m_2,m_3 使得 $m_0I+\sum\limits_i^3 m_i\sigma_i=0$ 成立，则依次用 I，σ_1、σ_2、σ_3 乘等式两边并取迹，得 $m_0=m_1=m_2=m_3=0$. 故 I，σ_1、σ_2、σ_3 线性无关，构成 2×2 复矩阵空间的完备基矢，任何 2×2 矩阵可用这四个矩阵表示出来.

(4) 按第 (3) 小题结论，$I=\sigma_0$、σ_1、σ_2、σ_3 构成 2×2 复矩阵空间的完备基矢，可设 $M=m_0I+\sum\limits_i^3 m_i\sigma_i$，依次用 I、σ_1、σ_2、σ_3 乘等式两边并取迹，有

$$m_\alpha=\frac{1}{2}\mathrm{tr}(\sigma_\alpha M),\quad \alpha=0,1,2,3$$

5.56　$S=1$ 的自旋算符的代数结果

题 5.56　自旋为 1 的三个矩阵算符满足 $[S_i,\ S_j]=\mathrm{i}\epsilon_{ijk}S_k$，其中 $i,j,k=x,y,z$. 证明 $S_z^3=S_z$，$(S_x\pm\mathrm{i}S_y)^3=0$.

证法一　由角动量理论可知，自旋角动量量子数 $s=1$，磁量子数 $m_s=1,0,-1$. 取 $\hbar=1$，在 $\boldsymbol{S}^2$ 和 S_z 表象中，S_x，S_y，S_z 矩阵表示为

$$S_x=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix},\quad S_y=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}&0\\\mathrm{i}&0&-\mathrm{i}\\0&\mathrm{i}&0\end{pmatrix},\quad S_z=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$$

上式可以通过升降算符 $S_\pm=S_x\pm\mathrm{i}S_y$ 对角动量态的作用导出. 易证

$$S_z^3=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}^3=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}=S_z$$

由于幺正变换不改变算符关系，而不同表象之间仅差一个幺正变换，所以在所有表象中有

$$S_z^3 = S_z$$

并有

$$(S_x + \mathrm{i}S_y)^3 = \left[\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\right]^3 = 0$$

$$(S_x - \mathrm{i}S_y)^3 = \left[\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}\right]^3 = 0$$

证法二　设 S_z 的本征态为 $|m_s = 1\rangle$，$|m_s = 0\rangle$，$|m_s = -1\rangle$. 一般态可写成

$$|\psi\rangle = C_1|1\rangle + C_0|0\rangle + C_{-1}|-1\rangle$$

则有

$$S_z(S_z - 1)(S_z + 1)|\psi\rangle = 0$$

因为 $|\psi\rangle$ 任意，故有

$$S_z(S_z - 1)(S_z + 1) = 0$$

即 $S_z^3 = S_z$.

由于 $S_\pm = S_x \pm \mathrm{i}S_y$ 为自旋角动量上升 (下降) 算符

$$S_\pm|m_s\rangle = \sqrt{s(s+1) - m_s(m_s \pm 1)}|m_s \pm 1\rangle$$

易得

$$S_\pm^3|\psi\rangle = 0$$

故有 $S_\pm^3 = 0$.

5.57　角动量矩阵的本征值

题 5.57　三个矩阵 M_z，M_y，M_x，每个均为 256 行和列的方阵，它们服从对易关系 $[M_x, M_y] = \mathrm{i}M_z$ (以及 x、y 和 z 轮换的其他对易关系式). M_z 的本征值为 ± 2 各 1 个，$\pm 3/2$ 各 8 个，± 1 各 28 个，$\pm 1/2$ 各 56 个，以及 0 有 70 个. 给出 $M^2 \equiv M_x^2 + M_y^2 + M_z^2$ 的 256 个本征值.

解答　M^2 与 M_x 对易，因此可取它们的共同本征态 $|m, m_x\rangle$，有

$$M^2|m, m_x\rangle = m(m+1)|m, m_x\rangle$$

$$M_x|m, m_x\rangle = m_x|m, m_x\rangle$$

属于同一个 m 的 m_x 取值为 $+m, m-1, \cdots, -m$.

m	2	3/2	1	1/2	0
m_x	$\left.\begin{matrix}\pm2\\\pm1\\0\end{matrix}\right\}$ 各 1 个	$\left.\begin{matrix}\pm3/2\\\pm1/2\end{matrix}\right\}$ 各 8 个	$\left.\begin{matrix}\pm1\\0\end{matrix}\right\}$ 各 27 个	$\pm1/2$ 各 48 个	0 各 42 个

m 对应多重数为 $2m+1$，因此 M^2 本征值如下表：

m	M^2 本征值	个数
2	6	5
3/2	15/4	32
1	2	81
1/2	3/4	96
0	0	42

共 256 个.

5.58　$s=1/2$ 时极化矢量与投影算子的关系

题 5.58　(1) 在 σ_z 表象中求 σ_x、σ_y、σ_z 的本征态.

(2) 在 σ_x 表象中求 σ_x、σ_y、σ_z 的本征态.

解答　解法一　(1) 设 Pauli 算符 σ^2、σ_z 的共同本征态是

$$\chi_{\frac{1}{2}}(s_z),\quad \chi_{-\frac{1}{2}}(s_z) \tag{5.265}$$

或记作 α 和 β，它们就是 σ_z 表象中 σ_z 的本征态. α 和 β 构成 1/2 自旋态空间的完备基矢，具有完备性，即可以展开任意的 1/2 自旋态. α 和 β 并不是 σ_x 的本征态，但根据其完备性，σ_x 的归一化本征态可表示为

$$\chi=c_1\alpha+c_2\beta \tag{5.266}$$

其中，c_1、c_2 是待定常数，χ 归一化条件可表示为

$$|c_1|^2+|c_2|^2=1 \tag{5.267}$$

本征方程为

$$\sigma_x(c_1\alpha+c_2\beta)=\lambda(c_1\alpha+c_2\beta) \tag{5.268}$$

其中，λ 为本征值. σ_x 对 σ_z 表象基矢的运算法则是

$$\sigma_x\alpha=\beta,\quad \sigma_x\beta=\alpha \tag{5.269}$$

将式 (5.269) 代入式 (5.268) 得

$$c_1\beta+c_2\alpha=\lambda c_1\alpha+\lambda c_2\beta$$

比较 α、β 的系数 (这二者线性无关)，有

$$\begin{cases} c_1 = \lambda c_2 \\ c_2 = \lambda c_1 \end{cases} \tag{5.270}$$

由式 (5.270) 得 $\lambda^2 = 1$，即 $\lambda = 1$，或 $\lambda = -1$. 当 $\lambda = 1$ 时，代入式 (5.270) 得 $c_1 = c_2$，再代入式 (5.267)，得

$$c_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}, \quad c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}$$

其中，δ 是任意的实数，在最后所得到的本征态中以整体相位的形式出现，通过相位约定，可以取 $\delta = 0$. 当 $\lambda = -1$ 时，代入式 (5.270) 得 $c_1 = -c_2$，再结合归一化条件 (5.267)，可以取

$$c_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad c_2 = -\frac{1}{\sqrt{2}}$$

最后得 σ_x 的本征态

$$\begin{aligned} \chi_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha + \beta), \quad \text{对应本征值1} \\ \chi_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha - \beta), \quad \text{对应本征值} -1 \end{aligned}$$

σ_y 的归一化本征态可表示为

$$\chi' = c_1'\alpha + c_2'\beta \tag{5.271}$$

其中，c_1'、c_2' 是待定常数，χ' 归一化条件可表示为

$$|c_1'|^2 + |c_2'|^2 = 1 \tag{5.272}$$

本征方程为

$$\sigma_y (c_1'\alpha + c_2'\beta) = \lambda' (c_1'\alpha + c_2'\beta) \tag{5.273}$$

λ' 是本征值. σ_y 对 σ_z 表象基矢的运算法则是

$$\sigma_y \alpha = \mathrm{i}\beta, \quad \sigma_y \beta = -\mathrm{i}\alpha \tag{5.274}$$

将式 (5.274) 代入式 (5.273) 得

$$\mathrm{i}c_1'\beta - \mathrm{i}c_2'\alpha = \lambda' c_1'\alpha + \lambda' c_2'\beta$$

比较 α、β 的系数 (这二者线性无关)，有

$$\begin{cases} \mathrm{i}c_1' = \lambda' c_2' \\ -\mathrm{i}c_2' = \lambda' c_1' \end{cases} \tag{5.275}$$

由式 (5.275) 得 $\lambda'^2=1$，即 $\lambda'=1$，或 $\lambda'=-1$. 当 $\lambda'=1$ 时，代入式 (5.275) 得 $\mathrm{i}c_1'=c_2'$，再结合归一化条件 (5.272)，可以取

$$c_1'=\frac{1}{\sqrt{2}},\quad c_2'=\frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{i}$$

当 $\lambda'=-1$ 时，代入式 (5.275) 得 $c_1'=-\mathrm{i}c_2'$，再结合归一化条件 (5.272)，可以取

$$c_1'=\frac{1}{\sqrt{2}},\quad c_2'=-\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}$$

最后得 σ_y 的本征态

$$\chi_1'=\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha+\mathrm{i}\beta),\quad \text{对应本征值1}$$
$$\chi_2'=\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha-\mathrm{i}\beta),\quad \text{对应本征值}-1$$

(2) 根据第 (1) 小题，在 σ_z 表象中 σ_x 的本征态为

$$\psi_1=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix},\quad \psi_2=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$$

而 σ_x 在 σ_x 自身表象中的本征态为

$$\psi_1'=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\quad \psi_2'=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

故由 σ_z 表象向 σ_x 表象的变换矩阵为

$$S_{\alpha k}=(\psi_\alpha',\psi_k)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1&1\\1&-1\end{pmatrix},\quad \alpha,k=1,2$$

由此可得 σ_y 的本征态为

$$\psi_{y+}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1&1\\1&-1\end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\\mathrm{i}\end{pmatrix}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1+\mathrm{i}\\1-\mathrm{i}\end{pmatrix}$$
$$\psi_{y-}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1&1\\1&-1\end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-\mathrm{i}\end{pmatrix}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1-\mathrm{i}\\1+\mathrm{i}\end{pmatrix}$$

因为幺正变换不改变本征值，故本征值仍为 ±1.

同理可得 σ_z 的本征态为

$$\psi_{z+}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1&1\\1&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$$

$$\psi_{z-}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -1\end{pmatrix}$$

本征值分别为 1、 -1.

解法二 (关于第 (1) 小题) 在 σ_z 表象中， σ_x、 σ_y 与 σ_z 的矩阵形式为

$$\sigma_x=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\quad \sigma_y=\begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{pmatrix},\quad \sigma_z=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \tag{5.276}$$

因此 σ_x 的本征方程是

$$\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1\\ c_2\end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix}c_1\\ c_2\end{pmatrix} \tag{5.277}$$

由非平凡解得久期方程

$$\begin{vmatrix}-\lambda & 1\\ 1 & -\lambda\end{vmatrix}=0$$

由此解得本征值 $\lambda=\pm1$. 其余步骤与上面方法相同，求得 σ_x 的相应于本征值 $\lambda=\pm1$ 的两个本征矢为

$$\chi_1=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ 1\end{pmatrix},\quad \chi_2=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -1\end{pmatrix}$$

σ_y 本征方程是

$$\begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1'\\ c_2'\end{pmatrix}=\lambda'\begin{pmatrix}c_1'\\ c_2'\end{pmatrix} \tag{5.278}$$

由非平凡解得久期方程

$$\begin{vmatrix}-\lambda' & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & -\lambda'\end{vmatrix}=0$$

由此解得本征值 $\lambda'=\pm1$. 其余步骤与上面方法相同，求得 σ_y 的相应于本征值 $\lambda'=\pm1$ 的两个本征矢为

$$\chi_1'=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ \mathrm{i}\end{pmatrix},\quad \chi_2'=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -\mathrm{i}\end{pmatrix}$$

说明 σ_x、 σ_y、 σ_z 的本征值 ±1 可直接由它们均满足自逆性给出.

5.59 在态 $\psi=K(x+y+2z)\exp(-\alpha r)$ 中，总角动量及角动量第三分量的期望值

题 5.59 有一无自旋粒子，其波函数为

$$\psi=K(x+y+2z)\exp(-\alpha r)$$

其中，$r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$ 且 K、α 是实常数，$\alpha>0$. 问：

(1) 粒子的总角动量是多少?

(2) 角动量 z 分量的期望值是多少?

(3) 若角动量 z 分量 L_z 被测量，问测得 $L_z=+\hbar$ 的概率是多少?

(4) 发现粒子在 θ，φ 方向上的 $\mathrm{d}\Omega$ 立体角内的概率是多少? 其中 θ、φ 就是通常球坐标中的角度.

解答　先写出前几项球谐函数的表达式

$$\mathrm{Y}_{00}=\sqrt{\frac{1}{4\pi}};\quad \mathrm{Y}_{10}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta;\quad \mathrm{Y}_{1,\pm1}=\mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\varphi} \tag{5.279}$$

在球坐标下写出该粒子的波函数，

$$\psi=R(r)\varphi(\theta,\varphi)=K'[\sin\theta\cos\varphi+\sin\theta\sin\varphi+2\cos\theta]K_r r\mathrm{e}^{-\alpha r} \tag{5.280}$$

其中，径向波函数为

$$R(r)=K_r r\mathrm{e}^{-\alpha r}$$

其归一化条件为

$$\begin{aligned}1 &= \int_0^\infty |R(r)|^2 r^2\mathrm{d}r=|K_r|^2\int_0^\infty r^4\mathrm{e}^{-2\alpha r}\mathrm{d}r\\ &= \frac{\Gamma(5)|K_r|^2}{(2\alpha)^5}=\frac{3}{4\alpha^5}|K_r|^2\end{aligned}$$

其中利用了式 (A.10)，因而归一化系数 K_r 可取为

$$K_r=\sqrt{\frac{4\alpha^5}{3}}$$

再考虑波函数的角度部分

$$\begin{aligned}\varphi(\theta,\varphi) &= K'[\sin\theta\cos\varphi+\sin\theta\sin\varphi+2\cos\theta]\\ &= K'\left[\sin\theta\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}}{2}+\sin\theta\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}}{2\mathrm{i}}+2\cos\theta\right]\\ &= K'\left[-\frac{1-\mathrm{i}}{2}\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\mathrm{Y}_{11}+\frac{1-\mathrm{i}}{2}\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\mathrm{Y}_{1,-1}+2\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\mathrm{Y}_{10}\right]\end{aligned}$$

由归一化条件，$\int\varphi(\theta,\varphi)^*\varphi(\theta,\varphi)\mathrm{d}\Omega=1$ 及 Y_{lm} 的正交归一性，从而有

$$K'^2\left[\frac{1}{2}\cdot\frac{8\pi}{3}+\frac{1}{2}\frac{8\pi}{3}\mathrm{Y}_{11}+4\cdot\frac{4\pi}{3}\right]=1$$

因此可以取

$$K'=\sqrt{\frac{1}{8\pi}}$$

因而

$$\varphi(\theta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{3}}\left[-\frac{1-\mathrm{i}}{2}\mathrm{Y}_{11}+\frac{1-\mathrm{i}}{2}\mathrm{Y}_{1,-1}+\sqrt{2}\mathrm{Y}_{10}\right] \tag{5.281}$$

由式 (5.281)可知：

(1) φ 是 $\boldsymbol{L}^2$ 的本征态，本征值为 $1(1+1)\hbar^2=2\hbar^2$，所以粒子的总角动量量子数为 $1\hbar$.

(2) 角动量的 z 分量的期望值

$$\langle L_z\rangle=\frac{1}{3}\cdot\frac{1}{2}(+\hbar)+\frac{1}{3}\cdot\frac{1}{2}(-\hbar)+0=0$$

(3) 对题给态测量角动量 z 分量 L_z 得 $L_z=+\hbar$ 的概率是

$$P(L_z=+\hbar)=|\langle \mathrm{Y}_{11}|\,\varphi(\theta,\varphi)\rangle|^2=\frac{1}{3}\cdot\frac{1}{2}=\frac{1}{6}$$

(4) 发现粒子在 (θ,φ) 方向上的 $\mathrm{d}\Omega$ 立体角内的概率为

$$P(\theta,\varphi)\mathrm{d}\Omega=|\varphi(\theta,\varphi)|^2\,\mathrm{d}\Omega=\frac{1}{8\pi}[\sin\theta(\sin\varphi+\cos\varphi)+2\cos\theta]^2\,\mathrm{d}\Omega$$

5.60 粒子具有轨道角动量量子数 $l=2$ 和自旋角动量量子数 $s=1$，求自旋-轨道作用相关的能级和简并度

题 5.60 一个处于中心势的粒子具有轨道角动量量子数 $l=2$ 和自旋角动量量子数 $s=1$，求形如 $H_I=A\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$ 的自旋 -轨道作用相关的能级和简并度.

解答 本题可选 $\{H,\boldsymbol{J}^2,J_z,\boldsymbol{L}^2,\boldsymbol{S}^2\}$ 作为力学量完全集，角度和自旋部分的波函数可取为 ϕ_{jm_jls}，

$$\boldsymbol{J}^2\phi_{jm_jls}=\hbar^2j(j+1)\phi_{jm_jls},\boldsymbol{L}^2\phi_{jm_jls}=\hbar^2l(l+1)\phi_{jm_jls}$$
$$\boldsymbol{S}^2\phi_{jm_jls}=\hbar^2s(s+1)\phi_{jm_jls},J_z\phi_{jm_jls}=\hbar m_j\phi_{jm_jls}$$

由于

$$\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{J}^2-\boldsymbol{L}^2-\boldsymbol{S}^2)$$

故该自旋-轨道作用的能级能量

$$\begin{aligned}E_j&=\langle A\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}\rangle=\frac{1}{2}\hbar^2A[j(j+1)-l(l+1)-s(s+1)]\\&=\frac{1}{2}\hbar^2A[j(j+1)-8]\\&=\begin{cases}2A\hbar^2, & j=3\\-A\hbar^2, & j=2\\-3A\hbar^2, & j=1\end{cases}\end{aligned}$$

对于同一个 j，m_j 可取 $-j$、$-j+1$、-1、0、$\cdots$、j，对应不同的态，E_j 都相等，该能级是简并的，简并度为 $2j+1$，对于 $j=1,2,3$，简并度分别为 3、5、7.

5.61　电子在 $\psi=\dfrac{1}{\sqrt{4\pi}}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\sin\theta+\cos\theta)g(r)$ 态中，L_z 的可能值及概率

题 5.61　假定一电子状态由波函数

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\sin\theta+\cos\theta)g(r)$$

描述，其中 $\int|g(r)|^2r^2\mathrm{d}r=1$，且 θ,φ 分别是方位角和极角.

(1) 处在该态电子的轨道角动量 z 分量 L_z 的可能测量结果是什么?

(2) 得到 (1) 中每个可能结果的概率是多少?

(3) L_z 的期望值是多少?

解答　(1) 先写出前几项球谐函数的表达式

$$\mathrm{Y}_{00}=\sqrt{\frac{1}{4\pi}};\quad \mathrm{Y}_{10}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta;\quad \mathrm{Y}_{1,\pm1}=\mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\varphi}\tag{5.282}$$

因而

$$\psi=\sqrt{\frac{1}{3}}(-\sqrt{2}\mathrm{Y}_{11}+\mathrm{Y}_{10})g(r)\tag{5.283}$$

角向波函数已归一化. 按题设

$$|g(r)|^2r^2\mathrm{d}r=1$$

径向波函数已归一化，则题给波函数已归一化. 由式 (5.283)可知，可能测得 L_z 值为：$+\hbar$，0.

(2) 由式 (5.283)可知，测得 $L_z=+\hbar$ 的概率为 $\dfrac{2}{3}$；测得 $L_z=0$ 的概率为 $\dfrac{1}{3}$.

(3) 由此可知，L_z 的期望值为

$$\langle L_z\rangle=\frac{2}{3}\times\hbar+\frac{1}{3}\times0=\frac{2}{3}\hbar$$

5.62　$U(\beta,y)$ 为绕 y 轴转 β 角的转动算符，证明矩阵元 $\langle jm|U(\beta,y)|jm'\rangle$ 是 $\sin\dfrac{\beta}{2}$ 和 $\cos\dfrac{\beta}{2}$ 的 $2j$ 次齐次多项式

题 5.62　$U(\beta,y)$ 表示绕 y 轴转 β 角的一个转动算符. 证明矩阵元

$$\langle jm|U(\beta,y)|jm'\rangle,\quad -j\leqslant m,m'\leqslant j$$

是变量 $\sin\dfrac{\beta}{2}$ 和 $\cos\dfrac{\beta}{2}$ 的 $2j$ 次齐次多项式. $|jm\rangle$ 是角动量平方及角动量 z 分量的本征态

$$\boldsymbol{J}^2|jm\rangle=j(j+1)\hbar^2|jm\rangle$$
$$J_z|jm\rangle=m\hbar|jm\rangle$$

证明　(数学归纳法)

当 $j=0$ 时，结论显然正确.

当 $j=\dfrac{1}{2}$ 时，$J_y=\dfrac{\hbar}{2}\sigma_y=\dfrac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0, & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i}, & 0\end{pmatrix}$，于是

$$\begin{aligned}U(\beta,y) &\equiv \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\beta J_y\right)=\exp\left(-\mathrm{i}\frac{\beta}{2}\sigma_y\right)\\ &= \cos\frac{\beta}{2}-\mathrm{i}\sin\frac{\beta}{2}\sigma_y=\cos\frac{\beta}{2}-\frac{2\mathrm{i}}{\hbar}\sin\frac{\beta}{2}J_y\end{aligned}$$

所以

$$\begin{aligned}\left\langle\frac{1}{2},m\middle|U(\beta,y)\middle|\frac{1}{2},m'\right\rangle &= \left\langle\frac{1}{2},m\middle|\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\beta J_y\right)\middle|\frac{1}{2},m'\right\rangle\\ &= \delta_{mm'}\cos\frac{\beta}{2}-\frac{2\mathrm{i}}{\hbar}\left\langle\frac{1}{2},m\middle|J_y\middle|\frac{1}{2},m'\right\rangle\sin\frac{\beta}{2}\end{aligned}$$

注意到第二项的 J_y 矩阵元是不含 β 的 (是虚常数)，故 $\left\langle\dfrac{1}{2},m\middle|U\middle|\dfrac{1}{2},m'\right\rangle$ 是 $\sin\dfrac{\beta}{2}$ 和 $\cos\dfrac{\beta}{2}$ 的一次齐次式，结论对此特例正确.

假定角动量为 j 时结论正确，即假定有

$$\langle jm|U(\beta,y)|jm'\rangle=\left\langle jm\middle|\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\beta J_y\right)\middle|jm\right\rangle=\sum_{n=0}^{2j}A_n\cdot\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2j-n}\left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^n$$

其中，$A_n=A_n(j,m,m')$. 需要证明角动量为 $j+\dfrac{1}{2}$ 时结论仍正确.

设 $\boldsymbol{J}'=\boldsymbol{J}+\boldsymbol{J}_1$，$\boldsymbol{J}$ 量子数为 j，$\boldsymbol{J}_1$ 量子数为 $\dfrac{1}{2}$. 将耦合表象中的 $|J,m\rangle=\left|j+\dfrac{1}{2},m\right\rangle$ 用无耦合表象基矢展开

$$\left|j+\frac{1}{2},m\right\rangle=C_1\left|j,m+\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle+C_2\left|j,m-\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$$

式中，C_1, C_2 是 (与 β 无关的)C-G 系数. 将此展式代入

$$\left\langle j+\frac{1}{2},m\middle|\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\beta(J_y+J_{1y})\right]\middle|j+\frac{1}{2},m'\right\rangle$$

中，可归结为计算如下几个矩阵元：

$$\left\langle\frac{1}{2},\mp\frac{1}{2},j,m\pm\frac{1}{2}\middle|\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\beta(J_y+J_{1y})\right]\middle|j,m'\pm\frac{1}{2},\frac{1}{2},\mp\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$\left\langle\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2},j,m\mp\frac{1}{2}\middle|\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\beta(J_y+J_{1y})\right]\middle|j,m'\mp\frac{1}{2},\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2}\right\rangle$$

比如

$$\left\langle \frac{1}{2},-\frac{1}{2},j,m+\frac{1}{2}\middle|\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\beta(J_y+J_{1y})\right]\middle|j,m'+\frac{1}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$=\left\langle \frac{1}{2},-\frac{1}{2}\middle|\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\beta J_{1y}\right)\middle|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\left\langle j,m+\frac{1}{2}\middle|\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\beta J_y\right)\middle|j,m'+\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$=\left(a_1\cos\frac{\beta}{2}+b_1\sin\frac{\beta}{2}\right)\sum_{n=0}^{2j}A_n\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{-2j-n}\left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^n$$

$$=\sum_{l=0}^{2(j+\frac{1}{2})}B_n(j+\frac{1}{2},m,m')\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2(j+\frac{1}{2})-1}\left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^l$$

于是结论对角动量为 $j+\dfrac{1}{2}$ 时仍正确. 由归纳法知，对任意角动量 j，矩阵元

$$\langle jm|U(\beta,y)|jm'\rangle,\quad -j\leqslant m,m'\leqslant j$$

是变量 $\sin\dfrac{\beta}{2}$ 和 $\cos\dfrac{\beta}{2}$ 的 $2j$ 次齐次多项式.

5.63　两个自旋 1/2 粒子相互作用 $f=a+b\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$ 在耦合与非耦合表象中的矩阵表示

题 5.63　一个算符 f 描述两个自旋 $\dfrac{1}{2}$ 粒子间的相互作用具有如下形式：

$$f=a+b\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$$

式中，a 和 b 是常数，$\boldsymbol{\sigma}_1$ 和 $\boldsymbol{\sigma}_2$ 是 Pauli 矩阵. 总自旋角动量 $\boldsymbol{J}$ 为 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{j}_1+\boldsymbol{j}_2=\dfrac{\hbar}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1+\boldsymbol{\sigma}_2)$.

(1) 证明 f，$\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 可同时测量；

(2) 推导出在基 $|JMj_1j_2\rangle$ 下 f 的矩阵表示 (标出矩阵的行和列)；

(3) 推导出在基 $|j_1j_2m_1m_2\rangle$ 下 f 的矩阵表示.

解答　(1) 所谓 f，$\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 可同时测量，就是要求它们之间彼此可对易. $\boldsymbol{J}^2$ 与 J_z 是可对易的，而

$$[f,\boldsymbol{J}^2]=[a,\boldsymbol{J}^2]+[b\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2,\boldsymbol{J}^2]=b[\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2,\boldsymbol{J}^2]$$

利用 $\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2=\dfrac{2\boldsymbol{J}^2}{\hbar^2}-3$，得 $[f,\boldsymbol{J}^2]=0$. 又因为 $[\boldsymbol{J}^2,J_z]=0$，所以

$$[f,J_z]=[a,J_z]+b\left[\frac{2\boldsymbol{J}^2}{\hbar^2}-3,J_z\right]=0$$

因此 f， $\boldsymbol{J}^2$ 和 J_z 之间相互对易，可同时测量.

(2) 在 $|JMj_1j_2\rangle$ 基下

$$\begin{aligned}\langle JMj_1j_2|f|J'M'j_1j_2\rangle &= a\delta_{JJ'}\delta_{MM'}+b\langle JMj_1j_2|\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2|J'M'j_1j_2\rangle\\ &= a\delta_{JJ'}\delta_{MM'}+b\left(\frac{2}{\hbar^2}J'(J'+1)\hbar^2-3\right)\cdot\delta_{JJ'}\delta_{MM'}\\ &= [a+2bJ(J+1)-3b]\,\delta_{JJ'}\delta_{MM'}\end{aligned}$$

式中， JM 为行指标， $J'M'$ 为列指标.

(3) 用 χ_{00} 和 χ_{1m} 分别表示 $J=0$ 和 $J=1$， $J_z=M$ 的态. 因 $j_1=j_2=\dfrac{1}{2}$，可用简写记号 $|m_1m_2\rangle$ 表示 $|j_1j_2m_1m_2\rangle$ 态. 易知

$$\begin{cases}\chi_{00}=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\left\{\left|\dfrac{1}{2},-\dfrac{1}{2}\right\rangle-\left|-\dfrac{1}{2},\dfrac{1}{2}\right\rangle\right\}\\ \chi_{10}=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\left\{\left|\dfrac{1}{2},-\dfrac{1}{2}\right\rangle+\left|-\dfrac{1}{2},\dfrac{1}{2}\right\rangle\right\}\\ \chi_{1\pm1}=\left|\pm\dfrac{1}{2},\pm\dfrac{1}{2}\right\rangle\end{cases}$$

因此

$$\begin{cases}\left|\pm\dfrac{1}{2},\pm\dfrac{1}{2}\right\rangle=\chi_{1\pm1}\\ \left|\dfrac{1}{2},-\dfrac{1}{2}\right\rangle=\dfrac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{00}+\chi_{10})\\ \left|-\dfrac{1}{2},\dfrac{1}{2}\right\rangle=\dfrac{1}{\sqrt{2}}(-\chi_{00}+\chi_{10})\end{cases}$$

将上述表达式代入矩阵元 $\langle m_1m_2|f|m_1'm_2'\rangle$ 中，并注意 (2) 中结果，可得在基 $|j_1j_2m_1m_2\rangle$ 下 f 的矩阵形式如下：

m_1m_2 \ $m_1'm_2'$	$\frac{1}{2},\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2},-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2},\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}$
$\frac{1}{2},\frac{1}{2}$	$a+b$	0	0	0
$\frac{1}{2},-\frac{1}{2}$	0	$a-b$	$2b$	0
$-\frac{1}{2},\frac{1}{2}$	0	$2b$	$a-b$	0
$-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}$	0	0	0	$a+b$

5.64　两粒子系各自粒子角动量平方及总角动量平方的可能值

题 5.64　考虑坐标空间中的如下两粒子波函数：

$$\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=f(r_1^2)g(r_2^2)\left[\alpha(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r}_1)(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{r}_2)+\beta(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{r}_1)\cdot(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r}_2)+\gamma(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})(\boldsymbol{r}_1\cdot\boldsymbol{r}_2)\right]$$

$\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 是任意的常矢量，f 和 g 是任意函数，α, β 和 γ 是常数.

(1) 每个粒子角动量平方 ($\boldsymbol{L}_1^2$ 和 $\boldsymbol{L}_2^2$) 的本征值是多少?

(2) 适当选取 α, β 和 γ，$\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)$ 也能构成总角动量平方 $\boldsymbol{J}^2=(\boldsymbol{L}_1+\boldsymbol{L}_2)^2$ 的本征函数. 总角动量平方的可能值是多少? 对每个状态 α, β 和 γ 的适当值又是多少?

解答　注意到

$$\nabla f(r)=f'(r)\frac{\boldsymbol{r}}{r},\quad \nabla(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r})=a$$
$$(\boldsymbol{r}\times\nabla)\cdot(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{a})=-2\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r},\quad \left[L,\ r^2\right]=0$$

则有:

(1) 用粒子 1 角动量平方 ($\boldsymbol{L}_1^2$) 作用

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{L}_1^2\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) &= -\hbar^2(\boldsymbol{r}_1\times\nabla_1)\cdot(\boldsymbol{r}_1\times\nabla_1)f(r_1^2)g(r_2^2)\\
&\quad [\alpha(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r}_1)(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{r}_2)+\beta(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{r}_2)(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r}_2)+\gamma(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})(\boldsymbol{r}_1\cdot\boldsymbol{r}_2)\nabla_1]\\
&= -\hbar^2 f(r_1^2)g(r_2^2)(\boldsymbol{r}_1\times\nabla_1)\cdot(\boldsymbol{r}_1\times\nabla_1)\\
&\quad [\alpha(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r}_1)(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{r}_2)+\beta(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{r}_1)(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r}_2)+\gamma(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})(\boldsymbol{r}_1\cdot\boldsymbol{r}_2)]\\
&= -\hbar^2 f(r_1^2)g(r_1^2)(\boldsymbol{r}_1\times\nabla_1)\\
&\quad [\alpha(\boldsymbol{r}_1\times\boldsymbol{a})(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{r}_2)+\beta(\boldsymbol{r}_1\times\boldsymbol{b})(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r}_2)+\gamma(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})(\boldsymbol{r}_1\times\boldsymbol{r}_2)]\\
&= 2\hbar^2 f(r_1^2)g(r_2^2)\\
&\quad [\alpha(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r}_1)(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{r}_2)+\beta(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{r}_1)(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r}_2)+\gamma(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})(\boldsymbol{r}_1\cdot\boldsymbol{r}_2)]\\
&= 1(1+1)\hbar^2\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)
\end{aligned}$$

也就是

$$\boldsymbol{L}_1^2\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=1(1+1)\hbar^2\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)$$

类似地，有

$$\boldsymbol{L}_2^2\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=1(1+1)\hbar^2\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)$$

因此，在题给两粒子波函数下，$\boldsymbol{L}_1^2$ 和 $\boldsymbol{L}_2^2$ 的本征值都是 $2\hbar^2$，或者说两个粒子的轨道角动量量子数都等于 1.

(2) 用 $\boldsymbol{L}_1\cdot\boldsymbol{L}_2$ 作用在题给两粒子波函数

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{L}_1\cdot\boldsymbol{L}_2\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) &= -\hbar^2(\boldsymbol{r}_1\times\nabla_1)\cdot(\boldsymbol{r}_2\times\nabla_2)f(r_1^2)g(r_2^2)\\
&\quad [\alpha(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r}_1)(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{r}_2)+\beta(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{r}_1)(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r}_2)+\gamma(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})(\boldsymbol{r}_1\cdot\boldsymbol{r}_2)]\\
&= -\hbar^2 f(r_1^2)g(r_2^2)(\boldsymbol{r}_1\times\nabla_1)\cdot(\boldsymbol{r}_2\times\nabla_2)\\
&\quad [\alpha(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r}_1)(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{r}_2)+\beta(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{r}_1)(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r}_2)+\gamma(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})(\boldsymbol{r}_1\cdot\boldsymbol{r}_2)]\\
&= -\hbar^2 f(r_1^2)g(r_2^2)(\boldsymbol{r}_1\times\nabla_1)\\
&\quad [\alpha(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r}_1)(\boldsymbol{r}_2\times\boldsymbol{b})+\beta(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{r}_1)(\boldsymbol{r}_2\times\boldsymbol{a})+\gamma(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})(\boldsymbol{r}_2\times\boldsymbol{r}_1)]\\
&= -\hbar^2 f(r_1^2)g(r_2^2)
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&[\alpha(\boldsymbol{r}_1\times\boldsymbol{a})(\boldsymbol{r}_2\times\boldsymbol{b})+\beta(\boldsymbol{r}_1\times\boldsymbol{b})(\boldsymbol{r}_2\times\boldsymbol{a})+\gamma(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})(2\boldsymbol{r}_1\cdot\boldsymbol{r}_2)]\\
=\ &-\hbar^2 f(r_1^2)g(r_2^2)\\
&[-\beta(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r}_1)(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{r}_2)-\alpha(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{r}_1)(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{r}_2)+(\alpha+\beta+2\gamma)(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})(\boldsymbol{r}_1\cdot\boldsymbol{r}_2)]
\end{aligned}
$$

因此，若使题给两粒子波函数 $\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)$ 是 $\boldsymbol{L}_1\cdot\boldsymbol{L}_2$ 的本征函数 (从而是 $\boldsymbol{J}^2=\boldsymbol{L}_1^2+\boldsymbol{L}_2^2+2\boldsymbol{L}_1\cdot\boldsymbol{L}_2$ 的本征函数)，其充分必要条件为

$$
-\beta=\lambda\alpha,-\alpha=\lambda\beta,(\alpha+\beta+2\gamma)=\lambda\gamma
$$

上述条件允许有三组解

$$
\begin{aligned}
&\lambda=-1,\quad \alpha=\beta=-\frac{3}{2}\gamma\\
&\lambda=+1,\quad \alpha=-\beta,\gamma=0\\
&\lambda=2,\quad \alpha=\beta=0
\end{aligned}
$$

于是，总角动量平方 $\boldsymbol{J}^2$ 的可能取值及其相应的 α, β 和 γ 参数值为

$$
\boldsymbol{J}^2=2\hbar^2+2\hbar^2-2\hbar^2\lambda=\begin{cases}2(2+1)\hbar^2, & \alpha=\beta=-\dfrac{3}{2}\gamma\\ 1(1+1)\hbar^2, & \alpha=-\beta,\gamma=0\\ 0, & \alpha=\beta=0\end{cases}
$$

5.65　在给定的空间态中，轨道角动量平方和其第三分量的取值

题 5.65　一粒子的某一量子力学态，在直角坐标 x、y 和 z 中由归一化波函数

$$
\psi(x,y,z)=\frac{\alpha^{5/2}}{\sqrt{\pi}}z\exp\left[-\alpha(x^2+y^2+z^2)^{1/2}\right]
$$

描述. 证明系统处在一个具有确定角动量的态上，并给出该态相应的 $\boldsymbol{L}^2$ 和 L_z 的值.

解答　转换到球坐标中

$$
x=r\sin\theta\cos\varphi,\ y=r\sin\theta\sin\varphi,\ z=r\cos\theta
$$

题给波函数

$$
\psi(r,\theta,\varphi)=\frac{\alpha^{5/2}}{\sqrt{\pi}}r\cos\theta\mathrm{e}^{-\alpha r}=f(r)\mathrm{Y}_{10}
$$

波函数的角度部分与径向部分分离，其角动量性质与径向波函数无关. 角度部分的波函数为 $A\cos\theta=K\mathrm{Y}_{10}$，故该态处在 $\boldsymbol{L}^2$ 和 L_z 的共同本征态，角量子数、磁量子数分别为 1、0. 因而在该态下 $\boldsymbol{L}^2$ 和 L_z 本征值分别为

$$
2\hbar^2,\quad 0
$$

5.66　自由碳原子的电子组态

题 5.66　一个自由碳原子有 4 个成对 s 态电子，2 个 p 态电子.

(1) 考虑到 Pauli 不相容原理，这个组态共有多少种状态?

(2) 在 L-S 耦合情形，哪些量子数为好量子数? 对两个 p 波电子组态给出它们的值.

(3) 对 (2) 中的态的简并度求和，证明结果与 (1) 中得到的相同.

解答　(1) 每个电子可以占据 $(2l+1)(2s+1)=3\times 2=6$ 个状态之一，但不能有两个电子处于同一状态，故共有 $C_6^2=15$ 种状态.

(2) 好量子数为 $\boldsymbol{L}^2$, $\boldsymbol{S}^2$, $\boldsymbol{J}^2$, J_z. 由于是 L-S 耦合，总自旋量子数可取 $S=0,\ 1$; 总轨道量子数可取 $L=0,1,2$. 考虑到交换对称性，单态 $S=0$，L 应为偶数，所以 $L=0,2$ 分别对应于 ${}^1\mathrm{s}_0$，${}^1\mathrm{d}_2$. 三重态 $S=1$，L 应为奇数，所以 $L=1$，$J=0,1,2$ 即 ${}^3\mathrm{p}_{0,1,2}$.

(3) 简并度 $=2J+1$，其中 $J=0,2,0,1,2$，所以简并度总和 $=1+5+1+3+5=15$.

5.67　用带负电的全同 $S=1$ 的两粒子代替氦原子中电子求其基态简并度

题 5.67　实际氦原子的基态当然是非简并的. 但是，考虑一假想的氦原子，其中两个带负电. 全同的、自旋为 1 的两粒子代替了原来的两个电子. 对这种假想的氦原子，问其基态的简并度是多少? 给出你的理由 (忽略与自旋有关的作用).

解答　这两个新的粒子为 Bose 子，因而波函数应该是对称的.

基态时显然两个粒子应占有 1s 轨道，因而空间波函数是对称的. 这样就要求自旋波函数也是对称的. 因 $S_1=1, S_2=1$，故合成的总自旋有三种可能:

(1) $S=2$，自旋波函数对称，5 重简并;

(2) $S=1$，自旋波函数反对称，3 重简并;

(3) $S=0$，自旋波函数对称，1 重简并.

因略去与自旋有关的作用，故基态 6 重简并.

5.68　电子自旋态的测量

题 5.68　测量一个电子 (处于自由空间) 自旋的 z 分量，发现是 $\dfrac{\hbar}{2}$.

(1) 接着测量自旋的 x 分量，可能得到什么结果?

(2) 得到这些结果的概率是多少?

(3) 如果测量自旋方向的轴与 z 轴成 θ 角，各种可能值的概率是多少?

(4) 在第 (3) 小题中自旋测量期望值是多少?

解答　(1) 在 σ_z 表象中，自旋波函数为 $\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$，而 σ_x 的本征波函数为

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix},\quad \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$$

相应本征值为 $+1$，-1. 将 $\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ 对此两态展开即知测量 S_x 可能得到 $+1$，-1. 测得的期望值

$$(1,\ 0)\,S_x\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=0$$

(2) 测得 $\pm\dfrac{\hbar}{2}$ 的概率分别为

$$P_+=\left|\frac{1}{\sqrt{2}}(1,1)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\right|^2=\frac{1}{2},\quad P_-=\left|\frac{1}{\sqrt{2}}(1,-1)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\right|^2=\frac{1}{2}$$

(3) 设自旋轴为 $\boldsymbol{n}=\boldsymbol{n}(\theta,\varphi)=(\sin\theta\cos\varphi,\sin\theta\sin\varphi,\cos\theta)$，则 $\boldsymbol{s}$ 沿 $\boldsymbol{n}$ 投影 $s_n=\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{n}$ 的本征态为

$$\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi/2}\\[2ex]\sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi/2}\end{pmatrix},\quad \begin{pmatrix}-\sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi/2}\\[2ex]\cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi/2}\end{pmatrix}$$

分别相应于本征值 $\hbar/2,-\hbar/2$. 测得 $\hbar/2,-\hbar/2$ 本征值的概率分别为

$$\cos^2\frac{\theta}{2},\quad \sin^2\frac{\theta}{2}$$

(4) 期望值

$$P_+\left(+\frac{\hbar}{2}\right)-P_-\left(-\frac{\hbar}{2}\right)=\frac{\hbar}{2}\cos\theta$$

5.69　1/2 自旋系统算符 AS_y+BS_z 的本征值、本征态

题 5.69　(1) 考虑自旋为 1/2 的系统，求出算符 AS_y+BS_z 的本征值及归一化的本征波函数. 其中 S_y、S_z 是角动量算符，且 A、B 是实常数；

(2) 假定此系统处于以上算符的一个本征态上，求测量 S_y 得到结果 $\hbar/2$ 的概率.

解法一　(1) 设 $T=AS_y+BS_z$，则在 ($\boldsymbol{S}^2$、S_z) 表象中有

$$T=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}B & -\mathrm{i}A\\ \mathrm{i}A & -B\end{pmatrix}$$

设本征值为 $\lambda\dfrac{\hbar}{2}$，有

$$\det\begin{pmatrix}B-\lambda & -\mathrm{i}A\\ \mathrm{i}A & -B-\lambda\end{pmatrix}=0$$

由此解得

$$\lambda=\pm\sqrt{A^2+B^2}$$

设归一化的本征态为 $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$，满足 $|a|^2+|b|^2=1$，则由本征方程

$$\begin{pmatrix} B & -\mathrm{i}A \\ \mathrm{i}A & -B \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

可以解出如下所给的本征态：

$$|\Psi_\pm\rangle=\left[\frac{1}{A^2+\left(B\mp\sqrt{A^2+B^2}\right)^2}\right]^{1/2}\begin{pmatrix} +\mathrm{i}A \\ B\mp\sqrt{A^2+B^2} \end{pmatrix}$$

(2) 在 $(\boldsymbol{S}^2,S_z)$ 表象中 S_y 的本征态为 (见题 8.2)

$$\left|S_y=\pm\frac{\hbar}{2}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ \pm\mathrm{i} \end{pmatrix}$$

故在算符 AS_y+BS_x 的本征态 $|\Psi_\pm\rangle$ 下发现 $S_y=\dfrac{\hbar}{2}$ 的概率幅为

$$\langle S_y=\frac{\hbar}{2}|\Psi_\pm\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}\sqrt{A^2+\left(B\mp\sqrt{A^2+B^2}\right)^2}}\left(\mathrm{i}A-\mathrm{i}B\pm\mathrm{i}\sqrt{A^2+B^2}\right)$$

相应概率为

$$\begin{aligned} P_\pm &= \left|\langle S_y=\frac{\hbar}{2}|\Psi_\pm\rangle\right|^2=\frac{1}{2}\frac{1}{A^2+\left(B\mp\sqrt{A^2+B^2}\right)^2}\left(B\mp\sqrt{A^2+B^2}-A\right)^2 \\ &= \frac{\sqrt{A^2+B^2}\pm A}{2\sqrt{A^2+B^2}} \end{aligned}$$

其中，$P_\pm$ 是分别当系统处在 $T=\pm\dfrac{\hbar}{2}\sqrt{A^2+B^2}$ 时的概率.

解法二　(1) 可将 $T=AS_y+BS_z$ 写为

$$T=\sqrt{A^2+B^2}\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}$$

的形式，其中 $\boldsymbol{n}=\dfrac{A}{\sqrt{A^2+B^2}}\boldsymbol{e}_y+\dfrac{B}{\sqrt{A^2+B^2}}\boldsymbol{e}_z$，其方位角 (θ,φ) 由

$$\cos\theta=\frac{B}{\sqrt{A^2+B^2}},\quad \sin\theta=\frac{A}{\sqrt{A^2+B^2}},\quad \varphi=\frac{\pi}{2}$$

给出. 按题 8.3 直接写出 $T=\dfrac{\hbar}{2}\sqrt{A^2+B^2}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}$ 的本征态如下:

$$|\Psi_+\rangle = \begin{pmatrix} \cos\dfrac{\theta}{2} \\ \sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\dfrac{\theta}{2} \\ \mathrm{i}\sin\dfrac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

$$|\Psi_-\rangle = \begin{pmatrix} \sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} \\ -\cos\dfrac{\theta}{2} \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} \mathrm{i}\sin\dfrac{\theta}{2} \\ \cos\dfrac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

其本征值分别为 $\pm\dfrac{\hbar}{2}\sqrt{A^2+B^2}$.

(2) 在 $(\boldsymbol{S}^2,S_z)$ 表象中 S_y 的本征态为 (见题 8.2)

$$\left|S_y=\frac{\hbar}{2}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ \mathrm{i}\end{pmatrix}$$

在算符 AS_y+BS_x 的本征态 $|\Psi_+\rangle$ 下发现 $S_y=\dfrac{\hbar}{2}$ 的概率幅为

$$\langle S_y=\frac{\hbar}{2}|\Psi_+\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(1,-\mathrm{i})\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\\ \mathrm{i}\sin\dfrac{\theta}{2}\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\cos\frac{\theta}{2}+\sin\frac{\theta}{2}\right)$$

相应概率为

$$P_+=\left|\langle S_y=\frac{\hbar}{2}|\Psi_+\rangle\right|^2=\frac{1+\sin\theta}{2}=\frac{\sqrt{A^2+B^2}+A}{2\sqrt{A^2+B^2}}$$

同理可得

$$P_-=\left|\langle S_y=\frac{\hbar}{2}|\Psi_-\rangle\right|^2=\frac{\sqrt{A^2+B^2}-A}{2\sqrt{A^2+B^2}}$$

说明　T 的本征值也可如下给出: 设

$$T=AS_y+BS_x=A\frac{1}{2}\hbar\sigma_y+B\frac{1}{2}\hbar\sigma_z$$

利用 $\{\sigma_i,\sigma_j\}=2\delta_{ij}$, 即有

$$T^2=\frac{1}{4}\hbar^2\left(A^2+B^2+AB\{\sigma_y,\sigma_z\}\right)=\frac{1}{4}\hbar^2\left(A^2+B^2\right)$$

由此得 T 的两个本征值为

$$T=\pm\frac{\hbar}{2}\sqrt{A^2+B^2}$$

另本题也可以在 S_y 表象中求解.

5.70　一个自旋为 1 的粒子 $H=AS_z+BS_x^2$ 的能级

题 5.70　一个自旋为 1 的粒子的 Hamilton 量为 $H=AS_z+BS_x^2$，其中 A 和 B 是常数，求系统的能级. 如果 $t=0$ 时，粒子处于自旋 $S_z=+\hbar$ 的本征态上，求此后 t 时刻粒子自旋的期望值.

解答　在 S_z 表象中，S_x、S_y 与 S_z 可表示为

$$S_x=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix},\quad S_y=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}&0\\\mathrm{i}&0&-\mathrm{i}\\0&\mathrm{i}&0\end{pmatrix},\quad S_z=\hbar\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix} \tag{5.284}$$

从而

$$S_x^2=\frac{\hbar^2}{2}\begin{pmatrix}1&0&1\\0&2&0\\1&0&1\end{pmatrix}$$

据此将题给 Hamilton 量写为

$$H=AS_z+BS_x^2=\begin{pmatrix}A\hbar+B\hbar^2/2&0&B\hbar^2/2\\0&B\hbar^2&0\\B\hbar^2/2&0&-A\hbar+B\hbar^2/2\end{pmatrix} \tag{5.285}$$

定态 Schrödinger 方程 $H\psi=E\psi$ 表示为

$$\begin{pmatrix}A\hbar+B\hbar^2/2&0&B\hbar^2/2\\0&B\hbar^2&0\\B\hbar^2/2&0&-A\hbar+B\hbar^2/2\end{pmatrix}=E\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix} \tag{5.286}$$

令 $A'=A\hbar$, $B'=B\hbar^2/2$，得到能量本征值 E 满足的久期方程为

$$\begin{vmatrix}A'+B'-E&0&B'\\0&2B'-E&0\\B'&0&-A'+B'-E\end{vmatrix}=0 \tag{5.287}$$

也就是

$$(A'+B'-E)(2B'-E)(-A'+B'-E)-B'^2(2B'-E)=0 \tag{5.288}$$

也即 $(2B'-E)[(B'-E)2-A'^2-B'^2]=0$，解得能量本征值

$$E_1=2B',\quad E_{2,3}=B'\pm\sqrt{A'^2+B'^2}=B'\pm\lambda \tag{5.289}$$

其中，$\lambda=\sqrt{A'^2+B'^2}$，令 $\lambda=\hbar\omega$. 把这 3 个能量本征值分别代入式 (5.286)求解，相应的归一化本征态可取为

$$\begin{cases} |\psi_1\rangle=\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix} \\ |\psi_2\rangle=\dfrac{|B'|}{\sqrt{B'^2+(\lambda-A')^2}}\begin{pmatrix}1\\0\\\dfrac{\lambda-A'}{B'}\end{pmatrix} \\ |\psi_3\rangle=\dfrac{|B'|}{\sqrt{B'^2+(\lambda+A')^2}}\begin{pmatrix}1\\0\\\dfrac{\lambda+A'}{-B'}\end{pmatrix} \end{cases} \tag{5.290}$$

用上述 3 个本征态展开题给粒子初态，

$$|\psi(0)\rangle=C_1|\psi_1\rangle+C_2|\psi_2\rangle+C_3|\psi_3\rangle$$

利用 $|\psi_1\rangle$、$|\psi_2\rangle$ 与 $|\psi_3\rangle$ 的正交归一性，$C_i=\langle\psi_1|\psi(0)\rangle(i=1,2,3)$，这给出

$$C_1=0,\quad C_2=\frac{|B'|}{\sqrt{B'^2+(\lambda-A')^2}},\quad C_3=\frac{|B'|}{\sqrt{B'^2+(\lambda+A')^2}}$$

粒子 t 时刻的态

$$\begin{aligned}|\psi(t)\rangle&=C_1\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_1t}|\psi_1\rangle+C_2\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_2t}|\psi_1\rangle+C_3\psi_3\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_3t}\\&=\frac{B'^2}{B'^2+(\lambda-A')^2}\begin{pmatrix}1\\0\\\dfrac{\lambda-A'}{B'}\end{pmatrix}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_2t}+\frac{B'^2}{B'^2+(\lambda+A')^2}\begin{pmatrix}1\\0\\\dfrac{\lambda+A'}{-B'}\end{pmatrix}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_3t}\end{aligned} \tag{5.291}$$

为了计算自旋的期望值，把上式的态表示为

$$|\psi(t)\rangle=\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_2t}\left\{\left[\frac{1}{B'^2+(\lambda-A')^2}+\frac{1}{B'^2+(\lambda+A')^2}\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\omega t}\right]B'^2|1,1\rangle\right.$$

$$+\left[\frac{\lambda-A'}{B'^2+(\lambda-A')^2}-\frac{\lambda+A'}{B'^2+(\lambda+A')^2}\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\omega t}\right]B'|1,-1\rangle\Bigg\} \tag{5.292}$$

其中，$|1,1\rangle$、$|1,-1\rangle$ 分别为 S_z 的本征值分别为 $\hbar$、$-\hbar$ 的归一化本征态，而 $\omega=\lambda/\hbar$. 在 S_z 的本征态，S_x、S_y 的期望值为零；而 S_x、S_y 作用到 S_z 的本征态使得 S_z 的本征值加 $\hbar$ 或者减 $\hbar$，因而 $\langle 1,1|S_x|1,-1\rangle=\langle 1,-1|S_x|1,1\rangle=0$ 以及 $\langle 1,1|S_y|1,-1\rangle=\langle 1,-1|S_y|1,1\rangle=0$. 由此给出在 $|\psi(t)\rangle$ 态下 S_x、S_y 的期望值为

$$\langle S_x\rangle=0,\quad \langle S_y\rangle=0 \tag{5.293}$$

而 S_z 的期望值如下给出：

$$\begin{aligned}
\langle S_z\rangle/\hbar=&\left|\frac{1}{B'^2+(\lambda-A')^2}+\frac{1}{B'^2+(\lambda+A')^2}\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\omega t}\right|^2B'^4\\
&-\left|\frac{\lambda-A'}{B'^2+(\lambda-A')^2}-\frac{\lambda+A'}{B'^2+(\lambda+A')^2}\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\omega t}\right|B'^2\\
=&\frac{B'^4}{\left[B'^2+(\lambda-A')^2\right]^2}+\frac{B'^4}{\left[B'^2+(\lambda+A')^2\right]^2}+\frac{2B'^4\cos 2\omega t}{\left[B'^2+(\lambda-A')^2\right]\left[B'^2+(\lambda+A')^2\right]}\\
&-\frac{B'^2(\lambda-A')^2}{\left[B'^2+(\lambda-A')^2\right]^2}-\frac{B'^2(\lambda+A')^2}{\left[B'^2+(\lambda+A')^2\right]^2}+\frac{2B'^2\left(\lambda^2-A'^2\right)\cos 2\omega t}{\left[B'^2+(\lambda-A')^2\right]\left[B'^2+(\lambda+A')^2\right]}
\end{aligned} \tag{5.294}$$

按式 (5.289)定义的 λ，$\lambda^2-A'^2=B'^2$. 而

$$\begin{aligned}
&\left[B'^2+(\lambda-A')^2\right]\left[B'^2+(\lambda+A')^2\right]\\
=&\ B'^4+\left(\lambda^2-A'^2\right)^2+\left(2\lambda^2+2A'^2\right)B'^2\\
=&\ 2B'^4+\left(2\lambda^2+2A'^2\right)B'^2\\
=&\ \left(2\lambda^2+2A'^2+2B'^2\right)B'^2=4\lambda^2B'^2
\end{aligned}$$

因而式 (5.294)中含 $\cos 2\omega t$ 的项系数为 $\dfrac{B'^2}{\lambda^2}$；剩下不含 $\cos 2\omega t$ 的常数项中，其分母为 $\left(4\lambda^2B'^2\right)^2$，而其分子为

$$\begin{aligned}
&B'^2\left[B'^2-(\lambda-A')^2\right]\left[B'^2+(\lambda+A')^2\right]^2+B'^2\left[B'^2-(\lambda+A')^2\right]\left[B'^2+(\lambda-A')^2\right]^2\\
=&B'^2\left[B'^4-\left(\lambda^2-A'^2\right)^2+B'^2\left[(\lambda+A')^2-(\lambda-A')^2\right]\right]\left[B'^2+(\lambda+A')^2\right]\\
&+B'^2\left[B'^4-\left(\lambda^2-A'^2\right)^2-B'^2\left[(\lambda+A')^2-(\lambda-A')^2\right]\right]\left[B'^2+(\lambda+A')^2\right]\\
=&4\lambda A'B'^4\left[B'^2+(\lambda+A')^2\right]-4\lambda A'B'^4\left[B'^2+(\lambda-A')^2\right]
\end{aligned}$$

$$=16\lambda^2 A'^2 B'^4$$

综上给出式 (5.294)的结果为

$$\frac{1}{\hbar}\langle S_z\rangle = \frac{A'^2}{\lambda^2} + \frac{B'^2}{\lambda^2}\cos 2\omega t = 1 - 2\frac{B'^2}{\lambda^2}\sin^2\omega t \tag{5.295}$$

其中用了 λ 的定义式 (5.289). 按参量 A' 与 B' 在式 (5.289)前的定义，上式用题给参量表示为

$$\langle S_z\rangle = \left[1 - \frac{B^2\hbar^2}{2\left(A^2 + B^2\hbar^2/4\right)}\sin^2\left(\sqrt{A^2 + B^2\hbar^2/4}\,t\right)\right]\hbar \tag{5.295'}$$

另式 (5.293)已给出 $\langle S_x\rangle = \langle S_y\rangle = 0$.

说明　此题在“张永德，量子菜根谭——量子理论专题分析，第 3 版，北京：清华大学出版社，2016 年”也给出了解答和讨论，见该书 §8，P.71-75.

5.71　两个自旋 1/2 粒子体系的能级

题 5.71　两个自旋 $\frac{1}{2}$ 的粒子组成的系统由等效 Hamilton 量

$$H = A(S_{1z} + S_{2z}) + B\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2$$

描述，其中 $\boldsymbol{S}_1$、$\boldsymbol{S}_2$ 是两个自旋，S_{1z}、S_{2z} 是它们的 z 分量，A 和 B 为常数. 求该 Hamilton 量的所有能级.

解答　若令

$$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{S}_1 + \boldsymbol{S}_2 \tag{5.296}$$

则有

$$\boldsymbol{S}^2 = (\boldsymbol{S}_1 + \boldsymbol{S}_2)^2 = \boldsymbol{S}_1^2 + \boldsymbol{S}_2^2 + 2\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2 = 2\times\frac{3}{4}\hbar^2 + 2\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2 \tag{5.297}$$

系统 Hamilton 量为

$$H = AS_z + \frac{B}{2}\left(\boldsymbol{S}^2 - \frac{3}{2}\hbar^2\right)$$

因此力学量完全集 (CSCO) 可以选为 $\boldsymbol{S}^2$、S_z. 其本征态即为已知的两 1/2 自旋耦合的自旋单态与三重态，将相应能量一并列表如下：

本征态	S	M_S	H
χ_{11}	1	1	$A\hbar + \frac{B}{4}\hbar^2$
χ_{10}	1	0	$\frac{B}{4}\hbar^2$
$\chi_{1,-1}$	1	-1	$-A\hbar + \frac{B}{4}\hbar^2$
χ_{00}	0	0	$-\frac{3B}{4}\hbar^2$

5.72　激发态原子二次发射的光子之间的关系

题 5.72　假定开始时原子处于 $^1s_0$ 激发态 (图 5.2(a))，通过发射一个光子 γ_1(图 5.2(b)) 衰变到较低的 $^1p_1$ 态. $^1p_1$ 态寿命较短，很快发射第二个光子 γ_2(图 5.2(c)) 而进入基态 $^1s_0$. 用 θ 表示所发射的两个光子间夹角.

(1) 对于此过程，不同 θ 的相对概率为何?

(2) 求两个光子圆偏振方向相同与相反的概率比.

$(d^1_{m'm})$ 矩阵，即联系转动前后两个坐标系中的两角动量表象之间的转动矩阵，如下所示 (知道它也许有所帮助)：

m \ m'	$m=1$	$m=0$	$m=-1$
$m'=1$	$\frac{1+\cos\theta}{2}$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta$	$\frac{1-\cos\theta}{2}$
$m'=0$	$\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta$	$\cos\theta$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta$
$m'=-1$	$\frac{1-\cos\theta}{2}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta$	$\frac{1+\cos\theta}{2}$

$= (d^1_{m'm})$

θ 是转动前 z 轴与转动后 z' 轴间夹角.

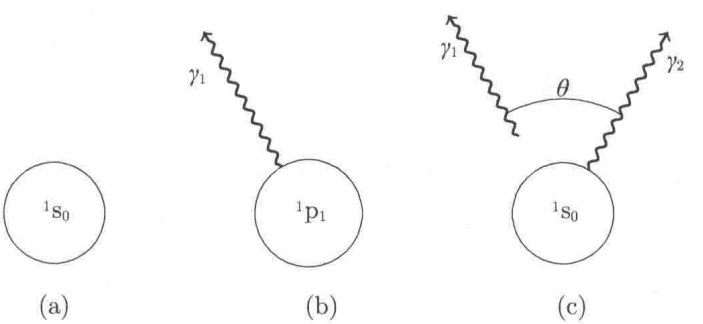


图 5.2　激发态原子二次发射的光子之间的关系

解答　初始时刻原子处于激发 $^1s_0$ 态，故原子角动量在任意 z 方向投影 L_z. 发射一个光子后，若取发射方向为 z 方向，对光子有 $L_z=\pm\hbar$. 相应地，处于 $^1p_1$ 态的原子 $L_z=\mp\hbar$，即 $m_z=\mp$. 若取第二个光子发射方向为 z' 方向. z 方向的角动量分量本征态投影到 z' 方向相当于将原态乘上一个 $d^{(1)}$ 矩阵. 而只有 $m_z=\mp$ 才可能在 z' 方向发射 $L_{z'}=\pm\hbar$ 的光子并使原子进入 $^1s_0$ 态 $(m'_z=\mp)$. 令

$$C_1 = \langle m'_z=-1|\,d^{(1)}\,|m_z=+1\rangle$$

$$
\begin{aligned}
&= (0,0,1)\begin{pmatrix} \dfrac{1+\cos\theta}{2} & -\dfrac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta & \dfrac{1-\cos\theta}{2} \\ \dfrac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta & \cos\theta & -\dfrac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta \\ \dfrac{1-\cos\theta}{2} & \dfrac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta & \dfrac{1+\cos\theta}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1-\cos\theta}{2} \\
C_2 &= \langle m_z'=+1|\, d^{(1)}\, |m_z=+1\rangle \\
&= (1,0,0)\begin{pmatrix} \dfrac{1+\cos\theta}{2} & -\dfrac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta & \dfrac{1-\cos\theta}{2} \\ \dfrac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta & \cos\theta & -\dfrac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta \\ \dfrac{1-\cos\theta}{2} & \dfrac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta & \dfrac{1+\cos\theta}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1+\cos\theta}{2} \\
C_3 &= \langle m_z'=+1|\, d^{(1)}\, |m_z=-1\rangle = \frac{1-\cos\theta}{2} \\
C_4 &= \langle m_z'=-1|\, d^{(1)}\, |m_z=+1\rangle = \frac{1+\cos\theta}{2}
\end{aligned}
$$

不同 θ 的相对概率为

$$P(\theta) \propto \left(|C_1|^2+|C_2|^2+|C_3|^2+|C_4|^2\right) = 1+\cos^2\theta$$

归一化得

$$P(\theta) = \sqrt{\frac{2}{3\pi}}(1+\cos^2\theta)$$

5.73　磁场中电子的自旋态

题 5.73　设有处于沿 z 轴正方向均匀恒定外磁场中的一个电子，测量表明，在 $t=0$ 时电子自旋沿 x 轴正向. 用 Ehrenfest 定理计算 $t>0$ 时电子处于

$$(1)\langle S_x\rangle = \frac{1}{2};\ (2)\langle S_x\rangle = -\frac{1}{2};\ (3)\langle S_y\rangle = \frac{1}{2};\ (4)\langle S_y\rangle = -\frac{1}{2};\ (5)\langle S_z\rangle = \frac{1}{2};\ (6)\langle S_z\rangle = -\frac{1}{2}$$

的概率.

解答　在经典图像中，自旋绕磁场方向运动. Ehrenfest 定理是说

$$\frac{\mathrm{d}\langle \boldsymbol{S}\rangle}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{\omega}\times\langle \boldsymbol{S}\rangle$$

式中，$\boldsymbol{\omega} = \dfrac{e\boldsymbol{B}}{\hbar mc}$，推导可如下进行：

$$\frac{\mathrm{d}\langle \boldsymbol{S}\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[H,\boldsymbol{S}]}$$

均匀恒定外磁场中自旋运动的 Hamilton 量为

$$H = g \cdot \frac{e}{2mc} \boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{B} = \frac{e}{mc} S_z B$$

所以

$$\frac{\mathrm{d}\langle \boldsymbol{S} \rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{eB}{\mathrm{i}\hbar mc} \overline{[S_z, \boldsymbol{S}]} = \frac{eB}{mc} [S_y \boldsymbol{e}_x - S_x \boldsymbol{e}_y] = \frac{e\boldsymbol{B}}{mc} \times \langle \boldsymbol{S} \rangle$$

式中，$\boldsymbol{e}_x$, $\boldsymbol{e}_y$ 为 x,y 方向的单位矢量. 这个方程满足初始条件 $t = 0$ 时 $\langle S_z \rangle = 0$, $\langle S_x \rangle = \dfrac{1}{2}$, $\langle S_y \rangle = 0$ 的解为

$$\langle S_z \rangle = 0, \quad \langle S_x \rangle = \frac{1}{2} \cos \omega t, \quad \langle S_y \rangle = \frac{1}{2} \sin \omega t$$

设时刻 t 时电子处于 $\langle S_x \rangle = \dfrac{1}{2}$ 的概率为 p，处于 $\langle S_x \rangle = -\dfrac{1}{2}$ 的概率则为 $1-p$，故有

$$\frac{1}{2} p - \frac{1}{2}(1-p) = \frac{1}{2} \cos \omega t$$

由此得 t 时电子处于 $\langle S_x \rangle = \dfrac{1}{2}$ 和 $\langle S_x \rangle = -\dfrac{1}{2}$ 的概率分别为

$$p = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos \omega t = \cos^2 \frac{\omega t}{2}, \quad 1 - p = \sin^2 \frac{\omega t}{2}$$

采取同样的办法，求得 t 时电子处于 $\langle S_y \rangle = \dfrac{1}{2}$ 和 $\langle S_y \rangle = -\dfrac{1}{2}$ 的概率分别为

$$\cos^2 \left(\frac{\omega t}{2} + \frac{\pi}{4} \right), \quad \sin^2 \left(\frac{\omega t}{2} + \frac{\pi}{4} \right)$$

处于 $\langle S_z \rangle = \dfrac{1}{2}$ 和 $\langle S_z \rangle = -\dfrac{1}{2}$ 的概率分别为

$$\frac{1}{2}, \quad \frac{1}{2}$$

5.74　磁场中自旋 1/2 粒子的自旋态

题 5.74　一具有磁矩自旋 $\dfrac{1}{2}$ 粒子放于沿 x 轴方向的均匀恒定外磁场中. 在 $t = 0$ 时，发现粒子具有 $S_x = \dfrac{1}{2}$. 求在以后任意时刻发现具有 $S_y = \pm \dfrac{1}{2}$ 粒子的概率.

解答　粒子自旋运动的 Hamilton 量为

$$H = -\mu_0 \boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{B} = -\frac{1}{2} \mu_0 \sigma_x B$$

取 σ_z 表象，自旋波函数所满足的 Schrödinger 方程为

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \mu_0 B \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = 0$$

或者

$$\begin{cases} \mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}a_1}{\mathrm{d}t}+\dfrac{1}{2}\mu_0 B a_2=0 \\ \mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}a_2}{\mathrm{d}t}+\dfrac{1}{2}\mu_0 B a_1=0 \end{cases}$$

因此

$$\frac{\mathrm{d}^2 a_{1,2}}{\mathrm{d}t^2}+\left(\frac{\mu_0 B}{2\hbar}\right)^2 a_{1,2}=0$$

若令

$$\omega=\frac{\mu_0 B}{2\hbar}$$

上面方程的解为

$$a_{1,2}=A_{1,2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}+B_{1,2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$$

初始条件：$a_1(0)=1,\ a_2(0)=0$，从而

$$\frac{\mathrm{d}a_1}{\mathrm{d}t}(0)=0,\qquad \frac{\mathrm{d}a_2}{\mathrm{d}t}(0)=\mathrm{i}\frac{\mu_0 B}{2\hbar}=\mathrm{i}\omega$$

因此

$$\begin{cases} A_1+B_1=1, \quad A_2+B_2=0 \\ \omega(A_1-B_1)=0, \quad \omega(A_2-B_2)=\omega \end{cases}$$

解得

$$\begin{cases} A_1=\dfrac{1}{2}, & A_2=\dfrac{1}{2} \\ B_1=\dfrac{1}{2}, & B_2=-\dfrac{1}{2} \end{cases}$$

所以

$$\begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \cos\omega t \\ \mathrm{i}\sin\omega t \end{pmatrix}$$

$S_y=\dfrac{1}{2}$ 的本征态为

$$|S_y(+)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ \mathrm{i} \end{pmatrix}$$

$S_y=-\dfrac{1}{2}$ 的本征态为

$$|S_y(-)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -\mathrm{i} \end{pmatrix}$$

于是测得 $S_y=\dfrac{1}{2}$ 的概率为

$$P(+)=|\langle S_y(+)|\psi(t)\rangle|^2=\left|\frac{1}{\sqrt{2}}(1,-\mathrm{i})\begin{pmatrix} \cos\omega t \\ \mathrm{i}\sin\omega t \end{pmatrix}\right|^2=\frac{1}{2}(1+\sin 2\omega t)$$

$S_y=-\dfrac{1}{2}$ 的概率为

$$P(-)=|\langle S_y(-)|\psi(t)\rangle|^2=\frac{1}{2}(1-\sin 2\omega t)$$

5.75　磁场中自旋 1/2 粒子的自旋随时间变化

题 5.75　在外磁场中一个自旋 $\dfrac{1}{2}$ 带电 e 的粒子自旋运动的 Hamilton 量为 $H=-\mu_0\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B}$. 计算算符 $\dfrac{\mathrm{d}\boldsymbol{S}}{\mathrm{d}t}$. 设 $\boldsymbol{B}=B\boldsymbol{e}_y$，$S_z(t)$ 的矩阵形式是什么?

解答　在 Heisenberg 表象中

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{S}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{S},H]=\frac{-ge}{\mathrm{i}2m\hbar c}[\boldsymbol{S},\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B}]$$

因此

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{S}}{\mathrm{d}t}=\frac{ge}{2mc}\boldsymbol{S}\times\boldsymbol{B}$$

若 $\boldsymbol{B}=B\boldsymbol{e}_y$，则

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}S_z(t)=\frac{geB}{2mc}S_x(t) \tag{5.298}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}S_x(t)=-\frac{geB}{2mc}S_z(t) \tag{5.299}$$

从而

$$S_z(t)=c_1\cos(g\omega t)+c_2\sin(g\omega t)$$

式中，$\omega=\dfrac{eB}{2mc}$ 为 Larmor 频率. 由初始条件得

$$S_z(0)=c_1,\qquad S_z'(0)=c_2g\omega=g\omega S_x(0)$$

因此

$$S_z(t)=S_z(0)\cos\left(\frac{geB}{2mc}t\right)+S_x(0)\sin\left(\frac{geB}{2mc}t\right)$$

这样在 $(\boldsymbol{S}^2,S_z)$ 表象，$S_z(t)$ 的矩阵为

$$S_z(t)=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\cos(g\omega t) & \sin(g\omega t)\\ \sin(g\omega t) & -\cos(g\omega t)\end{pmatrix}$$

其中，$\omega=\dfrac{eB}{2mc}$ 为 Lamor 频率.

5.76　$H=-J\left[\sigma_x^{(1)}\sigma_x^{(2)}+\sigma_y^{(1)}\sigma_y^{(2)}\right]$ 时极化矢量与投影算子的关系

题 5.76　两个电子被紧紧地束缚在某种固体的不同的邻近位置上. 这样，它们就是可分辨的且可用它们各自的 Pauli 自旋矩阵 $\boldsymbol{\sigma}^{(1)}$ 和 $\boldsymbol{\sigma}^{(2)}$ 描述. 它们的 Hamilton 量为

$$H=-J\left[\sigma_x^{(1)}\sigma_x^{(2)}+\sigma_y^{(1)}\sigma_y^{(2)}\right]$$

其中，J 是一常数.

(1) 这个系统有多少个能级? 能量是多少? 各能级的简并度是多少?

(2) 现在 z 方向上加上一个磁场. 求出新的能级、画出作为磁感应强度大小 B 函数的能级图.

解答　(1) 系统 Hamilton 量可表示为

$$\begin{aligned}
H &= -J\left[\sigma_x^{(1)}\sigma_x^{(2)}+\sigma_y^{(1)}\sigma_y^{(2)}\right] \\
&= -J\left[\frac{\left(\boldsymbol{\sigma}^{(1)}+\boldsymbol{\sigma}^{(2)}\right)^2-\boldsymbol{\sigma}^{(1)2}-\boldsymbol{\sigma}^{(2)2}}{2}-\frac{\left(\sigma_z^{(1)}+\sigma_z^{(2)}\right)^2-\sigma_z^{(1)2}-\sigma_z^{(2)2}}{2}\right] \\
&= -J\left[\frac{\left(\boldsymbol{\sigma}^{(1)}+\boldsymbol{\sigma}^{(2)}\right)^2-3-3}{2}-\frac{\left(\sigma_z^{(1)}+\sigma_z^{(2)}\right)^2-1-1}{2}\right] \\
&= -J\left[\frac{\left(\boldsymbol{\sigma}^{(1)}+\boldsymbol{\sigma}^{(2)}\right)^2-\left(\sigma_z^{(1)}+\sigma_z^{(2)}\right)^2}{2}-2\right]
\end{aligned}$$

系统总自旋 $S=\boldsymbol{S}^{(1)}+\boldsymbol{S}^{(2)}=\dfrac{\hbar}{2}(\boldsymbol{\sigma}^{(1)}+\boldsymbol{\sigma}^{(2)})$，$S_z=S_z^{(1)}+S_z^{(2)}=\dfrac{\hbar}{2}(\sigma_z^{(1)}+\sigma_z^{(2)})$，$\boldsymbol{S}^2$, S_z 与 H 相互对易. 由角动量耦合理论可知共出现以下情况 ($\boldsymbol{S}^2$ 的本征值为 $s(s+1)\hbar^2$)：

S	M_S	相应态数	相应能量
1	1	1	1
	0	2	$-2J$
	-1	1	1
0	0	2	$2J$

其中第二、四行情况与两电子不可区分情况有区别. 所以

$$H=-2J\left[s(s+1)-s_z^2-1\right]$$

因此这个系统有三个能级. 每个能级的能量分别为 $2J$, 0, $-2J$，各能级的简并度都是 2.

(2) 此时

$$H=-J\left[\sigma_x^{(1)}\sigma_x^{(2)}+\sigma_y^{(1)}\sigma_y^{(2)}\right]-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}$$

式中

$$\mu=\frac{-e}{mc}\boldsymbol{S},\quad B=B\boldsymbol{e}_z$$

$-e$ 为电子电荷. 所以

$$\begin{aligned}H&=-J\left[\sigma_x^{(1)}\sigma_x^{(2)}+\sigma_y^{(1)}\sigma_y^{(2)}\right]+\frac{e}{mc}S_zB\\&=-2J\left[s(s+1)-s_z^2-1\right]+\frac{eB}{mc}s_z\end{aligned}$$

此时 $\boldsymbol{S}^2$, S_z 与 H 仍可对易. 新的能级为

$$2J,\ \frac{eB}{mc}\hbar,\ -\frac{eB}{mc}\hbar,\ -2J$$

作为磁感应强度大小 B 函数的能级图如图 5.3 所示.

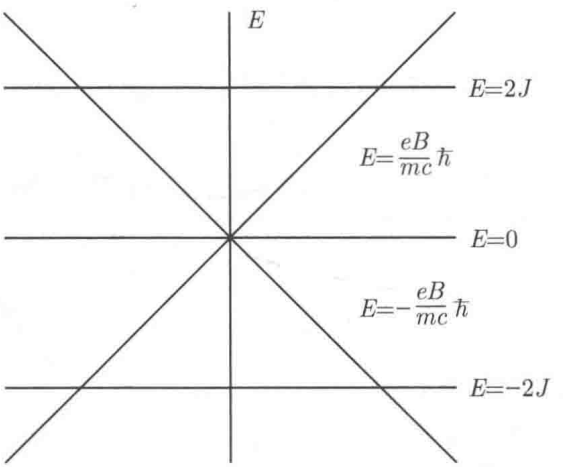


图 5.3　作为磁感应强度大小 B 函数的能级图

5.77　自由碳原子存在 L-S 精细结构耦合时，各可能态的 S, L, J 值及重数

题 5.77　一自由碳原子有 4 个成对 s 电子，2 个 p 电子. 假定存在 L-S 精细结构耦合，就是说 $\boldsymbol{S}^2$, $\boldsymbol{L}^2$ 和 $\boldsymbol{J}^2$ 是守恒量.

(1) 列表示各可能态的 S, L, J 值，指出相应的重数；

(2) 哪一个态具有最低能量？给出理由.

解答　(1) 碳原子有两个 1s 电子，两个 2s 电子，分别形成闭壳层. 于是原子态由两个 2p 电子组合决定. 因为是 L-S 耦合，$l_1=1$, $l_2=1$，可得

$$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{l}_1+\boldsymbol{l}_2\Rightarrow L=0,1,2$$

$$\boldsymbol{S}=\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2\Rightarrow S=0,1$$

考虑到 Pauli 不相容原理及总波函数反对称要求，可得下表.

各可能态的 S, L, J 值和相应的重数

L	S	J	$^{2S+1}L_J$	重数
0	0	0	$^1\mathrm{s}_0$	1
1	1	2	$^3\mathrm{p}_2$	
1	1	1	$^3\mathrm{p}_1$	3
1	1	0	$^3\mathrm{p}_0$	
2	0	2	$^1\mathrm{d}_2$	1

(2) 根据 Hund 规则，$^3\mathrm{p}_0$ 态能量最低.

5.78　$\pi^- + \mathrm{d} \to \mathrm{n} + \mathrm{n}$，中子对的轨道和总角动量

题 5.78　一个 π^- 介子 (赝标粒子：自旋为零，奇宇称) 最初被束缚在氘核周围，并处在最低的库仑能态上. 它被氘核 (一质子及一中子处于 $^3\mathrm{s}_1$ 态中) 俘获，并使氘核转变成为一对中子

$$\pi^- + \mathrm{d} \longrightarrow \mathrm{n} + \mathrm{n}$$

(1) 中子对轨道角动量是多少?

(2) 中子对的总自旋角动量是多少?

(3) 发现两个中子的自旋均与氘核的自旋相反的概率是多少?

(4) 如果氘核的自旋在最初全部指向 $\hat{R}$ 方向，发现自旋反向的中子的发射概率 (单位立体角) 的角分布是多少 (题图 5.4)?

你将发现前几个球谐函数是有用的 (没有归一化)：

$$\mathrm{Y}_{00} = 1; \quad \mathrm{Y}_{10} = \cos\theta; \quad \mathrm{Y}_{1,\pm1} = \mp\sin\theta \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}\varphi}; \quad \mathrm{Y}_{2,\pm1} = \mp\sin 2\theta \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}\varphi} \tag{5.300}$$

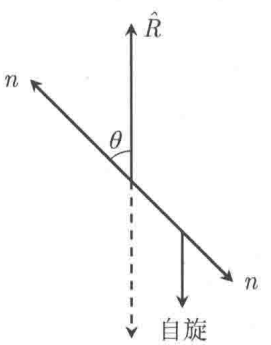


图 5.4　$\pi^- + \mathrm{d} \longrightarrow \mathrm{n} + \mathrm{n}$ 的中子发射方向与氘核的自旋

解答　(1)，(2) 反应前后宇称守恒，有

$$p(\pi^-)p(\mathrm{d})(-1)^{L_1}=p(\mathrm{n})p(\mathrm{n})(-1)^{L_2}$$

L_1,L_2 分别是 $\pi^-+\mathrm{d}$ 及 $\mathrm{n}+\mathrm{n}$ 的轨道角动量. 但反应前 π^- 是在库仑势的最低能态中，$L_1=0$，且已知：$p(\pi^-)=-1$, $p(\mathrm{d})=1$. 有

$$(-1)^{L_2}=-1,\quad L_2=2k+1,\quad k=0,1,2,\cdots$$

反应前后角动量守恒. 反应前 $J=1$，所以反应后有

$$\boldsymbol{L}_2+\boldsymbol{S}=\boldsymbol{J}$$

n 与 n 的全同性要求总波函数反对称，现在空间波函数反对称，所以自旋函数必须对称，即 $S=1$，所以 $J=2,1,0$. 但 $L_2=2k+1(k=0,1,2,\cdots)$，所以 $L_2=1$.

(3) 设反应前氘核子方向 $J_z=1\hbar$，若中子对全部反向 $S_z=-1\hbar$，那么 $L_z=1\hbar$，这是不可能的，因为 $L_2=1$，所以概率为 0.

(4) 初始态为 $|J,J_z\rangle=|1,1\rangle$，将其转用非耦合表象基矢展开

$$L=1,\quad S=1,\quad |L,L_z,S,S_z\rangle$$

从而有

$$|1,1\rangle=\frac{\sqrt{2}}{2}|1,0,1,1\rangle+\frac{\sqrt{2}}{2}|1,1,1,0\rangle$$

而其中

$$|1,1,1,0\rangle=\mathrm{Y}_{11}(\theta,\varphi)|1,0\rangle=-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\cdot\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}|1,0\rangle$$

此态中 $S_z=0$，显然有一个中子的 $S_{iz}=\hbar/2$，所以发现的概率为

$$\frac{\mathrm{d}p(\theta,\phi)}{\mathrm{d}\Omega}=\frac{1}{2}\frac{3}{8\pi}\sin^2\theta=\frac{3}{16\pi}\sin^2\theta$$

5.79　$\Omega^-\longrightarrow\Lambda+\mathrm{K}^-$ 中的角动量问题

题 5.79　一个 Ω^- 超子 (自旋 $\dfrac{3}{2}$，质量 $1672\mathrm{MeV}/c^2$，内禀宇称为 $+$) 可通过弱作用衰变为一个 Λ 超子 (自旋 $\dfrac{1}{2}$，质量 $1116\mathrm{MeV}/c^2$，内禀宇称为 $+$) 和一个 K^- 介子 (自旋 0，质量 $494\mathrm{MeV}/c^2$，内禀宇称为 $-$) 即

$$\Omega^-\longrightarrow\Lambda+\mathrm{K}^-$$

(1) 当 Ω^- 角动量 z 分量具有最大可能值时，即初态 $\left|\Omega_j^m\right\rangle=\left|\Omega_{3/2}^{+3/2}\right\rangle$，求 K^- 介子关于 Ω^- 自旋方向角分布的最一般形式 (设反应前 Ω^- 静止)；

(2) 如果衰变过程宇称守恒，可能在角分布形式上加上什么约束?

解答　(1) 初态为 $\left|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle$，末态自旋部分为 $\left|\frac{1}{2},s_z\right\rangle$，轨道部分为 $|l,m\rangle$(取坐标表象则为 $\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$)，于是末态波函数为

$$|l,m\rangle\left|\frac{1}{2},s_z\right\rangle$$

由角动量守恒可得

$$l=1,2,\quad m=\frac{3}{2}-s_z$$

p 波：$l=1$，末态为 $|1,1\rangle\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$，可表示为

$$\psi_{\mathrm{p}}=\mathrm{Y}_{11}(\theta,\varphi)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$

d 波：$l=2$，末态为 $|2,2\rangle\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$，$|2,1\rangle\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$，态可表示为

$$\psi_{\mathrm{d}}=\sqrt{\frac{4}{5}}|2,2\rangle\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle-\sqrt{\frac{1}{5}}|2,1\rangle\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle=\begin{pmatrix}-\sqrt{\frac{1}{5}}\mathrm{Y}_{21}(\theta,\varphi)\\ \sqrt{\frac{4}{5}}\mathrm{Y}_{22}(\theta,\varphi)\end{pmatrix}$$

因而

$$\begin{aligned}\psi &= \alpha_{\mathrm{d}}\psi_{\mathrm{d}}+\alpha_{\mathrm{p}}\psi_{\mathrm{p}}\\ &= \begin{pmatrix}\alpha_{\mathrm{p}}\mathrm{Y}_{11}(\theta,\varphi)-\alpha_{\mathrm{d}}\sqrt{\frac{1}{5}}\mathrm{Y}_{21}(\theta,\varphi)\\ \sqrt{\frac{4}{5}}\alpha_{\mathrm{d}}\mathrm{Y}_{22}(\theta,\varphi)\end{pmatrix}\end{aligned}\tag{5.301}$$

所以

$$\psi^*\psi=\frac{3}{8\pi}\sin^2\theta\left[|\alpha_p|^2+|\alpha_{\mathrm{d}}|^2-2\mathrm{Re}\alpha_{\mathrm{p}}^*\alpha_{\mathrm{d}}\cos\theta\right]$$

也就有

$$I\propto\sin^2\theta(1+\alpha\cos\theta)$$

式中

$$\alpha=\frac{-2\mathrm{Re}\alpha_{\mathrm{p}}^*\alpha_{\mathrm{d}}}{|\alpha_{\mathrm{p}}|^2+|\alpha_{\mathrm{d}}|^2}$$

这就是角分布的最一般形式.

(2) 如果衰变过程中宇称守恒，则末态宇称为正，即

$$(-1)^lP_{\mathrm{K}}P_{\Lambda}=+1,\quad P_{\mathrm{K}}P_{\Lambda}=-1$$

于是 $l=1$，末态轨道部分是 p 波，从而

$$\psi_{\mathrm{f}}=\mathrm{Y}_{11}(\theta,\varphi)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$

于是

$$\psi_{\mathrm{f}}^{\dagger}\psi_{\mathrm{f}}=\frac{3}{8\pi}\sin^2\theta=\frac{3}{8\pi}(1-\cos^2\theta)$$

所以角分布为

$$I\propto\left(1-\cos^2\theta\right)$$

5.80　两角动量 $j_1=1$、$j_2=\dfrac{1}{2}$ 耦合的 C-G 系数

题 5.80　给定两个角动量 $\boldsymbol{j}_1$ 和 $\boldsymbol{j}_2$(如 $\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{S}$ 及其相应的波函数)，其中 $j_1=1$ 且 $j_2=\dfrac{1}{2}$. 对于总角动量 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{j}_1+\boldsymbol{j}_2$，$m=m_1+m_2$，当

(1) $j=3/2$，$m=3/2$ 时；

(2) $j=3/2$，$m=1/2$ 时，

分别计算 C-G 系数. 考虑下列反应：

$$\begin{aligned}\mathrm{K^-p}&\rightarrow\Sigma^-\pi^+\\&\rightarrow\Sigma^+\pi^-\\&\rightarrow\Sigma^0\pi^0\\\mathrm{K^-n}&\rightarrow\Sigma^-\pi^0\\&\rightarrow\Sigma^0\pi^-\end{aligned}$$

假设这些过程是共振的，所以为纯同位旋态. 在同位旋守恒基础上求出相对比率.

(3) 对 $I=1$ 共振态；

(4) 对 $I=0$ 共振态 K，n，$\sum$，π 的同位旋各为 1/2，1/2，1 和 1.

解答　(1) 容易得出

$$\left|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle=|1,1\rangle\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$$

(2) 定义算符 $J_-=J_{1-}+J_{2-}$，则有

$$J_-\left|\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right\rangle=(J_{1-}+J_{2-})\,|1,1\rangle\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$$

也就是

$$\hbar\sqrt{3}\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle=\hbar\sqrt{2}|1,0\rangle\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle+\hbar\left|1,1\right\rangle\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle$$

所以

$$\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle=\sqrt{\frac{2}{3}}|1,0\rangle\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle+\sqrt{\frac{1}{3}}|1,1\rangle\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$$

下面计算反应截面的相对比值. 为此将初、末态的同位旋态用耦合表象表示：

$$|\mathrm{K^-p}\rangle = \left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}|1,0\rangle - \sqrt{\frac{1}{2}}|0,0\rangle$$

$$|\Sigma^-\pi^+\rangle = |1,-1\rangle|1,1\rangle = \sqrt{\frac{1}{6}}|2,0\rangle - \sqrt{\frac{1}{2}}|1,0\rangle + \sqrt{\frac{1}{2}}|0,0\rangle$$

$$|\Sigma^+\pi^-\rangle = |1,1\rangle|1,-1\rangle = \sqrt{\frac{1}{6}}|2,0\rangle - \sqrt{\frac{1}{2}}|1,0\rangle + \sqrt{\frac{1}{2}}|0,0\rangle$$

$$|\Sigma^0\pi^0\rangle = |1,0\rangle|1,0\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|2,0\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}}|0,0\rangle$$

$$|\mathrm{K^-n}\rangle = \left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right\rangle = |1-1\rangle$$

$$|\Sigma^-\pi^0\rangle = |11\rangle|1,0\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}|2-1\rangle - \sqrt{\frac{1}{2}}|1-1\rangle$$

$$|\Sigma^0\pi^-\rangle = |10\rangle|1-1\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}|2-1\rangle + \sqrt{\frac{1}{2}}|1-1\rangle$$

(3) 对于 $I=1$ 共振态，我们得到反应的截面相对比率为

$$\sigma(\Sigma^-\pi^+):\sigma(\Sigma^+\pi^-):\sigma(\Sigma^0\pi^0) = 1:1:0$$

$$\sigma(\Sigma^-\pi^0):\sigma(\Sigma^0\pi^-) = 1:1$$

(4) 对于 $I=0$ 共振态 (只有前一组反应有这个同位旋态)，反应截面的相对比率为

$$\sigma(\Sigma^-\pi_+):\sigma(\Sigma^+\pi_-):\sigma(\Sigma^0\pi_0) = 1:1:1$$

5.81　电子在外磁场中运动时的自旋态及平均极化率

题 5.81　考虑一个电子在均匀的沿 z 方向磁场中运动. 在 $t=0$ 时刻测量到电子自旋沿正 y 方向. 求在 $t>0$ 时的自旋态及沿 x 方向的平均极化率 (正比于 S_x 的期望值).

解答　取 $\boldsymbol{S}^2$、S_z 表象，则电子自旋态初态为 $\dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ \mathrm{i}\end{pmatrix}$. 演化满足 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\Psi\rangle = H|\Psi\rangle \tag{5.302}$$

其中

$$H = -\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B} = -\mu_{\mathrm{e}}B\sigma_z = \begin{pmatrix}-\mu_{\mathrm{e}}B & 0\\ 0 & \mu_{\mathrm{e}}B\end{pmatrix} \tag{5.303}$$

令 $|\Psi\rangle = \begin{pmatrix}\chi_1\\ \chi_2\end{pmatrix}$，代入式 (5.302)，得微分方程组

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\chi_1 = -\mu_0 B\chi_1 \tag{5.304}$$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\chi_2=\mu_0 B\chi_2 \tag{5.305}$$

令 $\dfrac{\mu_\mathrm{e}B}{\hbar}=\omega$，可得到如下形式的解：

$$\begin{cases}\chi_1=a\exp(\mathrm{i}\omega t)\\ \chi_2=b\exp(-\mathrm{i}\omega t)\end{cases}$$

代入初条件，得

$$\Psi(t)=\begin{pmatrix}\chi_1\\ \chi_2\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\\ \mathrm{i}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\end{pmatrix} \tag{5.306}$$

在该时间演化态下，S_x 的期望值为

$$\langle S_x\rangle=(\chi_1^*,\chi_2^*)\,S_x\begin{pmatrix}\chi_1\\ \chi_2\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}\sin 2\omega t$$

5.82　电子处于外磁场中时沿 x 和 z 方向的极化

题 5.82　考虑一沿 z 方向均匀磁场中的一个电子. 该电子自旋被测量到是沿正 y 轴 (在 t_0 时刻). 在 $t>t_0$ 时，沿 x 和 z 方向的极化是多少 (即 $2S_x$ 和 $2S_z$ 的期望值)?

解答　在 σ_z 表象，自旋态用两分量旋量表示

$$|\Psi\rangle=\begin{pmatrix}a(t)\\ b(t)\end{pmatrix}$$

的 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\Psi\rangle=H|\Psi\rangle \tag{5.307}$$

其中

$$H=-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}=-\mu_\mathrm{e}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B} \tag{5.308}$$

式中，$\mu_\mathrm{e}=\dfrac{|e|\hbar}{2m_\mathrm{e}c}$ 是电子的 Bohr 磁子.

$\boldsymbol{B}$ 沿 z 方向，故上式化为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix}a(t)\\ b(t)\end{pmatrix}=-\mu_\mathrm{e}B\begin{pmatrix}1&0\\ 0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a(t)\\ b(t)\end{pmatrix}$$

得方程组

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}a(t)=-\mu_\mathrm{e}Ba(t)$$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}b(t)=\mu_{\mathrm{e}}Bb(t)$$

其解为

$$a(t)=a(t_0)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mu_{\mathrm{e}}B(t-t_0)}$$
$$b(t)=b(t_0)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mu_{\mathrm{e}}B(t-t_0)}$$

t_0 时刻电子自旋沿正 y 方向，因此

$$S_y\begin{pmatrix}a(t_0)\\b(t_0)\end{pmatrix}=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}a(t_0)\\b(t_0)\end{pmatrix}$$

得出

$$-\mathrm{i}b(t_0)=a(t_0) \tag{5.309}$$
$$\mathrm{i}a(t_0)=b(t_0) \tag{5.310}$$

由归一化知

$$|a(t_0)|^2+|b(t_0)|^2=1$$

与前面式 (5.309)联立得

$$a(t_0)=\frac{1}{\sqrt{2}},\qquad b(t_0)=\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}$$

$t>t_0$ 时刻沿 x 方向极化为

$$\langle 2S_x\rangle=\hbar(a^*,b^*)\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix} \tag{5.311}$$
$$=\hbar(a^*b+b^*a)=\hbar\sin\left(\frac{2\mu g_{\mathrm{e}}}{\hbar}B(t-t_0)\right) \tag{5.312}$$

沿 z 方向极化为

$$\langle 2S_z\rangle=\hbar(a^*,b^*)\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\hbar(a^*a-b^*b)=0$$

5.83　两个自旋 1/2 粒子系在给定态下，总自旋 $S=0$ 的概率

题 5.83　两个自旋为 $\frac{1}{2}$ 的粒子组成一个复合系统. 自旋 A 在 $S_z=\frac{1}{2}$ 的本征态，自旋 B 在 $S_x=\frac{1}{2}$ 的本征态. 求发现系统自旋为零的概率.

解答　按题意，系统所处状态

$$\left|S_z=\frac{1}{2}\right\rangle_A\otimes\left|S_x=\frac{1}{2}\right\rangle_B$$

将其写到 S_z 的表象中，有

$$|\Psi\rangle=\left|S_z=\frac{1}{2}\right\rangle_A\otimes\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|S_z=\frac{1}{2}\right\rangle_B+\left|S_z=-\frac{1}{2}\right\rangle_B\right)$$

总自旋为零的态可以写为

$$|0\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|S_z=\frac{1}{2}\right\rangle_A\left|S_z=-\frac{1}{2}\right\rangle_B-\left|S_z=-\frac{1}{2}\right\rangle_A\left|S_z=\frac{1}{2}\right\rangle_B\right)$$

发现总自旋为 0 的概率为

$$P=|\langle 0|\Psi\rangle|^2=\frac{1}{4}$$

5.84　与电子自旋有关的测量问题

题 5.84　(1) 一个电子的自旋观测到沿 z 轴方向，问第二次测量到电子在 xz 平面内沿与 z 轴成 θ 角的方向的概率为多大?

(2) 氘核内中子和质子的总自旋为三重态. 已观测到总角动量平行于 z 轴方向，求第二次测量到质子自旋平行于 z 轴方向的概率.

解答　(1) 电子自旋初态为

$$|\psi_0\rangle=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$

自旋方向在 xz 平面内与 z 轴成 θ 角方向的态为

$$|\psi\rangle=\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\\[2ex]\sin\dfrac{\theta}{2}\end{pmatrix}$$

于是第二次观测到电子自旋在 xz 平面内与 z 轴成 θ 角方向的概率为

$$p(\theta)=|\langle\psi|\psi_0\rangle|^2=\left|\left(\cos\frac{\theta}{2},\sin\frac{\theta}{2}\right)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\right|^2=\cos^2\frac{\theta}{2}$$

(2) 中子-质子系统 (氘核) 的自旋初态为

$$|\psi_0\rangle=|11\rangle=\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{\mathrm{n}}\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{\mathrm{p}}$$

要使质子在第二次观测时自旋仍平行于 z 轴方向，考虑到氘核内中子自旋和质子自旋平行，末态仍为

$$|\psi_{\mathrm{f}}\rangle=\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{\mathrm{n}}\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle_{\mathrm{p}}$$

这就是说第二次测量得质子自旋沿 z 轴的概率为 1.

5.85　为什么氘核不存在 p 态和 g 态

题 5.85　氘是质子与中子的束缚态，其总角动量量子数 $J=1$. 现已知道它主要是由 s($l=0$) 态组成并且有很少的 d($l=2$) 态参与进来.

(1) 解释为什么 p 态不能混入；

(2) 解释为什么 g 态不能混入；

(3) 计算 n-p 系统 (总角动量 $J=1$) 处在纯 d 态时的磁矩；假设 n 和 p 自旋耦合形成总自旋 $\boldsymbol{s}$，然后总自旋再与轨道角动量 $\boldsymbol{l}$ 耦合形成总角动量 $\boldsymbol{J}$. 用核磁子表示结果. 质子及中子磁矩分别为 $2.79\mu_{\mathrm{N}}$ 和 $-1.91\mu_{\mathrm{N}}$，μ_{N} 为核磁子.

解答　(1) s、d 态的宇称为正，而 p 态的宇称为负，由于宇称守恒，开始时为 s 态的量子态在任何时刻都不可能有 p 态混入；

(2) 质子与中子组成的系统的自旋可能值为 1 或 0，因为 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}$. 所以在 $S=0$ 时有 $L=1$，为 p 态，由 (1) 知不可能存在，在 $S=1$ 时有 $L=2,1,0$，所以宇称准许的只有 s 或 d 态，不能有 g 混入；

(3) 对于纯 d 态，总自旋 $S=1$，轨道角动量 (对 n, p 质心)$L=2$.

总的磁矩应该等于总自旋的磁矩 $\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{s}}$ 与轨道角动量的磁矩 $\boldsymbol{\mu}_l$ 的耦合.

总自旋 $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{S}_{\mathrm{p}}+\boldsymbol{S}_{\mathrm{n}}$，$\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{s}}=\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{p}}+\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{n}}$($\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{p}},\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{n}}$ 分别为 p, n 的自旋磁矩), 把总 $\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{s}}$ 沿总 $\boldsymbol{S}$ 方向投影取平均，有

$$\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{s}}=\frac{(g_{\mathrm{p}}\mu_{\mathrm{N}}\boldsymbol{S}_{\mathrm{p}}+g_{\mathrm{n}}\mu_{\mathrm{N}}\boldsymbol{S}_{\mathrm{n}})\cdot\boldsymbol{S}}{S(S+1)}\boldsymbol{S}=\frac{1}{2}(g_{\mathrm{p}}+g_{\mathrm{n}})\mu_{\mathrm{N}}\boldsymbol{S}$$

式中

$$\mu_{\mathrm{N}}=\frac{e\hbar}{2m_{\mathrm{p}}c},\ g_{\mathrm{p}}=5.58,\ g_{\mathrm{n}}=-3.82$$

质子运动对质心产生磁矩；但是中子并不对质心产生磁矩，这样有

$$\mu_{\mathrm{L}}=\frac{e\hbar}{2m_{\mathrm{p}}c}\cdot\boldsymbol{L}_{\mathrm{p}}=\mu_{\mathrm{N}}\cdot\boldsymbol{L}_{\mathrm{p}}$$

$\boldsymbol{L}_{\mathrm{p}}$ 是 p 对质心的角动量，因为 $L_{\mathrm{p}}+L_{\mathrm{n}}=L$，且可以认为 $L_{\mathrm{p}}=L_{\mathrm{n}}$，有 $L_{\mathrm{p}}=\frac{1}{2}L$(质心在连线中点)，这样就有 $\mu_L=\frac{1}{2}\mu_{\mathrm{N}}L$.

耦合之后的总磁矩为

$$\mu_{\mathrm{r}}=\frac{\left[\frac{1}{2}\mu_{\mathrm{N}}\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{J}+\frac{1}{2}(g_{\mathrm{p}}+g_{\mathrm{n}})\mu_{\mathrm{N}}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{J}\right]J}{J(J+1)}$$

因 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}$，有

$$\boldsymbol{\mu}=\left[\frac{1}{2}\mu_{\mathrm{N}}\cdot 3+\frac{1}{2}(g_{\mathrm{p}}+g_{\mathrm{N}})\mu_{\mathrm{N}}(-1)\right]\boldsymbol{J}/2 \tag{5.313}$$

$$=\left[1.5-\frac{1}{2}(g_{\mathrm{p}}+g_{\mathrm{N}})\right]\frac{1}{2}\mu_{\mathrm{N}}\boldsymbol{J}=0.31\mu_{\mathrm{N}}\boldsymbol{J} \tag{5.314}$$

取 $\boldsymbol{J}$ 方向的投影并使 J_x 为最大值 $J=1$，从而有

$$\mu = 0.31\mu_{\mathrm{N}}$$

5.86　Stern-Gerlach 装置中的电子

题 5.86　预先建立一个 Stern-Gerlach 实验，使得一个电子自旋 z 分量为 $-\dfrac{\hbar}{2}$. 在 $t=0$ 时刻加入一个沿 x 方向的均匀磁场 $\boldsymbol{B}$. 问：

(1) 经过时间 T 后，测自旋 z 分量的结果是什么?

(2) 如果不是测自旋的 z 分量，而是 x 分量，则结果如何?

解法一　设自旋波函数在 S_z 表象中为 $\begin{pmatrix}\chi_1\\ \chi_2\end{pmatrix}$，它满足下面的方程：

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix}\chi_1\\ \chi_2\end{pmatrix} = \frac{e\hbar B}{2mc}\sigma_x\begin{pmatrix}\chi_1\\ \chi_2\end{pmatrix} = \hbar\omega\sigma_x\begin{pmatrix}\chi_1\\ \chi_2\end{pmatrix} \tag{5.315}$$

其中，$\omega \equiv \dfrac{eB}{2mc}$ 为 Larmor 频率，化简得

$$\begin{cases}\mathrm{i}\dot{\chi}_1 = \omega\chi_2\\ \mathrm{i}\dot{\chi}_2 = \omega\chi_1\end{cases} \tag{5.316}$$

解得

$$\begin{cases}\chi_1 = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\\ \chi_2 = -A\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\end{cases} \tag{5.317}$$

代入初始条件 $\begin{cases}\chi_1(t=0)=0\\ \chi_2(t=0)=1\end{cases}$，解出

$$A = -\frac{1}{2},\quad B = \frac{1}{2}$$

于是

$$\begin{cases}\chi_1 = -\dfrac{1}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} + \dfrac{1}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} = -\mathrm{i}\sin\omega t\\ \chi_2 = \dfrac{1}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} + \dfrac{1}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} = \cos\omega t\end{cases} \tag{5.318}$$

(1) T 时刻自旋波函数

$$\Psi(T) = \begin{pmatrix}\chi_1(T)\\ \chi_2(T)\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-\mathrm{i}\sin\omega T\\ \cos\omega T\end{pmatrix} \tag{5.319}$$

S_z 的本征态为

$$\begin{cases} \left|S_z=\dfrac{\hbar}{2}\right\rangle=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \\ \left|S_z=-\dfrac{\hbar}{2}\right\rangle=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \end{cases} \tag{5.320}$$

由测量假设可得

$$\begin{cases} P_{z\uparrow}=\left|\langle S_z=\dfrac{\hbar}{2}|\Psi\rangle\right|^2=\sin^2\omega T \\ P_{z\downarrow}=\left|\langle S_z=-\dfrac{\hbar}{2}|\Psi\rangle\right|^2=\cos^2\omega T \end{cases} \tag{5.321}$$

(2) S_x 的本征态为

$$\begin{cases} \left|S_x=\dfrac{\hbar}{2}\right\rangle=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} \\ \left|S_x=-\dfrac{\hbar}{2}\right\rangle=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix} \end{cases} \tag{5.322}$$

同理可得

$$\begin{cases} P_{x\uparrow}=\left|\langle S_z=\dfrac{\hbar}{2}|\Psi\rangle\right|^2=\dfrac{1}{2} \\ P_{x\downarrow}=\left|\langle S_z=-\dfrac{\hbar}{2}|\Psi\rangle\right|^2=\dfrac{1}{2} \end{cases} \tag{5.323}$$

解法二　电子自旋波函数为定态叠加态. Hamilton 量为

$$H=-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}=\frac{eB\hbar}{2mc}\sigma_x$$

σ_x 也就是 H 的完备本征态矢，

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix},\quad \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$$

于是电子自旋初态按上述本征态展开

$$\psi(t=0)=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}-\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}\right]$$

所以

$$\psi(t)=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}-\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} \tag{5.324}$$

$$= \begin{pmatrix} -\mathrm{i}\sin\omega t \\ \cos\omega t \end{pmatrix} \tag{5.325}$$

其中，$\omega = \dfrac{eB}{2mc}$.

(1) 由测量假设可得 T 时刻，

$$\begin{cases} P_{z\uparrow} = \left| \langle S_z = \dfrac{\hbar}{2} | \Psi \rangle \right|^2 = \sin^2 \omega T \\ P_{z\downarrow} = \left| \langle S_z = -\dfrac{\hbar}{2} | \Psi \rangle \right|^2 = \cos^2 \omega T \end{cases} \tag{5.326}$$

(2) 按式 (5.325)，可得

$$\begin{cases} P_{x\uparrow} = \left| \dfrac{1}{\sqrt{2}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \right|^2 = \dfrac{1}{2} \\ P_{x\downarrow} = \dfrac{1}{2} \end{cases}$$

5.87　处于基态的碱原子通过 Stern-Gerlach 装置

题 5.87　处于基态的一个碱原子通过 Stern-Gerlach 装置，使得出射原子的自旋处于 $+z$ 方向. 然后原子在沿 x 方向的磁场中花费时间 τ. 求出此时间的终点，原子可能通过自旋 $-z$ 方向的 Stern-Gerlach 选择器的概率. 这个概率可以等于 1 吗？如果可以，如何达到？

解答　初始状态

$$\psi(t=0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Hamilton 量为

$$H = -\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{B} = \frac{|e|\hbar B}{2mc} \sigma_x \equiv \hbar\omega\sigma_x$$

其中，$\omega = \dfrac{|e|B}{2mc}$. 运动方程为

$$-\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \hbar\omega \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \hbar\omega \begin{pmatrix} \psi_2 \\ \psi_1 \end{pmatrix}$$

也就是

$$\begin{cases} \mathrm{i}\psi_1 = \omega\psi_2 \\ \mathrm{i}\psi_2 = \omega\psi_1 \end{cases} \tag{5.327}$$

消去 ψ_2 得

$$\ddot{\psi}_1 + \omega^2 \psi_1 = 0$$

求解得到 ψ_1 并代入式 (5.327)得

$$\begin{cases}\psi_1(t)=a\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}+b\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\\ \psi_2(t)=\dfrac{\mathrm{i}}{\omega}\dot{\psi}_1=-a\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}+b\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\end{cases}$$

结合初始条件

$$\begin{cases}\psi_1(0)=1\\ \psi_2(0)=0\end{cases}$$

可得

$$\begin{cases}a+b=1\\ -a+b=0\end{cases}$$

解得

$$a=b=\frac{1}{2}$$

从而

$$\begin{aligned}\psi &= \begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\\ -\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\omega t\\ -\mathrm{i}\sin\omega t\end{pmatrix}\\ &= \cos\omega t\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}-\mathrm{i}\sin\omega t\begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix}\end{aligned}\tag{5.328}$$

所以经过时间 τ 后，通过 Stern-Gerlach 装置，自旋在 $-z$ 方向的概率为

$$\left|(0,1)\begin{pmatrix}\cos\omega\tau\\ -\mathrm{i}\sin\omega\tau\end{pmatrix}\right|^2=\sin^2\omega\tau=\frac{1-\cos 2\omega\tau}{2}$$

显然概率可以为 1，这时要求

$$1-\cos 2\omega\tau=2,\text{即}\cos 2\omega\tau=-1$$

从而

$$\tau=\frac{(2n+1)\pi}{2\omega}=(2n+1)\frac{mc\tau}{|e|B}$$

所以选 τ 满足上式时，就可让概率等于 1.

5.88　自旋 1/2 粒子束相继通过两个 Stern-Gerlach 装置

题 5.88　一束自旋 $\dfrac{1}{2}$ 的粒子通过 Stern-Gerlach 装置，按照粒子的量子数 m_s 的不同，入射粒子束被分裂成两束. 其中一束再通过类似的装置，其磁场相对于第一个装置有倾斜角 α(图 5.5) 离开第二个装置后，两束粒子相对数目是多少? 应用 Pauli 自旋公式推导结果.

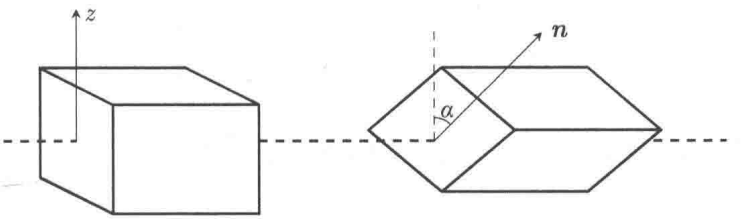


图 5.5　自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子相继通过两个 Stern-Gerlach 装置

解答　对于空间任意方向，$\boldsymbol{n}=(\sin\theta\cos\varphi,\sin\theta\sin\varphi,\cos\theta)$. 自旋算符

$$S_n=\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}=\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi}\\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta\end{pmatrix}$$

设它的本征态为 $\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}$，则本征方程为

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}$$

得本征值 $\lambda=\pm1$，另有 $(a^*,b^*)\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}=|a|^2+|b|^2=1$，最后求得本征态为

$$|\uparrow\boldsymbol{n}\rangle=\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\\ \sin(\theta/2)e^{i\varphi}\end{pmatrix}\tag{5.329}$$

$$|\downarrow\boldsymbol{n}\rangle=\begin{pmatrix}-\sin(\theta/2)e^{i\varphi}\\ \cos(\theta/2)\end{pmatrix}\tag{5.330}$$

对于本题情况，

$$\varphi=0,\ \theta=\alpha\tag{5.331}$$

若离开第一个 Stern-Gerlach 装置后留下的粒子是自旋向上，则

$$|\uparrow z\rangle=c|\uparrow n\rangle+d|\downarrow n\rangle$$

其中

$$c=\langle\uparrow\boldsymbol{n}|\uparrow,z\rangle=(\cos(\alpha/2)\sin(\alpha/2))\begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}=\cos(\alpha/2)$$

$$d=\langle\downarrow \boldsymbol{n}|\uparrow,z\rangle=(-\sin(\alpha/2)\cos(\alpha/2))\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=-\sin(\alpha/2)$$

所以经过第二个 Stern-Gerlach 装置后出射的两束粒子数比为

$$\frac{|c|^2}{|d|^2}=\frac{\cos^2(\alpha/2)}{\sin^2(\alpha/2)}=\cot^2\frac{\alpha}{2}$$

若离开第一个 Stern-Gerlach 装置后留下的粒子是自旋向下的，则有

$$|\downarrow z\rangle=c'|\uparrow \boldsymbol{n}\rangle+d'|\downarrow \boldsymbol{n}\rangle$$

其中

$$c'=\langle\uparrow \boldsymbol{n}|\downarrow,z\rangle=(\cos(\alpha/2)\sin(\alpha/2))\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\cos(\alpha/2)$$

$$d'=\langle\downarrow \boldsymbol{n}|\downarrow,z\rangle=(-\sin(\alpha/2)\cos(\alpha/2))\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=-\sin(\alpha/2)$$

所以粒子数比为

$$\frac{|c'|^2}{|d'|^2}=\frac{\sin^2(\alpha/2)}{\cos^2(\alpha/2)}=\cot^2\frac{\alpha}{2}$$

5.89　银原子束的 Stern-Gerlach 实验

题 5.89　银原子的磁矩基本上等于它的未配对价电子的磁矩，即 $\boldsymbol{\mu}=-\gamma\boldsymbol{s}$，这时 $\gamma=\dfrac{e}{mc}$，$\boldsymbol{s}$ 是电子自旋. 设一束银原子以速度 v 通过一个磁场梯度沿 z 方向的 Stern-Gerlach 装置，下面只考虑 $s_z=\dfrac{\hbar}{2}$ 的束流进入一个长为 L 的磁场区域，在这个区域内有一常磁场 $\boldsymbol{B}_0$ 沿束流方向 (z 轴). 然后进入另一个与前面全同的 Stern-Gerlach 装置 (图 5.6). 清楚地描述在束流冲出第二个 Stern-Gerlach 装置的时候所看到的现象. 用 $V,L,\boldsymbol{B}_0$ 及问题中的常数表示出射束流的强度. 用量子力学的运动方程推导你的结果.

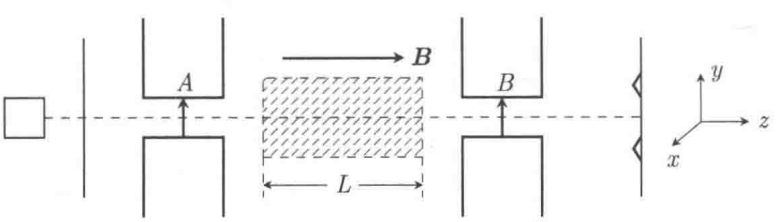


图 5.6　银原子束的 Stern-Gerlach 实验

解答　在第二个 Stern-Gerlach 装置的出口处进行摄影，则可看到两条黑线，分别是由 $s_z=\dfrac{\hbar}{2}$ 和 $s_z=-\dfrac{\hbar}{2}$ 的银原子沉积而成.

在磁场区域内，体系的状态用 $|t\rangle$ 表示. 当一个银原子刚进入磁场区域时 $t=0$，只考虑 $s_z=\dfrac{\hbar}{2}$ 的原子，所以 $|t=0\rangle=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$. 而体系的 Hamilton 量为

$$H=-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}=-\frac{\gamma\hbar B_0}{2}\sigma_y$$

则有

$$\begin{aligned}|t\rangle &= \exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Ht\right]|t=0\rangle\\ &= \exp\left[\frac{\mathrm{i}\gamma B_0 t}{2}\sigma_y\right]\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\left[\cos\frac{\gamma B_0 t}{2}+\mathrm{i}\sigma_y\sin\frac{\gamma B_0 t}{2}\right]\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\\ &= \cos\frac{\gamma B_0 t}{2}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}-\sin\frac{\gamma B_0 t}{2}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\end{aligned}$$

所以出口处 $I_+=I_0\cos^2\left[\dfrac{\gamma B_0 t}{2}\right]$，$I_-=I_0\sin^2\left[\dfrac{\gamma B_0 t}{2}\right]$，$I_0$ 为刚进入磁场区域时的束流强度.

由于束流离开磁场区域时，$t=L/V$，所以强度比为

$$\cot^2\left[\frac{\gamma B_0 L}{2V}\right]$$

5.90　两个自旋为 1/2 带等量异号电荷粒子组成的体系放在均匀磁场中

题 5.90　两个自旋为 1/2，带等量异号电荷的体系，设粒子的自旋算符为 $\boldsymbol{s}_1$、$\boldsymbol{s}_2$，自旋 -自旋耦合为 ΔE_{SS}，将其放在均匀磁场 $\boldsymbol{B}=B\boldsymbol{e}_z$ 中，此时的 Hamilton 量为

$$H=\frac{\Delta E_{SS}}{4}(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)-(\boldsymbol{\mu}_1+\boldsymbol{\mu}_2)\cdot\boldsymbol{B}\tag{5.332}$$

其中，$\boldsymbol{\mu}_i=g_i\mu_0\boldsymbol{s}_i$ 是第 i 个粒子的磁矩. 若用 Pauli 算符的二分量本征态表示体系的四个状态，其自旋波函数为

$$\psi_1=\alpha_1\alpha_2;\quad \psi_2=A_+\alpha_1\beta_2+A_-\beta_1\alpha_2;\quad \psi_3=A_+\beta_1\alpha_2-A_-\alpha_1\beta_2;\quad \psi_4=\beta_1\beta_2\tag{5.333}$$

其中，α_i 为 $(\sigma_z)_i$ 的本征值为 $+1$ 的态函数，β_i 为 $(\sigma_z)_i$ 的本征值为 -1 的态函数，而

$$A_\pm=\frac{1}{2}\left[1\pm\frac{\chi}{(1+\chi^2)^{1/2}}\right]^{1/2},\quad \chi=\frac{(g_2-g_1)\mu_0 B}{\Delta E_{SS}}\tag{5.334}$$

(1) 求每个波函数 ψ_i 相应的能量本征值;

(2) 若初态 $\psi(0)$ 中粒子 1 沿 z 轴方向极化，而粒子 2 在 z 方向是非极化的，求粒子 1 的极化对时间的依赖关系 $P_{1z}(t)=\langle\psi(t)|\sigma_{1z}|\psi(t)\rangle$;

(3) 分别讨论 $\mu_0 B/\Delta E_{SS}\gg 1$ 及 $\mu_0 B/\Delta E_{SS}\ll 1$ 两种情况.

解答 (1) 系统的 Hamilton 量为

$$\begin{aligned} H &= \frac{\Delta E_{SS}}{4}(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)-(\boldsymbol{\mu}_1+\boldsymbol{\mu}_2)\cdot\boldsymbol{B} \\ &= \frac{\Delta E_{SS}}{4}(\sigma_{1x}\sigma_{2x}+\sigma_{1y}\sigma_{2y}+\sigma_{1z}\sigma_{2z})-\frac{\mu_0 B}{2}(g_1\sigma_{1z}+g_2\sigma_{2z}) \end{aligned} \tag{5.335}$$

注意到

$$\sigma_x\alpha=\beta;\quad \sigma_x\beta=\alpha;\quad \sigma_y\alpha=\mathrm{i}\beta;\quad \sigma_y\beta=-\mathrm{i}\alpha \tag{5.336}$$

则有

$$\begin{aligned} H\psi_1 &= \frac{\Delta E_{SS}}{4}(\beta_1\beta_2-\beta_1\beta_2+\alpha_1\alpha_2)-\frac{1}{2}\mu_0 B(g_1+g_2)\cdot\alpha_1\alpha_2 \\ &= \left(\frac{\Delta E_{SS}}{4}-\frac{g_1+g_2}{2}\mu_0 B\right)\alpha_1\alpha_2=\left(\frac{\Delta E_{SS}}{4}-\frac{g_1+g_2}{2}\cdot\mu_0 B\right)\psi_1 \end{aligned} \tag{5.337}$$

可见 ψ_1 为 H 的本征态，相应本征值为

$$E_1=\frac{\Delta E_{SS}}{4}-\frac{g_1+g_2}{2}\cdot\mu_0 B$$

同理

$$\begin{aligned} H\psi_2 &= \frac{\Delta E_{SS}}{4}[A_+(\beta_1\alpha_2+\beta_1\alpha_2-\alpha_1\beta_2)+A_-(\alpha_1\beta_2+\alpha_1\beta_2-\beta_1\alpha_2)] \\ &\quad -\frac{1}{2}(g_1-g_2)\mu_0 B(A_+\alpha_1\beta_2-A_-\beta_1\alpha_2) \\ &= \left[\frac{\Delta E_{SS}}{4}(2A_--A_+)+\frac{\Delta E_{SS}}{2}\chi A_+\right]\alpha_1\beta_2 \\ &\quad +\left[\frac{\Delta E_{SS}}{4}(2A_+-A_-)-\frac{\Delta E_{SS}}{2}\chi A_-\right]\beta_1\alpha_2 \\ &= \frac{\Delta E_{SS}}{4}\left(\frac{2A_-}{A_+}+2\chi-1\right)A_+\alpha_1\beta_2+\frac{\Delta E_{SS}}{4}\left(\frac{2A_+}{A_-}-2\chi-1\right)A_-\beta_1\alpha_2 \end{aligned} \tag{5.338}$$

因为

$$\frac{2A_+}{A_-}-2\chi=\frac{2A_-}{A_+}+2\chi=2\left(1+\chi^2\right)^{1/2}$$

所以

$$H\psi_2=\frac{\Delta E_{SS}}{4}\left(2\sqrt{1+\chi^2}-1\right)\psi_2$$

可见 ψ_2 为 H 的本征态，相应本征值为

$$E_2=\frac{\Delta E_{SS}}{4}\left(2\sqrt{1+\chi^2}-1\right) \tag{5.339}$$

类似地，可以验证 ψ_3 与 ψ_4 均为 H 的本征态，相应本征值分别为

$$E_3=-\frac{\Delta E_{SS}}{4}\left(2\sqrt{1+\chi^2}+1\right) \tag{5.340}$$

$$E_4=\frac{\Delta E_{SS}}{4}+\frac{g_1+g_2}{2}\cdot\mu_0 B \tag{5.341}$$

由于

$$A_+^2+A_-^2=\frac{1}{2}\left(1+\frac{\chi}{\sqrt{1+\chi^2}}\right)+\frac{1}{2}\left(1-\frac{\chi}{\sqrt{1+\chi^2}}\right)=1$$

可知题给的 ψ_1、ψ_2、ψ_3 与 ψ_4 均已经归一化，它们构成体系的正交归一基矢，非耦合表象基矢由它们展开的表达式为

$$\alpha_1\alpha_2=\psi_1;\quad \alpha_1\beta_2=A_+\psi_2-A_-\psi_3;\quad \beta_1\alpha_2=A_+\psi_3+A_-\psi_2;\quad \beta_1\beta_2=\psi_4 \tag{5.342}$$

(2) 因粒子 2 未极化，处于自旋分别沿正负 z 轴[①]的两个态 α_2、β_2 的各自具有 1/2 概率非相干叠加的混合态.

对于粒子 2 自旋沿正 z 轴的情况. 初始时刻 $t=0$ 时，体系波函数为

$$\psi_{\mathrm{I}}(0)=\alpha_1\alpha_2=\psi_1 \tag{5.343}$$

是体系能量本征态，因此 t 时刻体系波函数为

$$\psi_{\mathrm{I}}(t)=\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_1 t}\psi_1 \tag{5.344}$$

体系处于定态. 这样计算 $\boldsymbol{P}_1(t)=\langle\psi(t)|\boldsymbol{\sigma}_1|\psi(t)\rangle$ 的各分量如下：

$$P_{\mathrm{I},1z}(t)=1,\quad P_{\mathrm{I},1x}(t)=0,\quad P_{\mathrm{I},1y}(t)=0$$

也就是

$$\boldsymbol{P}_{\mathrm{I},1}(t)=\boldsymbol{e}_z \tag{5.345}$$

对于粒子 2 自旋沿负 z 轴的情况. 初始时刻 $t=0$，体系波函数为

$$\psi_{\mathrm{II}}(0)=\alpha_1\beta_2=A_+\psi_2-A_-\psi_3 \tag{5.346}$$

其中，ψ_2 与 ψ_3 是体系能量本征态，故 t 时刻体系波函数为

$$\psi_{\mathrm{II}}(t)=A_+\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_2 t}\psi_2-A_-\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_3 t}\psi_3 \tag{5.347}$$

体系处于定态叠加态. 仍用非耦合基矢表示则为

$$\begin{aligned}\psi_{\mathrm{II}}(t)&=A_+\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_2 t}\left(A_+\alpha_1\beta_2+A_-\beta_1\alpha_2\right)-A_-\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_3 t}\left(A_+\beta_1\alpha_2-A_-\alpha_1\beta_2\right)\\&=\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_2 t}\left[A_+^2+A_-^2\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E_2-E_3)t}\right]\alpha_1\beta_2+\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_2 t}\left[1-\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E_2-E_3)t}\right]A_+A_-\beta_1\alpha_2\end{aligned} \tag{5.348}$$

① 或者等效的，沿正负 x 轴或其他方向.

这样计算 $\boldsymbol{P}_{\mathrm{II},1}(t)=\langle\psi(t)|\boldsymbol{\sigma}_1|\psi(t)\rangle$ 的各分量如下：

$$\begin{aligned}
P_{\mathrm{II},1z}(t) &= \left|A_+^2+A_-^2\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E_2-E_3)t}\right|^2-\left|\left[1-\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E_2-E_3)t}\right]A_+A_-\right|^2\\
&= (A_+^2-A_-^2)^2+4A_+^2A_-^2\cos\frac{(E_2-E_3)t}{\hbar}\\
&= \frac{1}{(1+\chi^2)}\left[\chi^2+\cos\left(\sqrt{1+\chi^2}\frac{\Delta E_{SS}t}{\hbar}\right)\right]\\
P_{\mathrm{II},1x}(t) &= P_{\mathrm{II}},1y(t)=0
\end{aligned}$$

也就是

$$\boldsymbol{P}_{\mathrm{II},1}(t)=\frac{1}{(1+\chi^2)}\left[\chi^2+\cos\left(\sqrt{1+\chi^2}\frac{\Delta E_{SS}t}{\hbar}\right)\right]\boldsymbol{e}_z \tag{5.349}$$

如前所指出的，粒子 2 自旋非极化，则其自旋沿正、负 z 轴的概率各占 1/2，由此得到粒子 1 的极化与时间的依赖关系：

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{P}_1(t) &= \frac{1}{2}\boldsymbol{P}_{\mathrm{I},1}(t)+\frac{1}{2}\boldsymbol{P}_{\mathrm{II},1}(t)\\
&= \frac{1}{2}\boldsymbol{e}_z+\frac{1}{2(1+\chi^2)}\left[\chi^2+\cos\left(\sqrt{1+\chi^2}\frac{\Delta E_{SS}t}{\hbar}\right)\right]\boldsymbol{e}_z\\
&= \left[1-\frac{1}{1+\chi^2}\sin^2\left(\sqrt{1+\chi^2}\frac{\Delta E_{SS}t}{2\hbar}\right)\right]\boldsymbol{e}_z
\end{aligned} \tag{5.350}$$

(3) 在极限情况下 $\mu_0B/\Delta E_{SS}\gg1$，则 $\chi\gg1$，所以

$$E_1=\frac{\Delta E_{SS}}{4}-\frac{g_1+g_2}{2}\mu_0B\sim-\frac{g_1+g_2}{2}\mu_0B \tag{5.351}$$

$$E_2=\frac{\Delta E_{SS}}{4}\left(2\sqrt{1+\chi^2}-1\right)\sim\frac{\Delta E_{SS}}{4}\times2\chi=\frac{1}{2}(g_2-g_1)\mu_0B \tag{5.352}$$

$$E_3=-\frac{\Delta E_{SS}}{4}\left(1+2\sqrt{1+\chi^2}\right)\sim-\frac{1}{2}(g_2-g_1)\mu_0B \tag{5.353}$$

$$E_4=\frac{\Delta E_{SS}}{4}+\frac{g_1+g_2}{2}\mu_0B\sim\frac{1}{2}(g_1+g_2)\mu_0B \tag{5.354}$$

以及

$$P_{1z}(t)\sim1 \tag{5.355}$$

若 $\mu_0B/\Delta E_{SS}\ll1$，则 $\chi\ll1$，所以

$$E_1,E_4\sim\frac{\Delta E_{SS}}{4} \tag{5.356}$$

$$E_2=\frac{\Delta E_{SS}}{4}\left(2\sqrt{1+\chi^2}-1\right)\sim\frac{\Delta E_{SS}}{4} \tag{5.357}$$

$$E_3\sim-\frac{3\Delta E_{SS}}{4} \tag{5.358}$$

$$P_{1z}(t)\sim1-\sin^2\left(\frac{\Delta E_{SS}t}{2\hbar}\right) \tag{5.359}$$

说明　关于第 (1) 小题各本征态和本征值的求解过程，可参考张鹏飞, 阮图南, 朱栋培, 吴强, 量子力学习题解答与剖析, 北京：科学出版社, 2011, P.213-214.

5.91　处于 $^2\mathrm{p}_{1/2}$ 态氢原子在弱和强外磁场中的有效磁矩

题 5.91　一氢原子处于 $^2\mathrm{p}_{1/2}$ 态，总角动量沿 z 轴，计算下列问题的结果：

(1) 发现电子自旋向下的概率是多少?

(2) 求在球坐标下单位立体角发现电子的概率 $P(\theta,\varphi)$(与径向和自旋无关)；

(3) 沿正 z 方向有一弱磁场. 在这个磁场中原子的有效磁矩是多少?

(4) 从初态开始，逐步加强磁场直到由磁场产生的能级移动远大于精细结构. 终态轨道和自旋量子数是多少 (假设 Hamilton 量关于磁场是线性的)? 终态的有效磁矩是多少?

解答　(1) 由题所给条件可知

$$l=1,\quad s=\frac{1}{2},\quad J=\frac{1}{2},\quad J_x=\frac{1}{2}$$

电子态处于 $\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$，从耦合表象变到非耦合表象

$$|J,J_x\rangle=\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle=\sqrt{\frac{2}{3}}|1,1\rangle\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle-\sqrt{\frac{1}{3}}|1,0\rangle\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$$

因此发现电子自旋向下的概率为

$$P_{\downarrow}=\left(\sqrt{\frac{2}{3}}\right)^2=\frac{2}{3}$$

(2) 在自旋 -角度空间即 (θ,φ,s_z) 表象，电子态 $\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$ 表示为

$$|J,J_x\rangle=\sqrt{\frac{1}{3}}\begin{pmatrix}\mathrm{Y}_{10}\\ \sqrt{2}\mathrm{Y}_{11}\end{pmatrix}$$

从而

$$P(\theta,\varphi)\mathrm{d}\Omega=\frac{1}{3}(2\mathrm{Y}_{11}^*\mathrm{Y}_{11}+\mathrm{Y}_{10}^*\mathrm{Y}_{10})\,\mathrm{d}\Omega$$

在球坐标下，单位立体角发现电子的概率为

$$P(\theta,\varphi)=\frac{1}{3}\left(2\times\frac{3}{8\pi}\sin^2\theta+\frac{3}{4\pi}\cos^2\theta\right)=\frac{1}{4\pi}$$

(3) 弱磁场中 J,J_z 是好量子数，不改变本征态，有效磁矩是

$$\begin{aligned}\mu&=\left\langle\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right|\mu_z\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle=g\frac{e}{2mc}\left\langle\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right|J_z\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle\\&=g\cdot\frac{e\hbar}{4mc}\end{aligned}\tag{5.360}$$

其中

$$g=1+\frac{J(J+1)-l(l+1)+s(s+1)}{2J(J+1)}=\frac{2}{3}$$

这样

$$\mu=\frac{e\hbar}{6mc}$$

(4) 加强磁场时，磁矩与磁场的相互作用远大于自旋-轨道耦合作用，因此可忽略后者. 这时 l,s 是好量子数. 与磁场有关的 Hamilton 量为

$$H_B=-\boldsymbol{\mu}_l\cdot\boldsymbol{B}-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}=\frac{eB}{2mc}\hat{L}_z+\frac{eB}{mc}\hat{S}_z$$

磁场从 0 逐步加强时，态一直保持在能量最低. 从 H_B 的表达式可知，磁场变为强场后，只有 $L_z=-\hbar,\quad S_z=-\hbar/2$ 时，能量才能保持最低，因此终态量子数是

$$l=1,\quad L_z=-1,\quad s=\frac{1}{2},\quad s_z=-\frac{1}{2}$$

而有效磁矩是

$$\mu=\bar{\mu}_{lz}+\bar{\mu}_{sz}=-\frac{e\hbar}{2mc}-\frac{e\hbar}{2mc}=-\frac{e\hbar}{mc}$$

5.92　1/2 自旋粒子内禀磁矩处在外磁场中

题 5.92　一个中性粒子带 $\frac{1}{2}$ 自旋. 假设这个粒子有一磁矩 $\boldsymbol{\mu}=\gamma\boldsymbol{s}$，其中 γ 是一常数. 这一粒子的量子态可以用自旋空间来描述，它的基矢是 s_z 的两个本征态 $|+\rangle$ 及 $|-\rangle$，分别代表其自旋方向平行与反平行于 z 轴 (即 $s_z|+\rangle=\frac{\hbar}{2}|+\rangle, s_z|-\rangle=-\frac{\hbar}{2}|-\rangle$). 在 $t=0$ 时，系统状态为 $|\psi(t=0)\rangle=|+\rangle$. 这一粒子沿 y 轴运动，通过一沿 y 轴方向的均匀磁场 $\boldsymbol{B}=B_0\boldsymbol{e}_y$.

(1) $|\psi(t)\rangle$ 用 $|+\rangle$ 及 $|-\rangle$ 表示的表达式是什么?

(2) 自旋算符的三个分量的期望值 $\langle s_x\rangle$，$\langle s_y\rangle$，$\langle s_z\rangle$ 作为时间函数的表达式.

解法一　(1) 此粒子的 Hamilton 量可以写为

$$H=-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}=-cB_0S_y=-\hbar\omega\sigma_y,\quad \omega=\frac{cB_0}{2}\tag{5.361}$$

则 $|\psi(t)\rangle$ 可写为

$$|\psi(t)\rangle=\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}Ht}|\psi(0)\rangle=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t\sigma_y}|\uparrow\rangle\tag{5.362}$$

由公式

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta\sigma_y}=\cos\theta+\mathrm{i}\sin\theta\sigma_y$$

且注意到 $\sigma_y|\uparrow\rangle=\mathrm{i}|\downarrow\rangle$，则 $|\psi(t)\rangle$ 的表达式为

$$|\psi(t)\rangle=\cos(\omega t)|\downarrow\rangle-\sin(\omega t)|\downarrow\rangle\tag{5.363}$$

(2) 自旋的 x 方向分量的期望值作为时间函数的表达式为

$$\langle S_x\rangle_t=\frac{\hbar}{2}\langle\sigma_x\rangle_t=\frac{\hbar}{2}\langle\psi(t)|\sigma_x|\psi(t)\rangle=-\frac{\hbar}{2}\sin(2\omega t)=-\frac{\hbar}{2}\sin(cB_0t)\tag{5.364}$$

计算时，可以利用 $\sigma_x|\uparrow\rangle=|\downarrow\rangle$ 和 $\sigma_x|\downarrow\rangle=|\uparrow\rangle$. 而 y、z 方向自旋分量的期望值则为

$$\langle S_y\rangle_t=0;\quad \langle S_z\rangle_t=\frac{\hbar}{2}\cos(cB_0t) \tag{5.365}$$

解法二　(1) 粒子的 Hamilton 量为

$$H=-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}=-\gamma s_yB$$

在 $(\boldsymbol{s}^2,\ s_z)$ 表象中，$s_y=\dfrac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}\\ \mathrm{i}&0\end{pmatrix}$，容易求出 s_y 的两个本征态

$$\left|s_y=\frac{1}{2}\hbar\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}-\mathrm{i}\\1\end{pmatrix},\quad \left|s_y=-\frac{1}{2}\hbar\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}\mathrm{i}\\1\end{pmatrix}$$

满足

$$H\left|s_y=\frac{1}{2}\hbar\right\rangle=\gamma B\frac{1}{2}\hbar\left|s_y=\frac{1}{2}\hbar\right\rangle$$
$$H\left|s_y=-\frac{1}{2}\hbar\right\rangle=\gamma B\frac{1}{2}\hbar\left|s_y=-\frac{1}{2}\hbar\right\rangle$$

所以任何一粒子态可以表示成

$$|\psi(t)\rangle=c_1\left|s_y=\frac{1}{2}\hbar\right\rangle\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{1}{2}\gamma Bt}+c_2\left|s_y=-\frac{1}{2}\hbar\right\rangle\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{1}{2}\gamma Bt} \tag{5.366}$$

$t=0$ 时，$|\psi(t)\rangle=\left|s_z=\dfrac{1}{2}\hbar\right\rangle$，有

$$\left|s_z=\frac{1}{2}\hbar\right\rangle=c_1\left|s_y=\frac{1}{2}\hbar\right\rangle+c_2\left|s_y=-\frac{1}{2}\hbar\right\rangle$$

其中

$$c_1=\left\langle s_y=\frac{1}{2}\hbar\middle|s_z=\frac{1}{2}\hbar\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{i},\quad c_2=\left\langle s_y=-\frac{1}{2}\hbar\middle|s_z=\frac{1}{2}\hbar\right\rangle=-\frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{i}$$

这样

$$\begin{aligned}|\psi(t)\rangle&=\frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{i}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}-\mathrm{i}\\1\end{pmatrix}\exp\left(\mathrm{i}\frac{1}{2}\gamma Bt\right)-\frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{i}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}\mathrm{i}\\1\end{pmatrix}\exp\left(-\mathrm{i}\frac{1}{2}\gamma Bt\right)\\&=\cos\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right)\left|s_z=\frac{1}{2}\hbar\right\rangle-\sin\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right)\left|s_z=-\frac{1}{2}\hbar\right\rangle\end{aligned} \tag{5.367}$$

(2) 自旋的 z 方向分量的期望值作为时间函数的表达式为

$$\langle s_z\rangle=\left[\cos\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right)-\sin\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right)\right]\frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right)\\-\sin\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right)\end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2}\hbar\left[\cos\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right),\ \sin\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right)\right]\begin{bmatrix}\cos\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right)\\ -\sin\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right)\end{bmatrix} = \frac{1}{2}\hbar\cos(\gamma Bt)$$

因为 $t=0$ 时，$\langle S_y\rangle_t = 0$，而 S_y 与 Hamilton 量对易为守恒量，从而其期望值不随时间变化，均为 0. 自旋的 x 方向分量的期望值作为时间函数的表达式为

$$\begin{aligned}\langle s_x\rangle &= \left[\cos\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right)-\sin\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right)\right]\frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right)\\ -\sin\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right)\end{pmatrix}\\ &= \frac{1}{2}\hbar\left[-\sin\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right),\ \cos\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right)\right]\begin{bmatrix}\cos\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right)\\ -\sin\left(\frac{1}{2}\gamma Bt\right)\end{bmatrix} = -\frac{1}{2}\hbar\sin(\gamma Bt)\end{aligned}$$

5.93　磁共振问题 (1)

题 5.93　在一类核磁共振试验中采用：一个自旋为 1/2，磁矩为 μ 的粒子处于磁场 $\boldsymbol{B} = B_1\cos(\omega t)\boldsymbol{e}_x - B_1\sin(\omega t)\boldsymbol{e}_y + B_0\boldsymbol{e}_z$ 中，若 $t=0$ 时粒子的自旋沿 z 轴向上，求出 $t>0$ 时粒子自旋沿 z 轴向下的概率.

解答　体系的 Hamilton 量为

$$H = -\mu\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B} \tag{5.368}$$

令 $\omega_0 = +\mu B_0/\hbar$, $\omega_1 = +\mu B_1/\hbar$，则

$$H = -\hbar\omega_0\sigma_z - \hbar\omega_1\begin{pmatrix}0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} & 0\end{pmatrix} \tag{5.369}$$

而体系的波函数为

$$|t\rangle = \begin{pmatrix}a(t)\\ b(t)\end{pmatrix} \tag{5.370}$$

由 Schrödinger 方程 $\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}|t\rangle = H|t\rangle$，可导出 a、b 的方程为

$$\begin{cases}\dot{a} = +\mathrm{i}\omega_0 a + \mathrm{i}\omega_1\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\omega t}b\\ \dot{b} = -\mathrm{i}\omega_0 b + \mathrm{i}\omega_1\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}a\end{cases} \tag{5.371}$$

现在令

$$\begin{cases}a = \alpha\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\omega_0 t}\\ b = \beta\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}\end{cases} \tag{5.372}$$

则式 (5.371)可以写为

$$\begin{cases} \alpha = \mathrm{i}\omega_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}(-2\omega_0+\omega)t}\beta \\ \beta = \mathrm{i}\omega_1 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(-2\omega_0+\omega)t}\alpha \end{cases} \tag{5.373}$$

假设 α、β 具有如下形式：

$$\begin{cases} \alpha = A_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}(-2\omega_0+\omega+\Omega)t} \\ \beta = A_2 \mathrm{e}^{\mathrm{i}\Omega t} \end{cases} \tag{5.374}$$

其中，A_1、A_2 为常数，则

$$\begin{cases} (-2\omega_0+\omega+\Omega)A_1 - \omega_1 A_2 = 0 \\ -\omega_1 A_1 + \Omega A_2 = 0 \end{cases} \tag{5.375}$$

上式有非零解的充要条件是系数行列式为零，从而解出 Ω,

$$\Omega_\pm = -\left(-\omega_0 + \frac{\omega}{2}\right) \pm \sqrt{(-\omega_0+\omega/2)^2+\omega_1^2} \tag{5.376}$$

所以 β 的一般形式为

$$\beta = A_{2+}\exp(\mathrm{i}\Omega_+ t) + A_{2-}\exp(\mathrm{i}\Omega_- t) \tag{5.377}$$

利用式 (5.371)可得

$$\alpha = \frac{1}{\omega_1}\exp[\mathrm{i}(-2\omega_0+\omega)t]\left[\Omega_+ A_{2+}\exp(\mathrm{i}\Omega_+ t) + \Omega_- A_{2-}\exp(\mathrm{i}\Omega_- t)\right] \tag{5.378}$$

代入初始条件

$$|t=0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a(0) \\ b(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha(0) \\ \beta(0) \end{pmatrix} \tag{5.379}$$

可得

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\omega_1}(\Omega_+ A_{2+} + \Omega_- A_{2-}) = 1 \\ &A_{2+} + A_{2-} = 0 \end{aligned} \tag{5.380}$$

所以

$$A_{2+} = -A_{2-} = \frac{\omega_1}{\Omega_+ - \Omega_-} = \frac{\omega_1}{2\sqrt{(\omega_0-\omega/2)^2+\omega_1^2}} \tag{5.381}$$

因而

$$\begin{aligned} b(t) &= \exp(-\mathrm{i}\omega_0 t)\beta(t) = \exp(-\mathrm{i}\omega_0 t)A_{2+}\left[\exp(\mathrm{i}\Omega_+ t) - \exp(\mathrm{i}\Omega_- t)\right] \\ &= \exp(-\mathrm{i}\omega t/2)2\mathrm{i}A_{2+}\cdot\sin\left(t\sqrt{(\omega_0-\omega/2)^2+\omega_1^2}\right) \\ &= \frac{\mathrm{i}\omega_1\exp\left[-\mathrm{i}(\omega/2)t\right]}{\sqrt{(\omega_0-\omega/2)^2+\omega_1^2}}\sin\left(t\sqrt{(\omega_0-\omega/2)^2+\omega_1^2}\right) \end{aligned} \tag{5.382}$$

所求概率为

$$P=|\langle\sigma_z\downarrow|t\rangle|^2 \tag{5.383}$$

所以

$$P=|b(t)|^2=\frac{\omega_1^2\sin^2\left(t\sqrt{(\omega_0-\omega/2)^2+\omega_1^2}\right)}{\sqrt{(\omega_0-\omega/2)^2+\omega_1^2}} \tag{5.384}$$

5.94　磁矩 $\boldsymbol{\mu}=\mu_0\boldsymbol{\sigma}$ 粒子处于磁场 $\boldsymbol{B}=B_0\boldsymbol{e}_z+B_1\boldsymbol{e}_x$ 中状态随时间的演化

题 5.94　一磁矩为 $\boldsymbol{\mu}=\mu_0\boldsymbol{\sigma}$ 的自旋 $\frac{1}{2}$ 体系处于一个沿 z 轴的均匀常磁场 $\boldsymbol{B}_0$ 中. 在 $0<t<T$ 时，加入一个沿 x 轴的均匀常磁场 $\boldsymbol{B}_1$，此时，体系仍处于一个常磁场中，只不过大小不同，方向沿 z' 轴而已，在 $t=0$ 及以前，体系处于 $s_z=\hbar/2$ 态，s_z 是 $\boldsymbol{s}$ 的 z 分量.

(1) 在 $t=0^+$ 时，体系自旋沿 z' 轴的投影为 $s_{z'}=\hbar/2$ 的振幅是多少?

(2) 在 $0<t<T$ 时，关于 z' 轴的能量本征态如何随时间演变?

(3) 在 $t=T$ 时观察到体系处于自旋态 $s_z=\hbar/2$ 的概率幅是多少 (用 z 与 z' 的夹角 θ 和频率 $\omega_0=\mu_0B_0/\hbar$ 表示结果)?

解答　(1) 在 s_z 表象中，$s_{z'}$ 的本征矢为

$$\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}\end{pmatrix},\quad \begin{pmatrix}-\sin\dfrac{\theta}{2}\\ \cos\dfrac{\theta}{2}\end{pmatrix}$$

分别对应于本征值 $s_{z'}=\frac{1}{2},-\frac{1}{2}$，所以 $s_{z'}=\frac{1}{2},-\frac{1}{2}$ 的概率幅分别为

$$C_+=\left(\cos\frac{\theta}{2},\sin\frac{\theta}{2}\right)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\cos\frac{\theta}{2} \tag{5.385}$$

$$C_-=\left(-\sin\frac{\theta}{2},\cos\frac{\theta}{2}\right)\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}=-\sin\frac{\theta}{2} \tag{5.386}$$

(2) 在 $0<t<T$ 时的 Hamilton 量为

$$\begin{aligned}H&=-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}=-\mu_0\left[B_0\sigma_x+B_1\sigma_x\right]\\&=-\mu_0\begin{bmatrix}B_0&B_1\\B_1&-B_0\end{bmatrix}\end{aligned}$$

其本征态为

$$\chi_+(0)=\begin{bmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}\end{bmatrix}c,\quad \chi_-(0)=\begin{bmatrix}-\sin\dfrac{\theta}{2}\\ \cos\dfrac{\theta}{2}\end{bmatrix}$$

其中，$\theta=\arctan\left(\dfrac{B_1}{B_0}\right)$，本征态相应的本征值为

$$E_{\pm}=\mp\mu_0 B_0/\cos\theta=\mp\mu_0 B$$

其中，$B=\sqrt{B_0^2+B_1^2}$. 所以，在 $0<t<T$ 时，本征态随时间的演变为

$$\chi_{\pm}(t)=\exp(-\mathrm{i}Ht/\hbar)\chi_{\pm}(0)=\exp(+\mathrm{i}\mu_0 Bt/\hbar)\chi_{\pm}(0)$$

(3) **解法一**　$t=T$ 时观察到体系处于自旋态 $s_z=\hbar/2$ 的概率幅为

$$\begin{aligned}C_-(T) &= (0,1)\exp(-\mathrm{i}HT/\hbar)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\\ &= \frac{\mathrm{i}B_1}{\sqrt{{B_0}^2+B_1^2}}\sin\frac{\mu_0 T}{\hbar}\sqrt{B_1^2+{B_0}^2}\\ &= \mathrm{i}\sin\theta\sin\frac{\mu_0 BT}{\hbar}\end{aligned}$$

解法二　将 $t=0$ 时的初态 $\psi(0)$ 用 $0<t<T$ 时的 Hamilton 量的本征态展开

$$\psi(0)=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\cos\frac{\theta}{2}\chi_+(0)-\sin\frac{\theta}{2}\chi_-(0)$$

从而 $0<t<T$ 时的状态为

$$\psi(t)=\chi_+(0)\cos\frac{\theta}{2}\exp(\mathrm{i}\mu_0 Bt/\hbar)-\chi_-(0)\sin\frac{\theta}{2}\cdot\exp(-\mathrm{i}\mu_0 Bt/\hbar)$$

于是 $t=T$ 时观察到体系处于自旋态 $s_z=\hbar/2$ 的概率幅为

$$\begin{aligned}C_-(T) &= \beta^{\dagger}\psi(T)=\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}[\exp(\mathrm{i}\mu_0 BT/\hbar)-\exp(-\mathrm{i}\mu_0 BT/\hbar)]\\ &= \mathrm{i}\sin\theta\sin\frac{\mu_0 BT}{\hbar}\end{aligned}$$

5.95　磁共振问题 (2)

题 5.95　磁矩为 $\boldsymbol{\mu}=\mu\boldsymbol{\sigma}$ 的自旋 $\dfrac{1}{2}$ 系统被放入均匀恒定磁场 $B_0\boldsymbol{e}_z$ 中，其自旋态 $\left|+\dfrac{1}{2}\right\rangle$ 能量为 $\hbar\omega_0$，而 $\left|-\dfrac{1}{2}\right\rangle$ 态的能量为 0. $t=0$ 时，该系统处于 $\left|-\dfrac{1}{2}\right\rangle$ 态，此时突然加一磁场 $B_1\boldsymbol{e}_x\cos\omega_0 t+\boldsymbol{e}_y\sin\omega_0 t)$. 忽略弛豫效应，求在 t 时刻自旋系统的能量，以 $\omega_0 B$，$C\equiv\left\langle+\dfrac{1}{2}\middle|\mu_x+\mu_y\middle|-\dfrac{1}{2}\right\rangle$ 表出. 为什么该自旋系统能量不守恒?

解法一　系统的 Hamilton 量为

$$H=-\boldsymbol{\mu}\cdot(\boldsymbol{B}_1+\boldsymbol{B}_0)=-\mu\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{B}_1+\boldsymbol{B}_0)=-\mu\begin{pmatrix}B_0 & B_1\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}\\ B_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t} & -B_0\end{pmatrix}$$

Schrödinger 方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=H\psi$$

令 $\psi=\begin{pmatrix}a(t)\\ b(t)\end{pmatrix}$，得

$$\begin{cases}\dfrac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}t}=\dfrac{\mu\mathrm{i}}{\hbar}\left[B_0a+B_1b\exp(-\mathrm{i}\omega_0t)\right]\\ \dfrac{\mathrm{d}b}{\mathrm{d}t}=\dfrac{\mu\mathrm{i}}{\hbar}\left[B_1\exp(\mathrm{i}\omega_0t)a-B_0b\right]\end{cases}$$

再令

$$a=A\exp\left[-\mathrm{i}\left(\Omega+\frac{1}{2}\omega_0\right)t\right]$$
$$b=B\exp\left[-\mathrm{i}\left(\Omega+\frac{1}{2}\omega_0\right)t\right]$$

代入上式，得

$$\begin{cases}\left(\Omega+\dfrac{1}{2}\omega_0+\omega\right)A+\omega_1B=0\\ \left(\Omega-\dfrac{1}{2}\omega_0+\omega\right)B+\omega_1A=0\end{cases}$$

其中

$$\omega_0=\frac{\mu B_0}{\hbar},\quad \omega_1=\frac{\mu B_1}{\hbar}$$

非零解条件为系数行列式等于零：

$$\begin{vmatrix}\Omega+\left(\dfrac{1}{2}\omega_0+\omega\right) & \omega'\\ \omega' & \left(\Omega-\dfrac{1}{2}\omega_0-\omega\right)\end{vmatrix}=0$$

所以

$$\Omega_{1,2}=\pm\sqrt{\omega'^2+\left(\frac{1}{2}\omega_0+\omega\right)^2}$$

而自旋态为

$$\psi(t)=\left(A_1\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Omega t}+A_2\mathrm{e}^{\mathrm{i}\Omega t}\right)\exp\left(-\mathrm{i}\frac{\omega_0}{2}t\right)\alpha+\left(B_1\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Omega t}+B_2\mathrm{e}^{\mathrm{i}\Omega t}\right)\exp\left(\mathrm{i}\frac{\omega_0}{2}t\right)\beta$$

式中

$$B_{1,2}=-A_{1,2}\frac{\Omega_{1,2}+\left(\omega+\frac{1}{2}\omega_0\right)}{\omega'}$$

按题设 $t=0$ 时，$\psi=\beta$，所以

$$B_1+B_2=1,\quad A_1+A_2=0$$

联立求解得

$$A_1=\frac{\omega'}{2\Omega},\quad A_2=\frac{-\omega'}{2\Omega}$$

$$B_1=\frac{-\left[\Omega+\left(\omega+\frac{1}{2}\omega_0\right)\right]}{2\Omega},\quad B_2=\frac{\left[\left(\omega+\frac{1}{2}\omega_0\right)-\Omega\right]}{2\Omega}$$

从而

$$\begin{aligned}\psi(t) &= -\frac{\omega'}{\Omega}\mathrm{i}\sin\Omega t\exp\left(-\mathrm{i}\frac{\omega_0}{2}t\right)\alpha\\ &\quad+\left[-\cos\Omega t+\mathrm{i}\frac{\left(\omega+\frac{1}{2}\omega_0\right)}{\Omega}\sin\Omega t\right]\exp\left(\mathrm{i}\frac{\omega_0}{2}t\right)\beta\end{aligned}$$

系统能量期望值为

$$\begin{aligned}\bar{E}(t) &= \langle\psi|H|\psi\rangle\\ &= -\mu\left[-H_0\cos^2\Omega t+\frac{\omega'^2H_0-\left(\omega+\frac{1}{2}\omega_0\right)^2H_0-2\omega' H\left(\omega+\frac{\omega_0}{2}\right)}{\Omega^2}\sin^2\Omega t\right]\\ &= \mu H_0\cos^2\Omega t+\mu H_0\frac{\left(\omega+\frac{1}{2}\omega_0\right)^2-\omega'^2}{\Omega^2}\sin^2\Omega t+\mu H\frac{2\omega'\left(\omega+\frac{\omega_0}{2}\right)}{\Omega^2}\sin^2\Omega t\\ &= \hbar\omega\cos^2\Omega t+\hbar\omega\cdot\frac{\left(\omega+\frac{1}{2}\omega_0\right)^2-\omega'^2}{\Omega^2}\sin^2\Omega+\hbar\omega'\frac{2\omega'\left(\omega+\frac{\omega_0}{2}\right)}{\Omega^2}\cdot\sin^2\Omega t\\ &= \hbar\omega\frac{\left(\omega+\frac{1}{2}\omega_0\right)^2+\omega'^2\cos2\Omega t}{\left(\omega+\frac{1}{2}\omega_0\right)^2+\omega'^2}+2\hbar\omega'\cdot\frac{\omega'\left(\omega+\frac{\omega_0}{2}\right)}{\left(\omega+\frac{1}{2}\omega_0\right)^2+\omega'^2}\sin2\Omega t\end{aligned}$$

可见能量期望值随 t 变化，因而系统能量不守恒. 就自旋系统来看，它并不是孤立系统.

解法二　$\Delta E_0=\hbar\omega_0=2\mu H_0,\quad \mu H_0=(1/2)\,\hbar\omega_0$. 又假设 $\mu B_0=\hbar\omega$，系统 Hamilton 量为

$$H=-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}=-\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}=-\mu\begin{pmatrix}B_0 & B_1\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}\\ B_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t} & -B_0\end{pmatrix}=-\hbar\begin{pmatrix}\frac{1}{2}\omega_0 & w\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}\\ \omega\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t} & -\frac{1}{2}\omega_2\end{pmatrix}$$

Schrödinger 方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=H\psi$$

令 $\psi=\begin{pmatrix}a(t)\\ b(t)\end{pmatrix}$，得

$$\begin{cases}\mathrm{i}\dfrac{\partial a}{\partial t}=-\dfrac{1}{2}\omega_0 a-\omega\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}b\\[2ex] \mathrm{i}\dfrac{\partial b}{\partial t}=-\omega\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t}a+\dfrac{1}{2}\omega_0 b\end{cases}$$

按题设，初始条件是 $a(0)=0,\ b(0)=1$. 利用 Laplace 变换方法，得

$$\begin{cases}\mathrm{i}p\bar{a}(p)=-\dfrac{1}{2}\omega_0\bar{a}(p)-\omega\bar{b}(p+\mathrm{i}\omega_0)\\[2ex] \mathrm{i}p\bar{b}(p)-\mathrm{i}=-\omega\bar{a}(p-\mathrm{i}\omega_0)+\dfrac{1}{2}\omega_0\bar{b}(p)\end{cases}$$

式中，以 $\bar{f}(p)$ 表示 $f(t)$ 的 Laplace 变换.

由上面两式解得

$$\begin{aligned}\bar{a}(p) &= \frac{\mathrm{i}\omega}{\Omega}\frac{\Omega}{(p+\mathrm{i}\omega_0/2)^2+\Omega^2}\\ \bar{b}(p) &= \frac{\mathrm{i}p+\dfrac{3}{2}\omega_0}{\omega}\bar{a}(p-\mathrm{i}\omega_0)=\frac{p-\dfrac{3}{2}\mathrm{i}\omega_0}{(p-\mathrm{i}\omega_0/2)^2+\Omega^2}\\ &= \frac{p-\mathrm{i}\omega_0/2}{(p-\mathrm{i}\omega_0/2)^2+\Omega^2}-\frac{\mathrm{i}\omega_0}{\Omega}\frac{\Omega}{(p-\mathrm{i}\dfrac{\omega_0}{2})^2+\Omega^2}\end{aligned}$$

式中，$\Omega^2=\omega^2+\omega_0^2$. 作 Laplace 反变换得

$$\begin{aligned}a(t) &= \mathrm{i}\frac{\omega}{\Omega}\sin\Omega t\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\omega_0}{2}t}\\ b(t) &= \left(\cos\Omega t-\mathrm{i}\frac{\omega_0}{\Omega}\sin\Omega t\right)\exp\left(\mathrm{i}\omega_0 t/2\right)\end{aligned}$$

所以

$$\begin{aligned}\bar{E}(t) &= \langle\psi|H|\psi\rangle\\ &= -\hbar(a^*(t),\ b^*(t))\begin{pmatrix}\dfrac{\omega_0}{2} & \omega\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}\\ \omega\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t} & -\dfrac{\omega_0}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a(t)\\ b(t)\end{pmatrix}\end{aligned}$$

$$= \frac{1}{2}\hbar\omega_0\left[\cos^2\Omega t + \frac{1}{\Omega^2}\left(\omega_0^2+3\omega^2\right)\sin^2\Omega t\right]$$

考虑到以 $t=0$ 时刻 $|-1/2\rangle$ 态的能量值为零点，所以应在 $\bar{E}(t)$ 表达式中减去 $(1/2)\hbar\omega_0$. 又由于

$$c = \left\langle +\frac{1}{2}\left|\mu_x + \mathrm{i}\mu_y\right| -\frac{1}{2}\right\rangle = \mu(1,0)\begin{pmatrix}0 & 2\\ 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix} = 2\mu$$

所以

$$\Omega^2 = \omega^2+\omega_0^2 = (\mu H/\hbar)^2+\omega_0^2 = c^2H^2/4\hbar^2+\omega_0^2$$

最后得

$$\begin{aligned}\bar{E}(t) &= \frac{1}{2}\hbar\omega_0\left[\cos^2\Omega t + \frac{\Omega^2+2\omega^2}{\Omega^2}\sin^2\Omega t\right] - \frac{1}{2}\hbar\omega_0 = \frac{\omega^2}{\Omega^2}\hbar\omega_0\sin^2\Omega t\\ &= \frac{c^2B_1^2}{c^2B_1^2+4\hbar^2\omega_0^2}\hbar\omega_0\sin^2\sqrt{\omega_0^2+\frac{c^2B_1^2}{4\hbar^2 t}}\end{aligned}$$

5.96　中子束相继穿过两个方向不同磁场时，自旋态的演化

题 5.96　一束速度为 $\boldsymbol{v}$ 的中子穿过区域 (I)(这里磁场 $\boldsymbol{B}=B_1\boldsymbol{e}_z$) 到达区域 (II)(这里磁场 $\boldsymbol{B}=B_2\boldsymbol{e}_x$). 在区域 (I) 中，中子束完全沿 $+z$ 方向极化.

(1) 假定一给定的粒子在 $t=0$ 时刻穿过区域 (I) 到达区域 (II)， $t>0$ 时该粒子的自旋波函数是什么?

(2) 粒子束被观察在 $+x$， $+y$ 和 $+z$ 方向的成分各是多少?

(3) 作为实际的事件，为使上述描述有效，(I) 和 (II) 之间的转换必须多快?

解答　(1) 只考虑自旋波函数，则相应的 Schrödinger 方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\chi\rangle = H|\chi\rangle$$

其中，Hamilton 量为

$$H = -\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B} = -\mu_{\mathrm{n}}B_2\sigma_x$$

式中，$\mu_{\mathrm{n}} = -1.9103\mu_{\mathrm{N}}$ 为中子反常磁矩，$\mu_{\mathrm{N}} = \dfrac{e\hbar}{2m_{\mathrm{p}}c}$ 为核磁子，m_{p} 为质子质量. 因此

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\chi\rangle = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mu_{\mathrm{n}}B_2\sigma_x|\chi\rangle \equiv -\mathrm{i}\omega_2\sigma_x|\chi\rangle$$

设 $|x\rangle = \begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}$，则

$$\begin{cases}\dot{a} = -\mathrm{i}\omega_2 b\\ \dot{b} = -\mathrm{i}\omega_2 a\end{cases}$$

结合初始条件 $a(0)=1$, $b(0)=0$，解得当 $t>0$ 时

$$|\chi\rangle=\begin{pmatrix}\cos(\omega_2 t)\\ -\mathrm{i}\sin(\omega_2 t)\end{pmatrix}$$

其中，$\omega_2=\dfrac{|\mu_{\mathrm{N}}|B_2}{\hbar}$.

(2) 自旋在 $|\chi\rangle$ 态中的平均，也即中子的极化矢量为

$$\boldsymbol{P}=\langle\chi|\boldsymbol{\sigma}|\chi\rangle=(0,-\sin 2\omega_2 t,\cos 2\omega_2 t)$$

可见，在区域 II 中，中子自旋是在 y-z 平面内以 $2\omega_2$ 频率绕 x 轴正向旋转着.

(3) 为使 (1) 和 (2) 中的描述有效，从 (I) 到 (II) 的过渡所花费的时间必须满足

$$t\ll\frac{2\pi}{\omega_2}=\frac{\hbar}{|\mu_{\mathrm{n}}|B_2}$$

取 $B_2\sim 10^3\mathrm{Gs}$，可得

$$t\ll 0.7\mu\mathrm{s}$$

若已知入射中子的动能，就可由此计算出这个磁场过渡区域的宽度上限.

5.97　原子在外磁场中 Hamilton 量中各项的意义

题 5.97　(μ^+e^-) 原子 (处于 $n=1$, $l=0$ 态) 在外磁场中的 Hamilton 量是

$$H=a\boldsymbol{S}_\mu\cdot\boldsymbol{S}_{\mathrm{e}}+\frac{|e|}{m_{\mathrm{e}}c}\boldsymbol{S}_{\mathrm{e}}\cdot\boldsymbol{B}-\frac{|e|}{m_\mu c}\boldsymbol{S}_\mu\cdot\boldsymbol{B}$$

(1) 各项的物理意义是什么？在和外场相互作用中哪项占主导地位？

(2) 选 z 轴沿 $\boldsymbol{B}$，用记号 (F,M_F)，其中 $\boldsymbol{F}=\boldsymbol{S}_\mu+\boldsymbol{S}_{\mathrm{e}}$. 证明 $(1,+1)$ 是 H 的本征态并给出其本征值；

(3) 用射频场可引起向态 $(0,0)$ 的跃迁. 定性描述怎样通过观察衰变 $\mu^+\to e^+\nu_{\mathrm{e}}\nu_\mu$ 去探测到这个跃迁的出现.

解答　(1) H 中的第一项是 μ^+ 子与电子间的相互作用，后两项分别表示 μ^+ 子与电子同外场 $\boldsymbol{B}$ 的磁相互作用. 其中 $\dfrac{|e|}{m_{\mathrm{e}}c}\boldsymbol{S}_{\mathrm{e}}\cdot\boldsymbol{B}$ 占主导地位，因为 $m_{\mathrm{e}}\approx\dfrac{m_\mu}{200}$.

(2) 按题设

$$\boldsymbol{F}=\boldsymbol{S}_\mu+\boldsymbol{S}_{\mathrm{e}}$$

Hamilton 量为

$$H=\frac{1}{2}a\left[F^2-S_\mu^2-S_{\mathrm{e}}^2\right]+\frac{eB}{m_{\mathrm{e}}c}S_{\mathrm{e}z}-\frac{eB}{m_\mu c}S_{\mu z}$$

作用到态

$$(1,\ 1)=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_{\mathrm{e}}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}_{\mu}$$

给出

$$H(1,\ 1) = \left\{\frac{1}{2}a\hbar^2\left(2-2\cdot\frac{3}{4}\right)+\frac{e\hbar}{2m_{\mathrm{e}}c}B-\frac{e\hbar}{2m_{\mu}c}B\right\}(1,\ 1)$$
$$= \left(\frac{1}{4}a\hbar^2+\frac{e\hbar}{2m_{\mathrm{e}}c}B-\frac{e\hbar}{2m_{\mu}c}B\right)(1,\ +1)$$

所以，$(1,\ +1)$ 是 H 的本征态且本征值为

$$\frac{1}{4}a\hbar^2+\frac{e\hbar}{2m_{\mathrm{e}}c}B-\frac{e\hbar}{2m_{\mu}c}B$$

(3) 衰变 $\mu^+\to e^+\nu_e\nu_\mu$ 是通过正负电子湮灭 $e^+e^-\to 2\gamma$ 而观察到的. 对于 $(1,\ +1)$ 态，e^+e^- 系统的总角动量为 1，因而不能衰变成 2γ(该系统的总角动量是 0. 对于 $(0,\ 0)$ 态，e^+e^- 系统的总角动量为 0，因而可以衰变成 2γ. 所以，探测到 $e^+e^-\to 2\gamma$，也即探测到 (μ^+e^-) 系统在 $(0,\ 0)$ 态下进行的衰变 $\mu^+\to e^+\nu_e\nu_\mu$，也就观察到了 $(1,+1)\to(0,0)$ 的跃迁.

5.98　含自旋算符的开根和逆

题 5.98　讨论下列算符是否存在? 如存在，将它表示成 σ_x、σ_y、σ_z 和 1 的线性叠加.

(1) $(1+\sigma_x)^{1/2}$; (2) $(1+\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y)^{1/2}$; (3) $(1+\sigma_x)^{-1}$.

解答　解法一　(1) 记 σ_x、σ_y、σ_z 和 1 为 σ_1、σ_2、σ_3 和 σ_0，它们构成 2×2 复矩阵的完备基. σ_i 的乘法满足如下代数关系：

$$\sigma_i\sigma_j=\delta_{ij}+\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_k,\quad i,j,k=1,2,3 \tag{5.387}$$

$1+\sigma_x$ 为一非负定的 Hermite 算符，作开方运算结果仍为一个 Hermite 算符. 由于 $\sigma_\alpha(\alpha=0,1,2,3)$ 的完备性，可设

$$(1+\sigma_x)^{1/2}=\sum_\alpha C_\alpha\sigma_\alpha \tag{5.388}$$

两边平方，利用式 (5.387) 得

$$1+\sigma_1=\sum_{\alpha=0}^{3}C_\alpha^2+2C_0\sum_{i=1}^{3}C_i\sigma_i+0$$

比较两边相同项的系数，得

$$\sum_{\alpha=0}^{3}C_\alpha^2=1,\quad 2C_0C_1=1,\quad 2C_0C_2=2C_0C_3=0$$

解得

$$C_0=C_1=\frac{1}{\sqrt{2}},\quad C_2=C_3=0$$

另一解 $C_0=C_1=-\dfrac{1}{\sqrt{2}}, C_2=C_3=0$ 舍去. 这样

$$(1+\sigma_x)^{1/2}=\frac{1}{\sqrt{2}}(1+\sigma_x)$$

(2) 我们设

$$(1+\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y)^{1/2}=(1+\sigma_1+\mathrm{i}\sigma_2)^{1/2}=\sum_{\alpha}C_\alpha\sigma_\alpha \tag{5.389}$$

两边平方，利用式 (5.387) 得

$$1+\sigma_1+\mathrm{i}\sigma_2=\sum_{\alpha=0}^{3}C_\alpha^2+2C_0\sum_{i=1}^{3}C_i\sigma_i+0$$

比较两边相同项的系数，得

$$\sum_{\alpha=0}^{3}C_\alpha^2=1,\quad 2C_0C_1=1,\quad 2C_0C_2=\mathrm{i},\quad 2C_0C_3=0$$

上式有 2 组解，取 $C_0>0$ 的解得

$$C_0=1,\quad C_1=\frac{1}{2},\quad C_2=\frac{\mathrm{i}}{2},\quad C_3=0$$

这样

$$(1+\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y)^{1/2}=1+\frac{1}{2}(\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y)$$

(3) 在 σ_x 表象易知 $\det(1+\sigma_x)=0$，故 $(1+\sigma_x)$ 无逆矩阵，即 $(1+\sigma_x)^{-1}$ 不存在.

解法二　(1) 利用本题附录，可设

$$(1+\sigma_x)^{1/2}=C_0I+C_1\sigma_x$$

上式分别作用到 σ_x 的 2 个本征态上给出

$$\sqrt{2}=C_0+C_1,\quad C_0-C_1=0$$

解得

$$C_0=C_1=\frac{1}{\sqrt{2}},\quad C_2=C_3=0$$

这样

$$(1+\sigma_x)^{1/2}=\frac{1}{\sqrt{2}}(1+\sigma_x)$$

(2) 令 $A=\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y$，$A$ 的本征值为 0(二重根)，且 A 不能通过相似变换对角化. 令

$$(1+A)^{1/2}=C_0+C_1A$$

上式的导数为

$$\frac{1}{2}(1+A)^{-1/2}=C_1$$

将以上两式作用于 A 的本征态 (本征值为 0) 上有

$$C_0=1,\quad C_1=\frac{1}{2}$$

因而

$$(1+\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y)^{1/2}=1+\frac{1}{2}(\sigma_x+\mathrm{i}\sigma_y)$$

与前面解答一致.

附录　(有限维算符 (矩阵) 整函数展开的一种简单方法) 设 A 为 n 维方阵，由线性代数中的 Hamilton-Cayley 定理，构造关于 λ 的 n 次多项式 $\varphi(\lambda)=\det(A-\lambda I)$，必有 $\varphi(A)=0$. 由于 $\varphi(\lambda)$ 为 λ 的 n 次多项式，故

$$\sum_{i=0}^{n-1}C_iA^i+A^n=0$$

即 A^n(从而任意的 $A^k,\ k\geqslant n$) 可由 $I,A,\cdots,A^{n-1}$ 线性表示，因此对于任意的整函数 $f(x)=\sum\limits_{i=0}^{n-1}C_ix^i$，有

$$f(A)=\sum_{i=0}^{n-1}b_iA^i \tag{5.390}$$

若 A 的本征值 $\lambda_i(i=1,2,3,\cdots,n)$ 皆为单根，可将式 (5.390) 作用于 A 的相互独立的 n 个本征态 $|\lambda_i\rangle$ 上有

$$f(\lambda_i)=\sum_{l=0}^{n-1}b_l\lambda_i^l,\quad i=1,2,3,\cdots,n \tag{5.391}$$

这是关于 b_l 的 n 个独立方程，可将 $f(A)$ 中 n 个系数 b_l $(l=0,1,2,\cdots,n-1)$ 解出.

若 λ_i 中有重根，不妨假设 λ_j 为 f_j 重根. 方程组 (5.391) 中 n 个方程不独立. 但我们可将式 (5.390) 及其 1 至 (f_j-1) 阶导数作用到 f_j 重根 λ_j 对应的本征态 $|\lambda_j\rangle$ 上，这样仍可有 n 个独立方程以确定 b_l $(l=0,1,2,\cdots,n-1)$. 对于 λ_i 中有重根，但 A 是可对角化的 (相似变换)，这时式 (5.390) 可简化. 设 A 的所有互异的本征值为 λ_i $(i=1,2,3,\cdots,m<n)$，可证 A 的最简单多项式为

$$m_A(\lambda)=\prod_{i=1}^{m}(\lambda-\lambda_i)$$

即有

$$m_A(A)=0$$

这时 $f(A)$ 的展开式为

$$f(A)=\sum_{l=0}^{n-1}C_lA^l$$

第 6 章　带电粒子在电磁场中运动问题

6.1　速度算符及各分量间的对易关系

题 6.1　质量为 m，电荷为 q 的非相对论粒子在电磁场中运动时，Hamilton 量算符为

$$H=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+q\varphi$$

其中，$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$、$\varphi(\boldsymbol{r},t)$ 分别是电磁场的矢势和标势，$\boldsymbol{p}=-\mathrm{i}\hbar\nabla$ 是正则动量算符，定义速度算符

$$\boldsymbol{v}=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{r},H]$$

求 $\boldsymbol{v}$ 的具体表示式以及它的各分量之间的对易关系，并给出 $[v_\alpha,x_\beta]$ 的值.

解答　按题设

$$\boldsymbol{v}=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{r},H]=\frac{1}{2\mathrm{i}\hbar m}\left[\boldsymbol{r},\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\right] \tag{6.1}$$

注意到 $\boldsymbol{r}$ 与 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$ 对易，且 $[x_\alpha,p_\beta]=\mathrm{i}\hbar\delta_{\alpha\beta}$，有

$$\boldsymbol{v}=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m\mathrm{i}\hbar}\times 2\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)=\frac{1}{m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right) \tag{6.2}$$

利用

$$[\boldsymbol{p},\ F(\boldsymbol{r})]=-\mathrm{i}\hbar\nabla F(\boldsymbol{r})$$

可得

$$\begin{aligned}[v_\alpha,v_\beta] &= -\frac{q}{m^2c}([p_\alpha,A_\beta]+[A_\alpha,p_\beta])=\frac{\mathrm{i}\hbar q}{m^2c}\left(\frac{\partial A_\beta}{\partial x_\alpha}-\frac{\partial A_\alpha}{\partial x_\beta}\right)\\ &= \frac{\mathrm{i}\hbar q}{m^2c}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}(\nabla\times\boldsymbol{A})_\gamma=\frac{\mathrm{i}\hbar q}{m^2c}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}B_\gamma\end{aligned}$$

可见速度算符各分量的对易关系可表示为

$$[v_\alpha,v_\beta]=\frac{\mathrm{i}\hbar q}{m^2c}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}B_\gamma \tag{6.3}$$

或者

$$\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{v}=\mathrm{i}\hbar\frac{q}{m^2c}\boldsymbol{B} \tag{6.4}$$

利用上面式 (6.2)，

$$[v_\alpha,x_\beta]=\frac{1}{m}\left[p_\alpha-\frac{q}{c}A_\alpha,x_\beta\right]=\frac{1}{m}[p_\alpha,x_\beta]$$

$$= -\frac{\mathrm{i}\hbar}{m}\delta_{\alpha\beta} \tag{6.5}$$

说明　利用上面式 (6.4)，容易证明

$$\left[\boldsymbol{v}, v^2\right] = \mathrm{i}\hbar\frac{q}{m^2c}(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B} - \boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v}) \tag{6.6}$$

例如对 v_i 分量

$$\begin{aligned}\left[v_i, \boldsymbol{v}^2\right] &= \left[v_i, v_j v_j\right] = v_j\left[v_i, v_j\right] + \left[v_i, v_j\right]v_j = v_j\frac{\mathrm{i}\hbar q}{m^2c}\varepsilon_{ijk}B_k + \frac{\mathrm{i}\hbar q}{m^2c}\varepsilon_{ijk}B_k v_j \\ &= \frac{\mathrm{i}\hbar q}{m^2c}\left(\varepsilon_{ijk}v_j B_k + \varepsilon_{ijk}B_k v_j\right) = \frac{\mathrm{i}\hbar q}{m^2c}(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B} - \boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v})_i\end{aligned}$$

即有 $\left[\boldsymbol{v}, \boldsymbol{v}^2\right] = \dfrac{\mathrm{i}\hbar q}{m^2c}(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B} - \boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v})$，此即式 (6.6).

6.2　(机械) 速度算符、机械角动量算符的时间导数算符

题 6.2　质量为 m，电荷为 q 的非相对论粒子在电磁场 $\boldsymbol{B} = \nabla\times\boldsymbol{A}$ 中运动，定义机械角动量算符

$$\boldsymbol{L} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{r}\times m\boldsymbol{v} - m\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{r})$$

$\boldsymbol{v}$ 为 (机械) 速度算符，求 $\dfrac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}$、$\dfrac{\mathrm{d}\boldsymbol{L}}{\mathrm{d}t}$.

解答　Hamilton 量算符可写为

$$H = \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 = \frac{1}{2}mv^2 \tag{6.7}$$

利用题 10.1 中 $\boldsymbol{v}$ 与 $\boldsymbol{v}^2$ 的对易关系 (6.6)，有

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{v}, H] = \frac{q}{2mc}(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B} - \boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v}) \tag{6.8}$$

因为

$$\boldsymbol{L} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{r}\times m\boldsymbol{v} - m\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{r}) \tag{6.9}$$

所以

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{L}}{\mathrm{d}t} = \frac{m}{2}\left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\times\boldsymbol{v} + \boldsymbol{r}\times\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} - \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}\times\boldsymbol{r} - \boldsymbol{v}\times\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\right) \tag{6.10}$$

利用式 (6.8)和 $\dfrac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{v}$，有

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{L}}{\mathrm{d}t} = \frac{q}{4c}[\boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}) - \boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v}) - (\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B})\times\boldsymbol{r} + (\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v})\times\boldsymbol{r}] \tag{6.11}$$

令 $\boldsymbol{F} = \dfrac{q}{2c}(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B} - \boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v})$，则有

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{L}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{2}[\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{F} - \boldsymbol{F}\times\boldsymbol{r}] \tag{6.12}$$

6.3 自由电子在外磁场中的 Hamilton 量

题 6.3 在非相对论情况下，自由电子的磁矩为 $\boldsymbol{\mu}$，处于恒定均匀外磁场中. 问：
(1) 系统的 Hamilton 量形式如何 (设磁场为 B_z)；
(2) 如果在 y 轴方向再加一个常磁场 B_y，则系统的 Hamilton 量形式又如何；
(3) 设为一般磁场，确定算符 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{\mu}$ 的形式.

解答 (1) 系统的 Hamilton 量可写为

$$H=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B} \tag{6.13}$$

其中，$q=-e$，而

$$\boldsymbol{\mu}=-\frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}=-\frac{e}{mc}\boldsymbol{s}$$

因为 $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}=B_z\boldsymbol{e}_z$，可取 $\boldsymbol{A}=-B_zy\boldsymbol{e}_x$，则有

$$H=\frac{1}{2m}\left(p_x-\frac{e}{c}B_zy\right)^2+\frac{1}{2m}p_y^2+\frac{1}{2m}p_z^2+\frac{e\hbar}{2mc}B_z\sigma_z \tag{6.14}$$

(2) 在 y 轴方向再加一个常磁场 B_y，我们可取 $\boldsymbol{A}=-\left(B_zy\boldsymbol{e}_x+B_yx\boldsymbol{e}_z\right)$，这相应

$$\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}=B_y\boldsymbol{e}_y+B_z\boldsymbol{e}_z \tag{6.15}$$

这样

$$H=\frac{1}{2m}\left(p_x-\frac{e}{c}B_zy\right)^2+\frac{1}{2m}p_y^2+\frac{1}{2m}\left(p_z-\frac{e}{c}B_yx\right)^2+\frac{e\hbar}{2mc}\left(B_y\sigma_y+B_z\sigma_z\right) \tag{6.16}$$

(3) 一般情况下

$$H=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B} \tag{6.17}$$

因而

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\mu}}{\mathrm{d}t}&=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{\mu},H]=-\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left(\frac{e\hbar}{2mc}\right)^2[\sigma_\alpha\boldsymbol{e}_\alpha,\sigma_\beta B_\beta]\\&=-\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left(\frac{e\hbar}{2mc}\right)^2\boldsymbol{e}_\alpha B_\beta[\sigma_\alpha,\sigma_\beta]=-\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left(\frac{e\hbar}{2mc}\right)^2\times2\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\boldsymbol{e}_\alpha B_\beta\sigma_\gamma\\&=\frac{e}{mc}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{\mu}=-\boldsymbol{\mu}\times\boldsymbol{\omega}\end{aligned}$$

或者

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\mu}}{\mathrm{d}t}=\frac{e}{mc}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{\mu}=-\boldsymbol{\mu}\times\boldsymbol{\omega} \tag{6.18}$$

其中，$\boldsymbol{\omega}=\dfrac{e}{mc}\boldsymbol{B}$，其方向沿 $\boldsymbol{B}$，大小为电子在该磁场中的回转频率，或者 2 倍 Larmor 频率. 上式表示 $\boldsymbol{\mu}$ 绕 $\boldsymbol{B}$ 反方向以回转频率进动.

6.4　带电粒子在均匀磁场中运动的轨道中心算符

题 6.4　质量为 μ、电荷为 q 的粒子，在沿 z 轴方向的均匀磁场作用下在 x、y 平面上运动，定义轨道中心算符 $x_0=x+\dfrac{1}{\omega}v_y$，$y_0=y-\dfrac{1}{\omega}v_x$，其中 $\omega=qB/(\mu c)$，说明 x_0、y_0 的经典力学的意义，并证明它们是运动常数.

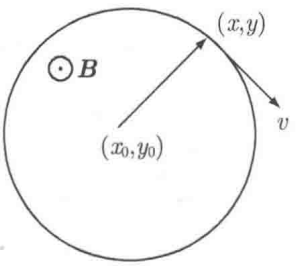


图 6.1　带电粒子在均匀恒定磁场中的经典轨道运动

解答　在经典力学中，粒子受 Lorentz 力的作用，将做匀速圆周运动，如图 6.1所示 $(q>0)$. 设 $\boldsymbol{r}_0(x_0,y_0)$ 为轨道中心，则粒子相对于轨道中心的位移为 $\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0$，角速度和速度分别为

$$\boldsymbol{\omega}=(0,0,-\omega),\quad \boldsymbol{v}=\boldsymbol{\omega}\times(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)$$

因此

$$\begin{aligned}v_x&=\omega_y(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)_z-\omega_z(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)_y=\omega(y-y_0)\\ v_y&=\omega_z(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)_x-\omega_x(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)_y=-\omega(x-x_0)\end{aligned}$$

也即

$$x_0=x+\frac{1}{\omega}v_y,\quad y_0=y-\frac{1}{\omega}v_x \tag{6.19}$$

将 $\boldsymbol{v}$ 换成算符，即得轨道中心算符 $x_0=x+\dfrac{1}{\omega}v_y$，$y_0=y-\dfrac{1}{\omega}v_x$.

根据题 10.1 和题 10.2 的结果有：

$$[x,v_x]=\left[x,\frac{1}{\mu}\left(p_x-\frac{q}{c}A_x\right)\right]=\frac{1}{\mu}[x,p_x]=\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu} \tag{6.20}$$

$$[y,v_y]=\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu} \tag{6.21}$$

$$[x,v_y]=[y,v_x]=0 \tag{6.22}$$

$$[v_x,v_y]=\mathrm{i}\hbar\frac{q}{\mu^2c}B_z=\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu}\frac{qB}{\mu}=\frac{\mathrm{i}\hbar\omega}{\mu} \tag{6.23}$$

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{v},H]=\frac{q}{2\mu c}(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}-\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v}) \tag{6.24}$$

因此

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}x_0}{\mathrm{d}t} &= \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}+\frac{1}{\omega}\frac{\mathrm{d}v_y}{\mathrm{d}t}=v_x+\frac{q}{2\mu c\omega}\left[(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B})_y-(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v})_y\right]\\ &= v_x+\frac{1}{2B}[\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}-\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v}]_y=v_x-v_x=0 \qquad (6.25)\\ \frac{\mathrm{d}y_0}{\mathrm{d}t} &= \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t}-\frac{1}{\omega}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}v_x=v_y-\frac{1}{2B}[\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}-\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v}]_x=v_y-v_y=0 \qquad (6.26)\end{aligned}$$

并有

$$[x_0,y_0]=\frac{1}{\omega}[v_y,y]-\frac{1}{\omega}[x,v_x]-\frac{1}{\omega^2}[v_y,v_x]=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu\omega} \tag{6.27}$$

由式 (6.25)、式(6.26)可知：轨道中心算符 x_0、 y_0 为运动常数 (守恒量)，这与经典力学一致. 由式 (6.27)可知， x_0 和 y_0 是不对易的，它们一般不能同时取确定值. 由不确定性关系

$$\Delta A\cdot\Delta B\geqslant\frac{1}{2}\left|\overline{[A,B]}\right|$$

可知

$$\Delta x_0\cdot\Delta y_0\geqslant\frac{\hbar}{2\mu\omega}=\frac{\hbar c}{2qB} \tag{6.28}$$

而在经典力学中，轨道中心当然是可以精确确定的.

说明 1　x_0、 y_0 为守恒量也可以通过直接检查它们与 H 的对易子为零来证明，例如取不对称规范： $A_x=-By$, $A_y=-A_z=0$，粒子的 Hamilton 量为

$$\begin{aligned}H &= \frac{1}{2\mu}\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2=\frac{1}{2\mu}\left[\left(p_x-\frac{qB}{c}y\right)^2+p_y^2+p_z^2\right]\\ &= \frac{1}{2\mu}\left[p_x^2+\frac{2qBy}{c}+\frac{q^2B^2y^2}{c^2}+p_y^2+p_z^2\right]\end{aligned}$$

因而

$$\begin{aligned}[x_0,H] &= \frac{1}{2\mu}\left[\frac{cp_y}{qB}+x,p_x^2+\frac{2qBy}{c}p_x+\frac{q^2B^2y^2}{c^2}+p_y^2+p_z^2\right]\\ &= \frac{1}{\mu}[p_y,y]p_x+\frac{qB}{2\mu c}[p_y,y^2]+\frac{qBy}{\mu c}[x,p_x]+\frac{1}{2\mu}[x,p_x^2]\\ &= -\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu}p_x-\frac{\mathrm{i}\hbar qBy}{\mu c}+\frac{\mathrm{i}\hbar qBy}{\mu c}+\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu}p_x=0\end{aligned}$$

同样 $[y_0,H]=0$.

说明 2　本题中 x_0、 y_0 这两个守恒量不对易，其对易子如式 (6.27)所给为常量. 这意味着体系每一个能级都具有无穷大的简并度，这是 Landau 能级的特点. 有关讨论可参见曾谨言, 量子力学: 卷 I[M]. 5 版. 北京: 科学出版社, 2013, P.162-163, P.255-256.

6.5　带电粒子在均匀磁场中运动的轨道中心算符和轨道半径的本征值谱

题 6.5　在均匀磁场 $\boldsymbol{B}(0,0,B)$ 作用下，质量为 μ、带电为 q 的粒子在 x-y 平面运动，求轨道中心算符 $\boldsymbol{r}_0^2$ 和轨道半径 $\rho^2=|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0|^2=\dfrac{1}{\omega^2}\left(v_x^2+v_y^2\right)$ 的本征值谱.

解答　利用题 6.4 结果可得下述对易关系：

$$\left[H,\boldsymbol{r}_0^2\right]=\left[H,\rho^2\right]=0,\quad \left[\boldsymbol{r}_0^2,\rho^2\right]=0 \tag{6.29}$$

由于

$$\rho^2=\frac{v_x^2}{\omega^2}+\frac{v_y^2}{\omega^2},\quad [v_x,v_y]=\frac{\mathrm{i}\hbar Bq}{\mu^2} \tag{6.30}$$

可令

$$Q=\frac{\mu v_x}{\sqrt{\hbar B|q|}},\quad p=\frac{\mu v_y}{\sqrt{\hbar B|q|}} \tag{6.31}$$

则得

$$[Q,\ p]=\begin{cases}\mathrm{i}, & q>0\\ -\mathrm{i}, & q<0\end{cases} \tag{6.32}$$

且有

$$\rho^2=a^2\left(Q^2+p^2\right) \tag{6.33}$$

其中，$a^2=\dfrac{\hbar}{B|q|}$. 解出 ρ^2 的本征值为

$$\rho_n^2=a^2(2n+1),\qquad n=0,1,2,\cdots \tag{6.34}$$

同样的，由

$$r_0^2=x_0^2+y_0^2,\qquad [x_0,y_0]=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{qB} \tag{6.35}$$

有 $\boldsymbol{r}_0^2$ 的本征值为

$$\left(\boldsymbol{r}_0^2\right)_k=a^2(2k+1),\quad k=0,1,2,\cdots \tag{6.36}$$

由于

$$\rho^2=\frac{2}{\mu\omega^2}H_t,\quad r_0^2=\frac{2}{\mu\omega^2}H_t-\frac{2}{\mu\omega_1}L_z$$

式中

$$H_t=H-\frac{p_z^2}{2\mu},\quad \omega_1=-\frac{q}{|q|}\omega$$

则有

$$k=n+\frac{q}{|q|}m \tag{6.37}$$

6.6 电荷密度和电流密度算符

题 6.6 已知质量为 m、电荷为 q 的粒子处于态 $\psi(\boldsymbol{r})$ 时，其电荷密度和电流密度分别为

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

问如何引入电荷密度和电流密度算符? 解释这两个算符的物理意义，并证明它们的期望值就是这里的表达式.

解答 在量子力学中，“带电粒子”是被当成点电荷对待的，因此，当粒子位置是 $\boldsymbol{r}$ 时，$\boldsymbol{r}'$ 处的电荷密度为

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{r}')=q\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \tag{6.38}$$

此即定义为电荷密度算符. 若粒子处于 $\psi(\boldsymbol{r})$ 所描述的状态，则粒子在 $\boldsymbol{r}$ 附近 $\mathrm{d}\tau$ 体积元中出现的概率为 $\psi^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\tau$，因此 $\boldsymbol{r}'$ 处的平均电荷密度为

$$\langle\hat{\rho}(\boldsymbol{r}')\rangle=\int\psi^*(\boldsymbol{r})q\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\tau=q\psi^*(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}')=\rho(\boldsymbol{r}')$$

在经典物理学中，电流密度 $\boldsymbol{j}$ 为

$$\boldsymbol{j}=\rho\boldsymbol{v}=\frac{1}{m}\rho\boldsymbol{p}$$

换成量子力学算符，并使其成为 Hermite 算符，即得

$$\boldsymbol{j}=\frac{1}{2m}(\rho\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\rho)=\frac{q}{2m}[\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')]$$

当粒子处于 $\psi(\boldsymbol{r})$ 状态时，$\boldsymbol{r}'$ 处的平均电流密度为

$$\begin{aligned}\langle\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}')\rangle&=\frac{q}{2m}\int\psi^*(\boldsymbol{r})[\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')]\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\tau\\&=-\frac{\mathrm{i}\hbar q}{2m}\int\psi^*(\boldsymbol{r})[\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\nabla+\nabla\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')]\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\tau\\&=-\frac{\mathrm{i}\hbar q}{2m}[\psi^*(\boldsymbol{r}')\nabla'\psi(\boldsymbol{r}')-\psi(\boldsymbol{r}')\nabla'\psi^*(\boldsymbol{r}')]\end{aligned}$$

6.7 带电粒子在均匀磁场及三维各向同性谐振子势场中的能谱

题 6.7 设带电粒子在均匀磁场 $\boldsymbol{B}$ 及三维各向同性谐振子场 $V(r)=\frac{1}{2}\mu\omega_0^2r^2$ 中运动，求能谱公式.

解答 在直角坐标系中求解，不妨取 $\boldsymbol{B}$ 沿 z 轴 $\boldsymbol{B}=B\boldsymbol{e}_z$，磁场矢势取为

$$\boldsymbol{A}=\frac{1}{2}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r}=\frac{1}{2}(Bx\boldsymbol{e}_y-By\boldsymbol{e}_x) \tag{6.39}$$

为对称规范. 则体系的 Hamilton 算符为

$$H=\frac{1}{2\mu}\left[\left(p_x+\frac{qB}{2c}y\right)^2+\left(p_y-\frac{qB}{2c}x\right)^2+p_z^2\right]+\frac{1}{2}\mu\omega_0^2x^2$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu} - \frac{qB}{2\mu c}L_z + \frac{q^2B^2}{8\mu c^2}\left(x^2+y^2\right) + \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2 \\
&= H_1 + H_2 - \omega L_z
\end{aligned} \tag{6.40}
$$

其中

$$
H_1 = \frac{p_z^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 z^2; \quad H_2 = \frac{1}{2\mu}\left(p_x^2+p_y^2\right) + \frac{1}{2\mu}\left(\omega^2+\omega_0^2\right)\left(x^2+y^2\right) \tag{6.41}
$$

而 $\omega = \dfrac{qB}{2\mu c}$. 上式中 L_z 的本征值为 $m\hbar$, $m = 0, \pm1, \pm2, \cdots$. H_1 为沿 z 轴方向运动的一维谐振子的 Hamilton 量，其本征值为

$$
E_k = \left(k + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0, \quad k = 0, 1, 2, \cdots
$$

H_2 为 x-y 平面上的二维各向同性谐振子的 Hamilton 量，其本征值为[①]

$$
E_{n,m} = \left(2n_\rho + |m| + 1\right)\hbar\omega'
$$

其中，$\omega' = \left(\omega^2+\omega_0^2\right)^{1/2}$，而 $n = 0, 1, 2, \cdots$，$m = 0, \pm1, \pm2, \cdots$

由于 $\{H_1, H_2, L_z\}$ 相互独立，相互对易，它们构成了体系的一个力学量完全集，故体系能谱为

$$
E_{k,n,m} = (2n + |m| + 1)\hbar\omega + m\hbar\omega_{\mathrm{L}} + \left(k + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0 \tag{6.42}
$$

6.8　限制在圆周上的带电粒子处于磁场中时的能级

题 6.8　一个无自旋粒子 (质量为 m，带电为 q) 被束缚在半径为 R 的圆周上运动，对以下每种情况分别求其允许的能级 (可以有一个公共的附加常数).

(1) 粒子的运动是非相对论的；

(2) 在与圆面垂直的方向上有一均匀的磁场 $\boldsymbol{B}$；

(3) 同样的磁通穿过圆面，但是它现在被包在一半径为 $b(b > R)$ 的螺线管中；

(4) 在圆面内有一极强的电场 $\boldsymbol{\mathcal{E}}$ 存在 $(q|\boldsymbol{\mathcal{E}}| \gg \hbar^2/(mR^2))$；

(5) 没有 $\boldsymbol{\mathcal{E}}$ 及 $\boldsymbol{B}$，但粒子的运动是极端相对论的；

(6) 圆现在被一等周长但一半面积的椭圆所代替.

解答　(1) 此时体系的 Hamilton 量可写为

$$
H = \frac{L_z^2}{2m} = \frac{-\hbar^2}{2MR^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}
$$

由本征方程在周期边界条件下解出本征态为

$$
\psi_n(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}n\theta} \tag{6.43}
$$

① 其求解可参见张鹏飞, 阮图南, 朱栋培, 吴强, 量子力学学习指导［M］, 北京：中国科学技术大学出版社, 2008, P148-150.

其中， $n=0,\pm1,\pm2,\cdots$，相应的本征值为

$$E_n=\frac{n^2\hbar^2}{2mR^2} \tag{6.44}$$

(2) 在直角坐标系中求解，取 $\boldsymbol{B}=B\boldsymbol{e}_z$ 和 $\boldsymbol{A}=\frac{1}{2}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r}=-\frac{1}{2}By\boldsymbol{e}_x+\frac{1}{2}B_x\boldsymbol{e}_y$，粒子态可表示为 $\psi(\theta)$，则有

$$\begin{aligned}H\psi(\theta) &= \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\psi(\theta)=\left[\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2-\frac{qB}{2mc}L_z+\frac{q^2B^2}{8mc^2}r^2\right]\psi(\theta)\\ &= \left[\frac{1}{2mR^2}L_z^2-\frac{qB}{2mc}L_z+\frac{q^2B^2}{8mc^2}R^2\right]\psi(\theta)\\ &= \frac{1}{2mR^2}\left(L_z-\frac{qBR^2}{2c}\right)^2\psi(\theta)\end{aligned}$$

相应能量本征方程 (定态方程) 为

$$\frac{1}{2mR^2}\left(L_z-\frac{qBR^2}{2c}\right)^2\psi(\theta)=E\psi(\theta) \tag{6.45}$$

结合周期性边界条件，求得相应的本征态为

$$\psi_n(\theta)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}n\theta} \tag{6.46}$$

其中， $n=0,\pm1,\pm2,\cdots$，而相应能量本征值为

$$E_n=\frac{1}{2mR^2}\left(n\hbar-\frac{q}{2c}BR^2\right)^2=\frac{1}{2mR^2}\left(n\hbar-\frac{\Phi}{2\pi}\right)^2 \tag{6.47}$$

其中，$\Phi=\pi BR^2$ 为通过圆周回路面积的磁通量.

(3) 磁场被限制在螺线管内，在管外 (包括粒子运动的圆环上) 磁场为零，但矢势 $\boldsymbol{A}$ 不为零， $\boldsymbol{A}$ 可取为

$$A_\theta=\frac{\Phi}{2\pi R},\quad A_\rho=0,\quad A_z=0$$

体系的 Hamilton 量对束缚圆周上运动粒子的态的作用可写为

$$\begin{aligned}H\psi(\theta) &= \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2=\frac{1}{2m}\left(P_\theta-\frac{q}{c}A_\theta\right)^2\psi(\theta)\\ &= \frac{1}{2mR^2}\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{q}{c}A_\theta R\right)^2\psi(\theta)=-\frac{\hbar^2}{2mR^2}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{\mathrm{i}q\Phi}{2\pi\hbar c}\right)^2\psi(\theta)\end{aligned}$$

能量本征态方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2mR^2}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{\mathrm{i}q\Phi}{2\pi\hbar c}\right)^2\psi(\theta)=E\psi(\theta) \tag{6.48}$$

其解为 $\psi(\theta)=c\mathrm{e}^{\mathrm{i}n\theta}$，由周期性条件 $\psi(\theta+2\pi)=\psi(\theta)$，可得 $n=0,\pm1,\pm2,\cdots$. 而相应能量本征值为

$$E_n=\frac{1}{2mR^2}\left(n\hbar-\frac{q}{2c}BR^2\right)^2=\frac{1}{2mR^2}\left(n\hbar-\frac{\Phi}{2\pi c}\right)^2 \tag{6.49}$$

其中，$\Phi=\pi BR^2$ 为通过圆周回路面积的磁通量. 与第 (2) 小题相比，能级不变.

(4) 在静电场作用下，定态 Schrödinger 方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2mR^2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\theta^2}-qR\mathcal{E}\cos\theta\right]\psi=E\psi \tag{6.50}$$

若电场很强，$\psi(\theta)$ 只有在 θ 很小处不为零，故可做近似 $\cos\theta=1-\frac{1}{2}\theta^2$，代入上式，从而得到定态 Schrödinger 方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2mR^2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\theta^2}+\frac{1}{2}qR\mathcal{E}\theta^2\right]\psi=(E+qR\mathcal{E})\psi \tag{6.51}$$

与我们所熟知的谐振子本征值问题相比，可得

$$\varepsilon_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega-q\mathcal{E}R,\quad \omega=\left(\frac{q\mathcal{E}}{mR}\right)^{1/2} \tag{6.52}$$

(5) 由于动量很大，可用 WKB 近似，或者由量子化条件，

$$p\cdot 2\pi R=nh \tag{6.53}$$

其中，$n=1,2,\cdots$(由于动量很大，不取 $n=0$)，也就有

$$p=\frac{n\hbar}{R} \tag{6.54}$$

极端相对论情况，粒子能量为

$$E=pc=\frac{n\hbar c}{R} \tag{6.55}$$

(6) 仍利用量子化条件，

$$p\cdot 2\pi R=nh \tag{6.56}$$

其中，$n=1,2,\cdots$(由于动量很大，不取 $n=0$)，也就有

$$p=\frac{n\hbar}{R} \tag{6.57}$$

极端相对论情况，粒子能量为

$$E=pc=\frac{n\hbar c}{R} \tag{6.58}$$

关于第 (2),(3) 小题另解　(2) 粒子在圆周上运动，可取 $\boldsymbol{A}=\frac{Br}{2}\boldsymbol{e}_\theta$，则体系的 Schrödinger 方程为

$$\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\psi=E\psi$$

作规范变换

$$\psi=\psi'\exp\left[\mathrm{i}\frac{q}{\hbar}\int_{x_0}^{x}\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right]$$

可有

$$\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\psi'=E\psi'$$

由于粒子被束缚在 $r=R$ 的圆上，所以

$$\psi(\theta)=\psi'(\theta)\exp\left[\mathrm{i}\frac{q}{\hbar}\int_{r=R}\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right]\propto\psi'(\theta)\exp\left[\mathrm{i}\frac{q}{\hbar}RA(R)\theta\right]$$

采用柱坐标系，有

$$\frac{1}{2m}\left(-\frac{\mathrm{i}\hbar}{R}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\right)^2\psi'(\theta)=E\psi'(\theta)$$

所以

$$\psi'(\theta)\sim\mathrm{e}^{\mathrm{i}c_1\theta}$$

c_1 为常数. 因而

$$\psi(\theta)\sim\exp\left\{\mathrm{i}\left[c_1+\frac{q}{\hbar}RA(R)\right]\theta\right\}$$

而能量本征值为

$$E=\frac{\hbar^2}{2mR^2}c_1^2$$

由周期性条件 $\psi(\theta)=\psi(\theta+2\pi)$，可得

$$\left[c_1+\frac{q}{\hbar}RA(R)\right]\times2\pi=2n\pi$$

其中，n 为整数，$n=0,\pm1,\pm2,\cdots$. 所以

$$c_1=n-\frac{qR}{\hbar}A(R)=n-\frac{qR}{\hbar}\frac{BR}{2}=n-\frac{qBR^2}{2\hbar}$$

而能量本征值为

$$E_n=\frac{1}{2mR^2}\left(n\hbar-\frac{q}{2c}BR^2\right)^2=\frac{1}{2mR^2}\left(n\hbar-\frac{\Phi}{2\pi}\right)^2$$

其中，Φ 为穿过粒子圆周轨道面内的磁通量.

(3) 同前得到能量本征态方程

$$-\frac{\hbar^2}{2mR^2}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{\mathrm{i}q\Phi}{2\pi\hbar}\right)^2\psi(\theta)=E\psi(\theta)$$

作规范变换 $\psi(\theta)\to\Psi(\theta)$，使得

$$\Psi(\theta)=\psi(\theta)\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}qx(\theta)}=\psi(\theta)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2\pi\hbar}q\Phi\theta}$$

其中，$x(\theta)=\dfrac{\Phi\theta}{2\pi}$. 则 $\Psi(\theta)$ 满足如下方程:

$$-\frac{\hbar^2}{2mR^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\Psi(\theta)=E\Psi(\theta)$$

其解为

$$\Psi(\theta)\sim \mathrm{e}^{\mathrm{i}n'\theta}$$

相应能量本征值为

$$E=\frac{n'^2\hbar^2}{2mR^2}$$

按上面结果

$$\psi(\theta)=\frac{1}{2\pi}\exp\left(\mathrm{i}n'\theta+\mathrm{i}\frac{q\Phi\theta}{2\pi\hbar}\right)$$

由周期性条件 $\psi(\theta+2\pi)=\psi(\theta)$，可得

$$n'+\frac{q\varphi}{2\pi\hbar}=n=0,\pm1,\pm2,\cdots$$

因此

$$E_n=\frac{n'^2\hbar^2}{2mR^2}=\frac{\hbar^2}{2mR^2}\left(n-\frac{\Phi}{2\pi\hbar}\right)^2$$

其中，$n=0,\pm1,\pm2,\cdots$

6.9　磁通量量子化

题 6.9　采用柱面坐标 (ρ,φ,z)，设磁场 $\boldsymbol{B}$ 仅存在于很小的柱形区域 $\rho<a$ 内，通量为 Φ，$\rho>a$ 处无磁场. 令 $a\to0$，但保持通量 Φ 不变.

(1) 证明矢势可以表示为

$$\boldsymbol{A}=\nabla f,\quad f=\frac{1}{2\pi}\Phi\varphi \tag{6.59}$$

(2) 讨论机械角动量 $L_z=\mu(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{v}_z)$ 的本征值，导出磁通量量子化.

解答　(1) 当矢势 $\boldsymbol{A}$ 取为式 (6.59)时，在 $\rho\neq0$ 处，显然有

$$\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}=\nabla\times\nabla f=0$$

梯度算符的柱坐标表示式为

$$\nabla=\boldsymbol{e}_\rho\frac{\partial}{\partial\rho}+\boldsymbol{e}_\varphi\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\varphi}+\boldsymbol{e}_z\frac{\partial}{\partial z} \tag{6.60}$$

$\boldsymbol{e}_\rho$、$\boldsymbol{e}_\varphi$ 和 $\boldsymbol{e}_z$ 分别为 ρ,φ,z 方向的单位矢量. 由式 (6.59)，得到

$$\boldsymbol{A}=\frac{\Phi}{2\pi\rho}\boldsymbol{e}_\varphi$$

对于任何一个垂直于 z 轴的圆形截面，均有

$$\begin{aligned}\iint \boldsymbol{B}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{s} &= \iint (\nabla\times\boldsymbol{A})\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{s} = \oint \boldsymbol{A}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{r}\\ &= \frac{1}{2\pi}\Phi\oint \frac{\boldsymbol{e}_\varphi}{\rho}\cdot \rho \mathrm{d}\varphi \boldsymbol{e}_\varphi = \Phi\end{aligned}$$

Φ 为磁通量. 可见表示式 (6.59)是正确的.

(2) 位置矢量 $\boldsymbol{r}$ 的柱坐标表示式为

$$\boldsymbol{r} = \rho\boldsymbol{e}_\rho + z\boldsymbol{e}_z$$

因此

$$\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{A} = \frac{1}{2\pi}\Phi\left(\boldsymbol{e}_\rho\times\boldsymbol{e}_\varphi + \frac{z}{\rho}\boldsymbol{e}_z\times\boldsymbol{e}_\varphi\right) = \frac{1}{2\pi}\Phi\left(\boldsymbol{e}_z - \frac{z}{\rho}\boldsymbol{e}_\rho\right)$$

机械角动量的 z 分量为

$$\begin{aligned}L_z &= \mu[\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{v}]_z = \left[\boldsymbol{r}\times\left(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\right]_z\\ &= L_z - \frac{q}{c}(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{A})_z = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{q}{2\pi c}\Phi\end{aligned}$$

只需要波函数满足周期性条件

$$\psi(\rho,\varphi,z) = \psi(\rho,\varphi+2\pi,z)$$

即可保证 L_z 为 Hermite 算符，从而求得 L_z 的本征值为

$$L_z = m\hbar - \frac{q}{2\pi c}\Phi,\quad m = 0,\pm1,\pm2,\cdots \tag{6.61}$$

但如何选择 $\rho\to 0$ 处，$\psi = 0$，因 $\rho\neq 0$ 处磁场为 0，粒子的运动应该不受场的影响，L_z 的本征值谱应和 l_z 的本征值相同，由此可知式 (6.61)中第二项为 $\hbar$ 的整数倍，即

$$\frac{q\Phi}{2\pi\hbar c} = n = 0,\pm1,\pm2,\cdots \tag{6.62}$$

这就是磁通量的量子化.

6.10　对称规范与不对称规范

题 6.10　沿着 z 轴的均匀磁场 $\boldsymbol{B}(0,0,B)$ 可选择规范为对称规范

$$\boldsymbol{A} = \frac{1}{2}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r} = \left(-\frac{B}{2}y, \frac{B}{2}x, 0\right)$$

也可选择不对称规范

$$\boldsymbol{A}_1 = (-By,0,0),\quad \boldsymbol{A}_2 = (0,Bx,0)$$

证明：

(1) $\boldsymbol{A}$ 规范下的波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$ 变换到 $\boldsymbol{A}_1$、$\boldsymbol{A}_2$ 规范下就是

$$\psi_1(\boldsymbol{r})=\psi(\boldsymbol{r})\exp\left[-\frac{\mathrm{i}qB}{2\hbar c}xy\right],\qquad \psi_2(\boldsymbol{r})=\psi(\boldsymbol{r})\exp\left[\frac{\mathrm{i}qB}{2\hbar c}xy\right]$$

(2) 若 $\psi(\boldsymbol{r})$ 是 $\hat{p}_x$ 的本征态，则 $\psi_1(\boldsymbol{r})$ 是 $\hat{p}_x+\dfrac{qB}{2c}y$ 的本征态.

证明　(1) 电磁场具有规范不变性，即具有下述变换：

$$\boldsymbol{A}\to\boldsymbol{A}_i=\boldsymbol{A}+\nabla f_i(\boldsymbol{r},t),\quad \varphi\to\varphi_i=\varphi-\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}f_i(\boldsymbol{r},t)\tag{6.63}$$

此时 $\boldsymbol{E}$ 与 $\boldsymbol{B}$ 保持不变，若在量力力学中进一步要求 Schrödinger 方程具有规范不变性，则

$$\psi\to\psi_i=\psi\exp\left[\frac{\mathrm{i}q}{\hbar c}f_i(\boldsymbol{r},t)\right]\tag{6.64}$$

不难看出，对称与不对称规范之间相当于作了下述规范变换：

$$\boldsymbol{A}\to\boldsymbol{A}_i=\boldsymbol{A}+\nabla f_i$$

式中

$$f_1=-\frac{B}{2}xy,\quad f_2=\frac{B}{2}xy$$

所以

$$\psi_1(\boldsymbol{r})=\psi(\boldsymbol{r})\exp\left[-\frac{\mathrm{i}qB}{2\hbar c}xy\right],\quad \psi_2(\boldsymbol{r})=\psi(\boldsymbol{r})\exp\left[\frac{\mathrm{i}qB}{2\hbar c}xy\right]$$

(2) 若 $\hat{p}_x\psi(\boldsymbol{r})=p_x\psi(\boldsymbol{r})$，则有

$$\hat{p}_x\psi_1(\boldsymbol{r})=\left(p_x-\frac{qB}{2c}y\right)\psi_1(\boldsymbol{r})$$

可有

$$\left(\hat{p}_x+\frac{qB}{2c}y\right)\psi_1(\boldsymbol{r})=p_x\psi_1(\boldsymbol{r})$$

即 $\psi_1(\boldsymbol{r})$ 是 $\left(\hat{p}_x+\dfrac{qB}{2c}y\right)$ 的本征态.

6.11　Pauli 提出的全面地反映电子在电磁场中运动的 Hamilton 量

题 6.11　对于电磁场中的电子，Pauli 提出的 Hamilton 量的形式为

$$H=\frac{1}{2\mu}[\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{p}+e\boldsymbol{A})]^2-e\varphi\tag{6.65}$$

试说明式 (6.65)全面地反映电子在电磁场中运动.

解答　由于

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{p}+e\boldsymbol{A})]^2 &= \sigma_\alpha\sigma_\beta v_\alpha v_\beta\mu^2\\ &= \mu^2(\delta_{\alpha\beta}+\mathrm{i}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\sigma_\gamma)v_\alpha v_\beta\\ &= \mu^2\boldsymbol{v}^2+\mathrm{i}\mu^2\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{v})\end{aligned}$$

注意到式 (6.4)($\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{v}=\mathrm{i}\hbar\dfrac{-e}{\mu^2}\boldsymbol{B}$)，可得

$$H = \frac{1}{2\mu}(\boldsymbol{p}+e\boldsymbol{A})^2+\frac{e\hbar}{2\mu}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}-e\varphi=\frac{1}{2\mu}(\boldsymbol{p}+e\boldsymbol{A})^2-\mu_s\cdot\boldsymbol{B}-e\varphi$$

式中

$$\boldsymbol{\mu}_s=-\frac{e\hbar}{2\mu}\boldsymbol{\sigma}$$

为自旋磁矩，$-\boldsymbol{\mu}_s\cdot\boldsymbol{B}$ 项代表电子自旋磁矩和磁场的相互作用. 故式 (6.65)较为全面地反映了电子在电磁场中的运动.

6.12　带电粒子受均匀电场作用时的含时 Schrödinger 方程

题 6.12　质量为 m、电荷为 q 的粒子受到均匀电场的作用.

(1) 写出这个系统的含时 Schrödinger 方程;

(2) 证明当粒子处于任意态时，坐标算符的期望值满足 Newton 第二定律;

(3) 证明这一结果在还有一个均匀静磁场时也是正确的. 这一结论在质谱仪、粒子加速器的设计中有用吗? 试解释之.

解答　(1) 系统的含时 Schrödinger 方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=H\psi \tag{6.66}$$

其中，Hamilton 量 H 为

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2-q\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{r} \tag{6.67}$$

(2) 因为

$$\frac{\mathrm{d}\langle\boldsymbol{r}\rangle}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[\boldsymbol{r},H]}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{\left[\boldsymbol{r},\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}-q\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{r}\right]}=\frac{\langle\boldsymbol{p}\rangle}{m} \tag{6.68}$$

$$\frac{\mathrm{d}\langle\boldsymbol{p}\rangle}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[\boldsymbol{p},H]}=\nabla(q\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{r})=q\boldsymbol{E} \tag{6.69}$$

所以

$$\frac{\mathrm{d}^2\langle\boldsymbol{r}\rangle}{\mathrm{d}t^2}=q\boldsymbol{E} \tag{6.70}$$

(3) 若还存在一个静磁场，则粒子运动 Hamilton 量为

$$H=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2-q\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{r} \tag{6.71}$$

此时

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\langle \boldsymbol{r}\rangle}{\mathrm{d}t} &= \langle \boldsymbol{v}\rangle = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[\boldsymbol{r},H]} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{\left[\boldsymbol{r},\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2-q\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{r}\right]} \\ &= \frac{1}{m}\left\langle \boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right\rangle \end{aligned} \tag{6.72}$$

进而

$$\begin{aligned} m\frac{\mathrm{d}\langle \boldsymbol{v}\rangle}{\mathrm{d}t} &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{\left[\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A},H\right]} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{\left[\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A},\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2-q\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{r}\right]} \\ &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{\left[\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A},\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\right]}-\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{\left[\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A},q\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{r}\right]} \\ &= q\boldsymbol{E}+\frac{q}{2c}\overline{(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}-\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v})} \end{aligned} \tag{6.73}$$

上面用了题 10.1 的结果. 对于均匀磁场， $\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v}=-\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}$，因而

$$m\frac{\mathrm{d}\langle \boldsymbol{v}\rangle}{\mathrm{d}t} = q\boldsymbol{E}+\frac{q}{c}\langle \boldsymbol{v}\rangle\times\boldsymbol{B} \tag{6.74}$$

这一结果使我们在观测仪器中带电粒子的运动轨迹时，可以直接用经典力学加以处理.

6.13　处于均匀磁场中无自旋带电粒子的能级

题 6.13　一个处于磁场 $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$ 中的无自旋带电粒子的 Hamilton 量为

$$H=\frac{1}{2m}\left[\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\right]^2$$

其中， $\boldsymbol{p}=(p_x,p_y,p_z)$ 是粒子位置 $\boldsymbol{r}$ 的共轭动量. 设 $\boldsymbol{A}=-B_0y\boldsymbol{e}_x$，对应着一个均匀磁场 $\boldsymbol{B}=B_0\boldsymbol{e}_z$.

(1) 证明 p_x 和 p_z 是运动恒量；

(2) 求该体系的能级.

解答　(1) 体系的 Hamilton 量为

$$H=\frac{1}{2m}\left(p_x+\frac{eB_0}{c}y\right)^2+\frac{1}{2m}p_y^2+\frac{1}{2m}p_z^2 \tag{6.75}$$

由于 H 中不显含 x 和 z，根据量子力学基本对易关系

$$[x_i,\,p_j]=\mathrm{i}\hbar\delta_{ij},\quad [p_i,\,p_j]=0 \tag{6.76}$$

容易看出

$$[p_x,H]=0,\quad [p_z,H]=0 \tag{6.77}$$

所以 p_x 和 p_z 是守恒量.

(2) 根据第 (1) 小题，可以取 $\{H,p_x,p_z\}$ 作为力学量完全集，相应的本征函数可表示成 (注意此处及下面的 p_x、 p_y 已是常数而非算符)

$$\psi(x,y,z)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_x x+p_z z)/\hbar}\phi(y) \tag{6.78}$$

其中， $\phi(y)$ 满足方程

$$\frac{1}{2m}\left[\left(p_+\frac{eB_0}{c}y\right)^2-\hbar^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2}+p_z^2\right]\phi(y)=E\phi(y) \tag{6.79}$$

也就是

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\phi}{\mathrm{d}y^2}+\frac{m}{2}\left(\frac{eB_0}{mc}\right)^2\left(y+\frac{cp_x}{eB_0}\right)^2\phi=\left(E-\frac{p_z^2}{2m}\right)\phi \tag{6.80}$$

这是平衡点位于 $y_0=-cp_x/eB_0$，自然频率为 $\omega=eB_0/mc$ 的一维谐振子所满足的能量本征方程. 根据谐振子的结果，可知能量本征值由下式确定：

$$E-\frac{p_z^2}{2m}=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\frac{eB_0}{mc},\quad n=0,1,2,\cdots \tag{6.81}$$

于是，该体系能级为

$$E_n=\frac{p_z^2}{2m}+\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\frac{eB_0}{mc},\quad n=0,1,2,\cdots \tag{6.82}$$

6.14　带电粒子在均匀恒定相互垂直电磁场中运动

题 6.14　设带电粒子在相互垂直的均匀恒定电场 $\boldsymbol{\mathcal{E}}$ 和均匀恒定磁场 $\boldsymbol{B}$ 中运动，取磁场方向为 z 轴方向，电场方向为 x 轴方向.

(1) 求能谱及其波函数；

(2) 求在零动量状态中速度 $\boldsymbol{v}$ 的期望值.

解答　(1) 选择矢势 $\boldsymbol{A}$ 使 $A_x=0,A_y=Bx,A_z=0$，满足 $\nabla\times\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}$. 设电场 $\boldsymbol{E}$ 沿着 x 轴，而其大小是 $\mathcal{E}$. 我们可取标势 $V(\boldsymbol{x})=-\mathcal{E}x$，它满足 $-\dfrac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}=\mathcal{E}$. 设粒子质量为 μ，这样粒子 Hamilton 量为

$$\begin{aligned}H&=\frac{1}{2\mu}\left\{p_x^2+\left(p_y-\frac{q}{c}Bx\right)^2+p_z^2\right\}-\mathcal{E}qx\\&=\frac{1}{2\mu}\left\{p_x^2+p_y^2-\frac{2qB}{c}p_yx+\left(\frac{q}{c}B\right)^2x^2+p_z^2\right\}-\mathcal{E}qx\end{aligned} \tag{6.83}$$

H 中不出现 y 和 z，因此

$$[H,p_y]=0,\quad [H,p_z]=0$$

这样可选 CSCO 为 (H,p_y,p_z)，而取分离变量形式的能量本征函数为

$$\psi(x,y,z)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_y y+p_z z)/\hbar}X(x) \tag{6.84}$$

代入能量本征方程得

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}-\frac{2\mathrm{i}qB}{c\hbar}\frac{\partial}{\partial y}x\psi+\left[\frac{2\mu q\mathcal{E}}{\hbar^2}x-\left(\frac{qB}{c\hbar}\right)^2x^2\right]\psi=-\frac{2\mu E}{\hbar^2}\psi$$

整理，并约去因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_yy+p_zz)/\hbar}$ 后，得到关于 $X(x)$ 的本征方程

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2\mu}\left[\frac{q^2B^2}{c^2}x^2-2\left(\frac{qBp_y}{c}+\mu\mathcal{E}q\right)x+p_y^2+p_z^2\right]\right\}X(x)=EX(x)$$

令 $\omega\equiv\dfrac{qB}{\mu c}$，$x_0=\dfrac{cp_y}{qB}+\dfrac{\mu q\mathcal{E}c^2}{B^2}$，上式可以化为

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\mu}{2}\omega^2\left(x-x_0\right)^2\right\}X(x)=E_1X(x)\tag{6.85}$$

其中，$E_1=E-E_0$，而 $E_0=\dfrac{p_y^2+p_z^2}{2\mu}-\dfrac{1}{2\mu}\left(p_y+\dfrac{\mu\mathcal{E}c}{B}\right)^2$.

式 (6.85)是一维谐振子的定态方程，振子频率是 ω，振动原点在 $x=x_0$. 令 $\alpha=\sqrt{\mu\omega/\hbar}$，由一维谐振子结果直接写出

$$E_1=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega=\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar qB}{\mu c}\tag{6.86}$$

以及相应本征函数

$$X(x)=N_n\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2(x-x_0)^2}\mathrm{H}_n\left[\alpha\left(x-x_0\right)\right]\tag{6.87}$$

其中，H_n 为 Hermite 多项式，归一化系数 $N_n=\sqrt{\alpha/\sqrt{\pi}2^nn!}$. 带电粒子的总能量 $E=E_0+E_1$ 是

$$E_{n,p_y,p_z}=\frac{p_y^2+p_z^2}{2\mu}-\frac{1}{2\mu}\left(p_y+\frac{\mu\mathcal{E}c}{B}\right)^2+\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar qB}{\mu c}\tag{6.88}$$

其中，$-\infty<p_y,p_z<+\infty$ 可连续取值，而 $n=0,1,2,\cdots$，因此简并度是无穷的. 相应的波函数为

$$\psi_{n,p_y,p_z}(x,y,z)=C_n\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_yy+p_zz)/\hbar}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\frac{\mu\omega}{\hbar}(x-x_0)^2}\mathrm{H}_n\left[\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\left(x-x_0\right)\right]$$

(2) 按题意，零状态动量是指 P_y 和 P_z 的本征值为零，而 P_x 的期望值为零的状态. 速度的定义为

$$\boldsymbol{v}=\frac{1}{m}\boldsymbol{P}_{\text{机械}}=\frac{1}{m}\left(\boldsymbol{P}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)$$

所以 $\boldsymbol{v}$ 的期望值为

$$\begin{aligned}\langle\boldsymbol{v}\rangle&=\left\langle\boldsymbol{P}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right\rangle=-\frac{q}{mc}\langle\boldsymbol{A}\rangle=-\frac{qB_0}{mc}\langle x\rangle\boldsymbol{e}_y\\&=-\frac{qB_0}{mc}\left(\frac{c\langle P_y\rangle}{qB_0}+\frac{mc^2E_0}{qB_0^2}+\langle\xi\rangle\right)\boldsymbol{e}_y\\&=-\frac{cE_0}{B_0}\boldsymbol{e}_y\end{aligned}$$

其中注意到对于谐振子本征态 $\langle\xi\rangle=0$.

6.15　中子的旋量干涉

题 6.15　在一次经典的台面试验中，一单色中子束 ($\lambda = 1.4445$Å) 在干涉仪的 A 点发生 Bragg 衍射相干分成两束，然后 (经过另一次衍射) 又交汇于 D 点. 其中一束穿过一磁感应强度为 $\boldsymbol{B}$ 的横向磁场区域，经过的距离为 l(图 6.2).

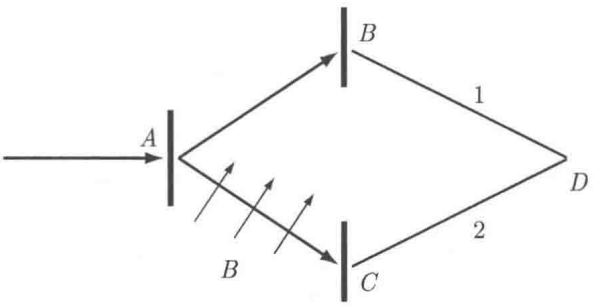


图 6.2　中子干涉仪原理图

假定从 A 到 D 的两条路径除有无磁场外完全一样. 在中子极化方向平行或反平行与磁场的情况下，找出 D 点强度依赖于 $\boldsymbol{B}$、l 及中子波长的明显表达式.

解答　此题属于旋量干涉问题，在磁场区域内，对于不带电荷的中子，有

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \mu\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}\right)\psi = E\psi \tag{6.89}$$

设 $\boldsymbol{B}$ 为均匀恒定磁场，则有

$$\psi(t_1) = \exp\left[-\mathrm{i}\frac{H(t_1-t_0)}{\hbar}\right]\psi(t_0) \tag{6.90}$$

其中，t_0 为进入磁场时刻，t_1 为出磁场时刻.

设 $\psi(t)\equiv\psi(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{s},t)$，$\psi(\boldsymbol{r},t)$、$\psi(\boldsymbol{s},t)$ 分别表示 ψ 空间部分和自旋部分，则有空间部分波函数

$$\psi(\boldsymbol{r},t_1) = \exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right)(t_1-t_0)\right]\psi(\boldsymbol{r},t_0) \tag{6.91}$$

即为自由粒子波函数. 而自旋部分波函数

$$\psi(\boldsymbol{s},t_1) = \exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mu\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}(t_1-t_0)\right]\psi(\boldsymbol{s},t_0) \tag{6.92}$$

干涉是由磁场使自旋波函数改变引起的.

由 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 为自由粒子波函数，可得

$$t_1 - t_0 = \frac{l}{v} = \frac{ml}{\hbar k} \tag{6.93}$$

因而

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{s},t_1) &= \exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mu\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}\frac{ml}{\hbar k}\right]\psi(\boldsymbol{s},t_0)\\ &= \exp\left[\mathrm{i}\frac{2\pi\mu ml\lambda}{h^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}\right]\psi(\boldsymbol{s},t_0)\end{aligned}\tag{6.94}$$

所以在 D 点产生的干涉强度正比于

$$\begin{aligned}&\left|\psi_D^{(1)}(\boldsymbol{r},t_1)\psi_D^{(1)}(\boldsymbol{s},t_1)+\psi_D^{(2)}(\boldsymbol{r},t_1)\psi_D^{(2)}(\boldsymbol{s},t_1)\right|^2\\ \propto\ &\left|\psi_D^{(1)}(\boldsymbol{s},t_1)+\psi_D^{(2)}(\boldsymbol{s},t_1)\right|^2\\ =\ &\left|\psi(\boldsymbol{s},t_0)+\exp\left[\mathrm{i}\frac{2\pi\mu ml\lambda}{h^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}\right]\psi(\boldsymbol{s},t_0)\right|^2\end{aligned}\tag{6.95}$$

这样，由

$$\exp\left[\mathrm{i}\frac{2\pi\mu ml\lambda}{h^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}\right]=\cos\frac{2\pi\mu ml\lambda}{h^2}B+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\frac{\boldsymbol{B}}{B}\sin\frac{2\pi\mu ml\lambda}{h^2}B\tag{6.96}$$

可得

$$\left|\psi_D^{(1)}(\boldsymbol{s},t_1)+\psi_D^{(2)}(\boldsymbol{s},t_1)\right|^2\propto\left(1+\cos\frac{2\pi\mu ml\lambda}{h^2}B\right)^2+\sin^2\frac{2\pi\mu ml\lambda}{h^2}B=4\cos^2\frac{\pi\mu ml\lambda B}{h^2}\tag{6.97}$$

所以 D 点干涉强度 $\propto\cos^2\dfrac{\pi\mu ml\lambda B}{h^2}$，$\mu$ 为中子内禀磁矩的数值，$\mu=-1.91\mu_{\mathrm{N}}$，而 $\mu_{\mathrm{N}}=e\hbar/2m_{\mathrm{p}}c$ 为核磁子.

6.16　Aharonov-Bohm 效应

题 6.16　考虑一个无限长的螺线管，其中通有电流 I，结果在螺线管内产生了一个均匀恒定的磁场. 假定在螺线管外的区域中，电荷为 e、质量为 m 的粒子的运动可以用 Schrödinger 方程描述. 假定对于 $I\equiv 0$，方程的解由下式给出：

$$\psi_0(\boldsymbol{x},t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_0t}\psi_0(\boldsymbol{x})$$

已取 $\hbar=1$.

(1) 对 $I\neq 0$ 情况给出并求解螺线管外区域中的 Schrödinger 方程；

(2) 考虑一个为上述粒子准备的双缝衍射实验 (图 6.3)，假定两缝间距 d 远大于螺线管直径. 计算 $I\neq 0$ 的螺线管的存在而使衍射图像在屏上产生的移动 ΔS，假定 $l\gg\Delta S$(l 为双缝到屏的距离).

提示　$\psi(\boldsymbol{x},t)=U(\boldsymbol{x})\psi_0(\boldsymbol{x},t)$，其中 $\left(\nabla-\mathrm{i}\dfrac{e}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\right)U(\boldsymbol{x})=0$.

解答　(1) 无电磁场情况下的 Schrödinger 方程为

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi_0(\boldsymbol{x},t)=\left[\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2+V(\boldsymbol{x})\right]\psi_0(\boldsymbol{x},t)\tag{6.98}$$

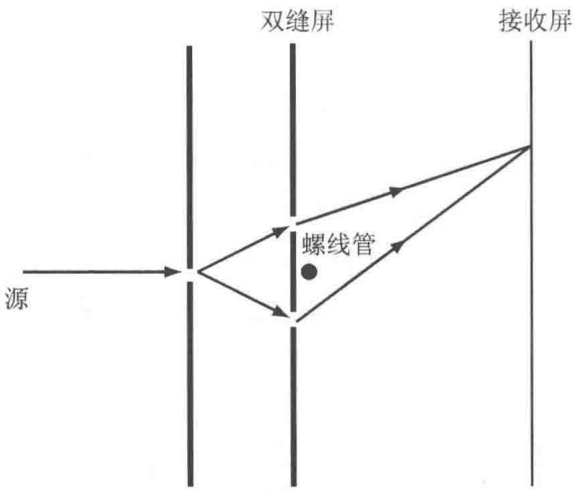


图 6.3　通电螺线管对带电粒子双缝衍射的影响

式中已取 $\hbar=1$. 作替换 $\boldsymbol{p}\to\boldsymbol{p}-\dfrac{e}{c}\boldsymbol{A}$，即可由上式得到有电磁场存在的 Schrödinger 方程 (最小电磁耦合)

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x},t)=\left[\frac{1}{2m}\left(-\mathrm{i}\nabla-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+V(\boldsymbol{x})\right]\psi(\boldsymbol{x},t) \tag{6.99}$$

其中，电磁量用 Gauss 制，而 $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}=0$. 作变换，令

$$\psi(\boldsymbol{x},t)=\exp\left\{\mathrm{i}\int_{\boldsymbol{x}_0}^{\boldsymbol{x}}\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right\}\psi_1(\boldsymbol{x},t) \tag{6.100}$$

满足

$$\left(\nabla-\mathrm{i}\frac{e}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\right)\psi(\boldsymbol{x},t)=\nabla\psi_1(\boldsymbol{x},t)$$

由式 (6.99)则有

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi_1(\boldsymbol{x},t)=\left[\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2+V(\boldsymbol{x})\right]\psi_1(\boldsymbol{x},t) \tag{6.101}$$

由题意可知

$$\psi_1(\boldsymbol{x},t)=\psi_0(\boldsymbol{x},t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_0t}\psi_0(\boldsymbol{x}) \tag{6.102}$$

因而

$$\psi(\boldsymbol{x},t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_0t}\exp\left\{\mathrm{i}\int_{\boldsymbol{x}_0}^{\boldsymbol{x}}\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right\}\psi(\boldsymbol{x}) \tag{6.103}$$

(2) 本题考察 Aharonov-Bohm 效应. 未加电流时，对屏上任一点，其概率振幅 f 为

$$f=f_++f_- \tag{6.104}$$

其中，f_+、f_- 分别为带电粒子经上、下孔到达屏上一点的概率幅.

加上电流后

$$f'_+=\exp\left\{\mathrm{i}\int_{c_+}^{\boldsymbol{x}}\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right\}f_+, \tag{6.105}$$

$$f'_- = \exp\left\{\mathrm{i}\int_{c_-}^{x}\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right\}f_- \tag{6.106}$$

其中，c_+、c_- 分别表示积分路径是由螺线管上方、下方路径构成. 所以

$$\begin{aligned} f' &= f'_+ + f'_- \\ &= \exp\left\{\mathrm{i}\int_{c_+}^{x}\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right\}f_+ + \exp\left\{\mathrm{i}\int_{c_-}^{x}\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right\}f_- \\ &\sim \exp\left\{\mathrm{i}\oint\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right\}f_- + f_+ \end{aligned} \tag{6.107}$$

以上两项已抽出一公共的相因子，这不影响对干涉图形的讨论，故已在式中略去. 其中 $\oint\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}$ 是沿任一包围螺线管的回路的环积分 (沿逆时针方向)

$$\oint\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x} = e\Phi \tag{6.108}$$

其中，Φ 是磁通量. 所以引入通电螺线管后相当于下孔对于屏上一点的概率振幅贡献一个相位因子 $e\Phi$.

比较式 (6.104)与式 (6.107)，仿光学中 Young 干涉公式推导，可得衍射图像移动 ΔS，由 $l \gg d$，$l \gg \Delta S$，有

$$\Delta S\cdot\frac{d}{l}\cdot k = \frac{e}{c}\Phi \tag{6.109}$$

其中，k 为粒子 de Broglie 波波数，这样

$$\Delta S = \frac{el\Phi}{cdk} = \frac{el\Phi}{cd\sqrt{2mE_0}} \tag{6.110}$$

如前式中已取 $\hbar = 1$. 上式为非相对论的，m 为粒子质量.

6.17　将 Bohr-Sommerfeld 关系推广应用到有电磁场存在的情况

题 6.17　我们可以将半经典的 Bohr-Sommerfeld 关系

$$\oint\boldsymbol{p}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r} = \left(n+\frac{1}{2}\right)2\pi\hbar$$

(其中积分是沿一封闭的轨道) 推广应用到有电磁场存在的情形，只需用 $\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}$ 代替 $\boldsymbol{p}$. 用这个关系及关于线动量 $\boldsymbol{P}$ 的运动方程，推导一半经典电子在磁场 $\boldsymbol{B}$ 中沿任意轨道运动时，其磁通量的量子化条件. 对于固体中的电子，这个条件可用电子轨道在 $\boldsymbol{k}$ 空间的尺度 s 重新加以描述. 试找出用 $\boldsymbol{B}$ 表达的 S 的量子化条件 (忽略自旋效应).

解答　在电磁场存在情况下，正则动量 $\boldsymbol{P}$ 为

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}$$

其中 $\boldsymbol{p}$ 为机械动量.

由推广的 Bohr-Sommerfeld 条件，有

$$\oint \boldsymbol{P}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{r}=\oint\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{r}=\left(n+\frac{1}{2}\right)2\pi\hbar$$

也就是

$$\oint \boldsymbol{p}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{r}-\frac{e}{c}\oint \boldsymbol{A}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{r}=\left(n+\frac{1}{2}\right)2\pi\hbar$$

由 $\nabla\times\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}$，$\oint \boldsymbol{A}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{r}=\int_s(\nabla\times\boldsymbol{A})\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S}=\int_s \boldsymbol{B}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S}=\Phi$ 及电子在电磁场中运动的经典方程式 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{p}=-\dfrac{e}{c}\dfrac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\times\boldsymbol{B}$，设 $\boldsymbol{B}$ 是恒场，则得

$$\boldsymbol{p}=-\frac{e}{c}\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{B}$$

从而

$$\begin{aligned}\oint \boldsymbol{p}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{r} &= -\oint\frac{e}{c}(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{B})\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{r}\\ &= \int_s\frac{e}{c}(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{B})\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{r}=-\int_s\frac{e}{c}(\boldsymbol{r}\times \mathrm{d}\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{B}\\ &= 2\frac{e}{c}\int_s \boldsymbol{B}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S}=2\frac{e}{c}\Phi\end{aligned}$$

则有

$$2\frac{e}{c}\Phi-\frac{e}{c}\Phi=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\cdot(2\pi)$$

即得

$$\Phi=\frac{2\pi c\hbar}{e}\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

又由 $\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k}=-\dfrac{e}{c}\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{B}$，得

$$\hbar\Delta\boldsymbol{k}=-\frac{Be}{c}\Delta\boldsymbol{r},\quad \Delta\boldsymbol{r}=-\frac{\hbar c}{Be}\Delta\boldsymbol{k}$$

所以轨道在 $\boldsymbol{k}$ 空间中占的面积 S_n 与其在位置坐标空间中的面积 A_n 之间关系为

$$A_n=\left(\frac{\hbar c}{Be}\right)^2 S_n$$

从而

$$\begin{aligned}\Phi &= \int \boldsymbol{B}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{a}=\left(\frac{\hbar c}{Be}\right)^2\int \boldsymbol{B}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S}_n\\ &= +\left(\frac{\hbar c}{Be}\right)^2 BS_n=\frac{2\pi\hbar c}{e}\left(n+\frac{1}{2}\right)\end{aligned}$$

所以

$$S_n=\frac{2\pi Be}{\hbar c}\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

此处只计 S_n 大小.

6.18　规范变换对波函数的影响

题 6.18　写出无自旋带电粒子在磁场中的 Hamilton 量. 证明规范变换 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\to\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})+\nabla\boldsymbol{f}(\boldsymbol{r})$ 等价于波函数乘上因子 $\exp\left[-\dfrac{\mathrm{i}e}{\hbar c}f(\boldsymbol{r})\right]$. 这个结果的意义是什么? 考虑沿 z 轴均匀磁场 $\boldsymbol{B}$ 的情况，证明能级可写成

$$E=\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{|e|\hbar}{mc}B+\frac{\hbar^2}{2m}k_z^2$$

讨论波函数的特点.

提示　利用规范 $A_x=-By,\ A_y=A_z=0$.

解答　Hamilton 量为

$$H=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2$$

磁感应强度为

$$\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$$

Schrödinger 方程为

$$\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\psi(\boldsymbol{r})=E\psi(\boldsymbol{r})$$

磁矢势作规范变换

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\to\boldsymbol{A}'(\boldsymbol{r})=\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})+\nabla\boldsymbol{f}(\boldsymbol{r})\tag{6.111}$$

相应的波函数变换为

$$\psi(\boldsymbol{r})\to\psi'(\boldsymbol{r})=\psi(\boldsymbol{r})\exp\left\{\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}f(\boldsymbol{r})\right\}\tag{6.112}$$

则由于

$$\begin{aligned}\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}'\right)\psi'(\boldsymbol{r}) &= \exp\left[\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}f(\boldsymbol{r})\right]\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\nabla f(\boldsymbol{r})-\frac{e}{c}A'\right)\psi(\boldsymbol{r})\\ &= \exp\left[\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}f(\boldsymbol{r})\right]\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\psi(r)\end{aligned}$$

从而

$$\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}'\right)^2\psi'(\boldsymbol{r})=\exp\left[\frac{\mathrm{i}e}{\hbar c}f(\boldsymbol{r})\right]\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\psi(\boldsymbol{r})$$

因此可得

$$\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}'\right)^2\psi'(\boldsymbol{r})=E\psi'(\boldsymbol{r})$$

这表明在规范变换 (6.111)、(6.112) 下，Schrödinger 方程不变，波函数仅差一相因子，系统有规范不变性. 若取 Landau 规范

$$A_x=-By,\qquad A_y=A_z=0$$

显然满足 $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}=B\boldsymbol{e}_x$，而 Hamilton 量成为

$$H=\frac{1}{2m}\left[p_y+\frac{eB}{c}y\right]^2+p_x^2+p_z^2$$

因为

$$[p_x,H]=[p_z,H]=0$$

故力学量完全集可取为 (p_x,p_z,H). 相应的本征态为

$$\psi(x,y,z)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_x x+p_z z)/\hbar}\chi(y)$$

令 $cp_x/eB=-y$，则上式化为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\chi''+\frac{1}{2}m\left(\frac{eB}{mc}\right)^2(y-y_0)^2\chi=\left(E-\frac{p_z^2}{2m}\right)\chi$$

这是一个谐振子方程，因此能级为

$$E=\frac{\hbar^2}{2m}k_z^2+\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\frac{|e|B}{mc}$$

相应波函数为

$$\psi_{p_x p_z n}(x,y,z)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_x x+p_z z)/\hbar}\chi_n(y-y_0)$$

其中

$$\chi_n(y-y_0)\sim\exp\left[-\frac{|e|B}{2\hbar c}(y-y_0)^2\right]\mathrm{H}_n\left(\sqrt{\frac{|e|B}{\hbar c}}(y-y_0)\right)$$

能量公式中不出现 p_x(取值范围 $-\infty\to\infty$)，故能级对 p_x 为无穷简并的，同时对 p_x 的正负方向也是简并的.

6.19　三维刚性盒中电子受一均匀磁场作用时的能级

题 6.19　设定出一个装在方盒 L^3 中的电子的能级及其简并度和相应的本征函数，电子是处在一个矢势为

$$\boldsymbol{A}=B_0x\boldsymbol{e}_y$$

的电磁场中.

解答　由最小电磁耦合原理，此时定态 Schrödinger 方程为

$$\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\psi=E\psi \tag{6.113}$$

由 $\boldsymbol{A}=B_0x\boldsymbol{e}_y$，可得

$$H=\frac{1}{2m}\left[p_x^2+p_z^2+\left(p_y-B_0x\frac{e}{c}\right)^2\right] \tag{6.114}$$

因为

$$[p_x, H] = [p_z, H] = 0$$

故力学量完全集可取为 (p_x, p_z, H). 相应的本征函数可表示成

$$\psi(x,y,z) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_y y + p_z z)/\hbar}\chi(x)$$

式中， p_y, p_z 可取任意实数值.

由方程 (6.113)及 ψ 表达式可得

$$\frac{1}{2m}\left[p_x^2 + p_z^2 + \left(p_y - B_0 x\frac{e}{c}\right)^2\right]\psi = E\psi(\boldsymbol{r})$$

或者

$$\frac{1}{2m}\left[p_x^2 + \left(\frac{eB_0}{c}\right)^2\left(x - \frac{c}{eB_0}p_y\right)^2\right]\chi = E\chi, \quad E_0 + \frac{1}{2m}p_z^2 = E$$

所以

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\chi + \frac{m}{2}\left(\frac{eB_0}{mc}\right)^2(x - x_0)^2\chi = E_0\chi$$

式中， $x_0 = \dfrac{cp_y}{eB_0}$.

上式是一个一维谐振子的能量本征方程，其自然频率为 $\omega_0 = \dfrac{-eB_0}{mc}$，平衡位置在 $x = x_0$ 处. 所以其能量本征值为

$$E_0 = (n + 1/2)\hbar\omega_0, \quad n = 0, 1, 2, \cdots$$

因而

$$E_0 = \frac{p_z^2}{2m} + (n + 1/2)\hbar\frac{-B_0 e}{mc} = \frac{p_z^2}{2m} - (n + 1/2)\frac{eB_0}{mc}\hbar, \quad n = 0, 1, 2, \cdots$$

相应本征函数为

$$\chi_n \sim \exp\left[\frac{eB_0}{2\hbar c}(x - x_0)^2\right]\mathrm{H}_n\left(-\frac{eB_0}{\hbar c}(x - x_0)\right)$$

所以能级为

$$E = \frac{p_z^2}{2m} - \left(n + \frac{1}{2}\right)\frac{eB_0}{mc}\hbar, \quad n = 0, 1, 2, \cdots$$

由于能级中无 p_y 项出现，且 p_y 可取任意实数值，所以能级是无限简并. 与能级相应的本征函数 (定态的) 为

$$\psi(\boldsymbol{r}) = C_n \exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p_y y + p_z z) + \frac{eB_0}{2\hbar c}(x - x_0)^2\right]\mathrm{H}_n\left(-\frac{eB_0}{\hbar c}(x - x_0)\right)$$

式中， C_n 是归一化常数因子， $x_0 = \dfrac{cp_y}{eB_0}$.

6.20　处于磁场中导体圆环中运动电子的基态与外磁场的关系

题 6.20　考虑一个由细导线组成的半径为 R 的圆环 (图 6.4)，与环面垂直的均匀恒定磁场使通过环的磁通量为 Φ. 设想导线只有一个电子且此电子可沿环自由移动. 此电子的波函数 $\psi(\theta)$ 只是角度 θ 的函数，忽略电子自旋与外磁场及电子自身产生的磁场之间的一切相互作用.

(1) 在上述近似下，此电子基态能量如何依赖于外加的磁场? 推导出公式并且画出结果的简图.

(2) 设想起先在有磁通量 Φ 存在条件下线环处于基态，然后缓慢地去掉磁场. 问线环中的电流是多少?

(3) 假设 $R=2\text{cm}, \Phi=0.6\text{Gs}\cdot\text{cm}^2$，电流是多少安培?

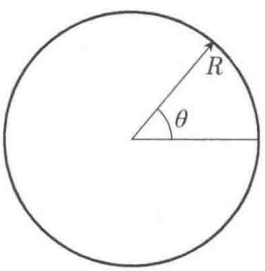


图 6.4　由细导线组成的半径为 R 的圆环

解答　(1) 由于 $\boldsymbol{B}$ 均匀且垂直于环面. 可取 $\boldsymbol{A}=-\dfrac{Br}{2}\boldsymbol{e}_\theta$，在题设条件下电子的定态 Schrödinger 方程为

$$\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{P}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\psi=E\psi$$

e 为电子电量. 作替换 $\psi=\psi'\exp\left(\mathrm{i}\dfrac{e}{c\hbar}\displaystyle\int^{\boldsymbol{x}}\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right)$，由上方程可得

$$\frac{1}{2m}P^2\psi'=E\psi'$$

由于题设电子被束缚在 $r=R$ 的圈上，所以

$$\psi=\psi(\theta)=\psi'\exp\left[\mathrm{i}\frac{e}{c\hbar}\int_{r=R}\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{x}\right]\propto\psi'\exp\left[\mathrm{i}\frac{e}{c\hbar}RA(R)\theta\right]$$

其中，$\psi'=\psi'(\theta)$. 采用柱坐标，有 $\dfrac{1}{2m}\left(-\mathrm{i}\dfrac{\hbar}{R}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\right)^2\psi'(\theta)=E\psi'(\theta)$，所以

$$\psi'(\theta)\sim\mathrm{e}^{\mathrm{i}c_1\theta}$$

其中，c_1 为一个常量. 这样

$$\psi(\theta)\sim\exp\left\{\mathrm{i}\left[c_1+\frac{e}{c\hbar}RA(R)\right]\theta\right\}$$

并且有

$$E=\frac{\hbar^2}{2mR^2}c_1^2$$

由周期性边界条件 $\psi(\theta)=\psi(\theta+2\pi)$，可得

$$\left[c_1+\frac{eR}{c}A(R)\right]\cdot 2\pi=2n\pi$$

其中，n 为整数. 所以常数

$$c_1=n-\frac{eR}{c\hbar}A(R)=n+\frac{eR}{c\hbar}\frac{BR}{2}=n+\frac{eBR^2}{2c\hbar}$$

而能量为

$$E_n=\frac{\hbar^2}{2mR^2}\left(n+\frac{eBR^2}{2c\hbar}\right)=\frac{\hbar^2}{2mR^2}\left(n+\frac{e\Phi}{2\pi c\hbar}\right)^2$$

E_n 与外磁场 B 或 Φ 的关系是抛物线型关系，如图 6.5所示.

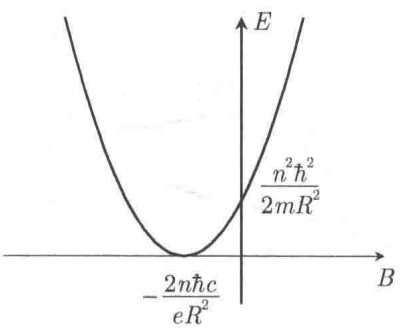


图 6.5　E_n 与外磁场 B 的关系是抛物线型关系

由于 n 为整数，所以基态能量为

$$E_{\text{基态}}=\frac{\hbar^2}{2mR^2}\left[n^*+\frac{eR^2B}{2c\hbar}\right]^2$$

式中，n^* 为最靠近 $-\dfrac{eR^2B}{2c\hbar}\left(\text{或}-\dfrac{e\Phi}{2\pi c\hbar}\right)$ 的整数.

(2) 在题设条件下，去掉磁场时 n 不会变，波函数变成 $\psi\sim \mathrm{e}^{\mathrm{i}n\theta}$，此时电流密度为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{j} &= e\frac{\hbar}{2m\mathrm{i}}(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)\,|_{r=R}\\ &= \frac{e\hbar}{2m\mathrm{i}}(\mathrm{i}n)2\frac{1}{R}\psi^*\psi\boldsymbol{e}_\theta\\ &= \frac{e\hbar n}{mR}\psi^*\psi\boldsymbol{e}_\theta\end{aligned}$$

由 ψ 归一化条件 $\int\psi^*\psi\mathrm{d}\boldsymbol{l}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S}_{\text{线截面}}$，令 $\psi=c\mathrm{e}^{\mathrm{i}n\theta}$，则

$$S_{\text{线截面}}\cdot 2\pi R|c|^2=1$$

给出

$$|c|^2 = (2\pi R S_{\text{线截面}})^{-1}$$

因而

$$\begin{aligned} I &= \int \boldsymbol{j}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S}_{\text{线截面}} = \frac{ne\hbar}{mR}|c|^2 S_{\text{线截面}} \\ &= \frac{ne\hbar}{mR}(2\pi R S_{\text{线截面}})^{-1} S_{\text{线截面}} = \frac{ne\hbar}{2\pi m R^2} \end{aligned}$$

由于线很细，认为线上同一截面中的 j 相同.

由于初始处于基态， E_n 为最小，所以

$$n = -\left[\frac{e\Phi}{2\pi c\hbar}\right], \text{或} -\left[\frac{e\Phi}{2\pi c\hbar}\right]-1\text{中之一}$$

其中， $[A]$ 表示不大于 A 的最大整数.

对于宏观大量子数情况 (本题 (3)) 即属于这种情况， $n \approx -e\Phi/2\pi c\hbar$，所以

$$I \approx e^2\Phi/4\pi^2 R^2 mc$$

(3) 在 $R = 2\text{cm}, \Phi = 0.6\text{Gs}\cdot\text{cm}^2$ 时，将上面 I 的公式化成 SI 制形式

$$\begin{aligned} I &= e^2\Phi/4\pi^2 R^2 m \\ &= (1.6\times 10^{-19})^2 \times 0.6\times 10^{-4}\times 10^{-4} / \left[4\pi^2\times(2\times 10^{-2})^2\times 0.9\times 10^{-30}\right]\ (\text{A}) \\ &= 1.1\times 10^{-14}(\text{A}) \end{aligned}$$

6.21　时间反演不变时，波函数的时间反演形式

题 6.21　(1) 假定非相对论量子力学在时间反演下不变，导出 Schrödinger 波函数的时间反演形式；

(2) 一个自由电子，磁矩为 $\boldsymbol{\mu}$，处于沿 z 方向的恒定外磁场中. 在电子的参照系中量子力学 Hamilton 量形式如何？设场强为 B_z；

(3) 假如在 y 方向上再加上一个常磁场 B_y，试确定这时算符 $\dfrac{\mathrm{d}\boldsymbol{\mu}}{\mathrm{d}t}$ 的形式.

解答　(1) Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t) = H\psi(t)$$

作变换 $t\to -t$ 后

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial(-t)}\psi(-t) = H(-t)\psi(-t)$$

也就是

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(-t) = H^*(-t)\psi^*(-t)$$

如果 $H^*(-t)=H(t)$，则 Schrödinger 波动方程在时间反演下不变. 波函数的时间反演形式为 $\psi^*(-t)$.

(2) 在电子的参照系中

$$H=-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}=-\mu_z B_z=\frac{e\hbar}{2mc}\sigma_z B_z$$

(3) 现在 $H=-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}=\dfrac{e\hbar}{2mc}(\sigma_z B_z+\sigma_y B_y)$，则

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\mu}}{\mathrm{d}t} &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{\mu},H]\\ &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left(\frac{e\hbar}{2mc}\right)^2[-\sigma_x\boldsymbol{e}_x-\sigma_y\boldsymbol{e}_y-\sigma_z\boldsymbol{e}_z,\sigma_z B_z+\sigma_y B_y]\\ &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left(\frac{e\hbar}{2mc}\right)^2[\mathrm{i}(\sigma_y B_z-\sigma_z B_y)\boldsymbol{e}_x-\mathrm{i}\sigma_x B_z\boldsymbol{e}_y+\mathrm{i}\sigma_x B_y\boldsymbol{e}_z]\\ &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left(\frac{e\hbar}{2mc}\right)^2\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{B}=\frac{e}{2mc}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{\mu}\end{aligned}$$

6.22　有自旋的带电粒子在均匀磁场中低速运动时的 Hamilton 量

题 6.22 ①　一个粒子质量为 m，电荷为 q，内禀角动量为 $\boldsymbol{s}$(s 不必等于 1/2) 和磁偶极矩为 $\boldsymbol{\mu}=\dfrac{q}{2mc}g\boldsymbol{s}$. 该粒子在一个均匀磁场中以小于光速 c 的速度运动 (磁场为 $\boldsymbol{B}$).

(1) 写出体系的 Hamilton 量，均匀磁场的矢量势可写成 $\boldsymbol{A}=\dfrac{1}{2}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r}$.

(2) 从这个 Hamilton 量，推导机械动量 $\boldsymbol{P}$ 和角动量 $\boldsymbol{s}$ 的量子力学 (Heisenberg) 运动方程 (在此非相对论近似中可略去 $\boldsymbol{A}^2$ 项).

(3) 不解这些方程，给出保持螺旋度为常数的 g 因子的值 (螺旋度为自旋在动量方向的投影).

(4) e,p,n,π 这些粒子 g 因子的实际值是多少?

解答　(1) Hamilton 量为

$$H=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}=\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2-\frac{q}{2mc}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}-\frac{q}{2mc}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A}+\frac{q^2}{2mc^2}\boldsymbol{A}^2-\frac{gq}{2mc}\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{B}$$

(2) 机械动量 $\boldsymbol{P}$ 为

$$\boldsymbol{P}=\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}$$

按题设，

$$\begin{aligned}[P_i,H] &= \left[p_i-\frac{q}{c}A_i,\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2-\frac{q}{2mc}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p})+\frac{q^2}{2mc^2}\boldsymbol{A}^2\right]\\ &= -\frac{q}{2mc}[p_i,\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}]+\frac{q^2}{2mc^2}[p_i,\boldsymbol{A}^2]\end{aligned}$$

① 本题根据 U. C. Berkerley 的 1979 年博士生资格考试题改编.

$$-\frac{q}{2mc}\left[A_i,\boldsymbol{p}^2\right]+\frac{q^2}{2mc^2}\left[A_i,\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}\right] \tag{6.115}$$

其中

$$\begin{aligned}
\left[p_i,\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}\right] &= \left[p_i,p_jA_j+A_jp_j\right]\\
&= -\mathrm{i}\hbar p_j\left(\partial_iA_j\right)-\mathrm{i}\hbar\left(\partial_iA_j\right)p_j\\
\left[p_i,\boldsymbol{A}^2\right] &= -2\mathrm{i}\hbar\left(\partial_iA_j\right)A_j\\
\left[A_i,\boldsymbol{p}^2\right] &= \mathrm{i}\hbar p_j\left(\partial_jA_i\right)+\mathrm{i}\hbar\left(\partial_jA_i\right)p_j\\
\left[A_i,\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}\right] &= 2\mathrm{i}\hbar A_j\left(\partial_jA_i\right)
\end{aligned}$$

这样由磁场均匀

$$\begin{aligned}
\left[P_i,H\right] &= \frac{\mathrm{i}\hbar q}{2mc}\left[\left(\partial_iA_j\right)-\left(\partial_jA_i\right)\right]p_j+\frac{\mathrm{i}\hbar q}{2mc}p_j\left[\left(\partial_iA_j\right)-\left(\partial_jA_i\right)\right]\\
&\quad+\frac{\mathrm{i}\hbar q^2}{mc^2}\left[-\left(\partial_iA_j\right)A_j+A_j\left(\partial_jA_i\right)\right]\\
&= \frac{\mathrm{i}\hbar q}{mc}\varepsilon_{ijk}p_jB_k-\frac{\mathrm{i}\hbar q^2}{mc^2}\varepsilon_{ijk}A_jB_k\\
&= \frac{\mathrm{i}\hbar q}{mc}\varepsilon_{ijk}P_jB_k=\frac{\mathrm{i}\hbar q}{mc}(\boldsymbol{P}\times\boldsymbol{B})_i
\end{aligned} \tag{6.116}$$

给出

$$\frac{\mathrm{d}P_i}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[P_i,H\right]=\frac{q}{mc}\varepsilon_{ijk}P_jB_k=\frac{q}{mc}(\boldsymbol{P}\times\boldsymbol{B})_i \tag{6.117}$$

可见 $\boldsymbol{P}$ 以 $\omega_c=2\omega_{\mathrm{L}}=eB/mc$ 的回转频率绕 $\boldsymbol{B}$ 转动， $\omega_{\mathrm{L}}=eB/2mc$ 为 Larmor 频率，因而

$$\left[\boldsymbol{P}^2,H\right]=0 \tag{6.118}$$

另外

$$\begin{aligned}
\left[s_i,H\right] &= \left[s_i,-\frac{gq}{2mc}\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{B}\right]=-\frac{gq}{2mc}\left[s_i,s_jB_j\right]\\
&= -\frac{gq}{2mc}B_j\left[s_i,s_j\right]=-\frac{gq}{2mc}\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}s_kB_j\\
&= \frac{\mathrm{i}\hbar gq}{2mc}(\boldsymbol{s}\times\boldsymbol{B})_i
\end{aligned} \tag{6.119}$$

因而

$$\frac{\mathrm{d}s_i}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[s_i,H\right]=\frac{gq}{2mc}(\boldsymbol{s}\times\boldsymbol{B})_i \tag{6.120}$$

可见 $\boldsymbol{s}$ 以 $g\omega_{\mathrm{L}}=geB/2mc$ 的频率绕 $\boldsymbol{B}$ 转动， $\omega_{\mathrm{L}}=eB/2mc$ 为 Larmor 频率，因而

$$\left[\boldsymbol{s}^2,H\right]=0 \tag{6.121}$$

(3) $\boldsymbol{P}$ 和 $\boldsymbol{s}$ 对易. 可在 $\boldsymbol{P}$， $\boldsymbol{s}^2$ 和 s_z 的共同本征态中讨论. 螺旋度算符定义为

$$h=\frac{\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{s}}{|\boldsymbol{P}|\cdot|\boldsymbol{s}|}$$

由于式 (6.118)与式 (6.121)以及式 (6.116)与式 (6.119)，则有

$$\begin{aligned}[h,H] &= \frac{1}{|\boldsymbol{P}|\cdot|\boldsymbol{s}|}[\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{s},H]=\frac{1}{|\boldsymbol{P}|\cdot|\boldsymbol{s}|}[P_is_i,H]\\ &= \frac{1}{|\boldsymbol{P}|\cdot|\boldsymbol{s}|}\frac{\mathrm{i}\hbar gq}{2mc}P_i(\boldsymbol{s}\times\boldsymbol{B})_i+\frac{\mathrm{i}\hbar q}{mc}(\boldsymbol{P}\times\boldsymbol{B})_is_i\\ &= \frac{1}{|\boldsymbol{P}|\cdot|\boldsymbol{s}|}\frac{\mathrm{i}\hbar gq}{2mc}\boldsymbol{P}\cdot(\boldsymbol{s}\times\boldsymbol{B})+\frac{\mathrm{i}\hbar q}{mc}(\boldsymbol{P}\times\boldsymbol{B})\cdot\boldsymbol{s}\\ &= \frac{\mathrm{i}\hbar(g-2)q}{2mc}(\boldsymbol{P}\times\boldsymbol{s})\cdot\boldsymbol{B}\end{aligned}\tag{6.122}$$

若要螺旋度为常数，即 $[h,H]$，则 g 必须为 2.

(4) e,p,n,π 这些粒子中 π 介子自旋为零，其余粒子的 g 因子值 (实际值) 如下：

e	p	n	π
2.0	5.6	−3.8	0

可见除了电子以外，其余粒子在均匀外磁场中螺旋度不能保持恒定. 由于真空涨落，电子 g 因子比 2 大约千分之一，螺旋度并非严格守恒.

6.23　电子、μ 子等 g 因子的一种测量原理

题 6.23　电子、μ 子的 g 因子理论计算和测量是物理学精密科学的典范. 本题考察 g 因子的一种测量原理 [D. Hanneke, S. Fogwell, and G. Gabrielse, Phys. Rev. Lett., 100 (2008), 120801; Fred Jegerlehner, and Andreas Nyffeler, Phys. Rep., 477 (2009), 1-110.]. 电子、μ 子均为 1/2 自旋粒子，电荷为 $-e$. 设其质量为 m，则磁矩为

$$\boldsymbol{\mu}=-g\frac{e}{2mc}\boldsymbol{s}=-g\frac{e\hbar}{4mc}\boldsymbol{\sigma}$$

其中，g 因子在 2 附近. 考虑具有一定动量的粒子 (电子、μ 子等) 在均匀磁场 [设沿 z 轴] 中运动，其 Hamilton 量为

$$H=\frac{1}{2}m\boldsymbol{v}^2+\mu\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}=\frac{1}{2}m\boldsymbol{v}^2+g\omega_{\mathrm{L}}s_z$$

其中，$\boldsymbol{v}$ 为粒子速度算符，其中 $\omega_{\mathrm{L}}=eB/2mc$ 为 Larmor 频率.

(1) 计算粒子自旋进动频率；

(2) 证明若 $g=2$，则粒子螺旋度算符 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{v}$ 是守恒量；

(3) 由于实际上 g 因子比 2 大约千分之一，上述 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{v}$ 并不是严格守恒量. 现在 $t=0$ 初始时刻极化粒子垂直于磁场入射，且初始时自旋取向与速度方向相同. 请计算自旋取向与速度方向偏离的角度随时间的变化关系和时间变化率 (角速度)，并给出该角速度与粒子自旋进动频率的比值 [对相对论粒子情况，在适当的地方计入动钟延缓效应即可]；

(4) 若有兴趣，可自行调研有关文献，对具体实验数据给出自己的计算.

解答　(1) 自旋与题给 Hamilton 量对易子

$$\begin{aligned}[s_x,H] &= [s_x,g\omega_{\mathrm{L}}s_z]=g\omega_{\mathrm{L}}[s_x,s_z]=-\mathrm{i}g\hbar\omega_{\mathrm{L}}s_y\\ [s_y,H] &= [s_y,g\omega_{\mathrm{L}}s_z]=g\omega_{\mathrm{L}}[s_y,s_z]=\mathrm{i}g\hbar\omega_{\mathrm{L}}s_x\\ [s_z,H] &= [s_z,g\omega_{\mathrm{L}}s_z]=g\omega_{\mathrm{L}}[s_z,s_z]=0\end{aligned}$$

或者

$$[\boldsymbol{s},H]=\mathrm{i}g\hbar\omega_{\mathrm{L}}\boldsymbol{e}_z\times\boldsymbol{s} \tag{6.123}$$

自旋导数算符为

$$\dot{\boldsymbol{s}}=\frac{\partial s_x}{\partial t}+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{s},H]=g\omega_{\mathrm{L}}\boldsymbol{e}_z\times\boldsymbol{s} \tag{6.124}$$

用 Pauli 算符表示为

$$[\boldsymbol{\sigma},H]=\mathrm{i}g\hbar\omega_{\mathrm{L}}\boldsymbol{e}_z\times\boldsymbol{\sigma} \tag{6.125}$$

以及

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}}=g\omega_{\mathrm{L}}\boldsymbol{e}_z\times\boldsymbol{\sigma} \tag{6.126}$$

(2) 速度算符如下给出：

$$v_i=\frac{1}{\mu}\left(p_i+\frac{e}{c}A_i\right),\quad i=x,y,z$$

满足

$$\begin{aligned}[v_x,v_y] &= \frac{1}{m^2}\left[p_x-\frac{q}{c}A_x,p_y+\frac{e}{c}A_y\right]\\ &= \frac{1}{m^2}[p_x,p_y]+\frac{e}{m^2c}[p_x,A_y]+\frac{e}{m^2c}[A_x,p_y]+\frac{e^2}{m^2c}[A_x,A_y]\\ &= \frac{e}{m^2c}\left[\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial x},A_y\right]-\frac{q}{m^2c}\left[A_x,\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial y}\right]=-\frac{e}{m^2c}\cdot\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\left(\frac{\partial A_y}{\partial x}-\frac{\partial A_x}{\partial y}\right)\\ &= -\frac{\mathrm{i}e\hbar}{m^2c}B_z\end{aligned} \tag{6.127}$$

一般表达式 [由上式可以通过 x、 y、 z 轮换写出其余式子] 为

$$[v_i,v_j]=-\frac{\mathrm{i}\hbar e}{m^2c}\varepsilon_{ijk}B_k \tag{6.128}$$

速度与 Hamilton 量对易子

$$\begin{aligned}[v_i,H] &= \left[v_i,\frac{1}{2}m\boldsymbol{v}^2\right]=\frac{1}{2}m[v_i,v_jv_j]=-2\frac{1}{2}mv_j\frac{\mathrm{i}\hbar e}{m^2c}\varepsilon_{ijk}B_k\\ &= 2\mathrm{i}\hbar\omega_{\mathrm{L}}\left(\boldsymbol{e}_z\times\boldsymbol{v}\right)_i\end{aligned}$$

或者

$$[\boldsymbol{v},H]=2\mathrm{i}\hbar\omega_{\mathrm{L}}\left(\boldsymbol{e}_z\times\boldsymbol{v}\right) \tag{6.129}$$

速度导数算符为

$$\dot{\boldsymbol{v}}=\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t}+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[v_i,H]=2\omega_{\mathrm{L}}(\boldsymbol{e}_z\times\boldsymbol{v}) \tag{6.130}$$

由上面式 (6.125)以及式(6.129)，可得

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{v},H] &= [\boldsymbol{\sigma},H]\cdot\boldsymbol{v}+\boldsymbol{\sigma}\cdot[\boldsymbol{v},H]\\ &= \mathrm{i}g\hbar\omega_{\mathrm{L}}\boldsymbol{e}_z\times\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{v}+\boldsymbol{\sigma}\cdot 2\mathrm{i}\hbar\omega_{\mathrm{L}}(\boldsymbol{e}_z\times\boldsymbol{v})\\ &= \mathrm{i}(g-2)\hbar\omega_{\mathrm{L}}\boldsymbol{e}_z\cdot(\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{v})\end{aligned} \tag{6.131}$$

可见若 $g=2$，则 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{v}$ 是守恒量.

(3) 由上面式 (6.126)以及式(6.130)，可得在 Heisenberg 图像，$\boldsymbol{\sigma}$ 绕 $\boldsymbol{B}$ 以 $\omega_{\mathrm{s}}=g\omega_{\mathrm{L}}$ 的角速度匀速率转动，而速度算符 $\boldsymbol{v}$ 绕 $\boldsymbol{B}$ 以回转频率 $\omega_C=2\omega_{\mathrm{L}}$ 匀速率转动，这样自旋取向与速度方向偏离的角度随时间的变化关系为

$$\phi(t)=\omega_{\mathrm{s}}t-\omega_C t=(g-2)\omega_{\mathrm{L}}t \tag{6.132}$$

时间变化率 (角速度) 为

$$\omega_{\mathrm{d}}=\frac{\mathrm{d}\phi(t)}{\mathrm{d}t}=(g-2)\omega_{\mathrm{L}} \tag{6.133}$$

该角速度与粒子自旋进动频率的比值为

$$\frac{\omega_{\mathrm{d}}}{\omega_{\mathrm{s}}}=\frac{g-2}{g} \tag{6.134}$$

(4) 请读者自行试着做一做.

6.24　中子干涉问题

题 6.24　有一台中子干涉仪 (图 6.6)，其分束器和反射镜是用同一块单晶制成的.

(1) 改变放在干涉仪的一臂中的薄塑料板的厚度. 可以改变两臂的相对位相，于是条纹发生移动，简要定性解释相移的起源.

(2) 在一臂中垂直于中子束加上一很均匀的常磁场，这时中子所受的磁力可以忽略. 选择磁场的强度，使中子的自旋矢量恰好旋转一周，发现两中子束的相对位相改变了半周，即 π 的弧度. 用恰当的方程说明为什么是这样的.

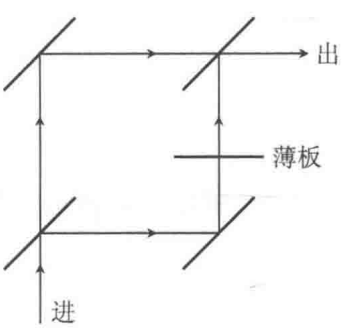


图 6.6　中子干涉仪

解答　(1) 当中子通过薄塑料板时，中子在塑料板中受到一个附加势的作用，因而动量发生改变，中子波的 de Broglie 波长也随之变化. 所以，中子波在相同厚度的塑料板和真空中传播时，位相的改变是不同的. 如果放在一臂中的薄塑料板厚度改变，也就改变了 (从同一束中子分出的) 两束中子波通过两臂时的相对位相.

(2) 由于中子有反常磁矩，可记为 $\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{n}}=-\mu_{\mathrm{n}}\boldsymbol{\sigma}$，其中 $\mu_{\mathrm{n}}=-1.91\mu_{\mathrm{N}}$，而 $\mu_{\mathrm{N}}=e\hbar/2m_{\mathrm{p}}c$ 为核磁子. Schrödinger 方程为

$$\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_{\mathrm{n}}}+\mu_{\mathrm{n}}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}\right)\psi=E\psi$$

由于磁场对中子的作用很弱，可略去中子波入射到板状磁场界面时的反射波，这时通过求解上述一维方阱、两个自旋分量的 Schrödinger 方程可以证明：射入板状磁场 (正入射) 的波函数 $\psi_{\text{入}}$ 和透出板状磁场的波函数 $\psi_{\text{出}}$ 之间用如下幺正变换关系相联系:

$$\psi_{\text{出}}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\rho}}\psi_{\text{入}}$$

式中，$\boldsymbol{\rho}=\omega_{\mathrm{L}}\tau\boldsymbol{e}_{\mathrm{B}}$，$\omega_{\mathrm{L}}=\dfrac{2\mu_{\mathrm{n}}B}{\hbar}$ 是 Larmor 频率，$\tau=\dfrac{Lm_{\mathrm{n}}}{\hbar k}$ 是中子通过厚为 L 的板状磁场的时间，$\boldsymbol{e}_{\mathrm{B}}$ 是 $\boldsymbol{B}$ 的单位方向矢量，k 是入射中子的波数.

假定中子进入磁场前极化在 (θ,φ) 方向，即极化矢量为

$$P=\langle\psi_{\text{入}}|\sigma|\psi_{\text{入}}\rangle=\{\sin\theta\cos\varphi,\ \sin\theta\sin\varphi,\ \cos\theta\}$$

那么 $\psi_{\text{入}}$ 可由下式给出：

$$\psi_{\text{入}}=\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi/2}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi/2}\end{pmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\cdot x}$$

式中，θ 是同磁场方向的夹角. 选 $\boldsymbol{e}_B=\boldsymbol{e}_z$，则

$$\psi_{\text{出}}=\begin{pmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\rho/2} & 0\\ 0 & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\rho/2}\end{pmatrix}\psi_{\text{入}}=\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\varphi+\rho)/2}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\varphi+\rho)/2}\end{pmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}$$

调整 B(或 L) 使 $\rho=2\pi$，则中子极化矢量在离开磁场时已旋进了一周，但这时

$$\psi_{\text{出}}=\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi/2}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi/2}\end{pmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}+\pi)}$$

即出射波只增加了 π 位相，从而和另一臂 (未通过磁场) 的中子波相比只使相对位相改变了半周.

6.25　处于 2p 态氢原子在外磁场中，计算 $\langle L_x\rangle$

题 6.25　(1) 一个氢原子处在 2p 态，并且是 $L_x=\hbar$ 的态. 在 $t=0$ 时，在系统上加上磁感应强度为 $|\boldsymbol{B}|$、方向沿 z 轴的强磁场. 假定电子的自旋效应可以忽略，计算 L_x 的期望值随时间的变化.

(2) 所加的磁场需多强才能使电子自旋效应真正被忽略? 答案用标准的宏观单位表示.

(3) 如果加上的磁场极弱，并假定 $t=0$ 时， $L_x=+\hbar, s_x=\dfrac{1}{2}\hbar$ 而磁场仍指向 z 轴方向. 概述这种情形下对 L_x 的期望值随时间变化的计算过程 (不需作全部计算，但各主要步骤需解释清楚).

注意　在本题中，核自旋的所有效应均可忽略.

解答　(1) 题中给出的初始条件写成明确表达式是

$$\psi(\boldsymbol{r},t)|_{t=0}=R_{21}(r)\Theta(\theta,\varphi)$$

式中， $\Theta(\theta,\varphi)=\dfrac{1}{2}\left(\mathrm{Y}_{11}+\mathrm{Y}_{1,-1}+\sqrt{2}\mathrm{Y}_{10}\right)$ 为 $L_x=+\hbar$ 本征态.

在 $t\geqslant 0$ 时，系统加上了磁感应强度为 $|\boldsymbol{B}|$ 的指向 z 轴方向的强磁场，则系统的 Hamilton 量为

$$H=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}-\frac{e^2}{r}+\frac{eB}{2m_{\mathrm{e}}c}L_z+\frac{e^2B^2}{8m_{\mathrm{e}}c^2}\left(x^2+y^2\right)$$

考虑到在一般的强磁场 $B\sim 10^5\mathrm{Gs}$ 下， B^2 项可以忽略不计，所以重写 Hamilton 量为

$$H=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}-\frac{e^2}{r}+\frac{eB}{2m_{\mathrm{e}}c}L_z$$

Schrödinger 方程为 $\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial\psi}{\partial t}=H\psi$. 方程的定态解为

$$\psi_{nlm}(\boldsymbol{r},t)=R_{nl}(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_{nlm}t/\hbar} \tag{6.135}$$

相应能量本征值为 $E_{nlm}=E_{nl}+\dfrac{eB}{2m_{\mathrm{e}}c}m\hbar$. 于是可得方程的一般解为

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\sum_{nlm}a_n\psi_{nlm}(\boldsymbol{r})\exp\left[-\mathrm{i}\frac{E_{nlm}t}{\hbar}\right]$$

考虑到初始条件，则系统随时间变化的波函数为

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{2}R_{21}(r)\left[\mathrm{Y}_{11}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_{211}t}+\mathrm{Y}_{1-1}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_{21-1}t}+\sqrt{2}\mathrm{Y}_{10}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_{210}t}\right] \tag{6.136}$$

于是， L_x 的期望值即为 $\langle\psi|L_x|\psi\rangle$. 由于 $L_x=\dfrac{1}{2}(L_++L_-)$，故

$$L_x\mathrm{Y}_{11}=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\mathrm{Y}_{10},\quad L_x\mathrm{Y}_{1-1}=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\mathrm{Y}_{10},\quad L_x\mathrm{Y}_{10}=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\left(\mathrm{Y}_{11}+\mathrm{Y}_{1-1}\right)$$

所以

$$L_x(t)=\langle\psi|L_x|\psi\rangle=\hbar\cos\frac{eB}{2m_{\mathrm{e}}c}t \tag{6.137}$$

(2) 所谓强磁场下自旋效应可以不加考虑，就是指电子在磁场中附加能远大于自旋 – 轨道耦合作用能的情形，即

$$\frac{e\hbar}{2m_{\mathrm{e}}c}B\gg\Delta E_{\text{旋-轨}}\approx 10^{-3}\mathrm{eV}$$

将已知的 e， $\hbar$， m_{e}， c 数值代入，得

$$B \geqslant 10^6 \mathrm{Gs}$$

所以，当磁场强到 10^6Gs[①]以上时，电子的自旋效应可以真正不予考虑.

(3) 当加给氢原子系统的是弱磁场时，电子的自旋效应必须考虑. 这时计算 L_x 随时间变化的期望值的主要步骤如下：

(i) 写出极弱磁场下系统的 Hamilton 量

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_{\mathrm{e}}} - \frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{2m_{\mathrm{e}}^2 c^2 r^3}(\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}) + \frac{eB}{2m_{\mathrm{e}}c}J_z + \frac{eB}{2m_{\mathrm{e}}c}S_z$$

这是一个典型的反常 Zeeman 效应问题. 取耦合表象，在计算含 s_z 项的附加能时，可近似认为此表象对之是对角的.

(ii) 写出符合初始条件 $L_x = +\hbar, s_x = \frac{1}{2}\hbar$ 的系统随时间变化的波函数. 初始条件为

$$\psi_0(\boldsymbol{r}, S) = R_{21}(r)\Theta(\theta,\varphi)\chi_s \tag{6.138}$$

式中， Θ, χ_s 分别是在 $(\boldsymbol{L}^2, L_z)$, $(\boldsymbol{S}^2, S_z)$ 表象中 $L_x = +\hbar$ 和 $s_x = \frac{1}{2}\hbar$ 的本征波函数. 其明确表达式为

$$\begin{aligned}\psi_0(\boldsymbol{r}, S) &= R_{21}(r)\frac{1}{2}\left(\mathrm{Y}_{11} + \mathrm{Y}_{1-1} + \sqrt{2}\mathrm{Y}_{10}\right)\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha+\beta) \\ &= \frac{R_{21}(r)}{\sqrt{2}}\left(\mathrm{Y}_{11}\alpha + \mathrm{Y}_{11}\beta + \mathrm{Y}_{1-1}\alpha + \mathrm{Y}_{1-1}\beta + \sqrt{2}\mathrm{Y}_{10}\alpha + \sqrt{2}\mathrm{Y}_{10}\beta\right)\end{aligned} \tag{6.139}$$

注意

$$\begin{aligned}\phi_{j=\frac{3}{2},\, m=\frac{3}{2}} &= \mathrm{Y}_{11}\alpha \\ \phi_{\frac{3}{2}\frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{1}{3}}\mathrm{Y}_{11}\beta + \sqrt{\frac{2}{3}}\mathrm{Y}_{10}\alpha \\ \phi_{\frac{3}{2}\,-\frac{1}{2}} &= \sqrt{\frac{1}{3}}\mathrm{Y}_{1\,-1}\alpha + \sqrt{\frac{2}{3}}\mathrm{Y}_{10}\beta \\ \phi_{\frac{3}{2}\,-\frac{3}{2}} &= \mathrm{Y}_{1-1}\beta\end{aligned}$$

将 ψ_0 转化为耦合表象

$$\psi_0(r,S) = \frac{1}{2\sqrt{2}}R_{21}(r)\left[\phi_{\frac{3}{2}\frac{3}{2}} + \sqrt{3}\phi_{\frac{3}{2}\frac{1}{2}} + \sqrt{3}\phi_{\frac{3}{2}-\frac{1}{2}} + \phi_{\frac{3}{2}-\frac{3}{2}}\right]$$

式中 ϕ_{jm_j} 是 $(\boldsymbol{J}^2,\, J_z)$ 的本征函数. 这里能级为 E_{nljm_j}.

体系的随时间变化的波函数为

$$\psi(\boldsymbol{r},s,t) = \frac{1}{2\sqrt{2}}R_{21}(r)\cdot\left[\phi_{\frac{3}{2}\frac{3}{2}}\exp\left(-\mathrm{i}\frac{E_{21\frac{3}{2}\frac{3}{2}}}{\hbar}t\right) + \sqrt{3}\phi_{\frac{3}{2}\frac{1}{2}}\exp\left(-\mathrm{i}\frac{E_{21\frac{3}{2}\frac{1}{2}}}{\hbar}t\right)\right.$$

① Gs 为磁通量密度或者磁感应强度单位， $1\mathrm{Gs} = 10^{-4}\mathrm{T}$.

$$+\sqrt{3}\phi_{\frac{3}{2}-\frac{1}{2}}\exp\left(-\mathrm{i}\frac{E_{21\frac{3}{2}-\frac{1}{2}}}{\hbar}t\right)+\sqrt{3}\phi_{\frac{3}{2}-\frac{3}{2}}\exp\left(-\mathrm{i}\frac{E_{21\frac{3}{2}-\frac{3}{2}}}{\hbar}t\right)\Bigg] \tag{6.140}$$

(iii) 直接计算 L_x 的期望值

$$\langle\psi|L_x|\psi\rangle$$

6.26　不带电荷磁矩为 $\boldsymbol{\mu}$ 的粒子被约束在 $(-L,L)$ 的无限深势阱中，在 $x<0$ 区加磁场 $B_0\boldsymbol{e}_z$，在 $x>0$ 区加磁场 $B_0\boldsymbol{e}_x$，求能量本征态及能级方程

题 6.26　考虑无电荷但自旋为 $\dfrac{1}{2}$、磁矩为 $\mu=-\dfrac{2\mu_0}{\hbar}s$ 的粒子的一维运动. 粒子被约束在无限深方势阱中，势阱从 $x=-L$ 延伸到 $x=L$. 在 I 区 $(x<0)$ 有 z 方向的均匀磁场 $B_0\boldsymbol{e}_z$，在 II 区 $(x>0)$ 有同样大小但指向 x 方向的均匀磁场 $B_0\boldsymbol{e}_x$. $\boldsymbol{e}_x$，$\boldsymbol{e}_z$ 是 x 和 z 方向的单位矢量，如图 6.7所示.

(1) 在弱场极限 $B_0\ll\dfrac{1}{2m\mu_0}\left(\dfrac{\hbar}{L}\right)^2$ 下，用微扰论找出基态的能量和波函数 (自旋和空间).

(2) 现考虑 B_0 任意，找出在 I 区满足左方边条件的能量本征函数 ψ_{I} 的一般表达式 (空间和自旋). 同理求 II 区满足右方边条件的能量本征函数 ψ_{II}.

(3) 求出决定能量本征值 E 的方程.

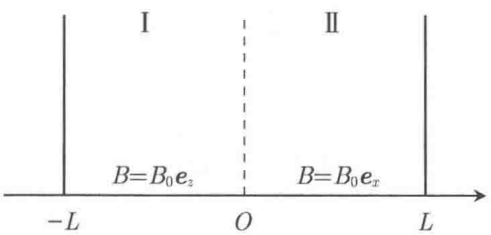


图 6.7　无限深势阱中，在 $x<0$ 区加磁场 $B_0\boldsymbol{e}_z$，在 $x>0$ 区加磁场 $B_0\boldsymbol{e}_x$

解答　(1) 无磁场时 Hamilton 量 $H=H_0$，能量本征函数 (空间) 为

$$\psi_n=\sqrt{\frac{1}{L}}\sin\frac{n\pi(x+L)}{2L},\qquad n=1,2,3,\cdots \tag{6.141}$$

相应能量本征值为

$$E_n=\frac{\hbar^2\pi^2}{8mL^2}n^2$$

考虑自旋，可知每个能级是二重简并的. 有磁场时 Hamilton 量 $H=H_0+H'$，

$$H'=-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}=\mu_0\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}=\begin{cases}\mu_0B_0\sigma_z, & -L\leqslant x<0\\ \mu_0B_0\sigma_x, & 0\leqslant x\leqslant L\\ 0, & \text{其他}\end{cases}$$

弱场时取 $\Psi_1=\psi_1(x)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$，$\Psi_2=\psi_1(x)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ 为基矢，则

$$\begin{aligned}H'_{11}&=\langle\Psi_1|H'|\Psi_1\rangle=\mu_0B_0\int_{-L}^{0}\psi_1^*(x)\psi_1(x)\mathrm{d}x=\frac{\mu_0B_0}{2}\\H'_{21}&=H'_{12}=\langle\Psi_1|H'|\Psi_2\rangle\\&=\mu_0B_0\int_{0}^{L}\psi_1^*(x)\psi_1(x)\mathrm{d}x=\frac{\mu_0B_0}{2}\\H'_{22}&=\langle\Psi_2|H'|\Psi_2\rangle\\&=-\mu_0B_0\int_{-L}^{0}\psi_1^*(x)\psi_1(x)\mathrm{d}x=-\frac{\mu_0B_0}{2}\end{aligned}$$

由久期方程 $\det(H'-E^{(1)}I)=0$ 可得

$$\left(\frac{\mu_0B_0}{2}-E^{(1)}\right)\left(-\frac{\mu_0B_0}{2}-E^{(1)}\right)-\frac{\mu_0^2B_0^2}{4}=0$$

由此解得

$$E^{(1)}=\pm\frac{1}{\sqrt{2}}\mu_0B_0$$

基态能级为

$$E_0=\frac{\pi^2\hbar^2}{8mL^2}-\frac{1}{\sqrt{2}}\mu_0B_0$$

由 $(H'-E^{(1)}I)\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}$ 可求得基态波函数 (未归一)

$$\varphi_0=a\Psi_1+b\Psi_2=\psi_1(x)\begin{pmatrix}1-\sqrt{2}\\1\end{pmatrix}$$

(2) I 区 $(-L\leqslant x\leqslant 0)$ 波函数的空间部分为

$$\psi_{\mathrm{I}k_1}=A\sin k_1(x+L)+B\cos k_1(x+L)$$

由波函数连续可知 $B=0$，再考虑自旋可得 I 区波函数 $(-L\leqslant x\leqslant 0)$ 为

$$\begin{cases}\Psi_{\mathrm{I}k_1x\downarrow}=\sin k_1(x+L)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}, & E=\dfrac{\hbar^2k_1^2}{2m}-\mu_0B_0\\[2ex]\Psi_{\mathrm{I}k_1x\uparrow}=\sin k_1(x+L)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, & E=\dfrac{\hbar^2k_1^2}{2m}+\mu_0B_0\end{cases}\tag{6.142}$$

同理，可得 II 区的能量本征函数 $(0 \leqslant x \leqslant L)$ 为

$$\begin{cases} \Psi_{\mathrm{II}k_2x\downarrow} = \sin k_2(x-L)\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, & E = \dfrac{\hbar^2 k_2^2}{2m} - \mu_0 B_0 \\ \Psi_{\mathrm{II}k_2x\uparrow} = \sin k_2(x-L)\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, & E = \dfrac{\hbar^2 k_2^2}{2m} + \mu_0 B_0 \end{cases} \tag{6.143}$$

$x < -L$ 与 $x > L$ 时，波函数为零.

(3) 考虑全空间能量本征函数为

$$\Psi_E = \begin{cases} A\Psi_{\mathrm{I}k_1x\downarrow} + B\Psi_{\mathrm{I}k_1'x\uparrow}, & -L \leqslant x < 0 \\ C\Psi_{\mathrm{II}k_2x\downarrow} + B\Psi_{\mathrm{II}k_2'x\uparrow}, & 0 \leqslant x \leqslant L \\ 0, & \text{其他} \end{cases} \tag{6.144}$$

满足定态方程 $H\Psi_E = E\Psi_E$，而

$$H\Psi_E = \begin{cases} \left(\dfrac{\hbar^2 k_1^2}{2m} - \mu_0 B_0\right) A\Psi_{\mathrm{I}k_1x\downarrow} + \left(\dfrac{\hbar^2 {k_1'}^2}{2m} + \mu_0 B_0\right) B\Psi_{\mathrm{I}k_1'x\uparrow}, & -L \leqslant x < 0 \\ \left(\dfrac{\hbar^2 k_2^2}{2m} - \mu_0 B_0\right) C\Psi_{\mathrm{I}k_2x\downarrow} + \left(\dfrac{\hbar^2 {k_2'}^2}{2m} + \mu_0 B_0\right) D\Psi_{\mathrm{I}k_2'x\uparrow}, & 0 \leqslant x \leqslant L \\ 0, & \text{其他} \end{cases}$$

式中，x 的区间与前相同. 则

$$\begin{aligned} E &= \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} - \mu_0 B_0 = \frac{\hbar^2 {k_1'}^2}{2m} + \mu_0 B_0 \\ &= \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} - \mu_0 B_0 = \frac{\hbar^2 {k_2'}^2}{2m} + \mu_0 B_0 \end{aligned}$$

所以

$$k_1 \simeq k_2 \approx k, \qquad k_1' = k_2' = k'$$

考虑波函数在 $x = 0$ 连续，可得

$$\begin{pmatrix} B\sin k'L \\ A\sin kL \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -C\sin kL - D\sin k'L \\ C\sin kL - D\sin k'L \end{pmatrix}$$

考虑波函数的导数在 $x = 0$ 连续，可得

$$\begin{pmatrix} Bk'\cos k'L \\ Ak\cos kL \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Ck\cos kL + Dk'\cos k'L \\ -Ck\cos kL + Dk'\cos k'L \end{pmatrix}$$

由非零解条件得

$$\begin{vmatrix} 0 & \sin k'L & \sin kl & \sin k'L \\ \sin kL & 0 & -\sin kL & \sin k'L \\ 0 & k'\cos k'L & -k\cos kL & -k'\cos k'L \\ k\cos kL & 0 & k\cos kL & -k'\cos k'L \end{vmatrix} = 0$$

也就是

$$-\sin kL \begin{vmatrix} \sin k'L & \sin kL & \sin k'L \\ k'\cos k'L & -k\cos kL & -k'\cos k'L \\ 0 & k\cos kL & -k'\cos k'L \end{vmatrix}$$

$$-k\cos kL \begin{vmatrix} \sin k'L & \sin kL & \sin k'L \\ 0 & -\sin kL & \sin k'L \\ k'\cos k'L & -k\cos kL & -k'\cos k'L \end{vmatrix} = 0$$

可化为

$$(k\sin kL\cos k'L - k'\sin k'L\cos kL)^2 = 0$$

确定能量本征值 E 的方程为

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu_0 B_0 = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + \mu_0 B_0$$

其中， k、 k' 满足 $k\sin kL\cos k'L = k'\sin k'L\cos kL$.

6.27 带电粒子在磁通为 Φ 的长螺线管穿过半径为 R 的双环中运动时，能级及本征函数

题 6.27 (1) 一个粒子在半径为 R 的环上做非相对论性运动时 (图 6.8(a))，其能量本征值和本征函数是什么?

(2) 当上题的环变为 (图 6.8(b)) 双环时 (每一环的半径为 R)，系统的能量本征值及本征函数是什么?

(3) 设粒子电量为 q，当一只磁通为 Φ 的长螺线管穿过 (1) 及 (2) 的环中的时候 (图 6.8(c))，这两个系统的能量本征值和本征函数又变成了什么? 假定系统无电磁辐射.

解答 (1) 粒子在环上做非相对论性运动，定态方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2I}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\theta^2}\psi(\theta) = E\psi(\theta)$$

其中， $I = mR^2$，周期边界条件 $\psi(\theta+2\pi) = \psi(\theta)$. 由此得定态解

$$\psi_n(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}n\theta}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$$

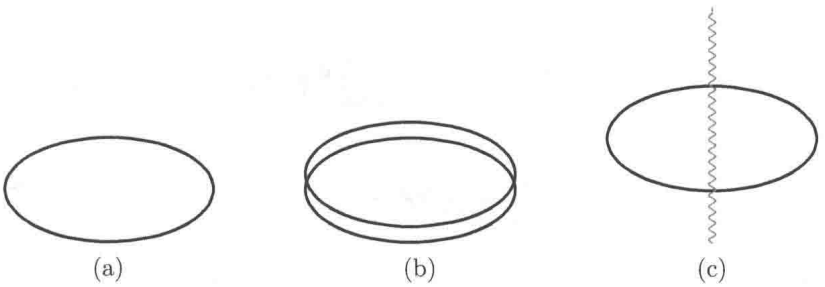


图 6.8　一个粒子在半径为 R 的环上做非相对论性运动

相应能量本征值为

$$E_n(\theta)=\frac{n^2\hbar^2}{2I}$$

(2) 粒子在双环上做非相对论性运动，定态方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2I}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\theta^2}\psi(\theta)=E\psi(\theta)$$

其中，$I=mR^2$，周期边界条件 $\psi(\theta+4\pi)=\psi(\theta)$. 由此得定态解

$$\psi_n(\theta)=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}n\theta},\quad n=0,\pm1,\pm2,\cdots$$

相应能量本征值为

$$E_n(\theta)=\frac{n^2\hbar^2}{8I}$$

(3) 粒子电量为 q，当一只磁通为 Φ 的长螺线管穿过环中的时候，粒子 Hamilton 量为

$$H=\frac{1}{2m}[\boldsymbol{p}-q\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})]^2=-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\nabla-\frac{\mathrm{i}q}{\hbar}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\right]^2$$

由于粒子运动区域里 $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}=0$，故可取 $\boldsymbol{A}=\nabla\varphi$. 由对称性知，可以取 $\boldsymbol{A}=A_\theta\boldsymbol{e}_\theta$，$A_\theta=\mathrm{const}$，

$$\oint\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{d}l=\int_0^{2\pi}A_\theta R\mathrm{d}\theta=2\pi RA_\theta=\phi$$

所以有

$$A=\frac{\Phi}{2\pi R}e_\theta=\nabla\left(\frac{\phi}{2\pi}\theta\right)$$

取 $\varphi=\dfrac{\phi\theta}{2\pi}$ 只引起波函数的常数相位差

$$\begin{aligned}H\psi&=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla-\frac{\mathrm{i}q\phi}{2\pi\hbar}\nabla\theta\right)^2\Phi\\&=-\frac{\hbar^2}{2m}\exp\left(\mathrm{i}\frac{q\phi}{2\pi\hbar}\theta\right)\nabla^2\left(\exp\left(-\mathrm{i}\frac{q\phi}{2\pi\hbar}\theta\right)\psi(\theta)\right)\\&=E\psi\end{aligned}$$

作变换

$$\psi'(\theta)=\exp\left(-\mathrm{i}\frac{q\phi}{2\pi\hbar}\theta\right)\psi(\theta)$$

可得

$$-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\theta^2}\psi'(\theta)=E\psi'(\theta)$$

其中

$$\psi'(\theta)=\exp\left(\pm\mathrm{i}\sqrt{\frac{2IE}{\hbar^2}}\theta\right)$$

粒子在环上做非相对论性运动，

$$\begin{aligned}\psi(\theta+2\pi) &= c\exp\left[\mathrm{i}\frac{q\phi}{2\pi\hbar}(\theta+2\pi)\right]\psi'(\theta+2\pi)\\ &= c\exp\left[\mathrm{i}\left(\frac{q\phi}{2\pi\hbar}\pm\sqrt{\frac{2IE}{\hbar^2}}\right)(\theta+2\pi)\right]\\ &= \psi(\theta)=c\exp\left[\mathrm{i}\left(\frac{q\phi}{2\pi\hbar}\pm\sqrt{\frac{2IE}{\hbar^2}}\right)\right]\end{aligned}$$

所以有

$$\frac{q\phi}{2\pi\hbar}\pm\sqrt{\frac{2IE}{\hbar^2}}=n$$

得能量本征态解

$$\psi_n(\theta)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}n\theta},\quad n=0,\pm1,\pm2,\cdots$$

相应能量本征值为

$$E_n=\frac{\hbar^2}{2I}\left(n-\frac{q\phi}{2\pi\hbar}\right)^2$$

同理，粒子在双环上做非相对论性运动，有能量本征态解

$$\psi_n(\theta)=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{n}{2}\theta},\quad n=0,\pm1,\pm2,\cdots$$

相应能量本征值为

$$E_n=\frac{\hbar^2}{2I}\left(\frac{n}{2}-\frac{q\phi}{2\pi\hbar}\right)^2=\frac{\hbar^2}{8I}\left(n-\frac{q\phi}{\pi\hbar}\right)^2$$

(O-7423.31)

物理学大题典

“物理学大题典”是中国科学技术大学39位资深教授长期鼎立合作的成果，前后历经近20年. 这套大型物理题解丛书的前身是在中国物理学界久负盛名的“美国物理试题与解答”丛书. “美国物理试题与解答”是CUSPEA项目的成果，内容主要是美国知名大学研究生的入学试题解答. 本次再版工作历时一年而成，增加了第6卷《相对论物理学》，第7卷《量子力学》扩充为上、下分册，丛书最终为8卷10分册. 丛书除了继续涵盖力、热、光、电、近代物理到四大力学全部基础物理学内容之外，还包括了原子核物理、粒子物理、凝聚态物理、等离子体物理、天体物理、激光物理、量子光学和量子信息物理等内容，大体涵盖了当前物理学类专业的全部本科课程的内容，并追踪不断发展的科学轨迹，除在上一版基础上适当修订审校外，还补充收录了部分编审老师积累的工作成果.

“物理学大题典”以先进教育理念为指导，注重学科交叉、注重与科研结合，富于“当代感”，是物理学类师生的必备工具书.

①《力学（第二版）》（上、下册）
②《电磁学与电动力学（第二版）》
③《光学（第二版）》
④《分子、原子与亚原子物理学（第二版）》
⑤《热学 热力学 统计物理（第二版）》
⑥《相对论物理学（第二版）》
⑦《量子力学（第二版）》（上、下册）
⑧《固体物理及物理量测量（第二版）》

科学出版社互联网入口
高教数理出版分社：(010)64015178　销售：(010)64031535
E-mail：mph@mail.sciencep.com
销售分类建议：物理

www.sciencep.com

ISBN 978-7-03-058373-4
9 787030 583734 >

定　价：89.00 元