2016秋季博资考 --量子部分

张胜

2016年9月11日

第一部分、知识点梳理

➢波函数和薛定谔方程

- 玻恩解释
- 态叠加原理
- 薛定谔方程
  - 力场中的粒子

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\Psi+U(\vec{r})\Psi$$

  - 多粒子体系

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi=-\sum_{n=1}^{N}\frac{\hbar^2}{2\mu_n}\nabla_n^2\Psi+U(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\cdots,\vec{r}_N)\Psi$$

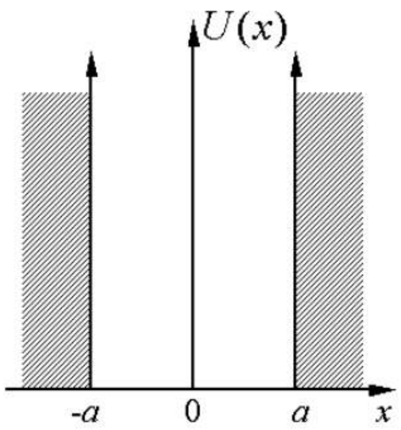
  - 概率流密度

$$\frac{\partial w}{\partial t}+\nabla\cdot\vec{J}=0,\quad \vec{J}\equiv\frac{i\hbar}{2\mu}(\Psi\nabla\Psi^*-\Psi^*\nabla\Psi)$$

➢ 一维定态问题

● 一维无限深势阱

$$\begin{cases} -\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\dfrac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi, & |x| < a \\ \psi = 0, & |x| \geq a \end{cases}$$



本征值和本征函数

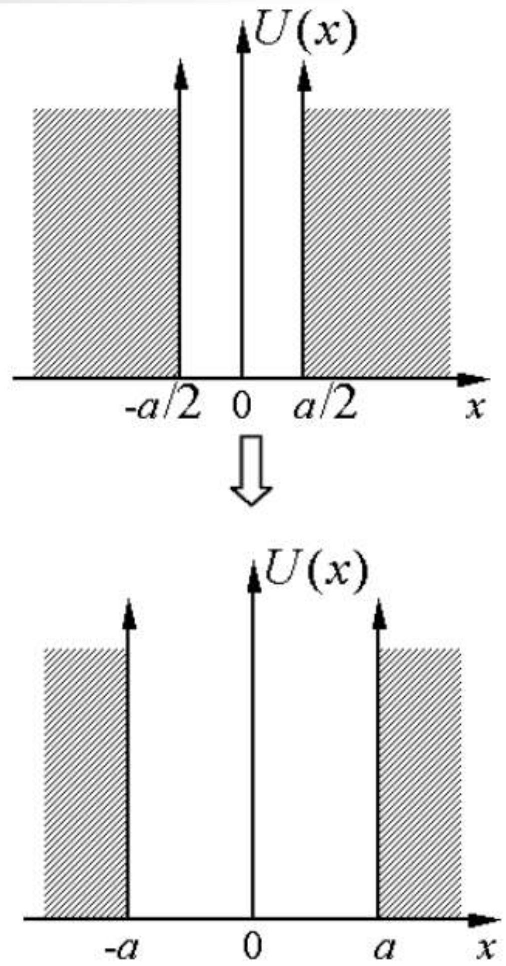
$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{8\mu a^2}, \qquad \psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}\sin[\frac{n\pi}{2a}(x+a)], \quad n = 1,2,3,\cdots$$

基态粒子的动量分布

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}\cos(\frac{\pi x}{2a}), \quad \phi_p(x) = \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

$$\Rightarrow c_1(p) = \frac{2\hbar\sqrt{2\pi a\hbar}}{-4a^2p^2 + \pi^2\hbar^2}\cos(\frac{ap}{\hbar})$$

- 问题分析
  - 势阱宽度突然增加，电子状态来不及改变→描述电子状态的波函数不变
  - 用新系统的本征函数展开旧波函数，第一个展开系数留在新基态 ψ_1' 的概率



- 新系统中的电子的基态

$$\psi_1'(x)=\begin{cases}\dfrac{1}{\sqrt{a}}\cos(\dfrac{\pi x}{2a}), & |x|<a\\ 0, & |x|\ge a\end{cases}$$

- 旧系统中的电子的基态

$$\psi_1(x)=\begin{cases}\dfrac{1}{\sqrt{a/2}}\cos(\dfrac{\pi x}{a}), & |x|<a/2\\ 0, & |x|\ge a/2\end{cases}$$

- 用新本征函数展开旧波函数，只考虑第一个展开系数

$$c_1=\int_{-a}^{a}\psi_1'(x)\,\psi_1(x)dx=\int_{-a/2}^{a/2}\frac{1}{\sqrt{a}}\cos(\frac{\pi x}{2a})\frac{1}{\sqrt{a/2}}\cos(\frac{\pi x}{a})dx=\frac{8}{3\pi}$$

$$\Rightarrow|c_1|^2=\frac{64}{9\pi^2}\approx 0.721$$

- 含时的波函数

$$\Psi(x,t)=\sum_n c_n\psi_n'(x)e^{-iE_nt/\hbar},\qquad c_n=-\frac{4\sqrt{2}(\sin\frac{n\pi}{4}+\sin\frac{3n\pi}{4})}{\pi(n^2-4)}$$

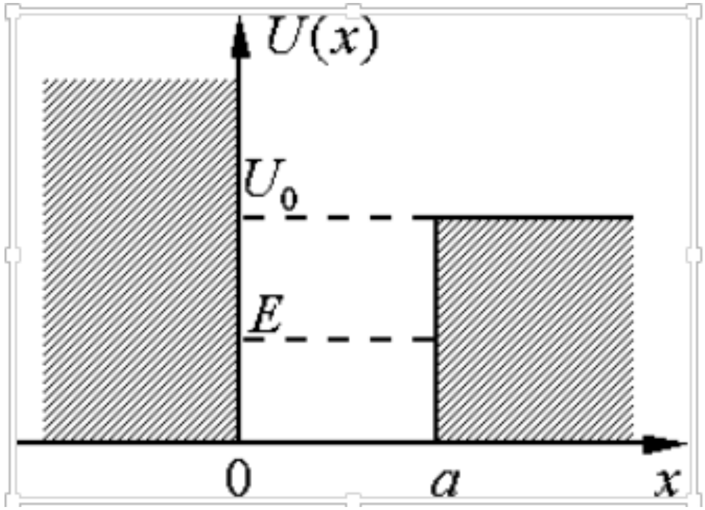
• 一维半壁无限深势阱

定态薛定谔方程（$E < U_0$）

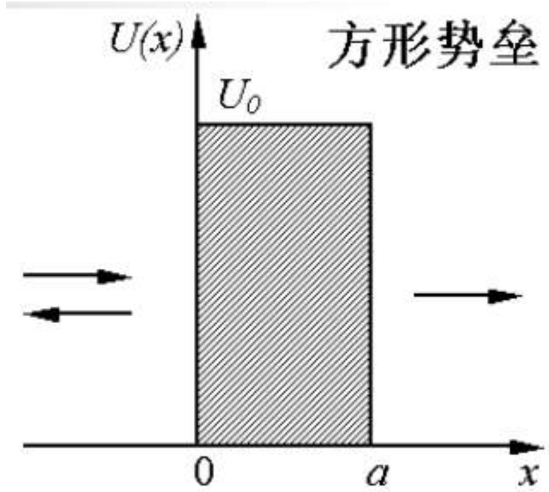
- 建立

$$\begin{cases} \psi = 0, & x < 0 \\ \dfrac{d^2\psi}{dx^2} + \beta^2\psi = 0, \quad \beta = \sqrt{\dfrac{2\mu E}{\hbar^2}}, & 0 < x < a \\ \dfrac{d^2\psi}{dx^2} - k^2\psi = 0, \quad k = \sqrt{\dfrac{2\mu(U_0 - E)}{\hbar^2}}, & x > a \end{cases}$$

连续性：波函数在 $x = 0$ 和 $x = a$ 连续



● 势垒贯穿



当 $E > U_0$ 时

$$\begin{cases} \dfrac{d^2\psi}{dx^2} + k_1^2\psi = 0, \\ \dfrac{d^2\psi}{dx^2} + k_2^2\psi = 0, \end{cases}$$

当 $E < U_0$ 时

$$\begin{cases} \dfrac{d^2\psi}{dx^2} + k_1^2\psi = 0, & x < 0 \quad \text{or} \quad x > a \\ \dfrac{d^2\psi}{dx^2} - k_2^2\psi = 0, & 0 < x < a \end{cases}$$

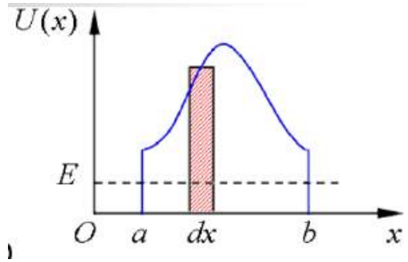
$$k_1 = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}, \quad k_2 = \sqrt{\frac{2\mu |E - U_0|}{\hbar^2}}$$

- $E < U_0 \;\; (0 < x < a)$

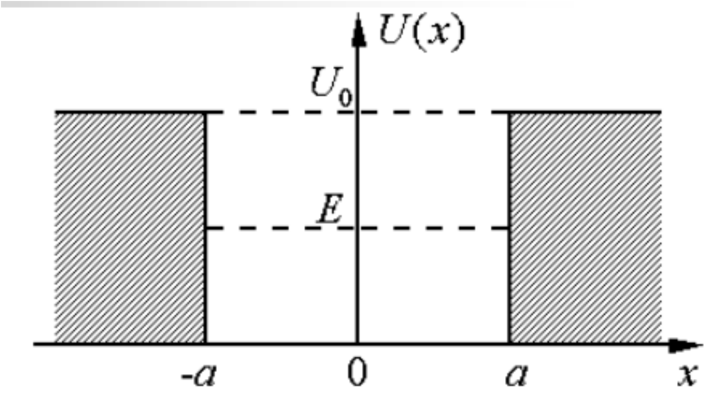
透射系数 $D = D_0 e^{-2k_2 a} = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2\mu(U_0 - E)}a}$， $D_0 \sim 1$

- 整个势垒的透射系数 = 每个方形势垒的透射系数的乘积

$$D = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar}\int_a^b \sqrt{2\mu[U(x_i) - E]}dx}$$



- 一维有限深势阱



定态薛定谔方程（$E<U_0$）

- 建立 $\begin{cases} \dfrac{d^2\psi}{dx^2}+k^2\psi=0 \quad , \ k=\sqrt{\dfrac{2\mu E}{\hbar^2}} \quad , \ |x|<a \\ \dfrac{d^2\psi}{dx^2}-k'^2\psi=0 \quad , \ k'=\sqrt{\dfrac{2\mu(U_0-E)}{\hbar^2}}, \ U_0>E \quad , \ |x|\ge a \end{cases}$
- 求解
  - $|x|<a$

    $\psi(x)=A\cos(kx)$ 偶，$\psi(x)=B\sin(kx)$ 奇
  - $|x|>a$

    $$\psi(x)=\begin{cases} Ce^{k'x}, & x<-a \\ De^{-k'x}, & x>a \end{cases}$$

- 能量本征值

  利用波函数的连续性条件

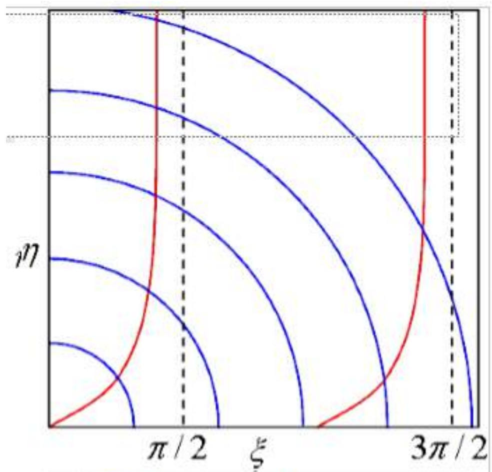
  $$\left(\frac{d\ln\psi_1}{dx}\right)_{x=a}=\left(\frac{d\ln\psi_2}{dx}\right)_{x=a}$$

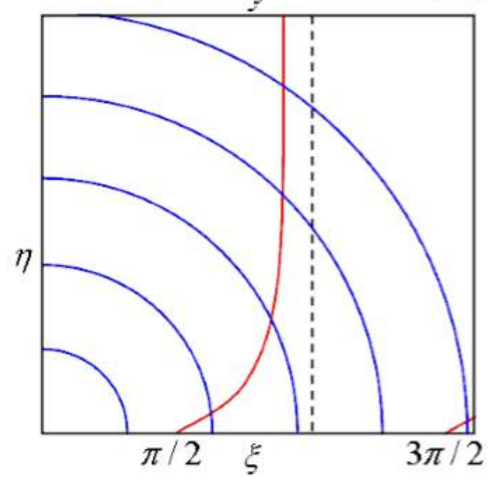
  - 偶宇称的态

    $\xi\tan\xi=\eta$，$\xi^2+\eta^2=\dfrac{2\mu U_0a^2}{\hbar^2}$

    $(\xi=ka,\quad \eta=k'a)$
  - 奇宇称的态

    $-\xi\cot\xi=\eta$，$\xi^2+\eta^2=\dfrac{2\mu U_0a^2}{\hbar^2}$





- 分析
  - 对于任意U_0a^2，一定有偶宇称态；

    仅当$U_0a^2\ge\dfrac{\pi^2\hbar^2}{8\mu}$，才有奇宇称态
  - 当$U_0\to\infty$，退化为一维无限深势阱

    $$E=\frac{\pi^2\hbar^2n^2}{8\mu a^2},\quad n=1,2,\cdots$$

- 一维δ势阱

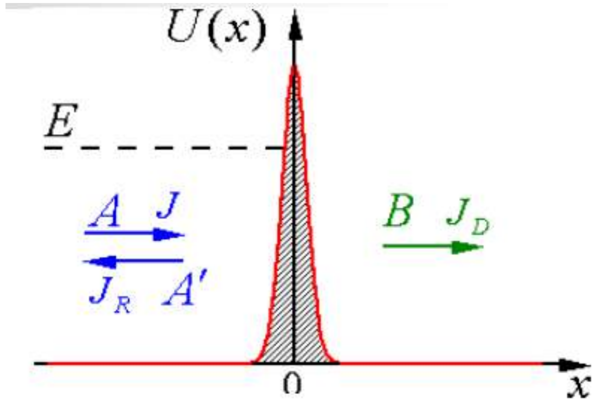
- 问题描述
  - 在一维空间中运动的单粒子
  - 势能 $U(x)=\gamma\delta(x)$
- 定态薛定谔方程（$E>0, \gamma>0$）
  - 建立

$$\begin{cases} \psi'(+0)-\psi'(-0)=\dfrac{2\mu\gamma}{\hbar^2}\psi(0), & x=0 \\ \dfrac{d^2}{dx^2}\psi+k^2\psi=0,\quad k=\sqrt{\dfrac{2\mu E}{\hbar^2}}, & x\neq 0 \end{cases}$$

  - 求解

$$\begin{cases} \psi_1(x)=Ae^{ikx}+A'e^{-ikx}, & x<0 \\ \psi_2(x)=Be^{ikx}, & x>0 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} B=(1+\dfrac{i\mu\gamma}{k\hbar^2})^{-1}A \\ A'=-\dfrac{i\mu\gamma}{k\hbar^2}(1+\dfrac{i\mu\gamma}{k\hbar^2})^{-1}A \end{cases}$$



- 反射系数，透射系数

$$R=\frac{\mu\gamma^2}{2E\hbar^2}(1+\frac{\mu\gamma^2}{2E\hbar^2})^{-1},\qquad D=(1+\frac{\mu\gamma^2}{2E\hbar^2})^{-1}<1$$

反射、透射系数的和 $\boldsymbol{R+D=1}$，即粒子数守恒

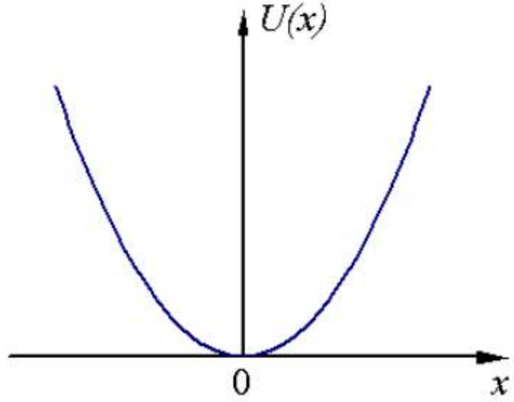
- 波函数的连续性

$$\psi_1(-0)=\psi_2(+0),\quad \psi_1'(-0)\neq\psi_2'(+0),\quad J_1(-0)=J_2(+0)$$

波函数连续，波函数的一阶导数不连续，概率流密度连续：从概率流密度的连续性不能得出 ψ' 的连续性；波函数各阶导数的连续性应该决定于薛定谔方程和势能的性质

- 一维谐振子

$$U(x) = \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2$$



- 定态薛定谔方程
  - 建立 $$\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\psi}{dx^2} + (E - \frac{\mu\omega^2}{2}x^2)\psi = 0$$
  - 化简(无量纲化)

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\psi = 0 \qquad \alpha = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}, \quad \xi = \alpha x, \quad \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

  - 一般地

$$\begin{cases} E = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}), \quad n = 0,1,2,\cdots \\ \psi_n(x) = (\frac{\alpha}{\pi^{1/2}2^n n!})^{1/2} e^{-\alpha^2 x^2/2} H(\alpha x) \end{cases}$$

$$\begin{cases} H_0 = 1 \\ H_1 = 2\xi \\ H_2 = 4\xi^2 - 2 \\ H_3 = 8\xi^3 - 12\xi \\ H_4 = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12 \\ H_5 = 32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi \end{cases}$$

➢ 力学量用算符表达

- 动量算符
  - 定义： $\hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla \quad (\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x},\ \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y},\ \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z})$
  - 动量算符的本征值方程

$$\hat{\vec{p}}\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \vec{p}\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) \Rightarrow \psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = Ce^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}$$

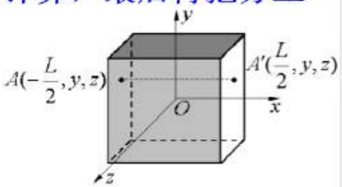
  - $\psi_{\vec{p}}(\vec{r})$ 归一化为 δ 函数

原因：$\psi_{\vec{p}}(\vec{r})$ 所属的本征值可以取任意值，组成连续谱

$$\delta(\vec{p}-\vec{p}') = \iiint_{V=\infty} \psi_{\vec{p}'}^{*}\psi_{\vec{p}}d\vec{r} = C^2(2\pi\hbar)^3\delta(\vec{p}-\vec{p}')]$$

$$\Rightarrow C = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \Rightarrow \psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}$$

- 箱归一化
  - 把连续本征值变为分立本征值进行计算，最后再把分立本征值变为连续本征值
  - 粒子限制在边长 L 的正方形箱中
  - 周期性边界条件：波函数在相对箱壁上的对应点相



$$\begin{cases} p_x = \dfrac{2n_x\pi\hbar}{L}, & n_x = 0,\pm1,\pm2,\cdots \\ p_y = \dfrac{2n_y\pi\hbar}{L}, & n_y = 0,\pm1,\pm2,\cdots \\ p_z = \dfrac{2n_z\pi\hbar}{L}, & n_z = 0,\pm1,\pm2,\cdots \end{cases}$$

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{1}{L^{3/2}}e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r})/\hbar}$$

- 角动量算符
  - 定义： $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}$

$$\Rightarrow \begin{cases} \hat{L}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y = \frac{\hbar}{i}(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}) \\ \hat{L}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z = \frac{\hbar}{i}(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}) \\ \hat{L}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}) \end{cases}$$

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^{\ 2} + \hat{L}_y^{\ 2} + \hat{L}_z^{\ 2}$$

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

- $\hat{L}^2$ 的本征值方程

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

$$\Rightarrow \lambda = l(l+1), \quad l = 0,1,2,\cdots \quad \Rightarrow \quad L^2 = l(l+1)\hbar^2$$

$$\begin{cases} Y_{lm}(\theta,\varphi) = (-1)^m\sqrt{\dfrac{(l-|m|)!(2l+1)}{(l+|m|)!4\pi}}P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi}, & m = 0,1,2,\cdots,l \\ Y_{lm}(\theta,\varphi) = (-1)^mY_{l-m}^{*}(\theta,\varphi), & m = -1,-2,-3,\cdots,-l \end{cases}$$

$$\hat{L}_zY_{lm}(\theta,\varphi) = m\hbar Y_{lm}(\theta,\varphi) \quad \Rightarrow \quad L_z = m\hbar$$

- 不对易和测不准关系
  - 测不准关系的推导

设 $\hat{F}$ 和 $\hat{G}$ 的对易关系是 $[\hat{F},\hat{G}] \equiv \hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F} = i\hat{k}$

令 $\overline{F}$，$\overline{G}$ 和 $\bar{k}$ 分别为 $\hat{F}$，$\hat{G}$ 和 $\hat{k}$ 的平均值，并定义

$$\Delta\hat{F} = \hat{F} - \overline{F},\quad \Delta\hat{G} = \hat{G} - \overline{G} \Rightarrow \Delta\hat{F}\Delta\hat{G} - \Delta\hat{G}\Delta\hat{F} = i\hat{k}$$

利用厄密算符的定义 $\int(\hat{K}\Psi)^*\Phi\, d\tau = \int\Psi^*(\hat{K}\Phi)\, d\tau$，有

$$\int(\Delta\hat{G}\psi)(\Delta\hat{F}\psi)^* d\tau = \int\psi^*(\Delta\hat{F}\Delta\hat{G}\psi)d\tau$$

考虑积分

$$0 \le I(\xi) = \int|(\xi\Delta\hat{F} - i\Delta\hat{G})\psi|^2\, d\tau = \xi^2\overline{(\Delta\hat{F})^2} + \overline{(\Delta\hat{G})^2} + \xi\,\bar{k}$$

$$\Rightarrow \overline{(\Delta\hat{F})^2}\;\overline{(\Delta\hat{G})^2} \ge \frac{\bar{k}^2}{4}$$

表明，如果 $\bar{k}$ 不为零，则 $\hat{F}$ 和 $\hat{G}$ 的均方偏差不会同时为零，它们的乘积要大于等于一正数，称为测不准关系

➢ 力学量随时间的演化和对称性

- 力学量平均值随时间的变化

$$\frac{d\overline{F}}{dt}=\frac{\overline{\partial F}}{\partial t}+\overline{\hat{F}\hat{H}-\hat{H}\hat{F}}$$

如果算符 $\hat{F}$ 不显含时间，即 $\frac{\overline{\partial F}}{\partial t}=0$，

并且 $\hat{F}$ 又与 $\hat{H}$ 对易，即 $[\hat{F},\hat{H}]=0$，那么

$$\frac{d\overline{F}(t)}{dt}=0$$

即算符 $\hat{F}$ 的平均值不随时间变化，称力学量 $\hat{F}$ 为运动守恒量(或 $\hat{F}$ 在运动中守恒)

位力定理 $2\overline{T}=\overline{\boldsymbol{r}\cdot\left(\nabla V(\boldsymbol{r})\right)}$

薛定谔绘景、海森堡绘景和相互作用绘景

➢ 中心力场

● 角动量守恒定律

- 角动量守恒定律(辏力场中运动的粒子)

粒子在辏力场中运动时，哈密顿算符是

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r})+\frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2}+U(r)$$

角动量算符 $\hat{L}^2, \hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ 不显含时间，即

$$\frac{\partial \overline{L^2}}{\partial t}=0,\quad \frac{\partial \overline{L_x}}{\partial t}=0,\quad \frac{\partial \overline{L_y}}{\partial t}=0,\quad \frac{\partial \overline{L_z}}{\partial t}=0$$

$\hat{L}^2, \hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ 与 (θ,φ) 有关，与 r 无关，所以与 $\hat{H}$ 对易，即

$$[\hat{L}^2,\hat{H}]=0,\quad [\hat{L}_x,\hat{H}]=0,\quad [\hat{L}_y,\hat{H}]=0,\quad [\hat{L}_z,\hat{H}]=0$$

那么

$$\frac{d\overline{L^2}}{dt}=0,\quad \frac{d\overline{L_x}}{dt}=0,\quad \frac{d\overline{L_y}}{dt}=0,\quad \frac{d\overline{L_z}}{dt}=0$$

表明粒子在辏力场中运动时，角动量平方和角动量分量 $\hat{L}^2, \hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ 是运动恒量(量子力学中的角动量守恒定律)

- 径向方程

$$[-\frac{\hat{p}^2}{2\mu}+U(r)]\psi=E\psi,\ \ \psi(r,\theta,\varphi)=R_l(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$$\Rightarrow[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r})+\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-U(r))-\frac{l(l+1)}{r^2}]R_l(r)=0$$

- 径向动能，离心势能(随角动量变大而变大)
- 由于中心力场的球对称性(与 z 轴无关)，径向方程不含磁量子数 m，能量本征值与 m 无关
- 由于 $m=-l,\ldots,l$，能量本征值至少 $(2l+1)$ 重简并
- 求解径向方程的常用技巧：$R_l(r)=u(r)/r$

$$\frac{d^2u}{dr^2}+[\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-U(r))-\frac{l(l+1)}{r^2}]u=0$$

  - 非束缚态：E 是连续的
  - 束缚态：E 是不连续(量子化)的，出现径向量子数
- 称 $l=0,1,2,3,\ldots$的态依次为 $s,p,d,f,\ldots$态

●电子在库伦场中的运动

定态薛定谔方程

- 建立

$$(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 - \frac{Ze_s^2}{r})\psi = E\psi \qquad \psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y(\theta,\varphi)$$

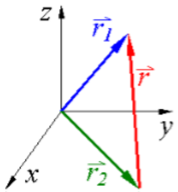
$$\Rightarrow \begin{cases} \dfrac{1}{r^2}\dfrac{d}{dr}(r^2\dfrac{dR}{dr}) + [\dfrac{2\mu}{\hbar^2}(E + \dfrac{Ze_s^2}{r}) - \dfrac{\lambda}{r^2}]R = 0 \\ [\dfrac{1}{\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial\theta}) + \dfrac{1}{\sin^2\theta}\dfrac{\partial^2}{\partial\varphi^2}]Y = -\lambda Y \end{cases}$$

- 解

$$\begin{cases} E_n = -\dfrac{\mu Z^2 e_s^4}{2\hbar^2 n^2}, \quad n = 1,2,3,\cdots \\ R_{nl}(r) = N_{nl} e^{-\frac{Z}{na_0}r}(\dfrac{2Z}{na_0}r)^l L_{n+1}^{2l+1}(\dfrac{2Z}{na_0}r), \quad a_0 = \dfrac{\hbar^2}{\mu e_s^2} \\ \psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi), \quad l = 0,1,\cdots,n-1; \quad m = 0,\pm1,\cdots,\pm l \end{cases}$$

●氢原子

- 问题描述
  - 一个电子与一个氢核(正电)之间有库仑相互作用
  - 氢核的位置不固定，是两体问题
  - 电子的质量为 μ_1，电荷 $-e$；氢核的为 μ_2，$+e$



- 薛定谔方程
  - 建立

$$\chi(t)=e^{-iE_0t/\hbar}$$ $\chi(t)$：时间部分的波函数

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2\psi(\vec{r})+U(\vec{r})\psi(\vec{r})=E\psi(\vec{r})$$ $\psi(\vec{r})$：描写内部运动状态的波函数

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2\phi(\vec{R})=(E_0-E)\phi(\vec{R})$$ $\phi(\vec{R})$：描写质心运动状态的波函数

E_0：总能量，E：内部运动的能量

- 解
  - 质心部分：能量为 E_0-E 的自由粒子

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2\phi=(E_0-E)\phi$$

  - 内部部分

$$[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2+U(\vec{r})]\psi=E\psi \qquad (U=-\frac{e^2}{r},\quad Z=1)$$

$$\begin{cases} E_n=-\dfrac{\mu e_s^4}{2\hbar^2n^2}, \quad n=1,2,3,\cdots \\ R_{nl}(r)=N_{nl}e^{-\frac{1}{na_0}r}(\dfrac{2}{na_0}r)^l\,L_{n+1}^{2l+1}(\dfrac{2}{na_0}r), \quad a_0=\dfrac{\hbar^2}{\mu e_s^2} \\ \psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi), \quad l=0,1,\cdots,n-1;\quad m=0,\pm1,\cdots,\pm l \end{cases}$$

- 分析
  - 能级

$$E_n=-\frac{\mu e_s^4}{2\hbar^2n^2}, \quad n=1,2,3,\cdots$$

  - 电离能：E_∞ 与电子基态能量之差

$$E_\infty-E_1=0+\frac{\mu e_s^4}{2\hbar^2}=\frac{\mu e_s^4}{2\hbar^2}=13.60\ \text{eV}$$

  - 跃迁：电子由 E_n 跃迁到 E_m

$$\nu=R_C(\frac{1}{m^2}-\frac{1}{n^2}), \quad R_C=\frac{\mu e_s^4}{4\pi\hbar^3}=10973731\ \text{m}^{-1}$$

  - 波函数(内部结构)

$$1=\iiint_{r,\theta,\varphi}|R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)|^2\ r^2\sin\theta\,dr\,d\theta\,d\varphi$$

  - 径向概率密度：节点数目为 $n-l-1$

$$W_{nl}^{(r)}=R_{nl}^2(r)r^2$$

  - 角向概率密度：与 φ 无关

$$W_{lm}^{(\Omega)}=N_{lm}^2[P_l^{|m|}(\cos\theta)]^2$$

- 例：求氢原子处于基态时，电子动量的概率分布
  - 波函数
    - 氢原子基态：$\psi_{100}(r)=\dfrac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}e^{-\frac{r}{a_0}}$
    - 电子动量态：$\phi_p(\vec{r})=\dfrac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}$
  - 用电子动量态展开氢原子基态

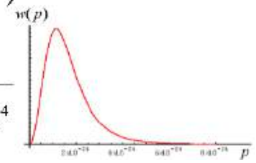
$$\psi_{100}(r)=\int c_p\phi_p(\vec{r})dp$$

$$c_p=\int\phi_p^*(\vec{r})\psi_{100}(r)d\tau=\frac{(2a_0\hbar)^{3/2}\hbar}{\pi(a_0^2p^2+\hbar^2)^2}$$

Microsoft Word 文档

  - 概率密度 $w(p)$

$$w(p)dp=|c_p|^2\,4\pi\,p^2dp=\frac{32}{\pi}(\frac{\hbar}{a_0})^5\frac{p^2dp}{(p^2+\frac{\hbar^2}{a_0^2})^4}$$



- 无限深球方势阱和有限深球方势阱（贝塞尔方程）

- 三维和二维的各向同性的谐振子（合流超几何方程）

- 谐振子方程的代数解法

➢ 微扰论

- 定态微扰理论

适用范围：求分立能级及其波函数的修正

适用条件：$\left|\dfrac{H'_{mn}}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\right| << 1,\quad E_n^{(0)} \neq E_m^{(0)}$

- 非简并

$$E_n = E_n^{(0)} + H'_{nn} + \sum_{m\neq n}\frac{|H'_{mn}|^2}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}} + \cdots,\qquad \psi_n = \psi_n^{(0)} + \sum_{m\neq n}\frac{H'_{mn}}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\psi_m^{(0)} + \cdots$$

- 简并

$$\begin{vmatrix} H'_{11}-E_n^{(1)} & H'_{12} & \cdots & H'_{1k} \\ H'_{21} & H'_{22}-E_n^{(1)} & \cdots & H'_{2k} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ H'_{k1} & H'_{k2} & \cdots & H'_{kk}-E_n^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

将 $E_{nj}^{(1)}$ 代入 $0=\sum_i c_i^{(0)}(H'_{li}-E_n^{(1)}\delta_{li})$ ，解得一组 $c_i^{(0)}$ ，得到零级近似波函数

- 与时间有关的微扰理论
  - 由初态 Φ_k 跃迁到末态 Φ_m 的概率

$$W_{k\to m} = |a_m(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t H'_{mk}e^{i\omega_{mk}t'}dt'\right|^2$$

周期微扰 $\hat{H}'(t)=\hat{A}\cos\omega t=\hat{F}(e^{i\omega t}+e^{-i\omega t})$

$$\omega \approx \pm\omega_{mk},\quad W_{k\to m} = |a_m(t)|^2 = \frac{2\pi t\,|F_{mk}|^2}{\hbar}\delta(\varepsilon_m-\varepsilon_k \mp \hbar\omega)$$

定态微扰理论

适用范围：求分立能级及其波函数的修正

适用条件：$\left|\dfrac{H'_{mn}}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\right| << 1,\ E_n^{(0)} \neq E_m^{(0)}$

- 非简并

$$E_n = E_n^{(0)} + H'_{nn} + \sum_{m\neq n}\frac{|H'_{mn}|^2}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}} + \cdots, \quad \psi_n = \psi_n^{(0)} + \sum_{m\neq n}\frac{H'_{mn}}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}\psi_m^{(0)} + \cdots$$

- 简并

$$\begin{vmatrix} H'_{11}-E_n^{(1)} & H'_{12} & \cdots & H'_{1k} \\ H'_{21} & H'_{22}-E_n^{(1)} & \cdots & H'_{2k} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ H'_{k1} & H'_{k2} & \cdots & H'_{kk}-E_n^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

将 $E_{nj}^{(1)}$ 代入 $0=\sum_i c_i^{(0)}(H'_{li}-E_n^{(1)}\delta_{li})$ ，解得一组$c_i^{(0)}$ ，得到零级近似波函数

➢ 自旋

- 电子的自旋
  - 自旋算符： $\hat{S} = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}$
    - 对易关系： $\hat{S}\times\hat{S} = i\hbar\hat{S}$， $\hat{\sigma}\times\hat{\sigma} = 2i\hat{\sigma}$
    - 平方算符： $\hat{S}_x^2 = \hat{S}_y^2 = \hat{S}_z^2 = \frac{\hbar^2}{4}$， $\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = 1$
    - 泡利矩阵： $\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$， $\hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$， $\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$
    - 自旋算符函数 $\overline{G}$ 对自旋求平均： $\overline{G} = \Psi^{+}G\Psi$
    - 自旋算符函数 $\overline{G}$ 对坐标和自旋求平均： $\overline{G} = \int \Psi^{+}G\Psi d\tau$
  - 自旋波函数： $\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}$
    - 无自旋与轨道相互作用的电子波函数：

      $$\Psi(x, y, z, s_z, t) = \Psi_1(x, y, z, t)\chi(s_z)$$
    - $\hat{S}_z$ 的本征函数： $\chi_{1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$， $\chi_{-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

➢ 自旋

- 电子的自旋
  - 自旋算符： $\hat{S}=\frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}$
    - 对易关系： $\hat{S}\times\hat{S}=i\hbar\hat{S},\quad \hat{\sigma}\times\hat{\sigma}=2i\hat{\sigma}$
    - 平方算符： $\hat{S}_x^2=\hat{S}_y^2=\hat{S}_z^2=\frac{\hbar^2}{4},\quad \hat{\sigma}_x^2=\hat{\sigma}_y^2=\hat{\sigma}_z^2=1$
    - 泡利矩阵： $\hat{\sigma}_x=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\quad \hat{\sigma}_y=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix},\quad \hat{\sigma}_z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$
    - 自旋算符函数 $\overline{G}$ 对自旋求平均： $\overline{G}=\Psi^{+}G\Psi$
    - 自旋算符函数 $\overline{G}$ 对坐标和自旋求平均： $\overline{G}=\int\Psi^{+}G\Psi d\tau$
  - 自旋波函数： $\Psi=\begin{pmatrix}\Psi_1\\\Psi_2\end{pmatrix}$
    - 无自旋与轨道相互作用的电子波函数：

      $$\Psi(x,y,z,s_z,t)=\Psi_1(x,y,z,t)\chi(s_z)$$
    - $\hat{S}_z$ 的本征函数： $\chi_{1/2}=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\quad \chi_{-1/2}=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$

- 两电子体系的自旋函数：

$$\chi_S^{(1)} = \chi_{1/2}(s_{1z})\chi_{1/2}(s_{2z})$$
$$\chi_S^{(2)} = \chi_{-1/2}(s_{1z})\chi_{-1/2}(s_{2z})$$
$$\chi_S^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\chi_{1/2}(s_{1z})\chi_{-1/2}(s_{2z}) + \chi_{-1/2}(s_{1z})\chi_{1/2}(s_{2z})]$$
$$\chi_A = \frac{1}{\sqrt{2}}[\chi_{1/2}(s_{1z})\chi_{-1/2}(s_{2z}) - \chi_{-1/2}(s_{1z})\chi_{1/2}(s_{2z})]$$

- 算符$\hat{S}^2 = (\hat{S}_1 + \hat{S}_2)^2$和$\hat{S}_z = \hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z}$在 $\chi_S^{(1)}, \chi_S^{(2)}, \chi_S^{(3)}, \chi_A$中的本征值

	$\hat{S}^2$	$\hat{S}_z$
$\chi_S^{(1)}$	$2\hbar^2$	$\hbar$
$\chi_S^{(2)}$	$2\hbar^2$	$-\hbar$
$\chi_S^{(3)}$	$2\hbar^2$	0
χ_A	0	0

- 简单塞曼效应：$\omega = \omega_0$， $\omega = \omega_0 \pm \dfrac{eB_s}{2\mu c}$

- 两电子体系的自旋函数：

$$\chi_S^{(1)} = \chi_{1/2}(s_{1z})\chi_{1/2}(s_{2z})$$
$$\chi_S^{(2)} = \chi_{-1/2}(s_{1z})\chi_{-1/2}(s_{2z})$$
$$\chi_S^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\chi_{1/2}(s_{1z})\chi_{-1/2}(s_{2z}) + \chi_{-1/2}(s_{1z})\chi_{1/2}(s_{2z})]$$
$$\chi_A = \frac{1}{\sqrt{2}}[\chi_{1/2}(s_{1z})\chi_{-1/2}(s_{2z}) - \chi_{-1/2}(s_{1z})\chi_{1/2}(s_{2z})]$$

- 算符$\hat{S}^2=(\hat{S}_1+\hat{S}_2)^2$和$\hat{S}_z=\hat{S}_{1z}+\hat{S}_{2z}$在 $\chi_S^{(1)},\chi_S^{(2)},\chi_S^{(3)},\chi_A$中的本征值

	$\hat{S}^2$	$\hat{S}_z$
$\chi_S^{(1)}$	$2\hbar^2$	$\hbar$
$\chi_S^{(2)}$	$2\hbar^2$	$-\hbar$
$\chi_S^{(3)}$	$2\hbar^2$	0
χ_A	0	0

- 简单塞曼效应：$\omega=\omega_0$，$\omega=\omega_0\pm\dfrac{eB_s}{2\mu c}$

- 全同粒子体系
  - 全同粒子不可区分(全同性原理) → 波函数的对称性
    - 对称化(玻色子体系)的波函数

$$\Phi_S(q_1,q_2,\cdots,q_N)=C\sum_P P\phi_i(q_1)\phi_j(q_2)\cdots\phi_k(q_N)$$

    - 反对称化(费密子体系)的波函数

$$\Phi_A(q_1,q_2,\cdots,q_N)=\frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix}\phi_i(q_1) & \phi_i(q_2) & \cdots & \phi_i(q_N)\\ \phi_j(q_1) & \phi_j(q_2) & \cdots & \phi_j(q_N)\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \phi_k(q_1) & \phi_k(q_2) & \cdots & \phi_k(q_N)\end{vmatrix}$$

无自旋-轨道相互作用的反对称化(费密子体系)波函数

$$\Phi(\vec{r}_1,s_1,\vec{r}_2,s_2,\cdots,\vec{r}_N,s_N)=\phi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\cdots,\vec{r}_N)\,\chi(s_1,s_2,\cdots,s_N)$$

➢ 散射问题

- 散射截面
  - 微分散射截面：$q(\theta,\varphi)=\dfrac{dn}{Nd\Omega}$
  - 总散射截面：$Q=\int q(\theta,\varphi)d\Omega$
- 辏力场中的弹性散射
  - 分波法
    - 微分散射截面：$q(\theta)=\dfrac{1}{k^2}\left|\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)e^{i\delta_l}\sin\delta_l\right|^2$
    - 第 l 个分波的散射截面：$Q_l=\dfrac{4\pi}{k^2}(2l+1)\sin^2\delta_l$
    - 总散射截面：$Q=\sum_{l=0}^{\infty}Q_l$
    - 适用范围：低能散射。$l\geq ka$ 的分波散射截面可以忽略
    - 方型势阱的低能散射（$ka<<1$）

      散射截面： $q(\theta)=\dfrac{1}{k^2}\sin^2[\operatorname{arc\,tg}(\dfrac{k}{k'}\operatorname{tg}k'a)-ka]$ $\quad Q=4\pi\, q(\theta)$
    - 方型势垒的低能散射（$k\to 0$）

      散射截面： $q(\theta)=a^2(\dfrac{\operatorname{th}k_0a}{k_0a}-1)^2$ $\quad Q=4\pi\, q(\theta)$
  - 玻恩近似
    - 适用条件：$\dfrac{U_0a}{\hbar v}<<1$
    - 微分散射截面：$q(\theta,\varphi)=\dfrac{4\mu^2}{K^2\hbar^4}\left|\int_0^{\infty}U(r)r\sin(Kr)dr\right|^2$
    - 屏蔽库仑场的散射：$q(\theta)=\dfrac{4\mu^2Z^2Z'^2e_s^4}{\hbar^4}\dfrac{1}{(a^{-2}+K^2)^2}$

      当 $ka>>1$ 时，过渡为卢瑟福散射公式
- 质心坐标系的弹性截面与实验室坐标系的弹性截面

$$q_0(\theta_0,\varphi_0)=\frac{(\mu_1^2+\mu_2^2+2\mu_1\mu_2\cos\theta)^{3/2}}{\mu_2^2(\mu_2+\mu_1\cos\theta)}q(\theta,\varphi)$$

第二部分、真题解题

2016春

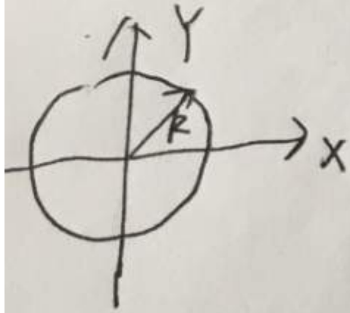
3. 一维谐振子势 $V(x)=m\omega^2x^2$ 中. 两个 spin-$\frac{1}{2}$ 粒子无相互作用. $|0\rangle, |1\rangle$

求能级、波函数及简并度.

(1). distinguishable (2) Bosons (3) Fermion.

4. (1). $\hat{H}=\frac{1}{2mR^2}\hat{L}_z^2$ 求能级、波函数、简并度.

(2). 过O点细螺管，磁通量 Φ. $\vec{A}=\frac{\Phi}{2\pi}\left(\frac{y\vec{e}_x-x\vec{e}_y}{x^2+y^2}\right)$



$\hat{H}=(\underline{\qquad D(A)})$? 求 $\hat{H}$ 具体形式? 并求能谱.

(3). 积分 $e^{\oint_R(\quad)}$ (环积分)

2015秋

三、角动量算符 $\vec{J}=(J_x, J_y, J_z)$（顶上省去∧）的如下表象称为 Schwinger 表象。设 $a^\dagger/a$ 和 $b^\dagger/b$ 是两个互相独立的谐振子的升级/降级算符. 定义 $\vec{J}=\frac{1}{2}(a^+, b^+)\vec{\sigma}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$，$\vec{\sigma}$ 是 pauli 矩阵

(1) 求证：$\vec{J}$ 满足角动量算符的对易关系（取 $\hbar=1$），只证明其中一个即可。

(2) 定义 $J=\frac{1}{2}(a^+, b^+)\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$ 记 J 的本征值为 j. 求证：j 可以取值 $0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \cdots$。

(3) 求证：$\vec{J}^2=J_x^2+J_y^2+J_z^2$ 的本征态也就是 J 的本征态，对应的 $\vec{J}^2$ 的本征值为 $j(j+1)$.

四、

An atom is trapped in the ground state for one dimensional infinitely deep potential of width L, with the normalized wave-function

$$\psi(x)=\begin{cases}\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\frac{\pi x}{L} & \text{for } x\in[0,L]\\ 0 & \text{else where}\end{cases}$$

(1) At t=0, the well walls are suddenly moved to form a new well of width 2L. W… the probability to find the atom in the first excited state of new well? (10 points)

(2) What is the momentum distribution for the freed atom if the well is suddenly …

(10 po…

2015春

装订线

第五题（20分）

超对称量子力学基本构架如下。（1）引入费米性算符$\hat{b}$，$\hat{b}^+$满足$\{\hat{b},\hat{b}\}=\{\hat{b}^+,\hat{b}^+\}=0$，$\{\hat{b},\hat{b}^+\}=1$，$\{\hat{A},\hat{B}\}\equiv\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}$。求证：算符$\hat{N}_b=\hat{b}^+\hat{b}$的本征值是0和1。记对应的本征态为$|0\rangle$和$|1\rangle$，请计算$\hat{b}|0\rangle$，$\hat{b}^+|0\rangle$，$\hat{b}|1\rangle$，$\hat{b}^+|1\rangle$各=?（2）记算符$\hat{Q}=\hat{F}\hat{b}$，$\hat{Q}^+=\hat{F}^+\hat{b}^+$，其中$\hat{F}=\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}}-iW(x)$，$\hat{F}^+=\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m}}+iW^*(x)$，$\hat{p}=-i\frac{d}{dx}$是动量算符，$W(x)$是$x$的复数函数，*代表复共轭，$\hat{b},\hat{b}^+$与$\hat{p},x$都可以对易，请计算$\{\hat{Q},\hat{Q}\}$，$\{\hat{Q}^+,\hat{Q}^+\}$各=?（3）设系统的哈密顿量为$\hat{H}=\{\hat{Q},\hat{Q}^+\}$，请计算$[\hat{H},\hat{N}_b]$，$[\hat{H},\hat{Q}]$，$[\hat{H},\hat{Q}^+]$各=? 这里$[\hat{A},\hat{B}]$就是通常的对易括号。（4）求证：该系统的能量$E\neq0$的能级对于$N_b=0$和$N_b=1$总是简并的，即，每个$N_b=0$，$E\neq0$的本征态都有对应的$N_b=1$且$E$相同的本征态，反之亦然。说明：$\hat{Q},\hat{Q}^+$称为超荷，$W(x)$称为超势。

2014秋

3. $H = a\begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix}$ 初态 $\psi = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

(1) $t=0$时. 测结果,和概率

(2) 平均能量 $\bar{E}$

(3) 不确定度

4. $V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \le x \le a \\ \infty & \text{other.} \end{cases}$

$\psi(x; t=0) = \begin{cases} C\left[\sin\frac{\pi x}{a} + \sin\frac{2\pi x}{a}\right] & 0 < x \le a \\ 0 & \text{other} \end{cases}$

(1) C

(2) E_n & $E_n(x)$

(3) $\psi(x,t)$

(4) t时刻, 在 ground state possibility

2014春

3 一维晶格能带色散关系

周期为a的1维晶格，第n个原子处电子有基态激发态$|n,0\rangle, |n,1\rangle$，

$$H = E_0 \sum_n |n,1\rangle\langle n,1| + A\sum_n (|n,0\rangle\langle n-1,0| + |n,0\rangle\langle n+1,0|)$$
$$+ B\sum_n (|n,1\rangle\langle n-1,1| + |n,1\rangle\langle n+1,1|)$$
$$+ C\sum_n (|n,0\rangle\langle n-1,1| + |n,0\rangle\langle n+1,1| + |n,1\rangle\langle n-1,0| + |n,1\rangle\langle n+1,0|)$$

电子波函数$|\psi\rangle = \sum_n \alpha_{n0}(t)|n,0\rangle + \alpha_{n1}(t)|n,1\rangle$，满足$\alpha_{ni}(t) = e^{ikx}e^{-i\frac{E}{\hbar}x_n}\alpha_{ni}(0)$，其中k为波矢，满足$k = \frac{2\pi n}{a}$. 求色散关系E(k).

4 一维无限深势阱中的双电子

1维无限深势阱满足$V(x) = 0, 0 < x < a; V(x) = \infty, x < 0, x > a$，其中有2电子，相互作用势$V(x_1, x_2) = aV_0\delta(x_1 - x_2)$.

(1).不考虑相互作用，求双电子基态波函数，能量，自旋态：

解：波函数

$$\langle x_1x_2|11\rangle = \frac{2}{a}\sin\frac{n\pi x_1}{a}\sin\frac{n\pi x_2}{a}$$

能量，自旋态为

$$E_{11} = 2E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{ma^2}, \quad |S=0\rangle = \frac{|+-\rangle - |-+\rangle}{\sqrt{2}}$$

(2).不考虑相互作用，求双电子第一激发态，及其能量，自旋态：

解：第一激发态及其能量

$$|\psi_\pm\rangle = \frac{|12\rangle - |21\rangle}{\sqrt{2}}, \quad E_{12} = E_1 + E_2 = \frac{5\pi^2\hbar^2}{ma^2}$$

(3).考虑相互作用，求第一激发态能级，精确到一级。

2013秋

3　一维无限深势阱

一维无限深方势阱

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

(1)求波函数和能级。
解：一维定态Schrodinger方程：

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

有：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)=E\psi(x)\quad 0<x<a$$

且有边界条件：

$$\psi(0)=\psi(a)=0$$

解得波函数和能级为：

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

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

(2)设初态为$\phi(x,0)=A\sin(\frac{2\pi}{a}x)(1-\cos(\frac{2\pi}{a}x))$，求$\phi(x,t)$。 解：对于初态，我们有：

$$\phi(x,0)=A[\sin(\frac{2\pi}{a}x)-\frac{1}{2}\sin(\frac{4\pi}{a}x)]=\frac{1}{\sqrt{5}}(2\psi_2(x)-\psi_4(x))$$

因此，根据Schrodinger方程，我们有：

$$\phi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{5}}(2\psi_2e^{-iE_2t/\hbar}-\psi_4e^{-iE_4t/\hbar})$$

其中E_2,E_4由上题E_n确定。

(3)若t_1时刻测量在E_2态，求t_2时刻测量结果，$t_2>t_1$。
解：t_1时刻在E_2态，则t_2时刻的波函数为：

$$\phi(x,t_2)=\psi_2e^{-iE_2(t_2-t_1)/\hbar}$$

测得在E_2的概率为：

$$P=|\phi|^2=1$$

即态仍处于E_2态。这是能量本征态演化的结果。

(4)两个中子自旋都向上，求基态能量。
解：考虑到中子的自旋为1/2，为费米子，若两个中子自旋都向上，则不能占据同一个量子态。因此对于基态，需要一个中子占据E_1态，一个中子占据E_2态。因此基态能量为：

$$E_g=E_1+E_2=\frac{5\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

(5)两个中子都处于基态，求z'方向的投影，求自旋（3维势阱中）。

4 二分量波函数 守恒方程

哈密顿量为$\hat{H}=\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}+\frac{\hbar k_0}{2m}\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{p}}$，二分量波函数，已知$(\hat{p}_x,\hat{p}_y,\hat{p}_z,\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{p}})$与$\hat{H}$ 两两对易。

(1)求本征值和本征态。

解：考虑到：

$$[\hat{\vec{p}},\hat{H}]=0$$

且$\hat{H}$不含时间，因此动量$\vec{p}$和能量E为守恒量。因此我们可以把本征函数写为：

$$\psi=\begin{pmatrix} u_1(\vec{p}) \\ u_2(\vec{p}) \end{pmatrix} e^{i(\vec{p}\cdot\vec{x}-Et)\hbar}$$

带入Schrodinger方程后，我们得到定态Schrodinger方程为：

$$[\frac{\vec{p}^2}{2m}+\frac{\hbar k_0}{2m}\vec{\sigma}\cdot\vec{p}]\begin{pmatrix} u_1(\vec{p}) \\ u_2(\vec{p}) \end{pmatrix}=E\begin{pmatrix} u_1(\vec{p}) \\ u_2(\vec{p}) \end{pmatrix}$$

考虑到左边括号里第一项为常数，我们可以整理为：

$$\frac{\hbar k_0}{2m}\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\begin{pmatrix} u_1(\vec{p}) \\ u_2(\vec{p}) \end{pmatrix}=(E-\frac{\vec{p}^2}{2m})\begin{pmatrix} u_1(\vec{p}) \\ u_2(\vec{p}) \end{pmatrix}=E'\begin{pmatrix} u_1(\vec{p}) \\ u_2(\vec{p}) \end{pmatrix}$$

求解本征值我们有：

$$\frac{\hbar k_0}{2m}\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\begin{pmatrix} u_{\pm1}(\vec{p}) \\ u_{\pm2}(\vec{p}) \end{pmatrix}=\pm\frac{\hbar k_0|p|}{2m}\begin{pmatrix} u_{\pm1}(\vec{p}) \\ u_{\pm2}(\vec{p}) \end{pmatrix}$$

因此$\hat{H}$的本征值为：

$$E_\pm=\frac{p^2\pm\hbar k_0|p|}{2m}$$

本征态为：

$$\psi_\pm(\vec{p})=A\begin{pmatrix} \frac{p_z\pm|p|}{p_x+ip_y} \\ 1 \end{pmatrix} e^{i(\vec{p}\cdot\vec{x}-E_\pm t)/\hbar}$$

A为归一化常数。

(2)已知$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\vec{j}=0$，求$\vec{j}$。

解：Schrodinger方程：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=[\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}+\frac{\hbar k_0}{2m}\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{p}}]\psi=[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\frac{i\hbar^2k_0}{2m}\hat{\vec{\sigma}}\cdot\nabla]\psi$$

我们有：

$$i\hbar\psi^\dagger\frac{\partial}{\partial t}\psi=-\frac{\hbar^2}{2m}\psi^\dagger\nabla^2\psi+\frac{i\hbar^2k_0}{2m}\psi^\dagger(\vec{\sigma}\cdot\nabla\psi)$$

$$-i\hbar(\frac{\partial}{\partial t}\psi^\dagger)\psi=-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla^2\psi^\dagger)\psi-\frac{i\hbar^2k_0}{2m}(\nabla\psi^\dagger\cdot\vec{\sigma})\psi$$

由此两式我们有：

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi^\dagger\psi)+\nabla\cdot[\frac{\hbar}{2im}[\psi^\dagger\nabla\psi-(\nabla\psi^\dagger)\psi]-\frac{\hbar k_0}{2m}\psi^\dagger\vec{\sigma}\psi]$$

因此：

$$\rho=\psi^\dagger\psi$$

$$\vec{j}=\frac{\hbar}{2im}[\psi^\dagger\nabla\psi-(\nabla\psi^\dagger)\psi]-\frac{\hbar k_0}{2m}\psi^\dagger\vec{\sigma}\psi$$

(3)根据(1)(2)结果，求$\vec{j}$。

解：将(1)(2)的最后结论代入即可。

2011秋

1、(12 分) 谐振子的非定态运动。考虑在一维谐振子势阱中运动的粒子。求证：任何满足 Schrödinger 方程的波函数$\psi(x,t)$必有如下性质：(1) $\psi(x,t+T)=\psi(x,t)$, (2) $\psi\left(x,t+(T/2)\right)=\psi(-x,t)$，其中$T=2\pi/\omega$; ω是谐振子的固有频率。

2、(23 分) Graphene（石墨烯）中的 Landau 能级。Graphene 即是单层石墨，由于它特殊的晶格结构，Graphene 中的电子准粒子好像是相对论粒子，即色散关系为$\varepsilon=\tilde{c}p$，其中的“准光速”$\tilde{c}$是实际光速的$1/300$。这使得它服从 Dirac 方程而不是 Schrödinger 方程。如果垂直于 Graphene 的平面（取为X-Y平面并假设它是无穷大的）加了一个外磁场B（假设沿$+Z$轴方向），Dirac 方程就成为

$$\tilde{c}\begin{pmatrix} -\vec{\sigma}^{\mathrm{T}}\cdot\hat{\vec{p}}^{\mathrm{M}} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma}\cdot\hat{\vec{p}}^{\mathrm{M}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}=E\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix},$$

其中$\vec{\sigma}$是 Pauli 矩阵，$\vec{\sigma}^{\mathrm{T}}$是它的转置，$\hat{\vec{p}}^{\mathrm{M}}=\hat{\vec{p}}+e\vec{A}=-\mathrm{i}\hbar\vec{\nabla}+e\vec{A}$是磁场中的机械动量算符（SI 制），矢量都只有$x$和$y$分量，矢量势$\vec{A}$在 Landau 规范下是$\vec{A}=(-By,0)$，$\psi_1$和$\psi_2$是二分量旋量。求能量本征值。提示：$\sigma_x=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$, $\sigma_y=\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}\\ \mathrm{i}&0\end{pmatrix}$。可以假设波函数的形式为$\phi(x,y)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_x x}f(y)\ (-\infty<k_x<\infty)$。

1. $E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\ \psi(x,t)=\sum_n a_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar}\phi_n(x)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t/2}\sum_n a_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\omega t}\phi_n(x)$，所以，(1)

$\psi(x,t+T)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t/2}\sum_n a_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}n(\omega t+2\pi)}\phi_n(x)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t/2}\sum_n a_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\omega t}\phi_n(x)=\psi(x,t)$。(2)

$$\psi(x,t+(T/2))=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t/2}\sum_n a_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}n(\omega t+\pi)}\phi_n(x)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t/2}\sum_n a_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\omega t}(-1)^n\phi_n(x)$$

$$=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t/2}\sum_n a_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\omega t}\phi_n(-x)=\psi(-x,t).$$

2. Dirac 方程是

$$\begin{cases}-\tilde{c}(\vec{\sigma}^{\mathrm{T}}\cdot\hat{\vec{p}}^{\mathrm{M}})\psi_1=E\psi_1,\\ \tilde{c}(\vec{\sigma}\cdot\hat{\vec{p}}^{\mathrm{M}})\psi_2=E\psi_2.\end{cases}$$

设$\psi_1=\begin{pmatrix}\phi_1\\ \phi_2\end{pmatrix}$，把 Pauli 矩阵代入，得方程

$$-\tilde{c}\begin{pmatrix}0 & p_x+\mathrm{i}p_y-eBy\\ p_x-\mathrm{i}p_y-eBy & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\phi_1\\ \phi_2\end{pmatrix}=E\begin{pmatrix}\phi_1\\ \phi_2\end{pmatrix},$$

所以

$$\begin{cases}-\tilde{c}(p_x+\mathrm{i}p_y-eBy)\phi_2=E\phi_1,\\-\tilde{c}(p_x-\mathrm{i}p_y-eBy)\phi_1=E\phi_2,\end{cases}$$

以$-\tilde{c}(p_x+\mathrm{i}p_y-eBy)$作用于第二个方程，得

$$\tilde{c}^2(p_x+\mathrm{i}p_y-eBy)(p_x-\mathrm{i}p_y-eBy)\phi_1=E^2\phi_1,$$

注意到$p_y y-yp_y=-\mathrm{i}\hbar$，把乘积展开得

$$\tilde{c}^2\left(p_x^2+p_y^2+2eByp_x-\hbar eB+e^2B^2y^2\right)\phi_1=E^2\phi_1.$$

设$\phi_1=\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_x x}f(y)$，由于$\hat{p}_x\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_x x}=\hbar k_x\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_x x}$，所以$f(y)$满足方程

$$\left[\tilde{c}^2p_y^2+\tilde{c}^2e^2B^2\left(y^2-2\frac{\hbar k_x}{eB}y+\frac{\hbar^2k_x^2}{e^2B^2}\right)\right]f(y)=(E^2+\tilde{c}^2\hbar eB)f(y),$$

也就是

$$\left(\tilde{c}^2p_y^2+\tilde{c}^2e^2B^2(y-y_0)^2\right)f(y)=(E^2+\tilde{c}^2\hbar eB)f(y),\quad\left(y_0=\frac{\hbar k_x}{eB}\right)$$

把这个方程和一维谐振子的方程

$$\left(\frac{1}{2m}p_y^2+\frac{1}{2}m\omega^2y^2\right)\psi(y)=E\psi(y)$$

作对比，发现对应的谐振子的“固有频率”是

$$\omega=2\tilde{c}^2eB,$$

用$y-y_0$代替y对能级没有影响，所以能级满足关系

$$E^2+\tilde{c}^2\hbar eB=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega=\left(n+\frac{1}{2}\right)2\tilde{c}^2\hbar eB,\quad(n=0,1,2,\cdots)$$

因此

$$E=\pm\sqrt{n2\tilde{c}^2\hbar eB},\quad(n=0,1,2,\cdots).$$

ϕ_2满足的方程与ϕ_1满足的方程的唯一区别是$\hbar eB$这一项由$-$变$+$，也就是

$$\tilde{c}^2\left(p_x^2+p_y^2+2eByp_x+\hbar eB+e^2B^2y^2\right)\phi_2=E^2\phi_2,$$

所以能级满足关系

$$E^2-\tilde{c}^2\hbar eB=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega=\left(n+\frac{1}{2}\right)2\tilde{c}^2\hbar eB,\quad(n=0,1,2,\cdots)$$

因此

$$E=\pm\sqrt{(n+1)2\tilde{c}^2\hbar eB},\quad(n=0,1,2,\cdots).$$

这比上面算出的能级少了一个$E=0$，但是没关系，因为$E=0$时ϕ_2仍然有零解，而不是无解。对ψ_2的分析是类似的。所以最后的能谱是$E_n^{\pm}=\pm\sqrt{n2\tilde{c}^2\hbar eB}$，$(n=0,1,2,\cdots)$.

2010

4 量子，20 分。A-B 效应，第一问求质量 M 电荷 e 的电子在半径 R 的 xy 面内运动的能级，简并度和本征函数，第二问求环心引入一条细长螺线管之后的能级分布和简并度。H 和 A 的公式已给。第三问求磁通等于什么数时和磁通为 0 时能级分布一致，并求出此时的 A 的一个积分。

5 量子，15 分。二能级，E1 和 E2 分别对应本征态|1>和|2>，已知算符 p，有 p|1>=|2>，p|2>=|1>，第一问求 p 的本征值分别为 1，-1 的本征态。第二问已知初态为 1 的态，求 t 时刻的本征函数。第三问求 t 时刻测得 p=1 的几率。第四问将 t 分成 N 等分，每等分测一次 p，求 t 时刻测到 p=1 的几率。第 5 问 N 趋于无穷时测到 p=1 的几率。

2009秋

3.氘核中，p.n的两体结合问题，可看作一个有限深球方势阱，最深处为U，宽度为a，已知在S态下，该问题有唯一的束缚态，且E略小于U，试估算a^2。

解：设径向波函数 $R(r)=u(r)/r$，在S态下，$l=0$。

在I区：$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2}u(r)=Eu(r)$

结合 $u(0)=0$ 得 $u_I(r)=A\sin kr$ $\left(k=\sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}\right)$

在II区：$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2}u(r)+U(r)=Eu(r)$

结合 $u(\infty)$ 有限，得 $u_{II}(r)=Be^{-\alpha r}$ $\left(\alpha=\sqrt{\frac{2\mu(U-E)}{\hbar^2}}\right)$

在 $r=a$ 处的连续性条件：

$$A\sin ka=Be^{-\alpha a}$$

$$Ak\cos ka=-\alpha Be^{-\alpha a}$$

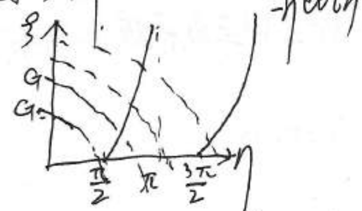
得 $\alpha=-k\cot ka$

设 $\xi=\alpha a$，$\eta=ka$，则有

$$\xi=-\eta\cot\eta$$

并已有 $\xi^2+\eta^2=\frac{2\mu Ua^2}{\hbar^2}\equiv G^2$

用作图法解之：



可见若该问题有唯一束缚态，则要求

$$\frac{\pi}{2}\le G\le\frac{3}{2}\pi$$

即 $\left(\frac{\pi}{2}\right)^2\le\frac{2\mu Ua^2}{\hbar^2}\le\left(\frac{3}{2}\pi\right)^2$

可以估算得a^2的取值范围为 $\frac{\pi^2\hbar^2}{8\mu U}\le a^2\le\frac{9\pi^2\hbar^2}{8\mu U}$

4. 质子的磁矩 $\mu_z=2.84\mu$. 质子是由2个u夸克，1个d夸克组成. u夸克电荷为$\frac{2}{3}e$，d夸克为$-\frac{1}{3}e$，质量都为质子质量的$\frac{1}{3}$. 夸克的磁矩 $\mu=\frac{e}{m}\hat{s}$，求质子在自旋向上的态下，

1) 如果3个夸克交换反对称

2) 如果3个夸克交换对称的情况时，质子在z方向的磁矩

解：本题有惑！夸克的自旋 $s=\frac{1}{2}$，摆明了是费米子，怎么可能会出现交换对称的情况呢？难道是说夸克的味道是交换对称？因粒子物理中要求重子的波函数是全对称的. 因而引入层子味道自由度本题的问法或与此精神相违背。望有大神谕示。

下面给出分析：

出于重子波函数全对称性的考虑，两个u层子的自旋必然处于三重态.

而d层子自旋波函数中分别有 $m_s=\pm\frac{1}{2}$.

由角动量的合成规则

$$\psi(\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2})=\sqrt{\tfrac{2}{3}}\chi(1,1)\phi(\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2})-\sqrt{\tfrac{1}{3}}\chi(1,0)\phi(\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2})$$

因而得到质子的磁矩应为 $\frac{2}{3}(2\mu_u-\mu_d)+\frac{1}{3}\mu_d=\frac{4}{3}\mu_u-\frac{1}{3}\mu_d$

$$\mu_u=\frac{2}{3}\cdot\frac{e}{\frac{1}{3}M_p}\hat{S}_u=\frac{2e}{M_p}\hat{S}_u=\frac{2e}{M_p}\times\frac{\hbar}{2}=\frac{e\hbar}{M_p}$$

$$\mu_d=-\frac{e}{3\times\frac{1}{3}M_p}\hat{S}_d=-\frac{e}{M_p}\hat{S}_d=-\frac{e\hbar}{2M_p}$$

则 $\mu_p=\frac{4}{3}\mu_d-\frac{1}{3}\mu_d=\left(\frac{8e}{3M_p}+\frac{e}{3M_p}\right)\hat{S}=\frac{3e}{M_p}\hat{S}=\frac{3e\hbar}{2M_p}$

2009春

三. 给出一般散射的远场表达式，求自旋为$\frac{1}{2}$的两粒子的

①远场表达式 ②散射截面 ③当$\theta=\frac{\pi}{2}$时考虑和不考虑全同性时散射截面有什么不同。

解：①一般散射的远场表达式

$$\psi(r) \xrightarrow{r\to\infty} e^{ikz} + f(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r}$$

②微分散射截面 $\sigma(\theta,\varphi)=|f(\theta,\varphi)|^2$

总散射截面 $\sigma_t=\int \sigma(\theta)\,d\Omega$

③全同粒子散射

考虑到全同粒子的对称性. $s=\frac{1}{2}$的粒子的远场表达式为

$$\psi(r) \xrightarrow{r\to\infty} e^{ikz} \pm e^{-ikz} + [f(\theta) \pm f(\pi-\theta)]\frac{e^{ikr}}{r}$$

其中"+"对应$s=0$的自旋单态，"−"对应$s=1$的三重态

散射微分截面为

$$\sigma(\theta)=\begin{cases} |f(\theta)+f(\pi-\theta)|^2 & s=0 \\ |f(\theta)-f(\pi-\theta)|^2 & s=1 \end{cases}$$

$\theta=\frac{\pi}{2}$时. 若考虑全同性则有 $\sigma(\frac{\pi}{2})=\begin{cases} 4|f(\frac{\pi}{2})|^2 & s=0 \\ 0 & \end{cases}$

若不考虑全同性则有 $\sigma(\frac{\pi}{2})=\cancel{4}\,2|f(\frac{\pi}{2})|^2$

四. 中心力场中的电子的哈密顿为H_0, 能级和本征态为E_n和$|nlm\rangle$, 在磁场中的哈密顿量为 $H = H_0 + \frac{qB}{2\mu}(L_z + 2S_z)$. 求能级和本征态的精确解。

{十分怀疑此题回忆的正确性, 冀大神谕之}

解: H的本征函数与本征能量为

$$\psi = \psi_{nlm}(r)\chi_{m_s}(S_z)$$

$$E = -\frac{e^2}{2an^2} + \frac{qB\hbar}{2\mu}(m_l + 2m_s)$$

2008

三.给出势场中的H表达式和径向波函数所满足的方程.

$$H=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2-\frac{e^2}{r}$$

令 $R(r)=u(r)/r$,则 $u(r)$ 的方程为

$$\frac{d^2u(r)}{dr^2}+\left[\frac{2\mu}{\hbar^2}(E-V(r))-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]u(r)=0$$

1)写出求解氢原子波函数的方法

结合无穷远处的边界条件用级数法求解合流超几何方程.

2)氢原子能级的特点,能级简并度

$$E_n=-\frac{e^2}{2an^2}$$

在不考虑电子自旋的情况下,能级是 n^2 度简并的.

3)给出试探波函数的形式 $|\psi\rangle=\sqrt{\frac{\lambda^3}{\pi}}\exp(-\lambda r)$. 用变分法求基态波函数和能量。

解:由于要求基态波函数,即 $l=0$ 的函数,是球对称的.因而 $p_\theta=0$, $p_\varphi=0$

$$\hat{p}_r=-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)$$

则哈密顿量可以写成 $H=\frac{p_r^2}{2\mu}-\frac{e^2}{r}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)^2$

$$\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)^2\exp(-\lambda r)=\lambda^2\exp(-\lambda r)-\frac{2\lambda}{r}\exp(-\lambda r)$$

$$E=\frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}=\frac{4\pi\int_0^\infty r^2dr\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\lambda^2\exp(-2\lambda r)-\frac{2\lambda}{r}\exp(-2\lambda r)\right)-\frac{e^2}{r}\exp(-2\lambda r)\right]}{4\pi\int_0^\infty\exp(-2\lambda r)dr}$$

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

由 $\frac{\partial E}{\partial\lambda}=0$ 得 $\lambda=\frac{\mu e^2}{\hbar^2}$

(4) 求无限深球方势阱中的能级 $V(r)=\begin{cases}0 & r<a\\ \infty & r\geq a\end{cases}$

在 $r\geq a$ 的区域 $\psi(r)=0$

在 $r<a$ 的区域

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

令 $\psi(\vec{r})=R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$

$R(r)$ 满足 $\frac{d^2R(r)}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr}+\left[k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R(r)=0$ $\quad \left(k=\sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}\right)$

这是球 Bessel 方程，解为球 Bessel 函数

$$R(r)=j_l(kr)$$

由 $x=a$ 处的连续性 $R(a)=j_l(ka)=0$

设 $j_l(ka)$ 的零点为 $x_{1l}, x_{2l}\cdots x_{nl}\cdots$

由 $ka=x_{nl}$，得 $E_{nl}=\frac{\hbar^2 x_{nl}^2}{2\mu a^2}$

(5) 求能级 (1) 的简并度

球 Bessel 函数 j_l 的零点有无穷个，j_l 和 j_{l+1} 的零点相间分布，考虑 Y_{lm} 函数

$l=1$ 的简并度为 3.

(6) 求有限深球方势阱中的基态能级。$V(r)=\begin{cases}0 & r<a\\ V_0 & r\geq a\end{cases}$

指出若 a 太小，则无束缚态

见第5页第3题，可知有束缚态的条件为 $a^2\geq\frac{\pi^2\hbar^2}{8\mu V_0}$ (μ 为粒子质量)

四. 高能粒子在势场 $V(r)=\frac{A}{r^2}$ 中的散射截面.

解: 高能粒子散射采用玻恩近似的方法. 中心力场下散射振幅 $f(\theta)$ 的玻恩近似公式为

$$f(\theta)=-\frac{2\mu}{\hbar^2 q}\int_0^\infty V(r)\, r\sin qr\, dr$$

将 $V(r)=\frac{A}{r^2}$ 代入, 得 $f(\theta)=-\frac{\mu A\pi}{\hbar^2 q}$

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2=\frac{\mu^2A^2\pi^2}{\hbar^4 q}$$

注: 计算中使用了 $\int_0^\infty \frac{\sin x}{x}dx=\frac{\pi}{2}$。使用留数定理可以得到此式。

2007

3. 设某量子体系有两个非简并能级E_1和E_2。微扰H'在使H对角的表象下两个对角矩阵元都为a，两个非对角矩阵元都为b。用非简并定态微扰方法求微扰后的能级，准确到二级近似，并与精确结果比较。

解：在$\hat{H}$表象下，$\hat{H}'$的矩阵形式为

$$H' = \begin{pmatrix} a & b \\ b & a \end{pmatrix}$$

根据微扰论 $E_1^{(0)} = E_1$；$E_2^{(0)} = E_2$

$$E_1^{(1)} = a \qquad E_2^{(1)} = a$$

$$E_1^{(2)} = \frac{b^2}{E_1 - E_2} \qquad E_2^{(2)} = \frac{b^2}{E_2 - E_1}$$

（不防设$E_2 > E_1$），则 $E_1^{(2)} = -\frac{b^2}{E_2 - E_1}$，$E_2^{(2)} = \frac{b^2}{E_2 - E_1}$

则根据微扰论，

$$E_I = E_1 + a - \frac{b^2}{E_2 - E_1}$$

$$E_{II} = E_2 + a + \frac{b^2}{E_2 - E_1}$$

可以看到能级之间的"排斥"效果

下面精确解之。

设$H = H_0 + H' = \begin{pmatrix} a+E_1 & b \\ b & a+E_2 \end{pmatrix}$的本征值为$E$，则$E$由下式所确定：

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

解之，得

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

即 $E_I = E_1 + a - \frac{b^2}{E_2 - E_1}$ （取"−"）

$E_{II} = E_2 + a + \frac{b^2}{E_2 - E_1}$ （取"+"）

可见微扰近似到二阶就可以给出精确的结果.

4. 猜想一维谐振子基态波函数形式为 $\psi(x)=A\exp(-\beta x^2)$

(1) 用 β 表示 A

(2) 用变分法求出基态能量和 β 的表达式

解：(1) 归一化条件：

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x)|^2dx=1 \quad 即 \quad |A|^2\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(-2\beta x^2)dx$$

$$|A|^2\sqrt{\frac{\pi}{2\beta}}=1$$

$$故\ A=\left(\frac{2\beta}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}$$

12

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

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)=A(4\beta^2x^2-2\beta)\exp(-\beta x^2)$$

$$则 \langle\psi|H|\psi\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}|A|^2\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}(4\beta^2x^2-2\beta)\exp(-2\beta x^2)+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2\exp(-2\beta x^2)\right]dx$$

$\Gamma(\frac{1}{2})=\sqrt{\pi}$

$\Gamma(n+1)=n\Gamma(n)$

$$=|A|^2\left(-\frac{2\hbar^2\beta^2}{\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega^2\right)\int_{-\infty}^{+\infty}x^2\exp(-2\beta x^2)dx+|A|^2\frac{\hbar^2\beta}{\mu}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(-2\beta x^2)dx$$

$$利用\Gamma函数，可得\ \langle\psi|H|\psi\rangle=\left[\left(-\frac{2\hbar^2\beta}{\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega^2\right)\frac{1}{(2\beta)^{\frac{3}{2}}}\cdot\frac{\sqrt{\pi}}{2}+\frac{\hbar^2\beta}{\mu}\sqrt{\frac{\pi}{2\beta}}\right]|A|^2$$

$$\langle\psi|\psi\rangle=\sqrt{\frac{\pi}{2\beta}}$$

$$得\ E=\frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}=\frac{\mu\omega^2}{8\beta}+\frac{\hbar^2\beta}{2\mu}$$

$$由\ \frac{\partial E}{\partial\beta}=0\ 得\quad \beta=\frac{\mu\omega}{2\hbar}$$

$$亦可得\ E=\frac{1}{2}\hbar\omega$$

5 设二玻色子体系的哈密顿量

$\hat{H} = V(aa^+ + bb^+) + \varepsilon(a^+b^+aa + a^+a^+ba)$.

设 $|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} a^+a^+|0\rangle$; $|2\rangle = a^+b^+|0\rangle$; $|3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} b^+b^+|0\rangle$

(1) 求 $\hat{H}$ 在以 $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$ 作为基矢的表象下的矩阵元

(2) 设体系初状态为 $|2\rangle$, $V = 4\varepsilon$, $t\varepsilon/\hbar = \frac{\pi}{2}$, 经过时间 t 以后测量玻色子 a 的数目. 问可能的结果和每种结果发生的几率.

解: (1) $|1\rangle = |2a\ 0b\rangle$; $|2\rangle = |1a\ 1b\rangle$; $|3\rangle = |0a\ 2b\rangle$

$\hat{H} = V(\hat{n}_a + \hat{n}_b) + \varepsilon(a^+b^+aa + a^+a^+ba) + 2V$

计算 $H_{mn} = \langle m|H|n\rangle$ 时可利用粒子数守恒, 不守恒的项为 0.

经计算得 $\hat{H}$ 的矩阵形式为

$$H = \begin{pmatrix} 4V & \sqrt{2}\varepsilon & 0 \\ \sqrt{2}\varepsilon & 4V & 0 \\ 0 & 0 & 4V \end{pmatrix}$$

(2) 在 $V = 4\varepsilon$ 时, $H = \varepsilon \begin{pmatrix} 16 & \sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & 16 & 0 \\ 0 & 0 & 16 \end{pmatrix}$

对 $\hat{H}$ 求解本征值问题, 得本征值与相应的本征态为

$E_1 = 16\varepsilon + \sqrt{2}\varepsilon \qquad |\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

$E_2 = 16\varepsilon \qquad |\psi_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

$E_3 = 16\varepsilon - \sqrt{2}\varepsilon \qquad |\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$

初态 $|\psi(0)\rangle = |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\psi_1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|\psi_3\rangle$

则 $|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\psi_1\rangle e^{-iE_1t/\hbar} - \frac{1}{\sqrt{2}}|\psi_3\rangle e^{-iE_3t/\hbar}$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i16\varepsilon t/\hbar} \begin{pmatrix} e^{-i\sqrt{2}\varepsilon t/\hbar} - e^{i\sqrt{2}\varepsilon t/\hbar} \\ e^{-i\sqrt{2}\varepsilon t/\hbar} + e^{i\sqrt{2}\varepsilon t/\hbar} \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$= e^{-i16\varepsilon t/\hbar} \begin{pmatrix} -i\sin\sqrt{2}\varepsilon t/\hbar \\ \cos\sqrt{2}\varepsilon t/\hbar \\ 0 \end{pmatrix}$$

故有 2 个 a 的几率 $P_2 = \sin^2\sqrt{2}\varepsilon t/\hbar = \sin^2\frac{\pi}{\sqrt{2}}$

有 1 个 a 的几率 $P_1 = \cos^2\sqrt{2}\varepsilon t/\hbar = \cos^2\frac{\pi}{\sqrt{2}}$

2006春

1. 波函数 $\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{45}}(6\phi(x)+3\varphi(x))$ 其中 $\phi(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right)$

$\varphi(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right)$ 为正交归一的波函数，求 $\psi(x)$ 对宇称算符 $\hat{I}$ 的平均值。

解：$\hat{I}$ 的作用规则是 $\hat{I}\phi(x)=\phi(-x)$

可以计算 $\langle\hat{I}\rangle=\langle\psi(x)|\hat{I}|\psi(x)\rangle=\frac{3}{5}$.

计算中利用 $\langle\phi(x)|\hat{I}|\phi(x)\rangle=1$；$\langle\varphi(x)|\hat{I}|\varphi(x)\rangle=-1$

并且 $\langle\phi(x)|\varphi(x)\rangle=0$。

2. 一维无限深方势阱的 $V(x)=0,\ |x|<\frac{L}{2}$；$V(x)=+\infty,\ |x|\geq\frac{L}{2}$。

单粒子能量本征波函数为 $\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$ $n=1,3,5\cdots$；

$\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$，$n=2,4,6\cdots$，对应的能量本征值为 $E_n=n^2E_1$

(1) 当体系由2个全同的Bose子组成时，求体系的基态波函数和基态能。

解：Bose子为全对称波函数，不受Pauli不相容原理限制.

基态波函数为 $\psi(x_1,x_2)=\sqrt{\frac{2}{L}}\cos\left(\frac{n\pi x_1}{L}\right)\cdot\sqrt{\frac{2}{L}}\cos\left(\frac{n\pi x_2}{L}\right)=\phi_1(x_1)\phi_1(x_2)$

$E=2E_1$

自旋处于交换对称的态

(2) 当体系由两个全同Fermi子组成时，求体系的基态波函数和基态能.

解：基态波函数与基态能仍同Bose子. 只是这时两Fermi子的自旋要处于交换反对称的态上。

(3) 当体系存在微扰 $V'=\begin{cases}V_0 & |x|<\frac{L}{4}\\ 0 & |x|>\frac{L}{4}\end{cases}$ 时，求两个全同Bose子体系的基态能级的一级修正.

解：

$$E^{(1)}=\iint_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}}\psi^*(x_1,x_2)V'\psi(x_1,x_2)\,dx_1dx_2$$

$$=\left[\int_{-\frac{L}{4}}^{\frac{L}{4}}\frac{2}{L}\cos^2\frac{\pi x_1}{L}\,dx_1\right]^2V_0$$

$$=\left(\frac{\pi+2}{2\pi}\right)^2V_0$$

3. 若考虑电子的自旋、磁场B沿z方向的体系的哈密顿量 $H=\frac{p^2}{2m}+kS_z$，在Heisenberg picture中：(1) 求体系坐标算符 $\hat{q}(t)$ 的表达式 (2) 求 $\hat{q}(t)$ 的本征值和本征函数。

2005

3. 求氢原子基态下的动量几率分布

解：氢原子基态波函数：$\phi = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}$

a 为 Bohr 半径. $a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$ 。$\phi(r)$ 与 θ, φ 无关，可选 $\vec{p}$ 的方向为 Z 轴方向，

则 $\varphi(p) = \langle p|\phi\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \iiint \phi(r) e^{-ipr\cos\theta/\hbar} r^2 \sin\theta \, d\theta \, d\varphi \, dr$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \frac{2\pi}{\sqrt{\pi a^3}} \iint e^{-r/a} e^{-ipr\cos\theta/\hbar} r^2 \sin\theta \, d\theta \, dr$$

令 $A = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \cdot \frac{2\pi}{\sqrt{\pi a^3}} = \left(\frac{1}{2\pi^2\hbar^3 a^3}\right)^{\frac{1}{2}}$

则 $\varphi(p) = A \int dr \, r^2 \int_1^{-1} \exp\left[-r\left(\frac{1}{a} + ipx/\hbar\right)\right] dx$

$$= \frac{Ai\hbar}{p} \int_0^\infty dr \cdot r \left\{ \exp\left[-r\left(\frac{1}{a} - ip/\hbar\right)\right] - \exp\left[-r\left(\frac{1}{a} + ip/\hbar\right)\right] \right\}$$

$$= \left(\frac{1}{2\pi^2\hbar^3 a^3}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{i\hbar}{p} \left[\frac{1}{\left(\frac{1}{a} - \frac{ip}{\hbar}\right)^2} - \frac{1}{\left(\frac{1}{a} + \frac{ip}{\hbar}\right)^2} \right]$$

$W(p) = |\varphi(p)|^2 \cdot 4\pi p^2 = \frac{32 a^3 \hbar^5 p^2}{\pi (a^2 p^2 + \hbar^2)^4}$

2. 基态能级有简并，能量为E_0，波函数为$|1\rangle, |2\rangle$，若$H' = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix}$

求能量的一级修正.

解：由 $\begin{vmatrix} H_{11}-\lambda & H_{12} \\ H_{21} & H_{22}-\lambda \end{vmatrix} = 0$

λ即所求。

3. 设两粒子体系中算符F只依赖于两粒子的距离$F(|\vec{r}_1-\vec{r}_2|)$，求在不考虑波函数对称性和考虑波函数对称性的情况下F平均值的差别，并说明什么情况下这种差别可以忽略不计。

解：(1) 不考虑对称性：$\bar{F} = \langle \varphi(r_1,r_2)|F|\varphi(r_1,r_2)\rangle$ 记为 $\langle r_1,r_2|F|r_1,r_2\rangle$

(2) 考虑全同性，$\bar{F} = \dfrac{1}{2[1+\delta(\varphi(r_1,r_2),\varphi(r_2,r_1))]}\Big[\langle r_1,r_2|F|r_1,r_2\rangle$

$+ \langle r_2,r_1|F|r_2,r_1\rangle + \langle r_1,r_2|F|r_2,r_1\rangle + \langle r_2,r_1|F|r_1,r_2\rangle\Big]$

仅供参考

莫神谕

可知若$\varphi(r_1,r_2)=\varphi(r_2,r_1)$则差别可忽略

2。已知电子 Ho 的能量本征值和本征函数，求在外磁场中 H`=a(Lz+Sz),能量本征值和本征

3。求含时微扰 H`(t)量子跃迁振幅的 2 级近似.

2004年以前

2.(2005) 证明表象变换不改变对易关系.

证明：设在1表象下，有算符$\hat{A}$, $\hat{B}$，满足对易关系 $[\hat{A},\hat{B}]=\hat{C}$

变换到2表象下，有 $\hat{A}'=\hat{S}^{+}A\hat{S}$ ，$\hat{B}'=\hat{S}^{+}A\hat{S}$ ，$\hat{C}'=\hat{S}^{+}C\hat{S}$

S为从表象1到表象2的变换矩阵。

则 $[\hat{A}',\hat{B}']=\hat{A}'\hat{B}'-\hat{B}'\hat{A}'$

$=\hat{S}^{+}\hat{A}\hat{S}\hat{S}^{+}\hat{B}\hat{S}-\hat{S}^{+}\hat{B}\hat{S}\hat{S}^{+}\hat{A}\hat{S}$

由$\hat{S}\hat{S}^{+}=\hat{I}$得，$=\hat{S}^{+}\hat{A}\hat{B}\hat{S}-\hat{S}^{+}\hat{B}\hat{A}\hat{S}$

$=\hat{S}^{+}[\hat{A},\hat{B}]\hat{S}$

$=\hat{S}^{+}\hat{C}\hat{S}$

$=\hat{C}'$

即$[\hat{A}',\hat{B}']=\hat{C}'$

即表象变换不改变对易关系。

3. (2004秋) 证明 $\frac{d\langle p\rangle}{dt}=\langle F\rangle$，$\vec{F}=-\nabla V$，$V$为势函数.

解：证明：首先证明 $[p,V]=-i\hbar\nabla V$

$$
\begin{aligned}
&[p,V]|\psi\rangle \\
&= pV|\psi\rangle - Vp|\psi\rangle \\
&= -i\hbar\nabla(V|\psi\rangle) - V(-i\hbar\nabla|\psi\rangle) \\
&= -i\hbar[\nabla V\cdot|\psi\rangle + V\cdot\nabla|\psi\rangle - V\cdot\nabla|\psi\rangle] \\
&= -i\hbar\nabla V\cdot|\psi\rangle
\end{aligned}
$$

故 $[p,V]=-i\hbar\nabla V$

则 $\frac{d\langle p\rangle}{dt}=\frac{1}{i\hbar}\overline{[\hat{p},\hat{H}]}=\frac{1}{i\hbar}\overline{[\hat{p},\frac{\hat{p}^2}{2m}+V]}=\frac{1}{i\hbar}\overline{[p,V]}$

$$=\frac{1}{i\hbar}(\overline{-i\hbar\nabla V})=\langle-\nabla V\rangle.$$

2. 氢原子基态 $\psi_{100}(\vec{r})=\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}e^{-r/a_0}$，$a_0$为常数. 求动量平均值

解: $\langle p\rangle=\langle\psi_{100}|p|\psi_{100}\rangle$ ~~由于积分~~

$$\langle p\rangle=m\frac{d\langle r\rangle}{dt}=\frac{m}{i\hbar}\langle[\vec{r},H]\rangle$$

在能量~~表象~~的本征态$|n\rangle$下,

$$\begin{aligned}\langle p\rangle&=\langle n|\vec{p}|n\rangle\\&=\frac{m}{i\hbar}\langle n|[r,H]|n\rangle\\&=\frac{m}{i\hbar}\langle n|rH-Hr|n\rangle\\&=\frac{m}{i\hbar}E_n\langle n|\vec{r}-\vec{r}|n\rangle\\&=0\end{aligned}$$

氢原子的基态是能量的本征态，故 $\langle p\rangle=0$

3. 动能为E的粒子向右运动,受到 $V(x)=\frac{\hbar^2\Omega\delta(x)}{2m}$ 的作用，m为粒子质量
求解此一维散射问题，并考虑 $\Omega\to0$ 和 $\Omega\to\infty$ 的极限