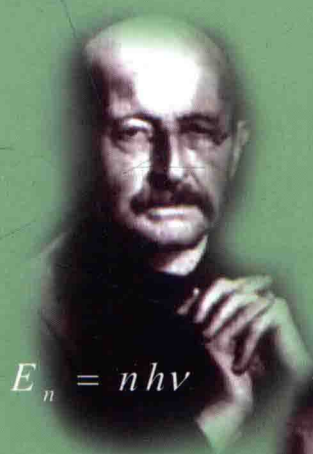


“十二五”国家重点图书出版规划项目

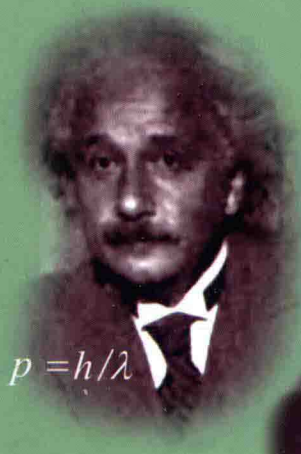
量子力学习题解答

Solutions to the Problems in Quantum Mechanics

(修订本)



$$E_n = nh\nu$$



$$p = h/\lambda$$



$$[x, \hat{p}_x] = i\hbar$$



$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \hat{H} \psi(\vec{r}, t)$$

井孝功 郑仰东 编著

哈尔滨工业大学出版社

量子力学学习题解答

(修订本)

井孝功 郑仰东 编著

哈尔滨工业大学出版社

内 容 简 介

本书是井孝功与赵永芳编著的《量子力学》(修订本)的配套书。书中包括三部分内容:一是量子力学基本概念与公式的归纳和总结,二是各章习题的解答(134题),三是7套模拟试题的解答。

本书是物理系各专业本科生的辅助教材,也可供相关专业学生和科技人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

量子力学习题解答/井孝功,郑仰东编著. —3版. —哈尔滨:
哈尔滨工业大学出版社,2017.3

ISBN 978-7-5603-5869-7

I. ①量… II. ①井…②郑… III. ①量子力学-高等学校-
解题 IV. ①O413.1-44

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2016)第 032357 号

策划编辑 张秀华

责任编辑 张秀华

出版发行 哈尔滨工业大学出版社

社 址 哈尔滨市南岗区复华四道街 10 号 邮编 150006

传 真 0451-86414749

网 址 <http://hitpress.hit.edu.cn>

印 刷 哈尔滨市工大节能印刷厂

开 本 787mm×960mm 1/16 印张 12.5 字数 260 千字

版 次 2017 年 3 月第 3 版 2017 年 3 月第 1 次印刷

书 号 ISBN 978-7-5603-5869-7

定 价 30.00 元

(如因印装质量问题影响阅读,我社负责调换)

前 言

量子力学是物理系四大力学之一,它是一门专业基础课程。虽然量子力学是建立在五个基本原理的基础上,但是,由它导出的一系列结论得到了实验结果的强有力支持,因此,量子力学已经成为解决微观与介观问题的必不可少的理论工具。

与经典物理学不同的是,量子力学给出了一套全新的思维模式和解决问题的方法,为了完成从经典理论到量子理论思维模式的转变,只靠死记硬背概念和公式是不够的,必须自己动手完成相当数量的习题,这样才能更深入地理解量子力学的内涵。

本书是井孝功与赵永芳编著的《量子力学》(修订本)的配套教材,它包括三部分内容:一是量子力学基本概念与公式的归纳和总结,二是各章习题的解答(134题),三是7套模拟试题的解答。建议读者在认真阅读第一部分内容后,自己先试做习题,然后再与习题解答比对,这样更有利于解决问题能力的提高。模拟试题需要在限定的时间内(2小时)完成,它是对读者学习效果的综合测试。

正像所有的课程一样,量子力学的“教”与“学”也是一个不可破缺的双边活动,对“教”与“学”效果的评价大致可分为三个层次:最基本的要求是传承知识,即对教学大纲界定知识的传授与继承,教师的讲授要准确,学生的理解要正确。知识需要在积累中深化;更深层次的目标是提升能力,包括逻辑思维能力、发现和解决问题的能力与获取新知识的能力等,教师的引领要给力,学生的历练要反复。能力需要在践行中升华;顶级的期盼是培养兴趣,只有对所面临的知识产生了兴趣,才能迸发出持续的动力,教师的培育要耐心,学生的养成要有意。兴趣需要在迸发后坚持。

此外,有几个问题提请读者注意:首先,物理公式通常是有使用条件的,在使用它之前,一定要先搞清楚所要处理的问题是否满足该条件,且不可拿来就用;其次,对于任意一个物理公式,若要判断其对错,最简单的方法是看等式两

端的量纲、角标和变量及其类型是否一致;最后,一个公式在物理上是否合理也是至关重要的,通常的判别方法是,看它在特殊或极端情况下能否成立。

哈尔滨工业大学物理系的孙秀冬教授、周忠祥教授和张宇教授,凝聚态科学与技术研究中心的 苏文辉 教授对本书的出版都曾十分关心,哈尔滨工业大学出版社对本书的出版给予了大力的支持,并为此付出了艰辛的劳动,作者对他们表示衷心的感谢。

由于水平所限,加之时间仓促,难免有诸多不当之处,恳请各位读者不吝赐教。

井孝功 郑仰东

2016 年 11 月

目 录

量子力学纲要.....	1
1. 量子力学概述.....	1
2. 波函数.....	6
3. 算 符	10
4. 薛定谔方程	17
习题解答	23
第 1 章 量子理论的诞生	23
第 2 章 波函数与薛定谔方程	32
第 3 章 束缚定态问题	38
第 4 章 一维势垒隧穿问题	49
第 5 章 力学量的算符表示	56
第 6 章 中心力场	71
第 7 章 表象理论	77
第 8 章 自旋与角动量加法	90
第 9 章 近似方法.....	104
第 10 章 量子散射理论初步	140
第 11 章 量子多体理论	145
模拟试题解答.....	149
模拟试题 1	149
模拟试题 2	157
模拟试题 3	163
模拟试题 4	171
模拟试题 5	176
模拟试题 6	182
模拟试题 7	187

量子力学纲要

众所周知,相对论与量子论是 20 世纪的两个最重大的科学发现,量子论的数学架构就是量子力学。虽然量子力学是建立在 5 个基本原理基础上的,但是,它的正确性已由诸多的实验结果所证实,并且在能源、激光、超导与材料等领域已经取得了令人瞩目的实用效果。波函数、算符和薛定谔方程是量子力学的 3 个基本要素,这里将对它们做简要回顾和归纳总结。

1. 量子力学概述

本节的主要内容为:量子论的实验基础与理论假说;量子论的 3 次飞跃;量子力学的 5 个基本原理。

1.1 量子论的实验基础与理论假说

实验结果既是理论的出发点也是理论的归宿,量子理论的创建过程正是这一基本原则的具体写照:黑体辐射、光电效应与原子光谱的实验结果分别导致了能量子假说、光量子假说与玻尔旧量子论的建立。

1.1.1 黑体辐射和能量子假说

1. 实验背景

为了深入地研究辐射频率(或波长)与温度的关系,人们设计了一个在任何温度下能吸收所有光(电磁辐射)而无反射的物体,通常称之为黑体。实验结果表明,黑体辐射满足如下的唯象公式。

(1) 维恩位移公式

$$\lambda_{\max} T = \alpha \quad (1.1)$$

式中, $\lambda_{\max}$ 为最强光的波长; T 为绝对温度; α 为实常数,其数值已由实验结果给出。若不再重新说明,则后面符号的含意保持不变(下同)。上式表明,最强光的波长与绝对温度成反比。

(2) 斯特藩-玻尔兹曼定律

$$\rho = \beta T^4 \quad (1.2)$$

式中, ρ 为能量密度(单位体积的能量); β 为实常数,其数值已由实验结果给

出。上式表明,能量密度与绝对温度的 4 次方成正比。

(3) 杜龙-佩替定律

$$C_V = 3N_A k_B = 3R = 24.9 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \quad (1.3)$$

式中, C_V 为固体的等容比热; $R = 8.314\,510\,00 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ 为摩尔气体常数; $N_A = 6.022\,136\,7 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ 为阿伏伽德罗常数; $k_B = 1.380\,658 \times 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$ 为玻尔兹曼常数,它是热力学与统计物理学的标志性常数。

上式表明,固体的等容比热是一个与温度无关的常数。在室温和高温下,上式与实验结果相符,但是,在低温时的实验结果是,比热与温度的 3 次方成正比,即

$$C_V = \gamma T^3 \quad (T \rightarrow 0) \quad (1.4)$$

式中 γ 为实常数,其数值已由实验结果给出。特别是,当 $T = 0$ 时, $C_V = 0$ 。

2. 能量密度的唯象公式

为了解释上述实验结果,人们曾给出如下的能量密度的唯象公式。

(1) 维恩的唯象公式

$$\rho_\nu d\nu = c_1 e^{-c_2 \nu T^{-1}} \nu^3 d\nu \quad (1.5)$$

式中, ν 为频率; ρ_ν 为能量密度(即单位体积单位频率的能量); c_1 与 c_2 为待定常数。维恩公式只是在高频情况下与实验结果相符。

(2) 瑞利-金斯的唯象公式

$$\rho_\nu d\nu = 8\pi k_B T c^{-3} \nu^2 d\nu \quad (1.6)$$

式中, $c = 2.997\,924\,58 \times 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 为真空中的光速,它是相对论的标志性常数。瑞利-金斯公式只是在低频情况下与实验结果相符。

(3) 普朗克的唯象公式

$$\rho_\nu d\nu = c_1 (e^{c_2 \nu T^{-1}} - 1)^{-1} \nu^3 d\nu \quad (1.7)$$

式中, c_1 与 c_2 为待定常数。对上式分别取高频和低频近似,可以得到维恩公式与瑞利-金斯公式,所以,普朗克的唯象公式在全频段与实验结果相符。

3. 普朗克的能量子假说

为了能从理论上导出式(1.7),普朗克假设:对于一定频率 ν 的辐射,物体只能以 $h\nu$ 为能量单位吸收或发射它,此即普朗克的能量子假说。其中的 $h = 6.626\,075\,5 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ 是一个普适常数,称之为普朗克常数,它是量子论的标志性常数。能量子假说也可以理解为,物体吸收或发射电磁波时,只能以量子的方式进行,每个量子的能量为 $\epsilon = h\nu$,说得再具体一些,物体在吸收或发射电磁波时,只能以能量 ϵ 的整数倍来实现,即

$$E_n = n\epsilon = nh\nu \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (1.8)$$

4. 能量密度的理论公式

利用能量子假说可以导出普朗克能量密度的理论公式

$$\rho_\nu d\nu = 8\pi hc^{-3} (e^{\hbar k_B^{-1} T^{-1}} - 1)^{-1} \nu^3 d\nu \quad (1.9)$$

应该特别说明的是,上式中已没有任何待定参数,故称之为理论公式。

利用式(1.9)可以导出式(1.1), (1.2), (1.4) 中常数 α, β, γ 的理论数值,详见井孝功与赵永芳编著的《量子力学》(修订本)(以下简称《量子力学》)之例题1.2与1.3及习题1.8之解答,它们分别为

$$\alpha = 2.897\,7 \times 10^{-3} \text{ m} \cdot \text{K} \quad (1.10)$$

$$\beta = 7.565\,902 \times 10^{-12} \text{ J} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{K}^{-4} \quad (1.11)$$

$$\gamma = 2.4\pi^4 T_D^{-3} N_A k_B \quad (1.12)$$

式中, $T_D = \hbar \omega_D k_B^{-1}$ 为德拜温度; $\hbar = (2\pi)^{-1} h$; $\omega_D = (6\pi^2 N_A V^{-1})^{1/3} C$ 为振动频率上限; C 是一个与纵波和横波速度相关的数。

α, β, γ 的理论数值与实验结果非常接近,说明能量子假说经受住了实验的检验。

1.1.2 光电效应和光量子假说

1. 实验背景

光电效应的实验现象是:当用紫外光照射到某些金属(例如,钠)的表面上时,立刻就会有电子的发射,于是在电路中有电流通过。

2. 爱因斯坦光量子假说之一

爱因斯坦假设:光是由光量子(简称光子)组成的,每个光子的能量 ϵ 与辐射频率 ν 的关系是

$$\epsilon = h\nu \quad (1.13)$$

由光电子的动能 T 与脱出功 W_0 的关系式 $T = h\nu - W_0$ 可知,只有当光子的频率 ν 不小于阈值 $\nu_0 = W_0/h$ 时,才有光电子的发射。

爱因斯坦的光量子假说不但正确的解释了单光子光电效应,而且预言了双光子光电效应乃至多光子光电效应的存在。

3. 爱因斯坦光量子假说之二

爱因斯坦假设:光量子的动量 p 与波长 λ 的关系为

$$p = h/\lambda \quad (1.14)$$

利用上述关系式可以解释X光被电子散射实验,即康普顿散射公式(详见习题1.9之解答)

$$\lambda' - \lambda = 4\pi\hbar (m_0 c)^{-1} \sin^2(\theta/2) \quad (1.15)$$

式中, λ, λ' 分别为入射与散射X光的波长; m_0 为电子的静止质量; θ 为散射光与入射光传播方向的夹角,称为散射角。

1.1.3 原子光谱和旧量子论

1. 实验背景

实验发现,原子光谱是由一条条断续的光谱线构成的,即所谓的线状光谱。

2. 玻尔的旧量子论

玻尔假设:原子在能量分别为 E_n 和 E_m 两个定态之间跃迁时,发射或吸收的电磁辐射的频率 ν 满足关系式 $h\nu = E_n - E_m$,光谱项为

$$T(n) = -E_n/h \quad (1.16)$$

玻尔的量子假说成功的解释了氢原子的光谱结构,但由于它仍然保留了经典物理学中轨道的概念,故被称之为旧量子论。

1.2 量子论的 3 次飞跃

在量子论的创建过程中,经历了如下 3 次具有历史意义的飞跃。

1.2.1 普朗克的量子假说

物体在吸收或发射电磁波时,只能以能量 $h\nu$ 的整数倍来实现,即

$$E_n = nh\nu \quad (n=0,1,2,\cdots) \quad (1.17)$$

1.2.2 德布罗意的物质波假说

德布罗意物质波假说:包括光子在内所有粒子在运动中都既表现出粒子的行为也表现出波动的行为,此即运动粒子的波粒二象性。换句话说,具有能量 E 和动量 p 的粒子与具有角频率 $\omega = 2\pi\nu$ 和波矢量 k 的物质波相对应,普朗克常数 h 是联系两者的纽带,即

$$E = h\omega, \quad p = \hbar k \quad (1.18)$$

此即德布罗意物质波假说的数学形式。

1.2.3 薛定谔方程与玻恩的概率波解释

描述体系状态的波函数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 随时间的变化满足薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H}(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.19)$$

哈密顿算符的一般形式为

$$\hat{H}(\mathbf{r}, t) = \hat{\mathbf{p}}^2 / (2m) + V(\mathbf{r}, t) \quad (1.20)$$

其中的 $\hat{\mathbf{p}}$ 为动量算符; m 为粒子的质量; $V(\mathbf{r}, t)$ 是位势。

玻恩认为,不论是德布罗意的物质波,还是薛定谔方程中的波函数所描述的波,都不是什么实在物理量的波动,只不过是描述粒子在空间的概率分布的概率波而已。此即玻恩对体系波函数的概率波解释。

1.3 量子力学的 5 个基本原理

1.3.1 波函数的概率波解释

体系的状态用波函数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 来描述, $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ 表示 t 时刻在 $\mathbf{r}$ 附近发现粒子的概率密度。

1.3.2 状态叠加原理

若体系具有一系列可能的状态 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi_3\rangle, \dots, |\psi_n\rangle, \dots$, 则这些状态的任意线性组合

$$|\psi\rangle = c_1 |\psi_1\rangle + c_2 |\psi_2\rangle + c_3 |\psi_3\rangle + \dots + c_n |\psi_n\rangle = \sum_{m=1}^n c_m |\psi_m\rangle \quad (1.21)$$

也一定是该体系的一个可能的状态, 其中, $c_1, c_2, c_3, \dots, c_n$ 为任意复常数。此即状态叠加原理。

1.3.3 薛定谔方程

体系的状态 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 随时间的变化满足薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H}(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.22)$$

1.3.4 算符化规则

经典物理学中的力学量用线性厄米算符来代替, 并且上述的替代关系是一一对应的, 此即力学量算符化规则。

能量算符 $\hat{E}$ 与动量算符 $\hat{\mathbf{p}}$ 是两个基本的普适算符, 具体形式为

$$\begin{aligned} \hat{E} &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \\ \hat{\mathbf{p}} &= -i\hbar \vec{\nabla} \end{aligned} \quad (1.23)$$

式中 $\vec{\nabla}$ 为梯度算符。需要特别说明的是, 虽然能量算符 $\hat{E}$ 与哈密顿算符 $\hat{H}$ 都具有能量量纲, 但是, 它们之间有两点差异, 一是能量算符适用于任意体系, 而哈密顿算符与具体的体系有关, 二是能量算符只与时间相关, 而哈密顿算符还与坐标相关。

1.3.5 全同性原理

对于具有 N 个粒子的全同粒子体系, 交换任意两个粒子的坐标不改变体系的状态, 即

$$\hat{P}_{ij} \psi(x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N) = \pm \psi(x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N) \quad (1.24)$$

式中, x_i 为第 i 个粒子的坐标; $\hat{p}_{ij}$ 为第 i 个粒子与第 j 个粒子坐标的交换算符。对于全同费米子体系取负号, 即要求其波函数是反对称的, 对于全同玻色子体系取正号, 即要求其波函数是对称的。

2. 波函数

本节的主要内容为: 波函数的物理内涵; 波函数应满足的条件; 具有特殊性质的波函数; 状态叠加原理与展开假设; 状态随时间的变化。

2.1 波函数的物理内涵

2.1.1 波函数的定义

波函数是用来描述状态的, 严格地说, 应该称其为态函数。由于它具有矢量的性质, 故也称之为态矢量, 或者简称为态矢。波函数可分为体系的波函数与力学量的波函数两大类。

1. 体系的波函数

体系的波函数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 是关于坐标和时间的复函数, 它可以描述体系状态, $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 随时间的变化满足薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H}(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.1)$$

2. 力学量的波函数

描述某个力学量取值状态的波函数称之为力学量的波函数, 特别是使力学量取确定值的波函数, 称之为该力学量的本征波函数。通常情况下, 某个力学量的波函数应该是其本征波函数的线性组合。

本征波函数满足该力学量算符的本征方程。例如, 动量算符 $\hat{p}$ 的本征方程为

$$\hat{p}\psi_p(\mathbf{r}) = p\psi_p(\mathbf{r}) \quad (2.2)$$

其中, 本征值 p 可以在正负无穷之间连续取值, 相应的本征波函数为

$$\psi_p(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{i\hbar^{-1} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} \quad (2.3)$$

2.1.2 波函数的表示

波函数可以在任意表象中写出来, 例如, $\Psi(\mathbf{r}, t)$, $\Phi(\mathbf{p}, t)$, $C_n(t)$ 分别表示坐标, 动量和任意力学量 F 表象中的波函数。对于断续谱表象下的波函数, 也可以写成列矩阵的形式。此外, 还可以用不涉及表象的狄拉克符号表示为 $|\Psi(t)\rangle$ 。

2.1.3 波函数的物理内涵

波函数的模方是具有物理意义的,它表示力学量取值概率密度或取值概率。例如,对于已经归一化的波函数 $\Psi(\mathbf{r},t), \Phi(\mathbf{p},t), C_n(t)$ 而言, $|\Psi(\mathbf{r},t)|^2, |\Phi(\mathbf{p},t)|^2, |C_n(t)|^2$ 分别表示力学量 $\mathbf{r}, \mathbf{p}$ 的取值概率密度和 F 的取值概率,它们是可观测量。进而可知,波函数 $\Psi(\mathbf{r},t), \Phi(\mathbf{p},t), C_n(t)$ 分别是力学量 $\mathbf{r}, \mathbf{p}$ 的取值概率密度幅和 F 的概率幅,它们是不可观测量。

2.2 波函数应满足的条件

2.2.1 模方可积条件

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\tau |\Psi(\mathbf{r},t)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \Psi^*(\mathbf{r},t) \Psi(\mathbf{r},t) = \text{有限值} \quad (2.4)$$

利用上式可以将波函数归一化。

2.2.2 自然条件

波函数还应该是单值、有限和连续的函数。

2.2.3 边界条件

1. 在位势的间断点处的连接条件

在位势的间断点 a 处,两个相邻波函数 $\psi_n(x), \psi_{n+1}(x)$ 及其 1 阶导数连续

$$\begin{aligned} \psi_n(a) &= \psi_{n+1}(a) \\ \psi'_n(x)|_a/m_n^* &= \psi'_{n+1}(x)|_a/m_{n+1}^* \end{aligned} \quad (2.5)$$

式中, m_n^*, m_{n+1}^* 分别为粒子在第 n 和第 $n+1$ 个区域中的有效质量。

当一个区域中的位势为无穷大时,只要求波函数连续。

2. δ 函数位势的连接条件

若粒子处于狄拉克 δ 函数位势 $V(x) = \pm V_0 a \delta(x)$ 中,则要求波函数连续,而波函数的 1 阶导数应满足

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = \pm 2m\hbar^{-2} V_0 a \psi(0) \quad (2.6)$$

其中, m 为粒子的质量; a 具有长度量纲; V_0 具有能量量纲。

2.3 具有特殊性质的波函数

2.3.1 本征态

定义:满足本征方程 $\hat{F}|n\rangle = f_n|n\rangle$ 的状态 $|n\rangle$ 称为 $\hat{F}$ 的本征态。

正交归一化条件

$$\langle m | n \rangle = \delta_{m,n} \quad (2.7)$$

封闭关系

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1 \quad (2.8)$$

测量: 在 $\hat{F}$ 的本征态 $|n\rangle$ 上, 测量力学量 F 得其本征值 f_n 。

2.3.2 定态

定义: 定态是能量取确定值的状态。

性质: 在定态之下, 不显含时间力学量的取值概率与平均值皆不随时间改变。

判据: 哈密顿算符不显含时间; 体系初始时刻的状态为定态。

2.3.3 束缚态与非束缚态

束缚态: 在无穷远处为零的状态为束缚态, 束缚态相应的能量本征值是断续的。

非束缚态: 在无穷远处不为零的状态为非束缚态, 非束缚态相应的能量本征值是连续的。

2.3.4 简并态与无简并态

简并态: 一个本征值对应 $f > 1$ 个线性独立的本征态时, 称该本征值简并, 所对应本征态为简并态, 简并度为 f 。

无简并态: 一个本征值只对应一个本征态时, 称该本征值无简并, 所对应本征态为无简并态, 简并度为 1。

2.3.5 正宇称态与负宇称态

正宇称态: 将波函数中坐标变量改变符号, 若得到的新波函数与原来的波函数相同, 则称该波函数描述的状态为正宇称态。

负宇称态: 将波函数中坐标变量改变符号, 若得到的新波函数与原来的波函数相差一个负号, 则称该波函数描述的状态为负宇称态。

2.3.6 耦合波函数与非耦合波函数

以两个自旋为 $\hbar/2$ 的粒子构成的体系为例, 其自旋量子数 $s_1 = s_2 = 1/2$, 总自旋量子数 $S = 0, 1$ 。

非耦合波函数为

$$|++\rangle, |--\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle \quad (2.9)$$

耦合波函数为

$$|00\rangle, |10\rangle, |1+1\rangle, |1-1\rangle \quad (2.10)$$

耦合波函数与非耦合波函数的关系为

$$\begin{aligned}
 |1+1\rangle &= |++\rangle \\
 |1-1\rangle &= |--\rangle \\
 |10\rangle &= 2^{-1/2} [|+-\rangle + |-+\rangle] \\
 |00\rangle &= 2^{-1/2} [|+-\rangle - |-+\rangle]
 \end{aligned} \tag{2.11}$$

其中, $|\pm\rangle_k = |1/2, \pm 1/2\rangle$ 为第 $k=1, 2$ 个粒子在 s^2, s_z 表象下的单粒子本征态, $|\pm\pm\rangle = |\pm\rangle_1 |\pm\rangle_2$ 表示两个单粒子本征态的直乘积, 是非耦合的二体波函数。

2.3.7 对称波函数与反对称波函数

反对称波函数: 全同费米子体系的状态用反对称波函数描述, 对二体问题而言, 有

$$\begin{aligned}
 \psi_a(x_1, x_2) &= 2^{-1/2} \begin{vmatrix} \varphi_1(x_1) & \varphi_1(x_2) \\ \varphi_2(x_1) & \varphi_2(x_2) \end{vmatrix} = \\
 &2^{-1/2} [\varphi_1(x_1)\varphi_2(x_2) - \varphi_1(x_2)\varphi_2(x_1)]
 \end{aligned} \tag{2.12}$$

对称波函数: 全同玻色子体系的状态用对称波函数描述, 对二体问题而言, 有

$$\psi_s(x_1, x_2) = 2^{-1/2} [\varphi_1(x_1)\varphi_2(x_2) + \varphi_1(x_2)\varphi_2(x_1)] \tag{2.13}$$

式中, $\varphi_i(x_k)$ 为粒子 k 的第 i 个本征态。

2.4 状态叠加原理与展开假设

2.4.1 状态叠加原理

若 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi_3\rangle, \dots, |\psi_n\rangle, \dots$ 为体系一系列可能的状态, 则 $|\psi\rangle = \sum_{m=1}^n c_m |\psi_m\rangle$ 也是体系的一个可能的状态, 其中, $c_1, c_2, c_3, \dots, c_n$ 为任意复常数。

2.4.2 展开假设

设力学量算符 $\hat{F}$ 满足本征方程

$$\hat{F} |n\rangle = f_n |n\rangle \tag{2.14}$$

其本征函数系 $\{|n\rangle\}$ 是正交、归一、完备的, 任意具有相同自变量的波函数 $|\psi\rangle$ 可以向 $\{|n\rangle\}$ 展开, 即

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \tag{2.15}$$

当 $|\psi\rangle$ 是归一化态矢时, $|c_n|^2$ 为力学量 F 在 $|\psi\rangle$ 状态上取 f_n 值的概率。进而可知, 在 $|\psi\rangle$ 状态上, 力学量 F 的平均值为

$$\bar{F} = \sum_n f_n |c_n|^2 \tag{2.16}$$

因此,可以把 c_n 视为 F 表象下的波函数。

综上所述,波函数是量子力学的精髓所在,一旦知道了体系的波函数,就可以得到任意力学量的取值概率与平均值,由此可见,波函数中蕴含着极其丰富的物理内涵。

3. 算 符

本节的主要内容为:量子力学中的算符;算符的对易关系;对称性与守恒量;两个力学量的取值;算符随时间的变化;算符的矩阵表示。

3.1 量子力学中的算符

在量子力学中,算符的作用是对波函数的一种运算或者操作,即将一个波函数变成另外一个波函数。

3.1.1 算符的类型

1. 线性算符

对任意的状态 $|\psi_1\rangle$ 与 $|\psi_2\rangle$ 而言,满足如下条件的算符 $\hat{F}$ 为线性算符

$$\hat{F}[c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle] = c_1\hat{F}|\psi_1\rangle + c_2\hat{F}|\psi_2\rangle \quad (3.1)$$

状态叠加原理要求量子力学中的算符是线性的。

2. 厄米算符

满足如下条件的算符 $\hat{F}$ 为厄米算符

$$\hat{F}^\dagger = \hat{F} \quad (3.2)$$

式中的符号“ $\dagger$ ”表示取厄米共轭。由于厄米算符的本征值是实数,可以与实验值相比较,故通常要求力学量算符是厄米的。

总之,力学量算符应该是线性厄米算符。

3. 幺正算符

满足如下条件的算符 $\hat{S}$ 为幺正算符

$$\hat{S}^\dagger = \hat{S}^{-1} \quad (3.3)$$

虽然幺正算符会将波函数与算符变成另外的形式,但是,幺正变换不改变力学量算符的本征值、两个算符之间的对易关系、力学量的取值概率与平均值等有物理意义的结果。幺正算符通常用于表象之间或者绘景之间的变换,实际上,幺正算符是一个变换算符。

3.1.2 常用算符

1. 能量算符

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (3.4)$$

2. 动量算符

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{p}} &= -i\hbar \vec{\nabla} = \hat{p}_x \mathbf{i} + \hat{p}_y \mathbf{j} + \hat{p}_z \mathbf{k} \\ -\infty &< p < \infty \end{aligned} \quad (3.5)$$

其分量算符分别为

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \quad (3.6)$$

3. 自旋($\hbar/2$) 算符

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{s}} &= \hat{s}_x \mathbf{i} + \hat{s}_y \mathbf{j} + \hat{s}_z \mathbf{k} \\ s &= 1/2 \end{aligned} \quad (3.7)$$

在 s^2, s_z 表象下, 其分量算符分别为

$$\hat{s}_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

4. 泡利算符

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}} = 2\hbar^{-1} \hat{\mathbf{s}} = \hat{\sigma}_x \mathbf{i} + \hat{\sigma}_y \mathbf{j} + \hat{\sigma}_z \mathbf{k} \quad (3.9)$$

在泡利表象下, 其分量算符分别为

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

5. 总自旋算符

$$\hat{\mathbf{S}} = \sum_{i=1}^N \hat{\mathbf{s}}_i \quad (3.11)$$

其中 N 为总粒子数。

6. 轨道角动量算符

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{l}} &= \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}} \\ l &= 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (3.12)$$

其分量算符分别为

$$\hat{l}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, \quad \hat{l}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z, \quad \hat{l}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x \quad (3.13)$$

7. 总轨道角动量算符

$$\hat{\mathbf{L}} = \sum_{i=1}^N \hat{\mathbf{l}}_i \quad (3.14)$$