小蓝书《量子力学典型题精讲》第7章 + 东哥强化班三维问题

三维（氢原子/中心力场/电磁场/Landau）——
答案解析详注（17+12 题全）

体例说明：每题含【题目】【分析】【解答】三部分；【解答】严格按原书流程，原书省略的推导以蓝底【补】块给出；个别原书排印笔误已在对应位置标注更正。

7-1 二粒子体系的相对动量、总动量与总轨道角动量

【题目】 二粒子体系的两个粒子的质量分别为 m_1 和 m_2，位矢分别为 $\boldsymbol{r}_1$ 和 $\boldsymbol{r}_2$，求：

(1) 相对动量；(2) 总动量；(3)

总轨道角动量在坐标表象中的表示。

【解答】 设质心坐标为 $\boldsymbol{R}$，相对坐标为 $\boldsymbol{r}$，则

$$\boldsymbol{R}=\frac{1}{M}(m_1\boldsymbol{r}_1+m_2\boldsymbol{r}_2),\quad (M=m_1+m_2)$$

$$\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2$$

由此解出，

$$\boldsymbol{r}_1=\boldsymbol{R}+\frac{m_2}{M}\boldsymbol{r},\quad \boldsymbol{r}_2=\boldsymbol{R}-\frac{m_1}{M}\boldsymbol{r}$$

(1) 相对动量：设两个粒子的折合质量为 μ，则相对动量

$$\hat{\boldsymbol{P}}_r=\mu\dot{\boldsymbol{r}}=\frac{m_1m_2}{M}(\dot{\boldsymbol{r}}_1-\dot{\boldsymbol{r}}_2)=\frac{m_2}{M}\hat{\boldsymbol{P}}_1-\frac{m_1}{M}\hat{\boldsymbol{P}}_2$$

$$=\frac{m_2}{M}(-\mathrm{i}\hbar\nabla_{\boldsymbol{r}_1})-\frac{m_1}{M}(-\mathrm{i}\hbar\nabla_{\boldsymbol{r}_2})$$

因为

$$\nabla_{\boldsymbol{r}_1}\equiv\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}_1}=\frac{\partial\boldsymbol{R}}{\partial\boldsymbol{r}_1}\cdot\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{R}}+\frac{\partial\boldsymbol{r}}{\partial\boldsymbol{r}_1}\cdot\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}=\frac{m_1}{M}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{R}}+\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}$$

$$\nabla_{\boldsymbol{r}_2} \equiv \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}_2} = \frac{\partial \boldsymbol{R}}{\partial \boldsymbol{r}_2} \cdot \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{R}} + \frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial \boldsymbol{r}_2} \cdot \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}} = \frac{m_2}{M} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{R}} - \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}$$

因此，

$$\hat{\boldsymbol{P}}_r = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{M}(m_2 \nabla_{\boldsymbol{r}_1} - m_1 \nabla_{\boldsymbol{r}_2})$$

$$= -\frac{\mathrm{i}\hbar}{M}\left(\frac{m_1 m_2}{M}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{R}} + m_2 \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}} - \frac{m_1 m_2}{M}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{R}} + m_1 \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\right)$$

$$= -\frac{\mathrm{i}\hbar}{M}(m_1 + m_2)\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}} = -\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}} = -\mathrm{i}\hbar \nabla_{\boldsymbol{r}}$$

(2) 总动量：

$$\hat{\boldsymbol{P}}_R = \hat{\boldsymbol{P}}_1 + \hat{\boldsymbol{P}}_2 = -\mathrm{i}\hbar \nabla_{\boldsymbol{r}_1} - \mathrm{i}\hbar \nabla_{\boldsymbol{r}_2}$$

但由于

$$\nabla_{\boldsymbol{r}_1} = \frac{m_1}{M}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{R}} + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}, \quad \nabla_{\boldsymbol{r}_2} = \frac{m_2}{M}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{R}} - \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}$$

因此

$$\hat{\boldsymbol{P}}_R = -\mathrm{i}\hbar(\nabla_{\boldsymbol{r}_1} + \nabla_{\boldsymbol{r}_2}) = -\mathrm{i}\hbar\left(\frac{m_1 + m_2}{M}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{R}}\right) = -\mathrm{i}\hbar \nabla_{\boldsymbol{R}}$$

(3) 总轨道角动量：

$$\hat{\boldsymbol{l}} = \hat{\boldsymbol{l}}_1 + \hat{\boldsymbol{l}}_2 = \boldsymbol{r}_1 \times \hat{\boldsymbol{P}}_1 + \boldsymbol{r}_2 \times \hat{\boldsymbol{P}}_2$$

因为

$$\hat{\boldsymbol{P}}_1 = -\mathrm{i}\hbar \nabla_{\boldsymbol{r}_1} = (-\mathrm{i}\hbar)\left(\frac{m_1}{M}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{R}} + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\right), \quad \boldsymbol{r}_1 = \boldsymbol{R} + \frac{m_2}{M}\boldsymbol{r}$$

$$\hat{\boldsymbol{P}}_2 = -\mathrm{i}\hbar \nabla_{\boldsymbol{r}_2} = (-\mathrm{i}\hbar)\left(\frac{m_2}{M}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{R}} - \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\right), \quad \boldsymbol{r}_2 = \boldsymbol{R} - \frac{m_1}{M}\boldsymbol{r}$$

因此，

$$\hat{\boldsymbol{l}}=-\mathrm{i}\hbar\left(\boldsymbol{R}+\frac{m_2}{M}\boldsymbol{r}\right)\times\left(\frac{m_1}{M}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{R}}+\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}\right)-\mathrm{i}\hbar\left(\boldsymbol{R}-\frac{m_1}{M}\boldsymbol{r}\right)\times\left(\frac{m_2}{M}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{R}}-\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}\right)$$

$$=-\mathrm{i}\hbar\left(\frac{m_1}{M}\boldsymbol{R}\times\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{R}}+\frac{m_1m_2}{M^2}\boldsymbol{r}\times\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{R}}+\boldsymbol{R}\times\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}+\frac{m_2}{M}\boldsymbol{r}\times\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}\right)-\mathrm{i}\hbar\left(\frac{m_2}{M}\boldsymbol{R}\times\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{R}}-\frac{m_1m_2}{M^2}\boldsymbol{r}\times\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{R}}-\boldsymbol{R}\times\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}+\frac{m_1}{M}\boldsymbol{r}\times\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}\right)$$

$$=-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{R}\times\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{R}}-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{r}\times\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}=\boldsymbol{R}\times\hat{\boldsymbol{P}}_R+\boldsymbol{r}\times\hat{\boldsymbol{P}}_r$$

$$=\hat{\boldsymbol{l}}_R+\hat{\boldsymbol{l}}_r$$

7-2 氢原子 1s 电子动能与势能的平均值

【题目】 求氢原子 $1s$ 电子的动能、势能的平均值。已知 $1s$ 电子的波函数为

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

【解答】 根据平均值公式，动能的平均值

$$\overline{T}=\int\psi_{100}^{*}\hat{T}\psi_{100}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\int\psi_{100}^{*}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_r^2\right)\psi_{100}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$

$$=\frac{4\pi}{\pi a_0^3}\int_0^{\infty}r^2\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\mathrm{d}r$$

$$=\frac{2\hbar^2}{ma_0^4}\int_0^{\infty}\left(2r-\frac{r^2}{a_0}\right)\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\mathrm{d}r=\frac{me^4}{2\hbar^2}$$

势能的平均值

$$\overline{V}=\int\psi_{100}^{*}V(r)\psi_{100}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\frac{4\pi}{\pi a_0^3}\int_0^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\left(-\frac{e^2}{r}\right)\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}r^2\mathrm{d}r$$

$$=-\frac{4e^2}{a_0^3}\int_0^{\infty}r\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\mathrm{d}r=-\frac{me^4}{\hbar^2}$$

所以

$$\overline{E}=\overline{T}+\overline{V}=-\frac{me^4}{2\hbar^2}$$

这就是氢原子的基态能量。我们看到，由于原子的势能（负）的绝对值大于动能，因此总能量取负值。

【补】径向求导：$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\mathrm{e}^{-r/a_0}\right)=\left(-\frac{2r}{a_0}+\frac{r^2}{a_0^2}\right)\mathrm{e}^{-r/a_0}$，乘以 $-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{1}{r^2}$ 与体积元中的 r^2 并提出常数，即得第三行。利用 $\int_0^\infty r\mathrm{e}^{-2r/a_0}\mathrm{d}r=\frac{a_0^2}{4}$、$\int_0^\infty r^2\mathrm{e}^{-2r/a_0}\mathrm{d}r=\frac{a_0^3}{4}$，得 $\int_0^\infty\left(2r-\frac{r^2}{a_0}\right)\mathrm{e}^{-2r/a_0}\mathrm{d}r=\frac{a_0^2}{2}-\frac{a_0^2}{4}=\frac{a_0^2}{4}$ 故 $\overline{T}=\frac{2\hbar^2}{ma_0^4}\cdot\frac{a_0^2}{4}=\frac{\hbar^2}{2ma_0^2}$；再代入玻尔半径 $a_0=\frac{\hbar^2}{me^2}$，即 $\overline{T}=\frac{me^4}{2\hbar^2}$。同理 $\overline{V}=-\frac{4e^2}{a_0^3}\cdot\frac{a_0^2}{4}=-\frac{e^2}{a_0}=-\frac{me^4}{\hbar^2}$。

7-3 氢原子基态电子的动量几率分布

【题目】 已知氢原子的基态波函数为

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

求基态电子的动量几率分布。

【解答】 设基态电子在动量表象中的波函数为 $\varphi(\boldsymbol{p})$，则

$$\varphi(\boldsymbol{p})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int\psi_{100}(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\frac{1}{\pi^2(2a_0\hbar)^{3/2}}\int\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$

选取动量 $\boldsymbol{p}$ 方向为 z 轴，则在球坐标系里 $\varphi(\boldsymbol{p})$ 可写为

$$\varphi(\boldsymbol{p})=\frac{1}{\pi^2(2a_0\hbar)^{3/2}}\int\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}pr\cos\theta}r^2\mathrm{d}r\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi$$

$$=\frac{2}{\pi(2a_0\hbar)^{3/2}}\int_0^{\infty}\left[\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}\int_{-1}^{1}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}pr\cos\theta}\mathrm{d}(\cos\theta)\right]r^2\mathrm{d}r$$

$$=\frac{1}{\pi p(2a_0^3\hbar)^{1/2}}\int_0^{\infty}\left[\mathrm{e}^{-r\left(\frac{1}{a_0}+\mathrm{i}\frac{p}{\hbar}\right)}-\mathrm{e}^{-r\left(\frac{1}{a_0}-\mathrm{i}\frac{p}{\hbar}\right)}\right]r\mathrm{d}r$$

$$=\frac{1}{\pi}\left(\frac{2a_0}{\hbar}\right)^{3/2}\frac{1}{\left[1+(p^2/\hbar^2)a_0^2\right]^2}$$

因此，动量几率分布

$$|\varphi(\boldsymbol{p})|^2=\frac{8a_0^3}{\pi^2\hbar^3\left[1+(p^2a_0^2/\hbar^2)\right]^4}$$

容易证明

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\varphi(\boldsymbol{p})|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}=\int|\varphi(\boldsymbol{p})|^2 4\pi p^2\mathrm{d}p=\frac{32}{\pi}\int\frac{x^2\mathrm{d}x}{(1+x^2)^4}=1$$

其中，$x\equiv pa_0/\hbar$。

【补】对 θ 的积分：令 $u=\cos\theta$，

$$\int_{-1}^{1} e^{-ipru/\hbar}\,du = \frac{\hbar}{ipr}\left(e^{ipr/\hbar} - e^{-ipr/\hbar}\right)$$

代入并提出因子后即得第三行的形式。再令 $a = \frac{1}{a_0} + i\frac{p}{\hbar}$，则

$$\int_0^{\infty} \left[e^{-ar} - e^{-a^* r}\right] r\,dr = \frac{1}{a^2} - \frac{1}{a^{*2}} = \frac{a^{*2} - a^2}{(aa^*)^2} = \frac{-4ip/(\hbar a_0)}{(1/a_0^2 + p^2/\hbar^2)^2}$$

（括号的次序吸收掉因子 i 与符号），整理即得 $\varphi(\boldsymbol{p}) = \frac{1}{\pi}\left(\frac{2a_0}{\hbar}\right)^{3/2} \frac{1}{\left[1 + p^2 a_0^2/\hbar^2\right]^2}$。归一化验证中，代入 $x = pa_0/\hbar$ 后

$$\frac{32}{\pi}\int_0^{\infty} \frac{x^2\,dx}{(1+x^2)^4} = \frac{32}{\pi}\cdot\frac{\pi}{32} = 1$$

（用 $x = \tan t$ 或 Γ 函数可算出 $\int_0^{\infty} \frac{x^2}{(1+x^2)^4}dx = \frac{\pi}{32}$）。

7-4 类氢二粒子体系的能谱

【题目】

利用氢原子能级公式，讨论下列体系的能谱。

(1) 正、负电子 e^+、e^- 的束缚体系。

(2) μ^- 子原子（μ^- 粒子绕质子 p^+ 运动，$m_\mu = 200 m_e$）。

(3) μ^+、μ^- 的束缚体系。

【解答】 三个问题都是二粒子体系，并且两体之间的相互作用势都是 Coulomb 势 $V=-\frac{e^2}{r}$，差别只是在于它们的折合质量不同，因此，三个体系的能谱都与氢原子具有相同形式：

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

其中的折合质量均可以用电子的质量表示。

(1) 正、负电子体系：折合质量

$$\mu=\frac{m_1 m_2}{m_1+m_2}=\frac{m_e^2}{2m_e}=\frac{1}{2}m_e$$

因此，体系的能谱

$$E_n=-\frac{m_e e^4}{4\hbar^2 n^2}$$

(2) μ^- 子原子体系：所谓的 μ^- 子原子体系就是氢原子中的电子被 μ^- 子替换而形成的原子。因此，μ^- 子原子体系的折合质量

$$\mu=\frac{m_p m_\mu}{m_p+m_\mu}=\frac{200 m_p m_e}{m_p+200m_e}$$

能谱

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2 n^2}$$

其中的 μ 代表 μ^- 子原子体系的折合质量。

(3) μ^+、μ^- 束缚体系：折合质量

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = \frac{m_\mu^2}{2m_\mu} = \frac{1}{2}m_\mu$$

因此，能谱

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{m_\mu e^4}{4\hbar^2 n^2} = -\frac{200 m_e e^4}{4\hbar^2 n^2} = -\frac{50 m_e e^4}{\hbar^2 n^2}$$

7-5 对易关系 $\frac{1}{2}[\nabla^2, r] = \frac{1}{r} + \frac{\partial}{\partial r}$

【题目】 求证：$\frac{1}{2}[\nabla^2, r] = \frac{1}{r} + \frac{\partial}{\partial r}$。

【解答】 因为

$$\frac{1}{2}[\nabla^2, r]\psi = \frac{1}{2}\left(\nabla^2(r\psi) - r\nabla^2\psi\right)$$

$$= \frac{1}{2}\left(\nabla\cdot\nabla(r\psi) - r\nabla^2\psi\right)$$

$$= \frac{1}{2}\left[\nabla\cdot(\nabla r\cdot\psi) + \nabla\cdot(r\nabla\psi) - r\nabla^2\psi\right]$$

$$= \frac{1}{2}\left[\nabla\cdot(\nabla r)\cdot\psi + 2\nabla r\cdot\nabla\psi + r\nabla^2\psi - r\nabla^2\psi\right]$$

$$= \frac{1}{2}[\nabla\cdot\nabla r\,\psi + 2\nabla r\cdot\nabla\psi]$$

$$= \frac{1}{2}\left\{\left(\nabla\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)\psi + 2\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\nabla\psi\right\}$$

但由于

$$\nabla\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}=\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{x}{r}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{y}{r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{z}{r}\right)=\frac{3}{r}-\frac{r^2}{r^3}=\frac{2}{r}$$

所以

$$\frac{1}{2}[\nabla^2,r]\psi=\frac{1}{2}\left\{\frac{2}{r}+2\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\nabla\right\}\psi$$

又因为

$$\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\nabla=\frac{1}{r}\left(x\frac{\partial}{\partial x}+y\frac{\partial}{\partial y}+z\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

$$=\frac{1}{r}\left(x\frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r}+y\frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r}+z\frac{\partial r}{\partial z}\frac{\partial}{\partial r}\right)$$

$$=\frac{1}{r}\left(\frac{x^2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{y^2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{z^2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)=\frac{\partial}{\partial r}$$

所以

$$\frac{1}{2}[\nabla^2,r]=\frac{1}{r}+\frac{\partial}{\partial r}$$

7-6 氢原子基态的 Δx、Δp_x 与不确定性关系

【题目】 氢原子的基态波函数为 $\psi_{100}=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}$。求：在基态下涨落 Δx 和 Δp_x，并验证不确定性关系。

【解答】 因为 $(\Delta x)^2=\overline{x^2}-\bar{x}^2$，$(\Delta p_x)^2=\overline{p_x^2}-\bar{p}_x^2$，因此，首先需要求 $\bar{x}$，$\bar{p}_x$，$\overline{x^2}$，$\overline{p_x^2}$。

$$\bar{x} = (\psi_{100}, x\psi_{100}) = \int x|\psi_{100}|^2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = 0,$$

因为 x 是奇函数，而 $|\psi_{100}|^2 = \frac{1}{\pi a_0^3}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}$ 为偶函数，因此，$x|\psi_{100}|^2$ 在对称积分区内的积分为零。同理，可以证明，$\bar{p}_x = 0$。另一方面，

$$\overline{r^2} = \int |\psi_{100}|^2 r^2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \frac{1}{\pi a_0^3}\int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}} r^4 \mathrm{d}r \sin\theta \mathrm{d}\theta \mathrm{d}\varphi$$

$$= \frac{4}{a_0^3}\int_0^\infty \mathrm{e}^{-2\left(\frac{r}{a_0}\right)} r^4 \mathrm{d}r = 4a_0^2 \int_0^\infty \mathrm{e}^{-2x} x^4 \mathrm{d}x = 4a_0^2 \frac{\Gamma(5)}{2^5} = 3a_0^2$$

其中 $x = \frac{r}{a_0}$。

$$\overline{p^2} = (\psi_{100}, \hat{p}^2\psi_{100}) = (\hat{p}\psi_{100}, \hat{p}\psi_{100})$$

$$= \int |\hat{p}\psi_{100}|^2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \hbar^2 \int |\nabla\psi_{100}|^2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$

但是，考虑到 ψ_{100} 与 θ, φ 无关，

$$\nabla = \boldsymbol{i}\frac{\partial}{\partial x} + \boldsymbol{j}\frac{\partial}{\partial y} + \boldsymbol{k}\frac{\partial}{\partial z} = \boldsymbol{i}\frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r} + \boldsymbol{j}\frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial}{\partial r} + \boldsymbol{k}\frac{\partial r}{\partial z}\frac{\partial}{\partial r}$$

$$= \boldsymbol{i}\frac{x}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \boldsymbol{j}\frac{y}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \boldsymbol{k}\frac{z}{r}\frac{\partial}{\partial r} = \frac{\boldsymbol{r}}{r}\frac{\partial}{\partial r}, \quad \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2}$$

因此

$$\overline{p^2} = \hbar^2 \int \left|\frac{\partial}{\partial r}\psi_{100}\right|^2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \hbar^2 \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{1}{\pi a_0^5} \mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}} r^2 \mathrm{d}r \sin\theta \mathrm{d}\theta \mathrm{d}\varphi$$

$$= \frac{4\hbar^2}{a_0^5}\int_0^\infty \mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}} r^2 \mathrm{d}r = \frac{4\hbar^2}{a_0^2}\frac{\Gamma(3)}{2^3} = \frac{\hbar^2}{a_0^2}$$

由于氢原子的波函数 ψ_{100} 与 θ,φ 无关，即球对称，因此，电子的位置、动量的几率分布对 x,y,z 也是对称的。即

$$\overline{x^2}=\overline{y^2}=\overline{z^2}=\frac{1}{3}\overline{r^2}=a_0^2,\quad \overline{p_x^2}=\overline{p_y^2}=\overline{p_z^2}=\frac{1}{3}\overline{p^2}=\frac{\hbar^2}{3a_0^2}$$

由此得到

$$\Delta x=\sqrt{\overline{x^2}-\bar{x}^2}=a_0,\quad \Delta p_x=\sqrt{\overline{p_x^2}-\bar{p}_x^2}=\frac{\hbar}{\sqrt{3}\,a_0}$$

所以

$$\Delta x\cdot\Delta p_x=\frac{\hbar}{\sqrt{3}}>\frac{\hbar}{2}$$

符合不确定性关系。

【补】$\bar{p}_x=0$ 的证明：
$\hat{p}_x\psi_{100}=-\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial\psi_{100}}{\partial x}=-\mathrm{i}\hbar\dfrac{x}{r}\dfrac{\mathrm{d}\psi_{100}}{\mathrm{d}r}=\dfrac{\mathrm{i}\hbar}{a_0}\dfrac{x}{r}\psi_{100}$，故 $\bar{p}_x=\dfrac{\mathrm{i}\hbar}{a_0}\int\dfrac{x}{r}|\psi_{100}|^2\mathrm{d}^3\mathbf{r}$，被积函数含奇函数 x，在对称积分区内积分为零。又 $\dfrac{\mathrm{d}\psi_{100}}{\mathrm{d}r}=-\dfrac{1}{a_0}\psi_{100}$，故 $\left|\dfrac{\partial\psi_{100}}{\partial r}\right|^2=\dfrac{1}{\pi a_0^5}\mathrm{e}^{-2r/a_0}$，这就是上面 $\overline{p^2}$ 被积函数中 $1/a_0^5$ 的来源；径向积分 $\int_0^\infty \mathrm{e}^{-2r/a_0}r^2\mathrm{d}r=a_0^3\dfrac{\Gamma(3)}{2^3}=\dfrac{a_0^3}{4}$。

7-7 氢原子叠加态的能量平均值与 $|lm\rangle=|11\rangle$ 的几率

【题目】 设在 $t=0$ 时刻，氢原子处于状态：

$$|\psi_0\rangle=\frac{1}{\sqrt{10}}\left[2|100\rangle+|210\rangle+\sqrt{2}\,|211\rangle+\sqrt{3}\,|21-1\rangle\right]$$

求：(1) 在 $|\psi_0\rangle$ 态下能量的平均值。

(2) 在 $t>0$ 时，体系处于 $|lm\rangle=|11\rangle$ 态的几率。

【解答】 (1) 能量平均值 $\overline{E}=\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle$，$\hat{H}$ 为 Hamilton 量。对于 $|\psi_0\rangle$ 态，由于

$$\hat{H}|\psi_0\rangle=\hat{H}\left[\frac{1}{\sqrt{10}}\left(2|100\rangle+|210\rangle+\sqrt{2}\,|211\rangle+\sqrt{3}\,|21-1\rangle\right)\right]$$

$$=\frac{1}{\sqrt{10}}\left\{2E_1|100\rangle+E_2|210\rangle+\sqrt{2}E_2|211\rangle+\sqrt{3}E_2|21-1\rangle\right\}$$

因此，

$$\overline{E}=\langle\psi_0|\hat{H}|\psi_0\rangle=\frac{1}{10}(4E_1+E_2+2E_2+3E_2)$$

$$=\frac{1}{10}(4E_1+6E_2)=\frac{11}{20}E_1=-\frac{11\mu e^4}{40\hbar^2}$$

(2) 状态 $|11\rangle$ 出现的几率为

$$P=|\langle n11|\psi(t)\rangle|^2=\left|\langle n11|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\psi_0\rangle\right|^2$$

$$=\frac{1}{10}\left|\langle n11|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\left(2|100\rangle+|210\rangle+\sqrt{2}\,|211\rangle+\sqrt{3}\,|21-1\rangle\right)\right|^2$$

$$= \frac{1}{5}\left|\langle n11|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|211\rangle\right|^2$$

$$= \frac{1}{5}\langle 211|e^{\frac{i}{\hbar}Ht}|n11\rangle\langle n11|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|211\rangle$$

$$= \frac{1}{5}e^{\frac{i}{\hbar}E_n t}\langle 211|n11\rangle\langle n11|211\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

$$= \frac{1}{5}|\langle n11|211\rangle|^2 = \frac{1}{5}\delta_{n2}$$

【补】第二到第三步：由本征态正交性，$\langle n11|100\rangle = 0$，$\langle n11|210\rangle = 0$（磁量子数不同），$\langle n11|21-1\rangle = 0$，只有 $|211\rangle$ 项有贡献；其系数 $\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{10}}$ 的模方提出因子 $\frac{2}{10} = \frac{1}{5}$。又 $|211\rangle$ 是 $\hat{H}$ 的本征态，$e^{-i\hat{H}t/\hbar}|211\rangle = e^{-iE_2 t/\hbar}|211\rangle$，相位与厄米共轭因子相消，故几率与时间无关；由 $\langle n11|211\rangle = \delta_{n2}$，$n=2$ 时 $P=\frac{1}{5}$，$n\neq 2$ 时 $P=0$。第 (1) 问中用到氢原子能级 $E_2 = \frac{E_1}{4}$ 与 $E_1 = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}$，故 $\overline{E} = \frac{1}{10}\left(4+\frac{6}{4}\right)E_1 = \frac{11}{20}E_1 = -\frac{11\mu e^4}{40\hbar^2}$。

7-8 氢原子基态电子处于经典禁区的几率

【题目】 氢原子处于基态 $\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}e^{-\frac{r}{a_0}}$，求氢原子中的电子处于经典不允许区（动能 $T<0$

）的几率。

【解答】 电子的动能 $T=E-V$。对氢原子，$E_n=-\dfrac{e^2}{2a_0n^2}$，$V=-\dfrac{e^2}{r}$，因此

$$T=-\frac{e^2}{2a_0n^2}+\frac{e^2}{r}$$

对经典禁区 $T<0$，即 $e^2\left(\dfrac{1}{r}-\dfrac{1}{2a_0n^2}\right)<0$ 或 $r>2a_0n^2$ 的区域为经典禁区。对 ψ_{100}，由于 $n=1$，$r>2a_0$ 为经典禁区。所以，基态电子处于经典禁区的几率为

$$\rho=\int|\psi_{100}|^2r^2\sin\theta\mathrm{d}r\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi=4\pi\int_{2a_0}^{\infty}|\psi_{100}|^2r^2\mathrm{d}r=\frac{4}{a_0^3}\int_{2a_0}^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}r^2\mathrm{d}r$$

利用分部积分法得

$$\int_{2a_0}^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}r^2\mathrm{d}r=\int_{2a_0}^{\infty}\left(-\frac{a_0}{2}\right)r^2\mathrm{d}\left(\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\right)$$

$$=\left(-\frac{a_0}{2}\right)r^2\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\Big|_{2a_0}^{\infty}+\frac{a_0}{2}\int_{2a_0}^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}2r\mathrm{d}r$$

$$=2a_0^3\mathrm{e}^{-4}-\frac{a_0^2}{4}2r\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\Big|_{2a_0}^{\infty}+\frac{a_0^2}{4}\cdot2\int_{2a_0}^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}\mathrm{d}r$$

$$=2a_0^3\mathrm{e}^{-4}+a_0^3\mathrm{e}^{-4}+\frac{1}{4}a_0^3\mathrm{e}^{-4}=\frac{13}{4}a_0^3\mathrm{e}^{-4}$$

因此，$\rho=13\mathrm{e}^{-4}$ 为电子出现在经典禁区的几率。要记住，尽管电子的动能取负值的可能性存在，但基态电子动能的平均值要大于零（见本章习题第 2 题）。

7-9 β 衰变后 1s 电子仍处于 k 态的几率

【题目】 带电荷 Ze 的某一原子突然发生 β 衰变（原子核中的一个中子发射一个电子后转变成质子）后变成核电荷为 $(Z+1)e$ 的新原子。求：衰变前原子中的一个 k 态电子（处于 $1s$ 态的电子）在衰变后的新原子中仍处于 k 态的几率。

【解答】 电荷为 Ze 的原子核经 β 衰变，转变成电荷为 $(Z+1)e$ 的原子核。因此，原子核的 Coulomb 势由原来的 $V=-\frac{Ze^2}{r}$ 变为 $V=-\frac{(Z+1)e}{r}$。势能的改变导致核外电子状态的改变。设衰变后新原子中电子的状态矢量为 $\psi_{nlm}(Z+1,r)$。

把衰变前 k 电子的波函数用 ψ_{nlm} 展开，则

$$\psi_{100}(Z,r)=\sum_{nlm}c_{nlm}\psi_{nlm}(Z+1,r)$$

因此，k 电子在衰变后的新原子核中处于 $\psi_{nlm}(Z+1,r)$ 态的几率为

$$\rho=|c_{nlm}|^2$$

其中，

$$c_{nlm} = (\psi_{nlm}, \psi_{100}) \ (1)$$

由于衰变是一个非常迅速的过程，在衰变发生的一瞬间，核外的电子状态来不及改变，在新原子中短暂时间内仍可以处于 $\psi_{100}(Z+1, r)$ 态的几率为 $\rho = |c_{100}|^2$。根据式 (1)，

$$c_{100} = (\psi_{100}(Z+1), \psi_{100}(Z))$$

但是，

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

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

因此，

$$c_{100} = \frac{1}{\pi} \left(\frac{Z(Z+1)}{a_0^2}\right)^{3/2} \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \mathrm{e}^{-(2Z+1)r/a_0} r^2 \mathrm{d}r \sin\theta \mathrm{d}\theta \mathrm{d}\varphi$$

$$= 4 \left(\frac{Z(Z+1)}{a_0^2}\right)^{3/2} \int_0^{\infty} \mathrm{e}^{-(2Z+1)r/a_0} r^2 \mathrm{d}r$$

$$= \left\{\frac{Z(Z+1)}{[Z+(1/2)]^2}\right\}^{3/2}$$

$$\rho = |c_{100}|^2 = \frac{Z^3(Z+1)^3}{[Z+(1/2)]^6}$$

【补】径向积分：$\int_0^{\infty} \mathrm{e}^{-(2Z+1)r/a_0} r^2 \mathrm{d}r = \frac{2a_0^3}{(2Z+1)^3}$，故

$$c_{100}=4\frac{[Z(Z+1)]^{3/2}}{a_0^3}\cdot\frac{2a_0^3}{(2Z+1)^3}=\frac{8[Z(Z+1)]^{3/2}}{(2Z+1)^3}$$

利用 $[Z+(1/2)]^2=\dfrac{(2Z+1)^2}{4}$，即 $\left\{\dfrac{Z(Z+1)}{[Z+(1/2)]^2}\right\}^{3/2}=\dfrac{8[Z(Z+1)]^{3/2}}{(2Z+1)^3}$，与上式一致。注意解答开头把新势印为 $V=-\dfrac{(Z+1)e}{r}$，按上下文应为 $-\dfrac{(Z+1)e^2}{r}$（排印漏了 e 的平方），此处照原书转写。

7-10 两同心球面间粒子的基态

【题目】 设一质量为 m 的粒子限制在半径分别为 a 和 b（$b>a$）的两个同心球面之间运动，两个球面之间的势 $V(r)=0$，求粒子的基态（$n=1$，$l=0$）波函数和能量。

【解答】 设粒子的径向波函数为 $R(r)=\chi(r)/r$，则 $\chi(r)$ 满足方程：

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

由于在两个同心球面之间 $V(r)=0$，且对基态 $l=0$，方程化为

$$\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}r^2}+k^2\chi=0,\quad k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$$

边界条件：$\chi(a)=\chi(b)=0$，方程的解为

$$\chi=A\sin(kr+\delta)$$

利用 $\chi(a)=0$ 得

$$A\sin(ka+\delta)=0$$

所以

$$\delta=-ka,$$

$$\chi(r)=A\sin k(r-a)$$

由 $\chi(b)=0$ 得

$$A\sin k(b-a)=0$$

所以

$$k=\frac{n\pi}{b-a},\quad (n=1,2,\cdots)$$

从而得，能量本征值为

$$E_n=\frac{\hbar^2k^2}{2m}=\frac{\hbar^2\pi^2n^2}{2m(b-a)^2}$$

对于基态

$$E_1=\frac{\hbar^2\pi^2}{2m(b-a)^2}$$

由归一化条件：$\int_a^b|R(r)|^2r^2\mathrm{d}r=\int_a^b|\chi(r)|^2\mathrm{d}r=1$，即

$$A^2\int_a^b \sin^2 k(r-a)\mathrm{d}r = 1,$$

得

$$A = \sqrt{\frac{2}{b-a}}$$

因此，

$$R(r) = \sqrt{\frac{2}{b-a}}\frac{1}{r}\sin\frac{\pi(r-a)}{b-a}$$

因为 $Y_{00} = \dfrac{1}{\sqrt{4\pi}}$，最后得

$$\psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(b-a)}}\frac{1}{r}\sin\frac{\pi(r-a)}{b-a}$$

【补】归一化积分：对基态 $k = \dfrac{\pi}{b-a}$，

$$\int_a^b \sin^2 k(r-a)\mathrm{d}r = \frac{b-a}{2} - \frac{\sin 2k(b-a)}{4k} = \frac{b-a}{2}$$

故 $A^2\cdot\dfrac{b-a}{2} = 1$，得 $A = \sqrt{\dfrac{2}{b-a}}$。最后由 $\psi_{100}(r) = R(r)Y_{00}$ 并乘 $\dfrac{1}{\sqrt{4\pi}}$ 即得末式。

7-11 速度算符 $\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{v} = \frac{\mathrm{i}\hbar q}{M^2c}\boldsymbol{B}$

【题目】 定义 $\boldsymbol{v} = \dfrac{1}{M}\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \dfrac{q}{c}\boldsymbol{A}\right) = \dfrac{1}{M}\left(-\mathrm{i}\hbar\nabla - \dfrac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)$（速度算符）。求证：$\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{v} = \dfrac{\mathrm{i}\hbar q}{M^2c}\boldsymbol{B}$。

【解答】

$$(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{v})_x = v_y v_z - v_z v_y = [v_y, v_z]$$

$$= \frac{1}{M^2}\left[\hat{p}_y - \frac{q}{c}A_y, \hat{p}_z - \frac{q}{c}A_z\right]$$

$$= \frac{1}{M^2}\left\{\left[-\frac{q}{c}A_y, \hat{p}_z\right] + \left[\hat{p}_y, -\frac{q}{c}A_z\right]\right\}$$

$$= -\frac{q}{cM^2}\left\{\left[A_y, -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial z}\right] + \left[-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial y}, A_z\right]\right\}$$

因为

$$\left[A_y, -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial z}\right]\psi = -\mathrm{i}\hbar A_y\frac{\partial\psi}{\partial z} + \mathrm{i}\hbar\frac{\partial A_y}{\partial z}\psi + \mathrm{i}\hbar A_y\frac{\partial\psi}{\partial z} = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial A_y}{\partial z}\psi$$

所以

$$\left[A_y, -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial z}\right] = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial A_y}{\partial z}$$

同理

$$\left[-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial y}, A_z\right]\psi = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial A_z}{\partial y}\psi - \mathrm{i}\hbar A_z\frac{\partial\psi}{\partial y} + \mathrm{i}\hbar A_z\frac{\partial\psi}{\partial y} = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial A_z}{\partial y}\psi$$

$$\left[-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial y}, A_z\right] = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial A_z}{\partial y}$$

从而得到

$$(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{v})_x = -\frac{q\mathrm{i}\hbar}{cM^2}\left(\frac{\partial A_y}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial y}\right) = \frac{\mathrm{i}\hbar q}{cM^2}\left(\frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z}\right) = \frac{\mathrm{i}\hbar q}{M^2 c}B_x$$

同理可证

$$(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{v})_y = \frac{\mathrm{i}\hbar q}{M^2 c}B_y, \quad (\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{v})_z = \frac{\mathrm{i}\hbar q}{M^2 c}B_z$$

因此最后得

$$\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{v}=\frac{\mathrm{i}\hbar q}{M^2c}\boldsymbol{B}$$

7-12 电磁场中带电粒子的连续性方程

【题目】 设在电磁场中运动的带电粒子的几率密度 $\rho=\psi^*\psi$，几率流密度

$$\boldsymbol{j}=\frac{1}{2\mu}(\psi^*\hat{\boldsymbol{p}}\psi-\psi\hat{\boldsymbol{p}}\psi^*)-\frac{q}{\mu c}\psi^*\boldsymbol{A}\psi$$

求证：连续性方程 $\dfrac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0$。

【解答】 在电磁场中运动的带电粒子（质量为 μ，电荷为 q）的 Schrödinger 方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\left(\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2\mu}-\frac{q}{\mu c}\boldsymbol{A}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\frac{q^2}{2\mu c^2}\boldsymbol{A}^2+q\phi\right)\psi\ (1)$$

其中，$\boldsymbol{A}$ 和 ϕ 分别表示电磁场的矢势和标势。

方程 (1) 的复共轭式为（注意 $\hat{\boldsymbol{p}}^*=-\hat{\boldsymbol{p}}$）

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t}=\left(\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2\mu}+\frac{q}{\mu c}\boldsymbol{A}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\frac{q^2}{2\mu c^2}\boldsymbol{A}^2+q\phi\right)\psi^*\ (2)$$

$\psi^*\times(1)-\psi\times(2)$，得

$$¤=\mathrm{i}\hbar\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}+\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right)=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi)=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\rho}{\partial t}$$

$$¤=\frac{1}{2\mu}[\psi^*\hat{\boldsymbol{p}}^2\psi-\psi\hat{\boldsymbol{p}}^2\psi^*]-\frac{q}{\mu c}(\psi^*\boldsymbol{A}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\psi+\psi\boldsymbol{A}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\psi^*)$$

$$=\frac{1}{2\mu}\hat{\boldsymbol{p}}\cdot(\psi^*\hat{\boldsymbol{p}}\psi-\psi\hat{\boldsymbol{p}}\psi^*)-\frac{q}{\mu c}\hat{\boldsymbol{p}}\cdot(\psi^*\boldsymbol{A}\psi)\quad(¤¤\ \nabla\cdot\boldsymbol{A}=0)$$

$$= -\mathrm{i}\hbar\nabla\cdot\left[\frac{1}{2\mu}\left(\psi^*\hat{\boldsymbol{p}}\psi-\psi\hat{\boldsymbol{p}}\psi^*\right)-\frac{q}{\mu c}\psi^*\boldsymbol{A}\psi\right]$$

$$= -\mathrm{i}\hbar\nabla\cdot\boldsymbol{j}$$

因此得

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0$$

【补】"右" 第二个等号的两步：其一，$\hat{\boldsymbol{p}}\cdot(\psi^*\hat{\boldsymbol{p}}\psi-\psi\hat{\boldsymbol{p}}\psi^*)=-\hbar^2\nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)=-\hbar^2(\psi^$（展开时交叉项 $\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi$ 相消）；其二，$-\mathrm{i}\hbar\nabla\cdot(\psi^*\boldsymbol{A}\psi)=-\mathrm{i}\hbar(\nabla\cdot\boldsymbol{A})\psi^*\psi-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{A}\cdot(\psi^*\nabla\psi+\psi\nabla\psi^*$，取规范 $\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0$ 后即为 $\psi^*\boldsymbol{A}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\psi+\psi\boldsymbol{A}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\psi^*$。再由 $\hat{\boldsymbol{p}}=-\mathrm{i}\hbar\nabla$ 提出 $-\mathrm{i}\hbar$，两边消去 $\mathrm{i}\hbar$ 即得连续性方程。

7-13 正交均匀电场与磁场中的带电粒子

【题目】 设一带电荷 q 的粒子在 y 方向的均匀电场 $\boldsymbol{\varepsilon}=(0,\varepsilon,0)$ 和 z 方向的均匀磁场 $\boldsymbol{B}=(0,0,B)$ 中运动（$\boldsymbol{B}$ 不随时间变化）。

(1) 证明矢势 $\boldsymbol{A}$ 可以选取 $\boldsymbol{A}=(-By,0,0)$；

(2) 说明粒子是在 $x-y$ 平面内运动；

(3) 写出体系的 Hamilton 量（用 ε，B 表示）；

(4) 证明 $[\hat{H},\hat{p}_y]=0$，$[\hat{H},\hat{p}_x]\neq 0$，从而可以选取 $\{\hat{H},\hat{p}_x\}$ 为力学量完全集；

(5) 设 $\hat{H}$，$\hat{p}_x$ 的共同本征函数为

$\psi(x,y)=\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_x\cdot x}\cdot\phi(y)$

时，利用分离变量法写出能量本征函数 $\phi(y)$ 的本征值方程；

(6) 解此本征值方程，解出能量本征值。

【解答】 (1) 由 $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$ 可得，当 $\boldsymbol{A}=(-By,0,0)$ 时

$$B_x=(\nabla\times\boldsymbol{A})_x=\frac{\partial A_z}{\partial y}-\frac{\partial A_y}{\partial z}=0$$

$$B_y=(\nabla\times\boldsymbol{A})_y=\frac{\partial A_x}{\partial z}-\frac{\partial A_z}{\partial x}=0$$

$$B_z=(\nabla\times\boldsymbol{A})_z=\frac{\partial A_y}{\partial x}-\frac{\partial A_x}{\partial y}=\frac{\partial A_x}{\partial y}=B$$

因此，$\boldsymbol{A}=(-By,0,0)$ 时 $\boldsymbol{B}=(0,0,B)$，即 $\boldsymbol{A}$ 可选取 $(-By,0,0)$。

(2) 因电场沿 y 方向，因此电荷沿 y 方向进入 z 方向的磁场，由 Lorentz 力 $\boldsymbol{F}=\frac{q}{c}\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}$

可知，带电粒子受 x 方向的力，因此带电粒子在 $x-y$ 平面内运动。

(3) 体系的 Hamilton 量为

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+q\phi$$

但由于

$$\boldsymbol{E}=E_x\boldsymbol{i}+E_y\boldsymbol{j}+E_z\boldsymbol{k}=-\nabla\phi-\frac{1}{c}\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}=-\frac{\partial\phi}{\partial x}\boldsymbol{i}-\frac{\partial\phi}{\partial y}\boldsymbol{j}-\frac{\partial\phi}{\partial z}\boldsymbol{k}$$

所以

$$E_y=\varepsilon=-\frac{\partial\phi}{\partial y},$$

因电场是均匀的，

$$\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}=0,\quad \phi=-\varepsilon y$$

所以

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\left[\left(\hat{p}_x+\frac{q}{c}By\right)^2+\hat{p}_y^2\right]-q\varepsilon y$$

(4) 因为

$$\left(\hat{p}_x+\frac{q}{c}By\right)^2=\hat{p}_x^2+\frac{qB}{c}(y\hat{p}_x+\hat{p}_xy)+\frac{q^2B^2}{c^2}y^2$$

很容易看出

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

另一方面

$$[\hat{H},\hat{p}_y]=\frac{qB}{2mc}\{[y\hat{p}_x,\hat{p}_y]+[\hat{p}_x y,\hat{p}_y]\}+\frac{q^2B^2}{2mc^2}[y^2,\hat{p}_y]-q\varepsilon[y,\hat{p}_y]$$

$$=\frac{qB}{mc}\mathrm{i}\hbar\hat{p}_x+\frac{\mathrm{i}\hbar yq^2B^2}{mc^2}-\mathrm{i}\hbar q\varepsilon\neq 0$$

因此，可以选取 $(\hat{H},\hat{p}_x)$ 为力学量完全集。

(5) 设 $(\hat{H},\hat{p}_x)$ 的共同本征函数为

$\psi(x,y)=\psi(x)\varphi(y)=\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_x x}\varphi(y)$，则 Schrödinger 方程为

$$\left\{\frac{1}{2m}\left[\hat{p}_x^2+\frac{2qB}{c}y\hat{p}_x+\frac{q^2B^2}{c^2}y^2+\hat{p}_y^2\right]-q\varepsilon y\right\}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_x x}\varphi(y)=E\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_x\cdot x}\varphi(y)$$

因为

$$\hat{p}_x^2\psi(x)=p_x^2\psi(x),\quad \hat{p}_x\psi(x)=p_x\psi(x)$$

Schrödinger 方程化为（能量本征值方程）

$$\left\{\frac{1}{2m}\left(\hat{p}_y^2+\frac{q^2B^2}{c^2}y^2+\frac{2qB}{c}p_x y\right)-q\varepsilon y\right\}\varphi(y)=\left(E-\frac{p_x^2}{2m}\right)\varphi(y)$$

即

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2}+\frac{q^2B^2}{2mc^2}(y-y_0)^2\right]\varphi(y)=\left[E-\frac{p_x^2}{2m}+\frac{q^2B^2y_0^2}{2mc^2}\right]\varphi(y)$$

其中，

$$y_0\equiv\frac{mc^2}{qB}\left(\varepsilon-\frac{Bp_x}{mc}\right)$$

如果进一步设 $k \equiv \frac{q^2B^2}{mc^2}$，则能量本征值方程变为

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2}+\frac{1}{2}k(y-y_0)^2\right)\varphi(y)=\left(E-\frac{p_x^2}{2m}+\frac{1}{2}ky_0^2\right)\varphi(y) \tag{6}$$

这是一个一维线性谐振子的能量本征值方程，平衡点在 y_0 处，因此，方程的解是一维谐振子方程的解，其能量本征值为

$$E=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega+\frac{p_x^2}{2m}-\frac{1}{2}ky_0^2$$

其中，

$$\omega=\sqrt{\frac{k}{m}}=\frac{|q|B}{mc}$$

把 y_0 和 k 值代入后得

$$E=\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar|q|B}{mc}+\frac{cp_x\varepsilon}{B}-\frac{mc^2\varepsilon^2}{2B^2},\quad n=0,1,2,\cdots$$

【补】配方与代入的细节：y 的二次项系数为 $\frac{q^2B^2}{2mc^2}$，一次项系数为 $\frac{qBp_x}{mc}-q\varepsilon$，平衡点应满足 $\frac{q^2B^2}{mc^2}y_0=q\varepsilon-\frac{qBp_x}{mc}$，即 $y_0=\frac{mc^2}{qB^2}\left(\varepsilon-\frac{Bp_x}{mc}\right)$（书上印为 $\frac{mc^2}{qB}\left(\varepsilon-\frac{Bp_x}{mc}\right)$，分母似漏一个 B；以下按能给出书末结果的 y_0 计算）。又

$$\frac{1}{2}ky_0^2=\frac{1}{2}\cdot\frac{q^2B^2}{mc^2}\cdot\frac{(mc^2\varepsilon-cBp_x)^2}{q^2B^4}=\frac{(mc\varepsilon-Bp_x)^2}{2mB^2}=\frac{mc^2\varepsilon^2}{2B^2}-\frac{c\varepsilon p_x}{B}+\frac{p_x^2}{2m}$$

故

$$E=\left(n+\tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega+\frac{p_x^2}{2m}-\frac{1}{2}ky_0^2=\left(n+\tfrac{1}{2}\right)\frac{\hbar|q|B}{mc}+\frac{cp_x\varepsilon}{B}-\frac{mc^2\varepsilon^2}{2B^2}$$

$p_x^2/2m$ 项恰好相消。另外注意：题目第 (4) 问排印为 $[\hat{H},\hat{p}_y]=0$、$[\hat{H},\hat{p}_x]\neq 0$，但解答实际证明的是 $[\hat{H},\hat{p}_x]=0$、$[\hat{H},\hat{p}_y]\neq 0$，题目两处下标应为排印颠倒，此处照原书转写。

7-14 $\boldsymbol{A}=(0,Bx,0)$ 中电子的 Landau 能级

【题目】 一电子在势 $\boldsymbol{A}=(0,Bx,0)$ 中运动。电子的 Hamilton 量为

$$H=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2$$

(1) 证明 Hamilton 量 H 的本征函数可以写成

$$\varphi(\boldsymbol{r})=f(x)\exp \mathrm{i}(k_y y+k_z z)$$

(2) 求能量本征值和本征函数。

【解答】 (1) 将 $\boldsymbol{A}=(0,Bx,0)$ 代入到 Hamilton 量 H 中得到

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\left(\frac{\partial}{\partial y}-\mathrm{i}\frac{eB}{c\hbar}x\right)^2+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]$$

将 Hamilton 量 H 作用到波函数 $\varphi(\boldsymbol{r})$ 可以得到

$$H\varphi(\boldsymbol{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left(\mathrm{i}k_y - \mathrm{i}\frac{eB}{c\hbar}x\right)^2 + (\mathrm{i}k_z)^2\right]\varphi(\boldsymbol{r})$$

$$= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{e^2B^2}{2mc^2}\left(x - \frac{c\hbar k_y}{eB}\right)^2 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}\right]\varphi(\boldsymbol{r})$$

由此可见，如果上式中的 $\varphi(\boldsymbol{r})$ 具有 $\varphi(\boldsymbol{r}) = f(x)\exp\mathrm{i}(k_y y + k_z z)$ 的形式，则函数 $f(x)$ 满足

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{e^2B^2}{2mc^2}\left(x - \frac{c\hbar k_y}{eB}\right)^2\right]f(x) = E_0 f(x)$$

从而 $H\varphi(\boldsymbol{r})$ 可以写成

$$H\varphi(\boldsymbol{r}) = \left(E_0 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}\right)\varphi(\boldsymbol{r})$$

这就说明 $\varphi(\boldsymbol{r}) = f(x)\exp\mathrm{i}(k_y y + k_z z)$ 正是 Hamilton 量 H 的本征值为 $E_0 + \dfrac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$ 的本征函数。

(2) 关于 $f(x)$ 的方程就是中心在 $x = c\hbar k_y/eB$ 的一维谐振子的能量本征值方程，其本征值为我们熟知的

$$E_0 = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, \cdots$$

其中

$$\omega = \frac{|e|B}{mc}$$

因此最后得到 Hamilton 量 H 的本征值

$$E = E_0 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\frac{|e|B\hbar}{mc} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

上式中的第一项表示电子在 $x-y$ 平面运动的能量，取离散值；而第二项表示沿 z 方向的匀速运动能量，取连续值。

【补】第二个等号：$\left(\mathrm{i}k_y-\mathrm{i}\frac{eB}{c\hbar}x\right)^2\varphi=-\left(k_y-\frac{eB}{c\hbar}x\right)^2\varphi=-\left(\frac{eB}{c\hbar}\right)^2\left(x-\frac{c\hbar k_y}{eB}\right)^2\varphi$，乘以外面的 $-\frac{\hbar^2}{2m}$ 后即为 $\frac{e^2B^2}{2mc^2}\left(x-\frac{c\hbar k_y}{eB}\right)^2\varphi$；$(\mathrm{i}k_z)^2=-k_z^2$ 给出 $\frac{\hbar^2k_z^2}{2m}$ 项。振子频率由 $\frac{1}{2}m\omega^2=\frac{e^2B^2}{2mc^2}$ 得 $\omega=\frac{|e|B}{mc}$。

7-15 r^lY_{lm} 的直角坐标表示与宇称

【题目】 氢原子的波函数为

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

(1) 对 $l=0,1,2$，试将 $r^lY_{lm}(\theta,\varphi)$ 用直角坐标 x,y,z 表示，并求 $r^lY_{lm}(\theta,\varphi)$ 的宇称。

(2) 利用上题结果，证明

$$\psi_{nlm}(-x,-y,-z)=(-1)^l\psi_{nlm}(x,y,z)$$

【解答】 (1) $l=0$ 时，

$$r^lY_{lm}(\theta,\varphi)=r^0Y_{00}(\theta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$l=1$ 时，

$$rY_{10}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}r\cos\theta=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}z$$

$$rY_{1\pm1}(\theta,\varphi)=\mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}r\sin\theta e^{\pm i\varphi}=\mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}(x\pm iy)$$

$l=2$ 时，

$$r^2Y_{20}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{5}{16\pi}}r^2(3\cos^2\theta-1)=\sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3z^2-r^2)$$

$$=\sqrt{\frac{5}{16\pi}}(2z^2-x^2-y^2)$$

$$r^2Y_{2\pm1}(\theta,\varphi)=\mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}r^2\sin\theta\cos\theta e^{\pm i\varphi}=\mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}z(x\pm iy)$$

$$r^2Y_{2\pm2}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{15}{32\pi}}r^2\sin^2\theta e^{\pm 2i\varphi}=\sqrt{\frac{15}{32\pi}}(x\pm iy)^2$$

这些结果表明，函数 $r^lY_{lm}(\theta,\varphi)$ 在空间反演变换 $r\to r$，$\theta\to\pi-\theta$，$\varphi\to\varphi\pm\pi$ 或 $x,y,z\to -x,-y,-z$ 下变成原函数的 $(-1)^l$ 倍，也就是说，函数 $r^lY_{lm}(\theta,\varphi)$ 的宇称是 $(-1)^l$。

(2) 氢原子的波函数 $\psi_{nlm}(\boldsymbol{r})=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 可改写为 $\psi_{nlm}(\boldsymbol{r})=\dfrac{R_{nl}(r)}{r^l}r^lY_{lm}(\theta,\varphi)$，在空间反演下，$\dfrac{R_{nl}(r)}{r^l}$ 不变，因为空间反演下 r 不变，因此，$\psi_{nlm}(\boldsymbol{r})$ 的宇称决定于函数 $r^lY_{lm}(\theta,\varphi)$。但上题中已证明，$r^lY_{lm}(\theta,\varphi)$ 的宇称为 $(-1)^l$，即

$$\psi_{nlm}(-x,-y,-z)=(-1)^l\psi_{nlm}(x,y,z)$$

【补】球坐标与直角坐标的关系：$z=r\cos\theta$，$x\pm \mathrm{i}y=r\sin\theta \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}\varphi}$，$r^2=x^2+y^2+z^2$，各球谐函数前的系数即标准 Y_{lm} 的归一化系数。空间反演 $x,y,z\to -x,-y,-z$ 下，$x\pm \mathrm{i}y\to -(x\pm \mathrm{i}y)$，$z\to -z$，故 $l=1$ 各量反号、$l=2$ 各量不变，与宇称 $(-1)^l$ 一致。

7-16 由归一化条件确定氢原子 s 态基态波函数

【题目】 已知氢原子的 s 态（$l=0$）能量本征函数为

$$\psi_{n0}(r)=f_n(r)\mathrm{e}^{-\frac{r}{na_0}}$$

其中，$f_n(r)$ 为 r 的 $n-1$ 次多项式。试利用归一化条件确定 $\psi_{ns}(r)$。

【解答】 因为 s 态的 $l=0$，因此 $n=1$，能量本征函数为

$$\psi_{10}(r)=Cr^0\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}=C\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}$$

由归一化条件

$$C^2\iiint \mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}r^2\mathrm{d}r\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi=4\pi C^2\int_0^\infty \mathrm{e}^{-\frac{2r}{a_0}}r^2\mathrm{d}r=4\pi C^2\frac{a_0^3}{4}=1$$

得到

$$C=\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}$$

因此，s 态归一化的能量本征函数为

$$\psi_{ns}(r)=\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\frac{2}{\sqrt{a_0^3}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{a_0}}$$

【补】径向积分 $\int_0^\infty \mathrm{e}^{-2r/a_0}r^2\mathrm{d}r=\frac{2!}{(2/a_0)^3}=\frac{a_0^3}{4}$，即归一化条件中 $\frac{a_0^3}{4}$ 的来源；末式写成 $\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\cdot\frac{2}{\sqrt{a_0^3}}\mathrm{e}^{-r/a_0}$ 是把角向部分 $Y_{00}=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ 显式分出的形式。注意本题只求出了 $n=1$ 的 ψ_{10}（即 ψ_{1s}），题目与末式中排印的下标 ns 按原书转写。

7-17 $n=l+1$ 时径向解的参数 α 与能量本征值

【题目】 氢原子的径向波函数满足方程

$$\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\right)+\left[\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+\frac{ze^2}{r}\right)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R=0$$

当 $n=l+1$ 时，该方程的解为

$$R_{nl}(r)=r^l\mathrm{e}^{-\alpha r}$$

试利用原方程求参数 α 和能量本征值 E。

【解答】 将 $R_{nl}(r)=r^l\mathrm{e}^{-\alpha r}$ 代入方程，则第一项

$$\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}R_{nl}}{\mathrm{d}r}\right)=\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left[r^2(lr^{l-1}-\alpha r^l)\mathrm{e}^{-\alpha r}\right]$$

$$=\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left[(lr^{l+1}-\alpha r^{l+2})\mathrm{e}^{-\alpha r}\right]$$

$$=\frac{1}{r^2}\left[l(l+1)r^l-\alpha(l+2)r^{l+1}-\alpha lr^{l+1}+\alpha^2r^{l+2}\right]\mathrm{e}^{-\alpha r}$$

$$=\left[\frac{l(l+1)}{r^2}-\frac{2\alpha(l+1)}{r}+\alpha^2\right]R_{nl}(r)$$

因此，方程变为

$$\left[\frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{ze^2}{r}+E\right)-\frac{2\alpha(l+1)}{r}+\alpha^2\right]R_{nl}(r)=0$$

由

$$\frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{ze^2}{r}+E\right)-\frac{2\alpha(l+1)}{r}+\alpha^2=0$$

得到

$$E=-\frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2,\quad 2\alpha(l+1)=\frac{2mze^2}{\hbar^2}$$

上式第二个方程里代入 $n=l+1$ 得

$$\alpha=\frac{mze^2}{\hbar^2}\frac{1}{n}$$

由此得能量本征值

$$E=-\frac{nz^2e^4}{2\hbar^2n^2}$$

【补】上面的方程对任意 r 成立，故 $\frac{1}{r}$ 项与常数项的系数须分别为零，即 $\frac{2mze^2}{\hbar^2}-2\alpha(l+1)=0$ 与 $\frac{2mE}{\hbar^2}+\alpha^2=0$，这就是书上最后联立的两个方程。把 $\alpha=\frac{mze^2}{\hbar^2 n}$ 代入 $E=-\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}$，应为

$$E=-\frac{mz^2e^4}{2\hbar^2n^2}$$

书上末式分子排印为 nz^2e^4，按推导应为 mz^2e^4（排印之误），此处照原书转写。

> 转写自《东哥物理考研·量子力学强化班刷题答案册》第四讲「三维定态问题」A 组（答案册印刷页 34–39，PDF 页码索引 35–40）。题干抄自 qh.md「三维问题」分区。

强化25 圆周上带电粒子在轴向 B 场中的基态（A1）

【题目】 一个质量为 μ、带有电荷 q 的粒子被限制在 xy 平面内半径为 a 的圆周上运动，在 z 轴方向加上强度为 B 的均匀磁场。求粒子的基态能量和基态波函数的表达式，证明基态能量是 B

的周期函数，并给出周期。已知在柱坐标系中

$$\nabla^2 = \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right) + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

【解答】 取电磁场的矢势

$$A_x = -By/2, \quad A_y = Bx/2, \quad A_z = 0.$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 = \frac{1}{2\mu}\left[\left(\hat{p}_x + \frac{qB}{2c}y\right)^2 + \left(\hat{p}_y - \frac{qB}{2c}x\right)^2 + \hat{p}_z^2\right]$$

$$= \frac{\hat{p}^2}{2\mu} - \frac{qB}{2\mu c}\hat{L}_z + \frac{q^2B^2}{8\mu c^2}(x^2 + y^2)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 - \frac{qB}{2\mu c}\hat{L}_z + \frac{q^2B^2}{8\mu c^2}(x^2 + y^2).$$

由于 $\rho = a$，$z = 0$ 均为常数，由题给 ∇^2 的表达式得

$$\nabla^2 = \frac{1}{a^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} = -\frac{1}{\hbar^2 a^2}\hat{L}_z^2, \quad x^2 + y^2 = \rho^2 = a^2.$$

代入上式，

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu a^2}\hat{L}_z^2 - \frac{qB}{2\mu c}\hat{L}_z + \frac{q^2B^2a^2}{8\mu c^2}.$$

$\hat{H}$ 的本征函数和本征能量为

$$\psi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi},$$

$$E_m = \frac{m^2\hbar^2}{2\mu a^2} - \frac{qBm\hbar}{2\mu c} + \frac{q^2B^2a^2}{8\mu c^2} = \frac{1}{2\mu}\left(\frac{m\hbar}{a} - \frac{qBa}{2c}\right)^2, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

当 B 取确定值时，设使 $\left(\dfrac{m\hbar}{a} - \dfrac{qBa}{2c}\right)^2$ 取最小值的 m 为 m'，基态能量为

$$E_{m'}=\frac{1}{2\mu}\left(\frac{m'\hbar}{a}-\frac{qBa}{2c}\right)^2.$$

当 $B=0$ 时，$m'=0$，$E_{m'}=0$。当 B 由 0 增大时，m' 仍为 0，但 $E_{m'}$ 开始由 0 增大。当 B 增大到 $c\hbar/qa^2$ 时 $m'=0$ 或 1，这时 $E_{m'}$ 取最大值 $\hbar^2/8\mu a^2$。B 再增大时，$m'=1$，$E_{m'}$ 随 B 增大而减小。当 $B=2c\hbar/qa^2$ 时，$E_{m'}=0$。B 再增大时，重复以上过程，即 $E_{m'}$ 由最小值 0 增大到最大值 $\hbar^2/8\mu a^2$ 后再减小到 0。B 的周期为

$$T=\frac{2c\hbar}{qa^2}.$$

基态波函数为

$$\psi_{m'}(\phi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im'\phi}.$$

当 $B=(2n+1)c\hbar/qa^2$ $(n=0,1,2,\ldots)$ 时，基态能量取最大值 $\hbar^2/8\mu a^2$，它是二度简并的，对应 $m'=n,n+1$。

强化26 磁场中速度对易、H 展开与含时 A 的薛定谔方程（A2）

【题目】 (1) 电荷为 q 的粒子在磁场 $\boldsymbol{B}$ 与势场 $V(\boldsymbol{r})$ 中运动，求速度分量算符的对易关系 $[\hat{v}_x,\hat{v}_y]$、

$[\hat{v}_y, \hat{v}_z]$、$[\hat{v}_z, \hat{v}_x]$。

(2) 质量为 μ、电荷为 q

的粒子在磁场中，哈密顿量为

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2.$$

问在什么条件下可写成

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}\hat{\boldsymbol{p}}^2 - \frac{q}{\mu c}\boldsymbol{A}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} + \frac{q^2}{2\mu c^2}\boldsymbol{A}^2.$$

(3) 设 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}_0 \cos\omega t$ （$\boldsymbol{A}_0$ 为常矢），略去 $\hat{H}$ 中的 $\boldsymbol{A}^2$ 项，求相应薛定谔方程的解。

【解答】 (1) 根据带电粒子速度算符 $\hat{\boldsymbol{v}}$ 的定义式 $\hat{\boldsymbol{v}} = \frac{1}{\mu}\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)$，

$$[\hat{v}_x, \hat{v}_y] = \frac{1}{\mu^2}\left[\hat{p}_x - \frac{q}{c}A_x,\ \hat{p}_y - \frac{q}{c}A_y\right]$$

$$= \frac{1}{\mu^2}\left\{\left[\hat{p}_x,\ -\frac{q}{c}A_y\right] + \left[-\frac{q}{c}A_x, \hat{p}_y\right]\right\}$$

$$= \frac{1}{\mu^2}\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\left(-\frac{q}{c}A_y\right) + i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\left(-\frac{q}{c}A_x\right)\right]$$

$$= \frac{i\hbar q}{\mu^2 c}\left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}\right) = \frac{i\hbar q}{\mu^2 c}B_z.$$

类似地，可得

$$[\hat{v}_y, \hat{v}_z] = \frac{i\hbar q}{\mu^2 c}B_x, \quad [\hat{v}_z, \hat{v}_x] = \frac{i\hbar q}{\mu^2 c}B_y.$$

(2) 条件是 $\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0$。

(3) 设 $\boldsymbol{A}_0$ 方向为 z 轴方向，薛定谔方程为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t)=\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+\frac{i\hbar qA_0\cos\omega t}{\mu c}\frac{\partial}{\partial z}\right)\psi(\boldsymbol{r},t).$$

这个方程无法分离变量 $\boldsymbol{r}$ 与 t

。转到动量表象，方程为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi(\boldsymbol{p},t)=\left(\frac{p^2}{2\mu}-\frac{qA_0p_z}{\mu c}\cos\omega t\right)\phi(\boldsymbol{p},t).$$

这个方程可表示为

$$\frac{d\phi}{\phi}=\frac{i}{\hbar}\left(\frac{qA_0p_z}{\mu c}\cos\omega t-\frac{p^2}{2\mu}\right)dt.$$

上式积分后得

$$\phi(\boldsymbol{p},t)=C\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\frac{qA_0p_z\sin\omega t}{\omega\mu c}-\frac{p^2t}{2\mu}\right)\right].$$

【补】第 (2) 问展开时交叉项为 $-\frac{q}{2\mu c}(\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})$；由于 $\hat{\boldsymbol{p}}\cdot(\boldsymbol{A}\psi)=-i\hbar(\nabla\cdot\boldsymbol{A})\psi+\boldsymbol{A}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\psi$，当且仅当 $\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0$（如库仑规范）时 $\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}$，交叉项才能合并成 $-\frac{q}{\mu c}\boldsymbol{A}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}$。

强化27 库仑突然消失后动量几率分布（A3）

【题目】 氢原子处于基态。假定库仑作用在 $t=0$ 时突然消失，电子离开原子像自由电子那样运动。试求 $t>0$ 时测量电子动量大小在 $p\sim p+dp$ 内的概率。

【解答】 氢原子基态波函数 $\psi(r)=\dfrac{1}{\sqrt{\pi a^3}}e^{-r/a}$ 与 θ、ϕ 角无关。取 $\boldsymbol{p}$ 方向为 z 轴方向，

$$\varphi(p)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\iiint e^{-ipr\cos\theta/\hbar}\psi(r)r^2\sin\theta\,d\theta\,d\varphi\,dr=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int_0^\infty dr\,\psi(r)r^2\int_0^\pi e^{-ipr\cos\theta/\hbar}\sin\theta\,d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi.$$

对 θ、φ 角积分后，得

$$\varphi(p)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}ip}\int_0^\infty\psi(r)(e^{ipr/\hbar}-e^{-ipr/\hbar})r\,dr.$$

将 $\psi(r)$ 的表示式代入，

$$\varphi(p)=\frac{1}{\sqrt{2\hbar\pi^2a^3}\,ip}\int_0^\infty\left[re^{-\left(\frac{1}{a}-\frac{ip}{\hbar}\right)r}-re^{-\left(\frac{1}{a}+\frac{ip}{\hbar}\right)r}\right]dr$$

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

$$=\sqrt{\frac{8\hbar^5a^3}{\pi^2}}\,\frac{1}{(p^2a^2+\hbar^2)^2}.$$

$t\geq 0$ 时，电子动量大小在 $p\sim p+dp$ 内的概率为

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

强化28 径向动量 $\hat{p}_r$ 与中心力场关系式（A4）

【题目】 设一粒子在中心力场 $V(r)$ 中运动，定义径向动量

$$\hat{p}_r = \frac{1}{2}\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} + \hat{\boldsymbol{p}}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right). \quad (1)$$

(1) 证明

$$\hat{p}_r = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right), \quad (2)$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2\mu} + \frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2} + V(r). \quad (3)$$

(2) 计算对易关系式 $\left[\frac{\partial}{\partial r}, \hat{H}\right]$。

(3) 当粒子处于某一束缚定态 $\psi_{nlm}(\boldsymbol{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$ 时，证明

$$\left\langle\frac{\partial V}{\partial r}\right\rangle_{nlm} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{\mu}\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle_{nlm} = \frac{\hbar^2}{2\mu}|R_{nl}(0)|^2. \quad (4)$$

(4) 设 $V = -\dfrac{Ze^2}{r}$，证明在束缚定态 $\psi_{nlm}(\boldsymbol{r})$ 上

$$\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle_{nlm} = \frac{Z}{l(l+1)a}\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle_{nlm}, \quad (5)$$

其中 a 为玻尔半径。

【解答】 (1) 式 (2) 的证明见第二讲第 1 题。在球坐标系中

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2} + V(r)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2} + V(r). \quad (6)$$

可以证明

$$\hat{p}_r^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right). \quad (7)$$

任取一波函数 ψ，利用式 (2)

$$\hat{p}_r^2\psi = -\hbar^2\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)^2\psi = -\hbar^2\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)\left(\frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{\psi}{r}\right) = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)\psi.$$

由于 ψ 是任意的，故式 (7) 得证。将式 (7) 代入式 (6)，式 (3) 得证。

(2) 利用式 (6)

$$\left[\frac{\partial}{\partial r}, \hat{H}\right] = \frac{\partial}{\partial r}\hat{H} = \frac{\partial}{\partial r}\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2} + V(r)\right]$$

$$= \frac{\hbar^2}{\mu r^2}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{L}^2}{\mu r^3} + \frac{\partial V(r)}{\partial r}. \quad (8)$$

(3) 在 ψ_{nlm} 态上，$\left[\frac{\partial}{\partial r}, \hat{H}\right]$ 的平均值

$$\overline{\left[\frac{\partial}{\partial r}, \hat{H}\right]}_{nlm} = \int \psi_{nlm}^*\left(\frac{\partial}{\partial r}\hat{H} - \hat{H}\frac{\partial}{\partial r}\right)\psi_{nlm}\, d\tau = 0. \quad (9)$$

将式 (8) 代入式 (9)，得

$$\int \psi_{nlm}^*\frac{\partial V(r)}{\partial r}\psi_{nlm}\, d\tau - \int \psi_{nlm}^*\frac{\hat{L}^2}{\mu r^3}\psi_{nlm}\, d\tau = -\int \psi_{nlm}^*\frac{\hbar^2}{\mu r^2}\frac{\partial}{\partial r}\psi_{nlm}\, d\tau. \quad (10)$$

上式左边的积分表示力学量 $\frac{\partial V(r)}{\partial r}$ 与 $\frac{\hat{L}^2}{\mu r^3}$ 的平均值，是实数，因此上式右边的积分也是实数。这个积分可以表示为

$$\int \psi^*_{nlm} \frac{\hbar^2}{\mu r^2} \frac{\partial}{\partial r} \psi_{nlm} \, d\tau = \frac{\hbar^2}{\mu} \int_{4\pi} d\Omega \int_0^\infty \psi^*_{nlm} \frac{\partial \psi_{nlm}}{\partial r} dr. \quad (11)$$

其中对 r 的积分应为实数，便有

$$\int_0^\infty \psi^*_{nlm} \frac{\partial \psi_{nlm}}{\partial r} dr = \left(\int_0^\infty \psi^*_{nlm} \frac{\partial \psi_{nlm}}{\partial r} dr \right)^* = \int_0^\infty \psi_{nlm} \frac{\partial \psi^*_{nlm}}{\partial r} dr$$

$$= \frac{1}{2} \int_0^\infty \frac{\partial}{\partial r} (\psi^*_{nlm} \psi_{nlm}) dr = -\frac{1}{2} |\psi_{nlm}(r=0)|^2$$

$$= -\frac{1}{2} |R_{nl}(0)|^2 |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2.$$

将此式代入式 (11)，

$$\int \psi^*_{nlm} \frac{\hbar^2}{\mu r^2} \frac{\partial}{\partial r} \psi_{nlm} \, d\tau = -\frac{\hbar^2}{2\mu} |R_{nl}(0)|^2 \int_{4\pi} |Y_{lm}(\theta, \phi)|^2 d\Omega = -\frac{\hbar^2}{2\mu} |R_{nl}(0)|^2. \quad (12)$$

再将式 (12) 代入式 (10)，并注意到 ψ_{nlm} 是 $\hat{L}^2$ 的本征函数，本征值为 $l(l+1)\hbar^2$，

$$\left\langle \frac{\partial V}{\partial r} \right\rangle_{nlm} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{\mu} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nlm} = \frac{\hbar^2}{2\mu} |R_{nl}(0)|^2.$$

这正是要证明的式 (4)。

(4) 将 $V = -\frac{Ze^2}{r}$ 代入上式，得

$$Ze^2 \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{nlm} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{\mu} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{nlm} = \frac{\hbar^2}{2\mu} |R_{nl}(0)|^2. \quad (13)$$

由于 $R_{nl}(r)\sim r^{l}$，对 $l\neq 0$，$R_{nl}(0)=0$，便有

$$\left\langle \frac{1}{r^3}\right\rangle_{nlm}=\frac{Ze^2\mu}{l(l+1)\hbar^2}\left\langle \frac{1}{r^2}\right\rangle_{nlm}. \quad (14)$$

$l=0$ 时，$\left\langle \frac{1}{r^3}\right\rangle_{nlm}\to\infty$，式 (15) 仍然成立。考虑到玻尔半径 $a=\frac{\hbar^2}{\mu e^2}$，式 (15) 变为

$$\left\langle \frac{1}{r^3}\right\rangle_{nlm}=\frac{Z}{l(l+1)a}\left\langle \frac{1}{r^2}\right\rangle_{nlm}. \quad (15)$$

利用已知结果：

$$\left\langle \frac{1}{r^2}\right\rangle_{nlm}=\frac{2Z^2}{(2l+1)a^2n^3}, \quad (16)$$

$$\left\langle \frac{1}{r^3}\right\rangle_{nlm}=\frac{2Z^3}{l(l+1)(2l+1)a^3n^3}. \quad (17)$$

【补】答案册将式 (2) 的证明引向「第二讲第 1 题」，此处补齐：在坐标表象中，$\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\,\psi=-i\hbar\sum_i\frac{x_i}{r}\partial_i\psi=-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial r}$，而 $\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\,\psi=-i\hbar\sum_i\partial_i\left(\frac{x_i}{r}\psi\right)=-i\hbar\left(\frac{2}{r}\psi+\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)$（用到 $\sum_i\partial_i(x_i/r)=2/r$）。两式相加除以 2 即得 $\hat{p}_r=-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)$。另外 (3) 中利用了：束缚定态下 $\int\psi^*\hat{H}\frac{\partial}{\partial r}\psi\,d\tau=E\int\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial r}d\tau$，与前一项相消，故式 (9) 的平均值为零。

强化29

测不准关系估算氢原子基态能量（A5）

【题目】 利用测不准关系估算氢原子基态能量。

【解答】 为了估算基态（$l=0$）能量，氢原子的哈密顿算符 $\hat{H}$（见上题式(3)）可作如下近似：

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}_r^2}{2\mu}+\frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2}-\frac{e^2}{r}\approx\frac{\hat{p}_r^2}{2\mu}-\frac{e^2}{\bar{r}},$$

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

$$E=\bar{H}\approx\frac{1}{2\mu}\overline{p_r^2}-e^2\overline{\left(\frac{1}{\bar{r}}\right)}\approx\frac{1}{2\mu}\overline{p_r^2}-\frac{e^2}{\bar{r}}.\ (1)$$

$$(\Delta r)^2=\overline{r^2}-(\bar{r})^2\approx(\bar{r})^2,\ (2)$$

$$(\Delta p_r)^2=\overline{p_r^2}-(\bar{p}_r)^2=\overline{p_r^2}.\ (3)$$

将式 (2) 与 (3) 代入测不准关系式 $(\Delta r)^2(\Delta p_r)^2\approx\hbar^2$，得

$$\overline{p_r^2}\approx\frac{\hbar^2}{(\bar{r})^2}.\ (4)$$

将式 (4) 代入式 (1)，得

$$E\approx\frac{\hbar^2}{2\mu(\bar{r})^2}-\frac{e^2}{\bar{r}}.\ (5)$$

由 $\partial E/\partial \bar{r}=0$ 求出使 E 取极小值的 $\bar{r}=\hbar^2/\mu e^2=a$，再将它代入式 (5) 得基态能量

$$E \approx -\frac{e^2}{2a}. \quad (6)$$

强化30 中心力场共有本征态的 □V□ 与单调势积分不等式（A6）

【题目】 设一微观粒子在中心力场 $V(r)$ 中运动，且处于能量和轨道角动量的某一共同本征态。

(1) 在球坐标系中写出能量本征函数的基本形式，写出势能 $V(r)$ 在此态上的平均值 $\langle V\rangle$ 的表达式，并最后表示成径向积分的形式；

(2) 设 $V(r)$ 是 r 的单调上升函数（对任意 r，$dV/dr>0$），证明对任意给定的 r_0，均有

$$\int_0^{r_0}[V(r)-\langle V\rangle]R^2(r)r^2\,dr<0,$$

其中 $R(r)$ 是径向波函数。

【解答】 (1)

$$\psi_{nlm}(\boldsymbol{r})=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi),$$

$$\langle V\rangle = \int \psi^*_{nlm} V(r)\psi_{nlm}\, d\tau = \int_0^\infty V(r) R^2_{nl}(r) r^2\, dr.$$

(2) 由于 $V(r)$ 是 r 的单调上升函数，总可以找到某个 $r=a$ 值，使得 $V(a)=\langle V\rangle$。对于 $r_0 < a$，显然有

$$\int_0^{r_0} [V(r) - \langle V\rangle] R^2_{nl}(r) r^2\, dr < 0.$$

对于 $r_0 > a$，我们注意到

$$\lim_{r_0 \to \infty} \int_0^{r_0} [V(r) - \langle V\rangle] R^2_{nl}(r) r^2\, dr = \langle V\rangle - \langle V\rangle = 0.$$

因此，在 $V(r)$ 是 r 的单调上升函数的条件下，无论 r_0 取任何有限值，必定有

$$\int_0^{r_0} [V(r) - \langle V\rangle] R^2_{nl}(r) r^2\, dr < 0.$$

【补】最后一步的严格说法是：定义 $f(r_0) = \int_0^{r_0} [V(r) - \langle V\rangle] R^2 r^2 dr$，则 $f(0)=0$，f 在 $(0, a)$ 上单调减（被积函数为负），在 (a, ∞) 上单调增（被积函数为正）且 $f(\infty)=0$，故对任意有限 r_0 有 $f(r_0)<0$。

> 转写自《东哥物理考研·量子力学强化班刷题答案册》第四讲「三维定态问题」A 组（答案册印刷页 39–44，PDF 页码索引 40–45）。题干抄自

qh.md「三维问题」分区。

强化31 $V=A/r^2-B/r$ 定态（化成氢原子）（A7）

【题目】 粒子在中心力场 $V(r)=\dfrac{A}{r^2}-\dfrac{B}{r}$ 中运动，其中 A 与 B 为正实数。求定态能量和波函数。（提示：将定态方程化为氢原子定态方程。）

【解答】 令 $\psi(\boldsymbol{r})=R(r)Y_{lm}(\theta,\phi)=\dfrac{u(r)}{r}Y_{lm}(\theta,\phi)$，$u(r)$ 满足方程

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

或

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

令

$$(2\mu A/\hbar^2)+l(l+1)=l'(l'+1),$$

方程变为

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

已知氢原子的径向方程为

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

比较以上两个方程看出，只要作如下变换：

$$l\to l',\ e^2\to B$$
$$a=\frac{\hbar^2}{\mu e^2}\to a'=\frac{\hbar^2}{\mu B}$$
$$n=n_r+l+1\to n'=n_r+l'+1$$

就可以由氢原子定态能量和波函数

$$E_n=-\frac{e^2}{2an^2},\quad \psi_{nlm}(\boldsymbol{r})=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\phi),$$

得到本题的定态能量和波函数

$$E=-\frac{B}{2a'n'^2}=-\frac{\mu B^2}{2\hbar^2(n_r+l'+1)^2},$$
$$\psi(\boldsymbol{r})=R_{n'l'}(r)Y_{lm}(\theta,\phi),$$

其中 l' 由方程 $(2\mu A/\hbar^2)+l(l+1)=l'(l'+1)$ 解得

$$l'=\frac{1}{2}\left[-1+\sqrt{1+4l(l+1)+8\mu A/\hbar^2}\right],$$
$$l,n_r=0,1,2,\ldots$$

强化32

二维圆环上两量子珠的库仑问题（A8）

【题目】 二维平面有一个以原点为圆心、半径为 R 的光滑刚性圆环，上面套着两颗质量为 m、电荷为 q

的「量子珍珠」。珍珠可以无摩擦地绕环滑动，相互之间存在库仑位势 $V=q^2/r$（r 为两颗珍珠之间的距离）；两颗珍珠各自的方位角（或极角）为 α,β。

(1) 利用 α,β 写出这一珍珠体系的定态薛定谔方程；

(2) 令 $\lambda=(\alpha+\beta)/2$，$\theta=\alpha-\beta$，证明定态方程可以利用 λ,θ 分离变量，从而这一体系可以分解为关于 λ 的「质心」运动和关于 θ 的相对运动；

(3) 求解关于 λ 的「质心」运动；

(4) 当 q^2 非常大时，求解或估算关于 θ 的相对运动的基态与最低激发态的本征能量。

【解答】 (1) 体系的哈密顿量为

$$\hat{H}=\frac{\hat{L}_{1z}^2}{2I}+\frac{\hat{L}_{2z}^2}{2I}+\frac{q^2}{2R\sin[(\alpha-\beta)/2]},$$

其中

$$I=mR^2,\quad \hat{L}_{1z}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\alpha},\quad \hat{L}_{2z}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\beta}.$$

体系的定态方程为

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2I}\left(\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2}+\frac{\partial^2}{\partial\beta^2}\right)+\frac{q^2}{2R\sin[(\alpha-\beta)/2]}\right\}\psi(\alpha,\beta)=E_t\psi(\alpha,\beta).$$

(2) 令 $\lambda=(\alpha+\beta)/2$，$\theta=\alpha-\beta$，作变换 $\alpha,\beta\to\lambda,\theta$ 。在此变换下，

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial\lambda^2}-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\frac{q^2}{2R\sin(\theta/2)},$$

其中 $M=2I$，$\mu=I/2$。定态方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial\lambda^2}-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\frac{q^2}{2R\sin(\theta/2)}\right]\psi(\lambda,\theta)=E_t\psi(\lambda,\theta).$$

令

$$\psi(\lambda,\theta)=\Psi(\lambda)\psi(\theta),\quad E_t=E_c+E,$$

代入方程，得

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2\Psi(\lambda)}{d\lambda^2}=E_c\Psi(\lambda),$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{d\theta^2}+\frac{q^2}{2R\sin(\theta/2)}\right]\psi(\theta)=E\psi(\theta).$$

$\Psi(\lambda)$ 描述关于 λ 的「质心」运动；$\psi(\theta)$ 描述关于 θ 的相对运动。

(3)

由「质心」运动方程解得「质心」运动的波函数与能量

$$\Psi(\lambda)=\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{i\gamma\lambda},\quad E_c=\frac{\gamma^2\hbar^2}{2M},\quad \gamma=0,\pm1,\pm2,\ldots$$

(4) 当 q^2 非常大时，由于同性电荷相斥，两个电荷处于相距最远的位置，$\theta\to\pi$，相对运动方程变为

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{d\theta^2}+\frac{q^2}{2R}\right)\psi(\theta)=E\psi(\theta).$$

这个方程的解为

$$\psi_k(\theta)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ik\theta},\quad E_k=\frac{k^2\hbar^2}{2\mu}+\frac{q^2}{2R},\quad k=0,\pm1,\pm2,\dots$$

基态能量 E_0 与第一激发态能量 E_1 分别为

$$E_0=\frac{q^2}{2R},\quad E_1=\frac{\hbar^2}{2\mu}+\frac{q^2}{2R}.$$

【补】(2) 中导数变换为 $\frac{\partial}{\partial\alpha}=\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial\lambda}+\frac{\partial}{\partial\theta}$，$\frac{\partial}{\partial\beta}=\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial\lambda}-\frac{\partial}{\partial\theta}$，于是 $\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2}+\frac{\partial^2}{\partial\beta^2}=\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial\lambda^2}+2\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}$，与 $M=2I$、$\mu=I/2$ 恰好对应。(4) 中 $\theta\to\pi$ 时 $\sin(\theta/2)\to1$，势能近似为常数 $q^2/2R$，故相对运动化为自由粒子（圆环上的平面转子）问题。

强化33 $d^2\bar{A}/dt^2$ 与双对易子（A9）

【题目】 证明力学量 $\hat{A}$（不显含 t）的平均值对时间的二次微商为

$$\frac{d^2\bar{A}}{dt^2}=-\frac{1}{\hbar^2}\overline{[[\hat{A},\hat{H}],\hat{H}]},$$

其中 $\hat{H}$ 为该体系的哈密顿量。

【解答】（证）

$$\bar{A}=\int \psi^{*}\hat{A}\psi\,d\tau,$$

$$\frac{d\bar{A}}{dt}=\int \psi^{*}\hat{A}\frac{\partial\psi}{\partial t}d\tau+\int\frac{\partial\psi^{*}}{\partial t}\hat{A}\psi\,d\tau,$$

其中

$$\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi,\quad \frac{\partial\psi^{*}}{\partial t}=-\frac{1}{i\hbar}(\hat{H}\psi)^{*}.$$

$$\frac{d\bar{A}}{dt}=\frac{1}{i\hbar}\int\psi^{*}\hat{A}\hat{H}\psi\,d\tau-\frac{1}{i\hbar}\int(\hat{H}\psi)^{*}\hat{A}\psi\,d\tau$$

$$=\frac{1}{i\hbar}\int\psi^{*}(\hat{A}\hat{H}-\hat{H}\hat{A})\psi\,d\tau=\frac{1}{i\hbar}\int\psi^{*}[\hat{A},\hat{H}]\psi\,d\tau.$$

$$\frac{d^{2}\bar{A}}{dt^{2}}=\frac{1}{i\hbar}\left\{\int\psi^{*}[\hat{A},\hat{H}]\frac{\partial\psi}{\partial t}d\tau+\int\frac{\partial\psi^{*}}{\partial t}[\hat{A},\hat{H}]\psi\,d\tau\right\}$$

$$=\frac{1}{i\hbar}\left\{\frac{1}{i\hbar}\int\psi^{*}[\hat{A},\hat{H}]\hat{H}\psi\,d\tau-\frac{1}{i\hbar}\int\psi^{*}\hat{H}[\hat{A},\hat{H}]\psi\,d\tau\right\}$$

$$=-\frac{1}{\hbar^{2}}\int\psi^{*}[[\hat{A},\hat{H}],\hat{H}]\psi\,d\tau=-\frac{1}{\hbar^{2}}\overline{[[\hat{A},\hat{H}],\hat{H}]}.$$

强化34 一维匀强电场中 ⟨p⟩、⟨x⟩ 的时间演化（A10）

【题目】 电荷为 q、质量为 μ 的点粒子在一维均匀电场 $\boldsymbol{E}$ 中运动，位势为 $V(x)=-qEx$。在 $t=0$ 时该粒子的坐标与动量平均值分别为 $\langle x\rangle=x_0$ 与 $\langle\hat{p}_x\rangle=0$。

(1) 计算 t 时刻的动量平均值 $\langle \hat{p}_x \rangle$；

(2) 计算 t 时刻的坐标平均值 $\langle x \rangle$；

(3) 把计算的结果同经典物理的结果比较。

【解答】 (1)

$$\frac{d\langle p_x \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\overline{[\hat{p}_x, \hat{H}]} = \frac{1}{i\hbar}\overline{\left[\hat{p}_x, \frac{\hat{p}_x^2}{2\mu} - qEx\right]} = qE. \quad (1)$$

上式积分后得

$$\langle p_x \rangle = qEt + c. \quad (2)$$

由 $t = 0$ 时 $\langle \hat{p}_x \rangle = 0$，得积分常数 $c = 0$。t 时刻的动量平均值为

$$\langle p_x \rangle = qEt. \quad (3)$$

(2)

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\overline{[x, \hat{H}]} = \frac{1}{i\hbar}\overline{\left[x, \frac{\hat{p}_x^2}{2\mu} - qEx\right]} = \frac{1}{\mu}\langle p_x \rangle. \quad (4)$$

将式 (3) 代入式 (4)，得

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{qE}{\mu}t. \quad (5)$$

上式积分后得

$$\langle x \rangle = \frac{qE}{2\mu}t^2 + c. \quad (6)$$

由 $t=0$ 时 $\langle x\rangle = x_0$，得积分常数 $c = x_0$。t 时刻的坐标平均值

$$\langle x\rangle = x_0 + \tfrac{1}{2}\left(\tfrac{qE}{\mu}\right)t^2. \quad (7)$$

(3) 按经典力学，t 时刻粒子的坐标 x 与动量 p_x 为

$$x = x_0 + \tfrac{1}{2}at^2 = x_0 + \tfrac{1}{2}\left(\tfrac{qE}{\mu}\right)t^2, \quad (8)$$

$$p_x = \mu v_x = \mu a t = qEt. \quad (9)$$

比较式 (3)、(7) 与 (8)、(9) 看出，量子力学中坐标与动量的平均值随时间变化的规律，同经典力学中坐标与动量随时间变化的规律相同。应该指出，这只是一个特殊情况。在一般情况下，量子力学与经典力学的结果是很不相同的。

强化35 $V=-\alpha/r^s$ 束缚态条件 $0<s<2$ (A11)

【题目】 质量为 μ 的粒子在中心力场 $V(r)=-\dfrac{\alpha}{r^s}$（$\alpha>0$）中运动，证明存在束缚态的条件是 $0<s<2$。

【解答】（证）根据维里定理

$$\langle T\rangle=\frac{1}{2}\overline{(\boldsymbol{r}\cdot\nabla V)}=\frac{1}{2}\overline{\left(r\frac{\partial V}{\partial r}\right)}=\frac{s\alpha}{2}\overline{\left(\frac{1}{r^s}\right)}>0.$$

可见 $s>0$。由于 $V(r)\ll 0$，$V(\infty)\to 0$，故束缚定态能量 $E<0$。

$$E=\langle T\rangle+\langle V\rangle=\frac{s\alpha}{2}\overline{\left(\frac{1}{r^s}\right)}-\alpha\overline{\left(\frac{1}{r^s}\right)}=\left(\frac{s}{2}-1\right)\alpha\overline{\left(\frac{1}{r^s}\right)}<0.$$

由上式知，$s<2$。可见，存在束缚态的条件是 $0<s<2$。

强化36 类氢原子 ⟨nlm|1/r²|nlm⟩（A12）

【题目】 势能 $V=-\frac{Ze^2}{r}$ 的类氢原子处于 ψ_{nlm} 态，试计算 $\frac{1}{r^2}$ 的平均值

$$\langle nlm|\frac{1}{r^2}|nlm\rangle.$$

【解答】 令

$$\psi_{nlm}(\boldsymbol{r})=\frac{u_{nl}(r)}{r}Y_{lm}(\theta,\varphi),\ (1)$$

$u_{nl}(r)$ 满足方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2}-\frac{Ze^2}{r}+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\right]u_{nl}(r)=E_n u_{nl}(r).\ (2)$$

方程 (2) 可以写成如下形式：

$$\hat{H}_{eff}\,u_{nl}(r)=E_n u_{nl}(r),\ (3)$$

其中

$$\hat{H}_{eff} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} - \frac{Ze^2}{r} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \tag{4}$$

是等效的一维哈密顿量。取 l 为参数，相应的 F–H 定理为

$$\frac{\partial E_n}{\partial l} = \left\langle \frac{\partial \hat{H}_{eff}}{\partial l} \right\rangle_{nlm}, \tag{5}$$

其中

$$E_n = -\frac{Z^2 e^2}{2an^2} = -\frac{Z^2 e^2}{2a(n_r + l + 1)^2}. \tag{6}$$

将式 (4) 与 (6) 代入式 (5)，得

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{nlm} = \langle nlm | \frac{1}{r^2} | nlm \rangle = \frac{2Z^2}{(2l+1)a^2 n^3}. \tag{7}$$

【补】答案册由式 (5)

直接给出结果，中间步骤为：左边 $\dfrac{\partial E_n}{\partial l} = \dfrac{Z^2 e^2}{a(n_r + l + 1)^3} = \dfrac{Z^2 e^2}{an^3}$ (注意 $n = n_r + l + 1$)；右边 $\left\langle \dfrac{\partial \hat{H}_{eff}}{\partial l} \right\rangle_{nlm} = \left\langle \dfrac{(2l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right\rangle_{nlm} = \dfrac{(2l+1)\hbar^2}{2\mu} \left\langle \dfrac{1}{r^2} \right\rangle_{nlm}$。两式相等并用 $a = \hbar^2/\mu e^2$ 即得式 (7)。