中国科学技术大学

2018-2019学年第一学期期终考试试题卷参考解答

考试科目：量子力学A　　　　　　　　得分：

考生所在系：　　　　　　姓名：　　　　　　学号：

一. 简答题（20分，每题2分）：

1. 从测量的角度看，力学量算符本征值的物理意义是什么?

答：对该力学量进行测量时某次具体测量可能得到的测量值.

2. 氢原子中电子与原子核之间的相互作用势能表为$V(\vec{r})=-\frac{e^2}{r}$，其中$e$为电子的电荷量，$r$为经典力学意义下电子与原子核的距离. 若以$\mu$表示电子的折合质量，请问此量子力学体系的薛定谔方程是否可以在动量表象中写成：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{p},t)=\frac{\vec{p}^2}{2\mu}\psi(\vec{p},t)+e^2\hbar\nabla_{\vec{p}}\psi(\vec{p},t)$$

答：否.

3. 设$\hat{A}$与$\hat{B}$是某量子力学体系的两个力学量算符，满足对易关系$[\hat{A},\ \hat{B}]=i$. 请问对于任意指定的正整数n，$[\hat{A},\ \hat{B}^n]=?$

答：$[\hat{A},\ \hat{B}^n]=ni\hat{B}^{n-1}$

4. 考虑质量为m的两个全同玻色子构成的体系. 若二粒子之间的相互作用有效势能仅仅依赖于粒子之间的距离$r=|\vec{x}_1-\vec{x}_2|$，即$V(\vec{x}_1,\vec{x}_2)=V(r)$，则通过引入约化质量$\mu$、相对位矢$\vec{r}$、质心位矢$\vec{R}$、相对动量$\vec{p}$和体系的总动量$\vec{P}$等概念，

$$\mu=\frac{1}{2}m,\ \vec{r}=\vec{x}_1-\vec{x}_2,\ \vec{R}=\frac{1}{2}(\vec{x}_1+\vec{x}_2),\ \vec{p}=\frac{1}{2}(\vec{p}_1-\vec{p}_2),\ \vec{P}=\vec{p}_1+\vec{p}_2$$

可以把体系的波函数写为：

$$\psi(\vec{x}_1,\vec{x}_2)=\psi(\vec{r})\exp\left(i\vec{P}\cdot\vec{R}/\hbar\right)$$

其中$\psi(\vec{r})$服从定态薛定谔方程，

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_{\vec{r}}^{\ 2}\psi(\vec{r})+V(r)\psi(\vec{r})=\mathscr{E}\psi(\vec{r})$$

它描写体系内部二粒子之间的相对运动，$\mathscr{E}$称为体系的内能. 若利用球坐标把$\vec{r}$表为，

$$\vec{r}=r\cos\theta\,\hat{k}+r\sin\theta\cos\phi\,\hat{i}+r\sin\theta\sin\phi\,\hat{j}$$

则$\psi(\vec{r})\sim\mathscr{Y}_{lm}(\theta,\phi)$. 球谐函数$\mathscr{Y}_{lm}(\theta,\phi)$的奇偶性反映的正是$\psi(\vec{r})$关于两个粒子位置矢量的交换对称性. 请问对于满足全同性原理的$\psi(\vec{x}_1,\vec{x}_2)$而言，角量子数$l$如何取值?

答：l只能取偶数值，形如$l=0,2,4,\cdots$.

5. 某量子力学体系的哈密顿算符的本征值方程是：

$$\hat{H}|n\rangle=-\frac{1}{n}E_0|n\rangle,\qquad n=1,2,3,\cdots$$

式中E_0为一具有能量量纲的正常数. 现设$t=0$时刻体系处在叠加态：

$$|\psi(0)\rangle=\frac{1}{2\sqrt{3}}|1\rangle+\frac{i}{2}|2\rangle-\sqrt{\frac{2}{3}}|3\rangle$$

若在此态下测量体系的能量，请问其期望值是多少?

答：$\langle E\rangle = -\frac{31}{72}E_0$

6. 假设二电子构成的全同费米子体系处于自旋单态：

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow,\downarrow\rangle - |\downarrow,\uparrow\rangle)$$

在此态下若测得一电子自旋角动量s_{1z}的取值为$\hbar/2$，请问另一电子自旋角动量s_{2z}可能的测量值有哪些？

答：s_{2z}的测量值只能是$s_{2z} = -\frac{\hbar}{2}$

7. 设一维量子力学体系的 Hamilton 算符$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2} + k\,x^4$属于本征值$E$的归一化本征态为$|\psi\rangle$，请写出$|\psi\rangle$态下体系动能的平均值$\langle T\rangle$与$E$之间的关系.

答： 按照 Virial 定理，$\langle T\rangle = \frac{2}{3}E$

8. 设$\vec{\sigma}$是由泡利自旋算符构造的矢量算符，$\vec{\sigma} = \sigma_1\hat{i} + \sigma_2\hat{j} + \sigma_3\hat{k}$，请问$\vec{\sigma}^2 = ?$

答：$\vec{\sigma}^2 = 3$

9. 一个带电的旋量粒子形成一个磁偶极子，它的磁偶极矩$\vec{\mu}$正比于其自旋角动量$\vec{s}$，

$$\vec{\mu} = \frac{q}{mc}\vec{s}$$

倘若这样一个荷电粒子进入到沿$(\theta,\ \phi)$方向极化的静磁场

$$\vec{B} = B\left(\hat{i}\sin\theta\cos\phi + \hat{j}\sin\theta\sin\phi + \hat{k}\cos\theta\right)$$

中运动，式中B为静磁场磁感应强度的大小，$\hat{i}$, $\hat{j}$与$\hat{k}$分别是笛卡尔直角坐标系三个坐标轴方向的单位矢量. 请问描写粒子与外磁场之间相互作用的哈密顿算符在泡利表象中用哪一个厄米矩阵表示?

答：$H' = -\vec{\mu}\cdot\vec{B} = -\frac{qB}{2mc}\begin{pmatrix} c_\theta & s_\theta e^{-i\phi} \\ s_\theta e^{i\phi} & -c_\theta \end{pmatrix}$

10. 考虑一维方势垒问题. 若势垒的势场为，

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

且粒子从势垒的左侧（$x<0$）入射，则势垒外部空间的波函数分布常写为：

$$\psi(x) = \begin{cases} \exp(ikx) + R\exp(-ikx), & x < 0 \\ T\exp(ikx), & x > a \end{cases}$$

式中$k = \sqrt{2\mu E}/\hbar > 0$，$\mu$与$E$分别为入射粒子的质量与能量. 请问此方势垒问题中概率流守恒定律的成立意味着什么?

答：$|R|^2 + |T|^2 = 1$

二. 单项选择题（20 分，每题 4 分）：

1. 在中心力场$V(r)$中运动的零自旋粒子的能量本征函数可表为：

$$\psi_{lm}(r,\theta,\phi) = \frac{u_l(r)}{r}\mathcal{Y}_{lm}(\theta,\ \phi)$$

其中$\mathcal{Y}_{lm}(\theta,\ \phi)$是球谐函数，$u_l(r)$是粒子的径向波函数，满足方程：

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

这里的μ表示粒子的质量，E是粒子的能量本征值. 倘若中心势场具有性质$V(r)|_{r\to\infty} \to 0$，请问当$u_l(r)$描写束缚态时粒子的能量本征值E如何取值 ?

A. $E<0$

B. $E=0$

C. $E>0$

D. E不能取实数值

答： A

2. 质量为μ、电荷量为q且自旋为$1/2$的带电粒子若处在磁感应强度为$\vec{B}$的外磁场中，其 Hamilton 算符可表为：

$$\hat{H}=\frac{1}{2\mu}\left[\vec{\sigma}\cdot\left(\hat{\vec{p}}-\frac{q}{c}\vec{A}\right)\right]^2$$

式中$\hat{\vec{p}}=-i\hbar\nabla$，$\vec{\sigma}$是泡利矢量算符，$\vec{\sigma}=\hat{i}\sigma_1+\hat{j}\sigma_2+\hat{k}\sigma_3=\sigma_i\vec{e}_i$， $\vec{A}$是外磁场的矢势， $\vec{B}=\nabla\times\vec{A}$. 请问 Hamilton 算符又可等价地写为如下候选表达式中的哪一个?

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

B. $\hat{H}=\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2\mu}-\frac{q}{2\mu c}\left(\hat{\vec{L}}+\hbar\vec{\sigma}\right)\cdot\vec{B}$

C. $\hat{H}=\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2\mu}-\frac{q}{2\mu c}\left(\hat{\vec{L}}+2\hbar\vec{\sigma}\right)\cdot\vec{B}$

D. $\hat{H}=\frac{1}{2\mu}\left(\hat{\vec{p}}-\frac{q}{c}\vec{A}\right)^2-\frac{q\hbar}{2\mu c}\vec{\sigma}\cdot\vec{B}$

答： D

3. 设一维简谐振子受到了一个含时微扰的作用，其 Hamilton 算符可表为，

$$\hat{H}=\hat{H}_0-x\Theta(t)F_0\left(1+\frac{t^2}{\tau^2}\right),\quad \hat{H}_0=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2$$

式中F_0，τ，μ与ω均为正的常参数， $\Theta(t)$为 Heaviside 阶梯函数，

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

若初始时刻（$t=0$）谐振子处在$\hat{H}_0$的基态$|0\rangle$， 请问它在极限$t\to+\infty$下跃迁到$\hat{H}_0$的第n个本征态$|n\rangle$上的概率是多少?

A. $\frac{\pi F_0^2\tau^2}{2\mu\hbar\omega}\exp(-\omega^2\tau^2/2)$

B. $\frac{\pi^2F_0^2\tau^2}{2\mu\hbar\omega}\exp(-2\omega\tau)$

C. $\frac{\pi F_0^2\tau^2}{2\mu\hbar\omega}\exp(-\omega^2\tau^2)$

D. $\frac{\pi^2F_0^2\tau^2}{2\mu\hbar\omega}\exp(-\omega\tau)$

答： B

4. 力学量算符在自身表象中用什么矩阵表示?

A. 对角矩阵

B. 实对角矩阵

C. 有限维的实对角矩阵

D. 行列式非零的实对角矩阵

答： B

5. 考虑由二电子构成的全同费米子体系，二电子的自旋角动量分别为$\vec{s}_1 = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}_1$和$\vec{s}_2 = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}_2$. 若体系处在自旋单态，

$$\chi(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\right]$$

则力学量算符$\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2$具有确定的测量值$-3$. 若体系处在自旋三重态，$\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2$也有确定的测量值. 请问这个测量值是多少?

A. 3

B. 0

C. 1

D. 2

答： C

三. 计算题（60 分，每题 20 分）:

1. 假设自由空间中有两个质量为m、自旋为$1/2$的全同粒子，粒子之间的相互作用可由如下有效的 Hamilton 算符描述

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_{\vec{r}}^{\,2} + \frac{g}{r}\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2$$

其中$\mu = m/2$为折合质量，$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$为二粒子的相对位置矢径，$r = |\vec{r}|$为两粒子之间的距离， g为耦合常量$(g>0)$，而$\vec{\sigma}_i\,(i=1,\ 2)$为第$i$个粒子自旋的 Pauli 算符.

(1) 请写出该两粒子体系的一组对易力学量算符完备集(CSCO)；

(2) 请给出该体系各束缚定态的能级和相应的简并度；

(3) 请写出该体系基态，并请注明相应的量子数；

(4) 倘若耦合常量$g<0$，重新求解上面(2)与(3).

解：

(1) 体系的 CSCO 可以选择为$\left\{\hat{H},\hat{L}^2,\hat{L}_3,\hat{S}^2,\hat{S}_3\right\}$，其中

$$\hat{S}=\frac{\hbar}{2}(\vec{\sigma}_1+\vec{\sigma}_2) \tag{1}$$

是体系的总自旋角动量算符.

(2) 注意到：

$$\hat{S}^2=\frac{\hbar^2}{2}(3+\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2) \tag{2}$$

$\left\{\hat{S}^2,\hat{S}_3\right\}$的共同本征态也是算符$\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2$的本征态. 在自旋单态$|00\rangle$与三重态$|1m\rangle$下，$\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2$的本征值分别为$-3$与$1$，体系的 Hamilton 算符分别表示为：

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_{\vec{r}}{}^2-\frac{3g}{r},\qquad |00\rangle \tag{3}$$

和

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_{\vec{r}}{}^2+\frac{g}{r},\qquad |1m\rangle \tag{4}$$

显然，在$g>0$情形下只有自旋单态才能形成束缚态. 把(3)式与氢原子的哈密顿算符比较，知体系的能级为：

$$E_n=-\frac{\mu(3g)^2}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}=-\frac{9mg^2}{4\hbar^2}\frac{1}{n^2},\quad n=1,\ 2,\ 3,\ \cdots \tag{5}$$

由于束缚态自旋只能是单态，能级E_n的简并度完全取决于轨道角动量角量子数l及轨道角动量磁量子数的可能取值. 按照全同性原理，体系的空间波函数必须具有交换对称性，即l必须取偶数. 如此，E_n的简并度计算如下. 注意到$l_{max}\le n-1$，若$n=2N$，

$$f_n=\sum_{l=0,2,\cdots}^{2N-2}(2l+1)=N(2N-1)=\frac{1}{2}n(n-1) \tag{6}$$

若$n=2N+1$，

$$f_n=\sum_{l=0,2,\cdots}^{2N}(2l+1)=(N+1)(2N+1)=\frac{1}{2}n(n+1) \tag{7}$$

(3) $g>0$情形下体系的基态能量为：

$$E_1=-\frac{9mg^2}{4\hbar^2} \tag{8}$$

按照(7)式，$f_1=1$，即基态是不简并的. 位置表象中体系归一化的基态波函数可表为：

$$\psi_1=\frac{1}{\sqrt{\pi}\,a^{3/2}}\exp(-r/a)\,\chi_{00} \tag{9}$$

式中，a为“玻尔”半径，

$$a=\frac{\hbar^2}{\mu(3g)^2}=\frac{2\hbar^2}{9mg^2} \tag{10}$$

而χ_{00}为体系的自旋态波函数，

$$\chi_{00}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\right] \tag{11}$$

（4）若$g<0$则只有自旋三重态才能形成束缚态. 把(4)式与氢原子的哈密顿算符比较，知体系的能级为：

$$E_n=-\frac{\mu(-g)^2}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}=-\frac{mg^2}{4\hbar^2}\frac{1}{n^2},\quad n=1,\ 2,\ 3,\ \cdots \tag{12}$$

E_n的简并度仍取决于轨道角量子数l与轨道磁量子数的可能取值. 因为自旋处于具有交换对称的三重态，全同性原理要求空间波函数必须具有交换反对称性，即l必须取奇数. 如此，E_n的简并度计算如下. 若$n=2N$，

$$f_n=3\sum_{l=1,3,\cdots}^{2N-1}(2l+1)=3N(1+2N)=\frac{3}{2}n(n+1) \tag{13}$$

若$n=2N+1$，

$$f_n=3\sum_{l=1,3,\cdots}^{2N-1}(2l+1)=3N(1+2N)=\frac{3}{2}n(n-1) \tag{14}$$

基态对应于$l=1$，从而$n=2$．所以，$g<0$情形下的基态能量为：

$$E_2=-\frac{mg^2}{64\hbar^2} \tag{15}$$

按照(13)式知，$f_2=9$，归一化的基态波函数可表为：

$$\psi_2=\frac{1}{2\sqrt{6}\,a^{3/2}}\frac{r}{a}\exp(-r/2a)\mathscr{Y}_{1m}(\theta,\phi)\chi_{1m} \tag{16}$$

式中$m=0,\pm1.$，

$$a=\frac{\hbar^2}{\mu(-g)^2}=\frac{2\hbar^2}{mg^2} \tag{17}$$

2. 在热核聚变等实验中，带电粒子被强磁场束缚于空间的一定区域内．让我们考虑一个简单情况：一个质量为μ、电荷量为q的无自旋微观粒子被沿z轴方向分布的均匀恒定强磁场B束缚于xy平面内(不需考虑z方向的运动).

(1) 写出该粒子的哈密顿算符．论证z方向的运动与xy平面上的运动是分离的，从而可以不考虑粒子在z轴方向的运动.

(2) 假设该粒子处在$\hat{L}_z$属于零本征值的某些本征态．在这些量子态中，请找出正电子能量最低的本征态并求出正电子的最低能量.

(3) 如果再引入一个静电场$\mathscr{E}_0$，其静电标势在xy平面内极坐标中的表示式为$\varphi=\mathscr{E}_0\rho\cos^2\phi$，试利用微扰论求出该电场对于粒子最低能量的一阶修正.

解：

(1) 粒子的 Hamilton 算符可写为：

$$\hat{H}=\frac{1}{2\mu}\left(-i\hbar\nabla-\frac{q}{c}\vec{A}\right)^2 \tag{18}$$

外磁场$\vec{B}=B\hat{k}$的矢势可取作$\vec{A}=-\frac{1}{2}\vec{r}\times\vec{B}=-\frac{1}{2}yB\hat{i}+\frac{1}{2}xB\hat{j}$．因此，(18)式又可等价地表为：

$$\hat{H}=\frac{1}{2\mu}\hat{\vec{p}}^2-\frac{qB}{2\mu c}\hat{L}_z+\frac{q^2B^2}{8\mu c^2}(x^2+y^2) \tag{19}$$

式中$\hat{p}=-i\hbar\nabla$， $\hat{L}=-i\hbar\vec{r}\times\nabla$．注意到在求坐标系里，$\hat{L}_z=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$， $\hat{p}^2$是标量算符，$x^2+y^2=r^2(1-\cos^2\theta)$，我们有：

$$\left[\hat{L}_z,\,\hat{p}^2\right]=0,\quad\left[\hat{L}_z,\,x^2+y^2\right]=0\qquad\rightsquigarrow\left[\hat{H},\,\hat{L}_z\right]=0$$

另外，我们还有$\left[\hat{L}_z,\,\hat{p}_z\right]=0$和$\left[\hat{p}_z,\,x^2+y^2\right]=0$，所以，$\left[\hat{H},\,\hat{p}_z\right]=0$．综合起来，对易力学量算符的完全集合可取为$\left\{\hat{H},\,\hat{L}_z,\,\hat{p}_z\right\}$．

(2) 设ψ是对易力学量算符完全集合$\left\{\hat{H},\,\hat{L}_z,\,\hat{p}_z\right\}$的共同本征态，且属于$\hat{L}_z$的零本征值，$\hat{L}_z\psi=0$，则能量本征值方程可表为：

$$\frac{1}{2\mu}\hat{\vec{p}}^2\psi+\frac{q^2B^2}{8\mu c^2}(x^2+y^2)\psi=E\psi \tag{20}$$

通过分离变量，$\psi=\psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z)$，可以把(20)变为三个常微分方程：

$$\begin{aligned}&\frac{1}{2\mu}\hat{\vec{p}}_1{}^2\psi_1+\frac{q^2B^2}{8\mu c^2}x^2\psi_1=E_1\psi_1,\quad\frac{1}{2\mu}\hat{\vec{p}}_2{}^2\psi_2+\frac{q^2B^2}{8\mu c^2}y^2\psi_2=E_2\psi_2,\\&\frac{1}{2\mu}\hat{\vec{p}}_3{}^2\psi_3=E_3\psi_3\end{aligned} \tag{21}$$

而$E=E_1+E_2+E_3$．根据(21)式中的第三个方程知，粒子在z轴方向是自由运动，$E_3\geq0$．所以，能量最低的量子态必有$E_3=0$．另外，(21)式表明粒子在x轴与y轴方向的运动相当于角频率为$\omega=\frac{qB}{2\mu c}$的两个相互独立的简谐振子，所以，

$$E_1 = \left(n_1 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad E_2 = \left(n_2 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad (n_1, n_2 = 0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \cdots) \tag{22}$$

所以，在$\hat{L}_z$属于零本征值的所有本征态中，最低的能量本征值为：

$$E_{min} = \hbar\omega = \frac{\hbar q B}{2\mu c} \tag{23}$$

它对应于$n_1 = n_2 = E_3 = 0$，相应的归一化波函数是两个高斯波包的乘积：

$$\psi_0(x, y) = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\exp\left[-\frac{\mu\omega}{2\hbar}(x^2 + y^2)\right] = \sqrt{\frac{qB}{2\pi\hbar c}}\exp\left[-\frac{qB}{4\hbar c}(x^2 + y^2)\right] \tag{24}$$

(3) 因为$\psi_0(x, y)$无简并，可按非简并态微扰论处理. 带电粒子与外电场之间的静电势能是：

$$\hat{H}' = q\mathscr{E}_0 \rho \cos^2\phi \tag{25}$$

现求其在$\psi_0(x, y)$态中的平均值. 首先把(24)式在极坐标系中写为：

$$\psi_0(\rho) = \sqrt{\frac{qB}{2\pi\hbar c}}\exp\left[-\frac{qB}{4\hbar c}\rho^2\right]$$

因此，

$$\begin{aligned}
\langle H' \rangle &= \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\infty} d\rho\ \rho[\psi_0(\rho)]^* \hat{H}' \psi_0(\rho) \\
&= \frac{q^2 \mathscr{E}_0 B}{2\pi\hbar c}\int_0^{2\pi}\cos^2\phi\ d\phi \int_0^{\infty} d\rho\ \rho^2 \exp\left[-\frac{qB}{2\hbar c}\rho^2\right] \\
&= \frac{q^2 \mathscr{E}_0 B}{4\hbar c}\left(\frac{2\hbar c}{qB}\right)^{3/2}\int_0^{\infty} t^{1/2}\exp(-t)\,dt \\
&= \frac{1}{2} q\mathscr{E}_0 \sqrt{\frac{2\hbar c}{qB}}\,\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \\
&= \frac{1}{4} q\mathscr{E}_0 \sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{qB}}
\end{aligned}$$

即最低能级的一级近似为：

$$E_{min} \approx \frac{\hbar q B}{2\mu c} + \frac{1}{4} q\mathscr{E}_0 \sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{qB}} \tag{26}$$

3. 考虑半无限长直线上的一维类氢原子体系，设电子在势场

$$V(x)=\begin{cases}+\infty, & x<0\\ -\dfrac{e^2}{x}, & x>0\end{cases}$$

中运动并形成束缚态(电子的电量与质量分别记作e和μ). 倘若体系基态的试探波函数可以取为$\psi(\alpha, x)=A\,\Theta(x)\,x\exp(-\alpha x)$，这里$\alpha$是变分参数，

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

是 Heaviside 阶梯函数，请使用变分法估算体系的基态能量.

解:

体系的基态是束缚态，试探波函数$\psi(\alpha,x)$中的变分参数必须满足条件$\alpha>0$.

如此，由归一化条件

$$1=\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(\alpha,x)|^2dx=A^2\int_0^{\infty}x^2e^{-2\alpha x}dx=\frac{A^2}{(2\alpha)^3}\Gamma(3)=\frac{A^2}{4\alpha^3} \tag{27}$$

可把归一化常数A取为:

$$A=2\alpha^{3/2} \tag{28}$$

从而，

$$\psi(\alpha, x)=2\alpha^{3/2}\Theta(x)\,x\exp(-\alpha x) \tag{29}$$

按照(29)式，

$$\frac{d\psi(\alpha, x)}{dx}=2\alpha^{3/2}\Theta(x)\,(1-\alpha x)\exp(-\alpha x)$$

$$\frac{d^2\psi(\alpha, x)}{dx^2}=2\alpha^{3/2}\delta(x)-2\alpha^{5/2}\Theta(x)\,(2-\alpha x)\exp(-\alpha x)$$

这里使用了数学恒等式 $\frac{d\Theta(x)}{dx}=\delta(x)$ 与 $x\delta(x)=0$．因此，体系哈密顿算符在 $\psi(\alpha,x)$ 态下的平均值为：

$$
\begin{aligned}
\langle H(\alpha)\rangle &= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(\alpha,\,x)\frac{d^2\psi(\alpha,\,x)}{dx^2}dx - e^2\int_0^\infty\frac{|\psi(\alpha,\,x)|^2}{x}dx \\
&= \frac{2\hbar^2}{\mu}\alpha^4\int_0^\infty x(2-\alpha\,x)\exp(-2\alpha\,x)dx - 4\alpha^3e^2\int_0^\infty x\exp(-2\alpha\,x)dx \\
&= \frac{\hbar^2}{2\mu}\alpha^2\left[2\Gamma(2)-\frac{1}{2}\Gamma(3)\right]-\alpha e^2\Gamma(2) \\
&= \frac{\hbar^2\alpha^2}{2\mu}-\alpha e^2
\end{aligned}
$$

(30)

极值条件为：

$$0=\frac{d\langle H(\alpha)\rangle}{d\alpha}=\frac{\hbar^2\alpha}{\mu}-e^2, \qquad \rightsquigarrow\ \alpha=\frac{\mu e^2}{\hbar^2} \tag{31}$$

把(31)式确定的 α 值代回到(30)，就得到了变分法意义下一维氢原子体系的基态能量的近似值：

$$E_G\approx\langle H(\alpha)\rangle\Big|_{\alpha=\frac{\mu e^2}{\hbar^2}}=-\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \tag{32}$$

这个结果实际上与精确值完全相同.