第三章习题答案

习题 3.1

(1) 势能的期望值为

$$
\begin{aligned}
\langle V\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} V(x)\left|\Psi(x,t)\right|^2 dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2}m\omega^2x^2\frac{\alpha}{\pi^{1/2}}e^{-\alpha^2x^2}dx \\
&= \frac{m\omega^2}{2\pi^{1/2}\alpha^2}\int_{-\infty}^{\infty} u^2e^{-u^2}du,
\end{aligned}
$$

其中利用了换元 $u=\alpha x$ 。利用分部积分法可得

$$
\int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2}du = ue^{-u^2}\Big|_{u\to-\infty}^{u\to\infty} + 2\int_{-\infty}^{\infty} u^2e^{-u^2}du = 2\int_{-\infty}^{\infty} u^2e^{-u^2}du,
$$

左边的积分值为 $\pi^{1/2}$ ，因此

$$
\int_{-\infty}^{\infty} u^2e^{-u^2}du = \frac{\pi^{1/2}}{2},
$$

$$
\langle V\rangle = \frac{m\omega^2}{4\alpha^2}.
$$

(2)

办法 (I)：动能的期望值为

$$
\begin{aligned}
\langle K\rangle &= \frac{\langle p^2\rangle}{2m} \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\Psi''(x,t)dx \\
&= \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} \left|\Psi'(x,t)\right|^2 dx \\
&= \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\alpha^5}{\pi^{1/2}}x^2e^{-\alpha^2x^2}dx \\
&= \frac{\hbar^2\alpha^2}{2m\pi^{1/2}}\int_{-\infty}^{\infty} u^2e^{-u^2}du \\
&= \frac{\hbar^2\alpha^2}{4m}.
\end{aligned}
$$

其中利用了以下等式，对于 $f(x), g(x)$ 满足

$$
\lim_{|x|\to\infty} f(x)=0,\ \lim_{|x|\to\infty} g(x)=0, \limsup_{|x|\to\infty}\left|g'(x)\right| = 0,
$$

都具有

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)g''(x)dx = f(x)g'(x)\Big|_{x\to-\infty}^{x\to\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} f'(x)g'(x)dx = -\int_{-\infty}^{\infty} f'(x)g'(x)dx\,.$$

办法 (II)：动量表象的波函数为

$$\begin{aligned}
\Phi(p,t) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi(x,t)e^{-ipx/\hbar}dx\\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\alpha}{\pi^{1/2}}\right)^{1/2}\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2x^2-\frac{ipx}{\hbar}-\frac{1}{2}i\omega t\right)dx\\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\alpha}{\pi^{1/2}}\right)^{1/2}\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2\left(x+\frac{ip}{\hbar\alpha^2}\right)^2-\frac{p^2}{2\hbar^2\alpha^2}-\frac{1}{2}i\omega t\right)dx\\
&= \left(\frac{\alpha}{2\pi^{3/2}\hbar}\right)^{1/2}\exp\left(-\frac{p^2}{2\hbar^2\alpha^2}-\frac{1}{2}i\omega t\right)\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2\left(x+\frac{ip}{\hbar\alpha^2}\right)^2\right)dx\\
&= \left(\frac{1}{2\pi^{3/2}\hbar\alpha}\right)^{1/2}\exp\left(-\frac{p^2}{2\hbar^2\alpha^2}-\frac{1}{2}i\omega t\right)\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{1}{2}\left(u+\frac{ip}{\hbar\alpha}\right)^2\right)du,
\end{aligned}$$

令

$$I(a) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x+ia)^2/2}dx,$$

其中 $a\in\mathbb{R}$ 。因此

$$\begin{aligned}
I'(a) &= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial}{\partial a}e^{-(x+ia)^2/2}dx\\
&= \int_{-\infty}^{\infty} -i(x+ia)e^{-(x+ia)^2/2}dx\\
&= i\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial}{\partial x}e^{-(x+ia)^2/2}dx\\
&= i\,e^{-(x+ia)^2/2}\Big|_{x\to-\infty}^{x\to\infty}\\
&\equiv 0,
\end{aligned}$$

因此

$$I(a)\equiv I(0) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2}dx = (2\pi)^{1/2},$$

$$\Phi(p,t) = \left(\frac{1}{\pi^{1/2}\hbar\alpha}\right)^{1/2} e^{-p^2/2\hbar^2\alpha^2-i\omega t/2}.$$

动能的期望值为

$$
\begin{aligned}
\langle K\rangle &= \frac{\left\langle p^2\right\rangle}{2m} \\
&= \frac{1}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} p^2\left|\Phi(p,t)\right|^2 dp \\
&= \frac{1}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} p^2\frac{1}{\pi^{1/2}\hbar\alpha}e^{-p^2/\hbar^2\alpha^2}dp \\
&= \frac{\hbar^2\alpha^2}{2m\pi^{1/2}}\int_{-\infty}^{\infty} u^2 e^{-u^2}du \\
&= \frac{\hbar^2\alpha^2}{4m}.
\end{aligned}
$$

(3)
根据 (2) 的结果可得

$$\Phi(p,t) = \left(\frac{1}{\pi^{1/2}\hbar\alpha}\right)^{1/2} e^{-p^2/2\hbar^2\alpha^2 - i\omega t/2},$$

因此动量的概率分布函数为

$$\left|\Phi(p,t)\right|^2 = \frac{1}{\pi^{1/2}\hbar\alpha}e^{-p^2/\hbar^2\alpha^2}.$$

计算动量或动能的期望值时，办法 (I) 与办法 (II) 均适用，取决于计算的难度。

附录：

(2) 的办法 (I) 与办法 (II) 计算的结果是相等的，这是为什么呢?

对于 $u \in L^1(\mathbb{R})$ ，定义其**傅立叶变换 (Fourier Transform)** 为

$$\hat{u}(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ixy}u(x)dx, \qquad y \in \mathbb{R},$$

定义**傅立叶逆变换 (Inverse Fourier Transform)** 为

$$\check{u}(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ixy}u(x)dx, \qquad y \in \mathbb{R}.$$

很显然，傅立叶变换与傅立叶逆变换操作都是在复数域 $\mathbb{C}$ 上线性的，即对于 $\alpha,\beta \in \mathbb{C}$ ，都具有

$$
\begin{aligned}
(\alpha u(x) + \beta v(x))^{\hat{}} &= \alpha\hat{u}(x) + \beta\hat{v}(x), \\
(\alpha u(x) + \beta v(x))^{\check{}} &= \alpha\check{u}(x) + \beta\check{v}(x),
\end{aligned}
$$

其中等式左边分别表示的是 $\alpha u(x) + \beta v(x)$ 的傅立叶变换与傅立叶逆变换。

定理 1: Plancherel's Theorem
如果 $u \in L^1(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R})$ ，那么 $\hat{u}, \check{u} \in L^2(\mathbb{R})$ ，并且

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left|\hat{u}(y)\right|^2 dy = \int_{-\infty}^{\infty} \left|\check{u}(y)\right|^2 dy = \int_{-\infty}^{\infty} \left|u(x)\right|^2 dx .$$

证明：
对于 $v, w \in L^1(\mathbb{R})$ ，可得

$$\int_{-\infty}^{\infty} v(x)\hat{w}(x)dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ixy}v(x)w(y)dxdy,$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} \hat{v}(y)w(y)dy = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ixy}v(x)w(y)dxdy,$$

因此

$$\int_{-\infty}^{\infty} v(x)\hat{w}(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{v}(y)w(y)dy .$$

根据第 2 页的计算，可以得出

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ixy-tx^2}dx = \sqrt{\frac{\pi}{t}}e^{-y^2/4t}, \qquad t > 0,$$

对于 $\epsilon > 0$ ，定义函数 $v_\epsilon(x) = e^{-\epsilon x^2}$, 可以得出 $\hat{v}_\epsilon(y) = \dfrac{1}{\sqrt{2\epsilon}}e^{-y^2/4\epsilon}$. 代入**蓝色**部分可得

$$\int_{-\infty}^{\infty} \hat{w}(y)e^{-\epsilon y^2}dy = \frac{1}{\sqrt{2\epsilon}}\int_{-\infty}^{\infty} w(x)e^{-x^2/4\epsilon}dx .$$

对于 $u \in L^1(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R})$ ，定义 $v(x) = u^*(-x)$ 。令 $w = u \otimes v \in L^1(\mathbb{R}) \cap C(\mathbb{R})$ ，其中 $\otimes$ 是**卷积 (Convolution)**，定义如下

$$w(y) = \int_{-\infty}^{\infty} u(x)v(y-x)dx .$$

根据后面的定理 2 可得

$$\hat{w}(y) = \sqrt{2\pi}\hat{u}(y)\hat{v}(y) \in L^\infty(\mathbb{R}),$$

然而

$$\hat{v}(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ixy}u^*(-x)dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ixy}u^*(x)dx = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ixy}u(x)dx\right)^* = \hat{u}^*(y),$$

积分利用了换元 $x \mapsto -x$ 。因此

$$\hat{w}(y) = \sqrt{2\pi}\left|\hat{u}(y)\right|^2.$$

因为 w 是处处连续的，所以

$$\lim_{\epsilon\to0}\frac{1}{\sqrt{2\epsilon}}\int_{-\infty}^{\infty} w(x)e^{-x^2/4\epsilon}dx = w(0)\lim_{\epsilon\to0}\frac{1}{\sqrt{2\epsilon}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/4\epsilon}dx = \sqrt{2\pi}w(0),$$

这是因为 $\epsilon\to0$ 时，$e^{-x^2/4\epsilon}$ 的图像向原点靠拢。对**玫瑰色**部分取极限 $\epsilon\to0$ 可得

$$\int_{-\infty}^{\infty}\hat{w}(y)dy = \sqrt{2\pi}w(0).$$

根据**红色**与**橙色**部分可得

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left|\hat{u}(y)\right|^2dy = w(0) = \int_{-\infty}^{\infty}u(x)v(-x)dx = \int_{-\infty}^{\infty}\left|u(x)\right|^2dx.$$

$\int_{-\infty}^{\infty}\left|\check{u}(y)\right|^2dy = \int_{-\infty}^{\infty}\left|u(x)\right|^2dx$ 原理相同，不再赘述。

□

定理 2: 傅立叶变换的性质
对于 $u, v \in L^2(\mathbb{R})$,
(A) $\int_{-\infty}^{\infty}u(x)v^*(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty}\hat{u}(y)\hat{v}^*(y)dy.$
(B) $\left(\frac{\partial^n u}{\partial x^n}(x)\right)^{\wedge} = (iy)^n\hat{u}(y)$, 其中等式左边表示的是 $\frac{\partial^n u}{\partial x^n}(x)$ 的傅立叶变换。
(C) 如果 $u, v \in L^1(\mathbb{R})\cap L^2(\mathbb{R})$ ，定义 $w = u \otimes v$ ，那么 $\hat{w}(y) = \sqrt{2\pi}\hat{u}(y)\hat{v}(y)$.
(D) $u = (\hat{u})^{\vee}$, 其中等式右边表示的是 $\hat{u}$ 的傅立叶逆变换。

证明：
(A) 对于 $\alpha \in \mathbb{C}$, 根据定理 1 可得

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left|u(x)+\alpha v(x)\right|^2dx = \int_{-\infty}^{\infty}\left|\hat{u}(y)+\alpha\hat{v}(y)\right|^2dy,$$

而

$$\left(u(x)+\alpha v(x)\right)^* = u^*(x)+\overline{\alpha}v^*(x),$$
$$\left(\hat{u}(y)+\alpha\hat{v}(y)\right)^* = \hat{u}^*(y)+\overline{\alpha}\hat{v}^*(y),$$

因此

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left|u(x)\right|^2 + \left|\alpha v(x)\right|^2 + \alpha u^*(x)v(x) + \overline{\alpha} u(x)v^*(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left|\hat{u}(y)\right|^2 + \left|\alpha \hat{v}(y)\right|^2 + \alpha \hat{u}^*(y)\hat{v}(y) + \overline{\alpha} \hat{u}(y)\hat{v}^*(y)dy,$$

根据定理 1 消去等式两边相等的项可得

$$\int_{-\infty}^{\infty} \alpha u^*(x)v(x) + \overline{\alpha} u(x)v^*(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \alpha \hat{u}^*(y)\hat{v}(y) + \overline{\alpha} \hat{u}(y)\hat{v}^*(y)dy,$$

分别取 $\alpha = 1, i$ 可得

$$\int_{-\infty}^{\infty} u^*(x)v(x) + u(x)v^*(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{u}^*(y)\hat{v}(y) + \hat{u}(y)\hat{v}^*(y)dy,$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} u^*(x)v(x) - u(x)v^*(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{u}^*(y)\hat{v}(y) - \hat{u}(y)\hat{v}^*(y)dy,$$

将两式相减即可得证。

(B)

$$\begin{aligned}\widehat{\left(\frac{\partial^n u}{\partial x^n}(x)\right)} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ixy}\frac{\partial^n u}{\partial x^n}(x)dx \\ &= \frac{(-1)^n}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^n}{\partial x^n}e^{-ixy}u(x)dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ixy}(iy)^n u(x)dx = (iy)^n\hat{u}(y).\end{aligned}$$

(C)

$$\begin{aligned}\hat{w}(y) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ixy}\int_{-\infty}^{\infty} u(z)v(x-z)dzdx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-izy}u(z)\left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(x-z)y}v(x-z)dx\right)dz \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-izy}u(z)dz\,\hat{v}(y) = \sqrt{2\pi}\hat{u}(y)\hat{v}(y).\end{aligned}$$

(D) 因为

$$\int_{-\infty}^{\infty} \check{u}(x)v(x)dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ixy}u(y)v(x)dxdy,$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} u(x)\check{v}(x)dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ixy}u(y)v(x)dxdy,$$

所以

$$\int_{-\infty}^{\infty} \check{u}(x)v(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} u(x)\check{v}(x)dx\,.$$

而

$$\begin{aligned}\check{v}(y) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ixy}v(x)dx \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ixy}v^*(x)dx\right)^* \\ &= \left(\hat{v}^*(y)\right)^*,\end{aligned}$$

因此

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\hat{u}(x))\check{\ } v(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{u}(x)\check{v}(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{u}(x)\left(\hat{v}^*(x)\right)^* dx,$$

根据 (A) 可得

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\hat{u}(x))\check{\ } v(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} u(x)v^{**}(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} u(x)v(x)dx,$$

根据 $v(x)$ 的任意性，得证。

□

办法 (I) 等价于计算

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left|u'(x)\right|^2 dx,$$

办法 (II) 等价于计算

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left|y\hat{u}(y)\right|^2 dy,$$

根据定理 1 可得

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left|u'(x)\right|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left|\left(u'(x)\right)\hat{\ }\right|^2 dx,$$

根据定理 2 (B) 可得

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left|\left(u'(x)\right)\hat{\ }\right|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left|y\hat{u}(y)\right|^2 dy,$$

因此办法 (I) 与办法 (II) 计算的结果是相等的。

习题 3.2

题目有误，实际的波函数为

$$\psi=\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}e^{-r/a_0}.$$

(1)

$$\begin{aligned}\langle r\rangle&=\int_0^\infty r\left|\psi\right|^2 4\pi r^2 dr\\&=\frac{4}{a_0^3}\int_0^\infty r^3e^{-2r/a_0}dr\\&=\frac{1}{4}a_0\int_0^\infty u^3e^{-u}du\\&=\frac{1}{4}a_0\left[-(u^3+3u^2+6u+6)e^{-u}\right]_{u=0}^{u\to\infty}\\&=\frac{3}{2}a_0.\end{aligned}$$

(2)

$$\begin{aligned}\left\langle-\frac{e^2}{r}\right\rangle&=\int_0^\infty-\frac{e^2}{r}\left|\psi\right|^2 4\pi r^2 dr\\&=-\frac{4e^2}{a_0^3}\int_0^\infty re^{-2r/a_0}dr\\&=-\frac{e^2}{a_0}\int_0^\infty ue^{-u}du\\&=-\frac{e^2}{a_0}\left[-(u+1)e^{-u}\right]_{u=0}^{u\to\infty}\\&=-\frac{e^2}{a_0}.\end{aligned}$$

(3)

$$r^2\left|\psi\right|^2=\frac{1}{\pi a_0^3}r^2e^{-2r/a_0},$$

最可几半径为 $r^2\left|\psi\right|^2$ 取到极大值对应的 r 值。而

$$\log\left(r^2\left|\psi\right|^2\right)=\log\left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right)+2\log r-\frac{2r}{a_0},$$

因此

$$\frac{\partial}{\partial r}\log\left(r^2\left|\psi\right|^2\right)=\frac{2}{r}-\frac{2}{a_0},$$

$$
\frac{\partial^2}{\partial r^2}\log\left(r^2\left|\psi\right|^2\right)=-\frac{2}{r^2}<0,
$$

因此最可几半径为

$$
r=a_0.
$$

(4) 因为

$$
P\psi=-i\hbar\nabla\psi,
$$

所以

$$
\begin{aligned}
\langle K\rangle &= \frac{\left\langle p^2\right\rangle}{2m} \\
&= \frac{1}{2m}\left\langle\psi\left|P^2\right|\psi\right\rangle \\
&= \frac{1}{2m}\langle P\psi, P\psi\rangle \\
&= \frac{1}{2m}\int_0^\infty\left|P\psi\right|^2 4\pi r^2 dr \\
&= \frac{\hbar^2}{2m}\int_0^\infty\left|\nabla\psi\right|^2 4\pi r^2 dr \\
&= \frac{2\hbar^2}{a_0^5}\int_0^\infty r^2 e^{-2r/a_0} dr \\
&= \frac{\hbar^2}{4a_0^2}\int_0^\infty u^2 e^{-u} du \\
&= \frac{\hbar^2}{2a_0^2}.
\end{aligned}
$$

其中 $\langle A, B\rangle$ 为球坐标 $(r,\theta,\phi)\in(0,\infty)\times(0,\pi)\times(0,2\pi)$ 上定义的内积，对于函数

$$
A, B:(0,\infty)\times(0,\pi)\times(0,2\pi)\to\mathbb{C},
$$

其内积为

$$
\langle A, B\rangle=\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty}A^*Br^2\sin\theta\, dr\, d\theta\, d\phi.
$$

(5)
因为坐标表象的波函数是球对称的，所以动量表象的波函数也是球对称的。只需计算 $\mathbf{p}=p\mathbf{k}$ 对应的动量表象波函数 $\phi(\mathbf{p})$ 即可，其中 $\mathbf{k}$ 是 Z 轴方向的单位向量。因此

$$
\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}=pr\cos\theta.
$$

$$
\begin{aligned}
\phi(\mathbf{p}) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty} \psi(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}\sqrt{\pi a_0^3}} \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty} e^{-r/a_0} e^{-ipr\cos\theta/\hbar} r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi^2\hbar^3 a_0^3}} \int_0^{\pi}\int_0^{\infty} e^{-r/a_0} e^{-ipr\cos\theta/\hbar} r^2 \sin\theta dr d\theta \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi^2\hbar^3 a_0^3}} \int_0^{\infty} e^{-r/a_0} r^2 \left(\int_0^{\pi} e^{-ipr\cos\theta/\hbar} \sin\theta d\theta \right) dr
\end{aligned}
$$

而

$$
\int_0^{\pi} e^{-ipr\cos\theta/\hbar} \sin\theta d\theta = \int_{-1}^{1} e^{-ipru/\hbar} du = \frac{2\sin\frac{pr}{\hbar}}{\frac{pr}{\hbar}} = \frac{2\hbar}{pr}\sin\frac{pr}{\hbar},
$$

因此

$$
\begin{aligned}
\phi(\mathbf{p}) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi^2\hbar^3 a_0^3}} \int_0^{\infty} e^{-r/a_0} r^2 \frac{2\hbar}{pr} \sin\frac{pr}{\hbar} dr \\
&= \frac{2\hbar}{p} \frac{1}{\sqrt{2\pi^2\hbar^3 a_0^3}} \int_0^{\infty} e^{-r/a_0} r \sin\frac{pr}{\hbar} dr \\
&= \frac{1}{p^3}\sqrt{\frac{2\hbar^3}{\pi^2 a_0^3}} \int_0^{\infty} e^{-\hbar u/pa_0} u \sin u du,
\end{aligned}
$$

而当 $a > 0$ 时

$$
\begin{aligned}
\int_0^{\infty} e^{-ar} r \sin r dr &= \frac{1}{2i}\int_0^{\infty} \left(e^{-(a-i)r} - e^{-(a+i)r}\right) r dr \\
&= \frac{1}{2i}\left(\frac{1}{(a-i)^2} - \frac{1}{(a+i)^2}\right) \\
&= \frac{2a}{(1+a^2)^2},
\end{aligned}
$$

其中利用了等式

$$
\int_0^{\infty} r e^{-zr} dr = \frac{1}{z^2}, \qquad \mathrm{Re}(z) > 0,
$$

因此

$$\phi(\mathbf{p}) = \frac{1}{p^3}\sqrt{\frac{2\hbar^3}{\pi^2 a_0^3}}\frac{\frac{2\hbar}{pa_0}}{\left(1+\frac{\hbar^2}{p^2a_0^2}\right)^2} = \frac{\sqrt{8\hbar^5 a_0^3}}{\pi\left(p^2a_0^2+\hbar^2\right)^2}\,.$$

动量概率分布函数为

$$\left|\phi(\mathbf{p})\right|^2 = \frac{8\hbar^5 a_0^3}{\pi^2\left(p^2a_0^2+\hbar^2\right)^4}\,.$$

有时候我真的挺佩服这些出物理习题的，明明什么数学都学不会，只能靠这些脑残计算取得精神胜利，并且掩盖自己是废物的事实。

习题 3.3

根据 23 页 (2.4.10) 可得，电流密度为

$$J_e = -eJ = -\frac{i\hbar e}{2m_e}\left(\psi\,\nabla\psi^* - \psi^*\,\nabla\psi\right).$$

而球坐标下的梯度表达式为

$$\nabla f = \frac{\partial f}{\partial r}\hat{r} + \frac{1}{r}\frac{\partial f}{\partial\theta}\hat{\theta} + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial f}{\partial\phi}\hat{\phi}\,.$$

因此，电流密度在 r,θ,ϕ 方向上的分量分别为

$$\begin{aligned}
J_e^r &= -\frac{i\hbar e}{2m_e}\left(\psi\,\frac{\partial\psi^*}{\partial r} - \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial r}\right),\\
J_e^\theta &= -\frac{i\hbar e}{2m_e r}\left(\psi\,\frac{\partial\psi^*}{\partial\theta} - \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right),\\
J_e^\phi &= -\frac{i\hbar e}{2m_e r\sin\theta}\left(\psi\,\frac{\partial\psi^*}{\partial\phi} - \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial\phi}\right).
\end{aligned}$$

波函数表达式为

$$\psi = CR_{nl}(r)P_l^m(\cos\theta)e^{im\phi},$$

其中 C 是与 r,θ,ϕ 无关的常量。因此

$$J_e^r = J_e^\theta = 0,$$

将 ψ 表示为

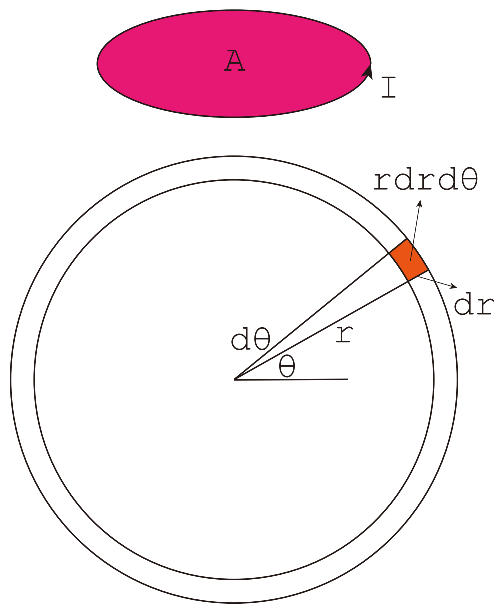
$$\psi = A(r,\theta)e^{im\phi},$$

其中 A 是实数值函数，$A^* = A$ 。可得

$$\begin{aligned}
J_e^\phi &= -\frac{i\hbar e}{2m_e r\sin\theta}\left(A^2 e^{im\phi}\frac{\partial e^{-im\phi}}{\partial\phi} - A^2 e^{-im\phi}\frac{\partial e^{im\phi}}{\partial\phi}\right)\\
&= -\frac{\hbar e m}{m_e r\sin\theta}A^2\\
&= -\frac{\hbar e m}{m_e r\sin\theta}\left|\psi\right|^2.
\end{aligned}$$

习题 3.4

(1)



如图所示，磁矩为

$$m = IA,$$

其中 I 是圆周电流的电流强度，A 是圆周内部曲面的面积。因此，圆周电流的磁矩为

$$dm = (J_e^\phi r dr d\theta)\pi(r\sin\theta)^2 = -\frac{\pi\hbar e m}{m_e}\left|\psi\right|^2 r^2\sin\theta dr d\theta.$$

(2)

$$M = \int dm = \int_0^\pi\int_0^\infty -\frac{\pi\hbar e m}{m_e}\left|\psi\right|^2 r^2\sin\theta dr d\theta,$$

利用第 8 页 $\psi = A(r,\theta)e^{im\phi}$ 可得

$$M = -\frac{\pi\hbar e m}{m_e}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty} A(r,\theta)^2 r^2 \sin\theta dr d\theta,$$

乍看之下无法计算，然而我们可以利用波函数的归一化关系

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty} \left|\psi\right|^2 r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi = 1$$

得到

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty} A(r,\theta)^2 r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi = 1,$$

由于原函数与变量 ϕ 无关，因此可以直接将 ϕ 提取出来，得到

$$\int_0^{\pi}\int_0^{\infty} A(r,\theta)^2 r^2 \sin\theta dr d\theta = \frac{1}{2\pi},$$

因此

$$M = -\frac{\hbar e m}{2m_e}.$$

而氢原子角动量 Z 轴方向的分量为

$$L^z = m\hbar,$$

因此

$$\frac{M}{L^z} = -\frac{e}{2m_e}.$$

习题 3.5

请自行完成。

提示：
(1) 转子绕固定轴转动时，哈密顿算子对应

$$H = \frac{L_3^2}{2I},$$

其中 L_3 是角动量算子，详见资料“三维空间的量子力学。” H 的特征函数与特征值是什么？

(2) 转子绕固定点转动时，哈密顿算子对应

$$H = \frac{L^2}{2I},$$

其中 $L^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2$ ，详见资料“三维空间的量子力学。” H 的特征函数与特征值是什么?

习题 3.6

题目有误，直接跳过。

习题 3.7

请参考习题 3.1 ，自行完成。

提示：动量的期望值为

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} p \left| \phi(p) \right|^2 dp \,.$$

习题 3.8

因为

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left| \psi(x) \right|^2 dx = \int_0^a A^2 x^2 (a-x)^2 dx = \frac{1}{30} A^2 a^5 = 1,$$

所以

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

因为无限深方势阱的特征函数为

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}, \qquad 0 < x < a,$$

对应的能量为

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

根据傅立叶级数的性质，我们可以将 $\psi(x)$ 表示为 $\left\{ \psi_n(x) \right\}_{n \in \mathbb{Z}_+}$ 的线性组合，即

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x),$$

其中

$$\begin{aligned}c_n &= \int_0^a \psi(x)\psi_n(x)dx \\ &= \frac{2\sqrt{15}}{a^3}\int_0^a x(a-x)\sin\frac{n\pi x}{a}dx \\ &= 2\sqrt{15}\int_0^1 u(1-u)\sin(n\pi u)\,du \\ &= \frac{4\sqrt{15}(1-(-1)^n)}{n^3\pi^3},\end{aligned}$$

因此，粒子能量的概率分布为

$$\left|c_n\right|^2 = \begin{cases}\frac{960}{n^6\pi^6}, & n=1,3,5,\dots \\ 0, & n=2,4,6,\dots\end{cases}$$

能量的期望值为

$$\langle E\rangle = \sum_{n=1}^{\infty}\left|c_n\right|^2 E_n = \sum_{k=1}^{\infty}\frac{480\hbar^2}{(2k-1)^4\pi^4 m a^2} = \frac{480\hbar^2}{\pi^4 m a^2}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{(2k-1)^4}.$$

因为偶函数 $f(x) = |x|, x\in[-\pi,\pi]$ 的傅立叶级数为

$$|x| = \frac{\pi}{2} - \frac{4}{\pi}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{(2k-1)^2}\cos(2k-1)x,$$

Parseval 定理表明，当 $f(x)\in L^2[-\pi,\pi]$ 被表示为傅立叶级数

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty}(a_k\cos kx + b_k\sin kx)$$

时，

$$\frac{a_0^2}{2} + \sum_{k=1}^{\infty}(a_k^2+b_k^2) = \frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi}f(x)^2dx.$$

因此

$$\frac{\pi^2}{2} + \frac{16}{\pi^2}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{(2k-1)^4} = \frac{2}{3}\pi^2,$$

$$\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{(2k-1)^4} = \frac{\pi^4}{96},$$

$$\langle E\rangle = \frac{5\hbar^2}{ma^2}.$$

习题 3.9

请自行完成。

提示：

$$\psi = \frac{1}{2}\psi_{2,1,0} - \frac{\sqrt{3}}{2}\psi_{2,1,-1},$$

其中 $\psi_{n,l,m}$ 是氢原子能量、角动量平方、角动量 Z 分量 $\{H, L^2, L_3\}$ 共同的特征函数。它们的特征值是什么？

习题 3.10

涉及 Bessel 函数，直接跳过。

习题 3.11

因为习题 3.6 有误，所以直接跳过。

习题 3.12

题目有误，实际的波函数为

$$\psi = \frac{1}{\left(2\pi\xi^2\right)^{1/4}} e^{ip_0x/\hbar - x^2/4\xi^2}.$$

$$\begin{aligned}
\langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} x \left|\psi(x)\right|^2 dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{1}{\left(2\pi\xi^2\right)^{1/2}} e^{-x^2/2\xi^2} dx \\
&= \frac{1}{\left(2\pi\xi^2\right)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-x^2/2\xi^2} dx \\
&= \frac{2\xi}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} u e^{-u^2} du \\
&= 0.
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
\left\langle x^2\right\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \left|\psi(x)\right|^2 dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \frac{1}{\left(2\pi\xi^2\right)^{1/2}} e^{-x^2/2\xi^2} dx \\
&= \frac{1}{\left(2\pi\xi^2\right)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-x^2/2\xi^2} dx \\
&= \frac{2\sqrt{2}\xi^2}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} u^2 e^{-u^2} du \\
&= \xi^2 .
\end{aligned}
$$

$$
\phi(p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\left(2\pi\xi^2\right)^{1/4}} e^{i(p_0-p)x/\hbar - x^2/4\xi^2} dx,
$$

根据第 4 页

$$
\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ixy-tx^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{t}} e^{-y^2/4t}, \qquad t > 0,
$$

可得

$$
\begin{aligned}
\phi(p) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \frac{1}{\left(2\pi\xi^2\right)^{1/4}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p_0-p)x/\hbar - x^2/4\xi^2} dx \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \frac{1}{\left(2\pi\xi^2\right)^{1/4}} 2\xi\pi^{1/2} e^{-(p-p_0)^2\xi^2/\hbar^2} \\
&= \left(\frac{2\xi^2}{\pi\hbar^2}\right)^{1/4} e^{-(p-p_0)^2\xi^2/\hbar^2},
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\langle p\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} p \left|\phi(p)\right|^2 dp \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} p \left(\frac{2\xi^2}{\pi\hbar^2}\right)^{1/2} e^{-2(p-p_0)^2\xi^2/\hbar^2} dp \\
&= \left(\frac{2\xi^2}{\pi\hbar^2}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} p e^{-2(p-p_0)^2\xi^2/\hbar^2} dp \\
&= \left(\frac{\hbar^2}{2\pi\xi^2}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \left(u + \frac{\sqrt{2}p_0\xi}{\hbar}\right) e^{-u^2} du \\
&= p_0,
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\langle p^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} p^2 \left|\phi(p)\right|^2 dp \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} p^2 \left(\frac{2\xi^2}{\pi\hbar^2}\right)^{1/2} e^{-2(p-p_0)^2\xi^2/\hbar^2} dp \\
&= \left(\frac{2\xi^2}{\pi\hbar^2}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} p^2 e^{-2(p-p_0)^2\xi^2/\hbar^2} dp \\
&= \frac{\hbar^2}{2\pi^{1/2}\xi^2} \int_{-\infty}^{\infty} \left(u + \frac{\sqrt{2}p_0\xi}{\hbar}\right)^2 e^{-u^2} du \\
&= p_0^2 + \frac{\hbar^2}{4\xi^2}.
\end{aligned}
$$

$$
(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \xi^2,
$$

$$
(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = \frac{\hbar^2}{4\xi^2},
$$

$$
(\Delta x)^2 (\Delta p)^2 = \hbar^2.
$$

习题 3.13

此题很不严谨，直接记住结论即可。

$$
p \approx \frac{\hbar}{r},
$$

$$
E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} \approx \frac{\hbar^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r} - \frac{me^2}{\hbar^2}\right)^2 - \frac{me^4}{2\hbar^2},
$$

因此最小能量为

$$
E_{\min} = -\frac{me^4}{2\hbar^2}.
$$