量子力学习题解答

井孝功 编

哈尔滨工业大学出版社

内 容 简 介

本书是哈尔滨工业大学出版社出版的《量子力学》的配套书。本书包括三部分内容：一是量子力学基本概念与公式的归纳和总结，二是各章习题的解答(136题)，三是七套模拟试题的解答。

本书是物理学各专业本科生教学参考书，也可供相关专业学生和科技人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

量子力学习题解答/井孝功编.—哈尔滨：哈尔滨工业大学出版社，2004.6

ISBN 7-5603-2002-3

Ⅰ.量… Ⅱ.井… Ⅲ.量子力学-高等学校-解题 Ⅳ.O413.1-44

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2004)第 010196 号

出版发行 哈尔滨工业大学出版社
社　　址 哈尔滨市南岗区教化街 21 号　邮编 150006
传　　真 0451-86414749
印　　刷 哈尔滨工业大学印刷厂
开　　本 787×960　1/16　印张 10.5　字数 185 千字
版　　次 2004 年 6 月第 1 版　2004 年 6 月第 1 次印刷
书　　号 ISBN 7-5603-2002-3/O·163
印　　数 1～3 000
定　　价 15.00 元

前　言

作为物理系四大力学之一的量子力学是一门专业基础课程，虽然，它是建立在五个基本原理的基础上，但是，由它导出的一系列结论得到了实验结果的强有力支持。因此，量子力学已经成为解决微观与介观问题的必不可少的理论工具。

量子力学给出了一套全新的思维模式和解决问题的方法，为了完成从经典理论到量子理论思维模式的转变，只是死记硬背概念和公式是不够的，必须自己动手完成相当数量的习题。

本书包括三部分内容：一是量子力学基本概念与公式的归纳和总结，二是各章习题的解答，三是模拟试题的解答。

本书是与本人编著的《量子力学》一书配套使用的，建议读者自己先试做习题，然后再与习题解答比对，这样才有利于解决问题能力的提高。

此外，有几个问题提请读者注意：首先，一个物理公式总是有使用条件的，在使用它之前，一定要先搞清楚所要处理的问题是否满足该条件，且不可拿来就用。其次，得到一个公式之后，若要判断其对错，最简单的方法之一是看等式两端的量纲是否一致。最后，一个公式在物理上是否合理也是至关重要的，通常的判别方法是，看它在特殊或极端情况下能否成立。

哈尔滨工业大学出版社对本书的出版给予了大力的支持，并为此付出了艰辛的劳动，作者对此表示衷心的感谢。

由于水平所限，加之时间仓促，难免有诸多不当之处，恳请各位读者不吝赐教。

井孝功

2003年12月

目　　录

量子力学纲要

1.量子力学概述

1.1 量子理论的诞生

1.两个理论

相对论与量子论是20世纪的两个最重大的科学发现。光速 c 和普朗克常数 h 分别是其标志性常数，当 $v \ll c$ 时，相对论退化为牛顿力学，当 $lp \gg h$ 时，量子论退化为牛顿力学，其中 v 与 p 分别为粒子运动的速率和动量，l 为粒子的活动范围。

2.三个实验

(1) 黑体辐射

维恩公式 $$\rho_\nu \mathrm{d}\nu = c_1 \exp\left(-c_2 \frac{\nu}{T}\right)\nu^3 \mathrm{d}\nu$$

瑞利 - 金斯公式 $$\rho_\nu \mathrm{d}\nu = \frac{8\pi kT}{c^3}\nu^2 \mathrm{d}\nu$$

普朗克公式 $$\rho_\nu \mathrm{d}\nu = \frac{8\pi h}{c^3}\frac{\nu^3}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right)-1}\mathrm{d}\nu$$

普朗克的能量子假说 $$\varepsilon = h\nu$$

式中，ν 为振子频率，ρ_ν 为能量密度，k 为玻耳兹曼常数，T 为绝对温度，ε 为振子能量，c_1、c_2 为常数。

(2) 光电效应

爱因斯坦的光量子假说 $$\varepsilon = h\nu$$

由 $\frac{1}{2}mv^2 = h\nu - W_0$ 可知，只有当光子的频率 ν 不小于阈值 $\nu_0 = \frac{W_0}{h}$ 时，才有光电子的发射。式中，v 为电子的运动速率，W_0 为电子的脱出功，m 为电子的质量，ε 为光子能量。

(3) 原子光谱

玻尔的旧量子论　原子在能量分别为 E_n 和 E_m($E_n > E_m$) 的两个定态之间跃迁时，发射或吸收的电磁辐射的频率 ν 满足关系式

$$h\nu = E_n - E_m$$

光谱项为

$$T(n) = -\frac{E_n}{h}$$

3. 三个飞跃

(1) 普朗克量子假说 $\varepsilon = h\nu$

(2) 德布罗意物质波假设

$$E = \hbar\omega; \quad \boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}$$

式中,ω 为角频率,$\boldsymbol{p}$ 为动量,$\boldsymbol{k}$ 为波矢量。

(3) 薛定谔方程与玻恩概率波解释

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

$|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2$ 表示 t 时刻在 $\boldsymbol{r}$ 附近单位体积元内发现粒子的概率。式中,$\psi(\boldsymbol{r},t)$ 为描述体系状态的波函数。

4. 五个基本原理

(1) 波函数的概率波解释　体系的状态用波函数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 来描述,$|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2$ 表示 t 时刻在 $\boldsymbol{r}$ 附近单位体积元内发现粒子的概率。

(2) 状态叠加原理　若体系具有一系列可能的状态 $\psi_1,\psi_2,\psi_3,\cdots,\psi_n$,则这些状态的任意线性组合

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + c_3\psi_3 + \cdots + c_n\psi_n = \sum_{m=1}^{n} c_m\psi_m$$

也一定是该体系的一个可能的状态。其中,$c_1,c_2,c_3,\cdots,c_n$ 为任意复常数。

(3) 薛定谔方程　状态随时间的变化遵循薛定谔方程

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

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

(5) 全同性原理　在全同粒子体系中,交换任意两个粒子的坐标不改变体系的状态。

1.2　在物理学中的位置

1. 按照研究方法分类

物理学可分为理论物理、实验物理和计算物理。

2. 按照所研究对象的尺度分类

物理学可分为宏观物理、微观物理和介观物理。

量子力学属于理论物理范畴,主要应用于微观物理和介观物理领域。

1.3 基本内容、特色及应用前景

1. 基本内容

包括波函数、算符和薛定谔方程三个要素。

2. 特色

在力学量取值量子化、势垒隧穿及不确定关系等内容上与经典力学有本质的差别。

3. 应用前景

21 世纪,生命、材料与信息等重要领域的发展都离不开量子理论。

2. 波 函 数

2.1 波函数的物理内涵

1. 波函数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 是描述体系状态的复函数,它满足薛定谔方程

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

2. 波函数的表示

波函数可以在任意表象中写出来,例如,$\psi(\boldsymbol{r},t)$、$\Phi(\boldsymbol{p},t)$、$C_n(t)$ 分别表示坐标、动量与任意力学量 F 表象中的波函数,也可以用不涉及具体表象的狄拉克符号 $|\psi(t)\rangle$ 来表示。

3. 波函数的模方表示其自变量的取值概率(密度)

例如,$|C_n(t)|^2$、$|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2$、$|\Phi(\boldsymbol{p},t)^2|$ 分别表示自变量 F、$\boldsymbol{r}$、$\boldsymbol{p}$ 的取值概率(密度)。

2.2 波函数应满足的条件

1. 波函数应该是平方可积的函数,即

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2\mathrm{d}\tau=\text{有限}$$

2. 自然条件

波函数还应该是单值、有限和连续的函数。

3. 边界条件

(1) 在位势的间断点 a 处,波函数及其一阶导数是连续的,即

$$\psi_1(a)=\psi_2(a);\quad \frac{\psi_1{}'(x)|_a}{m_1^*}=\frac{\psi_2{}'(x)|_a}{m_2^*}$$

式中，m_1^*、m_2^* 分别为粒子在第一和第二个区域中的有效质量。

当一个区域中的位势为无穷大时，只要求波函数连续，不要求波函数的一阶导数连续。

(2)δ 函数位势 $V(x) = \pm V_0 a\delta(x)$ 要求波函数连续，而波函数的一阶导数满足

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

其中，a 具有长度量纲，V_0 具有能量量纲。

2.3　具有特殊性质的波函数

1. 本征态

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

正交归一化条件　$\langle m \mid n\rangle = \delta_{mn}$

封闭关系　$\sum\limits_n \mid n\rangle\langle n \mid = 1$

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

2. 定态

定义　定态是能量取确定值的状态。

性质　定态之下不显含时间力学量的取值概率与平均值不随时间改变。

条件　哈密顿算符不显含时间；初始时刻的波函数为定态。

3. 束缚态与非束缚态

束缚态　在无穷远处为零的状态为束缚态，束缚态对应的本征值是断续的。

非束缚态　在无穷远处不为零的状态为非束缚态，非束缚态对应的本征值是连续的。

4. 简并态与非简并态

简并态　一个本征值对应一个以上不同的本征态时，称该本征值简并，所对应本征态的个数为简并度。

非简并态　一个本征值对应一个本征态时，称为非简并态，非简并态的简并度为 1。

5. 正宇称态与负宇称态

正宇称态　将波函数中坐标变量改变符号，若得到的新波函数与原来的波函数相同，则称该波函数具有正(偶)宇称。

负宇称态　将波函数中坐标变量改变符号，若得到的新波函数与原来的波函数相差一个负号，则称该波函数具有负(奇)宇称。

6. 耦合波函数与非耦合波函数

以两个自旋为$\frac{\hbar}{2}$的粒子为例，$s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$；$S = 0,1$

非耦合波函数为　　$|++\rangle, |--\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle$

耦合波函数为　　$|00\rangle, |10\rangle, |11\rangle, |1-1\rangle$

耦合波函数与非耦合波函数的关系为

$$|11\rangle = |++\rangle$$

$$|1-1\rangle = |--\rangle$$

$$|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+-\rangle + |-+\rangle]$$

$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+-\rangle - |-+\rangle]$$

其中，$|\pm\pm\rangle \equiv |\pm\rangle_1 |\pm\rangle_2$ 是两个粒子体系的一个非耦合波函数，$|\pm\rangle_k \equiv |\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle_k$ 为第 $k(=1,2)$ 个粒子在 s^2、s_z 表象下的本征态。

7.对称波函数与反对称波函数

反对称波函数　全同费米子体系用反对称波函数描述，对二体问题而言，有

$$\psi_a = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} \varphi_1(x_1) & \varphi_1(x_2) \\ \varphi_2(x_1) & \varphi_2(x_2) \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_1(x_1)\varphi_2(x_2) - \varphi_1(x_2)\varphi_2(x_1)]$$

对称波函数　全同玻色子体系用对称波函数描述，对二体问题而言，有

$$\varphi_s = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_1(x_1)\varphi_2(x_2) + \varphi_1(x_2)\varphi_2(x_1)]$$

2.4　状态叠加原理与展开假设

1.状态叠加原理

若 $\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_n$ 为体系可能的状态，则 $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \cdots + c_n\psi_n$ 也是体系可能的状态。其中，$c_1, c_2, c_3, \cdots, c_n$ 为任意复常数。

2.展开假设

若力学量算符 $\hat{F}$ 满足本征方程

$$\hat{F}\varphi_n = f_n\varphi_n$$

则任意的波函数 ψ 可以向 $\{\varphi_n\}$ 展开，即

$$\psi = \sum_n c_n\varphi_n$$

其中 $|c_n|^2$ 为力学量 F 在 ψ 状态上取 f_n 值的概率，因此，可以把 $\{c_n\}$ 视为 F 表象下的波函数。

2.5 状态随时间变化

1.薛定谔方程

状态随时间的变化满足薛定谔方程

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

2.当$\frac{\partial\hat{H}}{\partial t}=0$时,薛定谔方程的解为

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\sum_n c_n(0)\mid n\rangle\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n t\right)$$

其中,E_n与$\mid n\rangle$满足定态薛定谔方程$\hat{H}\mid n\rangle=E_n\mid n\rangle$,$c_n(0)$为$\psi(\boldsymbol{r},0)$在$\mid n\rangle$态上的展开系数,即

$$\psi(\boldsymbol{r},0)=\sum_n c_n(0)\mid n\rangle$$

3.算　符

3.1 算符化规则

1.线性厄米算符

可观测的力学量 F 与一个线性厄米算符$\hat{F}$相对应。

2.常用算符

动量算符

$$\hat{\boldsymbol{p}}=-\mathrm{i}\hbar\nabla;\quad \hat{p}_x=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x},\quad \hat{p}_y=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial y},\quad \hat{p}_z=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

自旋$\left(s=\frac{1}{2}\right)$算符

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

泡利算符

$$\hat{\sigma}_x=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\hat{\sigma}_y=\begin{pmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{pmatrix},\hat{\sigma}_z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$$

总自旋算符

$$\hat{\boldsymbol{S}}=\hat{\boldsymbol{s}}_1+\hat{\boldsymbol{s}}_2;\quad S=s_1+s_2,s_1+s_2-1,\cdots,\mid s_1-s_2\mid$$

轨道角动量算符

$$\hat{\boldsymbol{l}}=\boldsymbol{r}\times\hat{\boldsymbol{p}};\quad \hat{l}_x=y\hat{p}_z-z\hat{p}_y,\hat{l}_y=z\hat{p}_x-x\hat{p}_z,\hat{l}_z=x\hat{p}_y-y\hat{p}_x$$

总轨道角动量算符

$$\hat{\boldsymbol{L}} = \hat{\boldsymbol{l}}_1 + \hat{\boldsymbol{l}}_2; \quad L = l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1, \cdots, |l_1 - l_2|$$

总角动量算符

$$\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{L}} + \hat{\boldsymbol{S}}; \quad J = L + S, L + S - 1, \cdots, |L - S|$$

$$\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{j}}_1 + \hat{\boldsymbol{j}}_2; \quad \hat{\boldsymbol{j}}_1 = \hat{\boldsymbol{l}}_1 + \hat{\boldsymbol{s}}_1; \quad \hat{\boldsymbol{j}}_2 = \hat{\boldsymbol{l}}_2 + \hat{\boldsymbol{s}}_2,$$

$$J = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \cdots, |j_1 - j_2|$$

宇称算符

$$\hat{\pi}\psi(\boldsymbol{r}) = \psi(-\boldsymbol{r})$$

交换算符

$$\hat{p}_{ij}\psi(\cdots, x_i, \cdots, x_j, \cdots) = \psi(\cdots, x_j, \cdots, x_i, \cdots)$$

投影算符

$$\hat{p}_n = |n\rangle\langle n|; \quad \hat{P}_{mn} = |m\rangle\langle n|$$

3. 升降算符

定义 $$\hat{J}_{\pm} = \hat{J}_x \pm \mathrm{i}\hat{J}_y$$

$$\hat{J}_x = \frac{1}{2}(\hat{J}_+ + \hat{J}_-); \quad \hat{J}_y = \frac{1}{2\mathrm{i}}(\hat{J}_+ - \hat{J}_-)$$

作用 $$\hat{J}_{\pm}|j,m\rangle = \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)}\,|j, m\pm 1\rangle$$

3.2 厄米算符

1. 定义

$$\int \mathrm{d}x \varphi^*(x)\hat{F}\psi(x) = \int \mathrm{d}x \psi(x)\hat{F}^*\varphi^*(x)$$

或者

$$\hat{F}^+ = \hat{F}$$

2. 性质　厄米算符的本征值是实数，本征矢是正交、归一和完备的。

3.3 对易关系

1. 定义

对易关系

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

反对易关系

$$[\hat{A}, \hat{B}]_+ \equiv \{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$$

2. 对易子代数

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

3. 常用对易关系

$$[x, \hat{p}_x] = \mathrm{i}\hbar; \quad [\hat{j}_x, \hat{j}_y] = \mathrm{i}\hbar\hat{j}_z$$

3.4 守恒量

1.定义　满足$\frac{\partial \hat{F}}{\partial t}=0$和$[\hat{F},\hat{H}]=0$的力学量 F 称为守恒量。

2.性质　守恒量的取值概率与平均值不随时间改变。

3.5 对称性

若体系哈密顿算符具有某种对称性，则必有某个守恒量与之对应，同时也存在某个不可观测量。

1.空间平移对称性　对应动量守恒，空间的绝对原点是不可观测的。
2.时间平移对称性　对应能量守恒，时间的绝对原点是不可观测的。
3.空间反演对称性　对应宇称守恒，空间的绝对左右是不可观测的。
3.空间转动对称性　对应角动量守恒，空间的绝对方向是不可观测的。

3.6 两个力学量的取值

1.同时取确定值　若算符 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 满足$[\hat{A},\hat{B}]=0$，则两者有共同完备本征函数系，可同时取确定值。

2.不确定关系　若$[\hat{A},\hat{B}]\neq 0$，则两者的测量误差满足不确定关系

$$\overline{(\Delta A)^2}\cdot\overline{(\Delta B)^2}\geqslant\frac{1}{4}(\overline{\mathrm{i}[\hat{A},\hat{B}]})^2$$

特别是

$$\Delta x\cdot\Delta p\geqslant\frac{1}{2}\hbar,\quad \Delta t\cdot\Delta E\geqslant\frac{1}{2}\hbar$$

其中
$$\Delta A=\sqrt{\overline{(\Delta A)^2}},\quad \overline{(\Delta A)^2}=\overline{A^2}-\bar{A}^2$$

3.力学量完全集　如果有 N 个相互对易的力学量算符能惟一地确定体系的状态，称这 N 个力学量为力学量完全集。

3.7 算符随时间的变化

1.定义

$$\frac{\mathrm{d}\hat{F}}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial\hat{F}}{\partial t}+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{F},\hat{H}]$$

2.坐标

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\bar{r}=\frac{1}{m}\bar{p}$$

3.动量　爱伦弗斯特定理

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\bar{p}=-\overline{\nabla V(r)}$$

4.动能　位力定理

对于定态有 $$\bar{T} = \frac{1}{2}\overline{\boldsymbol{r}\cdot\nabla V(\boldsymbol{r})}$$

特别是，当 $V = \alpha x^n + \beta y^n + \gamma z^n$ 时，有

$$\bar{T} = \frac{n}{2}\bar{V}$$

5. 哈密顿量　费曼－海尔曼定理

对于束缚定态有

$$\overline{\frac{\partial H}{\partial \lambda}} = \frac{\partial E_n}{\partial \lambda}$$

式中，λ 为 H 中的任意一个参数。

3.8　算符的矩阵表示

1. 算符的矩阵表示

在任意的基底$\{|n\rangle\}$之下，算符 $\hat{F}$ 的矩阵元为

$$F_{mn} = \langle m|\hat{F}|n\rangle$$

2. 角动量

在 j^2 与 j_z 的基底$\{|jm\rangle\}$之下

$$\hat{\boldsymbol{j}} = \hat{\boldsymbol{j}}_1 + \hat{\boldsymbol{j}}_2, \qquad \hat{\boldsymbol{j}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{j}}_2 = \frac{1}{2}(\hat{j}^2 - \hat{j}_1^2 - \hat{j}_2^2)$$

$$\langle j'm'|\hat{\boldsymbol{j}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{j}}_2|jm\rangle = \frac{\hbar^2}{2}[j(j+1) - j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)]\delta_{j'j}\delta_{m'm}$$

3. 坐标

在线谐振子基底$\{|n\rangle\}$之下

$$x_{mn} = \langle m|x|n\rangle = \frac{1}{\alpha}\left[\sqrt{\frac{n}{2}}\delta_{m,n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\delta_{m,n+1}\right]$$

其中 $$\alpha = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}$$

4. 两个基底之间的变换

若已知算符 $\hat{F}$ 在任意的基底$\{|n\rangle\}$之下的矩阵元为 F_{mn}，则其在另一基底$\{|i\rangle\}$之下的矩阵元为

$$F_{ij} = \langle i|\hat{F}|j\rangle = \sum_{m,n}\langle i|m\rangle\langle m|\hat{F}|n\rangle\langle n|j\rangle = \sum_{m,n}\langle i|m\rangle F_{mn}\langle n|j\rangle$$

4. 定态薛定谔问题

4.1　精确求解

1. 解析解

(1) 阱宽为 a 的非对称无限深方势阱

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2; \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) \quad (n = 1,2,3,\cdots)$$

(2) 线谐振子

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

(3) 球谐振子

$$E_{nl} = \left(2n_r + l + \frac{3}{2}\right) \hbar \omega; \quad |n_r l m\rangle \quad (n_r = 0,1,2,\cdots),(l = 0,1,2,\cdots)$$

(4) 氢原子

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}; |nlm\rangle \quad (n = 1,2,3,\cdots),(l = 0,1,2,\cdots,n-1)$$

(5) 自由粒子

$$E_p = \frac{p^2}{2m}; \quad \psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} p x\right) \quad (-\infty \leqslant p \leqslant \infty)$$

2. 直接判断法

(1) 当势能平移 $\pm V_0$ 时，即 $\hat{H} = \hat{H}_0 \pm V_0$ 时，则 $\hat{H}$ 与 $\hat{H}_0$ 的本征函数是一样的，若 $\hat{H}_0$ 的本征值为 E_n^0，则 $\hat{H}$ 的本征值变成 $E_n^0 \pm V_0$。

(2) 当坐标平移 $\pm a$ 时，即 $x \to x \pm a$ 时，则 $\hat{H}$ 的本征值不变，而相应的本征函数的坐标变量由 x 变为 $x \pm a$。

3. 坐标变换法

(1) 若 $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 + \lambda x = \hat{H}_0 + \lambda x$，则

$$E_n = E_n^0 - \frac{\lambda^2}{2m\omega^2}$$

(2) 若 $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 + \lambda x^2$，则

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \sqrt{1 + \frac{2\lambda}{m\omega^2}}$$

(3) 若 $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x) + \lambda \hat{p} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{p}$，则

$$E_n = E_n^0 - \frac{1}{2} m\lambda^2$$

(4) 若 $\hat{H} = \frac{1}{2I_1}(\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2) + \frac{1}{2I_2}\hat{L}_z^2$，则

$$E_{lm} = \left[\frac{1}{2I_1} l(l+1) + \left(\frac{1}{2I_2} - \frac{1}{2I_1}\right) m^2\right] \hbar^2$$

4. 分区均匀位势

(1) 当 $E > V_0$ 时，取振荡解

$$\psi(x) = A\sin(kx + \delta)$$

其中
$$k = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$$

(2) 当 $E < V_0$ 时，取衰减解

$$\psi(x) = A\exp(\alpha x) + B\exp(-\alpha x)$$

其中
$$\alpha = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

4.2 近似方法

1. 微扰论

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}$$

$$\hat{H}_0 \mid k\alpha\rangle^0 = E_k^0 \mid k\alpha\rangle^0 \quad (\alpha = 1,2,\cdots,f_k)$$

(1) 无简并微扰论($f_k = 1$)

$$E_k \approx E_k^0 + W_{kk} + \sum_{n\neq k}\sum_{i=1}^{f_n}\frac{\mid W_{k,ni}\mid^2}{E_k^0 - E_n^0}$$

$$\mid k\rangle \approx \mid k\rangle^0 + \sum_{n\neq k}\sum_{i=1}^{f_n}\frac{W_{ni,k}}{E_k^0 - E_n^0}\mid ni\rangle^0$$

(2) 简并微扰论($f_k > 1$)

在简并子空间中，求解能量一级修正 $E_k^{(1)}$ 满足的本征方程

$$\sum_{i=1}^{f_k}[W_{kj,ki} - E_k^{(1)}\delta_{ij}]B_{kj,kl}^{(0)} = 0$$

2. 变分法

(1) 试探波函数

选择含有变分参数 a 的归一化的试探波函数 $\mid\psi(a)\rangle$。

(2) 能量平均值

在此状态之下计算哈密顿算符的平均值，即

$$\overline{H(a)} = \langle\psi(a)\mid\hat{H}\mid\psi(a)\rangle$$

(3) 极值条件

再利用极值条件$\overline{\dfrac{\partial H(a)}{\partial a}} = 0$，定出变分参数 a_0。

(4) 基态近似值

将 a_0 代入试探波函数得到 $\mid\psi(a_0)\rangle$，此即体系基态波函数的近似结果，进而可以得到基态能量的近似值 $E_0 \approx \overline{H(a_0)}$。

习　题　解　答

第1章　量子理论的诞生

【习题1.1】　利用玻尔－索末菲量子化条件求限制在方形箱内运动粒子的能量。箱的长、宽和高分别为 a、b 和 c。

解　选箱的长、宽、高分别为 x、y、z 方向，粒子在箱内作自由运动，按玻尔－索末菲量子化条件有

$$\oint p_x \mathrm{d}x = n_x h; \quad \oint p_y \mathrm{d}y = n_y h; \quad \oint p_z \mathrm{d}z = n_z h \tag{1}$$

式中 n_x、n_y、$n_z = 1,2,3,\cdots$。注意到粒子在箱壁上碰撞后，其动量会变成相反方向，所以上面的环积分的结果为

$$2ap_x = n_x h; \quad 2bp_y = n_y h; \quad 2cp_z = n_z h \tag{2}$$

于是粒子的动量为

$$p_x = \frac{n_x h}{2a}; \quad p_y = \frac{n_y h}{2b}; \quad p_z = \frac{n_z h}{2c} \tag{3}$$

进而得到粒子的能量为

$$E = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2}\right) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2}\right) \tag{4}$$

【习题1.2】　利用玻尔－索末菲量子化条件求转动惯量为 I 的平面转子的能量。

解　设平面转子的转角为 θ，则其角动量为 p_θ。若视 θ 为广义坐标，则 p_θ 为相应的广义动量。利用玻尔－索末菲量子化条件

$$\int_0^{2\pi} p_\theta \mathrm{d}\theta = mh \qquad (m = 1,2,3,\cdots) \tag{1}$$

于是得到

$$p_\theta = \frac{mh}{2\pi} = m\hbar \tag{2}$$

平面转子的能量为

$$E = \frac{1}{2I} p_\theta^2 = \frac{1}{2I} m^2 \hbar^2 \tag{3}$$

【习题 1.3】 由 $p = mv$ 及 $m = \dfrac{m_0}{\sqrt{1 - \dfrac{v^2}{c^2}}}$ 出发,利用 $T = mc^2 - m_0 c^2$,导出相对论粒子的德布罗意波长与动能的关系。m_0 为该粒子的静止质量。

解 依题意可知

$$m = \frac{m_0 c^2 + T}{c^2} \tag{1}$$

于是有

$$\frac{m_0 c^2 + T}{c^2} = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \dfrac{v^2}{c^2}}} \tag{2}$$

解之得

$$v = c\sqrt{\frac{T^2 + 2Tm_0 c^2}{(m_0 c^2 + T)^2}} \tag{3}$$

利用(1)和(3)式可求出粒子的动量

$$p = mv = \frac{m_0 c^2 + T}{c^2} c \sqrt{\frac{T^2 + 2Tm_0 c^2}{(m_0 c^2 + T)^2}} =$$

$$\sqrt{\frac{T^2}{c^2} + 2m_0 T} = \sqrt{2m_0 T\left(1 + \frac{T}{2m_0 c^2}\right)} \tag{4}$$

相对论粒子的德布罗意波长公式为

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0 T\left(1 + \dfrac{T}{2m_0 c^2}\right)}} \tag{5}$$

【习题 1.4】 计算如下粒子的德布罗意波长。

(1) 动能为 $T = 400 \times 10^6 \text{eV}$ 的 α 粒子,α 粒子的质量 $m_1 = 6.64 \times 10^{-27}$ kg;

(2) 速度 $v_2 = 1\ \text{cm} \cdot \text{s}^{-1}$,质量 $m_2 = 10^{-15}$ kg 的尘埃;

(3) 速度 $v_3 = 500\ \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$,质量 $m_3 = 20$ g 的子弹。

解 (1) 利用动能与速度的关系

$$T = \frac{1}{2} m_1 v^2 \tag{1}$$

计算 α 粒子的速度