高等院校物理学习辅导丛书

Exercise Series in Physics for Higher Education

量子力学

考研辅导

第2版

史守华 张战军 编著

清华大学出版社

高等院校物理学习辅导丛书
Exercise Series in Physics for Higher Education

量子力学
考研辅导

第2版

史守华 张战军 编著

清华大学出版社
北京

内容简介

本书是量子力学考研辅导用书。全书分为13个单元，每单元由“内容提要”和“典型习题解答”两部分组成，选题覆盖了现行各高校量子力学课程的全部内容。本书可帮助读者加深对量子力学基本概念、基本规律及基本方法的理解、掌握与运用，对于物理类及相关专业的学生学好量子力学课程，进而顺利通过攻读硕士研究生量子力学的入学考试具有指导作用。本书也可供讲授和学习量子力学的师生参考。

图书在版编目(CIP)数据

量子力学考研辅导/史守华，张战军编著. —2版. —北京：清华大学出版社，2007.10
ISBN 978-7-302-16192-9

Ⅰ.量…　Ⅱ.①史…②张…　Ⅲ.量子力学—研究生—入学考试—自学参考资料　Ⅳ.O413.1

中国版本图书馆CIP数据核字(2007)第151044号

责任编辑：朱红莲　邹开颜
责任校对：王淑云
责任印制：杨　艳

出版发行：清华大学出版社　　**地　　址**：北京清华大学学研大厦A座
http://www.tup.com.cn　　**邮　　编**：100084
c-service@tup.tsinghua.edu.cn
社 总 机：010-62770175　　**邮购热线**：010-62786544
投稿咨询：010-62772015　　**客户服务**：010-62776969

印 刷 者：北京四季青印刷厂
装 订 者：北京市密云县京文制本装订厂
经　　销：全国新华书店
开　　本：185×230　　**印　张**：16　　**字　数**：328千字
版　　次：2007年10月第2版　　**印　次**：2007年10月第1次印刷
印　　数：1～3000
定　　价：25.00元

FOREWORD 前言

量子力学是物理及物理相关各专业(如材料类、电子类专业)的重要基础理论课。全国各高等院校、科研院所在以上各专业硕士研究生入学考试时,几乎都把量子力学列为必考科目。为了辅导学生考研,笔者在安徽大学物理系任教期间,参阅了大量资料,对习题进行了认真的筛选。在筛选过程中,既注意习题的覆盖面,同时也充分考虑了习题的难易程度,编写成《量子力学——考研辅导讲义》。试用了几年后,于 2003 年编著成《量子力学——考研辅导教材》正式出版。这几年,笔者又进一步收集资料,在本书第 1 版的基础上,增加了大约三分之二的内容,特别注意吸纳各高等院校和科研院所近年来的考研试题,并补充了一些基本概念、基本规律、基本方法方面的习题,再次出版。

本版和第 1 版体例相同,将全书分成 13 个单元,每单元分为"内容提要"和"典型习题解答"两部分,难度较大的少数习题前加上了"*"号。内容提要便于读者从整体上把握应掌握的基本概念、规律及方法,典型习题解答有助于读者掌握计算方法。

本书可供物理类及相关专业的本科生考研复习之用,也可供讲授和学习量子力学的师生参考。

由于笔者水平有限,错误和不足之处在所难免,敬请谅解,并欢迎批评指正。

作　者

2007 年 8 月于安徽大学

CONTENTS

CHAPTER 1

状态和波函数 1

【内容提要】

1. 量子力学中用波函数描写微观体系的状态。

2. $\Psi^* \Psi \mathrm{d}\tau = |\Psi|^2 \mathrm{d}\tau$ 是状态用 Ψ 描写的粒子在体积元 $\mathrm{d}\tau$ 内的几率(设 Ψ 是归一化的)。

3. 态叠加原理:设 $\Psi_1, \Psi_2, \cdots, \Psi_n$ 是体系的可能状态,那么,这些态的线性叠加

$$\Psi = \sum_{i=1}^{n} c_i \Psi_i$$

也是体系的一个可能状态。

4. 波函数随时间的变化规律由薛定谔(Schrödinger)方程(简记为 S. eq)给出:

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \Psi + V(\boldsymbol{r}, t)\Psi$$

当势场 $V(\boldsymbol{r})$ 不显含 t 时,其解是定态解 $\Psi(\boldsymbol{r}, t) = \psi(\boldsymbol{r}) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar}$,$\psi(\boldsymbol{r})$ 满足定态 S. eq

$$H\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi + V(\boldsymbol{r})\right]\psi = E\psi$$

定态 S. eq 即能量算符的本征方程。

5. 波函数的归一化条件:$\int_{(全)} |\psi|^2 \mathrm{d}\tau = 1$。相对几率分布:$\psi(\boldsymbol{r}) \sim c\psi(\boldsymbol{r})$,波函数常数因子不定性;相位因子不定性。

6. 波函数一般应满足三个基本条件:连续性、有限性、单值性。

7. 几率流密度 $\boldsymbol{j} = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2\mu}(\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi)$ 与几率密度 $\rho = \psi^* \psi$ 满足连续性方程

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

【典型习题解答】

1.1 用球坐标表示的粒子波函数为 $\psi(r, \theta, \varphi)$。

① 写出粒子在(θ,φ)方向的立体角 $\mathrm{d}\Omega$ 中被测到的几率；

② 写出粒子在球壳$(r,r+\mathrm{d}r)$中被测到的几率；

③ 写出粒子在(θ,φ)方向的立体角 $\mathrm{d}\Omega$ 中且半径在 $0<r<a$ 范围内被测到的几率。

解 ①
$$P=\mathrm{d}\Omega\int_0^\infty|\psi(r,\theta,\varphi)|^2r^2\mathrm{d}r$$

②
$$P=r^2\mathrm{d}r\int_0^\pi\sin\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}|\psi(r,\theta,\varphi)|^2\mathrm{d}\varphi$$

③
$$P=\mathrm{d}\Omega\int_0^a|\psi(r,\theta,\varphi)|^2r^2\mathrm{d}r$$

1.2　一粒子的波函数为$\psi(\boldsymbol{r})=\psi(x,y,z)$，写出粒子位于 $x\sim x+\mathrm{d}x$ 间的几率。

解 $P=\mathrm{d}x\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}y\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}z\,|\psi(x,y,z)|^2$

1.3　何谓几率流密度?写出几率流密度 $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)$ 的表达式。

解 单位时间内，与粒子前进方向垂直的单位面积内通过的几率称为几率流密度，

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}(\Psi^*\nabla\Psi-\Psi\nabla\Psi^*)$$

1.4　设质量为 m 的粒子在一维无限深势阱中运动，势阱的势能函数为

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

试用德布罗意(de Broglie)的驻波条件，求粒子能量的可能取值。

解 据驻波条件，有

$$a=n\frac{\lambda}{2},\quad n=1,2,3,\cdots$$

所以

$$\lambda=2a/n \tag{1}$$

又据德布罗意关系

$$p=h/\lambda \tag{2}$$

而能量

$$\begin{aligned}E&=p^2/2m=h^2/2m\lambda^2\\&=\frac{h^2n^2}{2m\cdot4a^2}=\frac{\pi^2\hbar^2n^2}{2ma^2},\quad n=1,2,3,\cdots\end{aligned} \tag{3}$$

1.5 设粒子限制在长、宽、高分别为 a,b,c 的箱内运动，试用量子化条件求粒子能量的可能取值。

解 除了与箱壁碰撞外，粒子在箱内作自由运动。假设粒子与箱壁碰撞不引起内部激发，则碰撞为弹性碰撞。动量大小不变，仅方向反向。选箱的长、宽、高三个方向分别为 x,y,z 轴方向，把粒子沿 x,y,z 轴三个方向的运动分开处理。利用量子化条件，对于 x 方向，有

$$\oint p_x \mathrm{d}x = n_x h, \quad n_x = 1,2,3,\cdots$$

即

$$p_x 2a = n_x h \quad （提示：2a\ 表示一来一回一个周期）$$

所以

$$p_x = n_x h/2a, \quad n_x = 1,2,3,\cdots$$

同理可得

$$p_y = n_y h/2b, \quad p_z = n_z h/2c$$

式中

$$n_y, n_z = 1,2,3,\cdots$$

则粒子能量

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2}\right), \quad n_x, n_y, n_z = 1,2,3,\cdots$$

1.6 设质量为 m 的粒子在谐振子势 $V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ 中运动（图 1.1），用量子化条件求粒子能量 E 的可能取值。

（提示：利用 $\oint p\mathrm{d}x = nh, n = 1,2,\cdots, p = \sqrt{2m[E-V(x)]}$，以及积分公式：$\int \sqrt{a^2-u^2}\mathrm{d}u = \frac{u}{2}\sqrt{a^2-u^2} + \frac{a^2}{2}\arcsin\frac{u}{a} + c$ 来求解。）

解 能量为 E 的粒子在谐振子势中的活动范围为

$$|x| \leqslant a \tag{1}$$

其中 a 由下式决定：

$$E = V(x)|_{x=a} = \frac{1}{2}m\omega^2 a^2$$

由此得

$$a = \sqrt{2E/m\omega^2} \tag{2}$$

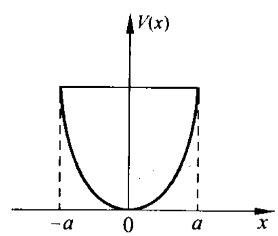

图 1.1

$x=\pm a$ 即为粒子运动的转折点。由量子化条件

$$\oint p\mathrm{d}x = 2\int_{-a}^{+a}\sqrt{2m\left(E-\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)}\mathrm{d}x = 2m\omega\int_{-a}^{+a}\sqrt{a^2-x^2}\mathrm{d}x$$

$$= 2m\omega a^2\cdot\frac{\pi}{2} = m\omega\pi a^2 = nh$$

得

$$a^2 = \frac{nh}{m\omega\pi} = \frac{2\hbar n}{m\omega} \tag{3}$$

代入式(2),解出

$$E_n = n\hbar\omega,\quad n = 1,2,3,\cdots \tag{4}$$

1.7　设一个平面转子的转动惯量为 I,求能量的可能取值。

$\left(\text{提示:利用}\int_0^{2\pi}p_\varphi\mathrm{d}\varphi = nh\text{,其中 } n = 1,2,\cdots\text{,而 } p_\varphi \text{ 是平面转子的角动量。转子的能量 } E = p_\varphi^2/2I\text{。}\right)$

解　平面转子的转角(角位移)记为 φ。它的角动量 $p_\varphi = I\dot{\varphi}$(广义动量),$p_\varphi$ 是运动恒量。按量子化条件

$$\int_0^{2\pi}p_\varphi\mathrm{d}\varphi = 2\pi p_\varphi = mh,\quad m = 1,2,3,\cdots$$

所以

$$p_\varphi = m\hbar$$

因而平面转子的能量

$$E_m = p_\varphi^2/2I = m^2\hbar^2/2I,\quad m = 1,2,3,\cdots$$

1.8　设质量为 m 的粒子在势场 $V(\boldsymbol{r})$ 中运动。

① 证明粒子的能量平均值为

$$E = \int\mathrm{d}^3r w$$

其中

$$w = \frac{\hbar^2}{2m}\nabla\Psi^*\cdot\nabla\Psi + \Psi^*V\Psi\quad\text{(能量密度)}$$

② 证明能量守恒公式

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \nabla\cdot\boldsymbol{s} = 0$$

其中

$$s=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\nabla\Psi+\frac{\partial\Psi}{\partial t}\nabla\Psi^*\right)\quad(\text{能流密度})$$

证 ① 粒子的能量平均值为(设 Ψ 已归一化)

$$E=\int\Psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)\Psi\mathrm{d}^3r=\overline{T}+\overline{V}\tag{1}$$

其中

$$\overline{V}=\int\mathrm{d}^3r\Psi^*V\Psi\quad(\text{势能平均值})\tag{2}$$

$$\begin{aligned}\overline{T}&=\int\mathrm{d}^3r\Psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right)\Psi\quad(\text{动能平均值})\\&=-\frac{\hbar^2}{2m}\int\mathrm{d}^3r[\nabla\cdot(\Psi^*\nabla\Psi)-(\nabla\Psi^*)\cdot(\nabla\Psi)]\end{aligned}$$

其中 $\overline{T}$ 的第一项可化为面积分，而在无穷远处归一化的波函数必然为 0。因此

$$\overline{T}=\frac{\hbar^2}{2m}\int\mathrm{d}^3r\nabla\Psi^*\cdot\nabla\Psi\tag{3}$$

结合式(1)、式(2)和式(3)，可知能量密度

$$w=\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\Psi^*\cdot\nabla\Psi+\Psi^*V\Psi\tag{4}$$

能量平均值

$$E=\int\mathrm{d}^3rw$$

② 由式(4)，得

$$\begin{aligned}\frac{\partial w}{\partial t}&=\frac{\hbar^2}{2m}[\nabla\dot{\Psi}^*\cdot\nabla\Psi+\nabla\Psi^*\cdot\nabla\dot{\Psi}]+\dot{\Psi}^*V\Psi+\Psi^*V\dot{\Psi}\\&=\frac{\hbar^2}{2m}[\nabla\cdot(\dot{\Psi}^*\nabla\Psi+\dot{\Psi}\nabla\Psi^*)-(\dot{\Psi}^*\nabla^2\Psi+\dot{\Psi}\nabla^2\Psi^*)]+\dot{\Psi}^*V\Psi+\Psi^*V\dot{\Psi}\\&=-\nabla\cdot s+\dot{\Psi}^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)\Psi+\dot{\Psi}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)\Psi^*\\&=-\nabla\cdot s+E(\dot{\Psi}^*\Psi+\dot{\Psi}\Psi^*)\\&=-\nabla\cdot s+E\frac{\partial}{\partial t}\rho\quad(\rho\text{ 为几率密度})\\&=-\nabla\cdot s\quad(\text{定态波函数，几率密度 }\rho\text{ 不随时间改变})\end{aligned}$$

所以

$$\frac{\partial w}{\partial t}+\nabla\cdot s=0$$

1.9 考虑单粒子的 S. eq

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r},t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\boldsymbol{r},t)+[V_1(\boldsymbol{r})+\mathrm{i}V_2(\boldsymbol{r})]\Psi(\boldsymbol{r},t) \tag{1}$$

V_1 与 V_2 为实函数。

① 证明粒子的几率(粒子数)不守恒；

② 证明粒子在空间体积 τ 内的几率随时间的变化为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\iiint_\tau \mathrm{d}^3r\Psi^*\Psi=-\frac{\hbar}{2\mathrm{i}m}\iint_S(\Psi^*\nabla\Psi-\Psi\nabla\Psi^*)\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S}+\frac{2}{\hbar}\iiint_\tau \mathrm{d}^3rV_2\Psi^*\Psi$$

证 ① 式(1)取复共轭，得

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi^*+(V_1-\mathrm{i}V_2)\Psi^* \tag{2}$$

$\Psi^*\times(1)-\Psi\times(2)$，得

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi)&=-\frac{\hbar^2}{2m}(\Psi^*\nabla^2\Psi-\Psi\nabla^2\Psi^*)+2\mathrm{i}\Psi^*V_2\Psi\\&=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\cdot(\Psi^*\nabla\Psi-\Psi\nabla\Psi^*)+2\mathrm{i}V_2\Psi^*\Psi\end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi)=-\frac{\hbar}{2\mathrm{i}m}\nabla\cdot(\Psi^*\nabla\Psi-\Psi\nabla\Psi^*)+\frac{2V_2}{\hbar}(\Psi^*\Psi) \tag{3}$$

即

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{j}=\frac{2V_2}{\hbar}\rho\neq 0$$

此即几率不守恒的微分表达式。

② 式(3)对空间体积 τ 积分，得

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\iiint_\tau \mathrm{d}^3r(\Psi^*\Psi)&=-\frac{\hbar}{2\mathrm{i}m}\iiint_\tau\nabla\cdot(\Psi^*\nabla\Psi-\Psi\nabla\Psi^*)\mathrm{d}^3r+\frac{2}{\hbar}\iiint_\tau \mathrm{d}^3rV_2(\Psi^*\Psi)\\&=-\frac{\hbar}{2\mathrm{i}m}\oiint_S(\Psi^*\nabla\Psi-\Psi\nabla\Psi^*)\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S}+\frac{2}{\hbar}\iiint_\tau \mathrm{d}^3rV_2\Psi^*\Psi\end{aligned}$$

上式右边第一项代表单位时间内粒子经过表面进入体积 τ 的几率 $\left(-\oiint\boldsymbol{j}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S}\right)$，第二项代表体积 τ 中“产生”的几率，这一项表征几率(或粒子数)不守恒。

1.10 设 Ψ_1 和 Ψ_2 是 S. eq 的两个解，证明

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int \mathrm{d}^3r\Psi_1^*(\boldsymbol{r},t)\Psi_2(\boldsymbol{r},t)=0$$

证

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi_1}{\partial t}=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)\Psi_1 \tag{1}$$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi_2}{\partial t}=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)\Psi_2 \tag{2}$$

取式(1)之复共轭，得

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi_1^*}{\partial t}=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)\Psi_1^* \tag{3}$$

$\Psi_2\times(3)-\Psi_1^*\times(2)$，得

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\Psi_1^*\Psi_2)=-\frac{\hbar^2}{2m}(\Psi_2\nabla^2\Psi_1^*-\Psi_1^*\nabla^2\Psi_2)$$

对全空间积分：

$$\begin{aligned}
&-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int\mathrm{d}^3r\Psi_1^*(\boldsymbol{r},t)\Psi_2(\boldsymbol{r},t)\\
&=-\frac{\hbar^2}{2m}\int\mathrm{d}^3r[\Psi_2\nabla^2\Psi_1^*-\Psi_1^*\nabla^2\Psi_2]\\
&=-\frac{\hbar^2}{2m}\int\mathrm{d}^3r[\nabla\cdot(\Psi_2\nabla\Psi_1^*-\Psi_1^*\nabla\Psi_2)\\
&\quad-(\nabla\Psi_2)\cdot(\nabla\Psi_1^*)+(\nabla\Psi_1^*)\cdot(\nabla\Psi_2)]\\
&=-\frac{\hbar^2}{2m}\int\mathrm{d}^3r[\nabla\cdot(\Psi_2\nabla\Psi_1^*-\Psi_1^*\nabla\Psi_2)]\\
&=-\frac{\hbar^2}{2m}\int(\Psi_2\nabla\Psi_1^*-\Psi_1^*\nabla\Psi_2)\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S}=0\quad(\text{无穷远边界面上},\Psi_1,\Psi_2\to 0)
\end{aligned}$$

即

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int\mathrm{d}^3r\Psi_1^*(\boldsymbol{r},t)\Psi_2(\boldsymbol{r},t)=0$$

1.11 对于一维自由粒子，

① 设初态 $\Psi(x,0)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_0x/\hbar}$，求 $\Psi(x,t)$。

② 设波函数为 $\psi(x)=\delta(x)=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\displaystyle\int\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{d}x=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}p$，可以看成无穷多个平面波 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$ 的叠加，即无穷多个动量本征态 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}$ 的叠加。试问 $\psi(x)=\delta(x)$ 是能量本征态吗？

③ 设粒子在 $t=0$ 时刻 $\Psi(x,0)=\delta(x)$，求 $\Psi(x,t)$。

$\left(\right.$提示：利用积分公式 $\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty}\cos(\xi^2)\mathrm{d}\xi=\int_{-\infty}^{+\infty}\sin(\xi^2)\mathrm{d}\xi=\sqrt{\pi/2}$

或

$$\left.\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(\mathrm{i}\xi^2)\mathrm{d}\xi=\sqrt{\pi}\exp(\mathrm{i}\pi/4)\right)$$

解 ①

$$H\Psi(x,0)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_0x/\hbar}=\frac{p_0^2}{2m}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_0x/\hbar}$$

即初态 $\Psi(x,0)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_0x/\hbar}$是一维自由粒子的能量本征态,能量本征值 $E=\dfrac{p_0^2}{2m}$,因而

$$\Psi(x,t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p_0x-Et)/\hbar},\quad E=\frac{p_0^2}{2m}$$

② 对于自由粒子,动量本征态同时也是能量本征态。由于 $\delta(x)$是无穷多个动量本征态 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}$的叠加,所以 $\Psi(x,0)=\delta(x)$不是能量本征态。

③ 由于 $\Psi(x,0)=\delta(x)$,作傅里叶变换:

$$\Psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p)\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}p$$

$$\varphi(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi(x,0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}x=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}x=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

所以

$$\Psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(px-Et)/\hbar}\mathrm{d}p$$

把 $E=p^2/2m$ 代入,得

$$\Psi(x,t)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(\frac{t}{2m}p^2-px\right)}\mathrm{d}p$$

进行指数配方

$$\Psi(x,t)=\frac{1}{2\pi\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}mx^2/2\hbar t}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[-\frac{\mathrm{i}t}{2m\hbar}\left(p-\frac{mx}{t}\right)^2\right]\mathrm{d}p$$

令

$$\xi^2=\frac{t}{2m\hbar}\left(p-\frac{mx}{t}\right)^2$$

则

$$\begin{aligned}\Psi(x,t)&=\frac{1}{2\pi\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}mx^2/2\hbar t}\sqrt{\frac{2m\hbar}{t}}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\xi^2}\mathrm{d}\xi\\&=\frac{1}{2\pi\hbar}\sqrt{\frac{2m\hbar}{t}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}mx^2/2\hbar t}\sqrt{\pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}\\&=\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar t}}\exp\left[\mathrm{i}\left(\frac{mx^2}{2\hbar t}-\frac{\pi}{4}\right)\right]\end{aligned}$$

$$|\Psi(x,t)|^2=\frac{m}{2\pi\hbar t}$$

1.12 写出动量表象中的不含时 S. eq。

解 经典能量方程

$$E=\frac{p^2}{2m}+V(\boldsymbol{r})\tag{1}$$

在动量表象中,算符化规则为

$$\boldsymbol{p} \rightarrow \boldsymbol{p}, \quad \boldsymbol{r} \rightarrow \mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\boldsymbol{p}} \tag{2}$$

将此规则运用于式(1),并将式(1)两边分别作用于动量空间波函数 $\varphi(\boldsymbol{p})$上,即得动量表象中的不含时 S. eq

$$\left[\frac{p^2}{2m} + V\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}\right)\right]\varphi(\boldsymbol{p}) = E\varphi(\boldsymbol{p})$$

根据方程解题

量子力学(QM)描述方式的最大特点,是微观系统的运动状态用波函数完全描写。而波函数是几率振幅,因此寻求波函数便是 QM 里最为重要的任务。解波函数满足的薛定谔方程是获得波函数的一条最基本的途径。但这时要充分认识边界条件(包括连接条件)的重要性。

1.13 证明具有不同能量的两个束缚态,其波函数的重叠积分为零。

解 设 ψ_1,ψ_2 分别为对应于能量 E_1 和 E_2 的束缚态波函数,$E_1 \neq E_2$,按题意要证明等式

$$\int \mathrm{d}\tau\psi_1^*(\boldsymbol{r})\psi_2(\boldsymbol{r}) = 0$$

凡这种与具体位势无关的结论,解题首先从 S. eq 出发。ψ_1,ψ_2 满足的两个定态 S. eq 分别为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_1(\boldsymbol{r}) + V\psi_1(\boldsymbol{r}) = E_1\psi_1(\boldsymbol{r}) \tag{1}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_2(\boldsymbol{r}) + V\psi_2(\boldsymbol{r}) = E_2\psi_2(\boldsymbol{r}) \tag{2}$$

$\psi_2 \times (1)^* - \psi_1^* \times (2)$,再对空间积分,即$\int \mathrm{d}\tau$,得

$$\begin{aligned}
(E_1 - E_2)\int \mathrm{d}\tau\psi_1^*(\boldsymbol{r})\psi_2(\boldsymbol{r}) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\int \mathrm{d}\tau(\psi_2\nabla^2\psi_1^* - \psi_1^*\nabla^2\psi_2) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\int \mathrm{d}\tau\nabla\cdot(\psi_2\nabla\psi_1^* - \psi_1^*\nabla\psi_2) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\oint(\psi_2\nabla\psi_1^* - \psi_1^*\nabla\psi_2)\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} \\
&= 0 \quad (\text{束缚态边界条件:} r \to \infty \text{ 处}, \psi_1, \psi_2 \to 0)
\end{aligned}$$

如果 $E_1 \neq E_2$,则有

$$\int \mathrm{d}\tau\psi_1^*(\boldsymbol{r})\psi_2(\boldsymbol{r}) = 0$$

亦即 ψ_1,ψ_2 正交或重叠积分为零。

1.14 已知描述单粒子一维束缚状态的两个本征函数分别为

$$\psi_1 = A\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha x^2}$$

$$\psi_2 = B(x^2 + bx + c)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha x^2}$$

试求这两个状态的能级间隔。

解 ψ_1,ψ_2 都满足定态 S. eq:

$$\psi_1'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E_1 - V)\psi_1 = 0 \tag{1}$$

$$\psi_2'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E_2 - V)\psi_2 = 0 \tag{2}$$

$\psi_2\times(1)-\psi_1\times(2)$,得

$$(E_2 - E_1)\psi_1\psi_2 = \frac{\hbar^2}{2m}(\psi_2\psi_1'' - \psi_1\psi_2'') \tag{3}$$

式(3)对任意 x 都成立。找一个波函数的非零点,例如 $x=0$,代入式(3),可求得

$$E_2 - E_1 = \frac{1}{ABc}\cdot\frac{\hbar^2}{2m}(-2AB) = -\frac{\hbar^2}{mc}$$

1.15 质量为 m 的粒子处于能量为 E 的本征态,波函数为 $\psi(x) = Ax\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$,问粒子在什么样的位势中运动?

解 这也是直接应用 S. eq 解题的例子,S. eq 联系了 $m,\hbar,V,E$ 和 $\psi(x)$,知道了其中一部分,就可以求出其他部分。本题中要求解位势。从 S. eq

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

出发,只要把已知的能量本征函数 $\psi(x)$ 代入运算,即可得解

$$V(x) = E + \frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\psi''(x)}{\psi(x)} = E + \frac{\hbar^2}{2m}(\alpha^4 x^2 - 3\alpha^2)$$

利用连接条件定能级

定态问题中常见的一类问题是确定系统的允许能量,最一般的办法是解 S. eq,然后利用边界条件和连接条件来确定能量本征值。常用的边界条件有下面几种:

(1) 束缚态中,粒子局限在有限范围内运动,因此在无限远处找到粒子的几率为零,也即波函数在无限远处消失。

(2) 在位势无限高处,有限能量的粒子去不了,故那里的波函数为零。

(3) 在位势作有限跳跃的地方,波函数及其导数也都分别连续。

(4) 对于 δ 形位势,波函数导数有跃变,而波函数本身仍连续 ,即 $V(x)=\pm\gamma\delta(x)$,则 $\psi'(0^+)-\psi'(0^-)=\pm\frac{2m\gamma}{\hbar^2}\psi(0)$。

1.16 粒子在位势

$$V(x)=\begin{cases}\infty, & x\leqslant 0\\ -V_0, & 0<x<a, \quad V_0>0\\ 0, & x\geqslant a\end{cases}$$

中运动(图 1.2),求至少存在一个束缚态的条件。

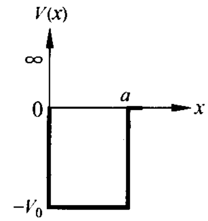

图 1.2

解 显然,在 $x<0$ 处,$\psi=0$;在 $0<x<a$ 区域,束缚态波函数为

$$\psi_1(x)=A\sin(kx+\varphi)$$

其中

$$k=\sqrt{2m(E+V_0)}/\hbar, \quad E<0 \tag{1}$$

利用边界条件 $\psi_1(0)=0$,知 $\varphi=0$。

在 $x>a$ 区域,一般解为

$$\psi_2(x)=Be^{-k'x}+B'e^{k'x}$$

其中

$$k'=\sqrt{-2mE}/\hbar \tag{2}$$

由于讨论束缚态,故当 $x\to\infty$时,$\psi\to 0$,由此定出 $B'=0$。于是

$$\left.\begin{aligned}\psi_1(x)&=A\sin kx, \quad 0<x<a\\ \psi_2(x)&=Be^{-k'x}, \quad a\leqslant x\end{aligned}\right\} \tag{3}$$

在 $x=a$ 处,位势只有有限跃变,故波函数及其导数均连续,或波函数对数导数连续:

$$(\ln\psi_1(x))'|_{x=a}=(\ln\psi_2(x))'|_{x=a} \tag{4}$$

把式(3)代入式(4),得

$$ka\cot ka=-k'a \tag{5}$$

但 k,k'不独立。由式(1)、式(2)可得

$$(ka)^2+(k'a)^2=\frac{2ma^2V_0}{\hbar^2} \tag{6}$$

令 $\xi=ka,\eta=k'a$,则式(5)、式(6)分别化为

$$\eta=-\xi\cot\xi \tag{7}$$

$$\eta^2+\xi^2=2ma^2V_0/\hbar^2 \tag{8}$$

式(8)是以 $r=\sqrt{2mV_0/\hbar^2}a$ 为半径的圆。对于束缚态来说,$-V_0<E<0$。由于 ξ 和 η 都大于零,所以式(8)表示的圆 $\eta^2+\xi^2=2ma^2V_0/\hbar^2$ 与式(7)表示的曲线 $\eta=-\xi\cot\xi$ 在第一象限的交点可决定束缚态能级。此方程至少有一个解的条件为:圆半径 $r\geqslant\pi/2$,即

$$\frac{2ma^2V_0}{\hbar^2}\geqslant\left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \tag{9a}$$

或

$$8ma^2V_0/\pi^2\hbar^2 \geqslant 1 \tag{9b}$$

这是对粒子质量 m、位阱深 V_0 和宽 a 的一个限制。

节点法

用节点法解题的依据是节点定理：对于一维束缚态而言，在基本区域内（不算边界点）基态无节点（即波函数的零点），第 n 个激发态有 n 个节点。对于高维情形，经常存在对称性，因而可以化为等效的一维问题。所以这个定理的适用范围还是很广的。利用节点定理，我们可以确定波函数零点，判定量子数、排列能级顺序，判定能量本征值等。

1.17　两个波函数

$$\psi_1 = A\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2/2}$$

$$\psi_2 = B(x^2+bx+c)\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2/2}$$

都对应于能量本征态，则它们对应的能级哪个高？能级是否相邻？

解　我们可以直接从 S. eq 出发求出这两个态的能量差，但无法回答题目中提出的两个问题。利用节点定理很容易解决这个问题。

ψ_1 无零点，也即没有节点，它对应的态是基态，因而能量最低。ψ_2 中可能有两个节点，因为解 $x^2+bx+c=0$ 可得在一定条件下 ψ_2 有两个节点：

$$x = \frac{1}{2}(-b \pm \sqrt{b^2-4c})$$

由于题目给定 ψ_2 为能量本征态，故必有两节点，于是可以判定 ψ_2 描写的是第二激发态，能量高于 ψ_1 描述的基态。并且我们知道，这里的数 c 必定要小于 $b^2/4$，而 ψ_1，ψ_2 描写的态不是相邻能级的态，它们之间还有一个能量本征态，具有一个节点。

如果题目中没有给定 ψ_2 为能量本征态，则也可判定它所对应的能量高，因为它可能是基态、第一激发态和第二激发态的组合（依赖于 b 和 c 的大小）。因此在此态中的能量平均值也要高于 ψ_1 描写的状态的能量平均值。

1.18　测得氢原子的一个能量本征态中，轨道角动量为零（s 态），而有两个同心球面是波函数的零点。求此氢原子的能量。

解　三维有心力场中的系统的本征函数可以写为

$$\psi(r,\theta,\varphi) = \frac{u(r)}{r}\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$$

其中 $\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$ 为球谐函数，而 $u(r)$ 满足方程

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

这是相当于在 $(0,\infty)$ 范围内的一维运动，其行为可用径向量子数 n_r 描写。从 ψ 函数的形式看，角度方向的零点由球谐函数 $\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$ 决定，而径向的零点由 $u(r)$ 决定。于是根据