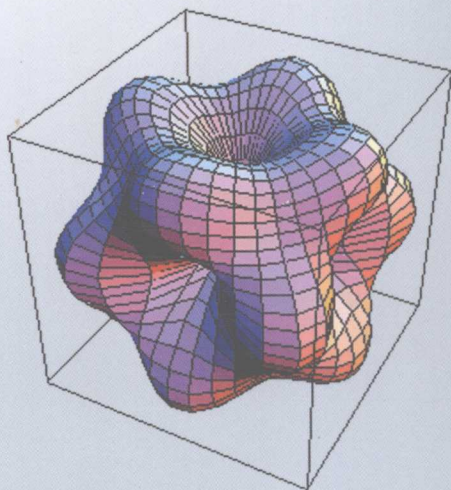


量子力学

习题精选与剖析

(第三版)

钱伯初 曾谨言 © 著



科学出版社

www.sciencep.com

量子力学习题精选与剖析

(第三版)

钱伯初 曾谨言 著

科学出版社

北 京

内 容 简 介

本书是作者在北京大学和兰州大学长期讲授量子力学课程基础上,精选内容新颖、难度较大的习题汇集而成. 习题大部分选自国内外研究生试题和资格考试题,全部题目都给出了详细的分析和解答,有些解法是作者首创的. 本次再版对第二版内容精选和重编,反映了近年来量子力学的最新进展. 全书分为十八章,共 360 题,内容包括 Schrödinger 方程、一维运动、 δ 势场中粒子的运动、谐振子、力学量的算符表示及算符运算、中心力场、角动量、磁场中粒子的运动、Hellmann 定理、动量表象、能量表象与 Heisenberg 图象、定态微扰论、变分法、量子跃迁、弹性散射、对称性、准经典近似、二次量子化、相对论量子力学等方面.

本书可以作为量子力学课程的教学参考书,同时也可供物理学工作者参考.

图书在版编目(CIP)数据

量子力学习题精选与剖析(第三版)/钱伯初,曾谨言著. —3 版. 北京:科学出版社,2008

ISBN 978-7-03-021630-4

I. 量… II. ①钱… ②曾… 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(2008)第 050646 号

责任编辑:贾 杨 / 责任校对:桂伟利
责任印制:张克忠 / 封面设计:耕者设计工作室

科学出版社出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码: 100717

<http://www.sciencep.com>

新蕾印刷厂印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

1998 年 4 月第 一 版 开本: B5(720×1000)

2008 年 6 月第 三 版 印张: 35 1/4

2008 年 6 月第一次印刷 字数: 680 000

印数: 1—4 000

定价: 50.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换<长虹>)

第三版序言

本书自 1988 年出版以来,受到广大师生的热诚欢迎.不少读者来信反映,本书有助于初学者确切掌握量子力学的基本概念和原理,有助于初学者运用量子力学理论去分析处理具体问题,并掌握各种计算方法.对于学习后继课程和进行科研工作,本书都很有用.物理类专业及有关专业的许多有志深造的学生(包括考研者,研究生,出国留学人员)几乎人手一册.本书及其在台湾省出版的繁体字版本,20 年来在台、港、澳以及海外华裔读者中广泛流传,影响很广.很多出国留学学生反映,研读本书,能加深对于量子力学的领悟,顺利通过研究生资格考试,并与以后的研究工作顺利接轨.

本书第一版问世 10 年后,发行了增订第二版,分上、下册出版.至今又过去了 10 年.本书问世以来的 20 年中,量子力学的一些前沿领域的研究取得了令人瞩目的进展.国内各高校的量子力学教学情况也有许多变化.为了适应新局面,我们对全书再次做了修改增删,以新版与读者见面.为了方便阅读与使用,第三版不再分上、下册,但分章较细,全书共分为十八章.题目总数略有减少,但有助于考研的题目增加了不少.全书共 360 题.

本书许多题目的巧妙剖析与解法,均为作者首创.有关的概念、思路、计算技巧等等,在作者编著的教科书中,叙述得更加全面、详细.读者阅读本书时,如能适当参考这些教材,既能加深理解基本原理,也能更好地掌握解题方法.有关的教材是:

钱伯初,《量子力学》,高等教育出版社(2006 年);

曾谨言,《量子力学教程》,科学出版社(第二版,2008 年);

曾谨言,《量子力学》卷 I、II,科学出版社(第四版,2007 年).

希望本书新版的问世,能为提高国内外量子力学的教学水平,继续作出贡献.我们二人虽然都已经是古稀之年,仍将同全国广大师生一起,在科学道路上继续探索前进.

作 者

2008 年 4 月

第一版序言

物理学的各门基础理论课,如果脱离了在具体问题中的应用,初学者就很难深入理解和掌握其基本概念和原理的实质.对于量子力学,尤其是这样.凡是有一些教学和科研实践经验的人,对此都会有同感.做习题就是一种初步地运用基本概念和原理来处理一些简单的或理想化了的问题的训练.在教学中我们发现,有相当一部分学生,他们可以将教科书中讲述的原理原封不动地复述出来,但是不会做题,更不会应用基本原理去处理具体问题.更有甚者,不少人在学过《高等量子力学》课程之后,仍对某些很简单的量子力学问题束手无策.这种“知识多,能力差”的通病应该引起我们深思.我们认为,通过基础课的教学,不仅要向学生传授知识,更重要的是培养思考和解决问题的能力.

从近年来国外许多大学的量子力学新教材、习题、试题以及研究生资格考试题来看,其特点是难度高,灵活性大,反映量子力学在各前沿研究领域中的应用的内容较多.特别是,国外许多大学的研究生资格考试题有相当大一部分是从科研前沿课题中直接提取出来的.国内的学生碰到这些问题时,往往感到无从下手.近年来,由于教学的需要,我们接触了大量的这类题.为了满足国内广大师生的要求,我们精选了370道有代表性的习题,作了较深入和新颖的剖析,整理成本书.书中习题的解答,绝大多数都是我们自己给出的,即原始的(original)而不是转抄的.解法力求简明,直截了当.有些题,给出了多种解法,以便读者对照比较,有利于深入了解各种解法之间的内在联系.我们希望读者能够以研究的态度阅读本书,这样才能较好地领会并掌握各种方法的精神实质,做到举一反三.我们相信,凡是认真钻研了这本书的读者,对于量子力学基本概念和原理的理解程度,以及应用量子力学处理具体问题的能力,一定会有较大的提高.

希望本书的出版,对于进一步提高我国的量子力学教学水平有所裨益.不妥当和不正确之处,在所难免,诚恳希望广大读者提出批评指正.

作者
1988年

目 录

第三版序言

第一版序言

第一章	Schrödinger 方程 一维运动	1
第二章	δ 势场中粒子的运动	29
第三章	谐振子	46
第四章	力学量的算符表示及算符运算	76
第五章	中心力场	100
第六章	角动量	133
第七章	磁场中粒子的运动	231
第八章	Hellmann 定理	243
第九章	动量表象	259
第十章	能量表象与 Heisenberg 图象	272
第十一章	定态微扰论	289
第十二章	变分法	346
第十三章	量子跃迁	378
第十四章	弹性散射	402
第十五章	对称性	437
第十六章	准经典近似	486
第十七章	二次量子化	499
第十八章	相对论量子力学	521

第一章 Schrödinger 方程 一维运动

1.1 设 $\psi_1(\mathbf{r}, t)$ 和 $\psi_2(\mathbf{r}, t)$ 是 Schrödinger 方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\mathbf{r})\psi$$

的两个解, 证明 $\int \psi_1^* \psi_2 d^3x$ 与时间无关.

证 ψ_1 和 ψ_2 分别满足 Schrödinger 方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_1 + V\psi_1 \quad (1)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_2 + V\psi_2 \quad (2)$$

以 ψ_1^* 左乘式(2), ψ_2 左乘式(1)之共轭方程, 再相减, 即得

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi_1^* \psi_2) &= \frac{\hbar^2}{2m} (\psi_2 \nabla^2 \psi_1^* - \psi_1^* \nabla^2 \psi_2) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \cdot (\psi_2 \nabla \psi_1^* - \psi_1^* \nabla \psi_2) \end{aligned}$$

再对全空间积分, 得到

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \int \psi_1^* \psi_2 d^3x &= \frac{\hbar^2}{2m} \int \nabla \cdot (\psi_2 \nabla \psi_1^* - \psi_1^* \nabla \psi_2) d^3x \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \oint (\psi_2 \nabla \psi_1^* - \psi_1^* \nabla \psi_2) \cdot d\mathbf{s} \end{aligned} \quad (3)$$

其中 $d\mathbf{s}$ 为面元, 按照波函数在无穷远处迅速趋于零的条件, 式(3)右端之面积分为零, 故得

$$\frac{d}{dt} \int \psi_1^* \psi_2 d^3x = 0$$

亦即 $\int \psi_1^* \psi_2 d^3x$ 与时间无关.

1.2 粒子在一维势场 $V(x)$ 中运动, 试证明: 属于不同能级的束缚态波函数互相正交.

证 设 ψ_1 、 ψ_2 分别为属于能级 E_1 、 E_2 的束缚态波函数. 由于是一维束缚态,

ψ_1, ψ_2 都可以取为实函数, 故只需证明

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1(x) \psi_2(x) dx = 0$$

ψ_1 和 ψ_2 均应满足定态 Schrödinger 方程, 即

$$\psi_1'' = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E_1] \psi_1 \quad (1)$$

$$\psi_2'' = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E_2] \psi_2 \quad (2)$$

以 ψ_2 左乘式(1), ψ_1 左乘式(2), 再相减, 即得

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

对全空间积分, 得到(束缚态波函数在无穷远处必须趋于0)

$$\begin{aligned} \frac{2m}{\hbar^2} (E_2 - E_1) \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1 \psi_2 dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d}{dx} (\psi_2 \psi_1' - \psi_1 \psi_2') dx \\ &= (\psi_2 \psi_1' - \psi_1 \psi_2') \Big|_{-\infty}^{+\infty} = 0 \end{aligned}$$

因此, 当 $E_2 \neq E_1$, 就有

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1 \psi_2 dx = 0 \quad (3)$$

亦即 ψ_1 与 ψ_2 正交.

1.3 证明从单粒子 Schrödinger 方程得出的粒子速度场是非旋的, 即求证

$$\nabla \times \mathbf{v} = 0$$

其中, $\mathbf{v} = \mathbf{j}/\rho$, ρ 为概率密度, $\mathbf{j}$ 为概率流密度.

证 概率密度和概率流密度的表达式为

$$\begin{aligned} \rho &= \psi^* \psi \\ \mathbf{j} &= -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \end{aligned}$$

因此速度场为

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{j}}{\rho} = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\frac{\nabla \psi}{\psi} - \frac{\nabla \psi^*}{\psi^*} \right) = -\frac{i\hbar}{2m} (\nabla \ln \psi - \nabla \ln \psi^*) = -\frac{i\hbar}{2m} \nabla \left(\ln \frac{\psi}{\psi^*} \right)$$

其旋度为

$$\nabla \times \mathbf{v} = -\frac{i\hbar}{2m} \nabla \times \nabla \left(\ln \frac{\psi}{\psi^*} \right) = 0$$

1.4 粒子在深度为 V_0 , 宽度为 a 的方势阱(如图 1.4)中运动, 求

(a) 阱口刚好出现一个束缚态能级(即 $E \approx V_0$)的条件;

(b) 束缚态能级总数, 并和无限深势阱作比较.

解 粒子能量 E 小于 V_0 时为束缚态, E 大于 V_0 时为游离态. 能量本征方程为

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\psi = 0 \quad (1)$$

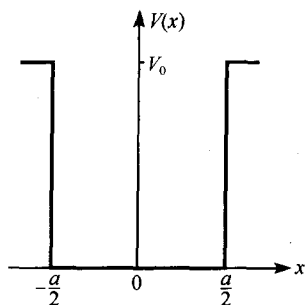


图 1.4

令

$$\sqrt{2mV_0}/\hbar = k_0, \quad \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar = \beta \quad (2)$$

式(1)可以写成

$$\begin{cases} \psi'' + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0, & |x| \leq a/2 \quad (\text{阱内}) \\ \psi'' - \beta^2\psi = 0, & |x| \geq a/2 \quad (\text{阱外}) \end{cases} \quad (3)$$

$$(4)$$

无限远处束缚态波函数应趋于 0, 因此式(4)的解应取为

$$\psi(x) = Ce^{-\beta|x|}, \quad |x| \geq a/2 \quad (5)$$

当阱口刚好出现束缚态能级时, $E \approx V_0$, $\beta \approx 0$, 因此

$$\psi'(x) = \pm \beta Ce^{-\beta|x|} \approx 0, \quad |x| \geq a/2 \quad (6)$$

阱内波函数可由式(3)解出, 当 $E \approx V_0$, 解为

$$\begin{aligned} \text{偶宇称} \quad \psi(x) &= \cos k_0 x, \\ \text{奇宇称} \quad \psi(x) &= \sin k_0 x, \end{aligned} \quad |x| \leq a/2 \quad (7)$$

阱内、外 ψ 和 ψ' 应该连续, 而由式(6)可知, $x = a/2$ 处, $\psi' = 0$, 将这条件用于式(7), 即得

$$\text{偶宇称} \quad \sin \frac{k_0 a}{2} = 0, \quad k_0 a = 2\pi, 4\pi, 6\pi, \dots \quad (8)$$

$$\text{奇宇称} \quad \cos \frac{k_0 a}{2} = 0, \quad k_0 a = \pi, 3\pi, 5\pi, \dots$$

亦即阱口刚好出现束缚能级的条件为

$$k_0 a = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (9)$$

即

$$\boxed{2mV_0 a^2 / \hbar^2 = n^2 \pi^2} \quad (10)$$

这种类型的一维势阱至少有一个束缚能级. 因此, 如 $2mV_0a^2/\hbar^2 < \pi^2$, 只存在一个束缚态, 偶宇称(基态). 如 $2mV_0a^2/\hbar^2 = \pi^2$, 除基态外, 阱口将再出现一个能级(奇宇称态), 共二个能级. 如 $2mV_0a^2/\hbar^2 = (2\pi)^2$, 阱口将出现第三个能级(偶宇称). 依此类推. 由此可知, 对于任何 V_0a^2 值, 束缚态能级总数为

$$N = 1 + \left[\frac{a}{\hbar\pi} \sqrt{2mV_0} \right] \quad (11)$$

其中符号 $[A]$ 表示不超过 A 的最大整数.

当粒子在宽度为 a 的无限深方势阱中运动时, 能级为

$$E_n = \frac{1}{2m} \left(\frac{n\pi\hbar}{a} \right)^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

则 $E \leq V_0$ 的能级数为

$$n = \left[\frac{a}{\hbar} \sqrt{2mV_0} \right] = N - 1 \quad (12)$$

也就是说, 如果只计算 $E \leq V_0$ 的能级数, 则有限深(V_0)势阱的能级数比无限深势阱的能级数多一个. 注意, 后者的每一个能级均一一对应地高于前者的相应能级(参看题 8.5).

1.5 对于方势阱(深 V_0 , 宽 a)的第 n 个束缚态 ψ_n, E_n , 在 $V_0 \gg E_n$ 条件下, 计算

- (a) 粒子在阱外出现的概率;
- (b) $V(x)$ 和 $V^2(x)$ 的平均值, 并和 E_n 比较.

解 以偶宇称态为例. 能量本征方程[见题 1.4, 式(3)、(4)]可以写成

$$\begin{cases} \psi'' + k^2\psi = 0, & |x| \leq a/2 \quad (\text{阱内}) \\ \psi'' - \beta^2\psi = 0, & |x| \geq a/2 \quad (\text{阱外}) \end{cases} \quad (1)$$

其中

$$k = \sqrt{2mE}/\hbar, \quad \beta = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar \quad (2)$$

注意在 $V_0 \gg E$ 条件下, $\beta \gg k$.

式(1)的偶宇称解为

$$\begin{cases} \psi = \cos kx, & |x| \leq a/2 \\ \psi = Ce^{-\beta|x|}, & |x| \geq a/2 \end{cases} \quad (3)$$

$x = a/2$ 处 ψ 应连续, 由此得出

$$C = e^{\beta a/2} \cos \frac{ka}{2} \quad (4)$$

$x=a/2$ 处 ψ' 也应连续, 由此得出

$$C = \frac{k}{\beta} e^{\beta a/2} \sin \frac{ka}{2}$$

和式(4)相除, 即得能级公式

$$\tan \frac{ka}{2} = \frac{\beta}{k} \quad (5)$$

在 $\beta \gg k$ 条件下, 式(5)的解为

$$ka \approx n\pi, \quad n = 1, 3, 5, \dots \quad (6)$$

代入式(2), 即得能级为

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \approx \frac{1}{2m} \left(\frac{n\pi\hbar}{a} \right)^2 \quad (7)$$

这正是无限深势阱的能级公式.

现在计算粒子在阱内、外出现的概率. 由式(3)、(4)容易求出

$$\int_{\text{阱外}} |\psi|^2 dx = 2C^2 \int_{a/2}^{\infty} e^{-2\beta x} dx = \frac{C^2}{\beta} e^{-\beta a} = \frac{1}{\beta} \cos^2 \frac{ka}{2} \quad (8)$$

$$\int_{\text{阱内}} |\psi|^2 dx = 2 \int_0^{a/2} \cos^2 kx dx = \frac{a}{2} \left(1 + \frac{\sin ka}{ka} \right) \quad (9)$$

考虑到 $ka \approx n\pi (n=1, 3, 5, \dots)$, $\sin ka$ 和 $\cos(ka/2)$ 均接近于零, 可知粒子出现在阱外概率远小于阱内概率. 而且

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx &\approx \int_{\text{阱内}} |\psi|^2 dx \approx \frac{a}{2} \\ \text{阱外概率} &= \frac{\int_{\text{阱外}} |\psi|^2 dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx} \approx \frac{2}{\beta a} \cos^2 \frac{ka}{2} \end{aligned} \quad (10)$$

利用能级公式(5), 易得

$$1 + \tan^2 \frac{ka}{2} = \frac{k^2 + \beta^2}{k^2} = \frac{V_0}{E}$$

$\cos^2 \frac{ka}{2} = \frac{E}{V_0}$

(11)

代入式(10), 即得

$$\text{阱外概率} = \frac{2E}{a\beta V_0} \approx \frac{2\hbar}{a\sqrt{2mV_0}} \frac{E}{V_0} \quad (12)$$

考虑到 $V_0 \gg E$ 和能级公式(7), 易见

$$\sqrt{2mV_0} \gg n\pi\hbar/a \quad (13)$$

因此,

$$\text{阱外概率} \ll \frac{2E}{n\pi V_0} \quad (14)$$

最后计算 $V(x)$ 和 $V^2(x)$ 平均值. 利用式(12),

$$\overline{V(x)} = (\text{阱外概率})V_0 \approx \frac{2\hbar E}{a\sqrt{2mV_0}} \quad (15)$$

$$\overline{V^2} = (\text{阱外概率})V_0^2 \approx \frac{\hbar E}{ma}\sqrt{2mV_0} \quad (16)$$

再利用式(13), 即可和 E_n (即 E) 作出比较,

$$\boxed{\overline{V(x)} \ll \frac{2E_n}{n\pi}, \quad \overline{V^2} \gg \frac{n\pi\hbar^2 E}{ma^2} \approx \frac{2}{n\pi} E_n^2} \quad (17)$$

1.6 粒子在无限深方势阱(宽度为 a)中运动, 处于第 n 个束缚态 ψ_n , 求粒子对于每一侧阱壁的平均作用力.

解 无限深方势阱可以视为有限深(深度为 V_0)势阱当 $V_0 \rightarrow \infty$ 的极限情形, 即

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| < a/2 \\ V_0, & |x| \geq a/2 \quad (V_0 \rightarrow \infty) \end{cases} \quad (1)$$

粒子所受作用力为 $-dV/dx$, 粒子对阱壁的作用力为

$$F(x) = \frac{dV}{dx} = V_0\delta\left(x - \frac{a}{2}\right) - V_0\delta\left(x + \frac{a}{2}\right) \quad (2)$$

其中第一项作用于阱壁右侧($x=a/2$), 第二项作用于阱壁左侧($x=-a/2$). 第一项的平均值为

$$\langle F_{\text{右}} \rangle = \frac{\int |\psi|^2 V_0 \delta\left(x - \frac{a}{2}\right) dx}{\int |\psi|^2 dx} = \frac{V_0 \left| \psi\left(\frac{a}{2}\right) \right|^2}{\int |\psi|^2 dx} \quad (3)$$

其中积分均为全空间积分. 利用题 1.5 的计算结果, 容易算出

$$\langle F_{\text{右}} \rangle \approx \frac{2V_0}{a} \cos^2 \frac{ka}{2} = \frac{2E_n}{a} \quad (4)$$

V_0/E 越大, 式(4)越准确.

由对称性, 显然有

$$\langle F_{\text{左}} \rangle = -\langle F_{\text{右}} \rangle \quad (5)$$

式(4)可作如下解释:设固定阱壁左侧而令右侧徐缓向外移动距离 Δa , 则粒子对外做功 $\langle F_{\text{右}} \rangle \Delta a$, 结果导致能级降低, 根据能量守恒定律, 应有

$$\langle F_{\text{右}} \rangle = -\frac{\partial E_n}{\partial a} = -\frac{\partial}{\partial a} \left(\frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \right) = \frac{2}{a} E_n$$

此即式(4).

1.7 粒子在图示之势场

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & |x| \leq a \\ 0, & a < |x| < L \\ \infty, & |x| \geq L \end{cases}$$

中运动, 求能级公式, 并讨论如下极限情况:

$$a \rightarrow 0, \quad V_0 \rightarrow \infty, \quad 2aV_0 \rightarrow U_0 (\text{有限值})$$

解 由于 $V(x) \geq 0$, 所以 $E > 0$. 由于 $V(-x) = V(x)$, 所以能量本征态有确定宇称. 在 $V(x) \rightarrow \infty$ 处, 波函数应该趋于 0, 所以边界条件为

$$\psi(x) = 0, \quad |x| \geq L \quad (1)$$

(a) 偶宇称态

1° $E < V_0$, 令

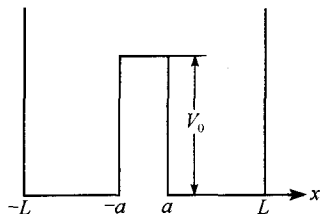


图 1.7

$$\begin{aligned} k &= \sqrt{2mE}/\hbar \\ \xi &= \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar \end{aligned} \quad (2)$$

能量本征方程可以写成

$$\begin{aligned} \psi'' - \xi^2 \psi &= 0, & |x| < a \\ \psi'' + k^2 \psi &= 0, & a < |x| < L \end{aligned} \quad (3)$$

满足边界条件(1)的解为

$$\begin{aligned} \psi &= \text{ch} \xi x = \frac{1}{2}(e^{\xi x} + e^{-\xi x}), & |x| < a \\ \psi &= A \sin k(L - x), & a < x < L \end{aligned} \quad (4)$$

($-L < x < -a$ 区间的 ψ , 可以按偶函数条件写出, 从略.) 由 $x = a$ 处 ψ'/ψ 的连续条件, 即可得出能级方程

$$k \cot k(L - a) = -\xi \tanh \xi a \quad (5)$$

其中

$$\operatorname{th} x = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$$

2° $E > V_0$, 令

$$\eta = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar \quad (6)$$

能量本征方程可以写为

$$\begin{aligned} \psi'' + \eta^2 \psi &= 0, & |x| < a \\ \psi'' + k^2 \psi &= 0, & a < |x| < L \end{aligned} \quad (7)$$

满足边界条件(1)的解为

$$\begin{aligned} \psi &= \cos \eta x, & |x| < a \\ \psi &= B \sin k(L - x), & a < x < L \end{aligned} \quad (8)$$

($-L < x < -a$ 区间的 ψ , 按偶函数条件写出, 从略.) 由 $x=a$ 处 ψ'/ψ 的连续条件, 即可得出能级方程

$$k \cot k(L - a) = \eta \tan \eta a \quad (9)$$

(b) 奇宇称态

1° $E < V_0$, 定态方程仍为式(3), 满足边界条件式(1)的解为

$$\begin{aligned} \psi &= \operatorname{sh} \xi x = \frac{1}{2}(e^{\xi x} - e^{-\xi x}), & |x| < a \\ \psi &= C \sin k(L - x), & a < x < L \end{aligned} \quad (10)$$

($-L < x < -a$ 区间的 ψ , 按奇函数条件写出, 从略.) 能级方程为

$$k \cot k(L - a) = -\xi \coth \xi a \quad (11)$$

其中

$$\coth x = 1/\operatorname{th} x = (e^x + e^{-x})/(e^x - e^{-x})$$

2° $E > V_0$, 定态方程仍为式(7), 满足边界条件(1)的解为

$$\begin{aligned} \psi &= \sin \eta x, & |x| < a \\ \psi &= D \sin k(L - x), & a < x < L \end{aligned} \quad (12)$$

($-L < x < -a$ 区间的 ψ , 按奇函数条件写出, 从略.) 能级方程为

$$k \cot k(L - a) = -\eta \cot \eta a \quad (13)$$

讨论 如 $a \rightarrow 0, V_0 \rightarrow \infty$, 但 $2aV_0 \rightarrow U_0$, 则

$$\int_{-a}^a V(x) dx = 2aV_0 = U_0$$

相当于在 $x=0$ 处存在一个 δ 势垒

$$V(x) = U_0 \delta(x), \quad |x| < L \quad (14)$$

只需考虑 $E < V_0$ 的情形.

(a) 偶宇称态

这时, 可取下列近似:

$$\begin{aligned} \xi^2 a &\approx 2mV_0 a / \hbar^2 = mU_0 / \hbar^2 \\ \xi a &\ll 1, \quad \text{th} \xi a \approx \xi a, \quad \xi \text{th} \xi a \approx mU_0 / \hbar^2 \end{aligned}$$

式(5)变成

$$k \cot kL = -mU_0 / \hbar^2 \quad (5')$$

这和后面题 2.7 所得的结果一致.

(b) 奇宇称态

取上述近似后, 式(11)变成

$$\tan kL = -ka \rightarrow 0 \quad (11')$$

解为

$$k = \frac{n\pi}{L}, \quad E = \frac{1}{2m} \left(\frac{n\pi\hbar}{L} \right)^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

这结果等价于平底无限深势阱, 因为奇宇称态 $\psi(0) = 0$, 中央的 δ 势垒不起作用 (参看题 2.4).

1.8 上题中, 设

$$\frac{a}{L} \ll 1, \quad \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} \gg 1$$

(a) 计算最低的两个能级之差, 并画出相应的本征态波形; (b) 以这两个能量本征函数构成一个初始波包 $\psi(x, 0)$, 使粒子刚好出现在势阱的左半边 ($x < 0$), 讨论这个波包的运动, 特别要求出粒子穿透到势阱的右半边所需时间.

解 上题中, 如保持 a 有限, 而令 $V_0 \rightarrow \infty$, 则中央的势垒变成完全不透明的, 整个势阱被分隔成两个不相通的无限深势阱. 这时能级为

$$E_n \rightarrow \frac{1}{2m} \left(\frac{n\pi\hbar}{L-a} \right)^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1)$$

V_0 有限时, 能级应比式(1)稍低. 题设条件相当于

$$V_0 a^2 \gg E_1 L^2 / \pi^2 \quad (2)$$

最低的一些能级仍可以式(1)作为粗略近似, 偶宇称态和奇宇称态的最低能级均为

$$E_1 \sim \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad (3)$$

式(2)成立时, 1.7 题中

$$\xi^2 a^2 \approx 2mV_0 a^2 / \hbar^2 \gg 1 \quad (4)$$

$$\operatorname{th} \xi a \approx 1 - 2e^{-2\xi a} \quad (5)$$

$$\operatorname{coth} \xi a \approx 1 + 2e^{-2\xi a}$$

如以 E_1 、 E_2 分别表示偶宇称态和奇宇称态的最低能级, 相应的 k 记为 k_1 、 k_2 , 则能级方程[见 1.7 题式(5), (11)]可以写成

$$\tan k_1(L-a) = -\frac{k_1}{\xi} \operatorname{coth} \xi a \approx -\frac{k_1}{\xi} (1 + 2e^{-2\xi a}) \quad (6)$$

$$\tan k_2(L-a) = -\frac{k_2}{\xi} \operatorname{th} \xi a \approx -\frac{k_2}{\xi} (1 - 2e^{-2\xi a}) \quad (7)$$

由于 k_1 、 $k_2 \ll \xi$, 式(6)和式(7)右端为小量, 由公式

$$\tan(\pi - \theta) = -\tan \theta \approx -\theta, \quad |\theta| \ll 1$$

可知式(6)、(7)之解为

$$k_1(L-a) \approx \pi - \frac{k_1}{\xi} (1 + 2e^{-2\xi a}) \quad (8)$$

$$k_2(L-a) \approx \pi - \frac{k_2}{\xi} (1 - 2e^{-2\xi a}) \quad (9)$$

即

$$k_1 \approx \frac{\pi}{L-a + \frac{1}{\xi} + \frac{2}{\xi} e^{-2\xi a}} \approx \frac{\pi}{L-a + \frac{1}{\xi}} \left(1 - \frac{2}{\xi L} e^{-2\xi a}\right) \quad (8')$$

$$k_2 \approx \frac{\pi}{L-a + \frac{1}{\xi} - \frac{2}{\xi} e^{-2\xi a}} \approx \frac{\pi}{L-a + \frac{1}{\xi}} \left(1 + \frac{2}{\xi L} e^{-2\xi a}\right) \quad (9')$$

两式相加、减, 即得

$$k_2 + k_1 \approx \frac{2\pi}{L-a + \frac{1}{\xi}} \quad (10)$$

$$k_2 - k_1 \approx \frac{4\pi}{\xi L \left(L-a - \frac{1}{\xi}\right)} e^{-2\xi a}$$

能级差为

$$E_2 - E_1 = \frac{\hbar^2}{2m} (k_2^2 - k_1^2) \approx \frac{4\pi^2 \hbar^2}{m \xi L^3} e^{-2\xi a} \quad (11)$$

如略去这个差别, 取粗略近似, 则得

$$k_1 \sim k_2 \sim \frac{\pi}{L-a+\frac{1}{\xi}} \sim \frac{\pi}{L}$$

$$E_1 \sim E_2 \sim \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} \sim \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

这就是式(3). 相应的本征函数如图 1.8 所示.

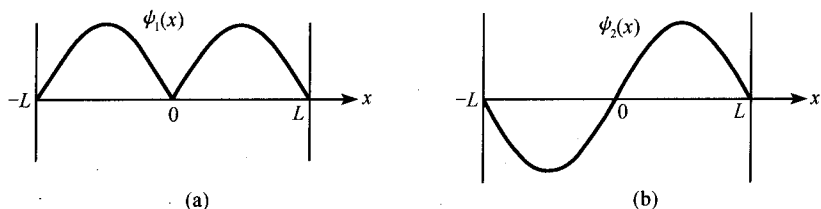


图 1.8 (a) 偶宇称态; (b) 奇宇称态

如取初始波函数

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(x) - \psi_2(x)] \quad (12)$$

则在 $x > 0$ 处 $\psi(x, 0) \sim 0$, 粒子主要出现在势阱的左半区, ψ 随时间的变化为

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(x) e^{-iE_1 t/\hbar} - \psi_2(x) e^{-iE_2 t/\hbar}] \quad (13)$$

当

$$t = n\pi\hbar/(E_2 - E_1), \quad n = 1, 3, 5, \dots \quad (14)$$

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(x) + \psi_2(x)] e^{-iE_1 t/\hbar}$$

这时, 在 $x < 0$ 处 $\psi \sim 0$, 粒子出现在右半区. 当

$$t = n\pi\hbar/(E_2 - E_1), \quad n = 2, 4, 6, \dots \quad (15)$$

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(x) - \psi_2(x)] e^{-iE_1 t/\hbar}$$

粒子又回到左半区. 粒子穿透中央的势垒所需时间

$$\Delta t = \pi\hbar/(E_2 - E_1) \approx \frac{m\xi L^3}{4\pi\hbar} e^{2\xi a} \quad (16)$$

这个结果大体上可以按势垒穿透现象来理解. 当 $E \ll V_0$, 而且穿透概率很小时, 粒子向势垒(高为 V_0 , 宽为 $2a$) 每碰撞一次, 透射波振幅和入射波振幅之比为

$$|S| \sim 4\sqrt{\frac{E}{V_0}} e^{-2\xi a} \sim \frac{4k}{\xi} e^{-2\xi a} \sim \frac{4\pi}{\xi L} e^{-2\xi a}$$