科学版

大学物理习题精解系列

量子力学习题精解

吴 强 柳盛典 编著

科学出版社
www.sciencep.com

内 容 简 介

本书是与科学出版社2003年出版的普通高等教育“十五”国家级规划教材《量子力学》(张永德著)配套的习题解答，主要包括量子力学物理基础、Schrödinger方程的一般讨论、一维问题、中心场束缚态问题、量子力学的表象与表示、对称性分析及应用、电子自旋角动量、定态微扰论、电磁作用分析和应用、势散射理论、含时问题与量子跃迁、量子信息论的物理基础。

本书适合于理科大学与师范大学物理系学习量子力学的学生。

图书在版编目(CIP)数据

量子力学习题精解/吴强，柳盛典编著. 一北京：科学出版社，2003
(大学物理习题精解系列)

ISBN 7-03-011549-X

Ⅰ. 量… Ⅱ. ①吴…②柳… Ⅲ. 量子力学-高等学校-习题
Ⅳ. O413. 1～44

中国版本图书馆CIP数据核字(2003)第048356号

责任编辑：鄢德平 / 责任校对：宋玲玲
责任印制：安春生 / 封面设计：陈 敬

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
*

2003年8月第 一 版 开本：B5(720×1000)
2003年8月第一次印刷 印张：12 3/4
印数：1—4 000 字数：243 000

定价：18.00元

序　言

物理习题是锻炼物理思维的体操。做物理习题是学习物理课程中必要而又重要的环节。通过做习题，可以巩固、丰富已经掌握的东西，发现一些你还不懂或懂得不够的地方，或是某些问题的某些侧面；它有助于深化对基本概念、基本原理的理解，使学到的知识更加融会贯通；它能进一步锻炼处理问题的技巧，提高运用所学知识的能力；此外，它还有助于进一步拓宽知识面等。所以许多著名物理学家都十分重视习题，要求勤奋地做习题，多做习题，将它看成学习是否踏实的一种标志。

一般地说，在四大力学的学习中，量子力学的学习有一种特殊的困难，这不仅在于量子力学中基本概念、基本原理和初学者的日常宏观观念差距很大，不容易理解，也在于量子力学的方法有时很新颖，其中包含不少物理和数学新技巧。于是，这种情况常常会造成：学生听课还都能懂，但做起题来有时却是“老虎啃天——无从下嘴”。这说明在学习量子力学中，做习题和上习题课的重要性，要求教师和学生必须更加重视做习题和上习题课这个环节。

在我写的《量子力学》中，吸收了美国一些著名大学研究生入学考试材料，参照书中内容也部分地拟定了一些，同时又参考了以往国内教学积累，一共编集了 251 道习题。出书后，一些老师提出，为教学方便，希望出版一本相应的习题解答。与此同时，科学出版社鄢德平先生也这样建议。于是我们便产生了针对那本《量子力学》的习题编写一本题解的想法。

这本题解是供同行老师们在教学中参考用的，它也适合于研究生作为复习量子力学之用。对于正在学习量子力学的本科同学，如能正确使用，它也很有益处。这里，我们向使用本书的本科生郑重建议：做习题时，千万不要不经思索就抄这本题解中的答案，应当有个小小的三部曲：第一，看到题目之后一定要思考几分钟，但也不必苦苦思索很长时间；第二，如仍不得要津，径直去看题解；第三，做完这道题后，反思几分钟，对自己做个分析和小结。这样，学习既踏实了，也有了高效率。本来，在看书、做题，以至阅读文献中，踏实和速度（效率）是一对矛盾。采用此类（以及其他合适的）方法是能够将两者统一起来的。这些无非是想说明：讲究学习方法（广义而言，讲究治学之道）至关重要。

成书期间，我的几位研究生：赵梅生、杨洁、赵博、张强承当了几乎全部求解任务和大部分计算机输入任务。烟台师范学院王立志同学也做了部分输入工作。经过吴强和柳盛典两位教授辛勤审校、修改和补充，终于完成了全书。为了尽力保证

质量，审改补充工作是彼此交换、反复进行的；其中第十二章曾由我另一位学生郁司夏博士协助审校；陈增兵教授也参加过题解的讨论；我则断断续续地参加了求解和讨论的全过程。

由于成书时间短促和我们见识所限，书中错误或不当之处在所难免，敬请同行专家和使用者们热心指正。我们真诚希望这本题解能有助于教学和学习，得到大家的认可。

张永德
中国科学技术大学
2002 年 11 月 15 日

目　　录

第一章　量子力学的物理基础

1.1　在宏观世界里，量子现象常常可以忽略. 对下列诸情况，在数值上加以证明：

(1) 长 $l=1\text{m}$，质量 $M=1\text{kg}$ 的单摆的零点振荡的振幅；

(2) 质量 $M=5\text{g}$，以速度 10cm/s 向一刚性障碍物(高 5cm，宽 1cm)运动的子弹的透射率；

(3) 质量 $M=0.1\text{kg}$，以速度 0.5m/s 运动的钢球被尺寸为 $1\times1.5\text{m}^2$ 的窗子所衍射.

解：(1) 由位力定理可推知，谐振子的平均势能 $\langle V\rangle=\langle T\rangle=\dfrac{E}{2}$，再由谐振子的零点振荡能为 $\dfrac{\hbar\omega}{2}$，可得

$$\frac{m\omega^2A^2}{2}=\frac{\hbar\omega}{4}$$

其中，A 为对应零点能的均方根振幅，所以

$$A=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}=\sqrt{\frac{\hbar}{2m}\sqrt{\frac{l}{g}}}\approx0.41\times10^{-17}\text{m}$$

可见宏观振子的零点振荡实际上是没有的(A 也可用 $\sqrt{\int\psi_0^*(x)x^2\psi_0(x)\mathrm{d}x}$ 来求.).

(2) 如果把障碍物的宽度看成是势垒的厚度 a，把子弹透射看成是越过障碍物所设置的重力势垒，则透射概率

$$T\approx\exp\left\{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0-E)}\right\}$$

这里 $V_0=mgH, E=mv^2/2$(公式参见第三章)，则

$$T\approx\exp\left\{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m\left(mgH-\frac{mv^2}{2}\right)}\right\}$$
$$\approx e^{-0.9\times10^{-30}}$$

(3) 入射钢球的 de Broglie 波长为

$$\lambda=\frac{h}{p}=\frac{h}{mv}\approx1.3\times10^{-30}\text{cm}$$

方形窗的水平和垂直方向的衍射角分别为

$$\theta_{\text{h}}\approx\frac{\lambda}{D}\approx1.3\times10^{-30}\text{rad}$$

$$\theta_1 \approx \frac{\lambda}{L} \approx 0.9\times 10^{-30}\,\mathrm{rad}$$

1.2 用 $\hbar, e, c, m$(电子质量)，M(质子质量)表示下列每个量，给出粗略的数值估计：

(1) 玻尔半径(cm)；(2) 氢原子结合能(eV)；(3)玻尔磁子；(4) 电子的康普顿波长(cm)；(5)经典电子半径(cm)；(6)电子静止能量(MeV)；(7)质子静止能量(MeV)；(8)精细结构常数；(9)典型的氢原子精细结构分裂.

解：(1)$a=\dfrac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}=0.529\times10^{-10}\,\mathrm{cm}$

(2) $E=\dfrac{me^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^2}=13.605\mathrm{eV}$

(3) $\mu_B=\dfrac{e\hbar}{2m}=5.788\times10^{-11}\mathrm{MeV}\cdot\mathrm{T}^{-1}$

(4) $\lambda_c=\dfrac{h}{mc}=2.426\times10^{-10}\,\mathrm{cm}$

(5) $r_{cl}=\dfrac{e^2}{4\pi\epsilon_0 mc^2}=2.817\times10^{-13}\,\mathrm{cm}$

(6) $E_e=mc^2=0.511\mathrm{MeV}$

(7) $E_p=Mc^2=938.272\mathrm{MeV}$

(8) $\alpha=\dfrac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}=7.297\times10^{-3}\approx1/137$

(9) $\Delta E=\alpha^4mc^2=1.8\times10^{-4}\,\mathrm{eV}$

1.3 导出、估计、猜测或背出下列数值，精确到一个数量级范围内.

(1) 电子的汤姆逊截面；(2) 氢原子的电离能；(3) 氢原子中基态能级的超精细分裂能量；(4) ${}^7_3\mathrm{Li}(Z=3)$核的磁偶极矩；(5) 质子和中子质量差；(6) ${}^4\mathrm{He}$核的束缚能；(7)最大稳定核的半径；(8)π^0介子的寿命；(9)μ^-介子的寿命；(10) 自由中子的寿命.

解：(1) $\sigma=\dfrac{8\pi}{3}r_e^2=6.56\times10^{-31}\,\mathrm{m}^2$

(2) $I=\dfrac{e^2}{2a}=13.6\mathrm{eV}$

(3) $\Delta E_{\mathrm{fine}}\approx13.6\times\left(\dfrac{1}{137}\right)^2\approx10^{-4}\,\mathrm{eV}$，$\Delta E_{\mathrm{super}}\approx\Delta E_{\mathrm{fine}}\times10^{-3}\approx10^{-7}\,\mathrm{eV}$

(4) $\mu=1.67\times10^{-26}\,\mathrm{J}\cdot\mathrm{T}^{-1}$

(5) $\Delta m=m_p-m_n=-2.3\times10^{-30}\,\mathrm{kg}$

(6) $E=4\times7=28\mathrm{MeV}$

(7) 在核力范围内，$r=1.4A^{1/3}\,\mathrm{fm}=1.4\times(100)^{1/3}\,\mathrm{fm}\approx6.5\mathrm{fm}$

(8) $\tau=0.828\times10^{-16}$s

(9) 衰变是弱相互作用过程,$\tau=2.2\times10^{-6}$s

(10) $\tau_n\approx15\text{min}=9\times10^2$s

1.4 指出下列实验中,哪些实验表明了辐射场的粒子性? 哪些实验主要证明能量交换的量子性? 哪些实验主要表明物质粒子的波动性? 简述理由.

(1) 光电效应;(2) 黑体辐射谱;(3) Franck-Hertz 实验;(4) Davisson-Germer 实验;(5) Compton 散射.

解:光电效应和 Compton 散射说明了光场的粒子性.光电效应表明每个光子的能量为 $\hbar\omega$,Compton 散射更进一步说明光子的动量为 h/λ,并且说明光子与物质相互作用时,满足动量守恒与能量守恒.

黑体辐射谱与 Franck-Hertz 实验说明,黑体(常描述为一谐振子体系)与辐射场的能量交换过程、电子与原子的碰撞过程,能量交换是量子化的,即原子的能级是量子化的.

Davisson-Germer 实验(电子在晶体中发生衍射),则主要表现出电子的波动性,验证了 de Broglie 波长与动量的关系,$\lambda=h/p$.

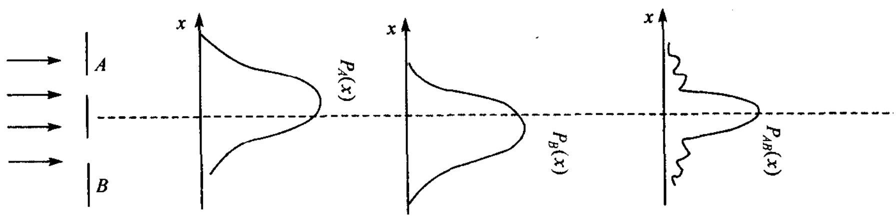
1.5 考虑如下实验:一束电子射向刻有 A、B 两缝的平板,板外是一装有检测器阵列的屏幕.利用检测器能定出电子撞击屏幕的位置.在下列各种情形下,画出入射电子强度随屏幕位置变化的草图,给出简单解释.

(1) A 缝开启,B 缝关闭;

(2) B 缝开启,A 缝关闭;

(3) 两缝均开启.

解:如图(1)~(3).



(1) 单缝衍射 (2) 单缝衍射 (3) 双缝干涉

当 A 缝单独开启时,屏幕上的电子强度分布 $P_A(x)$ 为电子 de Broglie 波在 A 缝的单缝衍射强度分布;同理,B 缝单独开启时,屏幕上形成 B 缝的电子单缝衍射强度分布 $P_B(x)$;两缝同时开启时,屏幕上的电子强度分布 $P_{AB}(x)$ 并非前两种情况强度分布的简单叠加,而是出现了干涉效应,即 $P_A(x)+P_B(x)+$干涉项,从而显示出电子的波动性.

1.6 导出(1.11)式,验算三个公式中的系数数值.

解:因为

$$P=\frac{h}{\lambda}\qquad E=\frac{P^2}{2m}$$

这里 P, E 分别是自由粒子的动量和能量,m 为质量,h 为普朗克常数. 由上两式可以导出

$$\lambda=\frac{h}{\sqrt{2mE}}$$

对于光子而言

$$\lambda=\frac{c}{\nu}=\frac{hc}{E}$$

以上两式,即(1.11)式的来源. 容易验算

$$\frac{h}{\sqrt{2m_e}}=\frac{6.626\times10^{-34}\,\mathrm{Js}}{\sqrt{2\times9.109\times10^{-31}\,\mathrm{kg}}}=12.26\,\text{Å}/\mathrm{eV}^{\frac{1}{2}}$$

$$\frac{h}{\sqrt{2m_n}}=\frac{6.626\times10^{-34}\,\mathrm{Js}}{\sqrt{2\times1.675\times10^{-27}\,\mathrm{kg}}}=0.286\,\text{Å}/\mathrm{eV}^{\frac{1}{2}}$$

$$hc=6.626\times10^{-13}\,\mathrm{Js}\times2.998\times10^{8}\,\mathrm{ms^{-1}}=1.241\times10^{4}\,\text{Å}/\mathrm{eV}$$

1.7 讨论以下波函数的归一化问题:

(1) 粒子在一维无限深势阱中运动,设 $\psi(x)=A\sin\frac{\pi x}{a}(0\leqslant x\leqslant a)$, 求 A 使波函数归一;

(2) 设 $\psi(x)=A\exp\left\{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2\right\}$,$\alpha$ 为已知常数,求归一化常数 A.

(3) 设 $\psi(x)=\exp\{\mathrm{i}kx\}$, 粒子的位置概率分布如何? 能否归一?

(4) 设 $\psi(x)=\delta(x)$, 粒子的位置概率分布如何? 能否归一?

解: (1) 由于在全空间(一维)发现粒子的概率为 1, 应有

$$\int\psi^*(x)\psi(x)\mathrm{d}x=\int_0^a A^2\left(\sin\frac{\pi x}{a}\right)^2\mathrm{d}x=1$$

由此可得 $A=\sqrt{\frac{2}{a}}$.

(2) 同理,有

$$\int_{-\infty}^{+\infty}A^2\exp\{-\alpha^2x^2\}\mathrm{d}x=1$$

得 $A=\sqrt[4]{\frac{\alpha^2}{\pi}}$.

(3) 概率密度 $p(x)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}=1$. 即,在空间中任何位置, 单位体积内测到一个粒子的概率为 1.

若沿用上面的方法来求归一化系数,则会出现

$$\int_{-\infty}^{\infty} A^2 e^{-ikx} e^{ikx} dx = \int_{-\infty}^{\infty} A^2 dx = \infty \cdot A^2$$

要使积分为 1,必须 $A=0$. 因此波函数不能归一,只能归于 δ 函数.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2\pi} \exp\{-ik'x\} \exp\{ikx\} dx = \delta(k-k')$$

(4) $\psi(x)=\delta(x-x_0)$是粒子的位置本征函数,此波函数描述的粒子的位置概率分布为

$$P(x) = \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x'-x_0)\delta(x-x')dx' \right|^2 = \delta^2(x-x_0)$$

即,在 $x=x_0$ 处可测得粒子,在其他位置测不到粒子. 位置本征函数不能归一,只能归到 δ 函数,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-x_1)\delta(x-x_2)dx = \delta(x_1-x_2)$$

1.8　设在球坐标中,粒子波函数为 $\psi(r,\theta,\varphi)$,试求

(1) 在球壳$(r,r+dr)$中找到粒子的概率;

(2) 在(θ,φ)方向的立体角 $d\Omega$ 中找到粒子的概率.

解:(1) 在球壳$(r,r+dr)$中找到粒子的概率为

$$P(r)dr = \left[\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} |\psi(r,\theta,\varphi)|^2 \sin\theta d\theta d\varphi\right] r^2 dr$$

(2) 在(θ,φ)方向的立体角 $d\Omega$ 中找到粒子的概率为

$$P(\theta,\varphi)d\Omega = \left[\int_0^{\infty} |\psi(r,\theta,\varphi)|^2 r^2 dr\right] d\Omega$$

1.9　对下列波函数所描述的粒子,分别求出位置和动量的不确定度,并验证不确定性关系:

(1) 平面波 $\psi(x)=\exp\{ikx\}$

(2) $\psi(x)=\delta(x-x_0)$

(3) Gauss 型波包 $\psi(x)=\sqrt[4]{\frac{\alpha^2}{\pi}}\exp\left\{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2\right\}$

(4)$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{L}}\exp\{-|x|/L\}$

解:(1)算符 Ω 的不确定度,指 Ω 在某一量子态 ψ 下的不确定度

$$\Delta_\psi \Omega = \sqrt{\langle \Omega^2 \rangle_\psi - \langle \Omega \rangle_\psi^2}$$

其中,$\langle \Omega \rangle_\psi = \int \psi^*(x)\Omega\psi(x)dx$.

算符 Ω_1,Ω_2 之间的不确定性关系满足:

$$(\Delta_\psi \Omega_1)(\Delta_\psi \Omega_2) \geqslant \left|\frac{1}{2}\langle[\Omega_1,\Omega_2]\rangle_\psi\right|$$

平面波 e^{ikx} 是动量 $p=k/\hbar$ 的本征态，此波函数描述的粒子具有确定的动量 p，所以动量的平均值也为 p，均方偏差 $\Delta_\psi p=0$.

再计算 $\langle\hat{x}\rangle_\psi$，$\langle\hat{x}^2\rangle_\psi$，易得

$$\langle\hat{x}\rangle_\psi=\int_{-\infty}^{\infty}e^{-ikx}\,xe^{ikx}\,dx=\int_{-\infty}^{\infty}x\,dx=0$$

$$\langle\hat{x}^2\rangle_\psi=\int_{-\infty}^{\infty}e^{-ikx}x^2e^{ikx}\,dx=\infty$$

故有，$\Delta_\psi x=\infty$.

综上所述，仍可以认为满足

$$(\Delta_\psi\hat{x})(\Delta_\psi\hat{p})\geqslant\left|\frac{1}{2}\langle[\hat{x},\hat{p}]\rangle_\psi\right|=\frac{1}{2}\hbar$$

(2) 与(1)类似，$\delta(x-x_0)$ 是位置的本征态，其本征值为 x_0，处于这种量子态的粒子具有确定的位置 x_0，所以有 $\Delta_\psi x=0$. 对于 $\langle\hat{p}\rangle_\psi$，可转到动量空间求解，$\psi(k)=\int\delta(x-x_0)e^{ikx}\,dx=e^{ikx_0}$，利用奇函数的性质，可求得 $\langle\hat{p}\rangle_\psi=0$，$\langle\hat{p}^2\rangle_\psi=\int e^{-ikx_0}\,\hat{p}^2e^{ikx_0}\,dp=\infty$，故 $\Delta_\psi p=\infty$，因此满足 $(\Delta_\psi\hat{x})(\Delta_\psi\hat{p})\geqslant\frac{1}{2}\hbar$.

注意：动量本征态与位置本征态是两种理想极限，是真实的物理波包无限展宽和无限压缩的两种极限结果. 它们是很有用的概念，但并非是物理上真实的量子状态.

(3) 因为 $\langle\hat{x}\rangle_\psi$，$\langle\hat{p}\rangle_\psi$ 的积分式中被积函数为奇函数，故在 $-\infty\sim\infty$ 范围内的积分为零. 另外易求出 $\langle\hat{x}^2\rangle_\psi$，$\langle\hat{p}^2\rangle_\psi$，即

$$\langle\hat{x}^2\rangle_\psi=\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\int e^{-\alpha^2x^2}x^2\,dx=\frac{1}{2\alpha^2}$$

$$\langle\hat{p}^2\rangle_\psi=\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\int e^{-\alpha^2x^2/2}\left(-\hbar^2\frac{d^2}{dx^2}\right)e^{-\alpha^2x^2/2}\,dx=\frac{\hbar^2\alpha^2}{2}$$

所以有 $(\Delta_\psi\hat{x})(\Delta_\psi\hat{p})=\hbar/2$. 因此称 $\psi(x)=\sqrt[4]{\frac{\alpha^2}{\pi}}e^{-\alpha^2x^2/2}$ 为最小不确定波包.

(4) 同样因为被积函数为奇函数积分，易算出 $\langle\hat{x}\rangle_\psi=0$，

$$\langle\hat{x}^2\rangle_\psi=\frac{2}{L}\int_0^{\infty}e^{-2x/L}x^2\,dx=\frac{L^2}{2}$$

故有 $\Delta_\psi\hat{x}=\frac{L}{\sqrt{2}}$，下面求 $\Delta_\psi\hat{p}$.

因为 $\frac{\partial}{\partial x}e^{-|x|/L}=\left[\frac{1}{L}-\frac{2}{L}\theta(x)\right]e^{-|x|/L}$，其中

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

为阶梯函数，故有

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\mathrm{e}^{-|x|/L}=-\frac{2}{L}\delta(x)\mathrm{e}^{-|x|/L}+\frac{1}{L^2}\mathrm{e}^{-|x|/L}$$

因此，

$$\begin{aligned}\langle\hat{p}\rangle&=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{L}}\mathrm{e}^{-|x|/L}\left[-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right]\frac{1}{\sqrt{L}}\mathrm{e}^{-|x|/L}\mathrm{d}x\\&=-\mathrm{i}\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{L}\mathrm{e}^{-|x|/L}\left[\frac{1}{L}-\frac{2}{L}\theta(x)\right]\mathrm{e}^{-|x|/L}\mathrm{d}x=0\\\langle\hat{p}^2\rangle&=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{L}\mathrm{e}^{-|x|/L}\left(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\mathrm{e}^{-|x|/L}\mathrm{d}x\\&=-\hbar^2\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{L}\left[\frac{2}{L}\delta(x)-\frac{1}{L^2}\right]\mathrm{e}^{-2|x|/L}\mathrm{d}x\\&=\frac{2\hbar^2}{L}\,|\,\psi(0)\,|^2-\frac{\hbar^2}{L^2}=\frac{\hbar^2}{L^2}\\\Delta_\psi\hat{p}&=\frac{\hbar}{L}\end{aligned}$$

也可以转到动量空间求解，

$$\begin{aligned}\psi(p)&=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar L}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-|x|/L}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}x=\frac{2}{\sqrt{2\pi\hbar L}}\int_0^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{1}{L}x}\cos\left(\frac{p}{\hbar}x\right)\mathrm{d}x\\&=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar L}}\frac{\frac{2}{L}}{\frac{p^2}{\hbar^2}+\frac{1}{L^2}}\end{aligned}$$

$$\langle\hat{p}^2\rangle_\psi=\frac{1}{2\pi\hbar L}\int_0^{\infty}\left(\frac{\frac{2}{L}}{\frac{p^2}{\hbar^2}+\frac{1}{L^2}}\right)^2p^2\mathrm{d}p=\frac{\hbar^2}{L^2}$$

上面利用了积分公式

$$\int\frac{\mathrm{d}x}{(a^2+x^2)^n}=\begin{cases}\dfrac{1}{a}\tan^{-1}\dfrac{x}{a} & (n=1)\\[2ex]\dfrac{x}{2(n-1)a^2(a^2+x^2)^{n-1}}+\dfrac{2n-3}{2(n-1)a^2}\displaystyle\int\frac{\mathrm{d}x}{(a^2+x^2)^{n-1}} & (n>1)\end{cases}$$

由上面计算可知$(\Delta_\psi\hat{x})(\Delta_\psi\hat{p})=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}>\frac{\hbar}{2}$.

1.10　利用不确定性关系估计无限深势阱中粒子的基态能量，设阱宽为 a.

解:因为对基态波函数有 $\overline{x}=\overline{p}=0$,故 $\Delta x\sim a$,$\Delta p\sim p$,代入不确定性关系

$$\Delta p\cdot\Delta x\geqslant\hbar/2$$

给出 $p\geqslant\frac{\hbar}{2a}$,这时基态能量为

$$E_0=\frac{p^2}{2m}\sim\frac{\hbar^2}{8ma^2}$$

1.11　证明流密度算符

$$\hat{j}=\frac{1}{2}\left[\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{m}+\frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{m}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\right]$$

是 Hermite 算符,并求它在 $\psi(\boldsymbol{r})$态中的平均值表达式.

解:由厄米算符的定义可知,当算符$\hat{A}$满足下列关系式时为厄米算符

$$\int\psi^*(\boldsymbol{r})\hat{A}\varphi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\int\varphi(\boldsymbol{r})[\hat{A}\psi(\boldsymbol{r})]^*\mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

其中 $\psi(\boldsymbol{r}),\varphi(\boldsymbol{r})$为两个任意波函数.

现将 $\hat{j}$ 代替上式中的$\hat{A}$,并将$\hat{\boldsymbol{p}}=-\mathrm{i}\hbar\nabla$ 代入,这时等式左边为

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(\boldsymbol{r})\frac{1}{2}\left[\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\frac{-\mathrm{i}\hbar\nabla}{m}+\frac{-\mathrm{i}\hbar\nabla}{m}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\right]\varphi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

$$=\oiint_{\infty}\mathrm{d}\boldsymbol{S}\psi^*(\boldsymbol{r})\left[\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\left(\frac{-\mathrm{i}\hbar}{m}\right)\varphi(\boldsymbol{r})\right]$$

$$+\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(\boldsymbol{r})\frac{1}{2}\left[\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\frac{\mathrm{i}\hbar\nabla}{m}+\frac{\mathrm{i}\hbar\nabla}{m}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\right]\psi^*(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

上式右边第一项面积分因 $\boldsymbol{r}'$ 不在积分面上而消失,第二项正好是 $\int\varphi(\boldsymbol{r})[\hat{\boldsymbol{j}}\psi(\boldsymbol{r})]^*\mathrm{d}\boldsymbol{r}$,故 $\hat{\boldsymbol{j}}$ 为厄米算符.

上面用到了矢量微分公式:

$$\psi^*(\boldsymbol{r})\nabla\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\varphi(\boldsymbol{r})=\nabla[\psi^*(\boldsymbol{r})\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\varphi(\boldsymbol{r})]-[\nabla\psi^*(\boldsymbol{r})]\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\varphi(\boldsymbol{r})$$

以及

$$\psi^*(\boldsymbol{r})\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\nabla\varphi(\boldsymbol{r})=\nabla[\psi^*(\boldsymbol{r})\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\varphi(\boldsymbol{r})]-[\nabla\psi^*(\boldsymbol{r})\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')]\varphi(\boldsymbol{r})$$

同理可证

$$\langle\hat{\boldsymbol{j}}\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(\boldsymbol{r}')\hat{\boldsymbol{j}}\psi(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}'=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}[\psi^*(\boldsymbol{r})\nabla\psi(\boldsymbol{r})-\psi(\boldsymbol{r})\nabla\psi^*(\boldsymbol{r})]$$

1.12　证明: $\sum\limits_{n,m=0}^{\infty}A_{n,m}\frac{\hat{p}^n\hat{x}^m+\hat{x}^m\hat{p}^n}{2}$ ($A_{n,m}$是实数)是 Hermite 算符.

证明:因为$\hat{x}$,$\hat{p}$是 Hermite 算符,所以有

$$\left[\frac{\hat{p}^n\hat{x}^m+\hat{x}^m\hat{p}^n}{2}\right]^\dagger=\frac{(\hat{x}^m)^\dagger(\hat{p}^n)^\dagger+(\hat{p}^n)^\dagger(\hat{x}^m)^\dagger}{2}$$

$$= \frac{\hat{p}^n \hat{x}^m + \hat{x}^m \hat{p}^n}{2}$$

1.13　结合电子 Young 双缝实验中，电子被接受屏与探测器探测前后的实验测量过程，解释量子力学第三公设——测量公设中三个阶段的说法.

解：设双缝屏上有 A,B 两条缝，通过双缝之后的电子状态可表示为

$$\psi(x,t) = \psi_A(x,t) + \psi_B(x,t)$$

这说明电子的量子态在经过双缝仪器时，和仪器由两条缝所表示的两个可区分态构成了纠缠态. 当我们要测量电子从哪条缝经过时，则测量结果一定是塌缩到和某一条缝纠缠的对应的态.（$\psi_A(x,t)$或者 $\psi_B(x,t)$）当不测量时，则处于叠加态，于是可以认为当不可区分时，电子是同时通过两条缝. 在电子到达接收屏时 $\psi(x,t)$可以分解为与接收屏位置可区分态相纠缠的电子位置本征态的叠加.

$$\Psi(x,t) = \iiint \Psi(x',t)\delta(x-x')\mathrm{d}x'$$

其中 $\delta(x-x')$是位置本征值为 x'的本征态. 当在接收屏上 x'位置发现电子时，即已经以 $|\Psi(x,t)|^2$ 的概率塌缩到 $\delta(x-x')$态，然后以此为初态在接收屏新环境的新哈密顿量下继续演化.

1.14　设$\hat{\Omega}$为对应力学量 Ω 的算符，其本征值为一系列分立值 ω_k. 现在对量子态 $\Psi(x)$的大量复制品进行了关于 Ω 的重复测量，所得 Ω 的实测值：(1) 必为分立的；(2) 不一定分立的. 而每次测量中，所得 Ω 的实测值：(3) 必是 Ω 的本征值之一；(4) 可以为本征值之外的某个数.

解：(1)、(3)是对的，(2)、(4)是错的. 被测态无论是任何量子态时都是如此.

1.15　为什么说轨道概念是被量子力学摒弃的纯经典的概念？

解：微观粒子的波粒二象性及波函数的描述导致了不确定性关系尤其是位置与动量的不确定性关系，使得在微观物理学中必须摒弃经典的轨道概念. 因为经典粒子之所以有轨道，其前提是在任意时刻可以同时确定它的位置与动量. 这和不确定性原理相违背.

1.16　根据不确定性关系，对“静止粒子”的概念进行讨论.

解：若有“静止粒子”则应理解为动量本征值为零，但根据不确定性关系，其位置应完全不确定. 即便对平面波，当 p 为零时也难以理解其坐标波函数及动量波函数，故一般以不考虑“静止微观粒子”为宜.

第二章　Schrödinger 方程的一般讨论

2.1　设粒子在势场 $V(\boldsymbol{r})$中运动，

（1）证明其能量平均值为

$$E=\int \mathrm{d}^3 x\, W=\int \mathrm{d}^3 x\left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \psi^* \cdot \nabla \psi+\psi^* V \psi\right]$$

W 称为能量密度；

（2）证明能量守恒公式：$\dfrac{\partial W}{\partial t}+\nabla \cdot \boldsymbol{S}=0$，其中

$$\boldsymbol{S}=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \nabla \psi+\frac{\partial \psi}{\partial t} \nabla \psi^*\right)$$

证：（1）设粒子的波函数为 $\psi(\boldsymbol{r})$，则其能量平均值

$$E=\int \mathrm{d}^3 x \psi^*(\boldsymbol{r})\, \hat{H} \psi^*(\boldsymbol{r})=\int \mathrm{d}^3 x \psi^*(\boldsymbol{r})\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2+V(\boldsymbol{r})\right] \psi(\boldsymbol{r})$$

$$=\int \mathrm{d}^3 x\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left[-\nabla \cdot\left(\psi^* \nabla \psi\right)+\nabla \psi^* \cdot \nabla \psi\right]+\psi^* V \psi\right\}$$

上式右边第一项，由高斯定理可以化为面积分，即

$$\iiint \nabla \cdot\left(\Psi^* \nabla \Psi\right) \mathrm{d}^3 x=\oiint\left(\psi^* \nabla \psi\right) \cdot \mathrm{d} s$$

将束缚态边条件 $\psi|_{\pm\infty}=\nabla \psi|_{\pm\infty}=0$，代入上式可知这项为零，所以

$$E=\int \mathrm{d}^3 x\left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \psi^* \cdot \nabla \psi+\psi^* V \psi\right]$$

（2）

$$\frac{\partial W}{\partial t}=\frac{\hbar^2}{2m}\left[\nabla \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \cdot \nabla \psi+\nabla \psi^* \cdot \nabla \frac{\partial \psi}{\partial t}\right]+\frac{\partial \psi^*}{\partial t} V \psi+\psi^* V \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{S}=-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\nabla \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \cdot \nabla \psi+\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \nabla^2 \psi+\nabla \frac{\partial \psi}{\partial t} \cdot \nabla \psi^*+\frac{\partial \psi}{\partial t} \nabla^2 \psi^*\right]$$

$$\frac{\partial W}{\partial t}+\nabla \cdot \boldsymbol{S}=\frac{\partial \psi^*}{\partial t} V \psi+\psi^* V \frac{\partial \psi}{\partial t}-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \nabla^2 \psi+\frac{\partial \psi}{\partial t} \nabla^2 \psi^*\right]$$

$$=\frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{H} \psi+\frac{\partial \psi}{\partial t} \hat{H} \psi^*=\frac{\partial \psi^*}{\partial t}\left(\mathrm{i} \hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}\right)+\frac{\partial \psi}{\partial t}\left(-\mathrm{i} \hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t}\right)=0$$

2.2　考虑任意势 $V(x)$的时间无关的一维 Schrödinger 方程，证明：如果一个解具有性质，当 $x \rightarrow \pm\infty$时 $\psi(x) \rightarrow 0$；则此解必然非简并，进而是实的，除了某一可能的相因子.

证：用反证法. 设另一 $\phi(x)$满足同样的方程，且具有与 $\psi(x)$相同的能量 E，并

有$\lim\limits_{x\to\infty}\phi(x)\to 0$，则

$$\begin{cases}\psi''/\psi = -2m(E-V)/\hbar^2 \\ \phi''/\phi = -2m(E-V)/\hbar^2\end{cases}$$

所以 $\psi''\phi-\phi''\psi=0, \psi'\phi-\phi'\psi=$常数.

由无穷远处条件，$\psi'\phi-\phi'\psi=0$，得

$$\psi'/\psi=\phi'/\phi,\quad [\ln\psi/\phi]'=0$$

所以 $\psi=$常数$\times\phi$，ψ 和 ϕ 代表同一个态.

当 $V(x)$ 为实函数时，ψ^* 与 ψ 满足相同的方程，有相同的能量和相同的边界条件$\lim\limits_{x\to\infty}\psi^*=0$，故 $\psi^*=c\psi$，或 $\psi=c^*\psi^*$，由此得$|c|^2=1, c=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}$. 此处 δ 为实数. 不妨取 $\delta=0$，则 $c=1$，ψ 为实数.

2.3 考虑一个一维束缚粒子：

(1) 证明：$\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x,t)\psi(x,t)\mathrm{d}x=0$；

(2) 证明某粒子在一给定的时刻是定态，则它将永远保持定态；

(3) 若在 $t=0$ 时，波函数在 $-a<x<a$ 范围内是常数，而在其他处为零，利用系统的本征态表达以后时间的完整波函数.

解：(1)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x,t)\psi(x,t)\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial}{\partial t}[\psi^*(x,t)\psi(x,t)]\mathrm{d}x$$

$$=\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\right)\psi+\psi^*\frac{\partial}{\partial t}\psi\right]\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\frac{1}{-\mathrm{i}\hbar}(\hat{H}\psi^*)\psi+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\psi^*\hat{H}\psi\right]\mathrm{d}x$$

$$=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\psi\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi^*+\psi^*\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi\right)+(-V\psi^*\psi+\psi^*V\psi)\right]\mathrm{d}x$$

$$=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial}{\partial x}\left(\psi^*\frac{\partial}{\partial x}\psi-\psi\frac{\partial}{\partial x}\psi^*\right)\mathrm{d}x=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left[\psi^*\frac{\partial}{\partial x}\psi-\psi\frac{\partial}{\partial x}\psi^*\right]\Bigg|_{-\infty}^{+\infty}$$

因为 ψ 是束缚态，$\psi(x\to\pm\infty)=0$，所以，上式为 0.

(2) 所谓定态即指能量本征态. 设粒子在 t_0 时刻处于定态，则有 $\hat{H}\psi(x,t_0)=E\psi(x,t_0)$. 任意时刻 t，粒子满足的 Schrödinger 方程为 $\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=\hat{H}\psi(x,t)$.

在$\hat{H}$不显含 t 下，积分此式得形式解

$$\psi(x,t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t-t_0)/\hbar}\psi(x,t_0)$$

不难证明，此波函数满足定态 Schrödinger 方程

$$\hat{H}\psi(x,t) = E\psi(x,t)$$

即在任意时刻也保持定态.

(3) 设

$$\psi(x,0) = \begin{cases} c, & |x| < a \\ 0, & |x| \geqslant a \end{cases}$$

式中 c 是常数,归一化得 $|c|^2 = 1/2a$, $c = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}/\sqrt{2a}$, δ 为位相因子. 设 $t=0$ 时刻,粒子的能量本征态完备集为 $\{\psi_n(x,0) \mid n=0,1,2,\cdots\}$, 则有

$$\hat{H}\psi_n(x,0) = E_n\psi_n(x,0)$$

任意粒子态可用它来展开,得

$$\psi(x,0) = \sum_n a_n \psi_n(x,0)$$

a_n 是与时间无关的系数,上式两边同乘以 $\psi_m^*(x,0)$,并且从负无穷到正无穷积分,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^*(x,0)\psi(x,0)\mathrm{d}x = \sum_n a_n \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^*(x,0)\psi_n(x,0)\mathrm{d}x$$

由 ψ_n 的正交归一性,得

$$a_m = \sum_n a_n \delta_{nm} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta} \frac{1}{\sqrt{2a}} \int_{-a}^{a} \psi_m^*(x,0)\mathrm{d}x$$

由(2)问, 得

$$\psi(x,t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\psi(x,0) = \sum_n a_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar}\psi_n(x,0)$$

2.4 证明:力学量 A(不显含 t)的平均值对时间的二次微商为

$$-\hbar^2 \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\overline{A} = \overline{[[A,H],H]}$$

H 为 Hamilton 量.

证: 不显含 t 的算符 A 的平均值的时间导数为

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{A} &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int \psi^*(x)A\psi(x)\mathrm{d}x = \int \frac{\partial}{\partial t}[\psi^*(x)A\psi(x)]\mathrm{d}x \\
&= \int\left[\frac{\partial \psi^*}{\partial t}A\psi - \psi^* A \frac{\partial \psi}{\partial t}\right]\mathrm{d}x \\
&= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int[\psi^* AH\psi - (H\psi^*)A\psi]\mathrm{d}x = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[A, H]}
\end{aligned}$$

同理可知,A 平均值的二次时间微商为

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\overline{A} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[A,H]}\right] = -\frac{1}{\hbar^2}\overline{[[A,H],H]}$$

2.5 证明:对于一组波包, 有