高等量子力学习题解答

井孝功　张井波　编著

哈爾濱工業大學出版社

高等量子力学习题解答

井孝功　张井波　编著

哈爾濱工業大學出版社

内 容 简 介

本书是作者编著的《高等量子力学导论》教材的配套书。书中收集的165道习题大致可分为三大类,第一类是对教材中没有详细推导的公式进行了推导;第二类是对教材中所讲授理论的具体应用;第三类是对教材内容的扩充和推广。

本书是物理系各专业硕士研究生学习"高等量子力学"课程的参考书,也是相关专业研究生和科技工作者的参考书。

图书在版编目(CIP)数据

高等量子力学习题解答/井孝功等编著.—哈尔滨:哈尔滨工业大学出版社,2006.3

ISBN 7-5603-2306-5

Ⅰ.高… Ⅱ.井… Ⅲ.量子力学-研究生-解题 Ⅳ.O413.1-44

中国版本图书馆CIP数据核字(2006)第147755号

责任编辑 张秀华
封面设计 卞秉利
出版发行 哈尔滨工业大学出版社
社　　址 哈尔滨市南岗区复华四道街10号　邮编150006
传　　真 0451-86414749
网　　址 http://hitpress.hit.edu.cn
印　　刷 哈尔滨市龙华印刷厂
开　　本 787mm×960mm　1/16　印张12.75　字数224千字
版　　次 2006年3月第1版　2006年3月第1次印刷
印　　数 1~3000册
定　　价 18.00元

前　言

高等量子力学是物理系硕士研究生的一门基础理论课程，在研究生的培养过程中具有重要的作用。

在讲授高等量子力学的过程中，学生经常会提出这样一个带有普遍性的问题：觉得教师在课堂上讲的似乎都能听明白，但是，一旦遇到具体的问题还是感到无从下手。其实原因很简单，那就是自己很少动脑动手去处理和解决一些问题。为了给读者一个检查学习效果的机会，特编写了这本《高等量子力学习题解答》，它是与作者编写的《高等量子力学导论》教材配套使用的。

本书中的习题大致可以分为三类，第一类习题是对教材中没有详细推导的公式进行了推导，第二类习题是教材中所讲授理论的具体应用，第三类习题属于课程内容的扩充或推广。

应该提醒读者的是，作为一个物理学工作者，物理思想和物理结论是问题的出发点和归宿，其中的数学演绎只不过是一个过程或手段，真正的目的是有意识地对自己发现问题和解决问题能力的培养。这些能力包括，对物理问题实质的洞察与理解能力，逻辑思维与理论推导能力，知识的综合运用与特殊技巧的使用能力，发现看似不同问题之间关系的能力，以致创新能力，等等。

本书中的一些题目是作者与同事们的研究成果，借此书出版的机会向他们表示谢意。

由于我们的水平有限，难免有诸多不当之处，还望读者不吝赐教。

井孝功　张井波

2005 年 11 月

目　　录

第 1 章　量子力学纲要

习题 1.1　设有一个体重为 $m = 50$ kg 的短跑运动员，以 $v = 10\ \mathrm{m\cdot s^{-1}}$ 的速度做直线运动，求其相应的德布罗意波长。

解　该运动员的动量为

$$p = mv = 500\ \mathrm{kg\cdot m\cdot s^{-1}} \tag{1}$$

相应的德布罗意波长只有

$$\lambda = \frac{h}{p} = 1.33\times10^{-36}\ \mathrm{m} \tag{2}$$

上述结果表明，不但微观客体具有波粒二象性，即使是具有宏观尺度的运动员也具有波粒二象性，只不过相对运动员本身的尺度而言，其德布罗意波长实在是太短了，以至其粒子性占据了绝对的主导地位，波动性完全可以被忽略，这也就是能够用经典物理方法处理宏观问题的原因所在。也许有人会说，如果运动员的速度再小一些，那么，他相应的德布罗意波长不就变大了吗。实际上，即使运动员以每秒 1 nm（纳米）的速度移动，他相应的德布罗意波长也不过只有 $\lambda = 1.33\times10^{-26}$ m。仔细想来，以 $1\ \mathrm{nm\cdot s^{-1}}$ 的速度运动，对一个体重 50 kg 的运动员来说，实在是勉为其难了。

习题 1.2　求出能量为 100 eV 的自由电子的德布罗意波长。

解　由计算德布罗意波长的公式可知

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = \frac{6.626\times10^{-34}\ \mathrm{J\cdot s}}{\sqrt{2\times9.11\times10^{-31}\ \mathrm{kg}\times10^{2}\ \mathrm{eV}}} =$$
$$\frac{6.626\times10^{-34}\ \mathrm{J\cdot s}}{\sqrt{2\times9.11\times10^{-31}\ \mathrm{kg}\times10^{2}\times1.602\times10^{-19}\ \mathrm{kg\cdot m^2\cdot s^{-2}}}} =$$
$$1.23\times10^{-10}\ \mathrm{m}$$

由此看来，该电子所具有的德布罗意波长远远大于其经典半径（2.82×10^{-15} m），它的波动性是绝对不可忽略的。实际上，至今在 10^{-20} m 的尺度上仍未探测到电子的大小，人们还在努力解开这个谜团。

习题 1.3　设有一个功率为 0.01 W 的光源，发出波长为 560 nm 的黄光，若一个人站在距光源 $R = 100$ m 处，计算每秒钟进入此人一个瞳孔中的光子个数。假设瞳孔的半径 r 约为 2 mm。

解　光源每秒钟发出的能量为

$$E = 0.01\ \mathrm{W} \times 1\ \mathrm{s} = 0.01\ \mathrm{J} \tag{1}$$

由爱因斯坦的光量子论可知，波长为 560 nm 的一个光子具有的能量为

$$\varepsilon = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \frac{6.626 \times 10^{-34}\ \mathrm{J \cdot s} \times 2.998 \times 10^{8}\ \mathrm{m \cdot s^{-1}}}{560 \times 10^{-9}\ \mathrm{m}} =$$

$$0.3547 \times 10^{-18}\ \mathrm{J} \tag{2}$$

于是，光源每秒钟发出的光子个数为

$$N = \frac{E}{\varepsilon} = \frac{0.01\ \mathrm{J}}{0.3547 \times 10^{-18}\ \mathrm{J}} = 2.82 \times 10^{16} \tag{3}$$

由初等几何图形知识可知，若观察者与光源的距离 $R = 100\ \mathrm{m}$，则光球的表面积为

$$S = 4\pi R^2 = 4\pi \times 10^4\ \mathrm{m}^2 \tag{4}$$

观察者瞳孔的表面积的计算公式为

$$s = \pi(r^2 + h^2) \tag{5}$$

其中，h 是拱高，其表达式为

$$h = R - \sqrt{R^2 - r^2} \tag{6}$$

由于 $R^2 = 10^4\ \mathrm{m}^2, r^2 = 4 \times 10^{-6}\ \mathrm{m}^2$，故 $R \gg r$，于是，上式可以改写成

$$h = R - \sqrt{R^2 - r^2} = R\left(1 - \sqrt{1 - \frac{r^2}{R^2}}\right) \approx R\left(1 - 1 + \frac{1}{2}\frac{r^2}{R^2}\right) = \frac{1}{2}\frac{r^2}{R} \tag{7}$$

将(7)式代入(5)式，得到

$$s = \pi(r^2 + h^2) \approx \pi r^2\left(1 + \frac{r^2}{4R^2}\right) \tag{8}$$

由于 $R \gg r$，故上式中右端的第 2 项可以略去，这时，相当于用小圆的面积代替小圆弧的面积。

最后，由(3)、(4)与(8)式可知，每秒钟进入观察者一个瞳孔中的光子个数是

$$n = N\frac{s}{S} = \frac{N\pi r^2}{4\pi R^2} = \frac{2.82 \times 10^{16} \times 4 \times 10^{-6}\ \mathrm{m}^2}{4 \times 10^4\ \mathrm{m}^2} = 2.82 \times 10^6 \tag{9}$$

上述结果表明，在 1 秒钟之内观察者的一个瞳孔将受到 282 万个光子的作用，而瞳孔的面积只有 $\pi r^2 = 12.56 \times 10^{-6}\ \mathrm{m}^2$，难怪人们感受不到光子的作用是断续的。

习题 1.4 设一个角频率为 ω，等效质量为 $m^* = \dfrac{\hbar\omega}{c^2}$ 的光子在重力场中垂直向上飞行的距离为 z，求其由引力产生的频率的移动（引力红移）。

解 由于光子在运动时需要克服重力做功，故如下关系式成立

$$m^* gz = \hbar\omega - \hbar\omega' \tag{1}$$

其中，g 为重力加速度，$\hbar\omega$ 为光子的初始能量，$\hbar\omega'$ 为光子飞行了距离 z 后的能量。光子的频率移动为

$$\Delta\omega = \omega' - \omega = -\frac{m^* gz}{\hbar} = -\frac{\hbar\omega gz}{\hbar c^2} = -\frac{\omega gz}{c^2} \tag{2}$$

上述理论结果已被实验证实。

习题 1.5　求波包的群速度与相速度。

解　对于做一维自由运动的粒子，通过求解定态薛定谔方程可知，其能量本征波函数是单色平面波，如果考虑到其状态随时间的变化，则波函数为

$$\psi_p(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(px - Et)\right] = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(px - \frac{p^2 t}{2m}\right)\right] \tag{1}$$

利用 $p = k\hbar$，上式可以改写成

$$\psi_k(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\{\mathrm{i}[kx - \omega(k)t]\} \tag{2}$$

式中

$$\omega(k) = \frac{k^2\hbar}{2m} \tag{3}$$

所谓波包就是上述单色平面波的叠加，即

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\Phi(k)\exp\{\mathrm{i}[kx - \omega(k)t]\}\mathrm{d}k \tag{4}$$

波包的中心位置 x_c 将出现在相角 $\varphi = kx - \omega(k)t$ 取极值的位置，具体地说，要求满足

$$\frac{\partial\varphi}{\partial k} = 0 \tag{5}$$

即

$$x_c = \frac{\partial\omega(k)}{\partial k}t \tag{6}$$

波包中心的运动速度

$$v_g = \frac{\mathrm{d}x_c}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial\omega(k)}{\partial k} \tag{7}$$

称之为波包的群速度。对于自由粒子构成的波包而言，由(3)式可知，群速度为

$$v_g = \frac{2k\hbar}{2m} = \frac{p}{m} = v \tag{8}$$

它等于自由粒子的运动速度 v。

如果顾及到相对论效应，从相对论的质能关系出发，即

$$E^2 = m^2c^4 = p^2c^2 + m_0^2c^4 \tag{9}$$

将上式两端对 p 求导，得到

$$2E\frac{\partial E}{\partial p} = 2pc^2 \tag{10}$$

由(8)式可知

$$v_g = \frac{p}{m} = \frac{\partial}{\partial p}\left(\frac{p^2}{2m}\right) = \frac{\partial E}{\partial p} \tag{11}$$

再利用(10)式,得到

$$v_g = \frac{\partial E}{\partial p} = \frac{pc^2}{E} = \frac{mvc^2}{mc^2} = v \tag{12}$$

得到与非相对论时同样的结论。

根据德布罗意假设可知

$$E = h\nu = \frac{hv_p}{\lambda}; \qquad p = \frac{h}{\lambda} \tag{13}$$

其中,ν 是频率,λ 是波长,h 是普朗克常数,而 v_p 称之为相速度。利用相对论的质能关系(9)式,可以导出相速度的表达式为

$$v_p = \frac{\lambda}{h}E = \frac{\lambda}{h}\sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4} = \frac{\lambda}{h}c\sqrt{\frac{h^2}{\lambda^2} + m_0^2c^2} = c\sqrt{1 + \frac{m_0^2c^2\lambda^2}{h^2}} \tag{14}$$

上式表明,相速度 v_p 是大于光速 c 的。

下面来讨论群速度与相速度之间的关系。

由德布罗意关系(13)式可知,相速度

$$v_p = \frac{E}{p} \tag{15}$$

于是得到群速度与相速度满足的关系式

$$v_g v_p = \frac{p}{m}\frac{E}{p} = \frac{mc^2}{m} = c^2 \tag{16}$$

总之,粒子存在于构成波包的波群之中,能量由粒子携带,能量传播的速度是群速度,群速度是小于光速的。由(14)式可知,相速度是与波长相关的,因此,相速度是构成波包的单个波的传播速度。

习题 1.6 讨论高斯波包的扩散。

解 随着时间的推移,若一个波包的宽度逐渐变大,则认为此波包是扩散的。若一个波包是扩散的,则其存在的时间(寿命)是有限的。一个波包是否扩散取决于 $\omega(k)$ 的函数形式。

在 $t = 0$ 时,假设有一个一维的高斯型波包,即

$$\Psi(x,0) = A\exp\left(-\frac{x^2}{2a^2} + \mathrm{i}k_0x\right) \tag{1}$$

式中的归一化常数 $A = (a\sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}}$。将上式向平面波展开,展开系数为

$$\Phi(k,0)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi(x,0)\exp(-\mathrm{i}kx)\mathrm{d}x=$$
$$\frac{A}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}+\mathrm{i}k_0x-\mathrm{i}kx\right)\mathrm{d}x \tag{2}$$

上述积分可用配方法来完成,即

$$\Phi(k,0)=\frac{A}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left\{-\left[\frac{x}{\sqrt{2}a}+\frac{\mathrm{i}a(k-k_0)}{\sqrt{2}}\right]^2\right\}\exp\left[-\frac{a^2}{2}(k-k_0)^2\right]\mathrm{d}x \tag{3}$$

若令

$$\xi^2=\left[\frac{x}{\sqrt{2}a}+\frac{\mathrm{i}a(k-k_0)}{\sqrt{2}}\right]^2 \tag{4}$$

则(3)式化为

$$\Phi(k,0)=\frac{A}{\sqrt{2\pi}}\exp\left[-\frac{a^2}{2}(k-k_0)^2\right]\int_{-\infty}^{\infty}\exp(-\xi^2)\sqrt{2}a\mathrm{d}\xi=$$
$$Aa\exp\left[-\frac{a^2}{2}(k-k_0)^2\right] \tag{5}$$

显然,$\Phi(k,0)$ 表示 k 分波在高斯波包中占据的份额,实际上,$\Phi(k,0)$ 就是 $\Psi(x,0)$ 在波矢 $\boldsymbol{k}$ 表象中的表示。

在坐标表象中,高斯波包由(1)式描述,它的宽度近似为

$$\Delta x\approx a \tag{6}$$

在波矢表象中,宽度近似为

$$\Delta k\approx\frac{1}{a} \tag{7}$$

两者之积满足不确定关系

$$\Delta x\cdot\Delta k\approx 1 \tag{8}$$

在任意时刻 t,高斯波包所处的状态为

$$\Psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\Phi(k,0)\exp\{\mathrm{i}[kx-\omega(k)t]\}\mathrm{d}k \tag{9}$$

将 $\Phi(k,0)$ 与 $\omega(k)$ 的表达式代入上式,得到

$$\Psi(x,t)=A\sqrt{\frac{a^2}{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-\frac{a^2(k-k_0)^2}{2}+\mathrm{i}kx-\mathrm{i}\frac{k^2\hbar t}{2m}\right]\mathrm{d}k \tag{10}$$

对被积函数进行配方,然后做积分得到

$$\Psi(x,t)=\frac{A}{\sqrt{1+\mathrm{i}\frac{\hbar t}{ma^2}}}\exp\left[-\frac{x^2-\mathrm{i}2a^2k_0x+\mathrm{i}\frac{a^2k_0^2\hbar t}{m}}{2a^2\left(1+\mathrm{i}\frac{\hbar t}{ma^2}\right)}\right] \tag{11}$$

进而得到坐标的取值概率密度为

$$|\Psi(x,t)|^2 = \frac{|A|^2}{\sqrt{1+\left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2}}\exp\left\{-\frac{\left(x-\frac{k_0\hbar t}{m}\right)^2}{a^2\left[1+\left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2\right]}\right\} \tag{12}$$

上式表明,坐标概率密度是一个高斯函数,极大值出现在 $x=\frac{k_0\hbar}{m}t$ 处,它以群速度 $v_g=\frac{k_0\hbar}{m}$ 运动。

由(12)式可知,在任意时刻 t,波包的宽度变为

$$a(t) = a\sqrt{1+\left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2} \tag{13}$$

上式表明,$t=0$ 时高斯波包的宽度为 a,随着时间的推移,该波包的宽度 $a(t)$ 将会逐渐变宽,大约在 $t=1.6\times10^{-26}$ s 时波包将消失。

总之,用波包来描述微观粒子是不恰当的,这是因为它只强调了微观粒子的波动性,而忽略了它的粒子性。

习题 1.7 导出瑞利 - 金斯和普朗克的黑体辐射公式。

解 黑体辐射的能量是由电磁场的本征振动(共振)引起的,若振动频率为 ν,则频率 ν 到 $\nu+\mathrm{d}\nu$ 之间的振动次数是

$$\frac{\mathrm{d}N(\nu)}{\mathrm{d}\nu} = \frac{8\pi V}{c^3}\nu^2 \tag{1}$$

式中,c 为光速,V 为空腔的体积。

设 $\bar{\varepsilon}(T,\nu)$ 表示温度为 T、频率为 ν 的本征振动的平均能量,$\rho(T,\nu)$ 为相应的能量密度,则振动频率在 ν 到 $\nu+\mathrm{d}\nu$ 之间的能量为

$$V\rho(T,\nu)\mathrm{d}\nu = \frac{8\pi V}{c^3}\nu^2\bar{\varepsilon}(T,\nu)\mathrm{d}\nu \tag{2}$$

消去等式两端的 V,于是得到

$$\rho(T,\nu)\mathrm{d}\nu = \frac{8\pi}{c^3}\nu^2\bar{\varepsilon}(T,\nu)\mathrm{d}\nu \tag{3}$$

本征振动是简谐振动,由热力学与统计物理的能量均分定理可知,平均能量为

$$\bar{\varepsilon}(T,\nu) = \frac{\int_0^\infty \varepsilon\exp\left(-\frac{\varepsilon}{kT}\right)\mathrm{d}\varepsilon}{\int_0^\infty \exp\left(-\frac{\varepsilon}{kT}\right)\mathrm{d}\varepsilon} = \frac{(kT)^2}{kT} = kT \tag{4}$$

其中,k 为玻尔兹曼常数。将(4)式代入(3)式,立即得到瑞利 - 金斯的黑体辐射公式

$$\rho(T,\nu)\mathrm{d}\nu = \frac{8\pi}{c^3}kT\nu^2\mathrm{d}\nu \tag{5}$$

应该特别指出的是，在上述推导过程中认定简谐振子的能量是连续取值的，这正是经典物理的观点。

普朗克的惊人之举是，假设简谐振子的能量的取值是断续的，即

$$\varepsilon_n = nh\nu \tag{6}$$

其中 $n = 0,1,2,\cdots$。在此基础上，计算热平衡状态下的平均能量

$$\bar{\varepsilon}(T,\nu) = \frac{\sum\limits_{n=0}^{\infty}\varepsilon_n \exp\left(-\frac{\varepsilon_n}{kT}\right)}{\sum\limits_{n=0}^{\infty}\exp\left(-\frac{\varepsilon_n}{kT}\right)} \tag{7}$$

若令

$$\beta = \frac{1}{kT} \tag{8}$$

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty}\exp(-\beta\varepsilon_n) \tag{9}$$

则(7) 式可以改写为

$$\bar{\varepsilon}(T,\nu) = -\frac{1}{Z}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\beta}Z \tag{10}$$

将(6) 式代入(9) 式

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty}\exp(-n\beta h\nu) = \sum_{n=0}^{\infty}[\exp(-\beta h\nu)]^n \tag{11}$$

由于 $\exp(-\beta h\nu) < 1$，故可以利用级数公式

$$\sum_{n=0}^{\infty}x^n = \frac{1}{1-x} \qquad (|x| < 1) \tag{12}$$

将(11) 式变成

$$Z = \frac{1}{1-\exp(-\beta h\nu)} \tag{13}$$

再将上式代入(10) 式，通过简单的微分运算得到

$$\bar{\varepsilon}(T,\nu) = \frac{h\nu}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right)-1} \tag{14}$$

最后，将上式代入(3) 式，得到普朗克黑体辐射公式

$$\rho(T,\nu)\mathrm{d}\nu = \frac{8\pi h}{c^3}\frac{\nu^3}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right)-1}\mathrm{d}\nu \tag{15}$$

习题 1.8　在量子力学向经典力学过渡时，指出普朗克常数所起的作用。

解 首先，研究两个基本力学量算符的对易关系与不确定关系。例如，常见的不为零的对易关系有

$$[\mu,\hat{p}_\mu] = \mathrm{i}\hbar \qquad (\mu = x,y,z)$$

$$[t,\hat{E}] = -\mathrm{i}\hbar \tag{1}$$

$$[\hat{L}_x,\hat{L}_y] = \mathrm{i}\hbar\hat{L}_z,\quad [\hat{L}_y,\hat{L}_z] = \mathrm{i}\hbar\hat{L}_x,\quad [\hat{L}_z,\hat{L}_x] = \mathrm{i}\hbar\hat{L}_y \tag{2}$$

$$\begin{aligned} &[\hat{L}_x,y] = \mathrm{i}\hbar z, && [\hat{L}_y,x] = -\mathrm{i}\hbar z \\ &[\hat{L}_y,z] = \mathrm{i}\hbar x, && [\hat{L}_z,y] = -\mathrm{i}\hbar x \\ &[\hat{L}_z,x] = \mathrm{i}\hbar y, && [\hat{L}_x,z] = -\mathrm{i}\hbar y \end{aligned} \tag{3}$$

$$\begin{aligned} &[\hat{L}_x,\hat{p}_y] = \mathrm{i}\hbar\hat{p}_z, && [\hat{L}_y,\hat{p}_x] = -\mathrm{i}\hbar\hat{p}_z \\ &[\hat{L}_y,\hat{p}_z] = \mathrm{i}\hbar\hat{p}_x, && [\hat{L}_z,\hat{p}_y] = -\mathrm{i}\hbar\hat{p}_x \\ &[\hat{L}_z,\hat{p}_x] = \mathrm{i}\hbar\hat{p}_y, && [\hat{L}_x,\hat{p}_z] = -\mathrm{i}\hbar\hat{p}_y \end{aligned} \tag{4}$$

当 $\hbar \to 0$ 时，上述对易关系全部变成零，这就意味着这些算符之间是可以交换的，量子力学中的算符变成了经典力学中的常量，量子力学退化为经典力学。

再来研究两个基本力学量算符的不确定关系，例如

$$\Delta x \cdot \Delta p \geqslant \frac{\hbar}{2} \tag{5}$$

$$\Delta t \cdot \Delta E \geqslant \frac{\hbar}{2} \tag{6}$$

当 $\hbar \to 0$ 时，上述不确定关系的右端全部变成零，这就意味着这些算符对应的力学量是可以同时取确定值的，这正是经典力学的观点。

其次，研究粒子的自旋。自旋是量子力学中的一个特有的力学量，在经典力学中没有相应的量与之对应，不论是费米子还是玻色子，自旋的本征值都是以 $\hbar$ 为单位的，当 $\hbar \to 0$ 时，相当于所有粒子的自旋都将变成零，这正是经典力学的结果。

最后，研究薛定谔方程在 $\hbar \to 0$ 时的情况。

设有一个接近经典情况的量子体系，处于状态

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = A(\boldsymbol{r},t)\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S(\boldsymbol{r},t)\right] \tag{7}$$

式中，$A(\boldsymbol{r},t)$ 为振幅，$S(\boldsymbol{r},t)$ 为作用量。设体系满足薛定谔方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right]\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{8}$$

将(7)式代入(8)式，(8)式右端的第1项可以写成（为简捷计，略去波函数中自变量）

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}\cdot\left\{\boldsymbol{\nabla}\left[A\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S\right)\right]\right\} =$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\cdot\left\{\left[(\nabla A)+\frac{i}{\hbar}A(\nabla S)\right]\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)\right\}=$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\nabla\cdot\left[(\nabla A)+\frac{i}{\hbar}A(\nabla S)\right]\right\}\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)-$$
$$\frac{\hbar^2}{2m}\left[(\nabla A)+\frac{i}{\hbar}A(\nabla S)\right]\frac{i}{\hbar}\cdot(\nabla S)\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)=$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\nabla^2 A+\frac{i}{\hbar}(\nabla A)\cdot(\nabla S)+\frac{i}{\hbar}A\,\nabla^2 S\right\}\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)-$$
$$\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{i}{\hbar}(\nabla A)\cdot(\nabla S)-\frac{1}{\hbar^2}A(\nabla S)^2\right\}\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)=$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\nabla^2 A+\frac{2i}{\hbar}(\nabla A)\cdot(\nabla S)-\frac{1}{\hbar^2}A(\nabla S)^2+\frac{i}{\hbar}A\,\nabla^2 S\right\}\exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right)\tag{9}$$

于是,(8) 式变成

$$A\frac{\partial S}{\partial t}-i\hbar\frac{\partial A}{\partial t}+AV-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\nabla^2 A+\frac{2i}{\hbar}(\nabla A)\cdot(\nabla S)-\frac{1}{\hbar^2}A(\nabla S)^2+\frac{i}{\hbar}A\,\nabla^2 S\right\}=0\tag{10}$$

将(10) 式的实部与虚部分别写出,可得两个方程

$$\begin{aligned}&\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{1}{2m}(\nabla S)^2+V-\frac{\hbar^2}{2mA}\nabla^2 A=0\\&\frac{\partial A}{\partial t}+\frac{A}{2m}\nabla^2 S+\frac{1}{m}\nabla S\cdot\nabla A=0\end{aligned}\tag{11}$$

在(11) 式中,略去与 $\hbar^2$ 相关的项,并用 $2A$ 乘以第 2 式的两端,得到

$$\begin{aligned}&\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{1}{2m}(\nabla S)^2+V=0\\&2A\frac{\partial A}{\partial t}+\frac{A^2}{m}\nabla^2 S+\frac{2A}{m}\nabla S\cdot\nabla A=0\end{aligned}\tag{12}$$

由于

$$\begin{aligned}&\frac{1}{2m}(\nabla S)^2+V=H(\nabla S,V)\\&\nabla\cdot(A^2\,\nabla S)=2A\nabla A\cdot\nabla S+A^2\,\nabla^2 S\end{aligned}\tag{13}$$

(12) 式可以改写为

$$\begin{aligned}&\frac{\partial S}{\partial t}+H(\nabla S,V)=0\\&\frac{\partial}{\partial t}A^2+\frac{1}{m}\nabla\cdot(A^2\,\nabla S)=0\end{aligned}\tag{14}$$

在(14) 式中,第 1 个方程就是单粒子作用量 S 的经典运动方程,若把 A^2 与 $\frac{1}{m}A^2\nabla S$

分别视为粒子密度与粒子流密度,则第2个方程可视为经典力学的连续性方程。

总之,当薛定谔方程中的 $\hbar \to 0$ 时,若略去与 $\hbar^2$ 相关的项,则退化为经典力学方程。

实际上,$\hbar = 1.054\times 10^{-34}\,\mathrm{J\cdot s^{-1}}$ 是一个有确切数值与量纲的物理量,所谓 $\hbar\to 0$ 的意思是,所研究对象的角动量在数值上远大于 $\hbar$,或者说,相对所研究对象的角动量而言,$\hbar$ 可以忽略不计。

习题 1.9 利用坐标变换或赫尔曼 - 费恩曼定理求解下列哈密顿算符

(1) $\hat{H}_1 = \dfrac{\hat{p}^2}{2\mu} + \dfrac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 + \lambda x = \hat{H}_0 + \lambda x$

(2) $\hat{H}_2 = \dfrac{\hat{p}^2}{2\mu} + \dfrac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 + \lambda x^2 = \hat{H}_0 + \lambda x^2$

(3) $\hat{H}_3 = \dfrac{\hat{p}^2}{2\mu} + V(x) + \dfrac{\lambda}{\mu}\hat{p} = \hat{H}_0 + \dfrac{\lambda}{\mu}\hat{p}$

的本征解。

解 设 $\hat{H}_0$ 满足

$$\hat{H}_0\varphi_n(x) = E_n^0\varphi_n(x) \tag{1}$$

(1) 用配方的方法改写位势

$$V_1(x) = \frac{1}{2}\mu\omega^2x^2 + \lambda x = \frac{1}{2}\mu\omega^2\left[x^2 + \frac{2\lambda}{\mu\omega^2}x + \left(\frac{\lambda}{\mu\omega^2}\right)^2\right] - \frac{\lambda^2}{2\mu\omega^2} =$$
$$\frac{1}{2}\mu\omega^2\left(x + \frac{\lambda}{\mu\omega^2}\right)^2 - \frac{\lambda^2}{2\mu\omega^2} \tag{2}$$

若令

$$X = x + \frac{\lambda}{\mu\omega^2}$$
$$E' = E + \frac{\lambda^2}{2\mu\omega^2} \tag{3}$$

则定态薛定谔方程可以写为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}X^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2X^2\right]\psi(X) = E'\psi(X) \tag{4}$$

此即正常的线谐振子的能量本征方程,已知它的能量本征值为

$$E_n' = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{5}$$

利用(3)式可以得到 $\hat{H}_1$ 的本征解为

$$\begin{aligned} E_n &= \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{\lambda^2}{2\mu\omega^2} \\ \psi_n(x) &= N_n\exp\left[-\frac{1}{2}\alpha^2\left(x + \frac{\lambda}{\mu\omega^2}\right)^2\right]\mathrm{H}_n\left[\alpha\left(x + \frac{\lambda}{\mu\omega^2}\right)\right] \end{aligned} \tag{6}$$

(2) 改写位势

$$V_2(x) = \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 + \lambda x^2 = \frac{1}{2}\mu\left(\omega^2 + \frac{2\lambda}{\mu}\right)x^2 \tag{7}$$

若令

$$\Omega^2 = \omega^2 + \frac{2\lambda}{\mu} \tag{8}$$

则定态薛定谔方程可以写为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}\mu\Omega^2 x^2\right]\psi(x) = E\psi(x) \tag{9}$$

此亦为正常的线谐振子的能量本征方程,它的能量本征解为

$$\begin{aligned} E_n &= \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\Omega = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\sqrt{\omega^2 + \frac{2\lambda}{\mu}} = E_n^0\sqrt{1 + \frac{2\lambda}{\mu\omega^2}} \\ \psi_n(x) &= N_n \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2\right)\mathrm{H}_n(\alpha x) \end{aligned} \tag{10}$$

式中

$$\alpha^2 = \frac{\mu\Omega}{\hbar} = \frac{\mu}{\hbar}\sqrt{\omega^2 + \frac{2\lambda}{\mu}} \tag{11}$$

(3) 视 λ 为参变量,则有

$$\frac{\partial \hat{H}_3}{\partial\lambda} = \frac{\hat{p}}{\mu} \tag{12}$$

对于哈密顿算符的任意束缚本征态 $|n\rangle$,利用赫尔曼－费恩曼定理可知

$$\frac{\partial E_n}{\partial\lambda} = \langle n | \frac{\partial \hat{H}_3}{\partial\lambda} | n\rangle = \frac{1}{\mu}\langle n | \hat{p} | n\rangle \tag{13}$$

又知

$$\begin{aligned} \langle n | \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} | n\rangle &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle n | [x, \hat{H}_3] | n\rangle = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar\mu}\left[x, \frac{\hat{p}^2}{2} + \lambda\hat{p}\right] = \\ &\frac{1}{\mu}[\langle n | \hat{p} | n\rangle + \lambda] \end{aligned} \tag{14}$$

从另一个角度,得到

$$\langle n | \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} | n\rangle = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle n | [x, \hat{H}_3] | n\rangle = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle n | x\hat{H}_3 - \hat{H}_3 x | n\rangle = 0 \tag{15}$$

所以

$$\langle n | \hat{p} | n\rangle = -\lambda \tag{16}$$

进而得到能量本征值满足的微分方程

$$\frac{\partial E_n}{\partial\lambda} = -\frac{\lambda}{\mu} \tag{17}$$

对上式的 λ 积分,得到

$$E_n = -\frac{\lambda^2}{2\mu} + c \tag{18}$$

利用 $\lambda = 0$ 时,$\hat{H}_3 = \hat{H}_0$,定出积分常数

$$c = E_n^0 \tag{19}$$

最后,得到 $\hat{H}_3$ 的本征值为

$$E_n = E_n^0 - \frac{\lambda^2}{2\mu} \tag{20}$$

若 $V_3 = \lambda\hat{p}$,则

$$E_n = E_n^0 - \frac{1}{2}\mu\lambda^2 \tag{21}$$

习题 1.10 求哈密顿算符

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2x^2 + ax + b\hat{p}_x$$

的本征值。其中,a、b 为实常数。

解 将哈密顿算符改写为

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + b\hat{p}_x \tag{1}$$

式中

$$\hat{H}_1 = \hat{H}_0 + ax$$

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2x^2 \tag{2}$$

已知 $\hat{H}_0$ 的本征值为

$$E_n^0 = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{3}$$

由上题中的(6)式可知,$\hat{H}_1$ 的本征值为

$$E_n^1 = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{a^2}{2\mu\omega^2} \tag{4}$$

最后,由上题中的(21)式可知,$\hat{H}$ 的本征值为

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{a^2}{2\mu\omega^2} - \frac{\mu b^2}{2} \tag{5}$$

习题 1.11 不顾及自旋时,讨论均匀磁场中自由电子的能级(朗道能级)。取磁场为 z 方向,即矢势 $\boldsymbol{A} = (-By, 0, 0)$。

解 不顾及自旋时,均匀磁场中自由电子的哈密顿算符为

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}\left[\left(\hat{p}_x + \frac{eB}{c}y\right)^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2\right] =$$