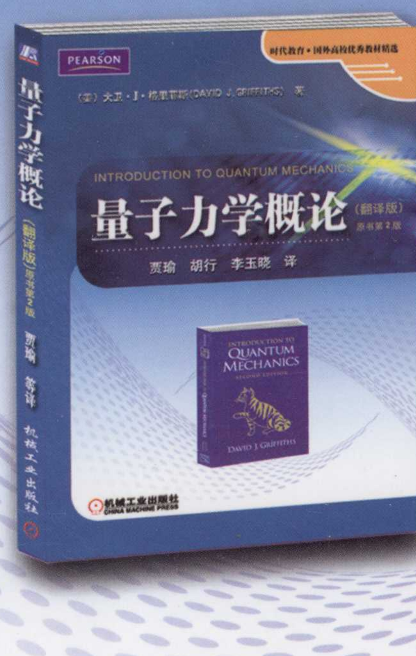
时代教育·国外高校优秀教材精选

21世纪普通高等教育基础课规划教材

Griffiths
量子力学概论
学习指导与习题解答

胡行　贾瑜　编著



机械工业出版社
CHINA MACHINE PRESS

Griffiths 量子力学概论

学习指导与习题解答

21 世纪普通高等教育基础课规划教材

Griffiths
量子力学概论
学习指导与习题解答

胡行　贾瑜　编著

机 械 工 业 出 版 社

本书是主教材《量子力学概论》（翻译版、原书第12版）的配套学习指导书，主要内容有波函数、定态薛定谔方程、形式理论、三维空间中的量子力学、全同粒子、不含时微扰理论、变分原理、WKB近似、含时微扰理论、绝热近似、散射等。本书密切配合主教材，对每一章的主要内容都给出了简明扼要的学习指导，对习题作出了详细解答。本书把理解量子力学的基本原理和方法贯穿在整个解题过程中，突出每一步的物理思想，读者通过学习本书，能够更深入地掌握量子力学的基本原理和方法。

本书适合高等学校物理专业以及相关专业学生使用，同时也可供相关专业的教师、科研人员和工程技术人员参考。

图书在版编目（CIP）数据

Griffiths量子力学概论学习指导与习题解答/胡行，贾瑜编著.
—北京：机械工业出版社，2011.12
21世纪普通高等教育基础课规划教材
ISBN 978-7-111-36524-2

Ⅰ.①G… Ⅱ.①胡…②贾… Ⅲ.①量子力学-高等学校-教学参考资料 Ⅳ.①O413.1

中国版本图书馆CIP数据核字（2011）第239270号

机械工业出版社（北京市百万庄大街22号 邮政编码100037）
策划编辑：李永联 责任编辑：李永联 陈崇昱
版式设计：常天培 责任校对：陈秀丽 胡艳萍
封面设计：路恩中 责任印制：杨 曦
北京京丰印刷厂印刷
2012年2月第1版 · 第1次印刷
184mm×260mm · 27.25印张 · 672千字
标准书号：ISBN 978-7-111-36524-2
定价：49.00元

凡购本书，如有缺页、倒页、脱页，由本社发行部调换
电话服务
社服务中心：（010）88361066
销售一部：（010）68326294
销售二部：（010）88379649
读者购书热线：（010）88379203

网络服务
门户网：http：//www.cmpbook.com
教材网：http：//www.cmpedu.com

前 言

Griffiths 教授是美国著名的物理教育学家，他所撰写的许多教材都被美国著名高校所使用。其中，《量子力学概论》一书是美国许多一流理工科大学，包括麻省理工学院（MIT）和加州大学洛杉矶分校（UCLA）等一些著名高校物理系学生的教学用书，在欧美被认为是最合适和最现代的教材之一。《量子力学概论》的英文版和中文翻译版已由机械工业出版社出版发行，深受我国广大读者的欢迎。

Griffiths《量子力学概论》不仅在内容上讲授物理概念清晰、方式简明、易于初学者理解，而且还随书配置了大量有启发性的习题。这些习题除了常见的经典题目外，还有相当一部分与实际问题密切相关，可以让读者充分体会到量子力学在现代科技中的作用。另外，作者还把一些内容转移到了课外习题中，学生通过对这些习题的演算，可以巩固在课堂上所学的内容。总之，作者在习题选择上特别下工夫，与主教材的学习密切结合，十分有特色。

《量子力学概论》的英文版和中文翻译版出版后，许多读者希望见到相应的习题解答和学习指导。Griffiths 教授本人曾对书中的习题给出过解答，应读者的要求，编者编写了这本《Griffiths 量子力学概论学习指导和习题解答》。编者在参考相关文献的基础上，对所有的习题进行了解答，并给出了必要的文字说明，力求使解题思路更加清晰，方式更加简洁。

如何使用好本书对初学量子力学的读者十分重要。正如 Griffiths 教授所说的那样：这不是一个任何人都有直观感觉的课程——这里你们正在开发的是一个全新的肌体，运动锻炼是不可替代的。因此，演算大量的习题是学习量子力学的必备步骤，初学者只有通过对习题的具体演算，才能更深刻理解课本所讲内容。编者不赞成读者在没有对一道题进行深入思考和具体演算之前，就阅读习题解答，这种学习方式有百害而无一利。习题解答仅是在完成习题后用来检验解题思路是否适当、演算方式和答案是否正确的，在与习题解答对比的过程中读者会进一步体会习题所包含的物理内容，很多时候读者自己会发现比习题解答所给方法更好的解答方法。《量子力学概论》中的习题有相当一部分与课本内容有直接联系，编者力图使习题解答能够独立于课本，让使用其他量子力学教材的读者也能顺利阅读本习题解答，但是，由于一部分习题是对课文内容的直接拓展，所以读者最好备有《量子力学概论》英文版或中文翻译版。

在本书的编写过程中，郑州大学物理工程学院胡素垒、侯亚森、刘成延等帮助核算或演算了部分习题，郑州大学李玉晓教授、李新建教授对本书的编写给出过很好的建议，机械工业出版社对本书从策划到最后完稿给了很大的帮助和支持，在此一并表示衷心的感谢！希望本书的出版能够对我国的量子力学教学能起到积极作用。由于编者水平所限，难免有不当之处，欢迎广大读者指正。

编　者

目录

第 1 章　波函数

本章主要内容

1. 薛定谔方程

微观粒子的状态由一个波函数描写，这个波函数通过解**薛定谔**（**Schrödinger**）方程得到：

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x,t)\right]\Psi(x,t)\quad（一维情况）$$

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\boldsymbol{r},t)\right]\Psi(\boldsymbol{r},t)\quad（三维情况）$$

$\hbar$是普朗克（Planck）常数——或者最初的常数（h）除以2π：

$$\hbar=\frac{h}{2\pi}=1.054572\times10^{-34}\,\mathrm{J\cdot s}$$

薛定谔方程的作用和地位从逻辑上讲就像牛顿第二定律：给定适当的初始条件（一般来说，$\Psi(x,0)$），薛定谔方程确定以后所有时刻的波函数 $\Psi(x,t)$就像经典力学中牛顿定律确定以后所有时刻的 $x(t)$一样。

2. 波函数的统计解诠释

玻恩（Born）关于波函数的统计诠释认为，当一个微观粒子处于状态 $\Psi(\boldsymbol{r},t)$时，在 t 时刻 $\boldsymbol{r}$ 处的体积 V 内发现这个粒子的概率为

$$\int_V|\Psi(\boldsymbol{r},t)|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\{在\,t\,时刻发现粒子处于\,V\,内的概率\}$$

所以，$|\Psi(\boldsymbol{r},t)|^2$ 是概率密度，它给出在 t 时刻 $\boldsymbol{r}$ 处单位体积内发现粒子的概率。由于$|\Psi(\boldsymbol{r},t)|^2$是概率密度，物理上的波函数必须满足归一化条件

$$\int_{整个空间}|\Psi(\boldsymbol{r},t)|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=1$$

物理上的波函数还需满足连续和单值条件。

3. 力学量的期望值、标准差

对一个系综（对大量相同的 Ψ 态每一个进行测量）测量的统计平均值（期望值）是

$$\langle Q(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})\rangle=\int\Psi^*(\boldsymbol{r},t)\,\hat{Q}(\boldsymbol{r},-i\hbar\nabla)\,\Psi(\boldsymbol{r},t)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$

标准差是

$$\sigma_Q=\sqrt{\langle Q^2\rangle-\langle Q\rangle^2}$$

4. 测量对波函数的影响

给定初始波函数，体系的波函数将按薛定谔方程演化，但是，如果对体系进行测量，将

导致波函数的坍缩。对坐标进行测量，如果测量结果是 x_0，波函数将坍缩为 x_0 处的一个尖峰。

题解

＊**习题 1.1** 对于教材 1.3.1 节中所给的年龄分布：

(a) 计算 $\langle j^2\rangle$ 和 $\langle j\rangle^2$。

(b) 对每一个 j 确定其 Δj，利用式 1.11 计算标准差。

(c) 利用 (a) 和 (b) 所得结果验证式 1.12。

解：

(a) 1.3.1 节中所给的年龄分布为

$$N(14)=1$$
$$N(15)=1$$
$$N(16)=3$$
$$N(22)=2$$
$$N(24)=2$$
$$N(25)=5$$

相应的概率分布由

$$P(j)=N(j)/\sum_{j=0}^{\infty}N(j)$$

确定为

$$P(14)=1/14$$
$$P(15)=1/14$$
$$P(16)=3/14$$
$$P(22)=2/14$$
$$P(24)=2/14$$
$$P(25)=5/14$$

年龄平方的平均值为

$$\begin{aligned}\langle j^2\rangle &= \sum_{j=0}^{\infty} j^2 P(j)\\ &= (14)^2\times\frac{1}{14}+(15)^2\times\frac{1}{14}+(16)^2\times\frac{3}{14}+(22)^2\times\frac{2}{14}+(24)^2\times\frac{2}{14}+(25)^2\times\frac{5}{14}\\ &=\frac{6434}{14}=459.571\end{aligned}$$

而年龄平均值的平方为

$$\begin{aligned}\langle j\rangle^2 &= \left[\sum_{j=0}^{\infty} jP(j)\right]^2\\ &=\left(14\times\frac{1}{14}+15\times\frac{1}{14}+16\times\frac{3}{14}+22\times\frac{2}{14}+24\times\frac{2}{14}+25\times\frac{5}{14}\right)^2\\ &=\left(\frac{294}{14}\right)^2=441\end{aligned}$$

(b) 由

$$\Delta j = j - \langle j \rangle$$

对应年龄 14，15，16，22，24，25 可分别计算出对应的 $\Delta j = -7$，-6，-5，1，3，4

由

$$\begin{aligned}\sigma^2 &= \langle (\Delta j)^2 \rangle \\ &= (-7)^2 \times \frac{1}{14} + (-6)^2 \times \frac{1}{14} + (-5)^2 \times \frac{3}{14} + (1)^2 \times \frac{2}{14} + (3)^2 \times \frac{2}{14} + (4)^2 \times \frac{5}{14} \\ &= \frac{260}{14} = 18.571\end{aligned}$$

得到

$$\sigma = \sqrt{\frac{260}{14}} = \sqrt{18.571} = 4.309$$

（c）

$$\sigma = \sqrt{\langle j^2 \rangle - \langle j \rangle^2} = \sqrt{\frac{6434}{14} - 441} = \sqrt{\frac{260}{14}} = 4.309$$

这与（b）中的结果是一致的。

习题 1.2

（a）求出例 1.1 中所给分布的标准方差。

（b）随机拍摄一张照片其显示距离 x 比平均值差一个标准差以上的概率是多少？

例题 1.1　假设我们从高度为 h 的悬崖上释放一块石头。当石头下落时，以随机的间隔，我们拍取了一百万张照片。在每一张照片上我们测量石头已经落下的距离。问：所有这些距离的平均值是多少？也就是说，下降距离的时间平均是多少？

原例题解：石头从静止开始下落，下落过程中逐渐加速；它在靠近悬崖顶端处所花费的时间较多，所以平均距离一定比 $h/2$ 小。忽略空气阻力，距离 x 与下降时间的关系为

$$x(t) = \frac{1}{2}gt^2$$

速度为 $\mathrm{d}x/\mathrm{d}t = gt$，总下降时间为 $T = \sqrt{2h/g}$。照相机在时间间隔 $\mathrm{d}t$ 拍照的概率是 $\mathrm{d}t/T$，所以，一个照片是在处于 $\mathrm{d}x$ 间隔内被拍照的概率是

$$\frac{\mathrm{d}t}{T} = \frac{\mathrm{d}x}{gt}\sqrt{\frac{g}{2h}} = \frac{1}{2\sqrt{hx}}\mathrm{d}x$$

很明显，概率密度是

$$\rho(x) = \frac{1}{2\sqrt{hx}} \quad (0 \leqslant x \leqslant h)$$

（当然，超出这个区间，概率密度是零）。

解：（a）

$$\langle x\rangle = \int_0^h x\frac{1}{2\sqrt{hx}}\mathrm{d}x = \frac{1}{2\sqrt{h}}\left(\frac{2}{3}x^{3/2}\right)\Big|_0^h = \frac{h}{3}$$

$$\langle x^2\rangle = \int_0^h x^2\frac{1}{2\sqrt{hx}}\mathrm{d}x = \frac{1}{2\sqrt{h}}\left(\frac{2}{5}x^{5/2}\right)\Big|_0^h = \frac{1}{5}h^2$$

$$\sigma_x = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2} = \sqrt{\frac{1}{5}h^2 - \left(\frac{1}{3}h\right)^2} = \sqrt{\frac{4}{45}}h = 0.2981h$$

(b) 设

$$x_+ = \langle x\rangle + \sigma_x = \frac{h}{3} + \sqrt{\frac{4}{45}}h = \frac{1}{3}\left(1+\sqrt{\frac{4}{5}}\right)h$$

$$x_- = \langle x\rangle - \sigma_x = \frac{h}{3} - \sqrt{\frac{4}{45}}h = \frac{1}{3}\left(1-\sqrt{\frac{4}{5}}\right)h$$

随机拍摄一张照片，其显示距离 x 比平均值差一个标准差以上的概率是

$$P(x > x_+ \text{且} x < x_-) = 1 - \int_{x_-}^{x_+}\rho(x)\mathrm{d}x = 1 - \int_{x_-}^{x_+}\frac{1}{2\sqrt{hx}}\mathrm{d}x$$

$$= 1 - \frac{1}{2\sqrt{h}}(2\sqrt{x})\Big|_{x_-}^{x_+} = 1 - \left[\sqrt{\frac{1}{3}\left(1+\sqrt{\frac{4}{5}}\right)} - \sqrt{\frac{1}{3}\left(1-\sqrt{\frac{4}{5}}\right)}\right]$$

$$\approx 1 - (\sqrt{0.6315} - \sqrt{0.0352}) \approx 0.393$$

***习题 1.3** 考虑高斯（Gaussian）分布

$$\rho(x) = A\mathrm{e}^{-\lambda(x-a)^2}$$

其中 A，a 和 λ 为正的实数（查阅你所需要的积分公式）。

(a) 利用公式 1.16 确定 A。

(b) 求出 $\langle x\rangle$，$\langle x^2\rangle$ 和 σ。

(c) 画出 $\rho(x)$ 的草图。

解： 由

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\rho(x)\mathrm{d}x = 1$$

及定积分公式

$$\int_0^{+\infty}\mathrm{e}^{-\lambda x^2}\mathrm{d}x = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \quad (\lambda > 0)$$

作变量代换，令 $\xi = x - a$，则 $\mathrm{d}\xi = \mathrm{d}x$，$\xi \in (-\infty, +\infty)$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}A\mathrm{e}^{-\lambda(x-a)^2}\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty}A\mathrm{e}^{-\lambda\xi^2}\mathrm{d}\xi = 2A\int_0^{+\infty}\mathrm{e}^{-\lambda\xi^2}\mathrm{d}\xi = A\sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} = 1$$

所以

$$A = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}$$

(b)

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} Axe^{-\lambda(x-a)^2}dx = \int_{-\infty}^{+\infty} A(\xi + a)e^{-\lambda\xi^2}d\xi$$

$$= A\int_{-\infty}^{+\infty} \xi e^{-\lambda\xi^2}d\xi + Aa\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\lambda\xi^2}d\xi$$

$$= 0 + 2Aa\int_{0}^{+\infty} e^{-\lambda\xi^2}d\xi = Aa\sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} = a$$

其中，第一项的积分结果是利用了 $\xi e^{-\lambda\xi^2}$ 是奇函数的性质。

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} Ax^2e^{-\lambda(x-a)^2}dx = \int_{-\infty}^{+\infty} A(\xi + a)^2e^{-\lambda\xi^2}d\xi$$

$$= A\int_{-\infty}^{+\infty} \xi^2e^{-\lambda\xi^2}d\xi + 2Aa\int_{-\infty}^{+\infty} \xi e^{-\lambda\xi^2}d\xi + Aa^2\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\lambda\xi^2}d\xi$$

$$= A\int_{-\infty}^{+\infty} \xi^2e^{-\lambda\xi^2}d\xi + 0 + a^2$$

利用定积分公式

$$\int_{0}^{+\infty} x^{2n}e^{-\lambda x^2}dx = \frac{(2n-1)!!}{2^{n+1}\lambda^n}\sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \quad (\lambda > 0)$$

所以

$$\langle x^2 \rangle = A\int_{-\infty}^{+\infty} \xi^2e^{-\lambda\xi^2}d\xi + a^2 = 2A\int_{0}^{+\infty} \xi^2e^{-\lambda\xi^2}d\xi + a^2$$

$$= 2A\frac{1}{4\lambda}\sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} + a^2 = \frac{1}{2\lambda} + a^2$$

标准差为

$$\sigma_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\frac{1}{2\lambda} + a^2 - a^2} = \sqrt{\frac{1}{2\lambda}}$$

(c) $\rho(x) = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}e^{-\lambda(x-a)^2}$ 的示意图如图 1-1 所示，可以看出，这个图是以 a 为中心的高斯分布，$x = a$ 时概率最大，a 既是分布的中值，又是平均值；λ 是衡量分布的标准差（这个图可以用 Origin 软件，通过设置 x 和 $\rho(x)$ 的值画出，当然需要指定 λ 和 a 的值）。

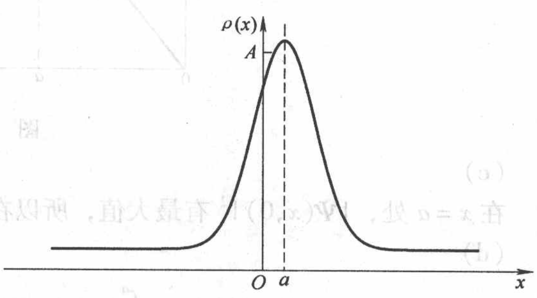


图 1-1

习题 1.4 在 $t = 0$ 时刻一粒子由下面的波函数描述

$$\Psi(x,0) = \begin{cases} A\dfrac{x}{a} & (0 \leqslant x \leqslant a) \\ A\dfrac{(b-x)}{(b-a)} & (a \leqslant x \leqslant b) \\ 0 & (\text{其他地方}) \end{cases}$$

式中，A，a 和 b 是常实数。

(a) 归一化 Ψ(即求出以 a 和 b 表示的 A)。

(b) 作为 x 的函数画出 $\Psi(x, 0)$的草图。

(c) 在 $t=0$ 时刻在哪里最有可能发现粒子?

(d) 在 a 的左边发现粒子的概率是多少? 对 $b=a$ 和 $b=2a$ 两种极限情况验证你的结果。

(e) x 的期望值是多少?

解:(a)

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,0)|^2 \mathrm{d}x = |A|^2\left[\int_0^a \frac{x^2}{a^2}\mathrm{d}x + \int_a^b \frac{(b-x)^2}{(b-a)^2}\mathrm{d}x\right]$$

$$= |A|^2\left[\frac{a}{3} + \frac{(b-a)}{3}\right] = |A|^2\frac{b}{3}$$

所以

$$A = \sqrt{\frac{3}{b}} \quad \text{(不考虑可能的相因子,以后都是如此)}$$

(b) $\Psi(x,0)$的示意图如图 1-2 所示。

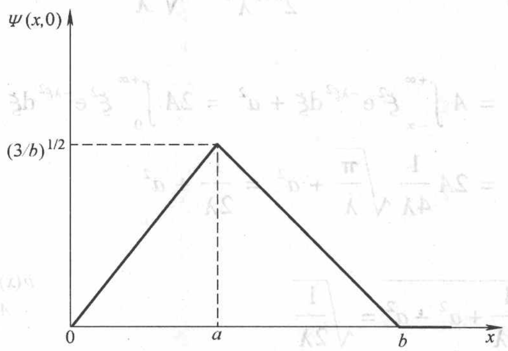


图 1-2

(c)

在 $x=a$ 处, $|\Psi(x,0)|^2$ 有最大值,所以在此处发现粒子的概率最大。

(d)

$$P(x<a) = \int_0^a |\Psi(x,0)|^2 \mathrm{d}x = \frac{3}{b}\int_0^a \frac{x^2}{a^2}\mathrm{d}x = \frac{a}{b}$$

当 $b=a$ 时,在 b 左边发现粒子的概率是1;当 $b=2a$ 时,发现粒子的概率是1/2。

(e)

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,0)x\Psi(x,0)\mathrm{d}x = \frac{3}{b}\left[\int_0^a \frac{x^3}{a^2}\mathrm{d}x + \int_a^b \frac{x(b-x)^2}{(b-a)^2}\mathrm{d}x\right]$$

$$= \frac{2a+b}{4}$$

*** 习题 1.5** 考虑波函数

$$\Psi(x,t) = A\mathrm{e}^{-\lambda|x|}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$$

式中，A，λ 和 ω 是正的实数。

（a）归一化 Ψ。

（b）求出 x 和 x^2 的期望值。

（c）求出 x 的标准差。作为 x 的函数，画出 $|\Psi|^2$ 的图像，并标出点$(\langle x\rangle+\sigma)$和$(\langle x\rangle-\sigma)$，解释在何种意义上 σ 代表 x 的“弥散”。在这个区域之外发现粒子的概率是多少？

解：（a）

$$1=\int_{-\infty}^{+\infty}|\Psi(x,t)|^2\mathrm{d}x=|A|^2\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-2\lambda|x|}\mathrm{d}x=2|A|^2\int_0^{+\infty}\mathrm{e}^{-2\lambda x}\mathrm{d}x=\frac{|A|^2}{\lambda}$$

所以
$$|A|^2=\lambda\text{，即 }A=\sqrt{\lambda}$$

（b）

$$\langle x\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}x|\Psi(x,t)|^2\mathrm{d}x=\lambda\int_{-\infty}^{+\infty}x\mathrm{e}^{-2\lambda|x|}\mathrm{d}x=0$$

（利用了奇函数的性质）

$$\langle x^2\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}x^2|\Psi(x,t)|^2\mathrm{d}x=2\lambda\int_0^{+\infty}x^2\mathrm{e}^{-2\lambda x}\mathrm{d}x=2\lambda\left[\frac{2}{(2\lambda)^3}\right]=\frac{1}{2\lambda^2}$$

（c）

$$\sigma_x=\sqrt{\langle x^2\rangle-\langle x\rangle^2}=\frac{1}{\sqrt{2}\lambda}$$

$|\Psi|^2$ 的图像如图 1-3 所示。

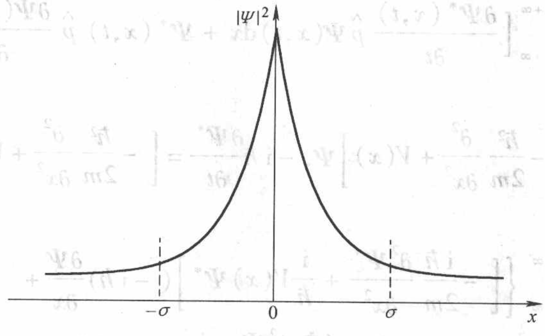


图　1-3

$$P(|x|>\sigma)=2\int_\sigma^\infty|\Psi(x,t)|^2\mathrm{d}x=2\lambda\int_\sigma^\infty\mathrm{e}^{-2\lambda|x|}\mathrm{d}x=\mathrm{e}^{-2\lambda\sigma}=\mathrm{e}^{-\sqrt{2}}=0.2431$$

在区间$(-\sigma,\sigma)$内，$|\Psi|^2$ 有较大的值，发现粒子的概率主要集中在这个区间。σ 越大，这个区间就越大，对系综多次测量 x 所得结果中与平均值的差别较大的次数就越多，即 x 的弥散就越大。

习题 1.6　为什么你不能直接对式 1.29 的中间一步进行分部积分——转化为对 x 的时间导数，利用$\partial x/\partial t=0$ 得到 $\mathrm{d}\langle x\rangle/\mathrm{d}t=0$ 的结论？

解：在课本中式 1.29 为

$$\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t}=\int x\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2\mathrm{d}x$$

因为

$$\frac{\partial}{\partial t}(x|\Psi|^2)=\frac{\partial x}{\partial t}|\Psi|^2+x\frac{\partial|\Psi|^2}{\partial t}=x\frac{\partial|\Psi|^2}{\partial t}$$

所以有

$$\int x\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2\mathrm{d}x=\int\frac{\partial}{\partial t}(x|\Psi|^2)\mathrm{d}x$$

但是

$$\int_a^b x\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2\mathrm{d}x=\int_a^b\frac{\partial}{\partial t}(x|\Psi|^2)\mathrm{d}x\neq(x|\Psi|^2)\big|_a^b$$

因为这里积分是对 x 的，被积函数中却是对 t 求导。

习题 1.7 计算 $\mathrm{d}\langle p\rangle/\mathrm{d}t$。答案：

$$\frac{\mathrm{d}\langle p\rangle}{\mathrm{d}t}=\left\langle-\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle$$

式 1.32（或式 1.33 的第一部分）和式 1.38 是**恩费斯脱［Ehrenfest］定理**之例，这个定理告诉我们期望值遵从经典定律。

解：

$$\frac{\mathrm{d}\langle p\rangle}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)\,\hat{p}\Psi(x,t)\mathrm{d}x$$

$$=\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\frac{\partial\Psi^*(x,t)}{\partial t}\hat{p}\Psi(x,t)\mathrm{d}x+\Psi^*(x,t)\,\hat{p}\,\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}\right]\mathrm{d}x$$

利用薛定谔方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right]\Psi,\ -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right]\Psi^*$$

并代入 $\hat{p}=-\mathrm{i}\hbar\partial/\partial x$

$$\frac{\mathrm{d}\langle p\rangle}{\mathrm{d}t}=\int_{-\infty}^{+\infty}\left\{\left[-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}V(x)\Psi^*\right](-\mathrm{i}\hbar)\frac{\partial\Psi}{\partial x}+\right.$$

$$\left.\Psi^*(x,t)\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\left[\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}V(x)\Psi\right]\right\}\mathrm{d}x$$

$$=\int_{-\infty}^{+\infty}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\frac{\partial\Psi}{\partial x}+\frac{\hbar^2}{2m}\Psi^*\frac{\partial^3\Psi}{\partial x^3}+\Psi^*\left[-\frac{\partial V(x)}{\partial x}\right]\Psi\right\}\mathrm{d}x$$

对第一项分部积分两次，并利用边界条件（当 $x=\pm\infty$ 时，波函数及其导数为零），前面两项相互抵消，最后有

$$\frac{\mathrm{d}\langle p\rangle}{\mathrm{d}t}=\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*\left[-\frac{\partial V(x)}{\partial x}\right]\Psi\mathrm{d}x=\left\langle-\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle$$

这就是量子力学中的牛顿运动方程。

（在学习第 3 章后，我们有更简洁的方法处理本题。

$$\frac{\mathrm{d}\langle p\rangle}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\Psi|\hat{p}|\Psi\rangle=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\Psi|(\hat{p}\hat{H}-\hat{H}\hat{p})|\Psi\rangle$$

利用哈密顿算符与动量算符的对应关系

$$\hat{p}\hat{H}-\hat{H}\hat{p}=\hat{p}V(x)-V(x)\hat{p}=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial V(x)}{\partial x}$$

所以

$$\frac{\mathrm{d}\langle p\rangle}{\mathrm{d}t}=\left\langle\Psi\left|\left(-\frac{\partial V}{\partial x}\right)\right|\Psi\right\rangle=\left\langle-\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle$$

习题 1.8 假定你在势能中增加了一个常数势 V_0（这里常数表示它不依赖于 x 和 t）。在经典力学中这不改变任何事情，但是在量子力学中如何？证明波函数将增加一个依赖时间的相因子：$\exp(-\mathrm{i}V_0t/\hbar)$。这对力学量的期望值有什么影响？

解：设 $\Psi(x,t)$ 是薛定谔方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(x)\right]\Psi(x,t)$$

的解，那么可以证明 $\Phi(x,t)=\exp(-\mathrm{i}V_0t/\hbar)\Psi(x,t)$ 将是薛定谔方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Phi(x,t)}{\partial t}=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(x)+V_0\right]\Phi(x,t)$$

的解。将 $\Phi(x,t)=\exp(-\mathrm{i}V_0t/\hbar)\Psi(x,t)$ 代入，得到

$$\mathrm{i}\hbar\exp(-\mathrm{i}V_0t/\hbar)\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}+V_0\exp(-\mathrm{i}V_0t/\hbar)\Psi(x,t)$$

$$=\exp(-\mathrm{i}V_0t/\hbar)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(x)+V_0\right]\Psi(x,t)$$

消去两边相同的项和公共因子 $\exp(-\mathrm{i}V_0t/\hbar)$ 后，得到

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(x)\right]\Psi(x,t)$$

所以势能中增加了一个常数势，波函数将增加一个依赖时间的相因子：$\exp(-\mathrm{i}V_0t/\hbar)$。显然

$$|\Phi(x,t)|^2=|\Psi(x,t)|^2$$

概率密度不变。若力学量不显含时间（实际上只要力学量算符不含有对后面波函数对时间的求导运算，我们的结论就成立，我们几乎从来没有遇到算符中含有对时间的求导运算），则

$$\int\Phi^*(x,t)\hat{F}(x,\hat{p})\Phi(x,t)\mathrm{d}x=\int\Psi^*(x,t)\hat{F}(x,\hat{p})\Psi(x,t)\mathrm{d}x$$

期望值也不改变。

***习题 1.9** 一个质量为 m 的粒子处于态

$$\Psi(x,t)=A\mathrm{e}^{-a[(mx^2/\hbar)+\mathrm{i}t]}$$

式中，A 和 a 为正的实数。

（a）求出 A。

（b）对什么样的势能函数 $V(x)$，这个 Ψ 满足薛定谔方程。

(c) 计算 x，x^2，p 和 p^2 的期望值。

(d) 求出 σ_x 和 σ_p，它们的积满足测不准关系吗？

解：(a) 由归一化

$$1=\int_{-\infty}^{+\infty}|\Psi(x,t)|^2\mathrm{d}x=|A|^2\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(-2amx^2/\hbar)\mathrm{d}x=|A|^2\sqrt{\frac{\hbar\pi}{2am}}$$

所以 $$A=\left(\frac{2am}{\hbar\pi}\right)^{1/4}$$

(b) 在第2章，我们将讨论一维谐振子，你将发现势能 $\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ 会得到这样的波函数解。不过现在我们打算直接从薛定谔方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right]\Psi(x,t)$$

得到对应的势能。把所给的波函数代入薛定谔方程，经过对 t 和 x 的求导运算后，得到

$$\hbar a\Psi(x,t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(-\frac{2am}{\hbar}\right)+\left(-\frac{2amx}{\hbar}\right)^2\right]\Psi(x,t)+V(x)\Psi(x,t)$$

两边消去相同的项后，得到

$$V(x)=2a^2mx^2$$

注意：如果令 $a=\omega/2$。则 $V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$，所给的波函数其实就是一维谐振子的基态，对应的基态能量是 $E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega=\hbar a$，在第2章将会看到这些结果。

(c)

$$\langle x\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}x|\Psi|^2\mathrm{d}x=0(\text{被积函数是奇函数})$$

$$\langle x^2\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}x^2|\Psi|^2\mathrm{d}x=|A|^2\int_{-\infty}^{+\infty}x^2\mathrm{e}^{-2amx^2/\hbar}\mathrm{d}x$$

$$=2|A|^2\frac{1}{2^2(2am/\hbar)}\sqrt{\frac{\pi}{(2am/\hbar)}}=\frac{\hbar}{4am}$$

$$\langle p\rangle=m\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t}=0$$

$$\langle p^2\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(-\mathrm{i}\hbar\partial/\partial x)^2\Psi\mathrm{d}x=-\hbar^2\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*\left[-\frac{2am}{\hbar}\left(1-\frac{2amx^2}{\hbar}\right)\right]\Psi\mathrm{d}x$$

$$=2am\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}|\Psi|^2\mathrm{d}x-(2am)^2\int_{-\infty}^{+\infty}x^2|\Psi|^2\mathrm{d}x$$

$$=2am\hbar-(2am)^2\langle x^2\rangle=2am\hbar-(2am)^2\frac{\hbar}{4am}=am\hbar$$

(d)

$$\sigma_x=\sqrt{\langle x^2\rangle-\langle x\rangle^2}=\sqrt{\frac{\hbar}{4am}}$$

$$\sigma_p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \sqrt{am\,\hbar}$$

$$\sigma_x \sigma_p = \sqrt{\frac{\hbar}{4am}} \cdot \sqrt{am\,\hbar} = \frac{\hbar}{2}$$

这刚好是不确定原理的下限。

第1章补充习题解答

习题1.10 考虑 π 的前25位数（3，1，4，1，5，9，…）

（a）如果随机从这些数字中选取一个，得到10个数字（0～9）中每一个的概率是多少？

（b）最概然的数字是哪一个？

（c）给出这个分布的标准差。

解： 圆周率的前25位数：π = 3.141592653589793238462643。由

$$P(j) = \frac{N(j)}{\sum_j N(j)}$$

可以求出

$$\begin{array}{ll}
N(0) = 0 & P(0) = 0 \\
N(1) = 2 & P(1) = 2/25 \\
N(2) = 3 & P(2) = 3/25 \\
N(3) = 5 & P(3) = 5/25 \\
N(4) = 3 & P(4) = 3/25 \\
N(5) = 3 & P(5) = 3/25 \\
N(6) = 3 & P(6) = 3/25 \\
N(7) = 1 & P(7) = 1/25 \\
N(8) = 2 & P(8) = 2/25 \\
N(9) = 3 & P(9) = 3/25
\end{array}$$

概然

（b）显然，最可几数字是3，它出现的概率最大，为1/5。

（c）

$$\langle j \rangle = \sum_{j=0}^{9} jP(j) = 128/25 = 4.72$$

$$\langle j^2 \rangle = \sum_{j=0}^{9} j^2 P(j) = 710/25 = 28.4$$

$$\sigma = \sqrt{\langle j^2 \rangle - \langle j \rangle^2} = \frac{\sqrt{1366}}{25} = 2.474$$

（一个有趣的小插曲：在网络上你可以查到，曾有人编诗来记忆圆周率，山巅一寺一壶酒（3.14159），尔乐苦煞吾（26535），把酒吃，酒杀尔（897932），杀不死，乐而乐（384626）。）