《量子力学》习题解答

一九八七年四月

目　　录

注：本书是为配合学习曾谨言教授的《量子力学》一书而编写的。由于印刷条件，本书中所有的 h 一律理解为 $h/2\pi$，希读者鉴谅。

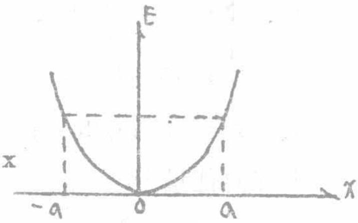
第一章　量子力学发展简况

第二章　波函数与波动方程

1．试用量子化条件，求谐振子能量 $\left[\text{谐振子势能} V(x) \text{ 取为} \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]$.

〔解一〕：设谐振子能量为E，由经典力学：$E=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$　…（1）

其中m为振子质量，p为动量，$k=m\omega^2$是常数，在此谐振子势中运动的经典粒子m角频率为ω，其活动范围是：$|x|\leqslant a$



F· 2－1

其中　$a=\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$

由（1）式：$\oint p\,dx=2\int_{-a}^{a}\sqrt{2m(E-m\omega^2x^2/2)}\,dx$

$$=2m\omega\int_{-a}^{a}\sqrt{a^2-x^2}\,dx=2m\omega a^2(\pi/2)$$

由量子化条件：$\oint p\,dx=nh\,2\pi$

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

$$E=\frac{1}{2}m\omega^2a^2=\frac{2\pi h}{2\pi}\,n\omega=nh\omega,\quad n=1,2\cdots$$

〔解二〕：由经典力学，在谐振子势 $V(x)=kx^2/2$ 中运动的粒子将做简谐运动，角频率为 $\sqrt{k/m}$，m为振子质量。因此，若取 $k=m\omega^2$，则振子角频率为ω，（周期 $T=2\pi/\omega$），选取适当相位（或时间零点），谐振子的位置可以表为：

$$x=a\sin\omega t\qquad\text{（a 为振幅）}$$

故：$p=m\dot{x}=ma\omega\cos\omega t$

代入量子化条件：$\oint p\,dx=\int_0^{2\pi/\omega}ma\omega\cos\omega t\cdot a\omega\cos\omega t\cdot dt$

$$=ma^2\omega^2\int_0^{2\pi/\omega}\cos^2\omega t\;dt$$

$$=\pi ma^2\omega^2=nh2\pi$$

$$\therefore\quad E=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2=\frac{1}{2}m\omega^2a^2$$

$$E=\frac{1}{2}m\omega^2\ \frac{2\pi nh}{\pi m\omega}=nh\omega,\ n=1.2\cdots$$

2. 用量子化条件求出限制在箱内运动的粒子的能量。箱的长，宽，高分别为a，b和c。

解：除碰壁外，粒子在箱内自由运动，能量是守恒的。在碰壁(弹性碰撞)时，粒子动量反向，但数值不变。选箱的长宽高三个方向为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：

$$\oint p_x dx=n_x h 2\pi,\ \oint p_y dy=n_y h 2\pi$$

$$\oint p_z dz=n_z h 2\pi\quad n_x,n_y,n_z=1.2\cdots\cdots$$

而 $\oint p_x dx=2a\cdot p_x,\ \oint p_y dy=2bPy$

$$\oint p_z dz=2cp_z.$$

$\therefore\quad p_x=n_x h2\pi/2a\quad p_y=n_y h2\pi/2b\quad p_z=n_z h2\pi/2c$

粒子总能量为：

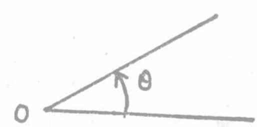
$$E=\frac{p_x{}^2+p_y{}^2+p_z{}^2}{2m}=\frac{h^2}{8m}\left(\frac{n_x^2}{a^2}+\frac{n_y^2}{b^2}+\frac{n_z^2}{c^2}\right)\quad (n_xn_yn_z=1.2\cdots)$$

3. 平面转子的转动惯量为I，求它的能量允许值。

解：平面转子的转角记为θ，它的角动量记为$P_\theta=I\theta$，P_θ是运动常数，θ看成广义坐标，P_θ为相应的广义动角。

由量子化条件： $\int_0^{2\pi}P_\theta\,d\theta=mh=2\pi P_\theta\quad m=1.2\cdots$

$\therefore\quad P_\theta=mh$



F. 2-3

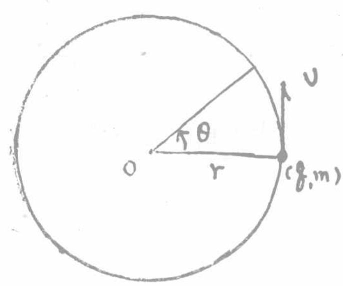
转子能量：$E=P_\theta{}^2/2I=m^2h^2/2I$

4. 有一个带电q质量为m的粒子在平面内运动，垂直于平面方向有磁场B，求粒子能量允许值。

解：设粒子速度为v，它受到洛仑兹力而不断改变方向，作园周运动。设轨道半径为r

则（用高斯单位制）：

$$\frac{mv^2}{r}=\frac{B|q|v}{c}\qquad\cdots(1)$$



F. 2-4

c 为光速，m 为粒子质量，粒子的角动量(广义动量)是vmr，为守恒量.

由量子化条件： $\oint P_\theta d_\theta = 2\pi mvr = nh 2\pi \qquad n=1,2\cdots,$

$$\therefore \quad mvr = m\frac{|q|B}{mc}r^2 = nh$$

$$r^2 = \frac{nhc}{|q|B} \qquad \cdots (2)$$

即 r 取值是量子化的。

粒子的动能： $T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m\frac{q^2B^2}{m^2c^2}r^2 = \frac{|q|B}{2mc}nh \qquad \cdots (3)$

粒子的势能：带电粒子做园周运动，相当于有一个磁矩μ，取磁场方向B为正方向

则磁矩： $\mu = \frac{iA}{c} = -q\frac{v}{2\pi r}\frac{\pi r^2}{c} = -\frac{qvr}{2c} \qquad \cdots (4)$

$\frac{v}{2\pi r}$代表粒子作园周运动的频率，i 是电流强度，$A=\pi r^2$ 是电流环的面积。

以(1)，(2)代入(4)式：

$$\mu = -\frac{q}{2c}\frac{|q|B}{mc}r^2 = nh\frac{q}{2mc}$$

因此与磁场B的作用能为：

$$V = -\mu B = nh|q|B/2mc$$

故带电粒子总能量为：

$$E = T + V = |q|Bnh/mc \qquad n=1,2\cdots$$

5. 对于高速运动粒子（静质量m）能量及动量由下式给出：

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}} \text{（v是粒子速度）} \qquad p = \frac{mv}{\sqrt{1-v^2/c^2}} = \frac{Ev}{c^2}$$

试根据哈密顿量$H=E=\sqrt{m^2c^4+p^2c^2}$ 及正则方程来验证这两式，由此求出粒子速度与德布罗意波的群速之间的关系，计算其相速，并证明相速大于光速 c 。

解：∵ $H = E = \sqrt{m^2c^4+p^2c^2}$

代入正则方程： $v_x = \frac{dH}{dp_x} = \frac{c^2p_x}{\sqrt{m^2c^4+p^2c^2}} \qquad \cdots (1)$

类似可求出v_y，v_z，

$$\therefore \quad \vec{v} = \frac{c^2\vec{p}}{\sqrt{m^2c^4+p^2c^2}} \qquad \cdots (2)$$

平方并消去c^2： $p^2(c^2-v^2) = m^2c^2v^2$

$$p = \frac{mv}{\sqrt{1-v^2/c^2}} \qquad \cdots (3)$$

由（2）式 $\vec{p}$与$\vec{v}$同向，即$\vec{p} = \frac{m\vec{v}}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$

$$\therefore\quad E=\sqrt{m^2c^4+p^2c^2}$$

$$=mc^2\left[1+\frac{p^2}{m^2c^2}\right]^{1/2}=mc^2\left[1+\frac{v^2/c^2}{(1-v^2/c^2)}\right]^{1/2}$$

$$=\frac{mc^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}}\qquad\cdots(4)$$

由德布罗意假设：$E=h\omega,\ p=hk$

$$\therefore\quad h\omega=\sqrt{m^2c^4+h^2c^2k^2}$$

群速为：$v_g=\dfrac{d\omega}{dk}=\dfrac{c^2hk}{\sqrt{m^2c^4+c^2h^2k^2}}=\dfrac{c^2p}{\sqrt{m^2c^4+c^2p^2}}=v.\qquad\cdots(5)$

即　波的群速 v_g 等于粒子速度 v.

德布罗意波的相速为：

$$u=\frac{\omega}{k}=\sqrt{\frac{m^2c^2}{h^2k^2}+c}\qquad >c\qquad\cdots(6)$$

或由：$v_g=\dfrac{c^2hk}{h\omega}=\dfrac{c^2}{\left(\dfrac{\omega}{k}\right)}=\dfrac{c^2}{v}$

即　$u\,v_g=c^2$.

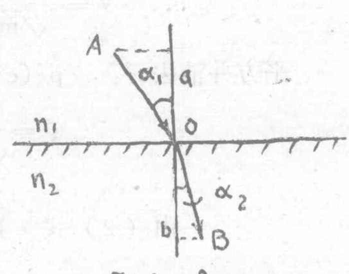
$\because\quad v_g<c.\qquad\qquad \therefore\quad u>c.$

6．（1）试用Fermat最短光程定律导出光的折射定律：$n_1\sin\alpha_1=n_2\sin\alpha_2$（见图）

（2）光的波动说的拥护者曾经向光的微粒论者提出下列非难：如认为光是"粒子"、则其运动遵守最小作用原理，$\delta\int Pdl=0$，如认为 $P=mv$，则 $\delta\int v\,dl=0$，p 指"粒子"动量，v 指粒子"速度"，这样将导出下列折射定律：$n_1\sin\alpha_2=n_2\sin\alpha_1$，这明显违反实验事实。即使考虑相对论效应，对于自由粒子，$p=Ev/c^2$ 仍然成立，E是粒子能量，从一种介质到另一种介质，E不改变，因此仍然得到 $\delta\int v\,dl=0$ 矛盾依然存在。你怎样解决这矛盾？

解：（1）如图 光线自A经O到B点的光程为：

$$\int_A^B n\,dl=n_1a\sec\alpha_1+n_2b\sec\alpha_2\qquad\cdots(1)$$



F・2－2

A与B点固定：

$$\delta\int_A^B n\,dl=n_1a\sec\alpha_1\operatorname{tg}\alpha_1\delta\alpha_1+n_2b\sec\alpha_2\operatorname{tg}\alpha_2\delta\alpha_2=0\qquad\cdots(2)$$

但 $a\mathrm{tg}\alpha_1+b\mathrm{tg}\alpha_2=\mathrm{const}$

$\therefore \quad a\sec^2\alpha_1\delta\alpha_1+b\sec^2\alpha_2\delta\alpha_2=0 \qquad \cdots(4)$

改写(2)，(4)式：$n_1 a\sec\alpha_1\mathrm{tg}\alpha_1\delta\alpha_1=-n_2 bs\alpha_2\mathrm{tg}\alpha_2\delta\alpha_2, \qquad \cdots(5)$

$a\sec^2\alpha_1\delta\alpha_1=-bec^2\alpha_2\delta\alpha_2 \qquad \cdots(6)$

两式相除： $n_1\sin\alpha_1=n_2\sin\alpha_2$

(2) 光的波动说的拥护者提出若光是粒子，则其运动遵守最小作用原理，即 $\delta\int p\,dl=0$，而由牛顿力学 $p=mv$，又有 $\delta\int v\,dl=0$，与(1)相同，可得 $v_1\sin\alpha_1=v_2\sin\alpha_2$，其中 v_1，v_2 分别是微粒在介质1与介质2中的速度。

但 $v_1=c/n_1$，$v_2=c/n_2$ 因此：$n_1\sin\alpha_2=n_2\sin\alpha_1$ 与折射定律完全矛盾。

若按相对论力学，粒子的动量 $p=Ev/c^2$ 是成立的（见上题），光微粒从一介质到别一介质，能量E是不改变的，因此 $\delta\int E\,dl=0$ 有 $\delta\int p\,dl=0$ 仍有 $\delta\int v\,dl=0$ 矛盾仍存在。

但按德布罗意的假定，波的相速u与群速 v_g 有关系：$uv_g=c^2$（见上题）

而粒子速度 $v=v_g$。

$$\therefore \quad p=\frac{E\,v}{c^2}=\frac{Ev_g}{c^2}=\frac{E}{u}=hk=\frac{h2\pi}{\lambda}=\frac{h2\pi n}{\nu\cdot c}$$

因此，$\delta\int p\,dl=0$ 将导致 $\delta\int n\,dl=0$ 这样就可以得出正确的折射定律了。

解决这个矛盾用了德布罗意关系。

7. 当势能 $V(\vec{r})$ 改变一个常量c时，即 $V(\vec{r})\to V(\vec{r})+c$，粒子的波函数与时间无关的部分改变否？能量本征值改变否？

答：波函数与时间无关的部分不变，能量本征值要变，$E\to E+C$。

8. 设粒子势能 $V(\vec{r})$ 的极小值为 $V\min$，证明能量本征值 $E_n>V\min$

证：$\because \quad \overline{E}=\overline{T}+\overline{V}$

$$\overline{T}=-\frac{h^2}{2m}\int\Psi\nabla^{*2}\Psi d^3x=-\frac{h^2}{2m}\int\left[\nabla\cdot(\Psi^*\nabla\Psi)-(\nabla\Psi^*)\cdot\nabla\Psi\right]d^3x$$

第一项可化为面积分，而在无穷远处波函数为0，故第一项为0。

$$\therefore \quad \overline{T}=\frac{h}{2m}\int|\nabla\Psi|^2d^3x\geqslant 0$$

又 $\overline{V}>V\min \qquad \therefore \quad \overline{E}>V\min$

以上ψ是任意的，若ψ是某一个能量本征态 ψ_n，则

$\overline{E}=E_n \qquad \therefore E_n>V\min$ （n任意）

9. 设粒子在势场$V(\vec{r})$中运动。

(1)证明其能量平均值为：$\overline{E}=\int d^3x\,W=\int d^3x\left[\frac{h^2}{2m}\nabla\Psi^*\cdot\nabla\Psi+\Psi^*V\Psi\right]$

W称为能量密度。

(2)证明能量守恒公式 $\frac{dW}{dt}+\nabla\cdot\vec{S}=0$

其中$\vec{S}=-\frac{h^2}{2m}\left(\frac{d\psi^*}{dt}\nabla\psi+\frac{d\psi}{dt}\nabla\psi^*\right)$ （能流密度）

证：（1）粒子能量平均值为（设ψ已归一化）

$$\overline{E}=\int\psi^*\left[-\frac{h^2}{2m}\nabla^2+V\right]\psi\,d^3\chi=\overline{T}+\overline{V}$$

$$\overline{V}=\int\Psi^*V\Psi d^3x;\quad \overline{T}=\int\psi^*\left(-\frac{h^2}{2m}\nabla^2\right)\psi d^3x$$

$$=-\frac{h^2}{2m}\int\left[\nabla\cdot(\Psi^*\nabla\Psi)-(\nabla\Psi^*)\cdot(\nabla\Psi)\right]d^3x$$

其中T之第一项可化为面积分，而在无穷远处归一化波函数必然为0。

$$\therefore\quad \overline{T}=\frac{h^2}{2m}\int\nabla\Psi^*\ \nabla\Psi\ \ d^3\chi$$

$$\therefore\quad \overline{E}=\overline{T}+\overline{V}=\int d^3\chi\left[\frac{h^2}{2m}\nabla\Psi^*\cdot\nabla\Psi+\Psi^*\nabla\Psi\right]$$

（2）$\because\quad W=\frac{h^2}{2m}\nabla\Psi^*\cdot\nabla\Psi+\Psi^*V\Psi$

$$\therefore\frac{dW}{dt}=\frac{h^2}{2m}\left[\nabla\dot{\Psi}^*\cdot\nabla\Psi+\nabla\Psi^*\cdot\nabla\dot{\Psi}\right]+\dot{\Psi}^*V\Psi+\Psi^*V\dot{\Psi}$$

$$=\frac{h^2}{2m}\left[\nabla\cdot(\dot{\Psi}^*\nabla\Psi+\dot{\Psi}\nabla\Psi^*)-(\dot{\Psi}^*\nabla^2\Psi+\dot{\Psi}\nabla^2\Psi^*)\right]$$
$$+\dot{\Psi}^*V\Psi+\Psi^*V\dot{\Psi}$$

$$=-\nabla\cdot\vec{S}+\dot{\Psi}^*\left(-\frac{h^2}{2m}\nabla^2+V\right)\Psi+\dot{\Psi}\left(-\frac{h^2}{2m}\nabla^2+V\right)\Psi^*=-\nabla\cdot\vec{S}$$

$$\therefore\quad\frac{dW}{dt}+\nabla\cdot\vec{S}=0$$

10. 设N粒子系的哈密顿量为：$H=-\sum_{i=1}^{N}\frac{h^2\nabla i^2}{2m}+\sum_{i<j}^{N}\vec{V}_{ij}(|\vec{r}_i-\vec{r}_j|)$，

$\Psi(\vec{r}_1\vec{r}_2\cdots,\vec{r}_N t)$是它的任一整函数，定义

$$\rho(\vec{r}_1 t)=\sum_i\rho_i(\vec{r}_1 t),\quad\vec{j}(\vec{r}_1 t)=\sum_i j_i(\vec{r}_1 t)$$

其中：$\rho_1(\vec{r}_1 t)=\int d^3\vec{r}_2 d^3\vec{r}_3\cdots d^3\vec{r}_N\Psi^*\Psi$

$\rho_2(\vec{r}_2 t)=\int d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_3\cdots d^3\vec{r}_N\Psi^*\Psi$，……

$$\vec{j}_1(\vec{r}_1, t)=\frac{h}{2im}\int d^3\vec{r}_2\, d^3\vec{r}_3 \cdots d^3\vec{r}_N\ (\Psi^*\nabla_1\Psi-\Psi\nabla_1\Psi^*)$$

$$\vec{j}_2(\vec{r}_2, t)=\frac{h}{2im}\int d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_3 \cdots d^3\vec{r}_N\ (\Psi^*\nabla_2\Psi-\Psi\nabla_2\Psi^*),\ \cdots\cdots$$

求证：$\frac{d\rho}{dt}+\nabla\cdot\vec{j}=0$

证：$\because ih\frac{d}{dt}\Psi=\left[-\sum_{i=1}^{N}\frac{h^2}{2m}\nabla_i{}^2+\sum_{i<j}^{N}V_{ij}(|\vec{r}_i-\vec{r}_j|)\right]\Psi$ ……（1）

$\therefore\ -ih\frac{d}{dt}\Psi^*=\left[-\sum_{i=1}^{N}\frac{h^2}{2m}\nabla_i{}^2+\sum_{i<j}^{N}V_{ij}(|\vec{r}_i-\vec{r}_j|)\right]\Psi^*$ ……（2）

$\Psi^*\times$（1）$-\Psi\times$（2）有：

$$ih\frac{d}{dt}(\Psi^*\Psi)=-\sum_{i=1}^{N}\frac{h^2}{2m}(\Psi^*\nabla_i{}^2\Psi-\Psi\nabla_i{}^2\Psi^*)$$

在空间闭区域$V=\sum V_i$中积分上式。

$$\therefore\int ih\frac{d}{dt}(\Psi^*\Psi)\,d\vec{r}_1\,d\vec{r}_2\cdots d\vec{r}_N$$

$$=-\int\sum_{i=1}^{N}\frac{h^2}{2m}(\Psi^*\nabla_i\Psi-\Psi\nabla_i\Psi^*)\cdot d\vec{S}_1\,d\vec{S}_2\cdots d\vec{S}_N$$

利用$\rho_1\ \rho_2\cdots\vec{j}_1,\ \vec{j}_2\ \cdots$的定义，上式立可改写为：

$$\frac{d\rho}{dt}+\nabla\cdot\vec{j}=0$$

11．设Ψ_1与Ψ_2是薛定谔方程的两个解，证明：

$\int\Psi_1{}^*(\chi,t)\Psi_2(\chi,t)d^3\chi$　与时间无关。

证：$\because\ ih\frac{d\Psi_1}{dt}=\left(-\frac{h^2}{2m}\nabla^2+V\right)\Psi_1$ …（1）。

$ih\frac{d\Psi_2}{dt}=\left(-\frac{h^2}{2m}\nabla^2+V\right)\Psi_2$ …（2）。

取（1）之复共轭：

$-ih\frac{d\Psi_1{}^*}{dt}=\left(-\frac{h^2}{2m}\nabla^2+V\right)\Psi_1{}^*$ …（3）

$\Psi_2\times(3)-\Psi_1{}^*\times(2)$。

$$-ih\frac{d}{dt}(\Psi_1{}^*\Psi_2)=-\frac{h^2}{2m}(\Psi_2\nabla^2\Psi_1{}^*-\Psi_1{}^*\nabla^2\Psi_2)$$

对全空间积分：

$$-ih\frac{d}{dt}\int\Psi_1^*(x,t)\Psi_2(x,t)d^3x=-\frac{h^2}{2m}\int[\Psi_2\nabla^2\Psi_1^*-\Psi_1^*\nabla^2\Psi_2]d^3x。$$

右边 $=-\frac{h^2}{2m}\int\left[\nabla\cdot(\Psi_2\nabla\Psi_1^*-\Psi_1^*\nabla\Psi_2)-(\nabla\Psi_2)(\nabla\Psi_1^*)+(\nabla\Psi_1^*)(\nabla\Psi_2)\right]d^3\chi。$

$$=-\frac{h^2}{2m}\int\nabla\cdot(\Psi_2\nabla\Psi_1^*-\Psi_1^*\nabla\Psi_2)d^3x$$

上式最后可化为面积分，按波函数在无穷远处要求为0的条件，故右边积分为0

$\therefore\quad \frac{d}{dt}\int\Psi_1^*(\chi,t)\Psi_2(\chi,t)d^3\chi=0$　　　　即积分与时间无关

12。考虑单粒子的薛定谔方程：

$$ih\frac{d}{dt}\Psi(x,t)=-\frac{h^2}{2m}\nabla^2\Psi(x,t)+\Big(V_1(x)+iV_2(x)\Big)\Psi(\chi,t)。\cdots(1)$$

V_1与V_2为实函数，证明粒子的几率不守恒，求出在空间体积Ω中粒子几率“丧失”或“增加”的速率。

证：对上述方程取复共轭：$-ih\frac{d}{dt}\psi^*(\chi,t)=-\frac{h^2}{2m}\nabla^2\psi^*(\chi,t)$

$$+\Big(V_1(x)-iV_2(x)\Big)\psi^*(\chi,t)\qquad\cdots(2)$$

$\Psi^*\times(1)-\Psi\times(2)$：$ih\frac{d}{dt}(\psi^*\psi)=-\frac{h^2}{2m}(\psi^*\nabla^2\psi-\psi\nabla^2\psi^*)+2i\psi^*\nabla_2\psi$

$$=-\frac{h^2}{2m}\nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)+2iV_2\psi^*\psi$$

$\therefore\quad \frac{d}{dt}(\psi^*\psi)=-\frac{h}{2im}\nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)+\frac{2V_2}{h}\psi^*\psi\qquad\cdots(3)$

$\therefore\quad \frac{d\rho}{dt}+\nabla\cdot\vec{j}=\frac{2V_2}{h}\rho\neq0$　　　　此即几率不守恒的微分表达式。

（3）式对空间体积Ω积分：

$$\frac{d}{dt}\iiint_\Omega\psi^*\psi d\Omega=-\frac{h}{2im}\iiint_\Omega\nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)d\Omega+\frac{2V_2}{h}\iiint_\Omega\psi^*\psi d\Omega$$

$$=-\frac{h}{2im}\oiint(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)ds+\frac{2V_2}{h}\iiint_\Omega\psi^*\psi d\Omega。\quad\cdots(4)$$

上式右边第一项表示单位时间内粒子经表面离开Ω的几率，而第二项表示Ω体积中“产生”的几率

13。对于一维自由运动粒子，设$\psi(\chi,o)=\delta(\chi)$。求$|\psi(\chi,t)|^2$。

解：作富氏分析：　$\psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{2\pi h}}\int_{-\infty}^{\infty}\phi(p)\exp(ip\frac{x}{h})dp$

$$\phi(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi h}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x,0)\exp\left(-\frac{ipx}{h}\right)dx=\frac{1}{\sqrt{2\pi h}}$$

$$\therefore\quad \Psi(\chi,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi h}}\int_{-\infty}^{\infty}\phi(p)\exp\left(\frac{i}{h}(px-Et)\right)dp\qquad\left(E=\frac{p^2}{2m}\right)$$

$$=\frac{1}{2\pi h}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-\frac{i}{h}\left(\frac{p^2}{2m}t-px\right)\right]dp$$

$$=\frac{1}{2\pi h}\exp\left(\frac{imx^2}{2ht}\right)\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-\frac{it}{2mh}\left(p-\frac{mx}{t}\right)^2\right]dp$$

令 $\xi^2=\frac{t}{2mh}\left(p-\frac{mx}{t}\right)^2$，则

$$\Psi(\chi,t)=\frac{1}{2\pi t}\exp\left(\frac{imx}{2ht}\right)\cdot\sqrt{\frac{2mh}{t}}\int_{-\infty}^{\infty}\exp(-i\xi^2)d\xi$$

利用非涅耳积分公式：$\int_{-\infty}^{\infty}\cos(\xi^2)d\xi=\int_{-\infty}^{\infty}\sin(\xi^2)d\xi=\sqrt{\pi/2}$

$$\therefore\quad \int_{-\infty}^{\infty}\exp(-i\xi^2)d\xi=\sqrt{\frac{\pi}{2}}(1-i)=\sqrt{\pi}\exp\left(-\frac{i\pi}{4}\right)$$

$$\therefore\quad \Psi(x,t)=\sqrt{\frac{m}{2\pi ht}}\exp\left[i\left(\frac{mx^2}{2ht}-\frac{\pi}{4}\right)\right]$$

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

14．在非定域势中粒子的薛定谔方程为

$$ih\frac{d}{dt}\Psi(x,t)=-\frac{h^2}{2m}\nabla^2\Psi(x,t)+\int V(x,x')\Psi(x',t)d^3x'\quad\cdots(1)$$

求几率守恒对非定域势的要求。此时，只依赖于波幽数Ψ在空间一点的值的几率流是否存在？

解：在（1）式中，若$V(x,x')=V(x)\delta(x-x')$　　（定域势）

则方程还原为平常所见的薛定谔方程，并取复共轭：

$$-ih\frac{d}{dt}\Psi^*=-\frac{h^2}{2m}\nabla^2\psi^*+\int d^3x'V^*\psi^*\quad\cdots(2)$$

$\Psi^*\times$（1）$-\Psi\times$（2）：

$$ih\frac{d}{dt}|\Psi(x,t)|^2=-\frac{h^2}{2m}(\Psi^*\nabla^2\Psi-\Psi\nabla^2\Psi^*)$$

$$+\int d^3x'\left[\Psi^*(x,t)V(x,x')\Psi(x',t)-\Psi(x,t)V(x,x')\Psi^*(x',t)\right]\cdots(3)$$

$$\therefore\quad \frac{d}{dt}\int|\Psi(x,t)|^2d^3x=\frac{ih}{2m}\int d^3x\left[\Psi^*(x,t)\nabla^2\Psi(x,t)\right.$$

$$\left.-\Psi(x,t)\nabla^2\Psi^*(x,t)\right]-\frac{i}{h}\iint d^3x'd^3x\left[\Psi^*(x,t)V(x,x')\Psi(x't)\right.$$

$$\left.-\Psi(x,t)V^*(x,x')\Psi^*(x',t)\right]\quad\cdots(4)$$

对空间积分，几率守恒要求左边为0，右边第一项可化为面积分，对任何真实的波函数，面积分为0，因此需求：

$$\iint d^3\chi' d^3\chi\left[\Psi^*(\chi,t)V(\chi,\chi')\Psi(\chi',t)-\Psi(\chi,t)V^*(\chi,\chi')\Psi^*(\chi',t)\right]=0$$

〔 〕括号中后一项换一下积分变数 $x\to\chi'$，则有：

$$\iint d^3x d^3x'\ \Psi^*(x,t)\left[V(x,x')-V^*(x',x)\right]\Psi(x',t)=0$$

Ψ为任意整态，故要求 $V(\chi,\chi')=V^*(\chi',\chi)$ ……（5）

$V(x,x')$是V在坐标表象中的“矩阵元”，上式等同于要求V为厄密算符.

由（4）式知：$\rho(\chi,t)=\Psi^*(\chi,t)\Psi(\chi,t)$

$$\vec{j}_0(x,t)=\frac{ih}{2m}\left[\Psi^*(\chi,t)\nabla\Psi(\chi,t)-\Psi(\chi,t)\nabla\Psi^*(\chi,t)\right]$$

$$\therefore\ \frac{d}{dt}\rho(\chi,t)+\int d^3\chi'\left\{\delta(\chi,-\chi')\nabla\cdot\vec{j}_0(\chi,t)\right.$$

$$\left.-\frac{i}{h}\left[\Psi^*(\chi,t)V(\chi,\chi')\Psi(\chi',t)-\Psi(\chi,t)V^*(\chi,\chi')\Psi^*(\chi',t)\right]\right\}=0$$

上式$\{\ \}$中第二项是非定域的。此时只依赖于波函数在空间一点的值的几率流不存在。

15．写出动量表象中的薛定谔方程。

解：经典能量方程 $E=\frac{p^2}{2m}+V(r)$

在动量表象中、只需作变换 $p\to p$ $r\to ih\frac{d}{dp}$

$\therefore$ 动量表象中薛定谔方程为：

$$\left[\frac{p^2}{2m}+V\left(ih\frac{d}{dp}\right)\right]\Psi(p)=E\Psi(p)$$

16．设在曲线坐标（$q^1,q^2,q^3,$）中 线段元dS为：$dS^2=\sum_{i,k}g_{ik}\,dq^i\,dq^k$，写出在这曲线坐标系中的薛定谔方程。利用此结果，写出球坐标中的薛定谔方程。

解：主要问题在于写出曲线坐标系中的动量算符：

$$T=-\frac{1}{2}h\sum_{\mu}\frac{1}{m_\mu}\frac{d^2}{dx_\mu^{\ 2}}\qquad\cdots\cdots(1)$$

其中 m_μ 对属于同一个粒子的三个坐标偏微商具有同样的值，量子理论中的表达式（1）是和下面的经典表达式相对应的：

$$T_{经典}=\frac{1}{2}\sum_{\mu}m_\mu\dot{X}^2_\mu\qquad 以\ \xi_\mu=\sqrt{m_\mu}\ \ x_\mu\ \ 代替\ x_\mu$$

则：$T_{经典}=\frac{1}{2}\sum_{\mu}\dot{\xi}^2_\mu$

现在在具有线元 $dS^2=\sum_\mu d\xi_\mu^2$ 的ξ空间中，用广义坐标q^k代替ξ_μ，则线元为：

$$dS^2=\sum_i\sum_k g_{ik}\ dq^i\,dq^k$$

$$\therefore\quad T_{经典}=\frac{1}{2}\sum_i\sum_k g_{ik}\ \dot{q}_i\ \dot{q}_k$$

过渡到量子理论，（1）式等价于：

$$T=\frac{1}{2}h^2\sum_\mu\frac{d^2}{d\xi_\mu^2}=-\frac{1}{2}h^2\ \nabla^2$$

在微分几何中已经证明了当用 g^i 代替 ξ_u 时，拉普拉斯算符变为

$$\nabla^2=\frac{1}{\sqrt{g}}\sum_i\sum_k\frac{d}{dq_i}\left(\sqrt{g}\,g^{ik}\ \frac{d}{dq^k}\right)$$

其中g是度规张量g_{ik}的行列式，g^{ik}是g_{ik}的逆变分量，$g^{ik}=G_{ik}/g$，G_{ik}是行列式g中g_{ik}的余式。

$$\therefore\quad T=-\frac{1}{2}\ h^2\sqrt{g}\sum_k\sum_i\frac{d}{dq^i}\left(\sqrt{g}\ g^{ik}\ \frac{d}{dq^k}\right)\qquad\cdots\cdots(2)$$

势能的表示式可以很容易推出。

在球坐标中、取r，θ，φ为广义座标，则有

$$T_{经典}=\frac{1}{2}m\ (\dot{x}^2+\dot{y}^2+\dot{z}^2)\ =\frac{1}{2}m\ (\dot{r}^2+r^2\dot{\theta}+r^2\sin^2\theta\dot{\varphi}^2)$$

由于$T_{经典}$是$\dot{r}$、$\dot{\theta}$、$\dot{\varphi}$的二次式、则度规张量g的协变分量为：

$g_{rr}=m$　　$g_{r\theta}=0$　　$g_{r\varphi}=0$

$g_{\theta r}=0$　　$g_{\theta\theta}=r^2m$　　$g_{\theta\varphi}=0$　　∴　行列式 $g=m^3\ r^4\ \sin^2\theta$

$g_{\varphi r}=0$　　$g_{\varphi\theta}=0$　　$g_{\varphi\varphi}=mr^2\sin^2\theta$

逆变分量　　$g^{ik}=Gik/g$

$g^{rr}=1/m$　　$g^{r\theta}=0$　　$g^{r\varphi}=0$

$g^{\theta r}=0$　　$g^{\theta\theta}=1/r^2m$　　$g^{\theta\varphi}=0$

$g^{\varphi r}=0$　　$g^{\varphi r}=0$　　$g^{\varphi\varphi}=1/mr^2\sin^2\theta$

代入（2）

$$\therefore\quad T=-\frac{h^2}{2}\ \frac{1}{\sqrt{g}}\left[\frac{d}{dr}\left(\sqrt{g}\,g^{rr}\ \frac{d}{dr}\right)+\frac{d}{dr}\left(\sqrt{g}\,g^{r\theta}\ \frac{d}{d\theta}\right)\right.$$

$$+\frac{d}{dr}\left(\sqrt{g}\,g^{r\varphi}\ \frac{d}{d\varphi}\right)+$$

$$+\ \frac{d}{d\theta}\left(\sqrt{g}\,g^{\theta r}\frac{d}{dr}\right)+\frac{d}{d\theta}\left(\sqrt{g}\,g^{\theta\theta}\ \frac{d}{d\theta}\right)+\frac{d}{d\theta}\left(\sqrt{g}\,g^{\theta\varphi}\ \frac{d}{d\varphi}\right)$$

$$+\frac{d}{d\varphi}\left(\sqrt{g}\, g^{\varphi r}\frac{d}{dr}\right)+\frac{d}{d\varphi}\left(\sqrt{g}\, g^{\varphi\theta}\frac{d}{d\theta}\right)+\frac{d}{d\varphi}\left(\sqrt{g}\, g^{\varphi\varphi}\frac{d}{d\varphi}\right)\Bigg]$$

$$\therefore T=-\frac{h^2}{2}\frac{1}{\sqrt{g}}\Bigg[\frac{d}{dr}\left(\sqrt{g}\, g^{rr}\frac{d}{dr}\right)+\frac{d}{d\theta}\left(\sqrt{g}\, g^{\theta\theta}\frac{d}{d\theta}\right)$$

$$+\frac{d}{d\varphi}\left(\sqrt{g}\; g^{\varphi\varphi}\frac{d}{b\varphi}\right)\Bigg]$$

$$=-\frac{h}{2}\frac{1}{\sqrt{g}}\Bigg[\frac{d}{dr}\left(\sqrt{m}\,\sin\theta\, r^2\frac{d}{dr}\right)+\frac{d}{d\theta}\left(\sqrt{m}\,\sin\theta\frac{d}{d\theta}\right)$$

$$+\frac{d}{d\varphi}\left(\sqrt{m}\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\varphi}\right)\Bigg]$$

$$=-\frac{h^2}{2m}\frac{1}{r^2\sin\theta}\Bigg[\left(2r\frac{d}{dr}+\frac{r^2d^2}{dr^2}\right)\sin\theta+\left(\cos\theta\frac{d}{d\theta}+\sin\theta\frac{d^2}{d\theta^2}\right)+\frac{1}{\sin\theta}\frac{d^2}{d\varphi^2}\Bigg]$$

$$=-\frac{h^2}{2m}\Bigg[\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}+\frac{1}{r^2}\frac{d^2}{d\theta^2}+\frac{1}{r^2}\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{d^2}{d\varphi^2}\Bigg]$$

势能表达式易写，故薛定谔方程得以写出。

17。证明从单粒子的薛定谔方程得出的粒子的速度场是非旋的，即求证，$\nabla\times\vec{V}=0$

其中 $\vec{V}=\vec{j}/\rho$

证：∵ $\nabla\cdot\vec{j}+\frac{d\rho}{dt}=0$

而在量子力学中波函数一般为复函数，令$\Psi=u+iw$

则 $\rho=\Psi^*\Psi=u^2+w^2$，$\vec{j}=-\frac{ih}{2m}(\Psi^*\nabla\Psi-\Psi\nabla\Psi^*)=\frac{h}{m}(u\nabla w-\nabla wu)$

$$\therefore\quad \nabla\times\vec{V}=\nabla\times\left(\frac{\vec{j}}{\rho}\right)=\frac{1}{\rho}\nabla\times\vec{j}+\left(\nabla\frac{1}{\rho}\right)\times\vec{j}$$

而 $\nabla\times\vec{j}=\frac{2h}{m}(\nabla u)\times(\nabla u)$

$$\left(\nabla\frac{1}{\rho}\right)\times\vec{j}=-\frac{1}{\rho^2}(\nabla\rho)\times\vec{j}=-\frac{2h}{m\rho}(\nabla u)\times(\nabla w)$$

$$\therefore\quad \nabla\times\vec{V}=0$$

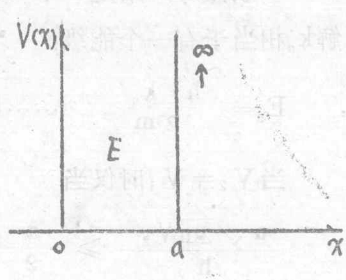
第三章　一维定态问题

1．对于无限深势阱中运动的粒子、证明：

$$\bar{x}=\frac{a}{2},\qquad \overline{(x-\bar{x})^2}=\frac{a}{12}\left(1-\frac{6}{h^2\pi^2}\right)$$

并证明当 $n\to\infty$ 时以上结果与经典理论一致

证：设粒子处于第n个本征态，其本征函数为：



F. 3-1

$$\Psi n\ (x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x$$

$$\overline{x}=\int_0^a x|\Psi_n|^2dx=\frac{2}{a}\int_0^a x\sin^2\frac{n\pi}{a}x\,dx$$

$$=\frac{a}{2}$$

$$\overline{(x-\overline{x})^2}=\overline{x^2}+(\overline{x})^2=\int_0^a x^2|\psi_n|^2dx-\frac{a^2}{4}$$

$$(=\frac{2}{a}\int_0^a x^2\frac{1}{2}(1-\cos\frac{2n\pi a}{a})dx-\frac{a^2}{4}=\frac{a^2}{12}(1-\frac{6}{n^2\pi^2})$$

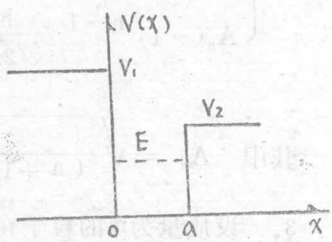
在经典情况下，在（0、a）区间粒子处于dx范围的几率为$\frac{dx}{a}$

$$\therefore\quad \overline{x}=\int_0^a x\frac{dx}{a}=\frac{a}{2}$$

$$\overline{x^2}=\int_0^a x^2\frac{dx}{a}=\frac{a^2}{3}$$

$$\overline{(x-\overline{x})^2}=\frac{a^2}{3}-\frac{a^2}{4}=\frac{a^2}{12}$$

∴ 当 $n\to\infty$ 时，量子力学的结果与经典的一致



F. 3-2

2. 试求在不对称势阱中的粒子的能级和波函数。

解：仅讨论分立能级的情况、即 $E<V_2$

$$\therefore\quad \frac{d^2\Psi}{dx^2}=\frac{2m(V-E)}{h^2}\Psi$$

当 $x\to\pm\infty$、$\Psi\to 0$ 故有：$\Psi=\begin{cases}A_1\exp(k_1x) & x<0 \quad k_1=\sqrt{2m(V_1-E)}/h\\ A\sin(kx+\delta) & 0<x<a \quad k=\sqrt{2mE}/h\ (\delta<\pi)\\ A_2\exp(-k_2x) & a<x \quad k_2=\sqrt{2m(V_2-E)}/h\end{cases}$

由 $d\psi/dx$ 在 $x=0$，$x=a$ 处连续的条件

$$\therefore\quad k_1=k\,ctg\delta、\quad k_2=-k\,ctg(ka+\delta) \qquad \cdots\cdots(1)$$

$$\therefore\quad \sin\delta=\frac{hk}{\sqrt{2mv_1}},\ \sin(ka+\delta)=\pm\frac{hk}{\sqrt{2mv_2}},$$

$$ka=n\pi-\sin^{-1}\frac{hk}{\sqrt{2mv_1}}-\sin^{-1}\frac{hk}{\sqrt{2mv_2}},\quad n=1,2\cdots\cdots$$

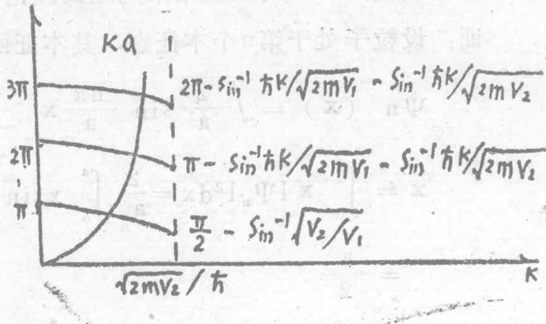
一般而言，给定一个n值，有一个解k_n相当于有一个能级:

$$E_n = \frac{h^2 k_n^2}{2m} \quad \cdots\cdots(2)$$

当$V_2 \neq V_1$时仅当

$$\frac{a\sqrt{2mV_2}}{h} \geqslant \frac{\pi}{2}$$

$$-\sin^{-1}\sqrt{\frac{V_2}{V_2}}$$



F. 3-3

才有束缚态,故V_1V_2给定时,仅当$a \geq \frac{h}{\sqrt{2mV_2}}\left(\frac{\pi}{2}-\sin^{-1}\sqrt{\frac{V_2}{V_1}}\right)$时才有束缚态

当 V_1V_2，a给定时，由(2)式可求出n个能级（若有n个能级的话）

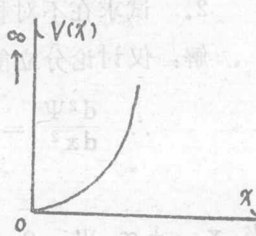
相应的波函数为:

$$\Psi=\begin{cases} An\,\frac{hk_n}{\sqrt{m2V_1}}\exp(k_nx) & x<0 \quad k_n=\sqrt{2m(V_1-E)}/h \\ A_n\sin(k_nx+\delta_n) & 0<x<a \\ A_n(-1)^{n-1}\frac{hk_{2n}}{\sqrt{2mV_2}}\exp[-k_{2n}(x-a)] & a<x \quad k_{2n}=\sqrt{2m(V_2-E)}/h \end{cases}$$

其中 $A_n=\sqrt{\frac{2}{(a+1/k_n+1/k_{2n})}}$

3. 设质量为m的粒子在下列势阱中运动

$$V(x)=\begin{cases}\infty & x>0 \\ m\omega^2x^2/2 & x>0\end{cases}$$



F. 3-4

求粒子的能级

解: $\because -\frac{h^2}{2m}\Psi''(x)+V(x)\Psi(x)=E\Psi(x)$

$$\therefore \begin{cases}\Psi(x)=0 & x<0 \quad \cdots\cdots(1) \\ -\frac{h^2}{2m}\Psi''+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\Psi(x)=E\Psi(x) & x>0 \quad \cdots\cdots(2)\end{cases}$$

令 $\frac{m\omega}{h}=\frac{1}{l^2}$, $\rho=\frac{x}{l}$, $\lambda=l^2\frac{2mE}{h^2}=\frac{E}{m\omega^2/2}$ 并代入(2)式:

$$\therefore \Psi''(\rho)-\rho^2\Psi(\rho)+\lambda\Psi(\rho)=0 \quad \cdots\cdots(3)$$

由边界条件 $\rho<\infty$，$\Psi(\rho)\to o$ 可令 $\Psi(\rho)=A\exp\rho.(-\frac{1}{2}\rho^2)H(\rho)$ ……(4)

将(4)代入(3)：$H''(\rho)-2\rho H'(\rho)+(\lambda-1)H(\rho)=0$

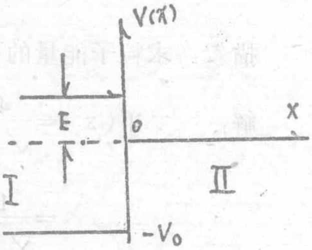
这即为厄密多项式所满足的微分方程，〔要保证 $\rho\to\infty$，$\Psi(\rho)\to 0$ 则有 $\lambda=2n+1$)

$\therefore\ \Psi_n(\rho)=A_n\exp\rho(-\frac{\rho^2}{2})\ H_n(\rho)$，$E_n=(n+\frac{1}{2})\ h\omega$

在 $x=0$ 的边界条件为：$\Psi_n(0)=0$ 故n只能取奇数。

$\therefore$ 能级为：$E_n=(2m+3/2)\ h\omega \quad m=0,\ 1,\ 2,\ \ldots\ldots$

4. 考虑粒子（$E>0$）在下列势阱壁（$x=0$）处的反射系数



$$V(x)=\begin{cases}-V0 & x<0\\ 0 & x>0\end{cases}$$

F.3-5

解：在区域Ⅰ有入射波和反射波，在区域Ⅱ仅有透射波。

$\therefore\ \Psi_{I}=A\exp(ik_1x)+B\exp(-ik_2x) \qquad k_1=\sqrt{2m(V_0+E)/h}$

$\Psi_{II}=C\exp(ik_2x) \qquad k_2=\sqrt{2mE/h}$

由 Ψ_I、Ψ_{II} 在 $x=0$ 处连续

$$\therefore\ R=\frac{B^2}{A^2}=\frac{(k_1-k_2)^2}{(k_1+k_2)^2}$$

$$\text{反射系数：}|R|^2=\frac{V_0{}^2}{(\sqrt{V_0+E}+\sqrt{E})^4}\begin{cases}V_0{}^2/16E^2 & E\gg V_0\\ 1-4\sqrt{E/V_0} & E\ll V_0\end{cases}$$

5. 试证明，对于任意势垒，粒子的反射系数R及透射系数D满足

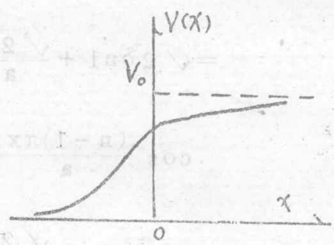
$R+D=1$（取 $E>V_0$）

解：设粒子从左向右运动，$X\to\infty$ 的渐近形式为

$\Psi(x)=\exp(ikx)+A\exp(-ikx)$

$k=\sqrt{2mE/h}$

而 $x\to+\infty$ 的渐近形式为：



$\Psi(x)=B\exp(k_1x) \qquad k_1=\sqrt{2m(E-V_0)/h}$

F·3-6

由 几率流密度守恒 〔对于 $V(x)$ 为实势〕