理论物理学习辅导丛书

周世勋 编

量子力学教程
学习辅导书

张宏宝

高等教育出版社

理论物理引

周世勋 编

量子力学教程
学习辅导书

张宏宝

高等教育出版社

内容提要

本书是为周世勋编《量子力学教程》配套的学习辅导书。本书每一章都对基本内容进行了总结，对教材中全部习题给出了分析和解题思路，并作出了解答，对部分习题还介绍了实际科研中的背景，帮助学生加强对所学知识的理解，巩固和提高学习效果。

本书可供使用周世勋编《量子力学教程》的学生作为学习辅导书，也可供教师或使用其他量子力学教材的读者参考。

图书在版编目(CIP)数据

量子力学教程学习辅导书/张宏宝.—北京：高等教育出版社，2004.11

ISBN 7-04-015566-4

Ⅰ.量… Ⅱ.张… Ⅲ.量子力学-高等学校-教学参考资料 Ⅳ.0413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2004)第 099192 号

出版发行	高等教育出版社	购书热线	010-64054588
社　　址	北京市西城区德外大街 4 号	免费咨询	800-810-0598
邮政编码	100011	网　　址	http://www.hep.edu.cn
总　　机	010-58581000		http://www.hep.com.cn

经　　销　新华书店北京发行所
印　　刷　北京未来科学技术研究所有限责任公司印刷厂

开　　本	850×1168　1/32	版　　次	2004 年 11 月第 1 版
印　　张	3.5	印　　次	2004 年 11 月第 1 次印刷
字　　数	80 000	定　　价	5.70 元

本书如有缺页、倒页、脱页等质量问题，请到所购图书销售部门联系调换。

物料号：15566-00

前　言

本书是和周世勋先生的《量子力学教程》配套的学习辅导书。

对于初学者来说，学好量子力学不是一件很容易的事，尤其是领会其基本概念，这需要多想，多练，再多想，也就是要经历一个把书“由薄读厚，再由厚读薄”的学习历程。希望本书能成为学生在这一过程中的好帮手，能引导他们把握学习重点，理清解题思路，领会量子力学的精髓，提高学习质量。本书对主教材的每一章的内容先作了简要的总结，然后给出了习题的分析和解题思路，并给出了解题过程，希望学生能从中掌握解决量子力学问题的一般方法。书中对部分习题还介绍了实际科研中的背景，帮助学生加强对所学知识的理解，巩固和提高学习效果。

北京交通大学的李文博教授和安徽阜阳师范学院的马涛教授审阅了全书，并提出了许多宝贵的建议，同时在编写过程中，向北京师范大学裴寿镛教授的多次请教使编者受益匪浅，在此编者向他们致以诚挚的感谢。

因编者水平有限，错误、疏漏之处在所难免，敬请读者批评指正。

编者

2004 年 2 月

目　　录

第一章　绪论……………………………………………………… 1

第二章　波函数和薛定谔方程 ……………………………………… 11

第三章　量子力学中的力学量 ……………………………………… 24

第四章　态和力学量的表象 ………………………………………… 50

第五章　微扰理论 …………………………………………………… 62

第六章　散射 ………………………………………………………… 77

第七章　自旋与全同粒子 …………………………………………… 89

第一章 绪 论

1. 旧量子论的精髓

当人类的触角延伸到微观领域时,微观世界的量子现象便展现出来,其中最重要的性质,也即是旧量子论的精髓便是由德布罗意提出的微观粒子的波粒二象性.微观粒子的这种波粒二象性是通过以下关系相联系的:

$$E = h\nu = \hbar\omega,$$

$$\boldsymbol{p} = \frac{h}{\lambda}\boldsymbol{n} = \hbar\boldsymbol{k}.$$

2. 旧量子论的应用

把旧量子论尤其是旧量子论的精髓——微观粒子的波粒二象性应用于微观领域,解释了很多现象,这包括:

(1) 过去长期认为光是波动的,这早已被光的干涉和衍射现象所证实,但黑体辐射与光电效应,以及康普顿效应证实了光又具有粒子性.

(2) 同样,过去长期认为电子是粒子的,但玻尔和索末菲发现的量子化条件,以及戴维孙和革末所做的电子衍射实验证实了电子又具有波动性.

1.1 由黑体辐射公式导出维恩位移定律:能量密度极大值所对应的波长 λ_m 与温度 T 成反比,即

$$\lambda_m T = b(\text{常量});$$

并近似计算 b 的数值,准确到二位有效数字.

解 根据普朗克的黑体辐射公式

$$\rho_\nu \, d\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \cdot \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} d\nu, \tag{1}$$

以及

$$\lambda\nu = c, \tag{2}$$

$$\rho_\nu d\nu = -\rho_\lambda d\lambda, \tag{3}$$

有

$$\begin{aligned}
\rho_\lambda &= -\rho_\nu \frac{d\nu}{d\lambda} \\
&= -\rho_\nu(\lambda) \frac{d\left(\frac{c}{\lambda}\right)}{d\lambda} \\
&= \frac{\rho_\nu(\lambda)}{\lambda^2} \cdot c \\
&= \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1},
\end{aligned}$$

这里的 ρ_λ 的物理意义是黑体内波长介于 λ 与 $\lambda + d\lambda$ 之间的辐射能量密度.

本题关注的是 λ 取何值时,ρ_λ 取得极大值,因此,就得要求 ρ_λ 对 λ 的一阶导数为零,由此可求得相应的 λ 的值,记作 λ_m.但要注意的是,还需要验证 ρ_λ 对 λ 的二阶导数在 λ_m 处的取值是否小于零,如果小于零,那么前面求得的 λ_m 就是要求的.具体如下:

$$\rho'_\lambda = \frac{8\pi hc}{\lambda^6} \cdot \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1}\left(-5 + \frac{hc}{\lambda kT} \cdot \frac{1}{1 - e^{-\frac{hc}{\lambda kT}}}\right) = 0$$

$$\Rightarrow \qquad -5 + \frac{hc}{\lambda kT} \cdot \frac{1}{1 - e^{-\frac{hc}{\lambda kT}}} = 0$$

$$\Rightarrow \qquad 5\left(1-\mathrm{e}^{-\frac{hc}{\lambda kT}}\right)=\frac{hc}{\lambda kT}.$$

如果令 $x=\dfrac{hc}{\lambda kT}$,则上述方程为

$$5(1-\mathrm{e}^{-x})=x.$$

这是一个超越方程.首先,易知此方程有解:$x=0$,但经过验证,此解是平庸的;另外的一个解可以通过逐步近似法或者数值计算法获得:$x=4.97$,经过验证,此解正是所要求的.这样则有

$$\lambda_{\mathrm{m}}T=\frac{hc}{xk}.$$

把 x 以及三个物理常量代入到上式便知

$$\lambda_{\mathrm{m}}T=2.9\times10^{-3}\mathrm{m\cdot K}.$$

这便是维恩位移定律.据此,我们知道如果物体温度升高的话,辐射的能量分布的峰值向较短波长方面移动.这样便会根据热物体(如遥远星体)的发光颜色来判定温度的高低.

1.2 在 0 K 附近,钠的价电子能量约为 3 eV,求其德布罗意波长.

解 根据德布罗意波粒二象性的关系,可知

$$E=h\nu,$$

$$p=\frac{h}{\lambda}.$$

如果所考虑的粒子是非相对论性的电子($E_{动}\ll\mu_{\mathrm{e}}c^2$),那么

$$E=\frac{p^2}{2\mu_{\mathrm{e}}};$$

如果我们考察的是相对论性的光子,那么

$$E=pc.$$

注意到本题所考虑的钠的价电子的动能仅为 3 eV,远远小于电子的质量与光速平方的乘积,即 0.51×10^6eV,因此利用非相对论性的电子的能量-动量关系式.这样,便有

$$\begin{aligned}\lambda &= \frac{h}{p} \\ &= \frac{h}{\sqrt{2\mu_e E}} \\ &= \frac{hc}{\sqrt{2\mu_e c^2 E}} \\ &= \frac{1.24\times10^{-6}}{\sqrt{2\times0.51\times10^6\times3}}\text{m} \\ &= 0.71\times10^{-9}\text{m} \\ &= 0.71\ \text{nm}.\end{aligned}$$

在这里,利用了

$$hc = 1.24\times10^{-6}\text{eV}\cdot\text{m},$$

以及

$$\mu_e c^2 = 0.51\times10^6\text{eV}.$$

最后,对

$$\lambda = \frac{hc}{\sqrt{2\mu_e c^2 E}}$$

作一点讨论.从上式可以看出,当粒子的质量越大时,这个粒子的波长就越短,因而这个粒子的波动性较弱,而粒子性较强;同样的,当粒子的动能越大时,这个粒子的波长就越短,因而这个粒子的波动性较弱,而粒子性较强.由于宏观世界的物体质量普遍很大,因而波动性极弱,显现出来的都是粒子性.这种波粒二象性,从某种意义来说,只有在微观世界才能显现.

1.3 氦原子的动能是 $E=\frac{3}{2}kT$(k 为玻耳兹曼常数),求 $T=1$ K 时,氦原子的德布罗意波长.

解 根据

$$1\ k\cdot\text{K} = 10^{-3}\text{eV},$$

知本题的氦原子的动能为

$$E=\frac{3}{2}kT=\frac{3}{2}k\cdot \mathrm{K}=1.5\times 10^{-3}\mathrm{eV},$$

显然远远小于 $\mu_{核}c^2$. 这样,便有

$$\begin{aligned}\lambda &= \frac{hc}{\sqrt{2\mu_{核}c^2E}}\\ &= \frac{1.24\times 10^{-6}}{\sqrt{2\times 3.7\times 10^9\times 1.5\times 10^{-3}}}\mathrm{m}\\ &= 0.37\times 10^{-9}\mathrm{m}\\ &= 0.37\ \mathrm{nm}.\end{aligned}$$

这里,利用了

$$\mu_{核}c^2=4\times 931\times 10^6\mathrm{eV}=3.7\times 10^9\mathrm{eV}.$$

最后,再对德布罗意波长与温度的关系作一点讨论. 由某种粒子构成的温度为 T 的体系,其中粒子的平均动能的数量级为 kT,这样,其相应的德布罗意波长就为

$$\lambda=\frac{hc}{\sqrt{2\mu c^2E}}=\frac{hc}{\sqrt{2\mu kc^2T}}.$$

据此可知,当体系的温度越低,相应的德布罗意波长就越长,这时这种粒子的波动性就越明显,特别是当波长长到比粒子间的平均距离还长时,粒子间的相干性就尤为明显. 因此这时就不能用经典的描述粒子统计分布的玻耳兹曼分布,而必须用量子的描述粒子的统计分布——玻色分布或费米分布.

1.4 利用玻尔-索末菲的量子化条件,求:

(1) 一维谐振子的能量;

(2) 在均匀磁场中作圆周运动的电子轨道的可能半径.

已知外磁场 $H=10$ T,玻尔磁子 $M_B=9\times 10^{-24}\mathrm{J}\cdot\mathrm{T}^{-1}$,试计算动能的量子化间隔 ΔE,并与 $T=4$ K 及 $T=100$ K 的热运动能量相比较.

解 玻尔-索末菲的量子化条件为

$$\oint p\mathrm{d}q = nh,$$

其中 q 是微观粒子的一个广义坐标，p 是与之相对应的广义动量，回路积分是沿运动轨道积一圈，n 是正整数.

(1) 设一维谐振子的劲度常数为 k，谐振子质量为 μ，于是有

$$E = \frac{p^2}{2\mu} + \frac{1}{2}kx^2.$$

这样，便有

$$p = \pm\sqrt{2\mu(E - \frac{1}{2}kx^2)}.$$

这里的正负号分别表示谐振子沿着正方向运动和沿着负方向运动，一正一负正好表示一个来回，运动了一圈. 此外，根据

$$E = \frac{1}{2}kx^2,$$

可解出
$$x_{\pm} = \pm\sqrt{\frac{2E}{k}}.$$

这表示谐振子的正负方向的最大位移. 这样，根据玻尔-索末菲的量子化条件，有

$$\int_{x_-}^{x_+}\sqrt{2\mu(E - \frac{1}{2}kx^2)}\mathrm{d}x + \int_{x_+}^{x_-}(-)\sqrt{2\mu(E - \frac{1}{2}kx^2)}\mathrm{d}x = nh$$

$$\Rightarrow \int_{x_-}^{x_+}\sqrt{2\mu(E - \frac{1}{2}kx^2)}\mathrm{d}x + \int_{x_-}^{x_+}\sqrt{2\mu(E - \frac{1}{2}kx^2)}\mathrm{d}x = nh$$

$$\Rightarrow \qquad \int_{x_-}^{x_+}\sqrt{2\mu(E - \frac{1}{2}kx^2)}\mathrm{d}x = \frac{n}{2}h.$$

为了积分上述方程的左边，作以下变量代换：

$$x = \sqrt{\frac{2E}{k}}\sin\theta.$$

这样，便有

$$\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \sqrt{2\mu E\cos^2\theta}\,\mathrm{d}\left(\sqrt{\frac{2E}{k}}\sin\ \theta\right) = \frac{n}{2}h$$

$$\Rightarrow \qquad \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \sqrt{2\mu E}\cos\ \theta\cdot\sqrt{\frac{2E}{k}}\cos\ \theta\mathrm{d}\theta = \frac{n}{2}h$$

$$\Rightarrow \qquad \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} 2E\cdot\sqrt{\frac{\mu}{k}}\cos^2\ \theta\mathrm{d}\theta = \frac{n}{2}h\,.$$

这时,令上式左边的积分为 A.此外,再构造一个积分

$$B = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} 2E\cdot\sqrt{\frac{\mu}{k}}\sin^2\theta\mathrm{d}\theta.$$

这样,便有

$$A+B = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} 2E\cdot\sqrt{\frac{\mu}{k}}\mathrm{d}\theta = 2E\pi\cdot\sqrt{\frac{\mu}{k}}, \tag{1}$$

$$\begin{aligned} A-B &= \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} 2E\cdot\sqrt{\frac{\mu}{k}}\cos\ 2\theta\mathrm{d}\theta \\ &= \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} E\sqrt{\frac{\mu}{k}}\cos\ 2\theta\mathrm{d}(2\theta) \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} E\sqrt{\frac{\mu}{k}}\cos\psi\ \mathrm{d}\psi, \end{aligned}$$

这里 $\psi = 2\theta$.这样,就有

$$A-B = \int_{-\pi}^{\pi} E\sqrt{\frac{\mu}{k}}\mathrm{d}\sin\ \psi = 0. \tag{2}$$

根据式(1)和(2),便有

$$A = E\pi\sqrt{\frac{\mu}{k}}.$$

这样,便有

$$E\pi\sqrt{\frac{\mu}{k}} = \frac{n}{2}h$$

$$\Rightarrow \qquad E = \frac{n}{2\pi}h\sqrt{\frac{\mu}{k}}$$

$$= n\hbar\sqrt{\frac{\mu}{k}},$$

其中 $\hbar = \frac{h}{2\pi}$.

最后,对此解作一点讨论.首先,注意到谐振子的能量被量子化了;其次,这量子化的能量是等间隔分布的.

(2) 当电子在均匀磁场中作圆周运动时,有

$$\mu\frac{v^2}{R} = qvB$$

$$\Rightarrow \qquad p = \mu v = qBR.$$

这时,玻尔-索末菲的量子化条件就为

$$\int_0^{2\pi} qBR\,\mathrm{d}(R\theta) = nh$$

$$\Rightarrow \qquad qBR^2\cdot 2\pi = nh$$

$$\Rightarrow \qquad qBR^2 = n\hbar.$$

又因为动能 $E = \frac{p^2}{2\mu}$,所以,有

$$\begin{aligned} E &= \frac{(qBR)^2}{2\mu} = \frac{q^2B^2R^2}{2\mu} \\ &= \frac{qBn\hbar}{2\mu} = nB\cdot\frac{q\hbar}{2\mu} \\ &= nBM_B, \end{aligned}$$

其中,$M_B = \frac{q\hbar}{2\mu}$是玻尔磁子.这样,发现量子化的能量也是等间隔的,而且

$$\Delta E = BM_B.$$

具体到本题,有

$$\Delta E = 10\times 9\times 10^{-24}\,\mathrm{J} = 9\times 10^{-23}\,\mathrm{J}.$$

根据动能与温度的关系式

$$E = \frac{3}{2}kT,$$

以及

$$1k\cdot K=10^{-3}eV=1.6\times10^{-22}J,$$

可知，当温度 $T=4$ K 时，

$$E=1.5\times4\times1.6\times10^{-22}J=9.6\times10^{-22}J;$$

当温度 $T=100$ K 时，

$$E=1.5\times100\times1.6\times10^{-22}J=2.4\times10^{-20}J.$$

显然，两种情况下的热运动所对应的能量要大于前面的量子化的能量的间隔.

1.5 两个光子在一定条件下可以转化为正负电子对.如果两光子的能量相等，问要实现这种转化，光子的波长最大是多少?

解 关于两个光子转化为正负电子对的动力学过程，如两个光子以怎样的概率转化为正负电子对的问题，严格来说，需要用到相对性量子场论的知识去计算，但当涉及到这个过程的运动学方面，如能量守恒，动量守恒等，我们不需要用那么高深的知识去计算.具体到本题，两个光子能量相等，因此当对心碰撞时，转化为正负电子对所需的能量最小，因而所对应的波长也就最长，而且，有

$$E=h\nu=\mu_e c^2.$$

此外，还有

$$E=pc=\frac{hc}{\lambda}.$$

于是，有

$$\frac{hc}{\lambda}=\mu_e c^2$$

$$\Rightarrow\qquad \lambda=\frac{hc}{\mu_e c^2}=\frac{1.24\times10^{-6}}{0.51\times10^{6}}m=2.4\times10^{-12}m=2.4\times10^{-3}nm.$$

尽管这是光子转化为电子的最大波长,但从数值上看,也是相当小的.我们知道,电子是自然界中最轻的有质量的粒子.如果光子转化为像正反质子对之类的更大质量的粒子,那么所对应的光子的最大波长将会更小.这从某种意义上告诉我们,当涉及到粒子的衰变,产生,转化等问题,一般所需的能量是很大的.能量越大,粒子间的转化等现象就越丰富,这样,也许就能发现新粒子,这便是世界上在造越来越高能的加速器的原因:期待发现新现象、新粒子、新物理.

第二章　波函数和薛定谔方程

1. 概率[①]波函数与薛定谔方程

电子作为粒子,描述其状态的不再是位置与动量,而是概率波函数 $\psi(x,y,z,t)$. $|\psi(x,y,z,t)|^2$ 解释为在 t 时刻,在点(x,y,z)找到电子的概率密度,显然,有

$$\iiint |\psi(x,y,z,t)|^2 \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z = 1,$$

以及 $e^{i\delta}\psi(x,y,z,t)$与 $\psi(x,y,z,t)$描述电子的同一个状态.这便是量子力学对旧量子论的波粒二象性的重新认识.

此外,概率波函数满足态叠加原理:当 $\psi_1,\psi_2,\cdots,\psi_n$ 是体系可能的状态时,它们的线性叠加

$$\psi = \sum_{i=1}^{n} c_i\psi_i$$

也是体系的一个可能状态;也可以说,当体系处于状态 ψ 时,体系部分的处于态 $\psi_1,\psi_2,\cdots,\psi_n$ 中.

最后,电子的概率波函数所满足的运动方程为薛定谔方程:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi + U(\boldsymbol{r})\psi.$$

据此,可以得到概率守恒方程:

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \nabla\cdot\boldsymbol{J} = 0,$$

① 全国自然科学名词审定委员会 1996 年公布的《物理学名词》中将“几率”统一称为“概率”,主教材中仍使用“几率”一词.

其中 $w=\psi^*\psi, \boldsymbol{J}=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2\mu}(\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi)$. 相应的,可以得到质量守恒定律、电荷守恒定律和波函数的三个标准条件:有限性、连续性和单值性.

2. 定态方程与一维问题

如果上述薛定谔方程中的势能 $U(\boldsymbol{r})$不含时间,那么方程的解总可以写作

$$\psi=\sum_n c_n\psi_n(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{E_n}{\hbar}t},$$

其中,$\psi_n(\boldsymbol{r})$满足定态薛定谔方程:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi_n+U(\boldsymbol{r})\psi_n=E_n\psi_n.$$

此方程也称为哈密顿算符 $\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+U(\boldsymbol{r})$的本征值方程,$E_n$ 称为算符$\hat{H}$的第 n 个本征值,ψ_n 称为算符的第 n 个本征函数.

特别地,把

$$\psi_n(\boldsymbol{r},t)=\psi_n(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{E_n}{\hbar}t}$$

称为定态波函数,它所描述的电子状态称为定态,当电子处于定态时,其能量具有确定值,而且其概率密度和概率流密度都与时间无关.

当把定态薛定谔方程用于一维空间情形时,有两类问题:其一为束缚态问题,如一维无限深势阱和线性谐振子;其二为散射问题,如势垒贯穿.

一维问题不仅简单,易于处理,而且随着技术的发展,也有实际的应用价值,更为重要的是,一维问题已经展示了量子力学的典型效应,如束缚态能级的量子化和隧道效应等.