量子力学习题指导

程檀生　编著

北京大学出版社
PEKING UNIVERSITY PRESS

量子力学习题指导

程檀生 编著

北京大学出版社
PEKING UNIVERSITY PRESS

图书在版编目(CIP)数据

量子力学习题指导/程檀生编著. —北京:北京大学出版社,2013.11
ISBN 978-7-301-23383-2

Ⅰ. ①量… Ⅱ. ①程… Ⅲ. ①量子力学-高等学校-题解
Ⅳ. ①O413.1-44

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 254546 号

书　　名:量子力学习题指导
著作责任者:程檀生　编著
责 任 编 辑:顾卫宇
标 准 书 号:ISBN 978-7-301-23383-2/O·0956
出 版 发 行:北京大学出版社
地　　址:北京市海淀区成府路 205 号　100871
网　　址:http://www.pup.cn
新 浪 微 博:@北京大学出版社
电 子 信 箱:zpup@pup.cn
电　　话:邮购部 62752015　发行部 62750672　编辑部 62752021
出版部 62754962
印 刷 者:三河市博文印刷厂
经 销 者:新华书店
890 毫米×1240 毫米　A5　7 印张　200 千字
2013 年 11 月第 1 版　2013 年 11 月第 1 次印刷
定　　价:20.00 元

前　言

本习题指导可与作者编著的《现代量子力学基础》(第二版)密切配合使用.事实上,对类似于这些习题的思考、推演和计算,是物理专业高年级大学生和研究生在学习量子力学课程时所必须完成的.

多年的教学实践告诉我们,对这些习题认真的独立思考、推演和计算,对于学生理解和掌握量子力学的新概念,并能熟练运用量子力学所含的特有的数学工具是不可缺的.一直以来我的很多同事和学生鼓励我编写此书,而我们也一直在斟酌:出版该种类型的书,对读者是利大于弊?弊大于利?还是有利无弊?现在,随着量子力学基础知识在各个领域的广为需求,已有很多读者在自学量子力学以充实自己.因此,营造更有效的环境对他们是很重要的.而学习量子力学不做相关的习题是不可能牢固掌握其内容的.而是否会做,是否做得既正确而又简练则是对他们学习成果的真实检验.为此,我们编写这本与教材内容紧密相扣的习题指导,使读者能较好地使用《现代量子力学基础》(第二版)一书,能更快、更好和更准确地抓住量子力学中的新概念和所用的特有的数学,从而逐步树立信心,增加兴趣,实现自己的目的.

但是需要指出的是,为从本书中真正获得收益,达到有利无弊,读者应在学习某章节后,首先对相应的问题周密思考,并勤于自己动手做题,而不要先去读书中的指导和解答.这样才有利于对概念的理解和对公式的正确掌握,并提高相应数学运用的熟练程度,才能真正较牢固地掌握所学内容.只有在你真的不知从何入手,不会求解时,方可翻阅相关的指导和解答,并与自己的思路进行对比以得到启发,这样才能获得真正收益.当然,在你觉得已解决了该问题时,你仍应该去翻阅相关的指导和解答,比较异同,发现最佳解法,使思路得到提升.如你的解法比本书中给出的解法在概念上更清晰或数学运用上更简洁,请一定不要吝惜给予提示,让作者也能有收获和改进.

最后,我衷心感谢我的同事和学生,他们在仔细地使用本书手稿后返回提示信息,而能使本书比较完整些,失误更少些.也要感谢北京大学教材建设基金的资助,以及本书编辑在编辑出版过程中的辛勤工作,使本书能早日与读者见面.

程檀生

2013 年 9 月于北京大学蓝旗营

目　　录

第一章　经典物理学的失效

内容综述

Ⅰ. 辐射的微粒性

普朗克(Planck)假设：无论是黑体辐射也好，还是固体中原子振动也好，它们都是以分立的能量 $nh\nu$ 显示，即能量模式是不连续的，

$$nh\nu = n\hbar\omega, \quad n = 0,1,2,\cdots.$$

$$(h=6.626\times10^{-34}\ \mathrm{J\cdot s},\ \hbar=1.0545\times10^{-34}\ \mathrm{J\cdot s})$$

Ⅱ. 原子结构的稳定性

卢瑟福(Rutherford)的原子的行星模型：原子核处于原子中心，电子绕原子核运动.

但经典物理认为，这样的原子是要坍塌的. 为此，玻尔提出二点假设：

① 原子仅能稳定地处于与分立能量($E_1, E_2, \cdots$)相对应的一系列定态中，不辐射能量.

② 原子从一个定态到另一个定态时，也就是电子从一个轨道跃迁到另一轨道时，将吸收或发射电磁辐射，其辐射的能量等于两定态的能量差，其频率为

$$\nu = (E_m - E_n)/h.$$

为了确定电子的轨道，即定态相应的分立能量，玻尔提出：圆形轨道运动的电子，其角动量是量子化的，

$$mvr = n\hbar \quad (n = 1,2,\cdots).$$

后来，索末菲推广了这一量子化条件，对于任何一个周期运动，有量子化条件

$$\oint p_i \mathrm{d}q_i = nh \quad (n = 1,2,\cdots),$$

q_i：广义坐标；p_i：广义动量.

Ⅲ. 物质粒子的波动性

A. 德布罗意假设：具有一定动量的粒子和一定波长的波相联系

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad 即\ \boldsymbol{p} = \hbar \boldsymbol{k} \quad \left(|\boldsymbol{k}| = \frac{2\pi}{\lambda} \right),$$

称为德布罗意关系.

$$\begin{aligned}\lambda &= \frac{h}{p} = \frac{hc}{[E_k(E_k + 2m_0c^2)]^{1/2}} \\ &= \frac{2\pi \times 197.32\ \mathrm{MeV \cdot fm}}{[E_k(E_k + 2m_0c^2)]^{1/2}} \\ &\overset{m_0c^2 \gg E_k}{\approx} \frac{2\pi \times 197.32\ \mathrm{MeV \cdot fm}}{(2m_0c^2E_k)^{1/2}} \quad (非相对论近似).\end{aligned}$$

B. 物质粒子波动性的实验证据

(1) 当可变电子束(30—600 eV)照射到抛光的镍单晶上，发现在某角度 ϕ 方向有强的反射(即有较多电子被反射，见图 1.1)，而 ϕ 满足

$$a\sin\phi = nh/p.$$

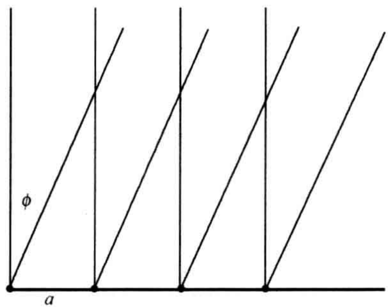

图 1.1　电子的干涉实验

(2) 正如 X 射线照到单晶粉末压成的金箔上，衍射条件为 $2d\sin\theta = n\lambda$ 一样，电子入射满足 $2d\sin\theta = nh/p$，则产生衍射(如图 1.2，d 为晶面间距).

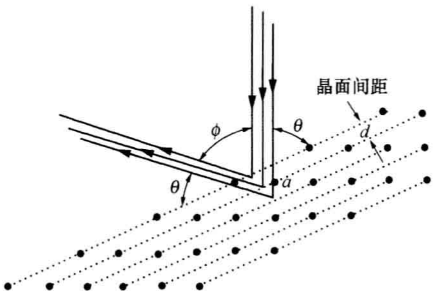

图 1.2 电子的衍射实验

题解和分析

1.1 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 由能量守恒:

$$2h\nu = E^{+} + E^{-},$$

而

$$\lambda = \frac{c}{\nu},$$

所以

$$\lambda = \frac{2hc}{E^{+} + E^{-}}.$$

要求发生转化,光子波长最大,即要求 $E^{+} + E^{-} = 2m_e c^2$ 最小,于是要求光子的波长最大为

$$\lambda = \frac{h}{m_e c} = \frac{hc}{m_e c^2} = \frac{2\pi \times 197.32\ \mathrm{MeV \cdot fm}}{0.511\ \mathrm{MeV}} = 2.426 \times 10^{-10}\ \mathrm{cm}.$$

1.2 求在势阱

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, \\ \infty, & x < 0,\ x > a \end{cases}$$

中运动的粒子的能谱.

解 主要是利用索末菲的量子化条件来解决周期运动的粒子的能谱.

$$E=\frac{p_x^2}{2m}+V,\quad\Rightarrow\quad p_x=\sqrt{2m(E-V)},$$

$$2\int_0^a p_x\mathrm{d}x=2\sqrt{2mE}\cdot a=nh,\quad\Rightarrow\quad E_n=\frac{\hbar^2\pi^2n^2}{2ma^2}.$$

粒子的能谱为

$$E_n=\frac{\hbar^2\pi^2n^2}{2ma^2}.$$

1.3　求在势场

$$V(x)=\begin{cases}-\dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 x}, & x>0,\\ \infty, & x<0\end{cases}$$

中运动的电子的能谱.

解

$$E=\frac{p_x^2}{2m}-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 x},\quad\Rightarrow\quad p_x=\sqrt{2mE+\frac{2me^2}{4\pi\varepsilon_0 x}}.$$

由 $p_x=0$,得(图 1.3)

$$c=\frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0 E},$$

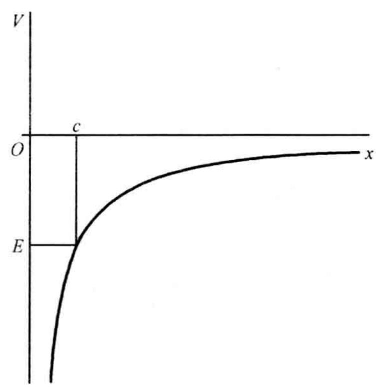

图 1.3　势场

即电子在区间$(0,c)$中作周期运动. 于是有

$$2\times\int_0^c\sqrt{2mE+\frac{2me^2}{4\pi\varepsilon_0 x}}\mathrm{d}x=2\times\sqrt{\frac{2me^2}{4\pi\varepsilon_0}}\times\int_0^c\sqrt{\frac{1}{x}-\frac{1}{c}}\mathrm{d}x$$

$$= 2\times 2\times\sqrt{\frac{2me^2}{4\pi\varepsilon_0}}\times\int_0^c\sqrt{1-\frac{x}{c}}\mathrm{d}\sqrt{x}$$

$$= 2\times 2\times\sqrt{\frac{2me^2}{4\pi\varepsilon_0}}\times\sqrt{c}\int_0^{\frac{\pi}{2}}\cos^2\theta\,\mathrm{d}\theta$$

$$= 2\times\sqrt{\frac{2me^2}{4\pi\varepsilon_0}}\times\sqrt{\frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0 E}}\times\left(\theta+\frac{1}{2}\sin 2\theta\right)\Big|_0^{\frac{\pi}{2}}$$

$$= nh.$$

从而得

$$E_n = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 n^2 a_0},$$

其中，$a_0=\dfrac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2}$.

1.4 计算下列情况的德布罗意波长，指出哪种过程要用量子力学处理：

(1) 能量为 0.025 eV 的慢中子($m_n=1.67\times10^{-24}$ g)，被铀吸收；

(2) 能量为 5 MeV 的 α 粒子穿过原子($m_\alpha=6.64\times10^{-24}$ g)；

(3) 飞行速度为 100 m/s、质量为 40 g 的子弹运动.

解 关键在于求出粒子的德布罗意波长，然后与问题中的特征尺度相比较.

(1)

$$\lambda_n = \frac{hc}{\sqrt{E_k(E_k+2m_n c^2)}}$$

$$= \frac{2\pi\times 197.32\times 10^3\ \mathrm{fm}}{\sqrt{0.025\times(0.025\times10^{-6}+2\times 939.272)}}$$

$$= 1.809\times 10^5\ \mathrm{fm},$$

^{235}U 原子尺度为 6 fm，必须用量子力学处理.

(2)

$$\lambda_\alpha = \frac{hc}{\sqrt{E_k(E_k+2m_\alpha c^2)}}$$

$$= \frac{2\pi\times 197.32\ \mathrm{fm}}{\sqrt{5\times(5+2\times 3727.385)}}$$

$$= 6.420\ \mathrm{fm},$$

比原子尺度 Å(10^5 fm)小很多,所以可以不用量子力学处理.

(3)

$$\begin{aligned}\lambda &= \frac{h}{p}\\ &= \frac{6.626\times 10^{-14}\ \text{fm}}{40\times 10^4}\\ &= 1.656\times 10^{-19}\ \text{fm},\end{aligned}$$

λ 非常小,任何情况下都可用经典力学处理.

1.5 利用德布罗意关系及圆形轨道为各波长的整数倍,给出氢原子能量可能值.

解 设电子绕质子做圆形轨道运动,半径为 R,则

$$2\pi R = n\lambda,\quad \Rightarrow\quad R = \frac{n\lambda}{2\pi} = \frac{nh}{2\pi p},\quad \Rightarrow\quad p = n\frac{\hbar}{R},$$

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 R} = \frac{n^2\hbar^2}{2mR^2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 R},$$

$$\frac{\partial E}{\partial R} = 0,\quad \Rightarrow\quad R = \frac{\hbar^2\cdot 4\pi\varepsilon_0}{me^2}n^2 = a_0 n^2,$$

$$E_n = \frac{n^2}{2m}\frac{\hbar^2}{a_0^2 n^4} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a_0 n^2} = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 a_0 n^2}.$$

1.6 利用中子衍射(衍射公式为 $n\lambda = 2d\sin\theta$)可测量晶体的结构.

(1) 估计中子的速度(若衍射原子平面间的距离 $d=0.2\times10^{-9}$ m, $m_n=1.675\times10^{-27}$ kg);

(2) 估计相应的中子动能和相应的温度.

解 由公式 $n\lambda=2d\sin\theta$ 可推得

$$\lambda \approx d.$$

(1) 由 $p=\frac{h}{\lambda}\approx\frac{h}{d}$,所以,中子的速度为

$$v = \frac{h}{m_n\lambda} = \frac{6.626\times10^{-34}}{0.2\times10^{-9}\times1.675\times10^{-27}}\ \text{m/s} = 1.978\times10^3\ \text{m/s}.$$

(2) 估计相应的中子动能和相应的温度

$$E_k = \frac{1}{2}\times1.675\times10^{-27}\times1.978^2\times10^6\ \text{J} = 3.277\times10^{-21}\ \text{J},$$

$$T = \frac{1}{k} \times 3.277 \times 10^{-21}\ \mathrm{J} = \frac{3.277}{1.38 \times 10^{-23}} \times 10^{-21}\,\mathrm{K} \approx 240\ \mathrm{K}.$$

1.7 利用电子散射能获得最精确的原子核半径，试估计要提供这一结果的电子的动量应多大(原子核的大小≈3 fm)？其相应的能量又是多大？这时 $E\lambda = ?$

解 根据题目要求，电子波长应约等于原子核大小：

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{6.626 \times 10^{-34}}{3 \times 10^{-15}}\ \mathrm{kg \cdot m/s} = 2.21 \times 10^{-19}\ \mathrm{kg \cdot m/s},$$

$$pc = \frac{hc}{\lambda} = \frac{197.32 \times 2\pi}{3}\ \mathrm{MeV} = 413\ \mathrm{MeV}.$$

而电子静止质量为 0.511 MeV，所以 $pc \gg m_e c^2$，于是

$$E\lambda \approx pc\lambda = hc = 197.32\ \mathrm{MeV \cdot fm} \times 2\pi \approx 1240\ \mathrm{MeV \cdot fm}.$$

第二章　波函数与波动方程

内 容 综 述

Ⅰ. 波粒二象性

A. 波函数的玻恩概率诠释——概率波. 如果在 t 时刻,对以波函数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 描述的粒子进行位置测量,测得的结果可以是不同的;而在 $\boldsymbol{r}$—$\boldsymbol{r}+\mathrm{d}\boldsymbol{r}$ 小区域中发现该粒子的概率为

$$P(\boldsymbol{r},t)\mathrm{d}\boldsymbol{r}=|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2\mathrm{d}\boldsymbol{r}$$

$$\left(\text{由于是概率},\int P(\boldsymbol{r},t)\mathrm{d}\boldsymbol{r}=1,\text{即归一化}\right).$$

B. 态叠加原理. 如果 ψ_{a_1} 是体系的一个可能态,ψ_{a_2} 是体系的一个可能态,则

$$\Psi=c_1\psi_{a_1}+c_2\psi_{a_2}$$

也是体系的可能态,并称 Ψ 为 ψ_{a_1} 和 ψ_{a_2} 态的线性叠加态.

C. 动量平均值

$$\overline{\boldsymbol{p}}=\int\psi^*(\boldsymbol{r},t)(-\mathrm{i}\hbar\nabla)\psi(\boldsymbol{r},t)\mathrm{d}\boldsymbol{r},$$

称 $-\mathrm{i}\hbar\nabla$ 为动量算符. 所以,量子力学中物理量(力学量)的描述是用算符来描述.

Ⅱ. 含时间的薛定谔方程

A. 含时间的薛定谔方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t)=\hat{H}(\hat{\boldsymbol{r}},\hat{\boldsymbol{p}},t)\psi(\boldsymbol{r},t),$$

$$E=T+V=H(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t)$$

$$\downarrow$$

$$H(\hat{\boldsymbol{r}},\hat{\boldsymbol{p}},t).$$

B. 量子力学的初值问题. 如 $\hat{H}(\hat{\boldsymbol{r}},\hat{\boldsymbol{p}},t)=\hat{H}(\hat{\boldsymbol{r}},\hat{\boldsymbol{p}})$,即与时间无关,则 t 时刻的解可表为

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(\boldsymbol{r},\hat{\boldsymbol{p}})t/\hbar}\psi(\boldsymbol{r},0)$$
$$=\sum_n c_n u_n(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar}.$$

而 $c_n=\int u_n^*\psi(\boldsymbol{r},0)\mathrm{d}\boldsymbol{r}, \hat{H}(\boldsymbol{r},\hat{\boldsymbol{p}})u_n(\boldsymbol{r})=E_n u_n(\boldsymbol{r})$.

C. 概率守恒方程

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0,$$

其中,

$$\rho=|\psi|^2,$$
$$\boldsymbol{j}=\frac{-\mathrm{i}\hbar}{2m}(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)=\frac{1}{m}\mathrm{Re}(\psi^*\hat{\boldsymbol{p}}\psi),$$

$\boldsymbol{j}$ 称为概率流密度矢.

Ⅲ. 不含时间的薛定谔方程

当 $\hat{H}$ 与 t 无关时,含时间的薛定谔方程的特解为

$$\psi_E(\boldsymbol{r},t)=u_E(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar}.$$

而 $\psi_E(\boldsymbol{r},t)$称为体系的定态,它满足方程

$$\hat{H}(\boldsymbol{r},\hat{\boldsymbol{p}})u_E(\boldsymbol{r})=Eu_E(\boldsymbol{r}).$$

该方程被称为不含时间的薛定谔方程,或称能量本征方程.

Ⅳ. 不确定关系

海森伯指出:当我们去测量客体的动量,如有一测不准度 Δp_x(即客体动量在此区域中的概率很大),则我们在同一时刻预言它的位置,不可能比 $\hbar/\Delta p_x$ 更精确.也就是说,在同一时刻测量动量和位置,其测不准度必须满足

$$\Delta x\cdot\Delta p_x\geqslant\hbar.$$

类似地

$$\Delta y\cdot\Delta p_y\geqslant\hbar,\quad \Delta z\cdot\Delta p_z\geqslant\hbar.$$

这称为海森伯不确定关系.

同时也有能量-时间不确定关系

$$\Delta\omega\cdot\Delta t\geqslant 1,\quad 即\quad \Delta E\cdot\Delta t\geqslant\hbar.$$

题解和分析

2.1 设 $\varphi(x)=Ae^{-\frac{1}{2}a^2x^2}$（$a$ 为常数）.

(1) 求归一化系数 A；

(2) 求 $\bar{x},\bar{p}_x$.

解 (1)

$$A^2\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-a^2x^2}\mathrm{d}x = A^2\,\frac{1}{a}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-y^2}\mathrm{d}y = A^2\,\frac{\sqrt{\pi}}{a} = 1,$$

从而得

$$A = \sqrt{\frac{a}{\sqrt{\pi}}}.$$

(2)

$$\bar{x} = \frac{a}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-a^2x^2}x\mathrm{d}x = 0,$$

$$\bar{p}_x = \frac{a}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}(-\mathrm{i}\hbar)(-a^2x)e^{-a^2x^2}\mathrm{d}x = 0.$$

2.2 一维运动的粒子处于

$$\varphi(x) = \begin{cases} Axe^{-\lambda x}, & x \geqslant 0, \\ 0, & x < 0 \end{cases}$$

的状态中，其中 $\lambda>0$. 求归一化系数 A 和粒子动量的概率密度幅.

解 由

$$A^2\int_0^{\infty}x^2e^{-2\lambda x}\mathrm{d}x = \frac{A^2}{4\lambda^3} = 1,$$

于是有

$$A = 2\lambda^{3/2},$$

$$\begin{aligned}\phi(p_x) &= \frac{2\lambda^{3/2}}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_0^{\infty}xe^{-\lambda x}e^{-\mathrm{i}p_x x/\hbar}\mathrm{d}x \\ &= \frac{2\lambda^{3/2}}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\,\frac{-1}{\left(\lambda+\mathrm{i}\,\frac{p_x}{\hbar}\right)}\left[xe^{-\left(\lambda+\mathrm{i}\frac{p_x}{\hbar}\right)x}\Big|_0^{\infty} - \int_0^{\infty}e^{-\left(\lambda+\mathrm{i}\frac{p_x}{\hbar}\right)x}\mathrm{d}x\right]\end{aligned}$$