高等院校物理学习辅导丛书

Exercise Series in Physics for Higher Education

量子力学——考研辅导教材

Quantum Mechanics

Companion to Post Graduate Examinations

史守华 编著

Shi Shouhua

清华大学出版社

内 容 提 要

本书是量子力学考研辅导用书。全书分为13个单元,每单元由"内容提要"和"典型习题解答"两部分组成。编著《量子力学——考研辅导教材》的目的是为了加深学生对量子力学基本概念、基本规律的理解、掌握与运用,对于物理类及相关专业的学生学好量子力学课程,进而顺利通过攻读硕士研究生量子力学课程的入学考试,是有帮助的。本书也可供量子力学课程教学人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

量子力学——考研辅导教材/史守华编著.—北京:清华大学出版社,2003

(高等院校物理学习辅导丛书)

ISBN 7-302-06992-1

Ⅰ.量… Ⅱ.史… Ⅲ.量子力学—研究生—入学考试—自学参考资料 Ⅳ.O413.1

中国版本图书馆CIP数据核字(2003)第070826号

出 版 者:清华大学出版社 **地 址**:北京清华大学学研大厦
http://www.tup.com.cn **邮 编**:100084
社 总 机:010-62770175 **客户服务**:010-62776969
责任编辑:朱红莲
封面设计:何凤霞
版式设计:刘祎淼
印 刷 者:北京市清华园胶印厂
装 订 者:北京国马印刷厂
发 行 者:新华书店总店北京发行所
开 本:185×230 **印张**:10.25 **字数**:210千字
版 次:2003年11月第1版 2003年11月第1次印刷
书 号:ISBN 7-302-06992-1/O·314
印 数:1~3000
定 价:19.00元

FOREWORD

前言

量子力学是物理系本科生各专业、包括与物理相关专业的重要基础理论课。全国各高等院校、科研院所物理类专业硕士研究生入学考试，几乎都把量子力学列为必考科目。为了辅导学生考研，作者在安徽大学物理系任教期间，参阅了大量资料，尤其是追踪近年来各高等院校、科研院所硕士研究生入学考试中量子力学试题的有关信息，对习题进行了认真的筛选。在筛选过程中，既注意习题的覆盖面，同时也充分考虑了习题的难易程度，编写成《量子力学》——考研辅导讲义。试用了几年，效果很好。本书就是在该讲义的基础上经进一步整理而成的。

全书分成 13 个单元，每单元分为“内容提要”和“典型习题解答”两部分，难度较大的少数习题前加上了“ * ”号。内容提要便于读者从整体内容上把握应掌握的基本概念、规律及方法，典型习题解答有助于学生掌握计算方法。

本书适用于物理类及相关专业的本科生考研复习之用，也可供讲授和学习量子力学的师生参考。

南京大学柯善哲教授和肖福康教授仔细审阅了该书的初稿，并提出了宝贵的修改意见，作者在此向他们表示深深的谢意。

由于作者水平有限，错误和不足之处在所难免，敬请原谅，并欢迎批评指正。

编者

2003 年 3 月于安徽大学

目录

CONTENTS

CHAPTER 1

状态和波函数 1

【内容提要】

1. 量子力学中用波函数描写微观体系的状态。

2. $\psi^* \psi d\tau = |\psi|^2 d\tau$ 是状态用 ψ 描写的粒子在体积元 $d\tau$ 内的几率(设 ψ 是归一化的)。

3. 态叠加原理:设 $\psi_1, \psi_2, \cdots \psi_n \cdots$ 是体系的可能状态,那么,这些态的线性叠加

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n$$

也是体系的一个可能状态。

4. 波函数随时间的变化规律由薛定谔方程给出:

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

当势场 $V(\boldsymbol{r})$ 不显含 t 时,其解是定态解 $\psi(\boldsymbol{r}, t) = \psi(\boldsymbol{r}) e^{-iEt/\hbar}$,$\psi(\boldsymbol{r})$ 满足定态薛定谔方程

$$H\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 \psi + V(\boldsymbol{r}, t)\right]\psi = E\psi$$

定态薛定谔方程即能量算符的本征方程。

5. 波函数的归一化条件:$\int_{(全)} |\psi|^2 d\tau = 1$。相对几率分布:$\psi(\boldsymbol{r}) \sim c\psi(\boldsymbol{r})$,波函数常数因子不定性;相位因子不定性。

6. 波函数一般应满足三个基本条件:连续性,有限性,单值性。

7. 几率流密度 $\boldsymbol{j} = \frac{i\hbar}{2\mu}(\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi)$ 与几率密度 $\rho = \psi^* \psi$ 满足连续性方程

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

【典型习题解答】

根据方程解题

量子力学(QM)描述方式的最大特点,是微观系统的运动状态用波函数完全描写。而波函数是几率振幅,因此寻求波函数便是 QM 里最为重要的任务。解波函数满足的 Schrödinger. eq (简记为 S. eq,下同)是获得波函数的一条最基本的途径。但这时要充分认识边界条件(包括连接条件)的重要性。

1.1 证明具有不同能量的两个束缚态,其波函数的重叠积分为零。

解:设 ψ_1,ψ_2 分别为对应于能量 E_1 和 E_2 的束缚态波函数,$E_1\neq E_2$,要证明等式

$$\int \mathrm{d}\tau\psi_1^*(\boldsymbol{r})\psi_2(\boldsymbol{r}) = 0$$

凡这种与具体位势无关的结论,第一个选择是从 S. eq(薛定谔方程)出发。ψ_1,ψ_2 满足的两个定态 S. eq 为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_1(\boldsymbol{r})+V\psi_1(\boldsymbol{r})=E_1\psi_1(\boldsymbol{r}) \tag{1}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_2(\boldsymbol{r})+V\psi_2(\boldsymbol{r})=E_2\psi_2(\boldsymbol{r}) \tag{2}$$

$\psi_2^*\times(1)-\psi_1^*\times(2)$,再对空间积分:$\int\mathrm{d}\tau$,得

$$(E_1-E_2)\int\mathrm{d}\tau\psi_1^*(\boldsymbol{r})\psi_2(\boldsymbol{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\int\mathrm{d}\tau(\psi_2\nabla^2\psi_1^*-\psi_1^*\nabla^2\psi_2)$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\int\mathrm{d}\tau\nabla\cdot(\psi_2\nabla\psi_1^*-\psi_1^*\nabla\psi_2) = -\frac{\hbar^2}{2m}\oint(\psi_2\nabla\psi_1^*-\psi_1^*\nabla\psi_2)\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S}$$

$=0$ (束缚态边条件:$r\to\infty$处,$\psi_1\to 0,\psi_2\to 0$)

如果 $E_1\neq E_2$,则有

$$\int\mathrm{d}\tau\psi_1^*(\boldsymbol{r})\psi_2(\boldsymbol{r}) = 0$$

亦即 ψ_1,ψ_2 正交或有零的重迭积分。

1.2 已知描述单粒子一维束缚状态的两个本征函数分别为

$$\psi_1=A\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha x^2}$$

$$\psi_2=B(x^2+bx+c)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha x^2}$$

试求这两个状态的能级间隔。

解：ψ_1，ψ_2 都满足定态 S. eq：

$$\psi_1''+\frac{2m}{\hbar^2}(E_1-V)\psi_1=0 \tag{1}$$

$$\psi_2''+\frac{2m}{\hbar^2}(E_2-V)\psi_2=0 \tag{2}$$

$\psi_2\times(1)-\psi_1\times(2)$，得

$$(E_2-E_1)\psi_1\psi_2=\frac{\hbar^2}{2m}(\psi_2\psi_1''-\psi_1\psi_2'') \tag{3}$$

式(3)对任意 x 都成立，找一个波函数的非零点，例如 $x=0$，在方程(3)两边取值，可求得

$$E_2-E_1=\frac{1}{ABc}\frac{\hbar^2}{2m}(-2AB)=-\frac{\hbar^2}{mc}$$

1.3 质量为 m 的粒子处于能量为 E 的本征态，波函数为 $\psi(x)=Axe^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$，问粒子在什么样的位势中运动？

解：这也是直接应用 S. eq 解题的例子，S. eq 联系了 $m,\hbar,V,E$ 和 $\psi(x)$，知道了其中一部分，就可以求出其他部分。本题中要求解位势。从 S. eq

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x)+V(x)\psi(x)=E\psi(x)$$

看，只要把题给的能量本征函数 $\psi(x)$代入运算，即可得解：

$$V(x)=E+\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\psi''(x)}{\psi(x)}=E+\frac{\hbar^2}{2m}(\alpha^4x^2-3\alpha^2)$$

利用连接条件定能级

定态问题中常见的一类问题是确定系统的允许能量，最一般的办法是解 S. eq，然后利用边界条件和连接条件来确定能量本征值。常用的边界条件有下面几种：

(1) 束缚态中，粒子局限在有限范围内运动，因此在无限远处找到粒子的几率为零，也即波函数在无限远处消失。

(2) 在位势无限高处，有限能量的粒子去不了，故那里的波函数为零。

(3) 在位势作有限跳跃的地方，波函数及其导数也都分别连续。

(4) 对于 δ 型位势，波函数导数有跃变，而波函数本身仍连续 ：

$$\left[V(x)=\pm\gamma\delta(x)\text{，则 }\psi'(0^+)-\psi'(0^-)=\pm\frac{2m\gamma}{\hbar^2}\psi(0)\right]$$

1.4 粒子在位势

$$V(x)=\begin{cases}\infty, & x\leqslant 0\\ -V_0, & 0<x<a, \quad V_0>0\\ 0, & x\geqslant a\end{cases}$$

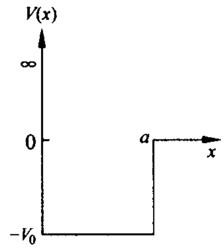

图 1.1

中运动(如图 1.1),求至少存在一个束缚态的条件。

解：显然,在 $x<0$ 处,$\psi=0$;在 $0<x<a$ 区域,束缚态波函数为

$$\psi_1(x)=A\sin(kx+\varphi)$$

$$k=\sqrt{2m(E+V_0)}/\hbar, \quad E<0 \tag{1}$$

利用边条件 $\psi(0)=0$,知 $\varphi=0$。

在 $x>a$ 区域,一般解为

$$\psi_2(x)=Be^{-k'x}+B'e^{k'x}$$

$$k'=\sqrt{-2mE}/\hbar \tag{2}$$

由于讨论束缚态,故当 $x\to\infty$ 时,$\psi\to 0$。由此定出 $B'=0$。于是

$$\left.\begin{aligned}\psi_1(x)&=A\sin kx, \quad 0<x<a\\ \psi_2(x)&=Be^{-k'x}, \quad a\leqslant x\end{aligned}\right\} \tag{3}$$

在 $x=a$ 处,位势只有有限跃变,故波函数及其导数分别连续,或波函数对数导数连续：

$$(\ln\psi_1(x))'\Big|_{x=a}=(\ln\psi_2(x))'\Big|_{x=a} \tag{4}$$

式(3)代入式(4),得

$$ka\cot ka=-k'a \tag{5}$$

但 k,k' 不独立。由式(1),(2)可得

$$(ka)^2+(k'a)^2=\frac{2ma^2V_0}{\hbar^2} \tag{6}$$

令 $\xi=ka$,$\eta=k'a$,则式(5),(6)化为

$$\left.\begin{aligned}\eta&=-\xi\cot\xi\\ \eta^2+\xi^2&=2ma^2V_0/\hbar^2\end{aligned}\right\} \tag{7}$$

此方程至少有一个解的条件为：

$$\frac{2ma^2V_0}{\hbar^2}\geqslant\left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \tag{8a}$$

或

$$8ma^2V_0/\pi^2\hbar^2\geqslant 1 \tag{8b}$$

这是对粒子质量 m,位阱深 V_0 和宽 a 的一个限制。

节点法

用节点法解题的依据是**节点定理**：对于一维束缚态而言，在基本区域内（不算边界点）基态无节点（即波函数的零点），第 n 个激发态有 n 个节点。对于高维情形，经常存在对称性，因而可以化为等效的一维问题。所以这个定理的适用范围还是很广的。利用节点定理，我们可以确定波函数零点，判定量子数，排列能级顺序，判定能量本征值等。

1.5　今有两个波函数

$$\psi_1 = A e^{-\alpha^2 x^2/2}$$

$$\psi_2 = B(x^2 + bx + c) e^{-\alpha^2 x^2/2}$$

都对应于能量本征态，则它们对应的能级哪个高？是否相邻能级？

解：我们可以直接从 S. eq 出发求出这两个态的能量之差，但无法判定题目中提出的两个问题。利用节点定理很容易解决这个问题。

ψ_1 无零点，也即没有节点，它对应的态是基态，因而能量最低。ψ_2 中可能有两个节点，因为解 $x^2 + bx + c = 0$，得在一定条件下 ψ_2 有两个节点：

$$x = \frac{1}{2}\left(-b \pm \sqrt{b^2 - 4c}\right)$$

由于题目给定 ψ_2 为能量本征态，故必有两节点，于是可以判定 ψ_2 描写的是第二激发态，能量高于 ψ_1 描述的基态。并且我们知道，这里的数 c 必定要小于 $b^2/4$，而 ψ_1，ψ_2 描写的态不是相邻能级的态，它们之间还有一个能量本征态，具有一个节点。

如果题目中没有给定 ψ_2 为能量本征态，则也可判定它所对应的能量高，因为它可能是基态、第一激发态和第二激发态的组合（依赖于 b 和 c 的大小）。因此在此态中的能量平均值也要高于 ψ_1 描写的状态的能量平均值。

1.6　测得氢原子的一个能量本征态中，轨道角动量为零（s 态），而有两个同心球面是波函数的零点。求此氢原子的能量。

解：三维有心力场中的系统的本征函数可以写为

$$\psi(r,\theta,\varphi) = \frac{u(r)}{r} Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

其中 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 为球谐函数，而 $u(r)$ 满足方程

$$u''(r) + \left[\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] u(r) = 0$$

这是相当于在 $(0,\infty)$ 范围内的一维运动，其行为可用径向量子数 n_r 描述。从 ψ 函数的形式看，角度方向的零点由球谐函数 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 提供，而径向的零点由 $u(r)$ 提供。于是

根据节点定理，对于固定的 l，径向基态($n_r=0$)无节点，第 k 个径向激发态($n_r=k$)有 k 个节点(同心球面)。

现在再来考虑氢原子(由于它具有高简并度，所以讨论问题时要仔细些)。由于是 s 态，$l=0$；然后由径向有两个节点知径向量子数 $n_r=2$。故而我们得到氢原子的主量子数为

$$n=n_r+l+1=2+0+1=3$$

于是全部量子数为$(n,l,m)=(3,0,0)$，其相应的能量值为

$$E_3=-\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{3^2}=-\frac{\mu e^4}{18\hbar^2}=-1.5(\mathrm{eV})$$

根据几率守恒定律解题

几率守恒定律是 S. eq 的一个基本结果，它的正确性依赖于 Hamilton 算符的厄米性。利用这个守恒律可以得到体系的一般性质。在应用这个定律时，须注意这个定律的多种形式、几率和几率流的一些性质。

1.7　证明：如果量子系统的态是可归一化的，则一旦归一化，它在任何时候也都是归一化的。

解：设描述此态的波函数为 $\psi(\boldsymbol{r},t)$，它可归一化，意味着积分 $\int d\tau\psi^*\psi$ 是有界的。于是分析在 $r=|\boldsymbol{r}|$ 很大处的行为可知当 $r\to\infty$，必有 $\psi\to0$。

由几率守恒定律

$$\partial_t\rho+\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0$$

对空间积分，得

$$\partial_t\int d\tau\psi^*\psi+\int d\tau\,\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0$$

或

$$\partial_t\int d\tau\psi^*\psi=-\int d\tau\,\nabla\cdot\boldsymbol{j}=-\oint_s\boldsymbol{j}\cdot d\boldsymbol{S}$$

其中 $\boldsymbol{S}$ 为无限远处的封闭曲面，$d\boldsymbol{S}$ 为面元。由于 $\boldsymbol{j}$ 中总有 ψ 或 ψ^* 这一因子，在无限远处它变为零，故 $\oint_s\boldsymbol{j}\cdot d\boldsymbol{S}=0$，从而

$$\partial_t\int d\tau\,\psi^*\psi=0$$

亦即 $\int d\tau\psi^*\psi$ 不显含时间。故当某一时刻归一化了，以后在任何时刻它也不变。这也说

明了总几率的守恒性质。

1.8 证明：若位势不依赖于时间，系统处于定态中，则其几率流密度不随时间变化。

解：几率流密度的一般表达式为

$$\boldsymbol{j}=-\frac{i\hbar}{2m}[\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*]-\frac{q}{mc}\psi^*\boldsymbol{A}\psi \tag{1}$$

对于定态 ψ 而言，它随时间的变化关系为

$$i\hbar\partial_t\psi=E\psi$$

E 为能量，是实数。于是

$$-i\hbar\partial_t\psi^*=E\psi^*$$

$$\begin{aligned}\partial_t\boldsymbol{j}&=-\frac{i\hbar}{2m}[(\partial_t\psi^*)\nabla\psi+\psi^*\nabla(\partial_t\psi)-(\partial_t\psi)\nabla\psi^*-\psi\nabla(\partial_t\psi^*)]\\&\quad-\frac{q}{mc}[(\partial_t\psi^*)\boldsymbol{A}\psi+\psi^*(\partial_t\boldsymbol{A})\psi+\psi^*\boldsymbol{A}(\partial_t\psi)]\\&=\frac{1}{2m}[E\psi^*\nabla\psi-\psi^*\nabla(E\psi)+E\psi\nabla\psi^*-\psi\nabla(E\psi^*)]\\&\quad-\frac{q}{mc}\left[\frac{1}{-i\hbar}E\psi^*\boldsymbol{A}\psi+\frac{1}{i\hbar}\psi^*\boldsymbol{A}E\psi\right]=0\end{aligned}$$

这里已用了$\partial_t\boldsymbol{A}=0$。

从几率流密度的表达式(1)可看出，如果不存在矢量势，则对**实函数**而言，几率流一定为零。例如一维束缚态，三维的 S 态束缚态等。

等效一维法

在量子体系的运动中，常常有这样一类运动，它们是在高维空间进行的。但由于受到一定的约束，其实际的运动自由度只有一个。这时常用的一种处理方法是把约束化掉，转变为等效的一维运动求解。这里的关键是如何写下等效的哈密顿算符，从而把运动完全描述出来。

*1.9 粒子的质量为 μ，被限制在半径为 R，螺距为 d 的螺旋线轨道上运动，求允许的能量值。

解：粒子在三维空间运动，但由于只能沿螺旋线走，实际上只要有一个合适的坐标，就可能把运动完全确定下来，因而是个一维运动。

选用柱坐标(ρ,φ,z)，$\rho=R$ 为定值，一般柱坐标 φ 取值范围是 $0\sim2\pi$。在这里如果 φ

从$-\infty\to+\infty$,则坐标z可与角度φ之间建立一个对应关系：

$$z=d\frac{\varphi}{2\pi},\quad -\infty<\varphi<+\infty$$

螺旋线上的线元平方

$$(\mathrm{d}l)^2=(R\mathrm{d}\varphi)^2+(\mathrm{d}z)^2=\left[R^2+\left(\frac{d}{2\pi}\right)^2\right](\mathrm{d}\varphi)^2$$

这样，在螺旋线上的梯度算符为

$$\nabla=\frac{1}{\sqrt{R^2+\frac{d^2}{4\pi^2}}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi}\boldsymbol{l}_0$$

其中$\boldsymbol{l}_0$为螺旋线切向单位矢量。于是可得粒子在螺旋线上“自由”运动的哈密顿算符为

$$H=\frac{p^2}{2\mu}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{1}{R^2+\frac{d^2}{4\pi^2}}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varphi^2}=\frac{L_\varphi^2}{2I}$$

$$L_\varphi=-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varphi},\quad I=\mu\left(R^2+\frac{d^2}{4\pi^2}\right)$$

可见，形式上如同一个转动惯量为I的转动刚体。当然，因为角坐标φ不只在$[0,2\pi]$内，而是在$-\infty\to+\infty$范围。解定态 S. eq 得波函数

$$\phi(\varphi)=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\varphi}$$

其中

$$k^2=2\mu\left(R^2+\frac{d^2}{4\pi^2}\right)E/\hbar^2$$

从而解出能量

$$E=\frac{\hbar^2k^2}{2\mu\left(R^2+\frac{d^2}{4\pi^2}\right)}$$

它有连续谱，确实相当于自由运动，不过等效质量变了。

在解 S. eq 的过程中，除了以上的一些方法外，通常解微分方程的常规方法，例如分离变量法、幂级数法、格林函数法等也是常用的。与数学不同的是，我们时时要考虑所求解的物理意义，要从一般解里挑出适合于所给物理条件的解来。例如在用级数法求解时，为了得到收敛的、满足边界条件的解，经常要令级数截断，这样就会导致一些力学量(如能量)的量子化。

*1.10 粒子在一半径为R的圆周上“自由”运动(没有其他位势)，求它的能量允许值和相应的波函数。

解：运动本身是个二维平面运动，哈密顿算符的一般形式为

$$H=\frac{1}{2\mu}(p_x^2+p_y^2)+V(x,y)$$

这里
$$V(x,y)=\begin{cases}0, & x^2+y^2=R^2\\ \infty, & x^2+y^2\neq R^2\end{cases}$$

但实际上，粒子的运动自由度只有一个，因为它离中心的距离保持常数，只有角度方向可以变化。显然，此时采用极坐标系便于解题。

$$x=r\cos\varphi,\quad y=r\sin\varphi$$

$$V(x,y)=\begin{cases}0, & r=R\\ \infty, & r\neq R\end{cases}$$

与角度 φ 无关。动能算符为

$$\frac{1}{2\mu}(p_x^2+p_y^2)=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$

定态 S. eq 为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)+V(r)\right]\psi(r,\varphi)=E\psi(r,\varphi)$$

由于位势只依赖于向径 r，故可分离变量。令

$$\psi(r,\varphi)=u(r)\phi(\varphi)$$

则 $u(r)$ 与 $\phi(\varphi)$ 各自满足方程

$$r^2u''+ru'-\frac{2\mu r^2}{\hbar^2}V(r)u+\left(\frac{2\mu Er^2}{\hbar^2}-\sigma\right)u=0 \tag{1}$$

$$\phi''(\varphi)+\sigma\phi(\varphi)=0 \tag{2}$$

由方程(1)可知，$V(r)$ 只在 $r=R$ 时有限，故 $u(r)=0, r\neq R$。而在此圆周上，位能和径向动能皆为零，故可得

$$\sigma=\frac{2\mu ER^2}{\hbar^2},\quad u=\begin{cases}c, & r=R\\ 0, & r\neq R\end{cases}$$

代入方程(2)，它可改写为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu R^2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varphi^2}\phi(\varphi)=E\phi(\varphi)$$

其一般解为（只需讨论 $E>0$，否则无周期解）

$$\phi=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}+B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\varphi} \tag{3}$$

$$m=\sqrt{2IE}/\hbar,\quad I=\mu R^2 \tag{4}$$

为确定 m 范围（既定能谱），可利用周期性。由于圆周封闭，为了使几率确定，必须令（波函数单值）

$$\phi(\varphi)=\phi(\varphi+2\pi)$$

代入式(3)，得

$$Ae^{im\varphi}(e^{im\cdot 2\pi}-1)=Be^{-im\varphi}(1-e^{-im\cdot 2\pi})$$

或
$$e^{im\varphi}(A-Be^{-i2m(\varphi+\pi)})\ (e^{im2\pi}-1)=0$$

此式有非零 A,B 解的条件是

$$m=0,\pm1,\pm2,\cdots$$

因此，波函数 ϕ 为（已归一化）

$$\phi(\varphi)=\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{im\varphi},m=0,\pm1,\pm2,\cdots$$

而相应的能量
$$E_m=\frac{\hbar^2}{2I}m^2=\frac{\hbar^2}{2\mu R^2}m^2$$

基态无简并，而激发态是二重简并的。

从 $\phi(\varphi)$ 满足的方程(2)可以看出，它实际上是 $\hat{H}$ 为

$$H(\varphi)=\frac{-\hbar^2}{2\mu R^2}\frac{d^2}{d\varphi^2}=\frac{L^2}{2I},\quad L=-i\hbar\frac{d}{d\varphi}$$

的系统的定态 S. eq。因此 $H(\varphi)$ 也就是本题中的等效一维 $\hat{H}$（我们也可从二维 $H(r,\varphi)$——极坐标下的 $\hat{H}$，根据位势 $V(r)$ 的意义把它读出来）。

CHAPTER 2

一 维 运 动 2

【内容提要】

1. 一维无限深方势阱 $V(x)=\begin{cases}0, & 0<x<a \\ \infty, & x\leqslant 0 \text{ 或 } x\geqslant a\end{cases}$

本征值 $$E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2},\quad n=1,2,3,\cdots$$

本征函数 $$\psi_n=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi x}{a}, & 0<x<a \\ 0, & x\leqslant 0 \text{ 或 } x\geqslant a\end{cases}$$

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

则本征值 $$E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8\mu a^2}$$

本征函数 $$\psi_n=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{1}{a}}\sin\dfrac{n\pi x}{2a}, \quad n\text{ 为偶数}, & |x|<a \\ 0, & |x|\geqslant a\end{cases}$$

$$\psi_n=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{1}{a}}\cos\dfrac{n\pi x}{2a}, \quad n\text{ 为奇数}, & |x|<a \\ 0, & |x|\geqslant a\end{cases}$$

2. 三维无限深方势阱 $V=\begin{cases}0, & 0<x<a,0<y<b,0<z<c \\ \infty, & \text{其余}\end{cases}$

本征值 $$E_{n_1n_2n_3}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{n_1^2}{a^2}+\frac{n_2^2}{b^2}+\frac{n_3^2}{c^2}\right),n_1,n_2,n_3=1,2,3,\cdots$$

本征函数 $$\psi_{n_1n_2n_3}(\boldsymbol{r})=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{8}{abc}}\sin\dfrac{n_1\pi x}{a}\sin\dfrac{n_2\pi x}{b}\sin\dfrac{n_3\pi x}{c}, & 阱内\\ 0, & 阱外\end{cases}$$

3. 一维谐振子 $$V=\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2$$

本征值 $$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\quad n=0,1,2,\cdots$$

本征函数 $$\psi_n=N_n\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2/2}H_n(\alpha x)$$

$$N_n=\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^nn!}},\quad \alpha=\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}$$

$$x\psi_n=\frac{1}{\alpha}\left[\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}+\sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}\right]$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_n=\alpha\left[\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}-\sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}\right]$$

宇称 $$\psi_n(-x)=(-1)^n\psi_n(x)$$

4. 势垒贯穿

方形势垒 $$V=\begin{cases}V_0, & 0<x<a\\ 0, & x\leqslant 0 \text{ 或 } x\geqslant a\end{cases}$$

当$\frac{a}{\hbar}\sqrt{2\mu(V_0-E)}\gg 1$时,透射系数为

$$T=T_0\mathrm{e}^{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2\mu(V_0-E)}}$$

任意形状的势垒 $V(x)$,透射系数为

$$T=T_0\mathrm{e}^{-\frac{2}{\hbar}\int_a^b\sqrt{2\mu(V(x)-E)}\,\mathrm{d}x}$$

5. δ 势 $$V(x)=\pm\gamma\delta(x)\quad(\gamma>0)$$

跃变条件 $$\psi'(0^+)-\psi'(0^-)=\pm\frac{2\mu\gamma}{\hbar^2}\psi(0)$$

6. 束缚态、非束缚态及其能级特点

7. 简并、简并度

【典型习题解答】

2.1 粒子在深度为 V_0,宽度为 a 的直角势阱(图 2.1)中运动,求:

① 阱口刚好出现一个束缚态能级(即 $E\approx V_0$)的条件;

② 束缚态能级总数,并和无限深势阱作比较。

解：① $E<V_0$ 时为束缚态，$E>V_0$ 时为游离态。

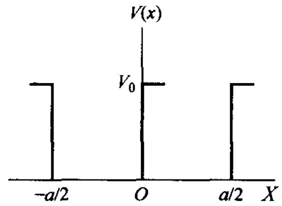

图 2.1

定态 S.eq 为

$$\psi''+\frac{2m}{\hbar^2}[E-V(x)]\psi=0 \tag{1}$$

令 $$k=\sqrt{2mV_0}/\hbar,\quad \beta=\sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar \tag{2}$$

则式(1)可写成

$$\psi''+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi=0,\quad |x|\leqslant a/2(\text{阱内}) \tag{3}$$

$$\psi''-\beta^2\psi=0,\quad |x|\geqslant a/2(\text{阱外}) \tag{4}$$

由于束缚态边条件($|x|\to\infty$处，$\psi\to 0$)，式(4)的解应取为

$$\psi(x)=Ce^{-\beta|x|},\quad |x|\geqslant a/2 \tag{5}$$

当阱口刚好出现束缚态能级时，$E\approx V_0$，$\beta\approx 0$。因此，由(5)式得

$$\psi'(x)=\pm\beta Ce^{-\beta|x|}\approx 0,\quad |x|\geqslant a/2 \tag{6}$$

阱内波函数由式(3)解出，当 $E\approx V_0$ 时，解为：

$$\left.\begin{array}{ll}\text{偶宇称} & \psi(x)=\cos kx\\ \text{奇宇称} & \psi(x)=\sin kx\end{array}\right\}\quad |x|\leqslant a/2 \tag{7}$$

阱内、外 ψ 和 ψ' 应分别连续，而由式(6)可知，$x=a/2$ 处 $\psi'=0$，将这一条件应用于式(7)，得

偶宇称 $$\sin\frac{ka}{2}=0,\quad ka=2\pi,4\pi,6\pi,\cdots \tag{8a}$$

奇宇称 $$\cos\frac{ka}{2}=0,\quad ka=\pi,3\pi,5\pi,\cdots \tag{8b}$$

亦即阱口刚好出现束缚态能级的条件为

$$ka=n\pi,\quad n=1,2,3,\cdots \tag{9}$$

即 $$2mV_0a^2/\hbar^2=n^2\pi^2 \tag{10}$$

② 一维势阱至少有一个束缚能级。因此，如果 $2mV_0a^2/\hbar^2<\pi^2$，只存在一个束缚态，偶宇称(基态)；如果 $2mV_0a^2/\hbar^2=\pi^2$，除基态外，阱口将再出现一个奇宇称态能级，共两个能级；如果 $2mV_0a^2/\hbar^2=(2\pi)^2$，阱口出现的将是第三个能级(偶宇称)……依此类推。由此可知，对于给定的 V_0a^2，束缚态能级总数为

$$N=1+\left[\frac{a}{\pi\hbar}\sqrt{2mV_0}\right] \tag{11}$$

符号[A]表示不超过 A 的最大整数。

当粒子在宽度为 a 的无限深势阱中运动时，能级为

$$E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2},\quad n=1,2,3,\cdots$$