科学版

大学物理习题精解系列

量子力学教程
习题剖析

孙婷雅 编

科学出版社
www.sciencep.com

内 容 简 介

本书是《量子力学教程》(曾谨言著)书中习题的解答.约一半习题可以在《量子力学习题精选与剖析》(钱伯初、曾谨言著)和《量子力学》(曾谨言著)卷Ⅰ、Ⅱ中找到解答.经征得作者同意,这部分作为附录收在本书后部.

全书内容大致可分为四部分:(1)第1,3,4章是为加强对量子力学基本概念和原理的理解;(2)第2,5,6章是简单应用题;(3)第7,8,9章则涉及量子力学的代数解法;(4)第10,11,12章是近似方法的练习.

本书可供量子力学教师和学习量子力学的读者参考.

图书在版编目(CIP)数据

量子力学教程习题剖析/孙婷雅编. —北京:科学出版社,2004.1
(大学物理习题精解系列)
ISBN 7-03-012115-5

Ⅰ.量… Ⅱ.孙… Ⅲ.量子力学-高等学校-解题 Ⅳ.O413.1-44

中国版本图书馆CIP数据核字(2003)第079766号

责任编辑:张邦固 / 责任校对:陈丽珠
责任印制:安春生 / 封面设计:陈 敬

科学出版社 出版
北京东黄城根北街16号
邮政编码:100717
http://www.sciencep.com
丽源印刷厂 印刷
科学出版社发行 各地新华书店经销
*
2004年1月第一版 开本:B5(720×1000)
2004年1月第一次印刷 印张:9 3/4
印数:1—5000 字数:183 000

定价:16.00元

(如有印装质量问题,我社负责调换〈新欣〉)

序 言

2002 年秋，编者有幸作为访问学者到北京大学物理学院进修和工作. 选听了普通物理、理论物理等基础课和基础理论课. 北京大学许多老师高水平的教学、诲人不倦的精神和深入浅出的讲课风范，给我留下深刻的印象. 特别是在 2003 年春，曾谨言老师给清华大学基础科学班（本科二下）讲授量子力学课，我参加了全部教学环节. 曾老师不仅教学严谨，讲课富于启发性，而且鼓励同学们勤于思考，敢于超过老师. 基础科学班一些同学在曾老师的鼓励下，边学习边运用，写出了一些质量很高的研究报告，其中有的已经（或即将）发表在重要学术期刊上. 这一届量子力学教学，选用了科学出版社 2003 年出版的《量子力学教程》为教材. 在曾老师的鼓励下，我对该教程中的习题做了解答，同时参照了基础科学班一些同学所做的习题，编写了这本《量子力学教程习题剖析》. 为此，我要感谢基础科学班这些同学，其中有王雪、胡盛穗、郑维喆、王岚君、王丰、张剑、汪源等同学. 对《量子力学教程》中的习题，凡是能在《量子力学习题精选与剖析》（钱伯初、曾谨言著，科学出版社，1999 年）中找到解答的，本书给出在该书中的出处，或给出答案，读者可径直去查阅该书，或者看本书附录.

作为来自我国西部的地方院校的教师，我深感这样的资料，用作教师教学的辅助和参考，可能是很有裨益的. 现由科学出版社出版，以飨各位同行. 由于编者水平和教学经验所限，解答中肯定有不完善，不妥当，甚至错误的地方，希望阅览和使用本书的读者提出宝贵的修改意见，以便重印时进行修改和补充.

在北京大学这一年的访问学者经历，使我终生难忘. 编者对曾谨言老师的鼓励和帮助表示衷心感谢.

孙婷雅

2003 年 7 月

目　录

第 1 章　波函数与 Schrödinger 方程

1.1　设质量为 m 的粒子在势场 $V(\boldsymbol{r})$ 中运动.

(a) 证明粒子的能量平均值为 $E=\int W \mathrm{d}^3 r$,式中

$$W=\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi+\psi^* V\psi \qquad (能量密度)$$

(b) 证明能量守恒公式

$$\frac{\partial W}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{s}=0$$

$$\boldsymbol{s}=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\nabla\psi+\frac{\partial\psi}{\partial t}\nabla\psi^*\right) \quad (能流密度)$$

证明

(a) 粒子能量平均值为(设 ψ 已归一化)

$$E=\int\psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)\psi\mathrm{d}^3 r=\overline{T}+\overline{V}$$

$$\overline{V}=\int\psi^* V\psi\mathrm{d}^3 r \qquad (势能平均值)$$

$$\overline{T}=\int\psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right)\psi\mathrm{d}^3 r \quad (动能平均值)$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\int[\nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi)-(\nabla\psi^*)\cdot(\nabla\psi)]\mathrm{d}^3 r$$

其中第一项可化为面积分,对于归一化的波函数,可以证明此面积分为零(见《量子力学教程》,18 页脚注),所以

$$\overline{T}=\frac{\hbar^2}{2m}\int\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi\mathrm{d}^3 r$$

(b) 按能量密度 W 和能流密度 $\boldsymbol{s}$ 的定义

$$\frac{\partial W}{\partial t}=\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla\dot{\psi}^*\cdot\nabla\psi+\nabla\psi^*\cdot\nabla\dot{\psi})+\dot{\psi}^* V\psi+\psi^* V\dot{\psi}$$

$$=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla\cdot(\dot{\psi}^*\cdot\nabla\psi+\dot{\psi}\nabla\psi^*)-(\dot{\psi}^*\nabla^2\psi+\dot{\psi}\nabla^2\psi^*)\right)+\dot{\psi}^* V\psi+\psi^* V\dot{\psi}$$

$$=-\nabla\cdot\boldsymbol{s}+\dot{\psi}^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)\psi+\dot{\psi}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)\psi^*$$

$$= -\nabla \cdot \boldsymbol{s} + \mathrm{i}\hbar\dot{\psi}^* \dot{\psi} - \mathrm{i}\hbar\dot{\psi}\dot{\psi}^* = -\nabla \cdot \boldsymbol{s}$$

因此

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{s} = 0$$

1.2 考虑单粒子的 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{r},t) + [V_1(\boldsymbol{r}) + \mathrm{i}V_2(\boldsymbol{r})]\psi(\boldsymbol{r},t)$$

V_1 与 V_2 为实函数.

(a) 证明粒子的概率(粒子数)不守恒;

(b) 证明粒子在空间体积 τ 内的概率随时间的变化为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\iiint_\tau \mathrm{d}^3 r\psi^*\psi = -\frac{\hbar}{2\mathrm{i}m}\iint_S (\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*)\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} + \frac{2}{\hbar}\iiint_\tau V_2(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3 r\psi^*\psi$$

证明

由 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + [V_1 + \mathrm{i}V_2]\psi \tag{1}$$

取复共轭

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^* = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^* + [V_1 - \mathrm{i}V_2]\psi^* \tag{2}$$

$(1)\times\psi^* - (2)\times\psi$ 得

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\frac{\partial(\psi^*\psi)}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m}(\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^*) + 2\mathrm{i}V_2\psi^*\psi \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) + 2\mathrm{i}V_2\psi^*\psi\end{aligned}$$

积分,利用 Stokes 定理

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_\tau \mathrm{d}^3 r\psi^*\psi = -\frac{\hbar}{2\mathrm{i}m}\iint_S \mathrm{d}\boldsymbol{S}\cdot(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) + \frac{2}{\hbar}\int \mathrm{d}^3 rV_2\psi^*\psi$$

对于可归一化波函数,当 $\tau\to\infty$,上式第一项(面积分)为 0,而 $V_2\neq 0$,所以 $\frac{\partial}{\partial t}\int_\tau \mathrm{d}^3 r\psi^*\psi$ 不为 0,即粒子数不守恒.

1.3 对于一维自由粒子,

(a) 设波函数为 $\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}$,试用 Hamilton 算符 $H = \frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$ 对 $\psi_p(x)$ 运算,验证 $H\psi_p(x) = \frac{p^2}{2m}\psi_p(x)$;说明动量本征态 $\psi_p(x)$ 是 Hamilton 量(能

量)本征态,能量本征值为 $E=p^2/2m$;

(b) 设粒子在初始($t=0$)时刻,$\psi(x,0)=\psi_p(x)$,求 $\psi(x,t)$;

(c) 设波函数为 $\psi(x)=\delta(x)=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\int e^{ikx}dk=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int e^{ipx/\hbar}dp$,可以看成无穷多个平面波 e^{ikx} 的叠加,即无穷多个动量本征态 $e^{ipx/\hbar}$ 的叠加.试问 $\psi(x)=\delta(x)$ 是否是能量本征态?

(d) 设粒子在 $t=0$ 时刻 $\psi(x,0)=\delta(x)$,求 $\psi(x,t)$.

解

(a) 容易计算出

$$H\psi_p=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ipx/\hbar}\right)=\frac{p^2}{2m}\psi_p$$

所以动量本征态 $\psi_p(x)$ 是 Hamilton 量(能量)的本征态,能量本征值为 $E=p^2/2m$;

(b) $\psi(x,0)=e^{ip_0x/\hbar}$,其 Fourier 变换为

$$\varphi(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{ip_0x/\hbar}e^{-ipx/\hbar}dx=\sqrt{2\pi\hbar}\,\delta(p-p_0)$$

由于 $\psi(x,0)$ 是能量本征态,按《量子力学教程》1.2 节,(37)式,

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\sqrt{2\pi\hbar}\,e^{ipx/\hbar}\delta(p-p_0)dp\cdot e^{-iEt/\hbar}=e^{ip_0x/\hbar-iEt/\hbar}$$

(c) 对于自由粒子,动量本征态,亦即能量本征态.由于 $\delta(x)$ 是无穷多个动量本征态 $e^{ipx/\hbar}$ 的叠加,所以 $\psi(x)=\delta(x)$ 不是能量本征态.

(d) 因为 $\psi(x,0)=\delta(x)$,按《量子力学教程》1.2 节,(5)式

$$\varphi(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x)e^{-ipx/\hbar}dx=(2\pi\hbar)^{-\frac{1}{2}}$$

所以

$$\psi(x,t)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{i(px-Et)/\hbar}dp=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{i\left(px-\frac{p^2}{2m}t\right)/\hbar}dp=\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar t}}\,e^{-i\frac{\pi}{4}}e^{i\frac{mx^2}{2\hbar t}}$$

计算中利用了积分公式

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\cos\xi^2d\xi=\int_{-\infty}^{+\infty}\sin\xi^2d\xi=\sqrt{\pi/2},\text{或}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{i\xi^2}d\xi=\sqrt{\pi}e^{i\pi/4}.\ \text{所以}$$

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

1.4 设一维自由粒子的初态为一个 Gauss 波包,

$$\psi(x,0)=e^{ip_0x/\hbar}\frac{1}{(\pi a^2)^{1/4}}e^{-x^2/2a^2}$$

(1) 证明初始时刻,$\bar{x}=0,\bar{p}=p_0$,

$$\Delta x = \left[\overline{(x-\bar{x})^2}\right]^{1/2} = \alpha/\sqrt{2}$$

$$\Delta p = \left[\overline{(p-\bar{p})^2}\right]^{1/2} = \hbar/\sqrt{2}\alpha$$

$$\Delta x \cdot \Delta p = \hbar/2$$

(2) 计算 t 时刻的波函数.

解

(1) 初始时刻

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} x \mid \psi \mid^2 \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{1}{\sqrt{\pi\alpha^2}} \mathrm{e}^{-x^2/\alpha^2} \mathrm{d}x = 0$$

$$\overline{x^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \mid \psi \mid^2 \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \frac{1}{\sqrt{\pi\alpha^2}} \mathrm{e}^{-x^2/\alpha^2} \mathrm{d}x = \frac{\alpha^2}{2}$$

$$\Delta x = (\overline{x^2} - \bar{x}^2)^{1/2} = \frac{\alpha}{\sqrt{2}}$$

按《量子力学教程》1.2 节,(18)式之逆变换

$$\begin{aligned}\varphi(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x,0) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar} \mathrm{d}x \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}p_0x/\hbar} \frac{1}{(\pi\alpha^2)^{1/4}} \mathrm{e}^{-x^2/2\alpha^2} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar} \mathrm{d}x \\ &= (\alpha^2/\pi)^{1/4} \mathrm{e}^{-\alpha^2(p-p_0)^2/2\hbar^2}\end{aligned}$$

$$\mid \varphi(p) \mid^2 = \sqrt{\alpha^2/\pi} \mathrm{e}^{-\alpha^2(p-p_0)^2/\hbar^2}$$

所以

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{+\infty} p \mid \varphi(p) \mid^2 \mathrm{d}p = p_0$$

$$\overline{p^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} p^2 \mid \varphi(p) \mid^2 \mathrm{d}p = p_0^2 + \frac{\hbar^2}{2\alpha^2}$$

$$\Delta p = (\overline{p^2} - \bar{p}^2)^{1/2} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}\alpha}$$

$$\Delta x \cdot \Delta p = \hbar/2$$

(2) 按《量子力学教程》1.2 节的讨论(见 1.2 节,(5)式,(18)式)可知,在 $t>0$ 时的波函数

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \varphi(p) \exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(px - \frac{p^2 t}{2m}\right)\right] \mathrm{d}p \\ &= \left[\sqrt{\pi}\left(\alpha + \frac{\mathrm{i}\hbar t}{m\alpha}\right)\right]^{-1/2} \exp\left[\frac{\mathrm{i}p_0}{\hbar}\left(x - \frac{p_0 t}{m}\right) - \frac{(x - p_0 t/m)^2}{2\alpha^2(1 + \mathrm{i}\hbar t/m\alpha^2)}\right]\end{aligned}$$

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}\left(\alpha^2+\dfrac{\hbar^2t^2}{m^2\alpha^2}\right)^{1/2}}\cdot\exp\left[-\frac{(x-p_0t/m)^2}{\alpha^2+\hbar^2t^2/m^2\alpha^2}\right],$$

$$\bar{x}(x) = \frac{p_0t}{m}$$

$$\overline{\Delta x}(t) = \frac{\alpha}{\sqrt{2}}\left(1+\frac{\hbar^2t^2}{m^2\alpha^4}\right)^{1/2} \approx \frac{\hbar t}{\sqrt{2}m\alpha} \qquad (t\to\infty)$$

$$\overline{\Delta x}(t=0) = \frac{\alpha}{\sqrt{2}} = 10^{-15}\mathrm{m}$$

$$\overline{\Delta x}(t) \approx \frac{\hbar\cdot 300000\times365\times24\times60\times60}{\sqrt{2}\times0.001\times\sqrt{2}\times10^{-15}} = 4.98\times10^{-2}\mathrm{m}$$

可见随时间的增加,波包逐渐扩散,振幅逐渐减小,而其宽度 Δx 逐渐增大.

1.5 设一维自由粒子的初态为 $\psi(x,0)$.证明在足够长时间后,

$$\psi(x,t) = \sqrt{\frac{m}{\hbar t}}\exp[-\mathrm{i}\pi/4]\cdot\exp\left[\frac{\mathrm{i}mx^2}{2\hbar t}\right]\cdot\varphi\left(\frac{mx}{\hbar t}\right)$$

式中

$$\varphi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x,0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\mathrm{d}x$$

是 $\psi(x,0)$的 Fourier 变换.

提示 利用 $$\lim_{\alpha\to\infty}\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi/4}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha x^2} = \delta(x)$$

证明

根据自由粒子的动量(能量)本征态随时间变化的规律 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\to\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)}$,式中 $\omega = E/\hbar = \hbar k^2/2m$,所以时刻 t 的波函数为

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\hbar tk^2/2m)}\mathrm{d}k$$

当时间足够长后($t\to\infty$),利用积分公式

$$\lim_{\alpha\to\infty}\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi/4}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha x^2} = \delta(x)$$

上式被积函数中指数函数具有 δ 函数的性质,即

$$\psi(x,t) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}mx^2/2\hbar t}\sqrt{\frac{2\pi m}{\hbar t}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}\int\varphi(k)\delta\left(k-\frac{mx}{\hbar t}\right)\mathrm{d}k$$

$$= \sqrt{\frac{m}{\hbar t}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi/4}\mathrm{e}^{\mathrm{i}mx^2/(2\hbar t)}\varphi\left(\frac{mx}{\hbar t}\right)$$

1.6 按照粒子密度分布 ρ 和粒子流密度分布 $\boldsymbol{j}$ 的表示式(1.2 节式(13),(14))

$$\rho(\boldsymbol{r},t) = \psi^*(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t)$$

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t) = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}[\psi^*(\boldsymbol{r},t)\nabla\psi(\boldsymbol{r},t) - \psi(\boldsymbol{r},t)\nabla\psi^*(\boldsymbol{r},t)]$$

定义粒子的速度分布 $\boldsymbol{v}$

$$\boldsymbol{v} = \frac{\boldsymbol{j}}{\rho} = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left[\frac{\nabla\psi(\boldsymbol{r},t)}{\psi(\boldsymbol{r},t)} - \frac{\nabla\psi^*(\boldsymbol{r},t)}{\psi^*(\boldsymbol{r},t)}\right]$$

证明 $\quad \times \boldsymbol{v} = 0$. 设想 $\boldsymbol{v}$ 描述一个速度场,则 $\boldsymbol{v}$ 为一个无旋场.

证明

按照上述 $\boldsymbol{v}$ 的定义,可知

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{v} &= -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left[\frac{\nabla\psi(\boldsymbol{r},t)}{\psi(\boldsymbol{r},t)} - \frac{\nabla\psi^*(\boldsymbol{r},t)}{\psi^*(\boldsymbol{r},t)}\right] \\
&= -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}[\nabla\ln\psi(\boldsymbol{r},t) - \nabla\ln\psi^*(\boldsymbol{r},t)] \\
&= -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\nabla\ln\frac{\psi(\boldsymbol{r},t)}{\psi^*(\boldsymbol{r},t)}
\end{aligned}$$

$$\nabla\times\boldsymbol{v} = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\nabla\times\nabla\ln\frac{\psi(\boldsymbol{r},t)}{\psi^*(\boldsymbol{r},t)} = 0$$

1.7 处于势场 $V(\boldsymbol{r})$ 中的粒子,在坐标表象中的能量本征方程表示成

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

试在动量表象中写出相应的能量本征方程.

解

利用 $\psi(\boldsymbol{r})$ 的 Fourier 变换

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int\varphi(\boldsymbol{p})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}\mathrm{d}^3p$$

可知

$$\begin{aligned}
\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r}) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r})\right)\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int\varphi(p)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}\mathrm{d}^3p \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\left[\int\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{p}}\right)\right)\varphi(\boldsymbol{p})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}\mathrm{d}^3p\right] \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int E\varphi(\boldsymbol{p})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}\mathrm{d}^3p
\end{aligned}$$

即

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int\left[\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{p}}\right)-E\right]\varphi(\boldsymbol{p})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}\mathrm{d}^3p=0$$

所以在动量表象中相应的能量本征方程为

$$\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{p}}\right)\right)\varphi(\boldsymbol{p})=E\varphi(\boldsymbol{p})$$

第 2 章　一维势场中的粒子

2.1　设粒子限制在矩形匣子中运动,即

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, 0 < y < b, 0 < z < c \\ \infty, & \text{其余区域} \end{cases}$$

求粒子的能量本征值和本征波函数.如 $a=b=c$,讨论能级的简并度.

解

在匣子内

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = E\psi$$

即$(\nabla^2+k^2)\psi=0$,其中 $k=\sqrt{2mE}/\hbar$.采用直角坐标系,方程的解可以分离变量.再考虑到边条件 $\psi(x=0,y=0,z=0)=0$,能量本征函数可表示为

$$\psi(x,y,z) = A\sin k_x x \sin k_y y \sin k_z z$$

再考虑到 $\psi(x=a,y=b,z=c)=0$,可以求出

$$k_x = n_1\pi/a,\ k_y = n_2\pi/b,\ k_z = n_3\pi/c,\ n_1,n_2,n_3 = 1,2,3,\cdots$$

粒子的能量本征值为

$$E = E_{n_1n_2n_3} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{a^2}+\frac{n_2^2}{b^2}+\frac{n_3^2}{c^2}\right)$$

而归一化的能量本征函数为

$$\psi_{n_1n_2n_3}(x,y,z) = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{abc}}\sin\frac{n_1\pi}{a}x\cdot\sin\frac{n_2\pi}{b}y\cdot\sin\frac{n_3\pi}{c}z$$

对于方匣子 $a=b=c$,

$$E_{n_1n_2n_3} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(n_1^2+n_2^2+n_3^2)$$

能级的简并度为满足 $n_1^2+n_2^2+n_3^2=\dfrac{2ma^2E}{\hbar^2\pi^2}$ 条件的正整数(n_1,n_2,n_3)解的个数.(参阅:《量子力学》,卷Ⅱ,pp.420~421,练习 2.)

2.2　设粒子处于一维无限深方势阱中,

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

证明处于能量本征态 $\psi_n(x)$的粒子,

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

讨论 $n\to\infty$的情况,并与经典力学计算结果比较.

证明

设粒子处于第 n 个本征态,其本征函数为

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

$$\bar{x} = \int_0^a x\,|\psi_n|^2 \mathrm{d}x = \frac{2}{a}\int_0^a x\sin^2\frac{n\pi x}{a}\mathrm{d}x$$

$$= \frac{2}{a}\int_0^a \frac{1}{2}x\left(1-\cos\frac{2n\pi x}{a}\right)\mathrm{d}x = \frac{a}{2}$$

$$\overline{(x-\bar{x})^2} = \overline{x^2} - \bar{x}^2 = \int_0^a x^2\,|\psi_n|^2\mathrm{d}x - \frac{a^2}{4}$$

$$= \frac{2}{a}\int_0^a x^2\,\frac{1}{2}\left(1-\cos\frac{2n\pi x}{a}\right)\mathrm{d}x - \frac{a^2}{4} = \frac{a^2}{12}\left(1-\frac{6}{n^2\pi^2}\right)$$

在经典情况下,在区域$(0,a)$中粒子处于 $\mathrm{d}x$ 范围中的概率为$\frac{\mathrm{d}x}{a}$,所以

$$\bar{x} = \int_0^a x\,\frac{\mathrm{d}x}{a} = \frac{a}{2}$$

$$\overline{x^2} = \int_0^a x^2\,\frac{\mathrm{d}x}{a} = \frac{a^2}{3}$$

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

当 $n\to\infty$,量子力学的结果与经典力学计算值一致.

2.3 设粒子处于一维无限深方势阱中

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| < a/2, \\ \infty, & |x| > a/2, \end{cases}$$

处于基态($n=1$,见 2.2 节式(12)),求粒子的动量分布.

解

基态波函数

$$\phi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\cos\frac{\pi x}{a}$$

$$\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}\sqrt{\frac{2}{a}}\cos\frac{\pi x}{a}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{px}{\hbar}}\mathrm{d}x$$

$$= \frac{1}{\sqrt{a\pi\hbar}}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}\cos\frac{\pi x}{a}\cos\frac{px}{\hbar}\mathrm{d}x$$

$$= \frac{1}{\sqrt{a\pi\hbar}}\frac{1}{2}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}\left[\cos\left(\frac{\pi}{a}+\frac{p}{\hbar}\right)x+\cos\left(\frac{\pi}{a}-\frac{p}{\hbar}\right)x\right]\mathrm{d}x$$

$$= \frac{1}{\sqrt{a\pi\hbar}}\frac{1}{2}\left(\frac{2\cos(pa/2\hbar)}{\pi/a+p/\hbar}+\frac{2\cos(pa/2\hbar)}{\pi/a-p/\hbar}\right)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{a\pi\hbar}}\frac{2(\pi/a)\cos(pa/2\hbar)}{(\pi/a)^2-(p/\hbar)^2}$$

测量粒子的动量的概率分布为$|\varphi(p)|^2$.(参阅:《量子力学》,卷Ⅰ,pp.87~88,练习4和练习5.)

2.4 设粒子处于无限深方势阱

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

中,粒子波函数为$\psi(x)=Ax(a-x)$,A为归一化常数.(a)求A;(b)求测得粒子处于能量本征态$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}$的概率$P_n$.特别是$P_1$;(c)作图,比较$\psi(x)$与$\psi_1(x)$曲线.从$P_1\gg P_n(n\neq1)$来说明两条曲线非常相似,即$\psi(x)$几乎与基态$\psi_1(x)$完全相同.

解

(a)根据归一化条件

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x)|^2\mathrm{d}x=\int_0^a[Ax(a-x)]^2\mathrm{d}x=1$$

可得$A=\sqrt{\frac{30}{a^5}}$,所以

$$\psi(x)=\sqrt{\frac{30}{a^5}}x(a-x)$$

(b)$\psi(x)$用$\psi_n(x)$展开,$\psi(x)=\sum_n c_n\psi_n(x)$,

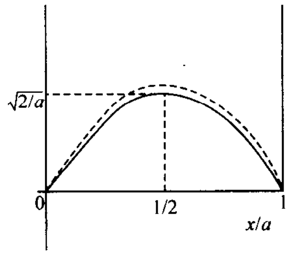
$$C_n=\int\psi_n^*(x)\psi(x)\mathrm{d}x=\int_0^a\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}\sqrt{\frac{30}{a^5}}x(a-x)\mathrm{d}x=\frac{4\sqrt{15}}{n^3\pi^3}(1-\cos n\pi)$$

$$P_n=|C_n|^2=\frac{240}{n^6\pi^6}[1-(-1)^n]^2$$

只当$n=1,3,5,\cdots$时,P_n才不为0.特别是$P_1=\frac{960}{\pi^6}\approx0.999$,非常接近于1.考虑到归一化条件,$\sum_{n=1}^{\infty}|c_n|^2=\sum_{n=1}^{\infty}P_n=1$,可知$P_n(n\neq1)$概率几乎为0,即$\psi(x)$与

$\psi_1(x)$概率几乎完全相同.

(c)



$$\psi_1(x) = \sqrt{2/a} \cdot \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \quad （实线）$$

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{30}{a^5}}x(a-x) \quad （虚线）$$

$$= \sqrt{\frac{30}{a}}\left(\frac{x}{a}\right)\left(1-\frac{x}{a}\right)$$

2.5 同上题.设粒子处于基态($n=1$),$E_1=\pi^2\hbar^2/2ma^2$.设 $t=0$ 时刻阱宽突然变为 $2a$,粒子波函数来不及改变,即

$$\psi(x,0) = \psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x}{a}$$

试问:对于加宽了的无限深方势阱

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < 2a \\ \infty, & x < 0, x > 2a \end{cases}$$

$\psi(x,0)$是否还是能量本征态?求测得粒子处于能量本征值 E_1 的概率.

解

对于加宽了的无限深方势阱,能量本征值和能量本征态分别为

$$\varepsilon_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2}, \quad \varphi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{a}}\sin\frac{n\pi x}{2a}, & 0 < x < a \\ 0, & x < 0, x > 2a \end{cases}$$

可见 $\psi(x,0)$不再是它的能量本征态.由于势阱突然变宽,粒子波函数和能量来不及改变,粒子能量仍保持为 $E_1=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}=\varepsilon_2$,而 $\psi(x,0)$可以按 $\varphi_n(x)$展开,

$$\psi(x,0) = \sum_n C_n\varphi_n(x)$$

$$C_n = \int_{-\infty}^{+\infty}\varphi_n^*(x)\psi(x,0)\mathrm{d}x = \int_0^a\varphi_n^*(x)\psi(x,0)\mathrm{d}x + \int_a^{2a}\varphi_n^*(x)\psi(x,0)\mathrm{d}x$$

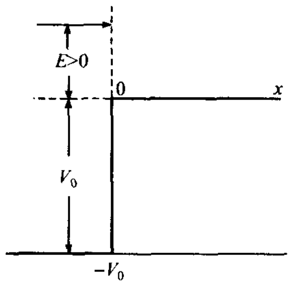
$$= \int_0^a \varphi_n^*(x)\psi(x,0)\mathrm{d}x$$

经过计算可得

$$C_2 = \int_0^a \sqrt{\frac{1}{a}}\sin\frac{\pi x}{a}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x}{a}\mathrm{d}x = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

所以粒子处于 φ_2，即能量仍为 $E_1=\varepsilon_2$ 的概率为 $|C_2|^2=1/2$.

2.6 设粒子(能量 $E>0$)从左入射，碰到下图所示的势阱，求透射系数与反射系数.



参见《量子力学》卷Ⅰ，108 页，有详细解答.

答案 透射系数为

$$T = \frac{4k/k'}{(1+k/k')^2}$$

反射系数为

$$R = \frac{(1-k/k')^2}{(1+k/k')^2}$$

其中

$$k=\sqrt{2mE}/\hbar,\ k'=\sqrt{2m(E+V_0)}/\hbar$$

不难验证概率守恒关系式

$$R+T=1.$$

2.7 利用 Hermite 多项式的递推关系(附录 A3，式(13))，证明谐振子波函数满足下列关系：

$$x\psi_n(x) = \frac{1}{\alpha}\left[\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}(x) + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}(x)\right], \qquad \alpha = \sqrt{m\omega/\hbar}$$

$$x^2\psi_n(x) = \frac{1}{2\alpha^2}[\sqrt{n(n-1)}\psi_{n-2}(x) + (2n+1)\psi_n(x) + \sqrt{(n+1)(n+2)}\psi_{n+2}(x)]$$

并由此证明,在 ψ_n 态下,$\bar{x}=0$,$\overline{V}=E_n/2$.

证明

已知

$$\mathrm{H}_{n+1}(x)-2x\mathrm{H}_n(x)+2n\mathrm{H}_{n-1}(x)=0$$

$$\psi_n(x)=\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2/2}\mathrm{H}_n(\alpha x)$$

$$\psi_{n+1}(x)=\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^{n+1}(n+1)!}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2/2}\mathrm{H}_{n+1}(\alpha x)$$

$$\psi_{n-1}(x)=\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^{n-1}(n-1)!}\right)^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2/2}\mathrm{H}_{n-1}(\alpha x)$$

所以

$$\begin{aligned}x\psi_n(x)&=\frac{1}{\alpha}\cdot M\cdot\left(\frac{1}{2^n n!}\right)^{\frac{1}{2}}\alpha x\mathrm{H}_n(\alpha x),\quad (M=\sqrt{\alpha}\pi^{-1/4}\mathrm{e}^{-\alpha^2x^2/2})\\
&=\frac{1}{\alpha}\cdot M\cdot\left(\frac{1}{2^n n!}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{1}{2}\mathrm{H}_{n+1}(\alpha x)+n\mathrm{H}_{n-1}(\alpha x)\right)\\
&=\frac{1}{\alpha}M\left(\frac{1}{2^{n-1}(n-1)!}\right)^{\frac{1}{2}}\sqrt{\frac{n}{2}}\mathrm{H}_{n-1}(\alpha x)+\\
&\quad\frac{1}{\alpha}M\left(\frac{1}{2^{n+1}(n+1)!}\right)^{\frac{1}{2}}\sqrt{\frac{n+1}{2}}\mathrm{H}_{n+1}(\alpha x)\\
&=\frac{1}{\alpha}\left[\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}(x)+\sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}(x)\right]\end{aligned}$$

利用本征函数的正交性,可得 $\bar{x}=0$.

$$\begin{aligned}x^2\psi_n(x)&=\frac{1}{\alpha}\left[\sqrt{\frac{n}{2}}x\psi_{n-1}(x)+\sqrt{\frac{n+1}{2}}x\psi_{n+1}(x)\right]\\
&=\frac{1}{\alpha}\left\{\sqrt{\frac{n}{2}}\cdot\frac{1}{\alpha}\left[\sqrt{\frac{n-1}{2}}\psi_{n-2}(x)+\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_n(x)\right]\right.\\
&\quad\left.+\sqrt{\frac{n+1}{2}}\cdot\frac{1}{\alpha}\left[\sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_n+\sqrt{\frac{n+2}{2}}\psi_{n+2}\right]\right\}\\
&=\frac{1}{2\alpha^2}\left[\sqrt{n(n-1)}\psi_{n-2}+(2n+1)\psi_n+\sqrt{(n+1)(n+2)}\psi_{n+2}\right]\end{aligned}$$

同样,利用本征函数的正交归一性,可得

$$\overline{V}=\frac{1}{2}m\omega^2\int\psi_n^*x^2\psi_n\mathrm{d}x=\frac{1}{2}m\omega^2\frac{2n+1}{2\alpha^2}=\frac{1}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega=\frac{E_n}{2}$$