

高等量子力学习题解答

井孝功 张井波 编著

哈尔滨工业大学出版社

高等量子力学习题解答

井孝功 张井波 编著

哈尔滨工业大学出版社

内 容 简 介

本书是作者编著的《高等量子力学导论》教材的配套书。书中收集的 165 道习题大致可分为三大类,第一类是对教材中没有详细推导的公式进行了推导;第二类是对教材中所讲授理论的具体应用;第三类是对教材内容的扩充和推广。

本书是物理系各专业硕士研究生学习“高等量子力学”课程的参考书,也是相关专业研究生和科技工作者的参考书。

图书在版编目(CIP)数据

高等量子力学学习题解答/井孝功等编著. —哈尔滨:
哈尔滨工业大学出版社, 2006. 3

ISBN 7-5603-2306-5

I. 高… II. 井… III. 量子力学-研究生-解题
IV. O413.1-44

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2006)第 147755 号

责任编辑 张秀华

封面设计 卞秉利

出版发行 哈尔滨工业大学出版社

社 址 哈尔滨市南岗区复华四道街 10 号 邮编 150006

传 真 0451-86414749

网 址 <http://hitpress.hit.edu.cn>

印 刷 哈尔滨市龙华印刷厂

开 本 787mm×960mm 1/16 印张 12.75 字数 224 千字

版 次 2006 年 3 月第 1 版 2006 年 3 月第 1 次印刷

印 数 1~3 000 册

定 价 18.00 元

(如因印装质量问题影响阅读,我社负责调换)

前 言

高等量子力学是物理系硕士研究生的一门基础理论课程,在研究生的培养过程中具有重要的作用。

在讲授高等量子力学的过程中,学生经常会提出这样一个带有普遍性的问题:觉得教师在课堂上讲的似乎都能听明白,但是,一旦遇到具体的问题还是感到无从下手。其实原因很简单,那就是自己很少动脑动手去处理和解决一些问题。为了给读者一个检查学习效果的机会,特编写了这本《高等量子力学学习题解答》,它是与作者编写的《高等量子力学导论》教材配套使用的。

本书中的习题大致可以分为三类,第一类习题是对教材中没有详细推导的公式进行了推导,第二类习题是教材中所讲授理论的具体应用,第三类习题属于课程内容的扩充或推广。

应该提醒读者的是,作为一个物理学工作者,物理思想和物理结论是问题的出发点和归宿,其中的数学演绎只不过是一个过程或手段,真正的目的是有意识地对自己发现问题和解决问题能力的培养。这些能力包括,对物理问题实质的洞察与理解能力,逻辑思维与理论推导能力,知识的综合运用与特殊技巧的使用能力,发现看似不同问题之间关系的能力,以致创新能力,等等。

本书中的一些题目是作者与同事们的研究成果,借此书出版的机会向她们表示谢意。

由于我们的水平有限,难免有诸多不当之处,还望读者不吝赐教。

井孝功 张井波

2005 年 11 月

目 录

第 1 章	量子力学纲要.....	(1)
第 2 章	量子力学的形式理论	(33)
第 3 章	近似方法中的递推与迭代	(70)
第 4 章	多体理论	(97)
第 5 章	对称性和守恒定律	(127)
第 6 章	量子散射理论	(142)
第 7 章	相对论量子力学	(160)
第 8 章	量子信息学基础	(188)

第 1 章 量子力学纲要

习题 1.1 设有一个体重为 $m = 50 \text{ kg}$ 的短跑运动员, 以 $v = 10 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 的速度做直线运动, 求其相应的德布罗意波长。

解 该运动员的动量为

$$p = mv = 500 \text{ kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1} \quad (1)$$

相应的德布罗意波长只有

$$\lambda = \frac{h}{p} = 1.33 \times 10^{-36} \text{ m} \quad (2)$$

上述结果表明, 不但微观客体具有波粒二象性, 即使是具有宏观尺度的运动员也具有波粒二象性, 只不过相对运动员本身的尺度而言, 其德布罗意波长实在是太短了, 以至其粒子性占据了绝对的主导地位, 波动性完全可以被忽略, 这也就是能够用经典物理方法处理宏观问题的原因所在。也许有人会说, 如果运动员的速度再小一些, 那么, 他相应的德布罗意波长不就变大了吗。实际上, 即使运动员以每秒 1 nm (纳米) 的速度移动, 他相应的德布罗意波长也不过只有 $\lambda = 1.33 \times 10^{-26} \text{ m}$ 。仔细想来, 以 $1 \text{ nm} \cdot \text{s}^{-1}$ 的速度运动, 对一个体重 50 kg 的运动员来说, 实在是勉为其难了。

习题 1.2 求出能量为 100 eV 的自由电子的德布罗意波长。

解 由计算德布罗意波长的公式可知

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{h}{\sqrt{2mE}} = \frac{6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}}{\sqrt{2 \times 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg} \times 10^2 \text{ eV}}} = \\ &= \frac{6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}}{\sqrt{2 \times 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg} \times 10^2 \times 1.602 \times 10^{-19} \text{ kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2}}} = \\ &= 1.23 \times 10^{-10} \text{ m} \end{aligned}$$

由此看来, 该电子所具有的德布罗意波长远远大于其经典半径 ($2.82 \times 10^{-15} \text{ m}$), 它的波动性是绝对不可忽略的。实际上, 至今在 10^{-20} m 的尺度上仍未探测到电子的大小, 人们还在努力解开这个谜团。

习题 1.3 设有一个功率为 0.01 W 的光源, 发出波长为 560 nm 的黄光, 若一个人站在距光源 $R = 100 \text{ m}$ 处, 计算每秒钟进入此人一个瞳孔中的光子个数。假设瞳孔的半径 r 约为 2 mm 。

解 光源每秒钟发出的能量为

$$E = 0.01 \text{ W} \times 1 \text{ s} = 0.01 \text{ J} \quad (1)$$

由爱因斯坦的光量子论可知,波长为 560 nm 的一个光子具有的能量为

$$\epsilon = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \frac{6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} \times 2.998 \times 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}}{560 \times 10^{-9} \text{ m}} = 0.3547 \times 10^{-18} \text{ J} \quad (2)$$

于是,光源每秒钟发出的光子个数为

$$N = \frac{E}{\epsilon} = \frac{0.01 \text{ J}}{0.3547 \times 10^{-18} \text{ J}} = 2.82 \times 10^{16} \quad (3)$$

由初等几何图形知识可知,若观察者与光源的距离 $R = 100 \text{ m}$,则光球的表面积为

$$S = 4\pi R^2 = 4\pi \times 10^4 \text{ m}^2 \quad (4)$$

观察者瞳孔的表面积的计算公式为

$$s = \pi(r^2 + h^2) \quad (5)$$

其中, h 是拱高,其表达式为

$$h = R - \sqrt{R^2 - r^2} \quad (6)$$

由于 $R^2 = 10^4 \text{ m}^2$, $r^2 = 4 \times 10^{-6} \text{ m}^2$,故 $R \gg r$,于是,上式可以改写成

$$h = R - \sqrt{R^2 - r^2} = R \left(1 - \sqrt{1 - \frac{r^2}{R^2}} \right) \approx R \left(1 - 1 + \frac{1}{2} \frac{r^2}{R^2} \right) = \frac{1}{2} \frac{r^2}{R} \quad (7)$$

将(7)式代入(5)式,得到

$$s = \pi(r^2 + h^2) \approx \pi r^2 \left(1 + \frac{r^2}{4R^2} \right) \quad (8)$$

由于 $R \gg r$,故上式中右端的第 2 项可以略去,这时,相当于用小圆的面积代替小圆弧的面积。

最后,由(3)、(4)与(8)式可知,每秒钟进入观察者一个瞳孔中的光子个数是

$$n = N \frac{s}{S} = \frac{N\pi r^2}{4\pi R^2} = \frac{2.82 \times 10^{16} \times 4 \times 10^{-6} \text{ m}^2}{4 \times 10^4 \text{ m}^2} = 2.82 \times 10^6 \quad (9)$$

上述结果表明,在 1 秒钟之内观察者的一个瞳孔将受到 282 万个光子的作用,而瞳孔的面积只有 $\pi r^2 = 12.56 \times 10^{-6} \text{ m}^2$,难怪人们感受不到光子的作用是断续的。

习题 1.4 设一个角频率为 ω ,等效质量为 $m^* = \frac{\hbar\omega}{c^2}$ 的光子在重力场中垂直向上飞行的距离为 z ,求其由引力产生的频率的移动(引力红移)。

解 由于光子在运动时需要克服重力做功,故如下关系式成立

$$m^* gz = \hbar\omega - \hbar\omega' \quad (1)$$

其中, g 为重力加速度, $\hbar\omega$ 为光子的初始能量, $\hbar\omega'$ 为光子飞行了距离 z 后的能量。光子的频率移动为

$$\Delta\omega = \omega' - \omega = -\frac{m^*gz}{\hbar} = -\frac{\hbar\omega gz}{\hbar c^2} = -\frac{\omega gz}{c^2} \quad (2)$$

上述理论结果已被实验证实。

习题 1.5 求波包的群速度与相速度。

解 对于做一维自由运动的粒子,通过求解定态薛定谔方程可知,其能量本征波函数是单色平面波,如果考虑到其状态随时间的变化,则波函数为

$$\psi_p(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right] = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(px - \frac{p^2 t}{2m}\right)\right] \quad (1)$$

利用 $p = k\hbar$, 上式可以改写成

$$\psi_k(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\{i[kx - \omega(k)t]\} \quad (2)$$

式中

$$\omega(k) = \frac{k^2 \hbar}{2m} \quad (3)$$

所谓波包就是上述单色平面波的叠加,即

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(k) \exp\{i[kx - \omega(k)t]\} dk \quad (4)$$

波包的中心位置 x_c 将出现在相角 $\varphi = kx - \omega(k)t$ 取极值的位置,具体地说,要求满足

$$\frac{\partial \varphi}{\partial k} = 0 \quad (5)$$

即

$$x_c = \frac{\partial \omega(k)}{\partial k} t \quad (6)$$

波包中心的运动速度

$$v_g = \frac{dx_c}{dt} = \frac{\partial \omega(k)}{\partial k} \quad (7)$$

称之为波包的群速度。对于自由粒子构成的波包而言,由(3)式可知,群速度为

$$v_g = \frac{2k\hbar}{2m} = \frac{p}{m} = v \quad (8)$$

它等于自由粒子的运动速度 v 。

如果顾及到相对论效应,从相对论的质能关系出发,即

$$E^2 = m^2 c^4 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4 \quad (9)$$

将上式两端对 p 求导,得到

$$2E \frac{\partial E}{\partial p} = 2pc^2 \quad (10)$$

由(8)式可知

$$v_g = \frac{p}{m} = \frac{\partial}{\partial p} \left(\frac{p^2}{2m} \right) = \frac{\partial E}{\partial p} \quad (11)$$

再利用(10)式,得到

$$v_g = \frac{\partial E}{\partial p} = \frac{pc^2}{E} = \frac{mvc^2}{mc^2} = v \quad (12)$$

得到与非相对论时同样的结论。

根据德布罗意假设可知

$$E = h\nu = \frac{h\nu_p}{\lambda}; \quad p = \frac{h}{\lambda} \quad (13)$$

其中, ν 是频率, λ 是波长, h 是普朗克常数, 而 v_p 称之为相速度。利用相对论的质能关系(9)式, 可以导出相速度的表达式为

$$v_p = \frac{\lambda}{h} E = \frac{\lambda}{h} \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} = \frac{\lambda}{h} c \sqrt{\frac{h^2}{\lambda^2} + m_0^2 c^2} = c \sqrt{1 + \frac{m_0^2 c^2 \lambda^2}{h^2}} \quad (14)$$

上式表明, 相速度 v_p 是大于光速 c 的。

下面来讨论群速度与相速度之间的关系。

由德布罗意关系(13)式可知, 相速度

$$v_p = \frac{E}{p} \quad (15)$$

于是得到群速度与相速度满足的关系式

$$v_g v_p = \frac{p}{m} \frac{E}{p} = \frac{mc^2}{m} = c^2 \quad (16)$$

总之, 粒子存在于构成波包的波群之中, 能量由粒子携带, 能量传播的速度是群速度, 群速度是小于光速的。由(14)式可知, 相速度是与波长相关的, 因此, 相速度是构成波包的单个波的传播速度。

习题 1.6 讨论高斯波包的扩散。

解 随着时间的推移, 若一个波包的宽度逐渐变大, 则认为此波包是扩散的。若一个波包是扩散的, 则其存在的时间(寿命)是有限的。一个波包是否扩散取决于 $\omega(k)$ 的函数形式。

在 $t = 0$ 时, 假设有一个一维的高斯型波包, 即

$$\Psi(x, 0) = A \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0 x\right) \quad (1)$$

式中的归一化常数 $A = (a\sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}}$ 。将上式向平面波展开, 展开系数为

$$\begin{aligned}\Phi(k, 0) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, 0) \exp(-ikx) dx = \\ &= \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0x - ikx\right) dx\end{aligned}\quad (2)$$

上述积分可用配方法来完成, 即

$$\Phi(k, 0) = \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\left[\frac{x}{\sqrt{2}a} + \frac{ia(k-k_0)}{\sqrt{2}}\right]^2\right\} \exp\left[-\frac{a^2}{2}(k-k_0)^2\right] dx\quad (3)$$

若令

$$\xi^2 = \left[\frac{x}{\sqrt{2}a} + \frac{ia(k-k_0)}{\sqrt{2}}\right]^2\quad (4)$$

则(3)式化为

$$\begin{aligned}\Phi(k, 0) &= \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{a^2}{2}(k-k_0)^2\right] \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\xi^2) \sqrt{2}a d\xi = \\ &= Aa \exp\left[-\frac{a^2}{2}(k-k_0)^2\right]\end{aligned}\quad (5)$$

显然, $\Phi(k, 0)$ 表示 k 分波在高斯波包中占据的份额, 实际上, $\Phi(k, 0)$ 就是 $\Psi(x, 0)$ 在波矢 k 表象中的表示。

在坐标表象中, 高斯波包由(1)式描述, 它的宽度近似为

$$\Delta x \approx a\quad (6)$$

在波矢表象中, 宽度近似为

$$\Delta k \approx \frac{1}{a}\quad (7)$$

两者之积满足不确定关系

$$\Delta x \cdot \Delta k \approx 1\quad (8)$$

在任意时刻 t , 高斯波包所处的状态为

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(k, 0) \exp\{i[kx - \omega(k)t]\} dk\quad (9)$$

将 $\Phi(k, 0)$ 与 $\omega(k)$ 的表达式代入上式, 得到

$$\Psi(x, t) = A \sqrt{\frac{a^2}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{a^2(k-k_0)^2}{2} + ikx - i\frac{k^2 \hbar t}{2m}\right] dk\quad (10)$$

对被积函数进行配方, 然后做积分得到

$$\Psi(x, t) = \frac{A}{\sqrt{1 + i\frac{\hbar t}{ma^2}}} \exp\left[-\frac{x^2 - i2a^2k_0x + i\frac{a^2k_0^2\hbar t}{m}}{2a^2\left(1 + i\frac{\hbar t}{ma^2}\right)}\right]\quad (11)$$

进而得到坐标的取值概率密度为

$$|\Psi(x, t)|^2 = \frac{|A|^2}{\sqrt{1 + \left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2}} \exp\left\{-\frac{\left(x - \frac{k_0 \hbar t}{m}\right)^2}{a^2 \left[1 + \left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2\right]}\right\} \quad (12)$$

上式表明,坐标概率密度是一个高斯函数,极大值出现在 $x = \frac{k_0 \hbar}{m}t$ 处,它以群速度 $v_g = \frac{k_0 \hbar}{m}$ 运动。

由(12)式可知,在任意时刻 t ,波包的宽度变为

$$a(t) = a\sqrt{1 + \left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2} \quad (13)$$

上式表明, $t = 0$ 时高斯波包的宽度为 a ,随着时间的推移,该波包的宽度 $a(t)$ 将会逐渐变宽,大约在 $t = 1.6 \times 10^{-26}$ s 时波包将消失。

总之,用波包来描述微观粒子是不恰当的,这是因为它只强调了微观粒子的波动性,而忽略了它的粒子性。

习题 1.7 导出瑞利 - 金斯和普朗克的黑体辐射公式。

解 黑体辐射的能量是由电磁场的本征振动(共振)引起的,若振动频率为 ν ,则频率 ν 到 $\nu + d\nu$ 之间的振动次数是

$$\frac{dN(\nu)}{d\nu} = \frac{8\pi V}{c^3} \nu^2 \quad (1)$$

式中, c 为光速, V 为空腔的体积。

设 $\bar{\epsilon}(T, \nu)$ 表示温度为 T 、频率为 ν 的本征振动的平均能量, $\rho(T, \nu)$ 为相应的能量密度,则振动频率在 ν 到 $\nu + d\nu$ 之间的能量为

$$V\rho(T, \nu)d\nu = \frac{8\pi V}{c^3} \nu^2 \bar{\epsilon}(T, \nu)d\nu \quad (2)$$

消去等式两端的 V ,于是得到

$$\rho(T, \nu)d\nu = \frac{8\pi}{c^3} \nu^2 \bar{\epsilon}(T, \nu)d\nu \quad (3)$$

本征振动是简谐振动,由热力学与统计物理的能量均分定理可知,平均能量为

$$\bar{\epsilon}(T, \nu) = \frac{\int_0^\infty \epsilon \exp\left(-\frac{\epsilon}{kT}\right) d\epsilon}{\int_0^\infty \exp\left(-\frac{\epsilon}{kT}\right) d\epsilon} = \frac{(kT)^2}{kT} = kT \quad (4)$$

其中, k 为玻尔兹曼常数。将(4)式代入(3)式,立即得到瑞利 - 金斯的黑体辐射公式

$$\rho(T, \nu) d\nu = \frac{8\pi}{c^3} kT \nu^2 d\nu \quad (5)$$

应该特别指出的是,在上述推导过程中认定简谐振子的能量是连续取值的,这正是经典物理的观点。

普朗克的惊人之举是,假设简谐振子的能量的取值是断续的,即

$$\epsilon_n = nh\nu \quad (6)$$

其中 $n = 0, 1, 2, \dots$ 。在此基础上,计算热平衡状态下的平均能量

$$\bar{\epsilon}(T, \nu) = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \epsilon_n \exp\left(-\frac{\epsilon_n}{kT}\right)}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{\epsilon_n}{kT}\right)} \quad (7)$$

若令

$$\beta = \frac{1}{kT} \quad (8)$$

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\beta \epsilon_n) \quad (9)$$

则(7)式可以改写为

$$\bar{\epsilon}(T, \nu) = -\frac{1}{Z} \frac{d}{d\beta} Z \quad (10)$$

将(6)式代入(9)式

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-n\beta h\nu) = \sum_{n=0}^{\infty} [\exp(-\beta h\nu)]^n \quad (11)$$

由于 $\exp(-\beta h\nu) < 1$, 故可以利用级数公式

$$\sum_{n=0}^{\infty} x^n = \frac{1}{1-x} \quad (|x| < 1) \quad (12)$$

将(11)式变成

$$Z = \frac{1}{1 - \exp(-\beta h\nu)} \quad (13)$$

再将上式代入(10)式,通过简单的微分运算得到

$$\bar{\epsilon}(T, \nu) = \frac{h\nu}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1} \quad (14)$$

最后,将上式代入(3)式,得到普朗克黑体辐射公式

$$\rho(T, \nu) d\nu = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1} d\nu \quad (15)$$

习题 1.8 在量子力学向经典力学过渡时,指出普朗克常数所起的作用。

解 首先,研究两个基本力学量算符的对易关系与不确定关系。例如,常见的不为零的对易关系有

$$[\mu, \hat{p}_\mu] = i\hbar \quad (\mu = x, y, z) \quad (1)$$

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z, \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y \quad (2)$$

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, y] &= i\hbar z, & [\hat{L}_y, x] &= -i\hbar z \\ [\hat{L}_y, z] &= i\hbar x, & [\hat{L}_z, y] &= -i\hbar x \\ [\hat{L}_z, x] &= i\hbar y, & [\hat{L}_x, z] &= -i\hbar y \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{p}_y] &= i\hbar \hat{p}_z, & [\hat{L}_y, \hat{p}_x] &= -i\hbar \hat{p}_z \\ [\hat{L}_y, \hat{p}_z] &= i\hbar \hat{p}_x, & [\hat{L}_z, \hat{p}_y] &= -i\hbar \hat{p}_x \\ [\hat{L}_z, \hat{p}_x] &= i\hbar \hat{p}_y, & [\hat{L}_x, \hat{p}_z] &= -i\hbar \hat{p}_y \end{aligned} \quad (4)$$

当 $\hbar \rightarrow 0$ 时,上述对易关系全部变成零,这就意味着这些算符之间是可以交换的,量子力学中的算符变成了经典力学中的常量,量子力学退化为经典力学。

再来研究两个基本力学量算符的不确定关系,例如

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (5)$$

$$\Delta t \cdot \Delta E \geq \frac{\hbar}{2} \quad (6)$$

当 $\hbar \rightarrow 0$ 时,上述不确定关系的右端全部变成零,这就意味着这些算符对应的力学量是可以同时取确定值的,这正是经典力学的观点。

其次,研究粒子的自旋。自旋是量子力学中的一个特有的力学量,在经典力学中没有相应的量与之对应,不论是费米子还是玻色子,自旋的本征值都是以 $\hbar$ 为单位的,当 $\hbar \rightarrow 0$ 时,相当于所有粒子的自旋都将变成零,这正是经典力学的结果。

最后,研究薛定谔方程在 $\hbar \rightarrow 0$ 时的情况。

设有一个接近经典情况的量子体系,处于状态

$$\psi(\mathbf{r}, t) = A(\mathbf{r}, t) \exp\left[\frac{i}{\hbar} S(\mathbf{r}, t)\right] \quad (7)$$

式中, $A(\mathbf{r}, t)$ 为振幅, $S(\mathbf{r}, t)$ 为作用量。设体系满足薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right] \psi(\mathbf{r}, t) \quad (8)$$

将(7)式代入(8)式,(8)式右端的第1项可以写成(为简捷计,略去波函数中自变量)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \cdot \left\{ \nabla \left[A \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right) \right] \right\} =$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \cdot \left\{ \left[(\nabla A) + \frac{i}{\hbar} A (\nabla S) \right] \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right) \right\} = \\
& -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \nabla \cdot \left[(\nabla A) + \frac{i}{\hbar} A (\nabla S) \right] \right\} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right) - \\
& \frac{\hbar^2}{2m} \left[(\nabla A) + \frac{i}{\hbar} A (\nabla S) \right] \frac{i}{\hbar} \cdot (\nabla S) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right) = \\
& -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \nabla^2 A + \frac{i}{\hbar} (\nabla A) \cdot (\nabla S) + \frac{i}{\hbar} A \nabla^2 S \right\} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right) - \\
& \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{i}{\hbar} (\nabla A) \cdot (\nabla S) - \frac{1}{\hbar^2} A (\nabla S)^2 \right\} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right) = \\
& -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \nabla^2 A + \frac{2i}{\hbar} (\nabla A) \cdot (\nabla S) - \frac{1}{\hbar^2} A (\nabla S)^2 + \frac{i}{\hbar} A \nabla^2 S \right\} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right)
\end{aligned} \tag{9}$$

于是, (8) 式变成

$$A \frac{\partial S}{\partial t} - i \hbar \frac{\partial A}{\partial t} + AV - \frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \nabla^2 A + \frac{2i}{\hbar} (\nabla A) \cdot (\nabla S) - \frac{1}{\hbar^2} A (\nabla S)^2 + \frac{i}{\hbar} A \nabla^2 S \right\} = 0 \tag{10}$$

将(10)式的实部与虚部分别写出, 可得两个方程

$$\begin{aligned}
\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} (\nabla S)^2 + V - \frac{\hbar^2}{2mA} \nabla^2 A &= 0 \\
\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{A}{2m} \nabla^2 S + \frac{1}{m} \nabla S \cdot \nabla A &= 0
\end{aligned} \tag{11}$$

在(11)式中, 略去与 $\hbar^2$ 相关的项, 并用 $2A$ 乘以第2式的两端, 得到

$$\begin{aligned}
\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} (\nabla S)^2 + V &= 0 \\
2A \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{A^2}{m} \nabla^2 S + \frac{2A}{m} \nabla S \cdot \nabla A &= 0
\end{aligned} \tag{12}$$

由于

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2m} (\nabla S)^2 + V &= H(\nabla S, V) \\
\nabla \cdot (A^2 \nabla S) &= 2A \nabla A \cdot \nabla S + A^2 \nabla^2 S
\end{aligned} \tag{13}$$

(12) 式可以改写为

$$\begin{aligned}
\frac{\partial S}{\partial t} + H(\nabla S, V) &= 0 \\
\frac{\partial}{\partial t} A^2 + \frac{1}{m} \nabla \cdot (A^2 \nabla S) &= 0
\end{aligned} \tag{14}$$

在(14)式中, 第1个方程就是单粒子作用量 S 的经典运动方程, 若把 A^2 与 $\frac{1}{m} A^2 \nabla S$

分别视为粒子密度与粒子流密度,则第2个方程可视为经典力学的连续性方程。

总之,当薛定谔方程中的 $\hbar \rightarrow 0$ 时,若略去与 $\hbar^2$ 相关的项,则退化为经典力学方程。

实际上, $\hbar = 1.054 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}^{-1}$ 是一个有确切数值与量纲的物理量,所谓 $\hbar \rightarrow 0$ 的意思是,所研究对象的角动量在数值上远大于 $\hbar$,或者说,相对所研究对象的角动量而言, $\hbar$ 可以忽略不计。

习题 1.9 利用坐标变换或赫尔曼-费恩曼定理求解下列哈密顿算符

$$(1) \hat{H}_1 = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 + \lambda x = \hat{H}_0 + \lambda x$$

$$(2) \hat{H}_2 = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 + \lambda x^2 = \hat{H}_0 + \lambda x^2$$

$$(3) \hat{H}_3 = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + V(x) + \frac{\lambda}{\mu}\hat{p} = \hat{H}_0 + \frac{\lambda}{\mu}\hat{p}$$

的本征解。

解 设 $\hat{H}_0$ 满足

$$\hat{H}_0 \varphi_n(x) = E_n^0 \varphi_n(x) \quad (1)$$

(1) 用配方的方法改写位势

$$\begin{aligned} V_1(x) &= \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 + \lambda x = \frac{1}{2}\mu\omega^2 \left[x^2 + \frac{2\lambda}{\mu\omega^2} x + \left(\frac{\lambda}{\mu\omega^2} \right)^2 \right] - \frac{\lambda^2}{2\mu\omega^2} = \\ &= \frac{1}{2}\mu\omega^2 \left(x + \frac{\lambda}{\mu\omega^2} \right)^2 - \frac{\lambda^2}{2\mu\omega^2} \end{aligned} \quad (2)$$

若令

$$\begin{aligned} X &= x + \frac{\lambda}{\mu\omega^2} \\ E' &= E + \frac{\lambda^2}{2\mu\omega^2} \end{aligned} \quad (3)$$

则定态薛定谔方程可以写为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dX^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 X^2 \right] \psi(X) = E' \psi(X) \quad (4)$$

此即正常的线谐振子的能量本征方程,已知它的能量本征值为

$$E_n' = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad (5)$$

利用(3)式可以得到 $\hat{H}_1$ 的本征解为

$$\begin{aligned} E_n &= \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega - \frac{\lambda^2}{2\mu\omega^2} \\ \psi_n(x) &= N_n \exp \left[-\frac{1}{2} \alpha^2 \left(x + \frac{\lambda}{\mu\omega^2} \right)^2 \right] H_n \left[\alpha \left(x + \frac{\lambda}{\mu\omega^2} \right) \right] \end{aligned} \quad (6)$$

(2) 改写位势

$$V_2(x) = \frac{1}{2} \mu \omega^2 x^2 + \lambda x^2 = \frac{1}{2} \mu \left(\omega^2 + \frac{2\lambda}{\mu} \right) x^2 \quad (7)$$

若令

$$\Omega^2 = \omega^2 + \frac{2\lambda}{\mu} \quad (8)$$

则定态薛定谔方程可以写为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} \mu \Omega^2 x^2 \right] \psi(x) = E \psi(x) \quad (9)$$

此亦为正常的线谐振子的能量本征方程, 它的能量本征解为

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \Omega = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \sqrt{\omega^2 + \frac{2\lambda}{\mu}} = E_n^0 \sqrt{1 + \frac{2\lambda}{\mu \omega^2}} \quad (10)$$

$$\psi_n(x) = N_n \exp\left(-\frac{1}{2} \alpha^2 x^2\right) H_n(\alpha x)$$

式中

$$\alpha^2 = \frac{\mu \Omega}{\hbar} = \frac{\mu}{\hbar} \sqrt{\omega^2 + \frac{2\lambda}{\mu}} \quad (11)$$

(3) 视 λ 为参变量, 则有

$$\frac{\partial \hat{H}_3}{\partial \lambda} = \frac{\hat{p}}{\mu} \quad (12)$$

对于哈密顿算符的任意束缚本征态 $|n\rangle$, 利用赫尔曼 - 费恩曼定理可知

$$\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} = \langle n | \frac{\partial \hat{H}_3}{\partial \lambda} | n \rangle = \frac{1}{\mu} \langle n | \hat{p} | n \rangle \quad (13)$$

又知

$$\begin{aligned} \langle n | \frac{dx}{dt} | n \rangle &= \frac{1}{i\hbar} \langle n | [x, \hat{H}_3] | n \rangle = \frac{1}{i\hbar \mu} \left[x, \frac{\hat{p}^2}{2} + \lambda \hat{p} \right] = \\ &= \frac{1}{\mu} [\langle n | \hat{p} | n \rangle + \lambda] \end{aligned} \quad (14)$$

从另一个角度, 得到

$$\langle n | \frac{dx}{dt} | n \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle n | [x, \hat{H}_3] | n \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle n | x \hat{H}_3 - \hat{H}_3 x | n \rangle = 0 \quad (15)$$

所以

$$\langle n | \hat{p} | n \rangle = -\lambda \quad (16)$$

进而得到能量本征值满足的微分方程

$$\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} = -\frac{\lambda}{\mu} \quad (17)$$

对上式的 λ 积分, 得到

$$E_n = -\frac{\lambda^2}{2\mu} + c \quad (18)$$

利用 $\lambda = 0$ 时, $\hat{H}_3 = \hat{H}_0$, 定出积分常数

$$c = E_n^0 \quad (19)$$

最后, 得到 $\hat{H}_3$ 的本征值为

$$E_n = E_n^0 - \frac{\lambda^2}{2\mu} \quad (20)$$

若 $V_3 = \lambda \hat{p}$, 则

$$E_n = E_n^0 - \frac{1}{2}\mu\lambda^2 \quad (21)$$

习题 1.10 求哈密顿算符

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 + ax + b\hat{p}_x$$

的本征值。其中, a, b 为实常数。

解 将哈密顿算符改写为

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + b\hat{p}_x \quad (1)$$

式中

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 &= \hat{H}_0 + ax \\ \hat{H}_0 &= \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 \end{aligned} \quad (2)$$

已知 $\hat{H}_0$ 的本征值为

$$E_n^0 = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad (3)$$

由上题中的(6)式可知, $\hat{H}_1$ 的本征值为

$$E_n^1 = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega - \frac{a^2}{2\mu\omega^2} \quad (4)$$

最后, 由上题中的(21)式可知, $\hat{H}$ 的本征值为

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega - \frac{a^2}{2\mu\omega^2} - \frac{\mu b^2}{2} \quad (5)$$

习题 1.11 不顾及自旋时, 讨论均匀磁场中自由电子的能级(朗道能级)。

取磁场为 z 方向, 即矢势 $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$ 。

解 不顾及自旋时, 均匀磁场中自由电子的哈密顿算符为

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu} \left[\left(\hat{p}_x + \frac{eB}{c}y \right)^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 \right] =$$