

量子力学习题精选与剖析

钱伯初 曾谨言 编著

科学出版社

量子力学习题精选与剖析

钱伯初 曾谨言 编著

科学★出版社

1988

内 容 简 介

本书是作者在北京大学和兰州大学所讲授的量子力学课程基础上,根据理论和实践相结合的原则,精选内容新颖、难度较大的 370 道量子力学习题。这些题大部分选自近年来国内外研究生试题和资格考试题,全部习题均给出了详细的分析和解答,其中有些解法是作者独创的。全书按内容分类编成十六章,内容包括:薛定谔方程和一维运动,粒子在 δ 函数型势场中的运动,谐振子,力学量的算符表示,费曼-海尔曼定理和维里定理,能量表象,中心力场,角动量,定态微扰论,变分法,量子跃迁,弹性散射,对称性,准经典近似,二次量子化,相对论量子力学。

本书可以作为量子力学和高等量子力学的参考书,可供预备深入钻研量子力学的大学生及研究生、教师和科技工作者参考。

量子力学习题精选与剖析

钱伯初 曾谨言 编著

责任编辑 陈菊华

科学出版社出版

北京朝阳门内大街 137 号

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1988 年 4 月第 一 版 开本: 850×1168 1/32

1988 年 4 月第一次印刷 印张: 21 7/8

精 1—4,500 插页: 精 3 平 2

印数: 平 1—8,700 字数: 584,000

ISBN 7-03-000214-8/O · 59

定 价: 布脊精装 7.90 元
平 装 6.80 元

前 言

物理学的各门基础理论课,如果脱离了在具体问题中的应用,就很难深入理解和掌握其基本概念和原理的实质.对于量子力学,尤其是这样.凡是有一些教学和科研实践经验的人,对此都会有同感.做习题就是一种初步地运用基本概念和原理来处理一些简单的或理想化了的问题的训练.在教学中我们发现,有相当一部分学生,他们可以将教科书中讲述的原理原封不动地复述出来,但是不会做题,更不会应用基本原理去处理具体问题.更有甚者,不少人在学过《高等量子力学》课程之后,仍对某些很简单的量子力学问题束手无策.这种“知识多,能力差”的通病应该引起我们深思.我们认为,通过基础课的教学,不仅要向学生传授知识,更重要的是培养思考和解决问题的能力.

从近年来国外许多大学的量子力学新教材、习题、试题以及研究生资格考试题来看,其特点是难度高,灵活性大,反映量子力学在各前沿研究领域中的应用的内容较多.特别是,国外许多大学的研究生资格考试题有相当大一部分是从科研前沿课题中直接提取出来的.国内的学生碰到这些问题时,往往感到无从下手.近年来,由于教学的需要,我们接触了大量的这类题.为了满足国内广大师生的要求,我们精选了 370 道有代表性的习题,作了较深入和新颖的剖析,整理成本书.书中习题的解答,绝大多数都是我们自己给出的,即原始的(original)而不是转抄的.解法力求简明,直截了当.有些题,给出了多种解法,以便读者对照比较,有利于深入了解各种解法之间的内在联系.我们希望读者能够以研究的态度阅读本书,这样才能较好地领会并掌握各种方法的精神实质,做到举一反三.我们相信,凡是认真钻研了这本书的读者,对于量子力学基本概念和原理的理解程度,以及应用量子力学处理具体

问题的能力,一定会有较大的提高。

希望本书的出版,对于进一步提高我国的量子力学教学水平有所裨益。不妥当和不正确之处,在所难免,诚恳希望广大读者提出批评指正。

目 录

前言

第一章	薛定谔方程。一维运动.....	1
第二章	粒子在 δ 函数型势场中的运动.....	31
第三章	谐振子.....	58
第四章	力学量的算符表示.....	109
第五章	费曼-海尔曼定理和维里定理	154
第六章	能量表象.....	172
第七章	中心力场.....	182
第八章	角动量.....	237
第九章	定态微扰论.....	361
第十章	变分法.....	452
第十一章	量子跃迁.....	495
第十二章	弹性散射.....	525
第十三章	对称性.....	576
第十四章	准经典近似.....	606
第十五章	二次量子化.....	630
第十六章	相对论量子力学.....	655

第一章 薛定谔方程. 一维运动

1.1 设 $\psi_1(\mathbf{r}, t)$ 和 $\psi_2(\mathbf{r}, t)$ 是薛定谔方程

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

的两个解, 证明 $\int \psi_1^* \psi_2 d^3x$ 与时间无关.

证 ψ_1 和 ψ_2 分别满足薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_1 + V \psi_1, \quad (1)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_2 + V \psi_2, \quad (2)$$

以 ψ_1^* 左乘式 (2), ψ_2 左乘式 (1) 之共轭方程, 再相减, 即得

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi_1^* \psi_2) &= \frac{\hbar^2}{2m} (\psi_2 \nabla^2 \psi_1^* - \psi_1^* \nabla^2 \psi_2) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \nabla \cdot (\psi_2 \nabla \psi_1^* - \psi_1^* \nabla \psi_2), \end{aligned}$$

再对全空间积分, 得到

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \int \psi_1^* \psi_2 d^3x &= \frac{\hbar^2}{2m} \int \nabla \cdot (\psi_2 \nabla \psi_1^* - \psi_1^* \nabla \psi_2) d^3x \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \oint (\psi_2 \nabla \psi_1^* - \psi_1^* \nabla \psi_2) \cdot d\mathbf{s}, \quad (3) \end{aligned}$$

其中 $d\mathbf{s}$ 为面元. 按照波函数在无穷远处迅速趋于零的条件, 式 (3) 右端之面积分为零, 故得

$$\frac{d}{dt} \int \psi_1^* \psi_2 d^3x = 0,$$

亦即 $\int \psi_1^* \psi_2 d^3x$ 与时间无关.

1.2 证明从单粒子薛定谔方程得出的粒子速度场是非旋的，即求证

$$\nabla \times \mathbf{v} = 0,$$

其中 $\mathbf{v} = \mathbf{j}/\rho$, ρ 为几率密度, $\mathbf{j}$ 为几率流密度.

证 几率密度和几率流密度的表达式为

$$\begin{aligned}\rho &= \phi^* \phi, \\ \mathbf{j} &= -\frac{i\hbar}{2m} (\phi^* \nabla \phi - \phi \nabla \phi^*),\end{aligned}$$

因此速度场为

$$\begin{aligned}\mathbf{v} = \mathbf{j}/\rho &= -\frac{i\hbar}{2m} \left(\frac{\nabla \phi}{\phi} - \frac{\nabla \phi^*}{\phi^*} \right) \\ &= -\frac{i\hbar}{2m} (\nabla \ln \phi - \nabla \ln \phi^*) \\ &= -\frac{i\hbar}{2m} \nabla \left(\ln \frac{\phi}{\phi^*} \right),\end{aligned}$$

其旋度为

$$\nabla \times \mathbf{v} = -\frac{i\hbar}{2m} \nabla \times \nabla \left(\ln \frac{\phi}{\phi^*} \right) = 0.$$

1.3 粒子在一维势场 $V(x)$ 中运动, 试证明: 属于不同能级的束缚态波函数互相正交.

证 设 ϕ_1, ϕ_2 分别为属于能级 E_1, E_2 的束缚态波函数. 由于是一维束缚态, ϕ_1, ϕ_2 都是实函数, 故只需证明

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_1(x) \phi_2(x) dx = 0.$$

ϕ_1, ϕ_2 均应满足定态薛定谔方程, 即

$$\phi_1'' = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E_1] \phi_1, \quad (1)$$

$$\phi_2'' = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E_2] \phi_2, \quad (2)$$

以 ϕ_2 左乘式 (1), ϕ_1 左乘式 (2), 再相减, 即得

$$\begin{aligned} \frac{2m}{\hbar^2} (E_2 - E_1) \phi_1 \phi_2 &= \phi_2 \phi_1'' - \phi_1 \phi_2'' \\ &= \frac{d}{dx} (\phi_2 \phi_1' - \phi_1 \phi_2'), \end{aligned}$$

对全空间积分, 得到

$$\begin{aligned} \frac{2m}{\hbar^2} (E_2 - E_1) \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_1 \phi_2 dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d}{dx} (\phi_2 \phi_1' - \phi_1 \phi_2') dx \\ &= (\phi_2 \phi_1' - \phi_1 \phi_2') \Big|_{-\infty}^{+\infty} = 0 \end{aligned}$$

(束缚态波函数在无穷远处必须趋于 0)。因此, 当 $E_2 \neq E_1$, 就有

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_1 \phi_2 dx = 0, \quad (3)$$

亦即 ϕ_1 与 ϕ_2 正交。

1.4 粒子在深度为 V_0 , 宽度为 a 的直角势阱(如图 1.4)中运动, 求:

(a) 阱口刚好出现一个束缚态能级 (即 $E \approx V_0$) 的条件。

(b) 束缚态能级总数。并和无限深势阱作比较。

解 粒子能量 E 小于 V_0 时为束缚态, E 大于 V_0 时为游离态。定态薛定谔方程为

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

令

$$\sqrt{2mV_0}/\hbar = k_0, \quad \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar = \beta, \quad (2)$$

式 (1) 可以写成

$$\begin{cases} \phi'' + \frac{2mE}{\hbar^2} \phi = 0, & |x| \leq a/2 \text{ (阱内)} \end{cases} \quad (3)$$

$$\begin{cases} \phi'' - \beta^2 \phi = 0, & |x| \geq a/2 \text{ (阱外)} \end{cases} \quad (4)$$

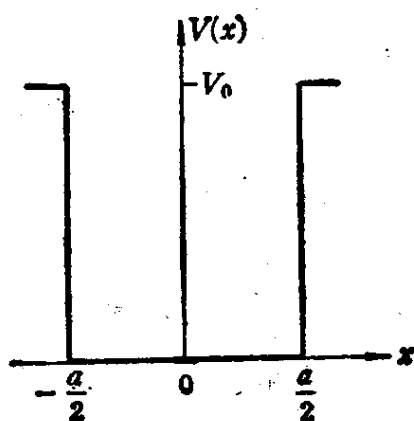


图 1.4

无限远处束缚态波函数应趋于 0, 因此式 (4) 的解应取为

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

当阱口刚好出现束缚态能级时, $E \approx V_0$, $\beta \approx 0$, 因此

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

阱内波函数可由式 (3) 解出, 当 $E \approx V_0$, 解为

$$\begin{aligned} \text{偶宇称} \quad \psi(x) &= \cos k_0 x, \\ \text{奇宇称} \quad \psi(x) &= \sin k_0 x, \end{aligned} \quad |x| \leq a/2 \quad (7)$$

阱内、外 ψ 和 ψ' 应该连续, 而由式 (6) 可知, $x = a/2$ 处 $\psi' = 0$, 将这条件用于式 (7), 即得

$$\begin{aligned} \text{偶宇称} \quad \sin \frac{k_0 a}{2} &= 0, \quad k_0 a = 2\pi, 4\pi, 6\pi, \dots \\ \text{奇宇称} \quad \cos \frac{k_0 a}{2} &= 0, \quad k_0 a = \pi, 3\pi, 5\pi, \dots \end{aligned} \quad (8)$$

亦即阱口刚好出现束缚能级的条件为

$$k_0 a = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (9)$$

即

$$\boxed{2mV_0 a^2 / \hbar^2 = n^2 \pi^2.} \quad (10)$$

一维势阱至少有一个束缚能级. 因此, 如 $2mV_0 a^2 / \hbar^2 < \pi^2$, 只存在一个束缚态, 偶宇称(基态). 如 $2mV_0 a^2 / \hbar^2 = \pi^2$, 除基态外, 阱口将再出现一个奇宇称态能级, 共二个能级. 如 $2mV_0 a^2 / \hbar^2 = (2\pi)^2$, 阱口将出现第三个能级(偶宇称). 依此类推. 由此可知, 对于任何 $V_0 a^2$ 值, 束缚态能级总数为

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

其中符号 $[A]$ 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

$$E_n = \frac{1}{2m} \left(\frac{n\pi\hbar}{a} \right)^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

则 $E \leq V_0$ 的能级数为

$$n = \left[\frac{a}{\pi \hbar} \sqrt{2mV_0} \right] = N - 1. \quad (12)$$

也就是说,如果只计算 $E \leq V_0$ 的能级数,则有限深 (V_0) 势阱的能级数比无限深势阱的能级数多一个。注意,后者的每一个能级均一一对应地高于前者的相应能级(参看题 5.5)。

1.5 对于直角势阱(深度为 V_0 , 宽度为 a) 的第 n 个束缚态 ϕ_n , E_n , 在 $V_0 \gg E_n$ 条件下,计算

(a) 粒子在阱外出现的几率。

(b) $V(x)$ 和 $V^2(x)$ 的平均值,并和 E_n 比较。

解 以偶宇称态为例。定态薛定谔方程[见题 1.4 式 (3)、(4)]可以写成

$$\begin{cases} \psi'' + k^2\psi = 0, & |x| \leq a/2 \text{ (阱内)} \\ \psi'' - \beta^2\psi = 0, & |x| \geq a/2 \text{ (阱外)} \end{cases} \quad (1)$$

其中

$$k = \sqrt{2mE}/\hbar, \quad \beta = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar. \quad (2)$$

注意: 在 $V_0 \gg E$ 条件下, $\beta \gg k$ 。

式 (1) 的偶宇称解为

$$\begin{aligned} \psi &= \cos kx, & |x| &\leq a/2 \\ \psi &= Ce^{-\beta|x|}, & |x| &\geq a/2 \end{aligned} \quad (3)$$

$x = a/2$ 处 ψ 应连续,由此得出

$$C = e^{\beta a/2} \cos \frac{ka}{2}. \quad (4)$$

$x = a/2$ 处 ψ' 也应连续,由此得出

$$C = \frac{k}{\beta} e^{\beta a/2} \sin \frac{ka}{2}.$$

和式 (4) 相除,即得能级公式

$$\operatorname{tg} \frac{ka}{2} = \frac{\beta}{k}. \quad (5)$$

在 $\beta \gg k$ 条件下,式 (5) 的解为

$$ka \approx n\pi, \quad n = 1, 3, 5, \dots \quad (6)$$

代入式(2), 即得能级为

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \approx \frac{1}{2m} \left(\frac{n\pi\hbar}{a} \right)^2. \quad (7)$$

这正是无限深势阱的能级公式。

现在计算粒子在阱内、外出现的几率。由式(3), (4)容易求出

$$\begin{aligned} \int_{\text{阱外}} |\phi|^2 dx &= 2C^2 \int_{a/2}^{\infty} e^{-2\beta x} dx \\ &= \frac{C^2}{\beta} e^{-\beta a} = \frac{1}{\beta} \cos^2 \frac{ka}{2}, \end{aligned} \quad (8)$$

$$\int_{\text{阱内}} |\phi|^2 dx = 2 \int_0^{a/2} \cos^2 kx dx = \frac{a}{2} \left(1 + \frac{\sin ka}{ka} \right). \quad (9)$$

考虑到 $ka \approx n\pi (n = 1, 3, 5, \dots)$, $\sin ka$ 和 $\cos(ka/2)$ 均接近于零, 可知粒子出现在阱外几率远小于阱内几率。而且

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\phi|^2 dx \approx \int_{\text{阱内}} |\phi|^2 dx \approx \frac{a}{2},$$

$$\text{阱外几率} = \frac{\int_{\text{阱外}} |\phi|^2 dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} |\phi|^2 dx} \approx \frac{2}{\beta a} \cos^2 \frac{ka}{2}. \quad (10)$$

利用能级公式(5), 易得

$$1 + \operatorname{tg}^2 \frac{ka}{2} = \frac{k^2 + \beta^2}{k^2} = \frac{V_0}{E},$$

$$\boxed{\cos^2 \frac{ka}{2} = \frac{E}{V_0}}, \quad (11)$$

代入式(10), 即得

$$\text{阱外几率} = \frac{2E}{a\beta V_0} \approx \frac{2\hbar}{a\sqrt{2mV_0}} \frac{E}{V_0}. \quad (12)$$

考虑到 $V_0 \gg E$ 和能级公式(7), 易见

$$\sqrt{2mV_0} \gg n\pi\hbar/a, \quad (13)$$

因此,

$$\text{阱外几率} \ll \frac{2E}{n\pi V_0}. \quad (14)$$

最后计算 $V(x)$ 和 $V^2(x)$ 平均值。利用式 (12),

$$\overline{V(x)} = (\text{阱外几率}) V_0 \approx \frac{2\hbar E}{a\sqrt{2mV_0}}, \quad (15)$$

$$\overline{V^2} = (\text{阱外几率}) V_0^2 \approx \frac{\hbar E}{ma} \sqrt{2mV_0}. \quad (16)$$

再利用式 (13), 即可和 E_n (即 E) 作出比较,

$$\boxed{\overline{V(x)} \ll \frac{2E_n}{n\pi}, \quad \overline{V^2} \gg \frac{n\pi\hbar^2 E}{ma^2} \approx \frac{2}{n\pi} E_n^2.} \quad (17)$$

1.6 粒子在无限深方势阱(宽度为 a)中运动, 处于第 n 个束缚态 ψ_n , 求粒子对于每一侧阱壁的平均作用力。

解 无限深方势阱可以视为有限深(深度为 V_0)势阱当 $V_0 \rightarrow \infty$ 的极限情形, 即

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| < a/2 \\ V_0, & |x| \geq a/2 \end{cases} \quad (V_0 \rightarrow \infty) \quad (1)$$

粒子所受作用力为 $-dV/dx$, 粒子对阱壁的作用力为

$$F(x) = \frac{dV}{dx} = V_0 \delta\left(x - \frac{a}{2}\right) - V_0 \delta\left(x + \frac{a}{2}\right), \quad (2)$$

其中第一项作用于阱壁右侧 ($x = a/2$), 第二项作用于阱壁左侧 ($x = -a/2$)。第一项的平均值为

$$\langle F_+ \rangle = \frac{\int |\phi|^2 V_0 \delta\left(x - \frac{a}{2}\right) dx}{\int |\phi|^2 dx} = \frac{V_0 \left|\phi\left(\frac{a}{2}\right)\right|^2}{\int |\phi|^2 dx}, \quad (3)$$

其中积分均为全空间积分。利用题 1.5 的计算结果, 容易算出

$$\langle F_+ \rangle \approx \frac{2V_0}{a} \cos^2 \frac{\hbar a}{2} = \frac{2E_n}{a}. \quad (4)$$

V_0/E 越大, 式 (4) 越准确。

由对称性,显然有

$$\langle F_{\pm} \rangle = -\langle F_{\mp} \rangle. \quad (5)$$

式(4)可作如下解释: 设固定阱壁左侧而令右侧徐缓向外移动距离 Δa , 则粒子对外作功 $\langle F_{\pm} \rangle \Delta a$, 结果导致能级降低, 根据能量守恒定律, 应有

$$\langle F_{\pm} \rangle = -\frac{\partial E_n}{\partial a} = -\frac{\partial}{\partial a} \left(\frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \right) = \frac{2}{a} E_n,$$

此即式(4).

1.7 质量为 m 的粒子在均匀力场 $f(x) = -F (F > 0)$ 中运动, 运动范围限制在 $x \geq 0$. 试在动量表象中求解束缚态能级和本征函数.

解 势能为 $V(x) = Fx$, 总能为

$$H = T + V = \frac{p^2}{2m} + Fx. \quad (1)$$

在动量表象中, x 的算符表示为

$$x = i\hbar \frac{d}{dp}, \quad (2)$$

H 的算符表示为

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + i\hbar F \frac{d}{dp}. \quad (3)$$

定态薛定谔方程为

$$\frac{p^2}{2m} \varphi(p) + i\hbar F \frac{d}{dp} \varphi(p) = E \varphi(p), \quad (4)$$

其中 $\varphi(p)$ 是动量表象中的波函数. 式(4)是非常简单的一阶微分方程, 其解为

$$\varphi(p) = A \exp \left[\frac{i}{\hbar F} \left(\frac{p^3}{6m} - Ep \right) \right], \quad (5)$$

A 是归一化常数.

变到 x 表象, 波函数为

$$\begin{aligned}
\psi(x) &= (2\pi\hbar)^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(p) e^{ipx/\hbar} dp \\
&= A(2\pi\hbar)^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \frac{i}{\hbar} \left[\frac{p^3}{6mF} + \left(x - \frac{E}{F}\right)p \right] dp \\
&= 2A(2\pi\hbar)^{-1/2} \int_0^{\infty} \cos \left[\frac{p^3}{6\hbar mF} + \frac{p}{\hbar} \left(x - \frac{E}{F}\right) \right] dp \\
&= \frac{C}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \cos \left(\frac{u^3}{3} + u\xi \right) du, \tag{6}
\end{aligned}$$

其中

$$u = p(2\hbar mF)^{-1/3}, \tag{7}$$

$$\xi = \left(x - \frac{E}{F}\right) \left(\frac{2mF}{\hbar^2}\right)^{1/3} = \frac{x}{l} - \lambda, \tag{8}$$

$$l = \left(\frac{\hbar^2}{2mF}\right)^{1/3}, \tag{9}$$

$$\lambda = \left(\frac{2m}{\hbar^2 F^2}\right)^{1/3} E = \frac{2mE}{\hbar^2} l, \tag{10}$$

l 是本题的特征长度。

除归一化常数 C 外，式 (6) 右端正是以 ξ 为变量的艾里 (Airy) 函数¹⁾。

当 $\xi > 0$ ($x > E/F$ ，即经典禁区)，艾里函数表现为第二类变型贝塞耳函数，即

$$\psi(x) = \sqrt{\xi} K_{1/3} \left(\frac{2}{3} \xi^{3/2} \right) \xrightarrow{\xi \rightarrow \infty} \sqrt{\xi} \left(\frac{3\pi}{4\xi^{3/2}} \right)^{1/2} e^{-\frac{2}{3}\xi^{3/2}}. \tag{11}$$

当 $\xi < 0$ ($x < E/F$ ，即经典允许区)，艾里函数表现为第一类贝塞耳函数，即

$$\psi(x) = \sqrt{|\xi|} \left[J_{1/3} \left(\frac{2}{3} |\xi|^{3/2} \right) + J_{-1/3} \left(\frac{2}{3} |\xi|^{3/2} \right) \right]. \tag{12}$$

能级 E 由边界条件 $\psi(0) = 0$ 决定，即

$$J_{1/3} \left(\frac{2}{3} \lambda^{3/2} \right) + J_{-1/3} \left(\frac{2}{3} \lambda^{3/2} \right) = 0, \tag{13}$$

1) 艾里函数的基本性质可以参看朗道等著《量子力学》上册（高等教育出版社，1980）中的附录 6。

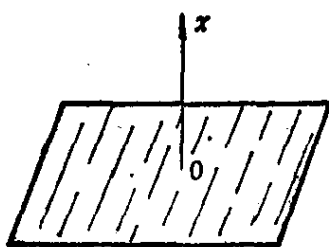
其解可由贝塞耳函数表查出,为

$$\lambda = 2.3381, 4.0880, 5.5206, 6.7867, 7.9441, \dots,$$

能量本征值和 λ 的关系见式 (10)。基态能级为

$$E_1 = 1.8558 \left(\frac{\hbar^2 F^2}{m} \right)^{1/3}. \quad (14)$$

1.8 一个电子被限制在一块电介质 (无限大) 平面的上方 ($x \geq 0$) 运动, 介质的介电常数为 ϵ , 不可穿透。按电象法可求出静电势能为



$$V(x) = -\frac{\alpha}{x}, \quad \alpha = \frac{e^2}{4} \left(\frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 1} \right) > 0, \quad (1)$$

图 1.8

试求电子的能级 ($E < 0$)。

解一 电子在 y, z 方向的运动为自由运动, 其动能可连续变化, 这部分能量不予考虑。 x 方向的运动, 能量本征方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) - \frac{\alpha}{x} \phi(x) = E \phi(x), \quad (2)$$

边界条件为 $\phi(0) = 0$ 。

式 (2) 的结构和库仑场 $V(r) = -\alpha/r$ 中 s 态 ($l=0$) 的径向方程相同, 后者为

$$\phi = R(r) = u(r)/r, \quad (3)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} u(r) - \frac{\alpha}{r} u(r) = E u(r), \quad (4)$$

边界条件为 $u(0) = 0$ [$\phi(0)$ 有限]。众所周知, 式 (4) 的束缚态能级为

$$E_n = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (5)$$

这也就是式 (2) 的能级。波函数也可以利用库仑场的 s 态解而写出来。

解二 在动量表象中求解。能量本征方程为

$$\left(\frac{p^2}{2m} - \frac{\alpha}{x}\right) \varphi(p) = E\varphi(p), \quad (6)$$

$\varphi(p)$ 为波函数。在 p 表象中,

$$x = i\hbar \frac{d}{dp}, \quad \frac{1}{x} = \frac{1}{i\hbar} \int dp, \quad (7)$$

所以式(6)可以写成

$$(p^2 + \eta^2)\varphi(p) = \frac{2m\alpha}{i\hbar} \int \varphi(p) dp, \quad \eta^2 = -2mE \quad (8)$$

令

$$\Phi(p) = \int \varphi(p) dp, \quad (9)$$

则

$$\varphi(p) = \frac{d}{dp} \Phi(p), \quad (9')$$

式(8)可以写成一阶微分方程的形式:

$$(p^2 + \eta^2) \frac{d}{dp} \Phi(p) = \frac{2m\alpha}{i\hbar} \Phi(p), \quad (10)$$

即

$$\frac{d\Phi}{\Phi} = \frac{2m\alpha}{i\hbar} \frac{dp}{p^2 + \eta^2} \quad (10')$$

积分,即得

$$\ln \Phi(p) = \frac{2m\alpha}{i\hbar} \frac{1}{\eta} \operatorname{tg}^{-1} \left(\frac{p}{\eta} \right),$$

$$\Phi(p) = \int \varphi(p) dp = \exp \left[\frac{2m\alpha}{i\hbar} \frac{1}{\eta} \operatorname{tg}^{-1} \left(\frac{p}{\eta} \right) \right], \quad (11)$$

$\operatorname{tg}^{-1} \left(\frac{p}{\eta} \right)$ 是 p 的多值函数,

$$\operatorname{tg}^{-1} \left(\frac{p}{\eta} \right) = \left[\operatorname{tg}^{-1} \left(\frac{p}{\eta} \right) \right]_{\text{主值}} \pm k\pi, \quad k = 1, 2, 3, \dots$$

而 $\varphi(p)$ 和 $\Phi(p)$ 应该是单值的,为此,必须

$$\frac{2m\alpha}{\hbar\eta} \pi = 2n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$