

高等院校物理学习辅导丛书

# 量 子 力 学

——考研辅导教材

史守华 编著

Quantum Mechanics——Companion to Post Graduate Examinations

清华大学出版社

北 京

## 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

量... 史... 量子力学 - 研究生 - 入学考试 - 自学参考资料 .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

<http://www.tup.com.cn>

社总机: 010-62770175

地 址: 北京清华大学学研大厦

邮 编: 100084

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 淼

印 刷 者:

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 10 月第 1 版 2003 年 10 月第 1 次印刷

书 号: ISBN 7-302-06992-1/O·314

印 数: 1~ 000

定 价: 元

**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

1 状态和波函数 .....	1
2 一维运动 .....	11
3 力学量和算符 .....	30
4 对易关系 厄米矩阵 .....	43
5 Feynman Hellmann 定理 Virial 定理 .....	57
6 中心力场 .....	66
7 带电粒子在电磁场中的运动 .....	79
8 自旋与角动量 .....	87
9 估算法 测不准关系 .....	111
10 近似方法 .....	116
11 粒子数表象 .....	133
12 全同粒子 .....	142
13 量子跃迁 散射 .....	150
参考书目 .....	158

## 【内容提要】

1. 量子力学中用波函数描写微观体系的状态。
2.  $\psi^* \psi d = |\psi|^2 d$  是状态用  $\psi$  描写的粒子在体积元  $d$  内的几率(设  $\psi$  是归一化的)。
3. 态叠加原理: 设  $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n, \dots$  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:

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

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

$$H \psi = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi + V(\mathbf{r}, t) \psi = E \psi$$

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:  $\int_{(\text{全})} \psi^* \psi d\tau = 1$ 。相对几率分布:  $P(\mathbf{r}) \sim |\psi(\mathbf{r})|^2$ , 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  $\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2\mu} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi)$  与几率密度  $\rho = \psi^* \psi$  满足连续性方程

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

## 【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  $\psi_1, \psi_2$  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

$$\int \psi_1^*(\mathbf{r}) \psi_2(\mathbf{r}) d\mathbf{S} = 0$$

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。 $\psi_1, \psi_2$  满足的两个定态S eq为

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_1(\mathbf{r}) + V_1(\mathbf{r}) \psi_1(\mathbf{r}) = E_1 \psi_1(\mathbf{r}) \quad (1)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_2(\mathbf{r}) + V_2(\mathbf{r}) \psi_2(\mathbf{r}) = E_2 \psi_2(\mathbf{r}) \quad (2)$$

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

$$\begin{aligned} (E_1 - E_2) \int \psi_1^*(\mathbf{r}) \psi_2(\mathbf{r}) d\mathbf{S} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int (\psi_2^* \nabla^2 \psi_1 - \psi_1^* \nabla^2 \psi_2) d\mathbf{S} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int \nabla \cdot (\psi_2^* \nabla \psi_1 - \psi_1^* \nabla \psi_2) d\mathbf{S} = -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi_2^* \nabla \psi_1 - \psi_1^* \nabla \psi_2) \cdot d\mathbf{S} \\ &= 0 \quad (\text{束缚态边条件: } r \rightarrow \infty \text{ 处, } \psi_1 \rightarrow 0, \psi_2 \rightarrow 0) \end{aligned}$$

如果  $E_1 \neq E_2$ , 则有

$$\int \psi_1^*(\mathbf{r}) \psi_2(\mathbf{r}) d\mathbf{S} = 0$$

亦即  $\psi_1, \psi_2$  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

$$\begin{aligned} \psi_1 &= A e^{-\frac{1}{2}ax^2} \\ \psi_2 &= B(x^2 + bx + c) e^{-\frac{1}{2}ax^2} \end{aligned}$$

试求这两个状态的能级间隔。

解:  $\psi_1, \psi_2$  都满足定态 S .eq:

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

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

$\psi_2 \times (1) - \psi_1 \times (2)$ , 得

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

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

$$E_2 - E_1 = \frac{1}{ABc2m} (\psi_2^2 - 2AB) = -\frac{\hbar^2}{mc}$$

1.3 质量为  $m$  的粒子处于能量为  $E$  的本征态, 波函数为  $\psi(x) = A x e^{-\frac{1}{2} x^2}$ , 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  $m, \psi, V, E$  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:

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

### 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  $\delta$  型位势, 波函数导数有跃变, 而波函数本身仍连续:

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

## 1.4 粒子在位势

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

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

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

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

利用边条件  $\psi(0) = 0$ , 知  $\delta = 0$ 。

在  $x > a$  区域, 一般解为

$$\psi_2(x) = B e^{-kx} + B e^{kx}$$

$$k = \sqrt{-2mE} \quad (2)$$

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

$$\psi_1(x) = A \sin kx, \quad 0 < x < a \quad (3)$$

$$\psi_2(x) = B e^{-kx}, \quad x > a$$

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:

$$\left( \ln \psi_1(x) \right) \Big|_{x=a} = \left( \ln \psi_2(x) \right) \Big|_{x=a} \quad (4)$$

式(3)代入式(4), 得

$$ka \cot ka = -ka \quad (5)$$

但  $k, k$  不独立。由式(1), (2)可得

$$(ka)^2 + (ka)^2 = \frac{2ma^2 V_0}{\hbar^2} \quad (6)$$

令  $\eta = ka$ ,  $\xi = ka$ , 则式(5), (6)化为

$$\begin{aligned} \eta &= -\xi \cot \xi \\ \eta^2 + \xi^2 &= 2ma^2 V_0 / \hbar^2 \end{aligned} \quad (7)$$

此方程至少有一个解的条件为:

$$\frac{2ma^2 V_0}{\hbar^2} \geq \frac{\pi^2}{2} \quad (8a)$$

或

$$8ma^2 V_0 / \hbar^2 \geq \pi^2 \quad (8b)$$

这是对粒子质量  $m$ , 位阱深  $V_0$  和宽  $a$  的一个限制。

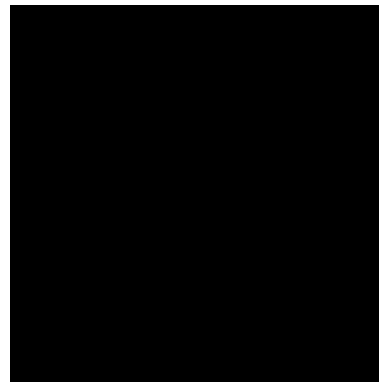


图 1.1

### 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

$$\psi_1 = Ae^{-x^2/2}$$

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

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:我们可以直接从薛定谔方程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。

$\psi_1$  无零点,也即没有节点,它对应的态是基态,因而能量最低。 $\psi_2$  中可能有两个节点,因为解  $x^2 + bx + c = 0$ ,得在一定条件下  $\psi_2$  有两个节点:

$$x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4c}}{2}$$

由于题目给定  $\psi_2$  为能量本征态,故必有两节点,于是可以判定  $\psi_2$  描写的是第二激发态,能量高于  $\psi_1$  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  $\psi_1, \psi_2$  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  $\psi_2$  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  $\psi_1$  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

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

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

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

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  $\psi$  函数的形式看,角度方向的零点由球谐函数  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  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

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

### 根据几率守恒定律解题

几率守恒定律是薛定谔方程的一个基本结果,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  $\psi(\mathbf{r}, t)$ , 它可归一化,意味着积分  $\int |\psi|^2 d^3r$  是有界的。于是分析在  $r = |\mathbf{r}|$  很大处的行为可知当  $r \rightarrow \infty$ , 必有  $\psi \rightarrow 0$ 。

由几率守恒定律

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

对空间积分,得

$$\frac{\partial}{\partial t} \int |\psi|^2 d^3r + \int \nabla \cdot \mathbf{j} d^3r = 0$$

或

$$\frac{\partial}{\partial t} \int |\psi|^2 d^3r = - \int \nabla \cdot \mathbf{j} d^3r = - \int_S \mathbf{j} \cdot d\mathbf{S}$$

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

$$\frac{\partial}{\partial t} \int |\psi|^2 d^3r = 0$$

亦即  $\int |\psi|^2 d^3r$  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

$$\mathbf{j} = -\frac{i}{2m} [\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi] - \frac{q}{mc} \psi^* \mathbf{A} \psi \quad (1)$$

对于定态而言，它随时间的变化关系为

$$i \psi_t = E \psi$$

$E$  为能量，是实数。于是

$$-i \psi_t^* = E^* \psi^*$$

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

这里已用了  $\nabla_t \mathbf{A} = 0$ 。

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  $\mu$ ，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  $(\rho, \phi, z)$ ， $\rho = R$  为定值，一般柱坐标  $\phi$  取值范围是  $0 \sim 2\pi$ 。在这里如果

从  $z = d \frac{\phi}{2}$ ,  $-\pi < \phi < +\pi$ , 则坐标  $z$  可与角度  $\phi$  之间建立一个对应关系:

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

螺旋线上的线元平方

$$(dl)^2 = (Rd\phi)^2 + (dz)^2 = R^2 + \frac{d^2}{4} (d\phi)^2$$

这样, 在螺旋线上的梯度算符为

$$\nabla = \frac{1}{R^2 + \frac{d^2}{4}} \frac{d}{d\phi} \mathbf{l}$$

其中  $\mathbf{l}$  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

$$H = \frac{p^2}{2\mu} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \cdot \frac{1}{R^2 + \frac{d^2}{4}} \frac{d^2}{d\phi^2} = \frac{L^2}{2I}$$

$$L = -i\hbar \frac{d}{d\phi}, \quad I = \mu \left( R^2 + \frac{d^2}{4} \right)$$

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  $\phi$  不只在  $[0, 2\pi]$  内, 而是在  $-\pi < \phi < +\pi$  范围。解定态薛定谔方程得波函数

$$\psi(\phi) = A e^{ik\phi}$$

其中

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

从而解出能量

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

它有连续谱, 确实相当于自由运动, 不过等效质量变了。

在解薛定谔方程的过程中, 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

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

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。

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

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

与角度  $\theta$  无关。动能算符为

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

定态  $\psi(r, \theta)$  为

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

由于位势只依赖于向径  $r$ ,故可分离变量。令

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

则  $u(r)$  与  $\phi(\theta)$  各自满足方程

$$r^2 u'' + ru' - \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} V(r) u + \frac{2\mu E r^2}{\hbar^2} u = 0 \quad (1)$$

$$\phi'' + m^2 \phi = 0 \quad (2)$$

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

$$u = \begin{cases} c, & r = R \\ 0, & r > R \end{cases}$$

代入方程(2),它可改写为

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

其一般解为(只需讨论  $E > 0$ , 否则无周期解)

$$\phi = A e^{im\theta} + B e^{-im\theta} \quad (3)$$

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

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)

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

代入式(3),得

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

$$\text{或} \quad e^{im} (A - Be^{-i2m(\cdot)}) (e^{im2} - 1) = 0$$

此式有非零  $A, B$  解的条件是

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

因此, 波函数 为(已归一化)

$$(\cdot) = \frac{1}{2} e^{im}, m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

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

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

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

## 【内容提要】

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\text{本征函数 } \psi_{n_1 n_2 n_3}(\mathbf{r}) = \begin{cases} \frac{8}{abc} \sin \frac{n_1 x}{a} \sin \frac{n_2 y}{b} \sin \frac{n_3 z}{c}, & \text{阱内} \\ 0, & \text{阱外} \end{cases}$$

## 3. 一维谐振子

$$V = \frac{1}{2} \mu \omega^2 x^2$$

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

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

$$N_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{\mu \omega}{\hbar}\right)^{1/4}$$

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

$$\frac{d}{dx} \psi_n = \frac{n}{2} \alpha^{-1/2} \psi_{n-1} - \frac{n+1}{2} \alpha^{-1/2} \psi_{n+1}$$

宇称

$$\psi_n(-x) = (-1)^n \psi_n(x)$$

## 4. 势垒贯穿

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

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

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

任意形状的势垒  $V(x)$ , 透射系数为

$$T = T_0 e^{-2 \int_a^b \sqrt{2\mu(V(x) - E)} dx}$$

## 5. 势

$$V(x) = \pm V_0 \delta(x) \quad (V_0 > 0)$$

跃变条件

$$\psi(0^+) - \psi(0^-) = \pm \frac{2\mu}{\hbar^2} V_0 \psi(0)$$

## 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:  
 阱口刚好出现一个束缚态能级(即  $E = V_0$ )的条件;  
 束缚态能级总数, 并和无限深势阱作比较。

解:  $E < V_0$  时为束缚态,  $E > V_0$  时为游离态。

定态薛定谔方程为

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

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

则式(1)可写成

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} = 0, \quad |x| > a/2 \text{ (阱外)} \quad (4)$$

由于束缚态边条件( $|x| = a/2$  处,  $\psi = 0$ ), 式(4)的解应取为

$$\psi(x) = C e^{-k|x|}, \quad |x| > a/2 \quad (5)$$

当阱口刚好出现束缚态能级时,  $E = 0$ ,  $k = 0$ 。因此, 由(5)式得

$$\psi(x) = \pm C e^{-k|x|} = 0, \quad |x| > a/2 \quad (6)$$

阱内波函数由式(3)解出, 当  $E = 0$  时, 解为:

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

阱内、外  $\psi$  和  $\psi'$  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

$$\text{偶宇称 } \sin \frac{ka}{2} = 0, \quad ka = 2, 4, 6, \dots \quad (8a)$$

$$\text{奇宇称 } \cos \frac{ka}{2} = 0, \quad ka = 1, 3, 5, \dots \quad (8b)$$

亦即阱口刚好出现束缚态能级的条件为

$$ka = n, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (9)$$

$$\text{即 } \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar \cdot a = n \quad (10)$$

一维势阱至少有一个束缚能级。因此, 如果  $\sqrt{2mV_0} a/\hbar < \pi$ , 只存在一个束缚态, 偶宇称(基态); 如果  $\sqrt{2mV_0} a/\hbar = \pi$ , 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  $\sqrt{2mV_0} a/\hbar = (2\pi)$ , 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  $V_0 a^2$ , 束缚态能级总数为

$$N = 1 + \frac{a}{\pi} \sqrt{2mV_0} \quad (11)$$

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

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

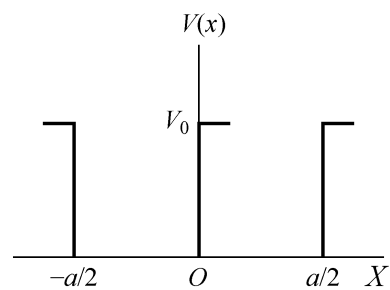


图 2.1