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

3. 态叠加原理:设 $\Psi_1, \Psi_2, \cdots, \Psi_n$ 是体系的可能状态,那么,这些态的线性叠加

$$\Psi = \sum_{i=1}^{n} c_i \Psi_i$$

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(Schrödinger)方程(简记为 S. eq)给出:

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

当势场 $V(\boldsymbol{r})$ 不显含 t 时,其解是定态解 $\Psi(\boldsymbol{r}, t) = \psi(\boldsymbol{r}) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar}$,$\psi(\boldsymbol{r})$ 满足定态 S. eq

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

定态 S. eq 即能量算符的本征方程。

5. 波函数的归一化条件:$\int_{(全)} |\psi|^2 \mathrm{d}\tau = 1$。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 $\boldsymbol{j} = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2\mu}(\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi)$ 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】

1.1 用球坐标表示的粒子波函数为 $\psi(r, \theta, \varphi)$。

① 写出粒子在(θ,φ)方向的立体角 $\mathrm{d}\Omega$ 中被测到的几率;

② 写出粒子在球壳$(r,r+\mathrm{d}r)$中被测到的几率;

③ 写出粒子在(θ,φ)方向的立体角 $\mathrm{d}\Omega$ 中且半径在 $0<r<a$ 范围内被测到的几率。

解 ①
$$P=\mathrm{d}\Omega\int_0^{\infty}|\psi(r,\theta,\varphi)|^2r^2\mathrm{d}r$$

②
$$P=r^2\mathrm{d}r\int_0^{\pi}\sin\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}|\psi(r,\theta,\varphi)|^2\mathrm{d}\varphi$$

③
$$P=\mathrm{d}\Omega\int_0^{a}|\psi(r,\theta,\varphi)|^2r^2\mathrm{d}r$$

1.2 一粒子的波函数为 $\psi(\boldsymbol{r})=\psi(x,y,z)$,写出粒子位于 $x\sim x+\mathrm{d}x$ 间的几率。

解 $P=\mathrm{d}x\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}y\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}z\,|\psi(x,y,z)|^2$

1.3 何谓几率流密度?写出几率流密度 $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)$ 的表达式。

解 单位时间内,与粒子前进方向垂直的单位面积内通过的几率称为几率流密度,

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

1.4 设质量为 m 的粒子在一维无限深势阱中运动,势阱的势能函数为

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

试用德布罗意(de Broglie)的驻波条件,求粒子能量的可能取值。

解 据驻波条件,有

$$a=n\frac{\lambda}{2},\quad n=1,2,3,\cdots$$

所以

$$\lambda=2a/n \tag{1}$$

又据德布罗意关系

$$p=h/\lambda \tag{2}$$

而能量

$$\begin{aligned}E&=p^2/2m=h^2/2m\lambda^2\\&=\frac{h^2n^2}{2m\cdot4a^2}=\frac{\pi^2\hbar^2n^2}{2ma^2},\quad n=1,2,3,\cdots\end{aligned} \tag{3}$$

1.5　设粒子限制在长、宽、高分别为 a,b,c 的箱内运动，试用量子化条件求粒子能量的可能取值。

解　除了与箱壁碰撞外，粒子在箱内作自由运动。假设粒子与箱壁碰撞不引起内部激发，则碰撞为弹性碰撞。动量大小不变，仅方向反向。选箱的长、宽、高三个方向分别为 x,y,z 轴方向，把粒子沿 x,y,z 轴三个方向的运动分开处理。利用量子化条件，对于 x 方向，有

$$\oint p_x \mathrm{d}x = n_x h, \quad n_x = 1,2,3,\cdots$$

即

$$p_x 2a = n_x h \quad （提示：2a 表示一来一回一个周期）$$

所以

$$p_x = n_x h/2a, \quad n_x = 1,2,3,\cdots$$

同理可得

$$p_y = n_y h/2b, \quad p_z = n_z h/2c$$

式中

$$n_y, n_z = 1,2,3,\cdots$$

则粒子能量

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2}\right), \quad n_x, n_y, n_z = 1,2,3,\cdots$$

1.6　设质量为 m 的粒子在谐振子势 $V(x)=\dfrac{1}{2}m\omega^2 x^2$ 中运动（图 1.1），用量子化条件求粒子能量 E 的可能取值。

$\left(\text{提示：利用} \oint p\mathrm{d}x = nh, n = 1,2,\cdots, p = \sqrt{2m[E - V(x)]}\text{，以及积分公式：}\int \sqrt{a^2 - u^2}\mathrm{d}u = \dfrac{u}{2}\sqrt{a^2 - u^2} + \dfrac{a^2}{2}\arcsin\dfrac{u}{a} + c\ \text{来求解。}\right)$

解　能量为 E 的粒子在谐振子势中的活动范围为

$$|x| \leqslant a \qquad (1)$$

其中 a 由下式决定：

$$E = V(x)|_{x=a} = \frac{1}{2}m\omega^2 a^2$$

由此得

$$a = \sqrt{2E/m\omega^2} \qquad (2)$$

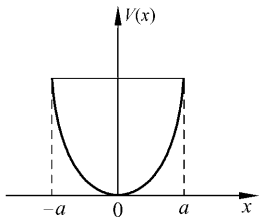

图　1.1

$x=\pm a$ 即为粒子运动的转折点。由量子化条件

$$\oint p\mathrm{d}x = 2\int_{-a}^{+a}\sqrt{2m\left(E-\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)}\mathrm{d}x = 2m\omega\int_{-a}^{+a}\sqrt{a^2-x^2}\mathrm{d}x$$

$$=2m\omega a^2\cdot\frac{\pi}{2}=m\omega\pi a^2=nh$$

得

$$a^2=\frac{nh}{m\omega\pi}=\frac{2\hbar n}{m\omega} \tag{3}$$

代入式(2),解出

$$E_n=n\hbar\omega,\quad n=1,2,3,\cdots \tag{4}$$

1.7 设一个平面转子的转动惯量为 I,求能量的可能取值。

$\left(\text{提示:利用}\int_0^{2\pi}p_\varphi\mathrm{d}\varphi=nh\text{,其中 }n=1,2,\cdots\text{,而 }p_\varphi\text{ 是平面转子的角动量。转子的能量 }E=p_\varphi^2/2I\text{。}\right)$

解 平面转子的转角(角位移)记为 φ。它的角动量 $p_\varphi=I\dot{\varphi}$(广义动量),p_φ 是运动恒量。按量子化条件

$$\int_0^{2\pi}p_\varphi\mathrm{d}\varphi=2\pi p_\varphi=mh,\quad m=1,2,3,\cdots$$

所以

$$p_\varphi=m\hbar$$

因而平面转子的能量

$$E_m=p_\varphi^2/2I=m^2\hbar^2/2I,\quad m=1,2,3,\cdots$$

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

① 证明粒子的能量平均值为

$$E=\int\mathrm{d}^3r\,w$$

其中

$$w=\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\Psi^*\cdot\nabla\Psi+\Psi^*V\Psi\quad\text{(能量密度)}$$

② 证明能量守恒公式

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

其中

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

证 ① 粒子的能量平均值为(设 Ψ 已归一化)

$$E = \int \Psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\Psi \mathrm{d}^3 r = \bar{T} + \bar{V} \tag{1}$$

其中

$$\bar{V} = \int \mathrm{d}^3 r \Psi^* V \Psi \quad (势能平均值) \tag{2}$$

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

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

其中 $\bar{T}$ 的第一项可化为面积分,而在无穷远处归一化的波函数必然为 0。因此

$$\bar{T} = \frac{\hbar^2}{2m}\int \mathrm{d}^3 r \nabla\Psi^* \cdot \nabla\Psi \tag{3}$$

结合式(1)、式(2)和式(3),可知能量密度

$$w = \frac{\hbar^2}{2m}\nabla\Psi^* \cdot \nabla\Psi + \Psi^* V \Psi \tag{4}$$

能量平均值

$$E = \int \mathrm{d}^3 r w$$

② 由式(4),得

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m}[\nabla\dot{\Psi}^* \cdot \nabla\Psi + \nabla\Psi^* \cdot \nabla\dot{\Psi}] + \dot{\Psi}^* V\Psi + \Psi^* V\dot{\Psi}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}[\nabla\cdot(\dot{\Psi}^* \nabla\Psi + \dot{\Psi}\nabla\Psi^*) - (\dot{\Psi}^* \nabla^2\Psi + \dot{\Psi}\nabla^2\Psi^*)] + \dot{\Psi}^* V\Psi + \Psi^* V\dot{\Psi}$$

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

$$= -\nabla\cdot s + E(\dot{\Psi}^* \Psi + \dot{\Psi}\Psi^*)$$

$$= -\nabla\cdot s + E\frac{\partial}{\partial t}\rho \quad (\rho\ 为几率密度)$$

$$= -\nabla\cdot s \quad (定态波函数,几率密度\ \rho\ 不随时间改变)$$

所以

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

1.9 考虑单粒子的 S. eq

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r},t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\boldsymbol{r},t)+[V_1(\boldsymbol{r})+\mathrm{i}V_2(\boldsymbol{r})]\Psi(\boldsymbol{r},t)\qquad(1)$$

V_1 与 V_2 为实函数。

① 证明粒子的几率(粒子数)不守恒;

② 证明粒子在空间体积 τ 内的几率随时间的变化为

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

证 ① 式(1)取复共轭,得

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi^*+(V_1-\mathrm{i}V_2)\Psi^*\qquad(2)$$

$\Psi^*\times(1)-\Psi\times(2)$,得

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

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi)=-\frac{\hbar}{2\mathrm{i}m}\nabla\cdot(\Psi^*\nabla\Psi-\Psi\nabla\Psi^*)+\frac{2V_2}{\hbar}(\Psi^*\Psi)\qquad(3)$$

即

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{j}=\frac{2V_2}{\hbar}\rho\neq0$$

此即几率不守恒的微分表达式。

② 式(3)对空间体积 τ 积分,得

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\iiint_\tau \mathrm{d}^3r(\Psi^*\Psi)&=-\frac{\hbar}{2\mathrm{i}m}\iiint_\tau\nabla\cdot(\Psi^*\nabla\Psi-\Psi\nabla\Psi^*)\mathrm{d}^3r+\frac{2}{\hbar}\iiint_\tau \mathrm{d}^3rV_2(\Psi^*\Psi)\\&=-\frac{\hbar}{2\mathrm{i}m}\oiint_S(\Psi^*\nabla\Psi-\Psi\nabla\Psi^*)\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S}+\frac{2}{\hbar}\iiint_\tau \mathrm{d}^3rV_2\Psi^*\Psi\end{aligned}$$

上式右边第一项代表单位时间内粒子经过表面进入体积 τ 的几率 $\left(-\oiint\boldsymbol{j}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S}\right)$,第二项代表体积 τ 中“产生”的几率,这一项表征几率(或粒子数)不守恒。

1.10 设 Ψ_1 和 Ψ_2 是 S. eq 的两个解,证明

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int\mathrm{d}^3r\Psi_1^*(\boldsymbol{r},t)\Psi_2(\boldsymbol{r},t)=0$$

证
$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi_1}{\partial t}=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)\Psi_1\qquad(1)$$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi_2}{\partial t}=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)\Psi_2 \tag{2}$$

取式(1)之复共轭，得

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi_1^*}{\partial t}=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)\Psi_1^* \tag{3}$$

$\Psi_2\times(3)-\Psi_1^*\times(2)$，得

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\Psi_1^*\Psi_2)=-\frac{\hbar^2}{2m}(\Psi_2\nabla^2\Psi_1^*-\Psi_1^*\nabla^2\Psi_2)$$

对全空间积分：

$$\begin{aligned}
&-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int\mathrm{d}^3r\Psi_1^*(\boldsymbol{r},t)\Psi_2(\boldsymbol{r},t)\\
&=-\frac{\hbar^2}{2m}\int\mathrm{d}^3r[\Psi_2\nabla^2\Psi_1^*-\Psi_1^*\nabla^2\Psi_2]\\
&=-\frac{\hbar^2}{2m}\int\mathrm{d}^3r[\nabla\cdot(\Psi_2\nabla\Psi_1^*-\Psi_1^*\nabla\Psi_2)\\
&\quad-(\nabla\Psi_2)\cdot(\nabla\Psi_1^*)+(\nabla\Psi_1^*)\cdot(\nabla\Psi_2)]\\
&=-\frac{\hbar^2}{2m}\int\mathrm{d}^3r[\nabla\cdot(\Psi_2\nabla\Psi_1^*-\Psi_1^*\nabla\Psi_2)]\\
&=-\frac{\hbar^2}{2m}\oint(\Psi_2\nabla\Psi_1^*-\Psi_1^*\nabla\Psi_2)\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S}=0\quad(\text{无穷远边界面上},\Psi_1,\Psi_2\to 0)
\end{aligned}$$

即

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int\mathrm{d}^3r\Psi_1^*(\boldsymbol{r},t)\Psi_2(\boldsymbol{r},t)=0$$

1.11 对于一维自由粒子，

① 设初态 $\Psi(x,0)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_0x/\hbar}$，求 $\Psi(x,t)$。

② 设波函数为 $\psi(x)=\delta(x)=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\displaystyle\int\mathrm{e}^{ikx}\mathrm{d}x=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}p$，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 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}$ 的叠加。试问 $\psi(x)=\delta(x)$ 是能量本征态吗？

③ 设粒子在 $t=0$ 时刻 $\Psi(x,0)=\delta(x)$，求 $\Psi(x,t)$。

$\Big($提示：利用积分公式 $\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty}\cos(\xi^2)\mathrm{d}\xi=\int_{-\infty}^{+\infty}\sin(\xi^2)\mathrm{d}\xi=\sqrt{\pi/2}$

或
$$\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(\mathrm{i}\xi^2)\mathrm{d}\xi=\sqrt{\pi}\exp(\mathrm{i}\pi/4)\Big)$$

解 ①
$$H\Psi(x,0)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_0x/\hbar}=\frac{p_0^2}{2m}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_0x/\hbar}$$

即初态 $\Psi(x,0)=e^{ip_0x/\hbar}$是一维自由粒子的能量本征态,能量本征值 $E=\frac{p_0^2}{2m}$,因而

$$\Psi(x,t)=e^{i(p_0x-Et)/\hbar},\quad E=\frac{p_0^2}{2m}$$

② 对于自由粒子,动量本征态同时也是能量本征态。由于 $\delta(x)$是无穷多个动量本征态 $e^{ipx/\hbar}$的叠加,所以 $\Psi(x,0)=\delta(x)$不是能量本征态。

③ 由于 $\Psi(x,0)=\delta(x)$,作傅里叶变换:

$$\Psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p)e^{ipx/\hbar}dp$$

$$\varphi(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi(x,0)e^{-ipx/\hbar}dx=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x)e^{-ipx/\hbar}dx=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

所以

$$\Psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p)e^{i(px-Et)/\hbar}dp$$

把 $E=p^2/2m$ 代入,得

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

进行指数配方

$$\Psi(x,t)=\frac{1}{2\pi\hbar}e^{imx^2/2\hbar t}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[-\frac{it}{2m\hbar}\left(p-\frac{mx}{t}\right)^2\right]dp$$

令

$$\xi^2=\frac{t}{2m\hbar}\left(p-\frac{mx}{t}\right)^2$$

则

$$\begin{aligned}\Psi(x,t)&=\frac{1}{2\pi\hbar}e^{imx^2/2\hbar t}\sqrt{\frac{2m\hbar}{t}}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-i\xi^2}d\xi\\&=\frac{1}{2\pi\hbar}\sqrt{\frac{2m\hbar}{t}}e^{imx^2/2\hbar t}\sqrt{\pi}e^{-i\pi/4}\\&=\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar t}}\exp\left[i\left(\frac{mx^2}{2\hbar t}-\frac{\pi}{4}\right)\right]\end{aligned}$$

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

1.12 写出动量表象中的不含时 S. eq。

解 经典能量方程

$$E=\frac{p^2}{2m}+V(\boldsymbol{r})\tag{1}$$

在动量表象中，算符化规则为

$$\boldsymbol{p} \to \boldsymbol{p}, \quad \boldsymbol{r} \to \mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\boldsymbol{p}} \tag{2}$$

将此规则运用于式(1)，并将式(1)两边分别作用于动量空间波函数 $\varphi(\boldsymbol{p})$上，即得动量表象中的不含时 S. eq

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

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。解波函数满足的薛定谔方程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。

1.13 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，$E_1 \neq E_2$，按题意要证明等式

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

凡这种与具体位势无关的结论，解题首先从 S. eq 出发。ψ_1，ψ_2 满足的两个定态 S. eq 分别为

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

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

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

$$\begin{aligned}(E_1 - E_2)\int \mathrm{d}\tau\psi_1^*(\boldsymbol{r})\psi_2(\boldsymbol{r}) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\int \mathrm{d}\tau(\psi_2\nabla^2\psi_1^* - \psi_1^*\nabla^2\psi_2) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\int \mathrm{d}\tau\nabla\cdot(\psi_2\nabla\psi_1^* - \psi_1^*\nabla\psi_2) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\oint(\psi_2\nabla\psi_1^* - \psi_1^*\nabla\psi_2)\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} \\ &= 0 \quad (\text{束缚态边界条件：} r\to\infty \text{ 处}, \psi_1, \psi_2 \to 0)\end{aligned}$$

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 正交或重叠积分为零。

1.14 已知描述单粒子一维束缚状态的两个本征函数分别为

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

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

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 $x=0$,代入式(3),可求得

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

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

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

出发,只要把已知的能量本征函数 $\psi(x)$ 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 形位势,波函数导数有跃变,而波函数本身仍连续 ,即 $V(x)=\pm\gamma\delta(x)$,则 $\psi'(0^+)-\psi'(0^-)=\pm\frac{2m\gamma}{\hbar^2}\psi(0)$。

1.16 粒子在位势

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

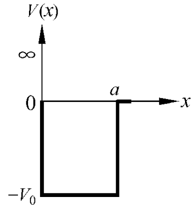

图 1.2

中运动(图 1.2),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

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

其中

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

利用边界条件 $\psi_1(0)=0$,知 $\varphi=0$。

在 $x>a$ 区域,一般解为

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

其中

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

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

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

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

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

把式(3)代入式(4),得

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

但 k,k' 不独立。由式(1)、式(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)、式(6)分别化为

$$\eta=-\xi\cot\xi \tag{7}$$

$$\eta^2+\xi^2=2ma^2V_0/\hbar^2 \tag{8}$$

式(8)是以 $r=\sqrt{2mV_0/\hbar^2}\,a$ 为半径的圆。对于束缚态来说,$-V_0<E<0$。由于 ξ 和 η 都大于零,所以式(8)表示的圆 $\eta^2+\xi^2=2ma^2V_0/\hbar^2$ 与式(7)表示的曲线 $\eta=-\xi\cot\xi$ 在第一象限的交点可决定束缚态能级。此方程至少有一个解的条件为:圆半径 $r\geqslant\pi/2$,即

$$\frac{2ma^2V_0}{\hbar^2}\geqslant\left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \tag{9a}$$

或

$$8ma^2V_0/\pi^2\hbar^2 \geqslant 1 \tag{9b}$$

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。

1.17 两个波函数

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

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

都对应于能量本征态，则它们对应的能级哪个高？能级是否相邻？

解 我们可以直接从 S. eq 出发求出这两个态的能量差，但无法回答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 $x^2+bx+c=0$ 可得在一定条件下 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。

1.18 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

$$\psi(r,\theta,\varphi) = \frac{u(r)}{r}\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$$

其中 $\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$ 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 描写。从 ψ 函数的形式看，角度方向的零点由球谐函数 $\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\varphi)$ 决定，而径向的零点由 $u(r)$ 决定。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 $n_r=2$，因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，它的正确性依赖于哈密顿算符的厄密性。利用这个守恒定律可以得到体系的一般性质。在应用这个定律时，需注意这个定律的多种形式、几率和几率流的一些性质。

1.19 证明：如果量子系统的态是可归一化的，那么一旦归一化，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 $\int \mathrm{d}\tau \Psi^* \Psi$ 是有界的。于是分析在 $r=|\boldsymbol{r}|$ 很大处的行为可知，必有 $\Psi \to 0$，当 $r\to\infty$。

由几率守恒定律

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

对空间积分，得

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

或

$$\partial_t \int \mathrm{d}\tau \Psi^* \Psi = -\int \mathrm{d}\tau \nabla \cdot \boldsymbol{j} = -\oint_S \boldsymbol{j} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S}$$

其中 $\boldsymbol{S}$ 为无限远处的封闭曲面，$\mathrm{d}\boldsymbol{S}$ 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 $\oint_S \boldsymbol{j}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S}=0$，从而

$$\partial_t \int \mathrm{d}\tau \Psi^* \Psi = 0$$

亦即 $\int \mathrm{d}\tau \Psi^* \Psi$ 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。

1.20 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

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

对于定态 Ψ 而言,它随时间的变化关系为

$$\mathrm{i}\hbar\partial_t\Psi=E\Psi$$

E 为能量,是实数。于是

$$-\mathrm{i}\hbar\partial_t\Psi^*=E\Psi^*$$

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

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。

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

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

式中 $\varphi(k)=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi(x,0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\mathrm{d}x$ 是 $\Psi(x,0)$ 的傅里叶变换。

$\left(\text{提示:利用}\lim\limits_{\alpha\to\infty}\sqrt{\dfrac{\alpha}{\pi}}\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi/4}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha x^2}=\delta(x)\text{。}\right)$

证 根据平面波的时间变化规律

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\to\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)},\quad\omega=E/\hbar=\hbar k^2/2m$$

得任意时刻的波函数为

$$\begin{aligned}\Psi(x,t)&=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\hbar tk^2/2m)}\mathrm{d}k\\&=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}mx^2/2\hbar t}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}k\varphi(k)\cdot\exp\left[-\mathrm{i}\frac{\hbar t}{2m}\left(k-\frac{mx}{\hbar t}\right)^2\right]\end{aligned}\tag{1}$$

当时间足够长后(即 $t\to\infty$),上式被积函数中的指数函数具有 δ 函数的性质,取

$$\alpha = \hbar t/2m,\quad u = k - \frac{mx}{\hbar t} \tag{2}$$

利用本题的解题提示，即得

$$\begin{aligned}\Psi(x,t) &\approx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{imx^2/2\hbar t} \sqrt{\frac{2\pi m}{\hbar t}} e^{-i\pi/4} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(k)\delta\left(k - \frac{mx}{\hbar t}\right) dk \\ &= \sqrt{\frac{m}{\hbar t}} e^{-i\pi/4} e^{imx^2/2\hbar t} \varphi\left(\frac{mx}{\hbar t}\right)\end{aligned} \tag{3}$$

$$|\Psi(x,t)|^2 \approx \frac{m}{\hbar t}\left|\varphi\left(\frac{mx}{\hbar t}\right)\right|^2 \tag{4}$$

本题的物理意义是：在足够长时间后，各不同 k 值的分波已经互相分离，波群在 x 处的主要成分为 $k=mx/\hbar t$，即 $x=\hbar kt/m$，强度$\propto|\varphi(k)|^2$，因子 $m/\hbar t$ 描述整个波包的扩散，波包强度$|\Psi|^2\propto 1/t$。

设整个波包中最强的动量成分为$\hbar k_0$，即 $k=k_0$ 时$|\varphi(k)|^2$ 最大。由式(4)可见，当 t 足够大以后，$|\varphi|^2$ 的最大值出现在 $mx/\hbar t=k_0$ 处，即 $x=\hbar k_0 t/m$ 处。这表明波包中心处波群的主要成分为 k_0。

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出等效的哈密顿算符，从而把运动完全描述出来。

*1.22 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

$$(dl)^2 = (R d\varphi)^2 + (dz)^2 = \left[R^2 + \left(\frac{d}{2\pi}\right)^2\right](d\varphi)^2$$

这样，在螺旋线上的梯度算符为

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

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

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

其中

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

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[0,2π]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

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

从而解出能量

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

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。与解数学题不同的是，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。

*1.23 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：

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

于是

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

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(即定能谱),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

$$A\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\cdot2\pi}-1)=B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\varphi}(1-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\cdot2\pi})$$

或

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}(A-B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2m(\varphi+\pi)})(\mathrm{e}^{\mathrm{i}m2\pi}-1)=0$$

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)

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$T=T_0\exp\left[-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2\mu(V_0-E)}\right],\quad T_0=\frac{16E(V_0-E)}{V_0^2}$$

任意形状的势垒$V(x)$,透射系数为

$$T=T_0\exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_a^b\sqrt{2\mu(V(x)-E)}\mathrm{d}x\right]$$

5. 一维有限深方势阱

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

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

7. 束缚态、非束缚态及其能级特点

8. 简并、简并度

【典型习题解答】

2.1 束缚态、非束缚态及相应能级的特点。

答 束缚态:粒子在一定范围内运动,$|\boldsymbol{r}|\to\infty$时,$\psi\to 0$。能级分立。非束缚态:粒子的运动范围没有限制,$|\boldsymbol{r}|\to\infty$时,$\psi$不趋于0。能级连续分布。

2.2 能级简并、简并度。

答 量子力学中,把处于不同状态、具有相同能量、对应同一能级的现象称为能级简