第三章

1.在动量表象中，求解 δ 势阱 $V(x)=-\gamma\delta(x)$ 的束缚定态能量和波函数，其中 γ 是一正的常数。计算 Δx 与 Δp，并验证不确定度关系。

解 设势阱中运动的粒子质量为 μ，在 x 表象的定态方程为

$$\left(\frac{p^2}{2\mu}-\gamma\delta(x)\right)\psi(x)=E\psi(x) \tag{1}$$

现设

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

式(1)两边作 Fourier 变换，即得在 p 表象下的定态方程

$$\frac{p^2}{2\mu}\varphi-\frac{\gamma}{\sqrt{2\pi\hbar}}\psi(0)=E\varphi \tag{3}$$

或者

$$\left(p^2-2\mu E\right)\varphi(p)=\frac{2\mu\gamma}{\sqrt{2\pi\hbar}}\psi(0)=A \tag{3'}$$

其中 A 为一个常数，与 p 无关。这样上式给出

$$\varphi(p)=\frac{A}{p^2-2\mu E} \tag{4}$$

即为动量变相的能量本征函数。将式(4)代入式(3')右边，并利用 $\psi(0)$ 的 Fourier 变换，【式(2)取 $x=0$】得

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\frac{1}{p^2-2\mu E}=\frac{\pi\hbar}{\gamma\mu} \tag{5}$$

此为能量本征值方程。

对于束缚态 $E<0$，令 $\kappa=\sqrt{-2\mu E}\big/\hbar$，则式(5)的左边定积分为

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\frac{1}{p^2-\hbar^2\kappa^2}=\frac{1}{\hbar\kappa}\arctan\frac{p}{\hbar\kappa}\Bigg|_{-\infty}^{+\infty}=\frac{\pi}{\hbar\kappa}$$

代入式(5)即得

$$\kappa=\frac{\gamma\mu}{\hbar^2}$$

可见决定束缚态能级的方程式(5)只有上述 κ 一个值。因此

$$E=-\frac{\hbar^2\kappa^2}{2\mu}=-\frac{\mu\gamma^2}{2\hbar^2}$$

对应唯一的一个束缚态。相应的波函数由式(4)给出。其中常数 A 可以由归一化条件确定，根据

$$1=\int \mathrm{d}p|\varphi(p)|^2=|A|^2\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\frac{1}{\left(p^2-2\mu E\right)^2}=|A|^2\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}p}{\left(p^2+\hbar^2\kappa^2\right)^2}=\frac{\pi|A|^2}{2(\hbar\kappa)^3}$$

可知归一化系数可以取

$$A=\sqrt{\frac{2}{\pi}}(\hbar\kappa)^{3/2}=\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2}\left(\frac{\mu\gamma}{\hbar}\right)^{3/2}$$

因而归一化的定态波函数为

$$\varphi(p)=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\left(\frac{\mu\gamma}{\hbar}\right)^{3/2}\frac{1}{p^2+\frac{\mu^2\gamma^2}{\hbar^2}}=\sqrt{\frac{2}{\pi}}(\hbar\kappa)^{3/2}\frac{1}{p^2+\hbar^2\kappa^2} \tag{6}$$

这样 p 和 p^2 的期望值为

$$\bar{p}=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\varphi^*(p)p\varphi(p)=A^2\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{p\mathrm{d}p}{\left(p^2+\hbar^2\kappa^2\right)^2}=0$$

$$\overline{p^2}=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\varphi^*(p)p^2\varphi(p)=A^2\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{p^2\mathrm{d}p}{\left(p^2+\hbar^2\kappa^2\right)^2}=\frac{A^2}{2\hbar\kappa}=\hbar^2\kappa^2$$

因而得 $\Delta p=\hbar\kappa$。在 p 表象中，坐标力学量表示为算符 $i\hbar\frac{\partial}{\partial p}$，利用力学量平均值公式即得坐标以及坐标平方的期望值分别为

$$\bar{x}=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\varphi^*(p)i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\varphi(p)=A^2\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{p^2+\hbar^2\kappa^2}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\frac{1}{p^2+\hbar^2\kappa^2}\mathrm{d}p=0$$

$$\overline{x^2}=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p\varphi^*(p)\hat{x}^2\varphi(p)=\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}p[\hat{x}\varphi(p)]^*[\hat{x}\varphi(p)]==\hbar^2\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\frac{\partial}{\partial p}\frac{1}{p^2+\hbar^2\kappa^2}\right|^2\mathrm{d}p$$

$$=4A^2\hbar^2\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{p^2\mathrm{d}p}{\left(p^2+\hbar^2\kappa^2\right)^4}=\frac{A^2\pi}{4\hbar^3\kappa^5}=\frac{1}{2\kappa^2}$$

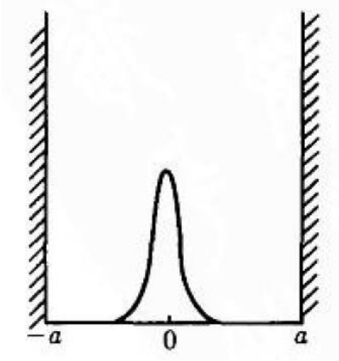
得到 $\Delta x=\frac{1}{\sqrt{2}\kappa}$。

因此

$$\Delta x\Delta p=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}$$

2.粒子在势场

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



中运动(即无限深势阱中央有一个δ势垒)，求能级公式。并讨论γ很大和很小的极限情况。

解　由于$V(x)\geq 0$，所以$E\geq 0$。在$V(x)\to\infty$处，波函数应该趋于 0，所以有边界条件

$$\psi(x)=0\,,\quad |x|\geq L \tag{1}$$

也就是波函数只在阱内($|x|\leq L$)不为零。在阱内能量本征方程为

$$\psi''+\frac{2m}{\hbar^2}[E-V_0\delta(x)]\psi=0 \tag{2}$$

在$x=0$，ψ连续条件给出

$$\psi(0^+)=\psi(0^-) \tag{3}$$

而ψ'的跃变条件为

$$\psi'(0^+)-\psi'(0^-)=\frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi(0) \tag{4}$$

现令

$$k=\sqrt{2mE}/\hbar \tag{5}$$

$x\neq 0$处，式(2)可以写成

$$\psi''+k^2\psi=0 \tag{6}$$

其解为

$$\psi=\sin kx\,,\quad \cos kx \tag{7}$$

在$-a<x<0$和$0<x<a$两个区域，ψ均可以表示成$\sin kx$和$\cos kx$的线形叠加，同时还要满足边界条件(1)和$x=0$处连续条件式(3)、式(4)。

因位势$V(x)$具有反射对称性，所以束缚定态有确定宇称。先讨论奇宇称态，由于$\psi(-x)=-\psi(x)$，当$x\to 0$，必有$\psi(0)=0$，则由式(4)就有$\psi'(0^+)-\psi'(0^-)=0$，即ψ在$x=0$处是连续的。由此可见，δ势垒的存在对奇宇称态并无影响，波函数和能级应和无限深势阱的相同，波函数为

$$\psi(x)=C\sin kx\,,\quad -a<x<a \tag{8}$$

由边界条件(1)，得到

$$k = n\pi / a\,,\quad n = 1,2,3,\ldots \tag{9}$$

给出能级为

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2,\quad n = 1,2,3,\ldots \tag{10}$$

归一化的能量本征函数为

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}\sin\frac{n\pi x}{a},\quad n = 1,2,3,\ldots \tag{11}$$

由式(7)的解叠加的偶宇称态ψ (满足$\psi(-x) = \psi(x)$)的一般形式为

$$\psi = \begin{cases} A\cos kx + B\sin kx, & 0 < x < a \\ A\cos kx - B\sin kx, & -a < x < 0 \end{cases} \tag{12}$$

由边界条件(1)，得到

$$A\cos ka + B\sin ka = 0 \tag{13}$$

由ψ'跃变条件(4)，得到

$$Bk = mV_0 A/\hbar^2 \tag{14}$$

联立式(13)、式(14)即得能级方程

$$\tan ka = -\frac{\hbar^2}{m\gamma a}ka = -\frac{b}{a}ka \tag{15}$$

其中$b = \hbar^2/m\gamma$是δ势垒的特征长度，对于给定的a,b后，可用图解法或者数值解法求出k，而偶宇称能级

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{16}$$

当$a >> bn\pi$，即$\gamma >> n\pi\hbar^2/ma$，式(15)可近似为$\tan ka \approx 0$，由此得近似解

$$ka \approx n\pi\,,\quad n = 1,2,3,\ldots \tag{17}$$

给出近似能级

$$E \approx \frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2,\quad n = 1,2,3,\ldots \tag{18}$$

这种情况下相当于δ势垒作用足够强，阻碍了两边粒子的穿透，将原来的无限深势阱分隔成了两个宽为a的无限深势阱，上式也即其能级公式。

当$a << b$，即$\gamma << \dfrac{\hbar^2}{ma}$时，式(15)近似为$\cot ka \approx 0$，由此得近似解

$$ka \approx \left(n+\frac{1}{2}\right)\pi \text{，} \quad n = 1,2,3,\ldots \tag{19}$$

给出近似能级

$$E = \frac{1}{2m}\left[\frac{(2n+1)\pi\hbar}{2a}\right]^2 \text{，} \quad n = 1,2,3,\ldots \tag{20}$$

这种情况下相当于δ势垒作用足够弱，粒子从一边到另一边的穿透基本不受阻碍。这样δ势垒基本可以忽略。式(20)正是无限深势阱中偶宇称态的能级公式。

式(10)和式(20)可以统一写成

$$E = \frac{1}{2m}\left[\frac{n\pi\hbar}{2a}\right]^2 \text{，} \quad n = 1,2,3,\ldots \tag{21}$$

偶数n对应奇宇称态，上式给出精确能级；奇数n对应偶宇称态，上式给出近似能级。

第五章

位力定理

$$2\overline{T} = \overline{\vec{r}\cdot\nabla V}$$

描述处于定态的系统，其动能平均值与势能平均值之间的关系。

特例： 若$V(x,y,z)$是x,y,z的n次齐次函数，即

$$V(\lambda x, \lambda y, \lambda z) = \lambda^n V(x,y,z)$$

其中λ是常数。上述函数的特点是：变量乘以λ，势函数乘以λ^n。上式两边对λ求导数，

$$x\frac{\partial V}{\partial(\lambda x)} + y\frac{\partial V}{\partial(\lambda y)} + z\frac{\partial V}{\partial(\lambda z)} = n\lambda^{n-1}V$$

最后令$\lambda = 1$，则有

$$\sum_{i=1}^{3} x_i \frac{\partial V}{\partial x_i} = nV(x_1, x_2, x_3)$$

根据位力定理，有

$$2T = n\overline{V}$$

(1)谐振子势

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

显然，这里当$x \to \lambda x$，有$V(\lambda x) = \lambda^2 V(x)$，即$n = 2$。所以$\overline{T} = \overline{V}$

(2)Coulomb 势

$$V = -\frac{e_s^2}{r}$$

显然，这里当$r\to\lambda r$，有$V(\lambda r)=\lambda^{-1}V(r)$，即$n=-1$。所以$-2\overline{T}=\overline{V}$

(3) δ势

$$V=\gamma\delta(x)$$

显然，这里当$x\to\lambda x$，利用δ函数的性质

$$\delta(\lambda x)=\frac{1}{\lambda}\delta(x)$$

即有$V(\lambda x)=\lambda^{-1}V(x)$，即$n=-1$。所以$-2\overline{T}=\overline{V}$。(与 Coulomb 势相同)

例 1：求证处于势$V(r)=cr^n$的能量本征态的体系，其总能量为$\overline{E}=\dfrac{n+2}{2}\overline{V}$。

证：$V(r)=cr^n=c(x^2+y^2+z^2)^{n/2}$是自变量$x,y,z$的齐次函数，根据位力定理，有

$$2\overline{T}=n\overline{V}$$

$$\therefore\overline{E}=\overline{T}+\overline{V}=\frac{n}{2}\overline{V}+\overline{V}=\frac{n+2}{2}\overline{V}$$

例 2：质量为m的粒子在对数势场中运动，$V(r)=c\ln(r/r_0)$。证明：(a)所有本征态具有相同的方均速度；(b)任何两能级间的间距与m无关；

证：(a)

$$\overline{v^2}=\frac{\overline{p^2}}{m^2}=\int\psi^*\frac{\hat{p}^2}{m^2}\psi\mathrm{d}\tau=\frac{2\overline{T}}{m}$$

ψ为能量本征态。由位力定理$2\overline{T}=\overline{\vec{r}\cdot\nabla V}$，

其中

$$V=c\ln(r/r_0)$$

所以$r\dfrac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}=c$或者$\vec{r}\cdot\nabla V=c$

由此得$\overline{v^2}=\dfrac{c}{m}$($c$为常数，对所有本征态相同)

(b)

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+V\Rightarrow\frac{\partial\hat{H}}{\partial m}=-\frac{\hat{p}^2}{2m^2}$$

$$\overline{E}=\overline{H}=\int\psi^*\hat{H}\psi\mathrm{d}\tau$$

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial \overline{E}}{\partial m}=\frac{\partial \overline{H}}{\partial m}&=\int \psi^* \frac{\partial \hat{H}}{\partial m}\psi \mathrm{d}\tau+\left[\int\left(\frac{\partial \psi^*}{\partial m}\hat{H}\psi+\psi^*\hat{H}\frac{\partial \psi}{\partial m}\right)\mathrm{d}\tau\right] \\
&=-\int \psi^* \frac{\hat{p}^2}{2m^2}\psi \mathrm{d}\tau+E\frac{\partial}{\partial m}\int \psi^*\psi \mathrm{d}\tau \qquad \text{(HF 定理)} \\
&=-\frac{1}{2m}\int \psi^* \frac{\hat{p}^2}{m}\psi \mathrm{d}\tau \\
&=-\frac{1}{2m}2\overline{T}
\end{aligned}
$$

因此任意两能级 E_1 和 E_2 的差 E_1-E_2 (利用上面结论：$\overline{v^2}=\frac{c}{m}$)

$$
\mathrm{d}E=-\frac{c}{2m}\mathrm{d}m
$$

积分得

$$
E_n=-\frac{c}{2}\ln m+\varepsilon_n
$$

$$
E_l=-\frac{c}{2}\ln m+\varepsilon_l
$$

$$
E_n-E_l=\varepsilon_n-\varepsilon_l
$$

这是与 m 无关的常数量。

第七章

设带电粒子在互相垂直的恒定均匀电场 E 和均匀磁场 B 中运动，求其能谱和波函数。(取磁场方向为 z 轴，电场方向为 x 轴方向)。

解：选择矢势 $\mathbf{A}$ 使 $A_x=0$，$A_y=Bx$，$A_z=0$，满足 $\nabla\times\mathbf{A}=\mathbf{B}$（沿着 z 方向），设电场 E 沿着 x 轴，而其大小是 ε。我们可取标势 $V(x)=-\varepsilon x$，它满足 $-\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}=\varepsilon$。设粒子质量为 μ，这样粒子 Hamilton 量为

$$
\begin{aligned}
H&=\frac{1}{2\mu}\left\{p_x{}^2+\left(p_y-\frac{q}{c}Bx\right)^2+p_z{}^2\right\}-q\varepsilon x \\
&=\frac{1}{2\mu}\left\{p_x{}^2+p_y{}^2-\frac{2q}{c}Bp_yx+\left(\frac{q}{c}B\right)^2x^2+p_z{}^2\right\}-q\varepsilon x
\end{aligned} \tag{1}
$$

H 中不出现 y 和 x，因此

$$
[H,p_y]=0,\ [H,p_z]=0
$$

这样可选完备集为 (H,p_y,p_z)，而取分离变量形式的能量本征函数为

$$
\psi(x,y,z)=\frac{1}{2\pi\hbar}e^{i(p_yy+p_zz)/\hbar}X(x) \tag{2}
$$

代入能量本征方程得

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}-\frac{2iqB}{c\hbar}\frac{\partial}{\partial y}x\psi+\left[\frac{2\mu q\varepsilon}{\hbar^2}x-\left(\frac{qB}{c\hbar}\right)^2x^2\right]\psi=-\frac{2\mu E}{\hbar^2}\psi$$

整理，并约去因子$e^{i(p_y y+p_z z)/\hbar}$后，得到关于$X(x)$的本征方程

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{q^2B^2}{2\mu c^2}x^2-\left(q\varepsilon+\frac{qB}{\mu c}p_y\right)x+\frac{1}{2\mu}\left({p_y}^2+{p_z}^2\right)\right\}X(x)=EX(x)$$

令 $\omega\equiv\frac{qB}{c\mu}$， $x_0=\frac{cp_y}{qB}+\frac{\mu q\varepsilon}{qB^2}$，而$E_0=\frac{p_y^2+p_z^2}{2\mu}-\frac{1}{2\mu}\left(p_y+\frac{\mu\varepsilon c}{B}\right)^2$。上式可以化为

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\mu}{2}\omega^2(x-x_0)^2\right\}X(x)=E_1X(x) \tag{3}$$

其中$E_1=E-E_0$，式(3)是一维谐振子的定态方程，振子频率是ω，振动原点在$x=x_0$。令$\alpha=\sqrt{\mu\omega/\hbar}$，由一维谐振子结果直接写下

$$E=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega=\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar qB}{\mu c} \tag{4}$$

及相应本征函数

$$X(x)=N_ne^{-\frac{1}{2}\alpha^2(x-x_0)^2}H_n[\alpha(x-x_0)] \tag{5}$$

其中H_n为 Hermite 多项式，归一化系数$N_n=\sqrt{\alpha/\sqrt{\pi}2^n n!}$。带电粒子的总能量$E=E_0+E_1$是

$$E_{n,p_y,p_z}=\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar qB}{\mu c}-\frac{1}{2\mu}\left(p_y+\frac{\mu\varepsilon c}{B}\right)^2+\frac{1}{2\mu}\left(p_y^2+p_z^2\right) \tag{6}$$

其中$-\infty<p_y,p_z<+\infty$可取连续值，而$n=0,1,2,\ldots$相应的波函数为

$$\psi_{n,p_y,p_z}(x,y,z)=\frac{1}{2\pi\hbar}\sqrt{\frac{2}{\sqrt{\pi}2^n n!}}e^{i(p_y y+p_z z)/\hbar}e^{-\frac{1}{2}\frac{\mu\omega}{\hbar}(x-x_0)^2}H_n\left[\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}(x-x_0)\right] \tag{7}$$