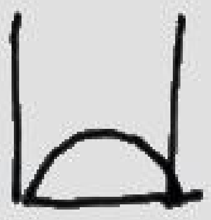
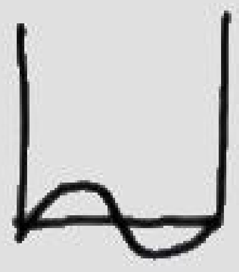
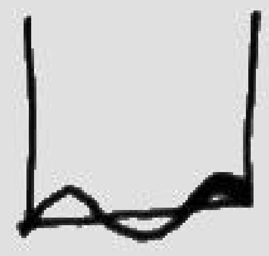
量统B期中考试　　张锦程　2180012082　材84

一. $\hat{C}=0$ 时，说明 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 相互对易，存在一组完全的共同本征函数系，对 $\hat{A}$、$\hat{B}$ 代表的力学量进行测量有可能得到2个精确值；

$\hat{C}\neq 0$ 时，说明 $\hat{A}$ $\hat{B}$ 不对易，不存在完全的本征函数系，存在不确定度关系 $\Delta A\cdot\Delta B \geq \frac{1}{2}|\bar{C}|$

~~基态~~ $\Delta x = 10^{-10}\,m$，$\therefore \Delta P \geq \frac{h}{4\pi\Delta x} = 5.273\times10^{-25}\ J(N\cdot S)$

$\therefore E_{基} = \frac{P^2}{2m} \sim \frac{\Delta P^2}{2m} = 1.521\times10^{-19}\ J$

基态 　第一激发态 　第二激发态 

二. $\Psi = A(x+y+2z)e^{-\lambda r}$，$\int_{全}\Psi^*\Psi\,d\tau = \iiint A r(\sin\theta\cos\varphi+\sin\theta\sin\varphi+\cos\theta)^2 e^{-2\lambda r}\overset{r^2\sin\theta}{\vee}\,dr\,d\theta\,d\varphi$

$= \iint A r(\sin\theta\cos\varphi+\sin\theta\sin\varphi+\cos\theta)^2\sin\theta\,d\theta\,d\varphi$

$= A\cdot\frac{6}{\lambda^4}\iint(\sin\theta\cos\varphi+\sin\theta\sin\varphi+\cos\theta)\ldots$

$= \int_0^{2\pi}\frac{3A\pi}{\lambda^4}(\cancel{\sin\varphi\ldots}\ 3\sin 2\varphi+4)\,d\varphi = \cancel{\ldots}\ \frac{3\pi^2 A}{2\lambda^4}$

$\therefore C^2 = \frac{2\lambda^4}{3\pi^2 A}$（归一化常数）(A)

$L_x = i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$

故 $\bar{L}_x = \int\Psi^* L_x\Psi =$

$= \frac{3\pi^2 A}{2\lambda^4}\times\frac{\lambda^4}{6A}\times\frac{3\pi^2 A}{2\lambda^2}\times =$

三.(1) $\hat{L}_z\Psi = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\Psi = -i\hbar\cdot i\Psi = \hbar\Psi \Rightarrow \Psi$ 为 $\hat{L}_z$ 对应 $\hbar$ 的一个本征函数

$\hat{L}^2\Psi = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Psi\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\Psi\right] = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\frac{\cos2\theta}{\cos\theta}\Psi\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}(-\Psi)\right]$

$= -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\cdot\frac{-2\sin 2\theta}{\sin\theta\cos\theta}\Psi - \frac{1}{\sin^2\theta}\Psi\right] = 6\hbar^2\Psi$

$\Rightarrow \Psi$ 为 $\hat{L}^2$ 对应 $6\hbar^2$ 的一个本征函数

$\Rightarrow$ 对于 Ψ，$\hat{L}_z$ 与 $\hat{L}^2$ 的测量值为 $\hbar$ 与 $6\hbar^2$

$\therefore \hat{L}$ 与 z 轴的夹角为 $\left(\frac{\hbar}{\sqrt{L^2}}\right)=\arccos\left(\frac{\sqrt{6}}{6}\right)$ $\overset{\wedge}{\text{arc cos}}$

$\Psi^2 = \cancel{\ldots}\ \Psi^*\Psi = \frac{1}{81^2\pi}\left(\frac{1}{a_0}\right)^7 r^4 e^{-\frac{2r}{3a_0}}\sin^2\theta\cos^2\theta$

归一化常数 $C = \iiint_{全}\Psi^*\Psi\,d\tau = 1$

(2) $\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\sin^3\theta\cos^2\theta\ \cancel{\ldots}\ d\theta\,d\varphi = \cancel{\ldots}\ \frac{8}{15}\pi$

(归一化) $\iiint_{全}\Psi^* r\Psi\,d\tau = \frac{1}{81^2\pi}\left(\frac{1}{a_0}\right)^7\cdot\cancel{\ldots}\frac{8}{15}\pi\int_0^{+\infty} r^5 e^{-\frac{2r}{3a_0}}\overset{r^2\sin\theta}{\vee}\,dr = \cancel{\ldots}\ \frac{1}{81^2\pi}\frac{1}{a_0^7}\cdot\frac{8\pi}{15}\cdot\cancel{\ldots}\ \frac{2061715a_0^8}{16}$

$\cancel{\ldots}$

~~平均半径~~ $= 10.5a_0/C^2 = 10.5a_0$ (平均) ~~半径~~

$\frac{d(\Psi^*\Psi)}{dr} = \frac{2r^3\left(e^{-\frac{2r}{3a_0}}\right)(6a_0-r)}{3a_0}$

令 $\frac{d(\Psi^*\Psi)}{dr}=0$ 得最可几半径 $r=6a_0$

四. 定态薛定谔方程为：$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi + V\psi = E\psi$

得：
$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi = E\psi & x\in(0,a) \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi = (E-V_1)\psi & x\in(a,b) \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi = (E-V_2)\psi & x\in(b,+\infty)\cup(-\infty,0) \end{cases}$$

由 V_1、E、V_2 的数值

得 $V_1 < E < V_2$ 时，则令 $k_0=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$，$k_1=\sqrt{\frac{2m(E-V_1)}{\hbar^2}}$，$k_2=\sqrt{\frac{2m(V_2-E)}{\hbar^2}}$ 得

$$\psi=\begin{cases} A_2 e^{k_2 x} & x\in(-\infty,0] \\ A_0\sin(k_0x+\varphi_0) & x\in[0,a] \\ A_1\sin(k_1x+\varphi_1) & x\in[a,b] \\ B_2 e^{-k_2x} & x\in[b,+\infty) \end{cases}
\qquad
\psi'=\begin{cases} A_2k_2e^{k_2x} \\ A_0k_0\cos(k_0x+\varphi_0) \\ A_1k_1\cos(k_1x+\varphi_1) \\ -B_2k_2e^{-k_2x} \end{cases}$$

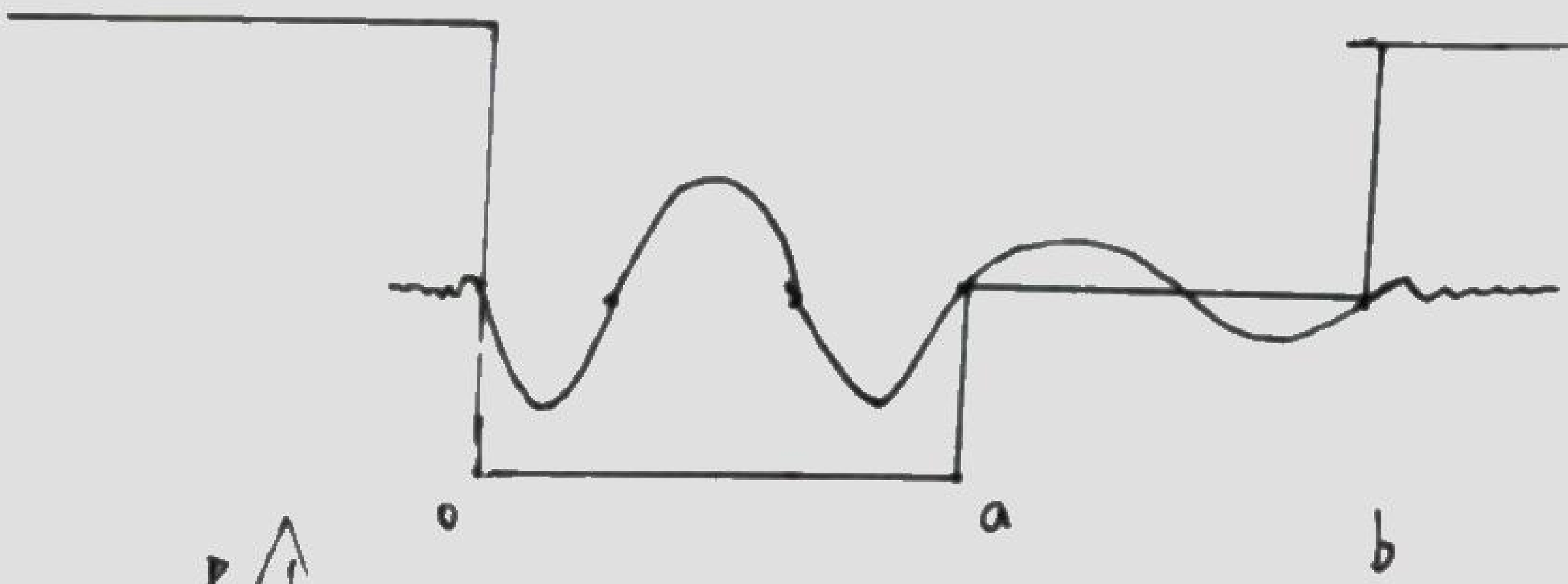
连续条件
$$\begin{cases} B_2e^{-k_2b} = A_1\sin(k_1b+\varphi_1) \\ -B_2k_2e^{-k_2b} = A_1k_1\cos(k_1b+\varphi_1) \end{cases}$$
$$\begin{cases} A_0\sin(k_0a+\varphi_0) = A_1\sin(k_1a+\varphi_1) \\ A_0k_0\cos(k_0a+\varphi_0) = A_1k_1\cos(k_1a+\varphi_1) \end{cases}$$
$$\begin{cases} A_2 = A_0\sin\varphi_0 \\ A_2k_2 = k_0A_0\cos\varphi_0 \end{cases}$$

由于 $k_0>k_1$，故粒子在 $[0,a)$ 处的波函数波长大于 $[a,b]$ 区域

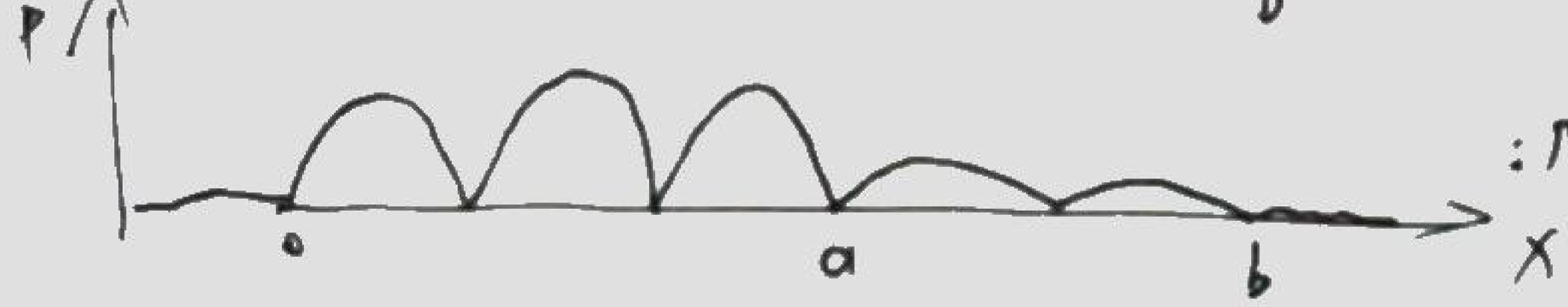
令 $k_1=\sqrt{k_0^2-\alpha^2}$，得 $\left(\frac{A_0}{A_1}\right)^2=\sin^2(k_1a+\varphi_1)+\frac{k_1^2}{k_0^2}\cos^2(k_1a+\varphi_1)=1-\frac{\alpha^2}{k_0^2}\cos^2(k_1a+\varphi_1)<1$

故 $A_0<A_1$，则粒子在 $[a,b]$ 区域~~振幅~~波函数的振幅较小

对于 $(-\infty,0)$，$(b,+\infty)$ 的区域，$E<V_2=2eV$，为散失波，振幅很快减小



：波函数



：几率密度

五. (1) 因为经典物理假设了电子具有连续的运动"轨道"，用而具有连续的能量，按经典理论，电子会发射电磁波损失能量，故可能会撞入原子核，原子不稳定，光谱连续。而电子具有量子性，它的能级是分立的，一次只能吸收特定量的能量，故电子可不发射电磁波，原子稳定，当电子由某一能级跃迁(跃出)到另一能级时，则吸收(发射)特定能量(光子)的光，故原子谱是离散的

(2) ①定态假设——原子只能处于一系列不连续的稳定状态(定态)，定态原子不辐射电磁波

②跃迁假设——原子由定态 E_n 跃迁到定态 E_k 时发射光子，频率 $\nu=\frac{|E_n-E_k|}{h}$

③轨道角动量量子化假设——L 只能取 $\hbar$ 的整数倍(L 为电子绕核轨道角动量)

(3) $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}=m\frac{v^2}{r}$　$mvr=n\hbar$ ($n\in N^+$)，得 $r_n=n^2\left(\frac{\epsilon_0h^2}{\pi me^2}\right)$，$n=1$ 时，得：波尔第一轨道半径 $r_1=5.29\times10^{-11}$

$E_n=T+V=\frac12mv_n^2-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0r_n}$　代入上面的式子得 $E_n=-\frac{1}{n^2}\left(\frac{me^4}{8\epsilon_0^2h^2}\right)$ (能级公式)

(4) 基态 $\psi_{100}=R_{10}Y_{00}=\sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}}e^{-\frac{r}{a_0}}$

$u=\frac{R_{10}}{r}=Are^{-r/a_0}$　令 $\frac{d(u^2)}{dr}=0$ 得 $A\left(1-\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/a_0}=0$，$r=a_0$ (最可几半径)

$\bar r=\int u^2r\,dr=\left(\frac{3a^4}{8}\right)/\left(\frac{a^3}{4}\right)=\frac32a$ (平均半径)

(15) He中 Hermiton量 $H = \left(\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_1} - \frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_2}}_{H_0} + \underbrace{V_{12}}_{H'} \right)$

求解 $H\Psi = E\Psi$.

先求解 $H_0\Psi_0 = E_0\Psi_0$. 试探解 $\Psi = \Psi_1(r_1)\Psi_2(r_2)$

可分解得: $\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_1}\right)\Psi_1(r_1) = E_1\Psi_1(r_1)$ $\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 - \frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_2}\right)\Psi_2(r_2) = E_2\Psi_2(r_2)$

$E_0 = E_{01} + E_{02}$ $E_{01} = E_{02} = -\frac{me^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 2\hbar^2} \cdot \frac{Z^2}{n^2} = -13.6\frac{Z^2}{n^2}(eV) = -\frac{54.4}{n^2}(eV)$

$E = E_0 + E_1$ (1阶修正项)

$E_1 = \iint \Psi^* V_{12} \Psi \, dr_1^3 dr_2^3 = \iint \Psi_1^* \Psi_2^* \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{12}} \Psi_1\Psi_2 \, dr_1^3 dr_2^3 = \frac{5}{4} Z \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e^2}{2a_0} = 34eV$

$\therefore E = -108.8eV + 34eV = -74eV$ 为修正后的He基态能量

(16) 波尔理论 ①给出的能级公式同量子理论

同 ②波尔理论中的 n_φ 相当于 $(l+1)$, 量子理论中 $l = n-1$ 对应玻尔圆轨道

③对于 L_z 本征值, 均给出 $L_z = m\hbar$ $(m = 0, \pm1, \pm2, \cdots)$

异 ④对于 L^2 本征值, 玻尔给出 $n_\varphi^2\hbar^2$, 量子力学给出 $l(l+1)\hbar^2$, 当 n 较小时, 2者差别较大, 但 n 较大时, $n_\varphi \to l + \frac{1}{2}$

⑤玻尔理论中存在"轨道"的概念, 量子理论中不存在

⑥玻尔理论中 ~~…~~ L 不可取 0, 但量子理论中存在