第三章 量子力学初步

3.1 波长为$1\overset{o}{A}$的 X 光光子的动量和能量各为多少？

解：根据德布罗意关系式，得：

动量为：$p=\dfrac{h}{\lambda}=\dfrac{6.63\times10^{-34}}{10^{-10}}=6.626\times10^{-24}$kgm/s

能量为：$E=hv=hc/\lambda=6.63\times10^{-34}\times3\times10^{8}/10^{-10}=1.988\times10^{-15}$J。

3.2 经过 10000 伏特电势差加速的电子束的德布罗意波长$\lambda=$？用上述电压加速的质子束的德布罗意波长是多少？

解：德布罗意波长与加速电压之间有关系：$\lambda=h/\sqrt{2meV}$

对于电子：$m=9.11\times10^{-31}$kg，$e=1.60\times10^{-19}$C，可得：

$$\lambda=\frac{12.25}{\sqrt{V}}\overset{o}{A}=\frac{12.25}{\sqrt{10000}}\overset{o}{A}=0.1225\overset{o}{A}$$

对于质子，$m=1.67\times10^{-27}$kg，得：

$$\lambda=\frac{6.626\times10^{-34}}{\sqrt{2\times1.67\times10^{-27}\times1.60\times10^{-19}\times10000}}=2.862\times10^{-3}\overset{o}{A}$$

3.3 电子被加速后的速度很大，必须考虑相对论修正。因而原来$\lambda=\dfrac{12.25}{\sqrt{V}}\overset{o}{A}$的电子德布罗意波长与加速电压的关系式应改为:

$$\lambda=\frac{12.25}{\sqrt{V}}(1-0.489\times10^{-6}V)\overset{o}{A}$$

其中 V 是以伏特为单位的电子加速电压。试证明之。

证明：德布罗意波长：$\lambda=h/p$

对高速粒子，考虑相对论效应：$(eV+m_0c^2)^2=(pc)^2+(m_0c^2)^2$

$$\therefore p^2=\frac{(eV)^2}{c^2}+2m_0eV$$
$$p=\sqrt{2m_0eV+(eV)^2/c^2}$$

因此有：$\lambda=h/p=\dfrac{h}{\sqrt{2m_0eV}}\cdot\dfrac{1}{\sqrt{1+\dfrac{eV}{2m_0c^2}}}$

等式右边根式中$eV/2m_0c^2$一项的值很小的，将上式的根式作泰勒展开，取前两项，得：

$$\lambda=\frac{h}{\sqrt{2m_0eV}}(1-\frac{eV}{4m_0c^2})=\frac{h}{\sqrt{2m_0eV}}(1-0.489\times10^{-6}V)$$

$$=\frac{12.25}{\sqrt{V}}(1-0.489\times10^{-6}V)\overset{o}{A}$$

随着加速电压逐渐升高，电子的速度增大，由于相对论效应引起的德布罗意波长变短。

3.4 试证明氢原子稳定轨道上正好能容纳下整数个电子的德布罗意波波长。上述结果不但适用于圆轨道，同样适用于椭圆轨道，试证明之。

证明：轨道量子化条件是：$\oint pdq=nh$

（1）对圆轨道，$p_r=0, p_\phi=mr^2\dot{\phi}=mvr$

所以有：$\oint pd\phi=2\pi\cdot mvr=nh$

$$S=2\pi r=n\frac{h}{mv}=n\lambda, n=1,2,3\ldots\ldots$$

所以,氢原子稳定轨道上正好能容纳下整数个电子的德布罗意波长。

（2）由于速率不再是常数，在轨道上各点的德氏波长也不一样。椭圆轨道的量子化条件是：

$$\oint p_\phi d\phi = n_\phi h$$

$$\oint p_r dr = n_r h$$

其中 $p_r=m\dot{r}, p_\phi=mr^2\dot{\phi}$，两式相加得：

$$\oint(p_rdr+p_\phi d\phi)=nh \qquad (n=n_\phi+n_r)$$

而 $\oint(p_rdr+p_\phi d\phi)=\oint(m\dot{r}dr+mr^2\dot{\phi}d\phi)$

$$=\oint(m\dot{r}\frac{dr}{dt}dt+mr^2\dot{\phi}\frac{d\phi}{dt}dt)=\oint mv^2dt=\oint mvds=\oint\frac{h}{r}ds=h\oint\frac{ds}{\lambda}$$

$$\therefore\oint\frac{ds}{\lambda}=n$$

因此，椭圆轨道也正好包含整数个德布罗意波波长。

3.5 带电粒子在威耳孙云室（一种径迹探测器）中的轨迹是一串小雾滴，雾滴德线度约为1微米。当观察能量为1000电子伏特的电子径迹时其动量与精典力学动量的相对偏差不小于多少？

解：由题知,电子动能 E=1000eV，$\Delta x=10^{-6}$m，动量相对偏差为$\Delta p/p$。由测

不准关系：$\Delta p\Delta x \geq \frac{h}{2}$，　　　　$\Rightarrow \Delta p \geq \frac{h}{2\Delta x}$

经典力学的动量为：$p = \sqrt{2mE}$

$$\therefore \frac{\Delta p}{p} \geq \frac{h}{2\Delta x\sqrt{2mE}} = 3.1\times 10^{-5}$$

电子横向动量的不准确量与经典力学动量之比如此之小，足见电子的径迹与直线不会有明显区别。

3.6 证明自由运动的粒子（势能$V \equiv 0$）的能量可以有连续的值。

证明：自由粒子的德氏波函数为：$\psi = Ae^{+\frac{i}{\hbar}(\bar{p}\cdot\bar{r}-Et)}$　　……（1）

自由粒子的哈密顿量是：$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$　……（2）

自由粒子的能量的本征方程为：$H\psi = E\psi$　……（3）

把（1）式和（2）式代入（3）式，得：$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2[Ae^{+\frac{i}{h}(\bar{p}\cdot\bar{r}-Et)}] = E\psi$

即：$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 A(\frac{d^2}{dx^2}+\frac{d^2}{dy^2}+\frac{d^2}{dz^2})e^{+\frac{i}{h}(p_x x+p_y y+p_z z-Et)} = E\psi$　　$\Rightarrow \frac{p^2}{2m}\psi = E\psi$

$$\therefore E = \frac{p^2}{2m}$$

自由粒子的动量 p 可以取任意连续值，所以它的能量 E 也可以有任意的连续值。

3.7 粒子位于一维对称势场中，势场形式入图 3-1，即

$$\begin{cases} 0<x<L, V=0 \\ x<0, x>L, V=V_0 \end{cases}$$

（1）试推导粒子在$E<V_0$情况下其总能量 E 满足的关系式。

（2）试利用上述关系式，以图解法证明，粒子的能量只能是一些不连续的值。

解：为方便起见,将势场划分为Ⅰ,Ⅱ,Ⅲ三个区域。

（1）　定态方程为：$\frac{d^2\psi_{(x)}}{dx^2}+\frac{2\mu}{h^2}(E-V_{(x)})\psi_{(x)} = 0$，$\mu$是粒子的质量。

Ⅰ区：　$\frac{d^2\psi}{dx^2}-\alpha^2\psi = 0$，　$\alpha^2 = \frac{2\mu}{h^2}(V_0-E)$

波函数处处为有限的解是：$\psi_1(x) = Ae^{\alpha x}$, A是一任意常数。

Ⅱ区：$\dfrac{d^2\psi}{dx^2}+\beta^2\psi=0$，　　$\beta^2=\dfrac{2\mu}{h^2}E$

处处有限的解是：$\psi_2(x)=B\sin(\beta x+\gamma)$,　 B,γ 是任意常数。

Ⅲ区：$\dfrac{d^2\psi}{dx^2}-\alpha^2\psi=0$，$\alpha^2=\dfrac{2\mu}{h^2}(V_0-E)$

处处有限的解是：$\psi_3(x)=De^{-\alpha x}$, D是任意常数。

由上面三式得到：$\dfrac{1}{\psi_1}\dfrac{d\psi_1}{dx}=\alpha,\dfrac{1}{\psi_2}\dfrac{d\psi_2}{dx}=\beta ctg(\beta x+\gamma),\dfrac{1}{\psi_3}\dfrac{d\psi_3}{dx}=-\alpha,$

由连续性条件，得：$\begin{cases}\dfrac{\alpha}{\beta}=ctg\ \gamma\\ -\dfrac{\alpha}{\beta}=ctg\ (\beta L+\gamma)\end{cases}$　　解得：

$$tg\ (\beta L)=-\frac{\dfrac{\beta}{\alpha}+\dfrac{\beta}{\alpha}}{1-\dfrac{\beta^2}{\alpha^2}}$$

因此得：$\beta L=n\pi-2tg^{-1}(\beta/\alpha)$

这就是总能量所满足的关系式。

（2）　由上式可得：

$$\frac{\beta}{\alpha}=tg(\frac{n\pi}{2}-\frac{\beta L}{2})$$

$$=\begin{cases}-tg\dfrac{\beta L}{2}\text{……}n\text{=偶数，包括零}\\ ctg\dfrac{\beta L}{2}\text{……}n\text{=奇数}\end{cases}$$

亦即

$$\alpha L=-(\beta L)ctg\frac{\beta L}{2}$$

$$\alpha L=(\beta L)tg\frac{\beta L}{2}$$

令 $\beta L=u,\alpha L=v$，则上面两方程变为：

$$v=-utg\frac{u}{2}\ldots\ldots(1)$$

$$v=utg\frac{u}{2}\ldots\ldots(2)$$

另外，注意到u和v还必须满足关系：$u^2+v^2=2\mu V_0L^2/h^2\ldots\ldots(3)$

所以方程（1）和（2）要分别与方程（3）联立求解。

3.8 有一粒子，其质量为m，在一个三维势箱中运动。势箱的长、宽、高分别为a、b、c在势箱外，势能$V=\infty$；在势箱内，$V=0$。式计算出粒子可能具有的能量。

解：势能分布情况，由题意知：

$$V_x=0,0\le x\le a;$$
$$V_y=0,0\le y\le b;$$
$$V_z=0,0\le z\le c;$$
$$V_x=\infty,x<0\text{和}x>a$$
$$V_y=\infty,y<0\text{和}y>b$$
$$V_z=\infty,z<0\text{和}z>c$$

在势箱内波函数$\psi(x,y,z)$满足方程：

$$\frac{\partial^2\psi}{2x^2}+\frac{\partial^2\psi}{2y^2}+\frac{\partial^2\psi}{2z^2}+\frac{2m}{h^2}[E-(V_x+V_y+V_z)]\psi=0 \qquad (1)$$

令$\psi(x,y,z)=X(x)Y(y)Z(z)$，代入（1）式，并将两边同除以$X(x)Y(y)Z(z)$，得：

$$(\frac{1}{X}\frac{d^2X}{dx^2}-\frac{2m}{h^2}V_x)+(\frac{1}{Y}\frac{d^2Y}{dy^2}-\frac{2m}{h^2}V_y)+(\frac{1}{Z}\frac{d^2Z}{dz^2}-\frac{2m}{h^2}V_z)=-\frac{2m}{h^2}E$$

方程左边分解成三个相互独立的部分，它们之和等于一个常数。因此，每一部分都应等于一个常数。由此，得到三个方程如下：

$$\frac{1}{X}\frac{d^2X}{dx^2}-\frac{2m}{h^2}V_x=-\frac{2m}{h^2}E_x$$
$$\frac{1}{Y}\frac{d^2Y}{dy^2}-\frac{2m}{h^2}V_y=-\frac{2m}{h^2}E_y$$
$$\frac{1}{Z}\frac{d^2Z}{dz^2}-\frac{2m}{h^2}V_z=-\frac{2m}{h^2}E_z$$

其中$E=E_x+E_y+E_z,E_x,E_y,E_z$皆为常数。上面三个方程有相同的形式，整理第一个方程，得： $\frac{d^2X}{dx^2}+\frac{2m}{h^2}(E_x-V_x)X=0\cdots\cdots$（2）

边界条件：$X(0)=X(l)=0$，可见，方程（2）的形式及边界条件与一维无限深阱完全相同，因此，其解为：

$$X_n=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n_x\pi}{a}x,\qquad E_x=\frac{\pi^2h^2}{2\pi a^2}n_x{}^2,n_x=1,2,3\ldots\ldots$$

类似地，有

$$Y_n=\sqrt{\frac{2}{b}}\sin\frac{n_y\pi}{b}y\qquad E_y=\frac{\pi^2h^2}{2\pi b^2}n_y{}^2,n_y=1,2,3\ldots\ldots$$

$$Z_n=\sqrt{\frac{2}{c}}\sin\frac{n_z\pi}{c}z\qquad E_z=\frac{\pi^2h^2}{2\pi c^2}n_z{}^2,n_z=1,2,3\ldots\ldots$$

$$\therefore\psi(x,y,z)=\sqrt{\frac{8}{abc}}\sin\frac{n_x\pi x}{a}\sin\frac{n_y\pi y}{b}\sin\frac{n_z\pi z}{c}\qquad E=\frac{\pi^2h^2}{2m}(\frac{n_x{}^2}{a^2}+\frac{n_y{}^2}{b^2}+\frac{n_z{}^2}{c^2})$$

可见，三维势箱中粒子的波函数相当于三个一维箱中粒子的波函数之积。而粒子的能量相当于三个一维箱中粒子的能量之和。

对于方势箱，$a=b=c$，波函数和能量为：

$$\psi(x,y,z)=\sqrt{\frac{8}{a^3}}\sin\frac{n_x\pi x}{a}\sin\frac{n_y\pi y}{a}\sin\frac{n_z\pi z}{a}$$

$$E=\frac{\pi^2h^2}{2ma^2}n^2,n^2=n_x{}^2+n_y{}^2+n_z{}^2$$