2009年硕士学位研究生入学考试试题

（量子力学）

所有试题答案写在答题纸上，答案写在试卷上无效

1，（20分） 质量为 μ，电荷为 q 的粒子在以电磁势（ϕ，$\vec{A}$）描写的电磁场内运动，哈密顿量为 $H=\frac{1}{2\mu}(\vec{p}-q\vec{A})^2+q\phi$，试求相应的守恒流。

2，（20分） 质量为 μ 的一维粒子，在势阱 $V(x)=-\alpha\delta(x)$ 内运动 （$\alpha>0$），求束缚态能级和波函数。

3，（30分） 二维各向同性谐振子，势能为 $V=\frac{1}{2}\mu\omega^2(x^2+y^2)$，$\mu$ 为粒子质量，ω 为频率，求能级和能量本征波函数，并讨论本证态的简并度和宇称。

4，（30 分）对于核电荷为 Ze 的类氢原子，计算处于束缚态 $\psi_{n\ell m}$ 中电子位置矢径函数 r^{-1},r^{-2} 和 r^{-3} 的期望值 $<r^{-1}>,<r^{-2}>,<r^{-3}>$。

5，（20分）设在电子的某自旋态中，测量自旋的 x 分量和 y 分量的平均值皆为零，则测电子自旋 z 分量的平均值一定为 $\hbar/2$ 或 $-\hbar/2$。证明这一点。

6， （30 分）一维谐振子的哈密顿量为 $H_0=\frac{p^2}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2$，今加上了微扰项 $H'=\lambda x^4$。

1），求对基态和第一激发态能级的一级修正；

2），微扰论在此能适用，参量 λ 应满足什么要求？

2

2009 年硕士学位研究生入学考试试题参考答案

（量子力学）

1，（20）

薛定谔方程为 $i\hbar\partial_t\psi=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi+i\frac{q\hbar}{\mu}\vec{A}\cdot\nabla\psi+i\frac{q\hbar}{2\mu}(\nabla\cdot\vec{A})\psi+q\phi\psi$，其复共轭为

$-i\hbar\partial_t\psi^*=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi^*-i\frac{q\hbar}{\mu}\vec{A}\cdot\nabla\psi^*-i\frac{q\hbar}{2\mu}(\nabla\cdot\vec{A})\psi^*+q\phi\psi^*$，前一方程乘以 ψ^*，

后一方程乘以 ψ，二者相减可得

$i\hbar\partial_t(\psi^*\psi)=\nabla\cdot\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)+i\frac{q\hbar}{\mu}\vec{A}\psi^*\psi\right)$，由此可得守恒流为

$\vec{j}=-i\frac{\hbar}{2\mu}(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)-\frac{q}{\mu}\psi^*\vec{A}\psi$.

2，（20）

定态薛定谔方程为 $\frac{d^2}{dx^2}\psi+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E+\alpha\delta(x)\right)\psi=0$，在 $x\neq 0$ 处位势为零，所以 $E>0$ 是自由态，$E<0$ 是束缚态。将上式在 $x\sim 0$ 附近积分，可得 $\psi'(0^+)-\psi'(0^-)=-\frac{2\mu\alpha}{\hbar^2}\psi(0)$，引入记号 $k=\sqrt{-2\mu E/\hbar^2}$，在 $x\neq 0$ 处薛定谔方程可以写为 $\psi''-k^2\psi=0$。在 $x\to\pm\infty$ 处，波函数必须趋于零，因此 $\psi\sim e^{-k|x|}$。又由于此时的波函数必须有确定的宇称，当宇称为偶时，$\psi(x)=ce^{-kx}$（$x>0$），$\psi(x)=ce^{kx}$（$x<0$）；当宇称为奇时，$\psi(x)=be^{-kx}$（$x>0$），$\psi(x)=-be^{kx}$（$x<0$）。显然由于波函数的连续性，当宇称为奇时，$b=0$，所以不存在奇宇称波函数。由偶宇称波函数可得 $\psi'(0^+)=-ck$，而 $\psi'(0^-)=ck$，因此给出 $E=-\frac{\mu\alpha^2}{2\hbar^2}$。另外由波函数的归一化条件给出 $c=\sqrt{k}$。因此，所求的能级为 $E=-\frac{\mu\alpha^2}{2\hbar^2}$，波函数为 $\psi(x)=\sqrt{k}\exp(-k|x|)$。

3，（30）

哈密顿量可以写为 $H=H_1+H_2$，$H_1=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2$，$H_2=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2y^2$，显然，$H_1$ 和 H_2 互相对易，是两个独立的谐振子的哈密顿量，其能级和本征函数分别为 $E_n=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega$，$\psi_n(x)=H_n(\alpha x)\exp(-\alpha^2x^2/2)$，以及 $E_m=(m+\frac{1}{2})\hbar\omega$，$\psi_m(y)=H_m(\alpha y)\exp(-\alpha^2y^2/2)$，这里 $n,m=0,1,2,\ldots$，$\alpha=\sqrt{\mu\omega/\hbar}$。因此所求的能级为 $E_N=(N+1)\hbar\omega$，$N=n+m$，相应的本征函数为 $\psi_{n,m}(x,y)=\psi_n(x)\psi_m(y)$。$N$ 给定了之后，能级 E_N 的简并度为 $N+1$，相应的 $N+1$ 个本征态，它们的宇称都是 $(-1)^N$。

4，（30）

类氢原子的哈氏量为

$$H=T+V=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

在态 $\psi_{n\ell m}$ 中，相应的能量本征值为

$$E_n=-\frac{Z^2e^2}{8\pi\varepsilon_0 a_0}\frac{1}{n^2},n=n_r+\ell+1,n_r=0,1,2,\ldots;\ell=0,1,2,\ldots;a_0=\frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{\mu e^2}$$

1） 由位力定理

$$2<T>=<\vec{r}\cdot\nabla V>=<\vec{r}\cdot\nabla(-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r})>=-<V>=2<H>=2E$$

于是

$$<r^{-1}>=-\frac{4\pi\varepsilon_0}{Ze^2}<V>=-\frac{8\pi\varepsilon_0}{Ze^2}E_n=\frac{Z}{a_0n^2},$$

2） 当把角动量部分分离后，类氢原子的的等效一维哈氏量为

$$H_\ell=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2}+V(r)+\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2}$$

利用 Feynman-Hellmann 定理，

$$\frac{\partial E_n}{\partial \ell} = <\frac{\partial H_\ell}{\partial \ell}> = <\frac{(2\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2}>$$

所以

$$<r^{-2}> = \frac{2\mu}{(2\ell+1)\hbar^2}\frac{\partial E_n}{\partial \ell} = \frac{2\mu}{(2\ell+1)\hbar^2}\frac{\partial}{\partial \ell}(-\frac{Z^2e^2}{8\pi\varepsilon_0 a_0(n_r+\ell+1)^2}) = \frac{2Z^2}{2\ell+1}\frac{1}{n^3a_0^2}$$

3) 对一维等效定态方程

$$H_\ell|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle$$

两边求导$\frac{\partial}{\partial r}$

$$\frac{\partial H_\ell}{\partial r}|E_n\rangle + H_\ell\frac{\partial}{\partial r}|E_n\rangle = E_n\frac{\partial}{\partial r}|E_n\rangle$$

两边作用以$\langle E_n|$，利用关系

$$\langle E_n|H_\ell = E_n\langle E_n|$$

可得

$$0 = \langle E_n|\frac{\partial H_\ell}{\partial \ell}|E_n\rangle = \langle E_n|[-\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{\mu r^3} + \frac{\partial V}{\partial r}]|E_n\rangle$$

所以有

$$<r^{-3}> = \frac{\mu}{\ell(\ell+1)\hbar^2}<\frac{\partial V}{\partial r}> = \frac{\mu Ze^2}{\ell(\ell+1)4\pi\varepsilon_0\hbar^2}<r^{-2}> = \frac{2Z^3}{\ell(\ell+1)(2\ell+1)}\frac{1}{n^3a_0^3}$$

5，（20）

设在（$(\vec{S}^2, S_z)$表象中，这自旋态的表示为

$$\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, a^*a + b^*b = 1$$

则由自旋x分量和y分量算符的表示

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

及题给条件，有

$$0 = \chi^+ S_x \chi = (a^*\, b)\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}(a^*b + ab^*)$$

$$0 = \chi^+ S_y \chi = (a^*\, b)\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = -i\frac{\hbar}{2}(a^*b - ab^*)$$

由此得

$a^*b=0, ab^*=0$

即

$a=0$

或

$b=0$

这就意味着，此态要么是自旋朝上 $\chi=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$,要么自旋朝下 $\chi=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$，即都为自旋 z 分量的本征态。在这两个本征态中，测量自旋 z 分量的平均值分别为 $\hbar/2$ 和 $-\hbar/2$。

6，（30）

1），求一级修正只要算出微扰项在态中的矩阵元 $\langle n|H'|n\rangle$。

基态波函数为高斯型的，归一化后为

$$\psi_0=\frac{\sqrt{\alpha}}{\pi^{1/4}}e^{-\alpha^2x^2/2}, \alpha=\sqrt{\mu\omega/\hbar}$$

则能修正为

$$\Delta E_0^{(1)}=\langle 0|H'|0\rangle=\int dx\psi_0^*(x)\lambda x^4\psi_0=\frac{\lambda\alpha}{\pi^{1/2}}\int dx x^4 e^{-\alpha^2x^2}=\frac{\lambda}{\pi^{1/2}\alpha^4}\int dz z^4 e^{-z^2}$$

$$=3\lambda/4\alpha^4$$

第一激发态有个节点（或奇宇称），波函数为

$$\psi_1=\frac{\sqrt{2\alpha}}{\pi^{1/4}}\alpha x e^{-\alpha^2x^2/2}$$

于是可计算出其能级的一级修正为

$$\Delta E_1^{(1)}=\langle 1|H'|1\rangle=\int dx\psi_1^*\lambda x^4\psi_1=\frac{2\alpha^3\lambda}{\pi^{1/2}}\int dx x^6 e^{-\alpha^2x^2}=\frac{15\lambda}{4\alpha^4}$$

2），微扰论要适用，修正不要超过原能级间隔。

对第一激发态言，这就要求

$$\frac{15\lambda}{4\alpha^4}=\frac{15\lambda}{4(\mu\omega/\hbar)^2}<\hbar\omega$$

或

$$\lambda<\frac{4\mu^2\omega^3}{15\hbar}$$

如要对更高能级使用微扰论，则 λ 还要更小。