量子力学 B

2021 秋季学期

作业 1 *(截止期: 9 月 29 号周三课上)*

1. 根据 Bohr 原子模型角动量量子化的条件, 假设电子轨道为圆形, 推导氢原子能级公式。
2. 估算能量为 1eV, 1 keV, 和 1 MeV 的电子的德布罗意波长。金属 Ni 的晶格间距约为 0.09 纳米，试估算为了用 Ni 晶格观测电子波动性，电子的能量大概应该在什么量级。
3. 气体分子热运动平均速率对应的物质波长称为热力学德布罗意波长。估算室温下大气分子的热力学德布罗意波长。若气体具有宏观量子效应(即量子简并气体)的条件为分子间物质波相互交叠从而形成干涉，试说明室温下的大气是否为量子简并气体(设大气分子平均间距约为 10^{-7}m)。估算密度为 10^{14}cm^{-3} 的稀薄钠原子气体成为量子简并气体的温度。
4. J. J. Thomson 在阴极射线管中测电子轨道的时候，电子的能量约为 10eV, 电子束截面线度约为 10^{-4}m。试用不确定性原理说明这时电子轨道的概念是否适用。这个实验中电子体现的是粒子性还是波动性?
5. 假设某粒子的坐标空间波函数是高斯型的， 即 （只考虑一维情况）

$$\psi(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha x^2\right)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2 + \beta x} = \sqrt{\frac{2\pi}{\alpha}}\, e^{\beta^2/2\alpha}, \quad \mathrm{Re}\,\alpha > 0$$

   a. 请写出粒子在动量空间的波函数
   b. 利用坐标空间波函数计算

$$\overline{x} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x)\psi(x)x$$
$$\overline{x^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x)\psi(x)x^2$$

   c. 利用动量空间波函数计算

$$\overline{p} = \int_{-\infty}^{\infty} dp \psi^*(p)\psi(p)p$$
$$\overline{p^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dp \psi^*(p)\psi(p)p^2$$

   d. 利用坐标空间波函数计算

$$\overline{p} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x)\hat{p}\psi(x)$$
$$\overline{p^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi^*(x)\hat{p}^2\psi(x)$$
$$\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

   e. 由上述结果，试验证波函数满足不确定性关系。定义涨落：

$$\Delta p \equiv \sqrt{\overline{(p-\bar{p})^2}} \qquad \Delta x \equiv \sqrt{\overline{(x-\bar{x})^2}}$$

量子力学B 第一次作业答案

By 鸽子

1.

由题意，电子在圆轨道上运行，假设运动半径为r，有

$\frac{mv^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$

电子的总能量：

$E = K + V = \frac{mv^2}{2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}$

角动量量子化条件：$L = mvr = n\hbar$，$n = 1, 2, \cdots$

代入量子化条件得：$K = \frac{n^2\hbar^2}{2mr^2} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r}$

综合以上，可以求出：

$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 n^2\hbar^2}{me^2} = a_0 n^2$，其中$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} \approx 0.053nm$ (玻尔半径)

能级公式：

$E_n = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r_n} = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0}\frac{me^2}{4\pi\epsilon_0 n^2\hbar^2} = -\frac{m\alpha^2c^2}{2}\frac{1}{n^2}$

其中$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} = \frac{1}{137}$

2.

(1) 已知电子静能为 $E_0 = 0.511mMeV$

对比可知，在$E_k = 1eV$，$E_k = 1keV$时可以忽略相对论效应，即$p = \sqrt{2mE_k}$；

在$E_k = 1MeV$时，需要考虑相对论效应，即$p = \sqrt{\frac{E_k^2 + 2E_kE_0}{c^2}}$；

又由德布罗意公式：$\lambda = \frac{h}{p}$，代入得：

$E_k = 1eV, \lambda = 1.2 \times 10^{-9}m$

$E_k = 1keV, \lambda = 3.9 \times 10^{-11}m$

$E_k = 1MeV, \lambda = 8.8 \times 10^{-13}m.$

估算只要数量级正确即可。

(2) 由题意$\lambda = 9 \times 10^{-11}m$~$1 \times 10^{-10}m$.

由(1)的公式可计算得到电子大概在100eV的量级。

3.

大气分子：双原子气体，分子平均动能$E=\frac{3}{2}kT$，平均摩尔质量$m=29g/mol$，T取300K。

则：

$\lambda=\frac{h}{p}=\frac{h}{\sqrt{2mE}}\rightarrow 10^{-11}m<d=10^{-7}m$

即为非量子简并气体。

Na原子气体分子：摩尔质量$m'=23g/mol.$

由$n\approx\frac{1}{d^3}$得到$d\approx 2.2\times 10^{-6}m.$

此气体成为量子简并气体的临界条件：$\frac{h}{p}=\frac{h}{\sqrt{3m'kT}}=d$

则：T~$10^{-6}K$

4.

截面(轨道)线度 $l=10^{-4}m$

电子波长：$\lambda=\frac{h}{p}=\frac{h}{\sqrt{2mE}}=3.9\times 10^{-10}m<<l=10^{-4}m$

可得此实验体现的是电子的粒子性，轨道的概念依然适用。

5.

a.通过傅里叶变换从坐标表象变换到动量表象，得到动量空间波函数

$\varphi(p)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int dx\psi(x)exp(-ipx/\hbar)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_{-\infty}^{+\infty}dxexp(-\frac{1}{2}\alpha x^2-ipx/\hbar)$

利用一个常用的公式：

$\int_{-\infty}^{+\infty}dxexp(-\frac{1}{2}\alpha x^2+\beta x)=\sqrt{2\pi/\alpha}exp(\beta^2/2\alpha),Re\alpha>0$

代入得：

$\varphi(p)=\frac{1}{(\alpha\pi\hbar^2)^{1/4}}exp(-\frac{p^2}{2\alpha\hbar^2})$

b.

$<x>=\int_{-\infty}^{+\infty}dx\psi^*(x)\psi(x)x=0$

$<x^2>=\int_{-\infty}^{+\infty}dx\psi^*(x)\psi(x)x^2=\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}x^2exp(-\alpha x^2)=\frac{1}{2\alpha}$

c.

$<p>=\int_{-\infty}^{+\infty}dx\psi^*(p)\psi(p)p=0$

$<p^2>=\int_{-\infty}^{+\infty}dx\psi^*(p)\psi(p)p^2=\frac{\alpha}{2}\hbar^2$

d.

$<p>=\int_{-\infty}^{+\infty}dx\psi^*(x)(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\psi(x)=0$

$<p^2>=\int_{-\infty}^{+infty}dx\psi^*(x)(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})^2\psi(x)=\frac{\alpha}{2}\hbar^2$

e.

$\Delta p \equiv \sqrt{<(p-<p>)>} = \sqrt{\frac{\alpha\hbar}{2}}$

$\Delta x = \sqrt{\frac{1}{2\alpha}}$

$\Delta x \times \Delta p = \frac{\hbar}{2} \geq \frac{\hbar}{2}$，可见满足不确定原理。

对高斯积分计算的补充

一维高斯积分

一般形式：$\int_{-\infty}^{+\infty} dx exp(-\alpha x^2/2) = \sqrt{2\pi/\alpha}, Re\alpha > 0$

中心平移 $x \rightarrow x + \frac{\beta}{\alpha}$后:

$\int_{-\infty}^{+\infty} dx exp(-\alpha x^2/2 + \beta x) = \sqrt{2\pi/\alpha} exp(\beta/2\alpha, Re\alpha > 0$

在复数域中有:

$\int d(z,\bar{z}) exp(-\bar{z}wz) = \frac{\pi}{w}, Rew > 0$，$z = x + iy$，$\int d(z,\bar{z}) = \int\int_{-\infty}^{+\infty} dxdy$

同样在中心平移后

$\int d(z,\bar{z}) exp(-\bar{z}wz + \bar{u}z + \bar{z}v) = \frac{\pi}{w} exp(\frac{\bar{u}v}{w}), Rew > 0$