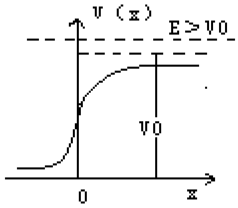
第三章： 一维定态问题

[5] 试证明对于任意势垒，粒子的反射系数 R，透射系数 T 满足 R + T = 1 。振幅间的关系？

（解）任意的势垒是曲线形的，如果 V（x）没有给定，则 Ψ （x）不能决定，因而无法计算各种几率流密度。但如果附图所示 V（x）满足二点特性：



(1) $$\lim_{x\to\infty} V(x) = V_0$$

(2) $$\lim_{x\to-\infty} V(x) = 0$$

我们近似地认为当 $x \to \infty$ 时波函数的解是

$$\Psi(x) = Ce^{ik_2 x}\left(k_2 = \sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar\right)$$

$x \to -\infty$ 时波函数的解是

$$\Psi(x) = Ae^{ik_1 x} + Be^{-ik_1 x}\left(k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar\right)$$

但由于粒子几率流的守恒（V（x）是实数函数）：在数量上入射几率流密度 J_A 应等于反射的 J_B 和透射的 J_C 的和，即：

$$|J_A| = |J_B| + |J_C|$$

仿前题的算法，不必重复就可以写出：

$$\frac{\hbar k_1}{m}|A|^2 = \frac{\hbar k_1}{m}|B|^2 + \frac{\hbar k_2}{m}|C|^2$$

这里的（1）（2）是等效的，将（1）遍除 $|J_1|$ 得：

$$1 = \left|\frac{J_B}{J_A}\right| + \left|\frac{J_C}{J_A}\right| \quad \text{即} \quad 1 = T + R \quad \text{得证}$$

将（2）式遍除 $\frac{\hbar k_1}{m}|A|^2$ 得另一种形式：

$$1=\frac{|B|^2}{|A|^2}+\frac{k_2}{k_1}\frac{|C|^2}{|A|^2}$$

#

[6] 设在一维无限深势阱中运动的粒子的状态用：

$$\Psi(x)=\frac{4}{\sqrt{a}}\sin\frac{\pi x}{a}\cos^2\frac{\pi x}{a}$$

描述，求粒子能量的可能值及相应的几率。

（解）一维无限深势阱的本征态波函数是

$$\Psi(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}$$

题给波函数可用本征函数展开：

$$\Psi(x)=\frac{2}{\sqrt{a}}\sin\frac{\pi x}{a}\left(1+\cos\frac{2\pi x}{a}\right)$$

$$=\frac{1}{\sqrt{a}}\left\{2\sin\frac{\pi x}{a}+2\sin\frac{\pi x}{a}\cos\frac{2\pi x}{a}\right\}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{a}}\left\{2\sin\frac{\pi x}{a}+\sin\frac{3\pi x}{a}-\sin\frac{\pi x}{a}\right\}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{a}}\left\{\sin\frac{\pi x}{a}+\sin\frac{3\pi x}{a}\right\}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x}{a}+\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{3\pi x}{a}$$

$$=C_1\Psi_1(x)+C_2\Psi_3(x)$$

因此 $\Psi(x)$ 是非本征态，它可以有二种本征态，处在

$$\Psi_1(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x}{a}$$

态上的几率是$\left(\sqrt{\frac{1}{2}}\right)^2=\frac{1}{2}$。这时能量是$E_1=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$，处在$\Psi_3(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{3\pi x}{a}$

态上的几率是$\left(\sqrt{\frac{1}{2}}\right)^2=\frac{1}{2}$，这时能量是$E_3=\frac{9\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$。

[8] **设粒子处于无限深势阱中，状态用波函数$\psi(x)=Ax(a-x)$描述，$A=\sqrt{\frac{30}{a^5}}$是归一化常数，求（1）粒子取不同能量几率分布。（2）能量平均值及涨落。**

(解)在物理意义上，这是一种能量的非本征态，就是说体系在这种态上时，它的能量是不确定的，薛定谔方程是能量的本征方程，波函数不会满足薛氏方程式。但我们知道势阱中的粒子满足边界条件的解是：

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

这种解是能量本征态，相应的能量$E=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$

按叠加原理非本征态可用本征函数谱展开：

$$（1）\ \psi(x)=\sum c_n\psi_n(x)=\sum_n c_n\cdot\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}\qquad（1）$$

$$c_n=\int_0^a\psi(x)\psi_n^*(x)dx=\frac{\sqrt{60}}{a^3}\int_0^a x(a-x)\sin\frac{n\pi x}{a}dx\qquad（2）$$

利用积分公式：

$$\begin{cases}\int x\sin pxdx=\frac{-x\cos px}{p}+\frac{\sin px}{p^2}\\ \int x^2\sin pxdx=(\frac{2}{p^2}-\frac{x^2}{p})\cos px+\frac{2x}{p^2}\sin px\end{cases}$$

于（2）式，可求得：$c_n=\frac{2\sqrt{60}}{\pi^3n^3}[1-(-1)^n]$　　（3）

此式只有为奇数时才不为0，故只有量子数奇数的态

$$\psi(x)=\frac{1}{\pi^3}\sqrt{\frac{1920}{a}}\{\frac{\sin\frac{\pi x}{a}}{1^3}+\frac{\sin\frac{3\pi x}{a}}{3^3}+\cdots\cdots+\frac{\sin\frac{(2k-1)\pi x}{a}}{(2k-1)^3}+\cdots\cdots\}\quad（4）$$

仍是归一化的，故粒子具有能级：

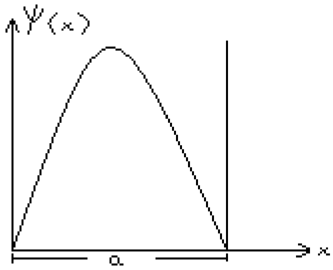
$E_n = \dfrac{n^2\pi^2\hbar}{2ma^2}$ 的几率是

$$c_n^* c_n = \left(\frac{4\sqrt{60}}{\pi^2 n^2}\right)^2 = \frac{960}{\pi^6 n^6} \qquad (5)$$

（2）能量的平均值可以按照已知几率分布的公式计算：

$$\overline{E} = \sum_n c_n^* c_n \cdot E_n = \sum_n \frac{960}{\pi^6 n^6} \cdot \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

$$= \frac{960\hbar^2}{2m\pi^4 a^2}\sum_n \frac{1}{n^4} \quad \text{（n 奇数）} \qquad (6)$$



根据傅立叶级数可计算 $\sum_n \frac{1}{n^4}$ (n 奇) 有几种方法，例如：

$$y(x) = x^2(3\pi - 2|x|) = \frac{\pi^3}{2} - \frac{48}{\pi}\sum_n \frac{\cos(2n-1)x}{(2n-1)^4}$$

$$(-\pi < x < \pi)$$

上式中令 x=0 立刻得

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)^4} = 1 + \frac{1}{3^4} + \frac{1}{5^4} + \frac{1}{7^4} \ldots\ldots = \frac{\pi^4}{96} \qquad (7)$$

代(6)式得 $\quad \overline{E} = \dfrac{5\hbar^2}{ma^2}$

另一方法是直接依据题给的能量非本征态用积分法求平均值：

$$\overline{E} = \int_0^A \psi^* \hat{H}\psi dx = A^2\int_0^a (ax - x^2)\cdot\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2}{\partial x^2}(ax - x^2)\right)dx$$

$$= -\frac{30}{a^5}\cdot\frac{\hbar}{2m}\int_0^a -2(ax - x^2)dx = \frac{5\hbar^2}{ma^2}$$

能够这样的原因是是厄米算符.

(3)能量的涨落指能量的不准度 $\delta E = \sqrt{\overline{E^2} - (\overline{E})^2}$ 现需求能量平方的平均值,这可利用前半题结果,既的值来计算.

$$\overline{E^2} = \sum_n c_n^* c_n E_n^2 = \sum_n \frac{960}{\pi^6 n^6}\cdot\frac{n^4\pi^4\hbar^4}{4m^2a^4}$$

$$= \frac{240\hbar^4}{\pi^2 m^2 a^4}\sum_{n奇} \frac{1}{n^2}$$

但 $\sum_{n奇}\frac{1}{n^2}=\sum_{k=2}^{\infty}\frac{1}{(2k-1)^2}$

关于此求和式 $\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{(2k-1)^2}=1+\frac{1}{3^2}+\frac{1}{5^2}+\frac{1}{7^2}$ 也用福利衰级数

$$y(x)=x=\frac{4l}{\pi^2}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-1)^{k-1}}{(2k-1)^2}\sin\frac{(2k-1)\pi x}{l}$$

（展开区间 $-\frac{l}{2}<x<\frac{l}{2}$）此式中可取 $l=1$,

代入 $x=\frac{1}{2}$ 得 $\frac{\pi^2}{8}=\sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-1)^{k-1}}{(2k-1)^2}\sin(2k-1)\frac{\pi}{2}=\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{(2k-1)^2}$

$\overline{E^2}=\frac{30\hbar^4}{m^2a^4}$, $\delta E=\sqrt{\frac{30\hbar^4}{m^2a^4}-\frac{25\hbar^4}{m^2a^4}}=\frac{\sqrt{5}\hbar^2}{ma^2}$

[9]一维无限深势阱中求处于 $\psi_n(x)$ 态的粒子的动量分布几率密度 $|\varphi(p)|^2$。

（解）因为 $\varphi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}$ 是已知的，所以要求动量分布的几率密度，先要求动量波函数，这可利用傅立叶变换的一维公式:

$$\varphi_n(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_0^a\sqrt{\frac{2}{a}}e^{-ipx/\hbar}\sin\frac{n\pi x}{a}dx$$

利用不定积分公式

$$\int e^{ax}\sin pxdx=\frac{a\sin px-p\cos px}{a^2+p^2}e^{ax}$$

用于前一式：

$$\varphi_n(p)=\frac{1}{\sqrt{\pi\hbar a}}\cdot\frac{-\frac{ip}{\hbar}\sin\frac{n\pi x}{a}-\frac{n\pi}{a}\cos\frac{n\pi x}{a}}{(\frac{n\pi}{a})^2-(\frac{p}{\hbar})^2}e^{ipx/\hbar}\Bigg|_0^a$$

$$=\frac{2n\sqrt{a\pi\hbar^8}}{a^2p^2-n^2\pi^2\hbar^2}\{\frac{-1+(-1)^n e^{\frac{ipa}{\hbar}}}{2}\}$$

$$=\frac{-2n\sqrt{a\pi\hbar^3}}{a^2p^2-n^2\pi^2\hbar^2}e^{\frac{ipa}{2\hbar}}\cos\frac{pa}{2\hbar}\qquad (n\text{ 奇数})$$

$$=\frac{-2ni\sqrt{a\pi\hbar^2}}{a^2p^2-n^2\pi^2\hbar^2}e^{\frac{ipa}{2\hbar}}\sin\frac{pa}{2\hbar},\qquad (n\text{ 偶数})$$

动量几率密度分别是

$$\frac{4n^2a\pi\hbar^2}{(a^2p^2-n^2\pi^2\hbar^2)^2}\cos^2\frac{pa}{2\hbar},\qquad （n\text{ 奇数}）$$

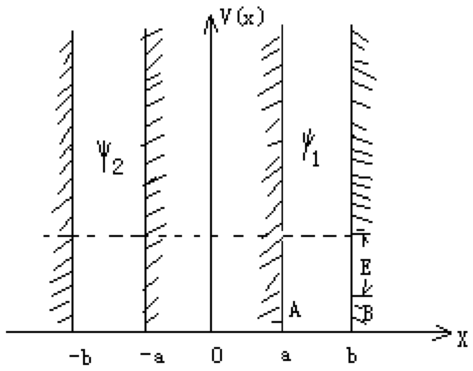
$$\frac{4n^2a\pi\hbar^2}{(a^2p^2-n^2\pi^2\hbar^2)^2}\sin^2\frac{pa}{2\hbar},\qquad (n\text{ 偶数})$$

#

[11]设粒子处在对称的双方势阱中

$$V(x)=\begin{cases}\infty & |x|>b\\ \mathbf{0} & a<|x|<b\\ V_0 & |x|<a\end{cases}$$

在$V_0\to\infty$情况下求粒子能级，并证明能级是双重简并。（证明V_0取有限值情况下，简并将消失。）



（解）**先看 V_0 趋于无穷大情况，**本题的势场相对于原点 0 来说是对称的，因此波函数具有字称。设总能量是 E，又设 $k=\sqrt{2mE}/\hbar$ 在区间$(-\infty,-b\ )$ (-a , a) (b， ∞)之中波函数都是零，**在区间(a ,b)，设波函数是：**

$$\psi(x)=A\sin(kx+\alpha)=0 \qquad (1)$$

考虑 x=a, x=b 二连续条件：（势阱外面$\psi=0$）

$$\begin{cases}\psi(a)=A\sin(ka+\alpha)=0\\ \psi(b)=A\sin(kb+\alpha)=0\end{cases} \qquad (2)$$

从这里得到，因而得 $ka+\alpha=n\pi$ ，$kb+\alpha=n'\pi$ ，因而得

$\alpha=-ka+n\pi$或$-kb+n'\pi$ ，n, n' 是整数，满足边界条件的解是:

$$\psi_1(x)=A\sin[k(x-a)+n\pi]=\begin{cases}A\sin k(x-a)\\ -A\sin k(x-a)\end{cases}$$

再考虑区间$(-b,-a)$**，设波函数：**

$$\psi_2(x)=B\sin(kx+\beta) \qquad (5)$$

代入$(x=-a)x=-b$ 在二点的连续条件得

$B\sin(-ka+\beta)=0, B\sin(-kb+\beta)=0$

得: $-ka+\beta=p\pi$,$-kb+\beta=-p'\pi$,但 p, p' 整数,因此区间 $(-b,-a)$ 的波函数:

$$\psi_2(x)=B\sin[k(x+a)+p\pi]=\begin{cases} B\sin k(x+a) & (6) \\ -B\sin k(x+a) & (7) \end{cases}$$

$\psi_1(x)$ 和 $\psi_2(x)$ 之间要满足奇或偶宇称的要求,才能成为一组合理的解,若令 $\psi_1(-x)=\psi_2(x)$,得 A=B,相应的一组**偶宇称解是:**

$$\begin{cases} \psi_1(x)=A\sin k(x-a) \\ \psi_2(x)=-A\sin k(x+a) \end{cases}$$

同理令 $\psi_1(-x)=-\psi_2(x)$,得到一组奇宇称解是

$$\begin{cases} \psi_1(x)=+A\sin k(x-a) \\ \psi_2(x)=A\sin k(x+a) \end{cases} \qquad (9)$$

$\psi_1(x)$ 和 $\psi_2(x)$ 是线性不相关的解,但却有相同的波数 k ,因而也有相同的能级 $E=\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}$.能级是分立的,这可以从边界条件式 $\psi_1(a)=0,\psi_2(b)=0$ 同时满足的要求看到,这两式推得

$$ka+\alpha=n\pi,kb+\alpha=n'\pi$$

相减得 $k(b-a)=(n'-n)\pi=n''\pi$,从中解出 k, n'' 是整数,可作为能级编号.

$$k_{n''}=\frac{n''\pi}{b-a}$$

因此能级是

$$E_{n''} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n''}{b-a}\right)^2$$ 是二度简并的（n^prime prime,正负均可），偶宇称的态和奇宇称的态对应同一个能量，但本证态不同。

[11] (补充） 粒子在图 1.7 所示之势场

$$V(x)=\begin{cases} V_0, & |x| \le a \\ 0, & \text{a}<|x|<L \\ \infty, & |x| \ge L \end{cases}$$

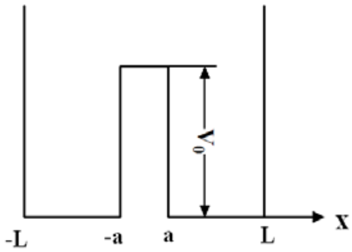


图1.7

中运动，求能级公式，并讨论如下极限情况：

$$a \to 0,\ \ V_0 \to \infty,\ \ 2aV_0 \to U_0(\text{有限值})$$

解： 由于 $V(x) \ge 0$，所以 $E>0$，由于 $V(-x)=V(x)$，所以能量本征态有确定宇称。在 $V(x)\to\infty$ 处，波函数应该趋近于 0，所以边界条件为

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

(a)偶宇称态

1° $E<V_0$，另

$$k=\sqrt{2mE}/\hbar$$
$$\xi=\sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar \tag{2}$$

能量本征方程可以改写成

$$\psi''-\xi^2\psi=0,\quad |x|<a$$
$$\psi''+k^2\psi=0,\quad \text{a}<|\text{x}|<L \tag{3}$$

满足边界条件（1）的解为

$$\begin{aligned}&\psi=\mathrm{ch}\,\xi x=\frac{1}{2}(e^{\xi x}+e^{-\xi x}), \quad |x|<a\\&\psi=A\sin k(L-x). \qquad \mathrm{a}<x<L\end{aligned} \tag{4}$$

（$-L<x<-a$ 区间的ψ，可以按偶函数条件写出，从略。）由 $x=a$ 处ψ'/ψ 的连续条件，即可得出能级方程

$$k\cot k(L-a)=-\xi\,\mathrm{th}\,\xi a \tag{5}$$

其中

$$\mathrm{th}x=\frac{e^{x}-e^{-x}}{e^{x}+e^{-x}}$$

2° $E>V_0$，另

$$\eta=\sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar \tag{6}$$

能量本征方程可以写为

$$\begin{aligned}&\psi''+\eta^{2}\psi=0, \quad |x|<a\\&\psi''+k^{2}\psi=0, \quad \mathrm{a}<|\mathrm{x}|<L\end{aligned} \tag{7}$$

满足边界条件（1）的解为

$$\begin{aligned}&\psi=\cos\eta x, \qquad |x|<a\\&\psi=B\sin k(L-x). \qquad \mathrm{a}<x<L\end{aligned} \tag{8}$$

（$-L<x<-a$ 区间的ψ，按偶函数条件写出，从略。）由 $x=a$ 处ψ'/ψ 的连续条件，即可得出能级方程

$$k\cot k(L-a)=\eta\tan\eta a \tag{9}$$

每一个本证能量 E（或 k 或ξ），对应一个本证函数。所以，不兼并。

(b)奇宇称态

1° $E < V_0$，定态方程仍为式（3），满足边界条件（1）的解为

$$\begin{aligned}\psi &= \mathrm{sh}\,\xi x = \frac{1}{2}(e^{\xi x} - e^{-\xi x}), \quad && |x| < a \\ \psi &= C\sin k(L-x). && \mathrm{a}<x<L\end{aligned} \tag{10}$$

（$-L < x < -a$ 区间的 ψ，按奇函数条件写出，从略。）能级方程为

$$k\cot k(L-a) = -\xi\coth\xi a \tag{11}$$

其中

$$\coth x = 1/\,\mathrm{th}x = (e^x + e^{-x})/(e^x - e^{-x})$$

2° $E > V_0$，定态方程仍为式（7），满足边界条件（1）的解为

$$\begin{aligned}\psi &= \sin\eta x, \quad && |x| < a \\ \psi &= D\sin k(L-x). && \mathrm{a}<x<L\end{aligned} \tag{12}$$

（$-L < x < -a$ 区间的 ψ，按奇函数条件写出，从略。）能级方程为

$$k\cot k(L-a) = -\eta\cot\eta a \tag{13}$$

讨论　如果 $a \to 0, V_0 \to \infty,$ **但** $2aV_0 \to U_0$**，则**

$$\int_{-a}^{a} V(x)dx = 2aV_0 = U_0$$

相当于在 $x = 0$ 处存在一个 δ 势垒

$$V(x) = U_0\delta(x), \qquad |x| < L \tag{14}$$

只需要考虑 $E < V_0$ 的情形。

(a) 偶宇称态

这时，可以得到下列近似：

$$\xi^2 a \approx 2mV_0 a/\hbar^2 = mU_0/\hbar^2$$

$$\xi a \ll 1,\quad \mathrm{th}\xi a \approx \xi a,\quad \xi\mathrm{th}\xi a \approx mU_0/\hbar^2$$

式（5）变成

$$k\cot kL = -mU_0/\hbar^2 \tag{5'}$$

(b) 奇宇称态

取上述近似后，式（11）变成

$$\tan kL = -ka \to 0 \tag{11'}$$

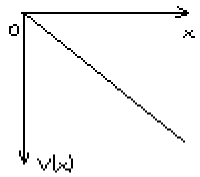
解为

$$k = \frac{n\pi}{L},\quad E = \frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{L}\right)^2,\quad n = 1, 2, 3\cdots$$

这结果等价于平底无限深势阱，因为奇宇称态$\psi(0)=0$，中央的δ势垒不起作用。

[16]在 p 表象中，求解均匀 V（x）=-Fx 中粒子的能量本征函数。（设 F>0）

(线性势中的游离态)



（解）建立动量表象中的一维薛定谔方程式。根据第二章第 15 题以及本章第 10 题的方法，薛定谔方程式用一维动量 p 作自变量时，形式是:（定态）

$$\left[\frac{p^2}{2m} + V\left(\hbar i\frac{\partial}{\partial p}\right)\right]\varphi(p) = E\varphi(p)$$

在势能这一项上，将 V 看作一个算符，V 中原来含有的 x 应更换成$\hbar i\dfrac{\partial}{\partial p}$，然后将这样构成的势能算符作用到动能波函数$\varphi(p)$上，因而在本题情形:

$$\frac{p^2}{2m}\varphi(p) - \hbar iF\frac{\partial\varphi}{\partial p} = E\varphi(p)$$

（2）

此式容易分离变量：

$$\hbar iFd\varphi = \left(\frac{p^2}{2m} - E\right)\varphi dp$$

$$\frac{d\varphi}{\varphi} = \left(\frac{p^2}{2m\hbar iF} - \frac{E}{\hbar iF}\right)dp$$

积分得：

$$\ln\phi = \frac{p^2}{6m\hbar iF} - \frac{Ep}{\hbar iF} + 常数$$

$$\phi_E = Ce^{\frac{p^2}{6m\hbar iF} - \frac{Ep}{\hbar iF}}$$

（3）

积分常数 C 用动量波函数归一化决定：

$$\int_p \phi_E^{\ *}\phi_{E'}dp = \delta(E - E')$$

（4）

这种计算是所谓“δ 函数归一化”。原因是波函数（3）实际上是平面波包，当 $p \to \pm\infty$ 时

$\varphi(p)$ 不趋近于 0，所以（3）实际上是不能归一化的，而只能令几率积分等于 δ，这样

$$\int \varphi^*(p,\ E)\cdot\varphi(p,\ E')\,dp = C^*C\int_p e^{\frac{p}{\hbar iF}(E-E')}dp$$

$$= C^*C\,(2\pi\hbar F)\cdot\frac{1}{2\pi}\int e^{i\frac{p}{\hbar F}(E'-E)}\cdot\frac{dp}{\hbar F}$$

$$= C^*C\,(2\pi\hbar F)\,\delta(E - E')$$

因而 $$C = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar F}}$$

[17]粒子处在δ势阱$V(x)=-V_0\delta(x)$　($V_0>0$)中，用动量表象中的薛定谔方程式，求解其束缚态的能量本征值及其相应的本征函数。

（解）（甲法）：

薛定谔方程式的确定，与第二章习题15、本章习题10的方法类似，但是不能简单地用

$$V(x)=V(\hbar i\frac{\partial}{\partial p})$$

来得到结果，因为本题的情形

$$V(x)=-V_0\delta(x)=-V_0\delta(\hbar i\frac{\partial}{\partial p})$$

这种算符运用不便，可以用第二章15题方法；写下坐标表象薛氏方程式（定态）：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+V(x)\Psi=E\Psi$$

遍乘以$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-ipx/\hbar}$，再对坐标积分：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_x e^{-ipx/\hbar}\frac{d^2\Psi}{dx^2}dx+\int_x\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-ipx/\hbar}V(x)\Psi(x)dx$$

$$=\frac{E}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_x e^{-ipx/\hbar}\Psi(x)dx$$

等号左方第二项被积函数中的$\Psi(x)$再用傅立叶变换使成为p的积分。左方第一项和右方一项按逆变换变成动量波函数的项：

$$\frac{p^2}{2m}\varphi(p)+\int_x\frac{1}{2\pi\hbar}e^{-ipx/\hbar}\int_{p'}e^{ip'x/\hbar}\varphi(p')dp'dx\cdot V(x)=E\varphi(p)$$

即

$$\frac{p^2}{2m}\varphi(p)+\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{p'}[\int_x e^{i(p'-p)x/\hbar}V(x)dx]\varphi(p')dp'=E\varphi(p)$$

利用δ函数的变换性质 $\int_x f(x)\delta(x-x')dx = f(x)$，有

$$\int_{x=-\infty}^{\infty} e^{i(p'-p)x/\hbar} V(x)\, dx = -V_0 \int_{x=-\infty}^{\infty} e^{i(p'-p)x/\hbar} \delta(x)\, dx$$

$$= -V_0 e^{i(p'-p)*0/\hbar} = -V_0$$

不能把势能通过傅立叶变换，变成动量空间的势能算符：

$$\int_{x=-\infty}^{\infty} e^{ipx} V(x)\, dx = -V_0 \int_{x=-\infty}^{\infty} e^{ipx} \delta(x)\, dx$$

$$= -V_0 e^{ip*0} = -V_0$$

前式中扩号左方的积分

$$= -\frac{V_0}{2\pi\hbar} \int_{p'=-\infty}^{\infty} \varphi(p')\, dp' = 常数A \qquad (4)$$

动量表象的薛氏方程式成为：

$$\frac{p^2}{2m}\phi(p) + A = E\phi(\mathrm{p}) \qquad (5)$$

不需积分就得到动量表象的波函数：

$$\varphi(p)=\frac{2mA}{2mE-p^2} \qquad (6)$$

首先确定能量的本征值E（即允许的值），在本题中因为没有寻常的势阱问题中的边界条件可以利用，这只能依靠积分式（4）来解决，将式（6）代入（4），得：

$$-\frac{V_0}{2\pi\hbar}\int_{p=-\infty}^{\infty}\frac{2mA}{2mE-p^2}dp=A$$

消去A，并注意到在束缚态情形$E<0$，可令$-E=E'>0$，前一式成为：

$$\frac{mV_0}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp}{2mE'+p^2}=\frac{mV_0}{\pi\hbar}\cdot\frac{1}{\sqrt{2mE'}}\cdot tg^{-1}\frac{p}{\sqrt{2mE'}}\Bigg|_{p=-\infty}^{p=\infty}$$

$$=\frac{m}{\sqrt{2E'}}\cdot\frac{V_0}{\pi\hbar}\cdot\pi=1$$

即

$$E'=\frac{mV_0^2}{2\hbar^2},\quad E=-\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}$$

（7）

常数A可以将波函数（5）通过归一化计算来定

$$\int_p\varphi^2(p)\ dp=1$$

$$(2mA)^2\int_p\frac{dp}{(2mE'+p^2)^2}=1 \qquad (8)$$

利用不定积分公式

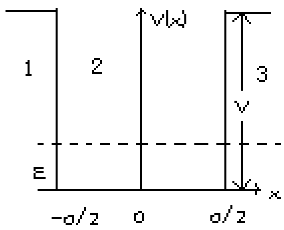
$$\int_p\frac{dp}{(a^2+p^2)^2}=\frac{1}{2a^2}[\frac{p}{a^2+p^2}+\frac{1}{a}tg^{-1}\frac{p}{a}]$$

从（8）式求得：

$$A=(\frac{2}{\pi})^{\frac{1}{2}}(2mE')^{\frac{3}{4}}=\sqrt{\frac{2}{\pi}\cdot(\frac{mV_0}{\hbar})^3}$$

（9）

[18]设粒子在一维无限高势垒中运动（有限高），试求作用在势垒壁上的平均力。



（解）与经典力学中的力相对应，量子力学力是一个算符用 $-\nabla V(\vec{r})$（三维）或 $-\dfrac{\partial}{\partial x}V(x)$ 表示，在某位置 $\vec{r}$ 上的力由该点单值决定，它的平均值指空间所有范围内的平均值（假定空间各点上受力）

$$\bar{F}=-\iiint_{\tau}\Psi^{*}(\vec{r},t)\nabla V(r)\Psi(\vec{r},t)d^{2}r$$

或 $$F=-\int_{x}\Psi^{*}(x,t)\frac{\partial V}{\partial x}\Psi(x,t)dx$$

在如图示的对称有限深势垒的情形，因为势垒内部势能无变化，外部也无变化，故只有这势能突变点$(-\dfrac{a}{2})$　$(\dfrac{a}{2})$处受力，该两点的力为无限大：

$$\frac{\Delta V}{\Delta x}=\lim_{\Delta x\to 0}\frac{V_0-0}{\Delta x}\to\infty$$

此外，又发现在包括$-\dfrac{a}{2}$(或$\dfrac{a}{2}$)点在内的小范围中力的积分是有限值：

$$\int_{\frac{a}{2}-\tau}^{\frac{a}{2}+\tau}Fdx=\int_{\frac{a}{2}-\tau}^{\frac{a}{2}+\tau}-\frac{\partial V}{\partial x}dx=-V_0$$

而 $$\frac{1}{V_0}\int_{+\frac{a}{2}-\tau}^{\frac{a}{2}+\tau}-\frac{\partial V}{\partial x}dx=1$$

因此在该二点上的力满足 δ 函数的三个主要性质，所以每一点上的力表示为一个 δ 函数

$$\hat{F}(x)=V_0\delta(x-\frac{a}{2})-V_0\delta(x+\frac{a}{2})\qquad(1)$$

可以分别计算一壁的平均力，在 $x=\dfrac{a}{2}$ 处的平均力：

$$\overline{F} = \int_{x=\frac{a}{2}-\tau}^{\frac{a}{2}+\tau} \Psi^*(x)\ V_0\delta\left(x-\frac{a}{2}\right)\ \Psi\ (x) \qquad (2)$$

这里Ψ（x）是归一化的一维有限深度（V_0）势垒中粒子的波函数。象附图那样取坐标，并

设 $k = \sqrt{2mE}/\hbar \qquad k' = \sqrt{2m\left(V_0 - E\right)}/\hbar$

并注意Ψ（x）具有奇或偶的宇称。

（1） 奇宇称：可设 I 、II、III三个区间的波函数依次是：

$$Ae^{k' x},\quad B\sin kx,\quad -Ae^{-k' x}$$

在点 $x=\frac{a}{2}$ 处的连续条件是

$$B\sin\frac{ka}{2} = Ae^{-\frac{k' a}{2}},\quad B = e^{-\frac{k' a}{2}} A/\sin\frac{ka}{2}$$

写出归一化条件：

$$A^2\left\{\int_{-\infty}^{\frac{a}{2}} e^{2k' x}dx + \frac{e^{-k' a}}{\sin^2\frac{ka}{2}}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}\sin^2 kxdx + \int_{\frac{a}{2}}^{\infty} e^{-2k' x}dx\right\} = 1$$

得 $$A^2 = \frac{e^{k' a}}{\frac{a}{2}cse^2\frac{ka}{2} + \frac{1}{k'} - \frac{1}{k}ctg\frac{ka}{2}}$$

$$B^2 = \frac{1}{\frac{a}{2} + \frac{1}{k'}\sin^2\frac{ka}{2} - \frac{1}{k}\sin\frac{ka}{2}\cos\frac{ka}{2}}$$

（4）

现在根据这个结果代入平均力公式（2），就求得 $x=\frac{a}{2}$ 壁上的平均力，至于式中的波

函数 $\Psi(x)$，**则用 $B\sin kx$ 或 $Ae^{-k'x}$ 都是等效的，**我们有：

$$\overline{F}=V_0B^2\int_{\frac{a}{2}-\tau}^{\frac{a}{2}+\tau}\sin^2 kx\cdot\delta\left(x-\frac{a}{2}\right)dx=V_0B^2\sin^2\frac{ka}{2}$$

$$=\frac{V_0}{\frac{a}{2}cse^2\frac{ka}{2}+\frac{1}{k'}-\frac{1}{k}ctg\frac{ka}{2}}$$

（5）

(2) 偶宇称：在有限深势阱的情形，在 $x<-\frac{a}{2},-\frac{a}{2}<x<\frac{a}{2}$， $x>\frac{a}{2}$ 三个区间中的

波函数是：

$$Ae^{+k'x},\quad B\cos kx,\quad Ae^{-k'x}$$

在 $x=\frac{a}{2}$ 处的波函数连续条件：

$$B\cos\frac{ka}{2}=Ae^{-k'a/2} \qquad (8)$$

归一化条件：

$$A^2\{\int_{-\infty}^{-\frac{a}{2}}e^{2k'x}dx+\frac{e^{-2k'a}}{\cos^2\frac{ka}{2}}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}\cos^2 kxdx+\int_{\frac{a}{2}}^{\infty}e^{-2k'x}dx\}=1$$

$$A^2=\frac{e^{k'a}}{\frac{a}{2}\sec^2\frac{ka}{2}+\frac{1}{k'}+\frac{1}{k}tg\frac{ka}{2}}$$

$$B^2=\frac{1}{\frac{a}{2}+\frac{1}{k'}\cos^2\frac{ka}{2}+\frac{1}{k}\sin\frac{ka}{2}\cos\frac{ka}{2}} \qquad (9)$$

又根据 $x=\frac{a}{2}$ 点上波函数及其一阶导数的连续条件，得能量量子化条件 $k'=ktg\frac{ka}{2}$。平均

力： $\overline{F}=V_0B^2\int_{a-\frac{\tau}{2}}^{a+\frac{\tau}{2}}\cos^2 kx\delta\left(x-\frac{a}{2}\right)dx=V_0B^2\cos^2\frac{ka}{2}$，代入 B 的结果，得：

$$=\frac{V_0}{\frac{a}{2}\sec^2\frac{ka}{2}+\frac{1}{k^{/}}+\frac{1}{k}tg\frac{ka}{2}}=\frac{V_0}{(\frac{a}{2}+\frac{1}{k^{/}})\quad(1+\frac{k^{/2}}{k^2})}$$

$$=\frac{E}{\frac{a}{2}+\frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0-E)}}}$$

这个结果同于（7）。

当$V_0\to\infty$时，亦得到$\overline{F}=\frac{2E}{a}$

对于$x=-\frac{a}{2}$的势垒壁上，由于对称性，力的平均值是相同的。