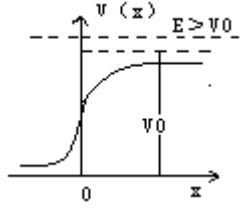


第三章： 一维定态问题

[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 $R + T = 1$ 。

(解) 任意的势垒是曲线形的，如果 $V(x)$ 没有给定，则 $\Psi(x)$ 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：



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

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

我们近似地认为当 $x \rightarrow \infty$ 时波函数的解是

$$\Psi(x) = Ce^{ik_2x} \left(k_2 = \sqrt{2m(E - V_0)} / \hbar \right)$$

$x \rightarrow -\infty$ 时波函数的解是

$$\Psi(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \left(k_1 = \sqrt{2mE} / \hbar \right)$$

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 $|J_A|$ 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:

$$\begin{aligned} \Psi(x) &= \frac{2}{\sqrt{a}} \sin \frac{\pi x}{a} \left(1 + \cos \frac{2\pi x}{a} \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{a}} \left\{ 2 \sin \frac{\pi x}{a} + 2 \sin \frac{\pi x}{a} \cos \frac{2\pi x}{a} \right\} \\ &= \frac{1}{\sqrt{a}} \left\{ 2 \sin \frac{\pi x}{a} + \sin \frac{3\pi x}{a} - \sin \frac{\pi x}{a} \right\} \\ &= \frac{1}{\sqrt{a}} \left\{ \sin \frac{\pi x}{a} + \sin \frac{3\pi x}{a} \right\} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a} + \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{3\pi x}{a} \\ &= C_1 \Psi_1(x) + C_2 \Psi_3(x) \end{aligned}$$

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：

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

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：

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

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

利用积分公式：

$$\left\{ \begin{array}{l} \int x \sin px dx = \frac{-x \cos px}{p} + \frac{\sin px}{p^2} \\ \int x^2 \sin px dx = \left(\frac{2}{p^2} - \frac{x^2}{p}\right) \cos px + \frac{2x}{p^2} \sin px \end{array} \right.$$

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

此式只有为奇数时才不为 0，故只有量子数奇数的态

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

仍是归一化的，故粒子具有能级：

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

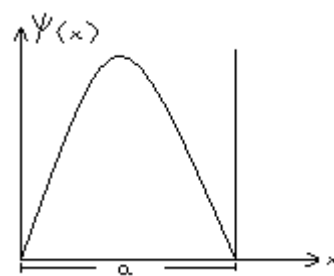
$$c_n^* c_n = \left(\frac{4\sqrt{60}}{\pi^2 n^2} \right)^2 = \frac{960}{\pi^6 n^6} \quad (5)$$

(2) 能量的平均值可以按照已知几率分布的公式计算:

$$\begin{aligned} \bar{E} &= \sum_n c_n^* c_n \cdot E_n = \sum_n \frac{960}{\pi^6 n^6} \cdot \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \\ &= \frac{960 \hbar^2}{2m \pi^4 a^2} \sum_n \frac{1}{n^4} \quad (\text{n 奇数}) \end{aligned} \quad (6)$$

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:

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



上式中令 $x=0$ 立刻得

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

代(6)式得 $\bar{E} = \frac{5\hbar^2}{ma^2}$

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:

$$\begin{aligned} \bar{E} &= \int_0^A \psi^* \hat{H} \psi dx = A^2 \int_0^a (ax - x^2) \cdot \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} (ax - x^2) \right) dx \\ &= -\frac{30}{a^5} \cdot \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^a 2(ax - x^2) dx = \frac{5\hbar^2}{ma^2} \end{aligned}$$

能够这样的原因是厄米算符.

(3) 能量的涨落指能量的不准度 $\delta E = \sqrt{\overline{E^2} - (\bar{E})^2}$ 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.

$$\begin{aligned} \overline{E^2} &= \sum_n c_n^* c_n E_n^2 = \sum_n \frac{960}{\pi^6 n^6} \cdot \frac{n^4 \pi^4 \hbar^4}{4m^2 a^4} \\ &= \frac{240 \hbar^4}{\pi^2 m^2 a^4} \sum_{n \text{ 奇}} \frac{1}{n^2} \end{aligned}$$

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

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 $l=1$,

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

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

[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

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

用于前一式:

$$\begin{aligned} \varphi_n(p) &= \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar a}} \cdot \frac{-\frac{ip}{\hbar} \sin \frac{n\pi x}{a} - \frac{n\pi}{a} \cos \frac{n\pi x}{a}}{\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 - \left(\frac{p}{\hbar}\right)^2} e^{ipx/\hbar} \Big|_0^a \\ &= \frac{2n\sqrt{a\pi\hbar^8}}{a^2 p^2 - n^2 \pi^2 \hbar^2} \left\{ \frac{-1 + (-1)^n e^{\frac{ipa}{\hbar}}}{2} \right\} \end{aligned}$$

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

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

动量几率密度分别是

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

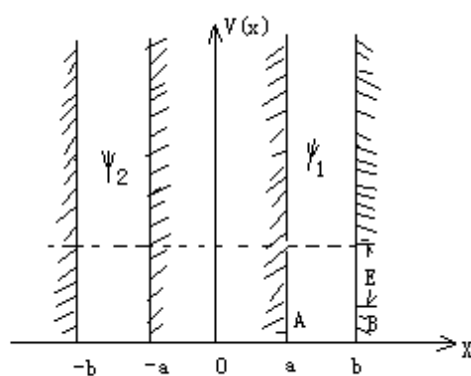
$$\frac{4n^2 a \pi \hbar^2}{(a^2 p^2 - n^2 \pi^2 \hbar^2)^2} \sin^2 \frac{pa}{2\hbar}, \quad (n \text{ 偶数})$$

#

[11]设粒子处在对称的双方势阱中

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

在 $V_0 \rightarrow \infty$ 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）本题的势场相对于原点 0 来说是对称的，因此波函数具有宇称。

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：

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

考虑 $x=a, x=b$ 二连续条件：（势阱外面 $\psi = 0$ ）

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

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：

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

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：

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

$$\psi_2(x) = -A \sin k(x+a)$$

同理令 $\psi_1(-x) = -\psi_3(x)$, 得到一组奇宇称解是

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

$\psi_1(x)$ 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 $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. 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.

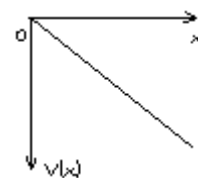
$$k_{n''} = \frac{n''\pi}{b-a}$$

因此能级是

$$E_{n''} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n''}{b-a} \right)^2 \quad \text{是二度简并的 (n'' prime, 正负均可)}$$

[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 $\hbar i \frac{\partial}{\partial p}$ ，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：

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

(2)

此式容易分离变量：

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

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

积分得：

$$\ln \varphi = \frac{p^2}{6m\hbar i F} - \frac{Ep}{\hbar i F} + \text{常数}$$

$$\phi_E = C e^{\frac{p^2}{6m\hbar i F} - \frac{Ep}{\hbar i F}}$$

(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 $p \rightarrow \pm\infty$ 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

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

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

因而

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

本题可参看 Davydov: Quantum Mechanics (1965)

[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

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

来得到结果, 因为本题的情形

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

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:

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

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

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

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

$$\begin{aligned} \int_{x=-\infty}^{\infty} e^{i(p'-p)x/\hbar} V(x) dx &= -V_0 \int_{x=-\infty}^{\infty} e^{i(p'-p)x/\hbar} \delta(x) dx \\ &= -V_0 e^{i(p'-p) \cdot 0/\hbar} = -V_0 \end{aligned}$$

不能把势能通过傅立叶变换，变成动量空间的势能算符：

~~$$\begin{aligned} \int_{x=-\infty}^{\infty} e^{ipx} V(x) dx &= -V_0 \int_{x=-\infty}^{\infty} e^{ipx} \delta(x) dx \\ &= -V_0 e^{ip \cdot 0} = -V_0 \end{aligned}$$~~

前式中扩号左方的积分 $= -\frac{V_0}{2\pi\hbar} \int_{p'=-\infty}^{\infty} \varphi(p') dp' = \text{常数} A$

(4)

动量表象的薛氏方程式成为： $\frac{p^2}{2m} \phi(p) + A = E \phi(p)$

(5)

不需积分就得到动量表象的波函数： $\varphi(p) = \frac{2mA}{2mE - p^2}$

(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:

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

(6)

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:

$$\begin{aligned} \frac{mV_0}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2mE' + p^2} &= \frac{mV_0}{\pi\hbar} \cdot \frac{1}{\sqrt{2mE'}} \cdot \left. \operatorname{tg}^{-1} \frac{p}{\sqrt{2mE'}} \right|_{p=-\infty}^{p=\infty} \\ &= \frac{m}{\sqrt{2E'}} \cdot \frac{V_0}{\pi\hbar} \cdot \pi = 1 \end{aligned}$$

即 $E' = \frac{mV_0^2}{2\hbar^2}, E = -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}$ (7)

常数 A 可以将波函数 (5) 通过归一化计算来定

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

(8)

利用不定积分公式

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

从 (8) 式求得:

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

(9)

[18] 设粒子在一维无限高势垒中运动，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 $-\frac{\partial}{\partial x} V(x)$ 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)

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

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

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 $(-\frac{a}{2})$ $(\frac{a}{2})$ 处受力，该两点的力为无限大：

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

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

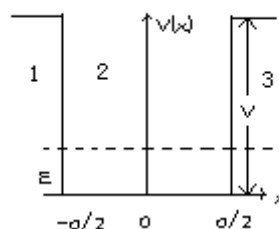
$$\int_{\frac{a}{2}-\tau}^{\frac{a}{2}+\tau} F dx = \int_{\frac{a}{2}-\tau}^{\frac{a}{2}+\tau} -\frac{\partial V}{\partial x} dx = -V_0$$

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

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

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

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



$$\bar{F} = \int_{x=\frac{a}{2}-\tau}^{\frac{a}{2}+\tau} \Psi^*(x) V_0 \delta(x - \frac{a}{2}) \Psi(x) dx \quad (2)$$

这里 $\Psi(x)$ 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

$$\text{设 } k = \sqrt{2mE} / \hbar \quad k' = \sqrt{2m(V_0 - E)} / \hbar$$

并注意 $\Psi(x)$ 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：

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

$$\text{得 } A^2 = \frac{e^{k'a}}{\frac{a}{2} \csc^2 \frac{ka}{2} + \frac{1}{k'} - \frac{1}{k} \cotg \frac{ka}{2}}$$

$$B^2 = \frac{1}{\frac{a}{2} + \frac{1}{k'} \sin^2 \frac{ka}{2} - \frac{1}{k} \sin \frac{ka}{2} \cos \frac{ka}{2}} \quad (4)$$

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：

$$\begin{aligned}\bar{F} &= V_0 B^2 \int_{\frac{a}{2}-\tau}^{\frac{a}{2}+\tau} \sin^2 kx \cdot \delta\left(x - \frac{a}{2}\right) dx = V_0 B^2 \sin^2 \frac{ka}{2} \\ &= \frac{V_0}{\frac{a}{2} \csc^2 \frac{ka}{2} + \frac{1}{k'} - \frac{1}{k} \cotg \frac{ka}{2}}\end{aligned}$$

(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：

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

在 $x = \frac{a}{2}$ 处的波函数连续条件：

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

归一化条件：

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

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

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

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 $k' = k \tg \frac{ka}{2}$ 。平均

力： $\bar{F} = V_0 B^2 \int_{\frac{a}{2}-\tau}^{\frac{a}{2}+\tau} \cos^2 kx \delta\left(x - \frac{a}{2}\right) dx = V_0 B^2 \cos^2 \frac{ka}{2}$ ，代入 B 的结果，得：

$$\begin{aligned}
&= \frac{V_0}{\frac{a}{2} \sec^2 \frac{ka}{2} + \frac{1}{k'} + \frac{1}{k} \operatorname{tg} \frac{ka}{2}} = \frac{V_0}{\left(\frac{a}{2} + \frac{1}{k'}\right) \left(1 + \frac{k'^2}{k^2}\right)} \\
&= \frac{E}{\frac{a}{2} + \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}}
\end{aligned}$$

这个结果同于 (7)。

$$\text{当 } V_0 \rightarrow \infty \text{ 时, 亦得到 } \bar{F} = \frac{2E}{a}$$

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。
