

第2章 一维运动

One-dimensional Motion

【内容提要】

1. 一维无限深方势阱
$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a \\ \infty, & x \leq 0 \text{ 或 } x \geq a \end{cases}$$

本征值
$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2\mu a^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

本征函数
$$\psi_n = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}, & 0 < x < a \\ 0, & x \leq 0 \text{ 或 } x \geq a \end{cases}$$

若
$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| < a \\ \infty, & |x| \geq a \end{cases}$$

则本征值
$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8\mu a^2}$$

本征函数

$$\psi_n = \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{a}} \sin \frac{n\pi x}{2a}, & n \text{ 为偶数}, \quad |x| < a \\ 0, & |x| \geq a \end{cases}$$

$$\psi_n = \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{a}} \cos \frac{n\pi x}{2a}, & n \text{ 为奇数}, \quad |x| < a \\ 0, & |x| \geq a \end{cases}$$

2. 三维无限深方势阱

$$V = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, 0 < y < b, 0 < z < c \\ \infty, & \text{其余} \end{cases}$$

本征值

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu} \left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \right), \quad n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \dots$$

本征函数

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(\vec{r}) = \begin{cases} \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin \frac{n_1 \pi x}{a} \sin \frac{n_2 \pi y}{b} \sin \frac{n_3 \pi z}{c}, & \text{阱内} \\ 0, & \text{阱外} \end{cases}$$

3. 一维谐振子

$$V = \frac{1}{2} \mu \omega^2 x^2$$

本征值

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

本征函数

$$\psi_n = N_n e^{-\alpha^2 x^2 / 2} H_n(\alpha x)$$

$$N_n = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!}}, \quad \alpha = \sqrt{\frac{\mu \omega}{\hbar}}$$

$$x \psi_n = \frac{1}{\alpha} \left[\sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1} \right]$$

$$\frac{d}{dx} \psi_n = \alpha \left[\sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1} - \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1} \right]$$

宇称

$$\psi_n(-x) = (-1)^n \psi_n(x)$$

4. 势垒贯穿

方形势垒

$$V = \begin{cases} V_0, & 0 < x < a \\ 0, & x \leq 0 \text{ 或 } x \geq a \end{cases}$$

当 $\frac{a}{\hbar} \sqrt{2\mu(V_0 - E)} \gg 1$ 时, 透射系数为

$$T = T_0 \exp\left[-\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2\mu(V_0 - E)}\right], \quad T_0 = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2}$$

任意形状的势垒 $V(x)$, 透射系数为

$$T = T_0 \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2\mu(V(x) - E)} dx\right]$$

5. 一维有限深方势阱

6. δ 势 $V(x) = \pm\gamma \delta(x) \quad (\gamma > 0)$

跃变条件 $\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = \pm \frac{2\mu\gamma}{\hbar^2} \psi(0)$

7. 束缚态、非束缚态及其能级特点

8. 简并、简并度

【典型习题解答】

2.1 束缚态、非束缚态及相应能级的特点。

答：束缚态：粒子在一定范围内运动， $|\vec{r}| \rightarrow \infty$ 时， $\psi \rightarrow 0$ 。能级分立。

非束缚态：粒子的运动范围没有限制， $|\vec{r}| \rightarrow \infty$ 时， ψ 不趋于 0。能级连续分布。

2.2 能级简并、简并度。

答：量子力学中，把处于不同状态、具有相同能量、对应同一能级的现象称为能级简并。把对应于同一能级的不同状态数称为简并度。

2.3 对于阶梯形方势场

$$V(x) = \begin{cases} V_1, & x < a \\ V_2, & x > a \end{cases}$$

如果 $(V_2 - V_1)$ 有限, 则定态波函数 $\psi(x)$ 连续否? 其一阶导数 $\psi'(x)$ 连续否?

答: 定态波函数 $\psi(x)$ 连续; 其一阶导数 $\psi'(x)$ 也连续。

2.4 一质量为 μ 的粒子在一维无限深方势阱

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < 2a \\ \infty, & x < 0, \quad x > 2a \end{cases}$$

中运动，写出其状态波函数和能级表达式。

解：

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{a}} \sin \frac{n\pi x}{2a}, & 0 < x < 2a, \\ 0, & x \leq 0, x \geq 2a \end{cases}$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{8\mu a^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

2.5 一维运动粒子的状态是

$$\psi(x) = \begin{cases} Ax e^{-\lambda x}, & x \geq 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases},$$

求：

- ① 归一化常数 A ；
- ② 粒子动量的几率分布；
- ③ 粒子动量平均值。

解：① 由
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \psi(x) dx = |A|^2 \int_0^{\infty} x^2 e^{-2\lambda x} dx = \frac{2|A|^2}{(2\lambda)^3} = 1$$

可取归一化常数

$$A = 2\lambda^{3/2}$$

$$\begin{aligned}
 \textcircled{2} \quad \varphi(p) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_0^\infty A x e^{-\lambda x} \cdot e^{-ipx/\hbar} dx = \frac{A}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_0^\infty x e^{-(\lambda + \frac{i}{\hbar}p)x} dx \\
 &= \frac{A}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \cdot \frac{1}{(\lambda + ip/\hbar)^2} = \frac{2\lambda^{3/2}}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \cdot \frac{1}{(\lambda + ip/\hbar)^2}
 \end{aligned}$$

粒子动量的几率分布

$$w(p) = |\varphi(p)|^2 = \frac{2\lambda^3\hbar^3}{\pi(\lambda^2\hbar^2 + p^2)^2}$$

③ 粒子动量平均值可用下面两种方法求得：

$$\begin{aligned} 1) \quad \bar{p} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \hat{p} \psi(x) dx = -i\hbar \int_0^{\infty} A^2 x e^{-\lambda x} \frac{\partial}{\partial x} (x e^{-\lambda x}) dx \\ &= -i\hbar A^2 \int_0^{\infty} x e^{-\lambda x} (1 - \lambda x) e^{-\lambda x} dx = -i\hbar A^2 \left(\frac{1}{4\lambda^2} - \lambda \cdot \frac{2}{8\lambda^3} \right) = 0 \end{aligned}$$

$$2) \quad \bar{p} = \int_{-\infty}^{+\infty} p w(p) dp = \frac{2\lambda^3 \hbar^3}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{p dp}{(\lambda^2 \hbar^2 + p^2)^2} = 0$$

(因为被积函数为奇函数)

2.6 在一维势箱问题求解中, 假定在箱内 $V(x) = C \neq 0$ (C 为常数), 是否对其解产生影响? 怎样影响?

解: 当 $V(x) = C \neq 0$ 时, 一维势箱中的粒子的 S.eq 为

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + C\psi(x) = E\psi(x)$$

即

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = (E - C)\psi(x)$$

或

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = E'\psi(x)$$

其中

$$E' = E - C$$

边界条件不变，因此 S.eq 的解为

$$E'_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

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

即 $V(x) = C \neq 0$ 不影响波函数，能级整体改变 C ：

$$E_n = E'_n + C = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} + C$$

2.7 重 1g 的小球在长 1cm 的盒内，试计算当它的能量等于在 300K 下的 kT 时其量子数 n 。这一结果说明了什么？ k 和 T 分别为玻尔兹曼常数和热力学温度。 $k = 1.3807 \times 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$, $\hbar = 1.055 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$

解：由一维势箱粒子的能级公式

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

得

$$n = \frac{\sqrt{2mE_n}}{\pi \hbar} a = \frac{\sqrt{2mkT}}{\pi \hbar} a$$

$$= \frac{\sqrt{2 \times 10^{-3} \times 300 \times 1.3807 \times 10^{-23}}}{3.14 \times 1.055 \times 10^{-34}} \times 10^{-2} = 8.7 \times 10^{21}$$

量子数 n 很大，说明量子化效应不明显。

2.8 设粒子处在二维无限深势阱中，

$$V(x, y) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, \quad 0 < y < b \\ \infty, & \text{其余区域} \end{cases}$$

求粒子的能量本征值和本征波函数。如 $a = b$ ，能级的简并度如何？

解：定态 S.e.g 为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x, y) \right] \psi(x, y) = E \psi(x, y) \quad (1)$$

阱内， $V(x, y) = 0$ ，式 (1) 化为

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, y) = E \psi(x, y) \quad (2)$$

采用分离变量法求解。令

$$\psi(x, y) = X(x)Y(y) \quad (3)$$

代入式 (2)，整理后得

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 X}{dx^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 Y}{dy^2} = E X(x) Y(y) \quad (4)$$

左边第一项只含变量 x ，第二项只含变量 y ， E 为与 x 、 y 均无关的常量。欲使此等式对给定区域中任意 x 、 y 都成立，则要求等号左边的每一项都是常量。设第一项为 E_1 ，则有

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 X}{dx^2} = E_1 X(x) \quad (5)$$

利用边条件 $X(0) = 0, X(a) = 0$ ，得归一化解

$$X_{n_1}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n_1 \pi x}{a} \quad (6)$$

$$E_{1n_1} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \frac{n_1^2}{a^2}, \quad n_1 = 1, 2, 3, \dots$$

同理可求得

$$Y_{n_2}(y) = \sqrt{\frac{2}{b}} \sin \frac{n_2 \pi y}{b} \quad (7)$$

$$E_{2n_2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \frac{n_2^2}{b^2}, \quad n_2 = 1, 2, 3, \dots$$

据此可得能量的本征值和本征函数为

$$E_{n_1 n_2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} \right)$$

$$\psi_{n_1 n_2} = \begin{cases} \frac{2}{\sqrt{ab}} \sin \frac{\pi n_1 x}{a} \sin \frac{\pi n_2 y}{b}, & 0 < x < a, 0 < y < b \\ 0, & \text{其它区域} \end{cases}$$

$$n_1, n_2 = 1, 2, 3, \dots$$

若 $a = b$ ，则

$$E_{n_1 n_2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n_1^2 + n_2^2) \quad \psi_{n_1 n_2} = \frac{2}{a} \sin \frac{\pi n_1 x}{a} \sin \frac{\pi n_2 y}{a}$$

这时，若 $n_1 = n_2$ ，则能级不简并；若 $n_1 \neq n_2$ ，则能级一般是二度简并的

（有偶然简并情况，如 $n_1 = 10, n_2 = 5$ 与 $n'_1 = 11, n'_2 = 2$ ）。总之，这时能级

简并度为满足 $n_1^2 + n_2^2 = \frac{2ma^2 E}{\hbar^2 \pi^2}$ 条件的正整数解 (n_1, n_2) 的个数。

2.9 设粒子限制在长方体形状的匣子中运动, 即

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, 0 < y < b, 0 < z < c; \\ \infty, & \text{其余区域。} \end{cases}$$

求粒子的能量本征值和本征波函数。如 $a = b = c$, 讨论能级的简并度。

解: 与题 2.8 相仿, 能量本征值和本征波函数为

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \right),$$

$$\psi_{n_1 n_2 n_3} = \begin{cases} \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin \frac{\pi n_1 x}{a} \sin \frac{\pi n_2 y}{b} \sin \frac{\pi n_3 z}{c}, & 0 < x < a, 0 < y < b, 0 < z < c; \\ 0, & \text{其余区域} \end{cases}$$

$n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3, \dots$

当 $a = b = c$ 时,

$$E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$$

$$\psi_{n_1 n_2 n_3} = \left(\frac{2}{a}\right)^{3/2} \sin \frac{\pi n_1 x}{a} \sin \frac{\pi n_2 y}{a} \sin \frac{\pi n_3 y}{a}$$

$n_1 = n_2 = n_3$ 时，能级不简并。

n_1, n_2, n_3 三者中有二者相等而与第三者不相等时，能级一般为三重简并的。

n_1, n_2, n_3 三者皆不相等时，能级一般为 6 度简并的。

还有偶然简并情况，如 $(n_1, n_2, n_3) = (5, 6, 8) \rightarrow (3, 4, 10)$ ；

$(10, 12, 16) \rightarrow (6, 8, 20)$ ； $(1, 7, 9) \rightarrow (1, 3, 11)$ ； $(1, 5, 10) \rightarrow (3, 6, 9)$ ，等等。因为

$5^2 + 6^2 + 8^2 = 3^2 + 4^2 + 10^2$ ； $10^2 + 12^2 + 16^2 = 6^2 + 8^2 + 20^2$ ，等等。总之，

这时能级简并度为满足 $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = \frac{2ma^2E}{\hbar^2\pi^2}$ 条件的正整数解 (n_1, n_2, n_3)

的个数。

2.10 一电子局限在 10^{-14} 米的区域中运动。已知电子质量 $m = 9.11 \times 10^{-31}$ 千克，试计算该电子的基态能量（提示：可按长、宽、高均为 10^{-14} 米的三维无限深势阱计算）。

解：在三维无限深势阱中运动的电子的能量为：

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right)$$

依题意， $a = b = c = 10^{-14} \text{ m}$ ， $m = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$ ，基态 $n_x = n_y = n_z = 1$ ，基态能量

$$E_{111} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \cdot \frac{3}{a^2} = 1.8 \times 10^{-8} \text{ J}$$

2.11 求下列波函数的归一化常数 A ：

$$\textcircled{1} \quad \psi_n(x) = \begin{cases} A \sin \frac{n\pi}{2a}(x+a), & |x| < a \\ 0, & |x| \geq a \end{cases}$$

$$\textcircled{2} \quad \psi(x) = A \exp(-\alpha^2 x^2 / 2). \quad (\text{积分公式: } \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi})$$

解：①

$$\begin{aligned} \int_{-a}^a |\psi_n(x)|^2 dx &= \int_{-a}^a |A|^2 \sin^2 \frac{n\pi}{2a}(x+a) dx = 2|A|^2 \int_0^a \frac{1}{2} \left(1 - \cos \frac{n\pi(x+a)}{a} \right) dx \\ &= |A|^2 \left[x - \frac{a}{n\pi} \sin \frac{n\pi(x+a)}{a} \right]_0^a = |A|^2 a = 1 \end{aligned}$$

可取

$$A = \sqrt{\frac{1}{a}}$$

②

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |A|^2 e^{-\alpha^2 x^2} dx = \frac{|A|^2}{\alpha} \cdot \sqrt{\pi} = 1$$

可取

$$A = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}$$

2.12 设粒子处在一维无限深方势阱

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

中, 证明处于定态 $\psi_n(x)$ 的粒子,

$$\bar{x} = \frac{a}{2}, \quad \overline{(x - \bar{x})^2} = \frac{a^2}{12} \left(1 - \frac{6}{n^2 \pi^2} \right)$$

讨论 $n \rightarrow \infty$ 的情况, 并与经典力学计算结果相比较。

证: 设粒子处于第 n 个本征态, 其本征函数

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}, & 0 < x < a \\ 0, & x < 0, x > a \end{cases}$$

$$\begin{aligned}\bar{x} &= \int_0^a x |\psi_n|^2 dx = \frac{2}{a} \int_0^a x \sin^2 \frac{n\pi x}{a} dx \\ &= \frac{2}{a} \int_0^a \frac{x}{2} \left(1 - \cos \frac{2n\pi x}{a} \right) dx = \frac{a}{2}\end{aligned}\quad (1)$$

$$\begin{aligned}\overline{(x - \bar{x})^2} &= \overline{x^2} - \bar{x}^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\psi_n|^2 dx - \frac{a^2}{4} \\ &= \frac{2}{a} \int_0^a x^2 \cdot \frac{1}{2} \left(1 - \cos \frac{2n\pi x}{a} \right) dx - \frac{a^2}{4} \\ &= \frac{a^2}{12} \left(1 - \frac{6}{n^2 \pi^2} \right)\end{aligned}\quad (2)$$

在经典情况下，在 $(0, a)$ 区间粒子除与阱壁碰撞（设碰撞时间不计，且为弹性碰撞，即粒子碰撞后仅运动方向改变，但动能、速度不变）外，来回作匀速运动，因此粒子处于 $x \rightarrow x + dx$ 范围的几率为 $\frac{dx}{a}$ ，故

$$\bar{x} = \int_0^a x \cdot \frac{dx}{a} = \frac{a}{2}, \quad (3)$$

$$\overline{x^2} = \int_0^a x^2 \cdot \frac{dx}{a} = \frac{a^2}{3},$$

$$\overline{(x - \bar{x})^2} = \overline{x^2} - \bar{x}^2 = \frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{4} = \frac{a^2}{12}. \quad (4)$$

当 $n \rightarrow \infty$ 时，式 (2) 趋于式 (4) 的结果，即量子力学与经典力学的结果趋于一致。

2.13 已知局限在 $x = 0$ 到 a 范围内运动的粒子的归一化波函数为

$$\psi_n = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}, & 0 < x < a \\ 0, & x \leq 0 \text{ 或 } x \geq a \end{cases}$$

计算其动量和动能平均值。

解：动量算符为

$$p = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

动能算符为

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$$

动量的平均值为

$$\bar{p} = -i\hbar \int_0^a \psi_n^*(x) \frac{d}{dx} \psi_n(x) dx$$

$$= -i \frac{2\hbar}{a} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \frac{d}{dx} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx$$

$$= -i \frac{2\hbar}{a} \left(\frac{n\pi}{a}\right) \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = 0$$

动能的平均值为

$$\bar{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^a \psi_n^*(x) \frac{d^2}{dx^2} \psi_n(x) dx$$

$$= -\frac{\hbar^2}{ma} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \frac{d^2}{dx^2} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx$$

$$= \frac{\hbar^2}{ma} \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

2.14 上题中的波函数是否动量的本征函数？是否动能的本征函数？如果是，本征值是多少？

解：①
$$p\psi_n(x) = -i\hbar \frac{d}{dx} \psi_n(x)$$
$$= -i\hbar \frac{d}{dx} \left[\sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \right] = -i\hbar \sqrt{\frac{2}{a}} \left(\frac{n\pi}{a}\right) \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

所以 $\psi_n(x)$ 不是动量的本征函数

②
$$T\psi_n(x) = \frac{p^2}{2m} \psi_n(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \left[\sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \right]$$
$$= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \psi_n(x)$$

所以 $\psi_n(x)$ 是动能的本征函数，本征值为 $\frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$ 。

2.15 设粒子处在一维无限深方势阱中，

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| < a/2 \\ \infty, & |x| > a/2 \end{cases}$$

处于基态 ($n=1$)，求粒子的动量分布。

解：基态波函数为

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{\pi x}{a} \\ \varphi(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-a/2}^{a/2} e^{-\frac{ipx}{\hbar}} \cdot \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{\pi x}{a} dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar a}} \int_{-a/2}^{a/2} e^{-\frac{ipx}{\hbar}} \cdot \frac{1}{2} (e^{i\pi x/a} + e^{-i\pi x/a}) dx \\ &= \frac{1}{2\sqrt{\pi\hbar a}} \int_{-a/2}^{a/2} \left[e^{i\left(\frac{\pi}{a} - \frac{p}{\hbar}\right)x} + e^{-i\left(\frac{\pi}{a} + \frac{p}{\hbar}\right)x} \right] dx \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar a}} \left\{ \frac{1}{2i\left(\frac{\pi}{a} - \frac{p}{\hbar}\right)} \cdot \left[e^{i\left(\frac{\pi-p}{a-\hbar}\right)\frac{a}{2}} - e^{-i\left(\frac{\pi-p}{a-\hbar}\right)\frac{a}{2}} \right] \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{-2i\left(\frac{\pi}{a} + \frac{p}{\hbar}\right)} \cdot \left[e^{-i\left(\frac{\pi+p}{a+\hbar}\right)\frac{a}{2}} - e^{i\left(\frac{\pi+p}{a+\hbar}\right)\frac{a}{2}} \right] \right\} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar a}} \left\{ \frac{1}{\frac{\pi}{a} - \frac{p}{\hbar}} \cos \frac{pa}{2\hbar} + \frac{1}{\frac{\pi}{a} + \frac{p}{\hbar}} \cos \frac{pa}{2\hbar} \right\} \\
 &= \frac{2\sqrt{\pi a\hbar^3}}{\pi^2\hbar^2 - a^2p^2} \cos \frac{pa}{2\hbar}
 \end{aligned}$$

动量的几率分布

$$\rho(p) = |\varphi(p)|^2 = \frac{4\pi a\hbar^3}{(\pi^2\hbar^2 - a^2p^2)^2} \cos^2 \frac{pa}{2\hbar}$$

2.16 在动量表象中，写出线谐振子的哈密顿算符的矩阵元。

解：在坐标表象中，线谐振子的哈密顿算符为

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

在动量表象中，该哈密顿算符为

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \left(i\hbar \frac{d}{dp} \right)^2 = \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{2}m\omega^2 \hbar^2 \frac{d^2}{dp^2}$$

由于动量的本征函数为 $\delta(p-p')$ ，故哈密顿算符的矩阵元为

$$\begin{aligned} H_{p'p''} &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta(p-p') \left[\frac{p^2}{2m} - \frac{1}{2}m\omega^2 \hbar^2 \frac{d^2}{dp^2} \right] \delta(p-p'') dp \\ &= \left[\frac{p'^2}{2m} - \frac{1}{2}m\omega^2 \hbar^2 \frac{d^2}{dp'^2} \right] \delta(p'-p'') \end{aligned}$$

2.17 利用 Hermite 多项式的递推关系, 证明谐振子波函数满足下列关系

$$x\psi_n(x) = \frac{1}{\alpha} \left[\sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1}(x) + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}(x) \right]$$

$$x^2\psi_n(x) = \frac{1}{2\alpha^2} \left[\sqrt{n(n-1)} \psi_{n-2}(x) + (2n+1) \psi_n(x) + \sqrt{(n+1)(n+2)} \psi_{n+2}(x) \right]$$

并由此证明, 在 ψ_n 态下, $\bar{x} = 0$, $\bar{V} = E_n/2$ 。

证: 谐振子波函

$$\psi_n(x) = A_n e^{-\alpha^2 x^2/2} H_n(\alpha x) \quad (1)$$

其中, 归一化常数

$$A_n = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} \cdot 2^n \cdot n!}}, \quad \alpha = \sqrt{m\omega/\hbar} \quad (2)$$

$H_n(\alpha x)$ 的递推关系为

$$H_{n+1}(\alpha x) - 2\alpha x H_n(\alpha x) + 2n H_{n-1}(\alpha x) = 0 \quad (3)$$

$$\begin{aligned} x\psi_n(x) &= A_n e^{-\alpha^2 x^2/2} \cdot x H_n(\alpha x) = \frac{1}{2\alpha} A_n e^{-\alpha^2 x^2/2} \cdot 2\alpha x H_n(\alpha x) \\ &= \frac{1}{2\alpha} A_n e^{-\alpha^2 x^2/2} [H_{n+1}(\alpha x) + 2n H_{n-1}(\alpha x)] \\ &= \frac{1}{\alpha} \cdot \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} \cdot 2^n \cdot n!}} \cdot e^{-\alpha^2 x^2/2} \cdot n H_{n-1}(\alpha x) \\ &\quad + \frac{1}{2\alpha} \cdot \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} \cdot 2^n \cdot n!}} \cdot e^{-\alpha^2 x^2/2} \cdot H_{n+1}(\alpha x) \\ &= \frac{1}{\alpha} \cdot \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} \cdot 2^{n-1} \cdot (n-1)!}} \cdot \sqrt{\frac{n}{2}} \cdot e^{-\alpha^2 x^2/2} \cdot H_{n-1}(\alpha x) \\ &\quad + \frac{1}{\alpha} \cdot \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} \cdot 2^{n+1} \cdot (n+1)!}} \cdot \sqrt{\frac{n+1}{2}} \cdot e^{-\alpha^2 x^2/2} \cdot H_{n+1}(\alpha x) \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{\alpha} \left[\sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1}(x) + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}(x) \right]$$

$$\begin{aligned} x^2 \psi_n(x) &= \frac{1}{\alpha} \left[\sqrt{\frac{n}{2}} x \psi_{n-1}(x) + \sqrt{\frac{n+1}{2}} x \psi_{n+1}(x) \right] \\ &= \frac{1}{\alpha^2} \left\{ \sqrt{\frac{n}{2}} \left[\sqrt{\frac{n-1}{2}} \psi_{n-2}(x) + \sqrt{\frac{n}{2}} \psi_n(x) \right] + \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \left[\sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_n(x) + \sqrt{\frac{n+2}{2}} \psi_{n+2}(x) \right] \right\} \\ &= \frac{1}{2\alpha^2} \left[\sqrt{n(n-1)} \psi_{n-2}(x) + (2n+1) \psi_n(x) + \sqrt{(n+1)(n+2)} \psi_{n+2}(x) \right] \end{aligned}$$

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* x \psi_n dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x) \cdot \frac{1}{\alpha} \left[\sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1}(x) + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}(x) \right] dx = 0$$

$$\begin{aligned}
 \bar{V} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x) \cdot \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \cdot \psi_n(x) dx \\
 &= \int \psi_n^*(x) \cdot \frac{1}{2} m \omega^2 \cdot \frac{1}{2 \alpha^2} \cdot (2n+1) \psi_n(x) dx \\
 &= \frac{1}{2} m \omega^2 \cdot \frac{1}{2 \alpha^2} \cdot (2n+1) = \frac{1}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega = E_n / 2
 \end{aligned}$$

2.18 利用 Hermite 多项式的求导公式证明

$$\frac{d}{dx} \psi_n(x) = \alpha \left[\sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1}(x) - \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}(x) \right]$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_n(x) = \frac{\alpha^2}{2} \left[\sqrt{n(n-1)} \psi_{n-2}(x) - (2n+1) \psi_n(x) + \sqrt{(n+1)(n+2)} \psi_{n+2}(x) \right]$$

证：Hermite 多项式的求导公式为：

$$H'_n(\xi) = 2nH_{n-1}(\xi)$$

$$\frac{dH_n(\alpha x)}{dx} = 2n\alpha H_{n-1}(\alpha x)$$

$$\frac{d}{dx} \psi_n(x) = A_n \cdot \left[(-\alpha^2 x) e^{-\alpha^2 x^2/2} H_n(\alpha x) + e^{-\alpha^2 x^2/2} \cdot 2n\alpha H_{n-1}(\alpha x) \right]$$

$$= -\alpha^2 x \psi_n(x) + \sqrt{2n\alpha} \psi_{n-1}(x)$$

$$= -\alpha \left[\sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1}(x) + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}(x) \right] + \alpha \cdot \sqrt{2n} \psi_{n-1}(x)$$

$$= \alpha \left[\sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1}(x) - \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}(x) \right]$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^2} \psi_n(x) &= \alpha \left\{ \sqrt{\frac{n}{2}} \cdot \alpha \left[\sqrt{\frac{n-1}{2}} \psi_{n-2} - \sqrt{\frac{n}{2}} \psi_n \right] \right. \\ &\quad \left. - \sqrt{\frac{n+1}{2}} \cdot \alpha \left[\sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_n - \sqrt{\frac{n+2}{2}} \psi_{n+2} \right] \right\} \\ &= \frac{\alpha^2}{2} \left[\sqrt{n(n-1)} \psi_{n-2} - (2n+1) \psi_n + \sqrt{(n+1)(n+2)} \psi_{n+2} \right] \end{aligned}$$

$$\bar{p} = \int \psi_n^* \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi_n dx = (-i\hbar) \int \psi_n^* \cdot \alpha \left[\sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1} - \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1} \right] dx = 0$$

$$\overline{T} = \frac{\overline{p^2}}{2m} = \int \psi_n^* \cdot \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) \psi_n dx$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \int \psi_n^* \cdot \frac{\alpha^2}{2} \left[\sqrt{n(n-1)} \psi_{n-2} - (2n+1) \psi_n + \sqrt{(n+1)(n+2)} \psi_{n+2} \right] dx$$

$$= -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{4m} \cdot (2n+1) \int \psi_n^* \psi_n dx = \frac{\hbar^2}{4m} \cdot \frac{m\omega}{\hbar} (2n+1) = \frac{1}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega = \frac{E_n}{2}$$

2.19 谐振子处于 ψ_n 态下, 计算

$$\Delta x = \left[\overline{(x - \bar{x})^2} \right]^{1/2}, \quad \Delta p = \left[\overline{(p - \bar{p})^2} \right]^{1/2}, \quad \Delta x \cdot \Delta p = ?$$

解: 由题 2.17,

$$\bar{x} = 0, \quad \overline{x^2} = \frac{2\bar{V}}{m\omega^2} = \frac{E_n}{m\omega^2} = \frac{\left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar}{m\omega}$$

由题 2.18,

$$\bar{p} = 0, \quad \overline{p^2} = 2m\bar{T} = mE_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)m\hbar\omega$$

$$\Delta x = \left[\overline{(x - \bar{x})^2} \right]^{1/2} = \left(\overline{x^2} - \bar{x}^2 \right)^{1/2} = \left[\left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar}{m\omega} \right]^{1/2}$$

$$\Delta p = \left[\overline{(p - \bar{p})^2} \right]^{1/2} = \left(\overline{p^2} - \bar{p}^2 \right)^{1/2} = \left[\left(n + \frac{1}{2} \right) m\hbar\omega \right]^{1/2}$$

$$\Delta x \cdot \Delta p = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar$$

对于基态, $n = 0$, $\Delta x \cdot \Delta p = \hbar/2$, 刚好是不确定关系所规定的下限。

2.20 荷电 q 的谐振子，受到外电场 ε 的作用，

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - q\varepsilon x \quad (1)$$

求能量本征值和本征函数。

解：

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - q\varepsilon x = H_0 - q\varepsilon x \quad (2)$$

H_0 的本征函数为

$$\psi_n = A_n e^{-\alpha^2 x^2/2} H_n(\alpha x)$$

本征值

$$E_n^{(0)} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

现将 H 的本征值记为 E_n ，本征函数记为 $\varphi_n(x)$ 。

式(1)的势能项可以写成

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2[(x-x_0)^2 - x_0^2]$$

其中

$$x_0 = q\varepsilon/m\omega^2 \quad (3)$$

如作坐标平移, 令

$$x' = x - x_0 \quad (4)$$

由于

$$p = -i\hbar \frac{d}{dx} = -i\hbar \frac{d}{dx'} = p' \quad (5)$$

H 可表成

$$H = \frac{p'^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x'^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 x_0^2 \quad (6)$$

式(6)中的 H 与式(2)中的 H_0 相比较, 易见 H 和 H_0 的差别在于变量由 x 换成 x' , 并添加了常数项 $\left(-\frac{1}{2}m\omega^2x_0^2\right)$, 由此可知

$$E_n = E_n^{(0)} - \frac{1}{2}m\omega^2x_0^2 \quad (7)$$

$$\varphi_n(x) = \psi_n(x') = \psi_n(x - x_0) \quad (8)$$

即

$$\begin{aligned} E_n &= \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{1}{2}m\omega^2 \cdot \left(\frac{q\varepsilon}{m\omega^2}\right)^2 \\ &= \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{q^2\varepsilon^2}{2m\omega^2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (9)$$

$$\varphi_n(x) = A_n e^{-\frac{1}{2}\alpha^2\left(x - \frac{q\varepsilon}{m\omega^2}\right)^2} H_n\left[\alpha\left(x - \frac{q\varepsilon}{m\omega^2}\right)\right] \quad (10)$$

其中

$$A_n = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} \cdot 2^n \cdot n!}}, \quad \alpha = \sqrt{m\omega/\hbar} \quad (11)$$

2.21 在时间 $t = 0$ 时，一个线性谐振子处于用下列归一化的波函数所描写的状态：

$$\psi(x, 0) = \sqrt{\frac{1}{5}}u_0(x) + \sqrt{\frac{1}{2}}u_2(x) + c_3u_3(x)$$

式中 $u_n(x)$ 是振子的第 n 个本征函数。

- ① 试求 c_3 的数值；
- ② 写出在 t 时刻的波函数；
- ③ 在 $t = 0$ 时振子能量的平均值是多少？ $t = 1$ 秒时呢？

解：① $\left(\sqrt{\frac{1}{5}}\right)^2 + \left(\sqrt{\frac{1}{2}}\right)^2 + c^2 = 1$ ，得 $c = \sqrt{\frac{3}{10}}$

$$\textcircled{2} \quad \psi(x,t) = \sqrt{\frac{1}{5}}u_0(x)e^{-i\frac{1}{2}\omega t} + \sqrt{\frac{1}{2}}u_2(x)e^{-i\frac{5}{2}\omega t} + \sqrt{\frac{3}{10}}u_3(x)e^{-i\frac{7}{2}\omega t}$$

③ 在 $t=0$ 时振子能量的平均值是

$$\bar{E} = \frac{1}{2}\hbar\omega \cdot \left(\sqrt{\frac{1}{5}}\right)^2 + \frac{5}{2}\hbar\omega \cdot \left(\sqrt{\frac{1}{2}}\right)^2 + \frac{7}{2}\hbar\omega \cdot \left(\sqrt{\frac{3}{10}}\right)^2 = \frac{12}{5}\hbar\omega$$

由于谐振子的 **Hamiltom** 量不显含时间，所以能量是守恒量，其平均值不随时间变化，因而 $t=1$ 秒时振子能量的平均值仍然是 $\frac{12}{5}\hbar\omega$

根据

$$\bar{E} = (\psi(x,t), H\psi(x,t))$$

及厄密算符的属于不同本征值的本征函数彼此正交，也可证明上述结论。

2.22 设粒子在下列势阱中运动,

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0, \\ \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, & x > 0. \end{cases}$$

求粒子能级。

解：既然粒子不能穿入 $x < 0$ 的区域，则对应的 S.eq 的本征函数必须在 $x = 0$ 处为零。另一方面，在 $x > 0$ 的区域，这些本征函数和谐振子的本征函数相同（因在这个区域，粒子的 H 和谐振子的 H 完全一样，粒子的波函数和谐振子的波函数满足同样的 S.eq）。振子的具有 $n = 2k + 1$ 的奇宇称波函数在 $x = 0$ 处为零，因而这些波函数是这一问题的解（ $n = 2k$ 的偶宇称波函数不满足边条件 $\psi(0) = 0$ ）。所以

$$E_k = (2k + 3/2)\hbar\omega, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

2.23 在质量为 m 的单原子组成的晶体中, 每个原子可看作在所有其他原子组成的球对称势场 $V(r) = \frac{1}{2}kr^2$ 中振动, 式中 $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$ 。

该模型称为三维各向同性谐振子模型, 请给出其能级的表达式。

解: 该振子的 **Hamiltonian** 算符为

$$\begin{aligned} H &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{2}k(x^2 + y^2 + z^2) \\ &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}kx^2 \right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2}ky^2 \right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2}kz^2 \right) \\ &= H_x + H_y + H_z \end{aligned}$$

即 H 为三个独立谐振子 **Hamiltonian** 算符之和。根据量子力学基本定律，该振子的能级为三个独立振子能级之和：

$$\begin{aligned} E_{n_x n_y n_z} &= \left(n_x + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega + \left(n_y + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega + \left(n_z + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \\ &= \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2} \right) \hbar \omega = \left(N + \frac{3}{2} \right) \hbar \omega \end{aligned}$$

$$N = n_x + n_y + n_z = 0, 1, 2, \dots$$

2.24 设粒子在下列势阱中运动，

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 \\ -\gamma \delta(x-a), & x > 0, \quad (\gamma, a > 0) \end{cases} \quad (1)$$

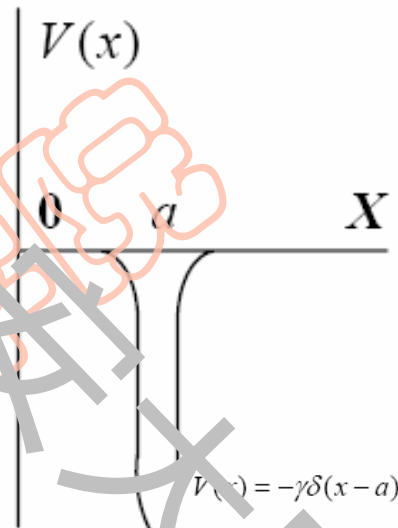
是否存在束缚定态？求存在束缚定态的条件及确定束缚能级的公式。

解：S.eq:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' - \gamma \delta(x-a) \psi = E \psi \quad (2)$$

对于束缚态， $E < 0$ ，令

$$\beta^2 = -2mE/\hbar^2 \quad (3)$$



则

$$\psi'' - \beta^2 \psi + \frac{2m\gamma}{\hbar^2} \delta(x-a)\psi = 0 \quad (4)$$

积分, $\int_{\alpha-\varepsilon}^{\alpha+\varepsilon} dx, \varepsilon \rightarrow 0^+$, 得 ψ' 的跃变条件

$$\psi'(a^+) - \psi'(a^-) = -\frac{2m\gamma}{\hbar^2} \psi(a) \quad (5)$$

在 $x \neq a$ 处, 式 (4) 化为

$$\psi'' - \beta^2 \psi = 0 \quad (6)$$

边条件 $\psi(0) = 0, \psi(\infty) = 0$ (束缚态), 因此

$$\psi(x) = \begin{cases} \sinh \beta x, & 0 \leq x < a \\ A e^{-\beta x}, & x > a \end{cases} \quad (7)$$

$x = a$ 点 $\psi(x)$ 连续及 $\psi'(x)$ 的跃变条件分别给出

$$\sinh \beta a = A e^{-\beta a} = \psi(a) \quad (8)$$

$$-\beta A e^{-\beta a} - \beta \cosh \beta a = -\frac{2m\gamma}{\hbar^2} \psi(a) \quad (9)$$

式 (9) $\times \left[-\frac{a}{\psi(a)} \right]$, 利用式 (8), 得

$$\beta a + \beta a \coth \beta a = \frac{2m\gamma a}{\hbar^2} \quad (10)$$

此式即为确定能级的公式。

下面分析至少存在一条束缚态能级的条件。

当势阱出现第一条能级时, $E \sim 0^-$, 所以 $\beta a \sim 0^+$ 。利用

$$\lim_{\beta a \rightarrow 0} \beta a \coth \beta a = \lim_{\beta a \rightarrow 0} \frac{\beta a}{\tanh \beta a} = 1$$

式 (10) 化为

$$\frac{2m\gamma a}{\hbar^2} = \beta a + \beta a \coth \beta a = 1 + 0^+$$

因此至少存在一条束缚态能级的条件为

$$\frac{2m\gamma a}{\hbar^2} \geq 1 \quad (11)$$

我们已经知道，纯 δ 势阱肯定存在唯一的束缚态能级。当一侧存在无限高势垒时，由于排斥作用（表现为 $\psi(x) \equiv 0$, 对 $x \leq 0$ ），束缚态存在与否是要受到影响的。纯 δ 势阱的特征长度为 $L = \hbar^2 / m\gamma$ ，条件 (11) 可改写成

$$a \geq L/2 \quad (12)$$

即要求无限高势垒离开 δ 势阱较远 ($a \geq L/2$), 才能保证 δ 势阱中束缚态能存在下去。

显然, 当 $a \rightarrow \infty$ (即 $a \gg L/2$), $\beta a \rightarrow \infty$ 时, 左侧无限高势垒的影响可完全忽略。此时 $\coth \beta a \rightarrow 1$, 式 (10) 给出

$$\beta = m\gamma / \hbar^2$$

即

$$E = -\hbar^2 \beta^2 / 2m = -m\gamma^2 / 2\hbar^2 \quad (13)$$

和孤立的 δ 势阱中束缚态能级完全相同。

令 $\beta a = \eta$, 式 (10) 化为

$$\eta(1 + \coth \eta) = 2m\gamma a / \hbar^2 \quad (14)$$

由于 $\eta(1 + \coth \eta) \geq 1$, 所以只当 $\frac{2m\gamma a}{\hbar^2} \geq 1$ 时, 式(10)或式(14)才有解。解出根 η 之后, 利用

$$\eta = \beta a = a\sqrt{-2mE}/\hbar$$

即可求出能级

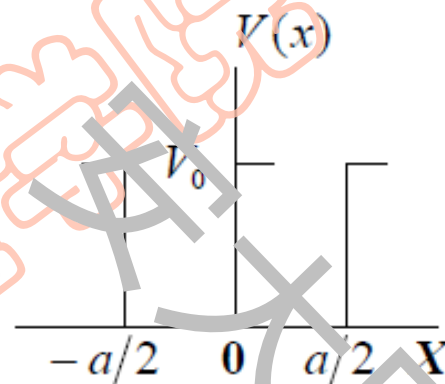
$$E = -\hbar^2 \eta^2 / 2ma^2 \quad (15)$$

2.25 粒子在深度为 V_0 ，宽度为 a 的直角势阱中运动，求：

① 阱口刚好出现一个束缚态能级（即 $E \approx V_0$ ）

的条件；

② 束缚态能级总数，并和无限深势阱作比较。



解：① $E < V_0$ 时为束缚态， $E > V_0$ 时为游离态。

定态 S.eq 为

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \psi = 0 \quad (1)$$

令

$$k = \sqrt{2mV_0}/\hbar, \quad \beta = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar \quad (2)$$

则式(1)可写成

$$\psi'' + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi = 0, \quad |x| \leq a/2 \text{ (阱内)} \quad (3)$$

$$\psi'' - \beta^2 \psi = 0, \quad |x| \geq a/2 \text{ (阱外)} \quad (4)$$

由于束缚态边条件 ($|x| \rightarrow \infty$ 处, $\psi \rightarrow 0$), 式(4)的解应取为

$$\psi(x) = C e^{-\beta|x|}, \quad |x| \geq a/2 \quad (5)$$

当阱口刚好出现束缚态能级时, $E \approx V_0$, $\beta \approx 0$ 。因此, 由(5)式得

$$\psi'(x) = \pm \beta C e^{-\beta|x|} \approx 0, \quad |x| \geq a/2 \quad (6)$$

阱内波函数由式(3)解出, 当 $E \approx V_0$ 时, 解为:

$$\left. \begin{array}{l} \text{偶宇称} \quad \psi(x) = \cos kx \\ \text{奇宇称} \quad \psi(x) = \sin kx \end{array} \right\} \quad |x| \leq a/2 \quad (7)$$

阱内、外 ψ 和 ψ' 应分别连续，而由式(6)可知， $x = a/2$ 处 $\psi' = 0$ ，将这一条件应用于式(7)，得

$$\text{偶宇称} \quad \sin \frac{ka}{2} = 0, \quad ka = 2\pi, 4\pi, 6\pi, \dots \quad (8a)$$

$$\text{奇宇称} \quad \cos \frac{ka}{2} = 0, \quad ka = \pi, 3\pi, 5\pi, \dots \quad (8b)$$

亦即阱口刚好出现束缚态能级的条件为

$$ka = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (9)$$

$$\text{即} \quad 2mV_0 a^2 / \hbar^2 = n^2 \pi^2 \quad (10)$$

② 一维势阱至少有一个束缚能级。因此，如 $2mV_0a^2/\hbar^2 < \pi^2$ ，只存在一个束缚态，偶宇称（基态）。如 $2mV_0a^2/\hbar^2 = \pi^2$ ，除基态外，阱口将再出现一个奇宇称态能级，共二个能级。如 $2mV_0a^2/\hbar^2 = (2\pi)^2$ ，阱口出现的将是第三个能级（偶宇称）……依此类推。由此可知，对于给定的 V_0a^2 ，束缚态能级总数为

$$N = 1 + \left[\frac{a}{\pi \hbar} \sqrt{2mV_0} \right] \quad (11)$$

符号 $[A]$ 表示不超过 A 的最大整数。

当粒子在宽度为 a 的无限深势阱中运动时，能级为

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

则 $E \leq V_0$ 的能级数为

$$n = \left[\frac{a}{\pi \hbar} \sqrt{2mV_0} \right] = N - 1 \quad (12)$$

即：如果只计算 $E \leq V_0$ 的能级数，则有限深 (V_0) 势阱的能级数比无限深势阱的能级数多一个。

注意，后者的每一个能级均一一对应地高于前者的相应能级。

2.26 能量为 1 eV 的电子入射到矩形势垒上, 势垒高为 2 eV, 为使穿透几率约为 10^{-3} , 势垒大约多宽?

解: 穿透系数

$$T \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2a\sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar} = 4 e^{-2a\sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar} \sim 10^{-3}$$

$$\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} = \ln 4000$$

$$a = \frac{\hbar \ln 4000}{2\sqrt{2m(V_0 - E)}} = \frac{1.05 \times 10^{-34} \times \ln 4000}{2\sqrt{2 \times 9.1 \times 10^{-31} \times 1.6 \times 10^{-19}}}$$

$$= 8.1 \times 10^{-10} (m) = 8.1 (\text{\AA})$$

2.27 一个谐振子处于基态: $\psi(x,t) = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi^{1/2}}} e^{-\alpha^2 x^2/2 - i\omega t/2}$, 求势能

$V = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$ 的平均值及动能 $T = p^2 / 2m$ 的平均值。

(积分公式: $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}$)

解:

$$\overline{x^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t) x^2 \psi(x,t) dx = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\alpha^2 x^2} dx$$

$$= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha^3} = \frac{1}{2\alpha^2} = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

$$\overline{V} = \frac{1}{2} m \omega^2 \overline{x^2} = \frac{1}{4} \hbar \omega$$

$$\begin{aligned}
 \overline{T} &= \frac{\overline{p^2}}{2m} = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2 x^2/2} \cdot \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) e^{-\alpha^2 x^2/2} dx \\
 &= -\frac{\alpha \hbar^2}{2m\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} (\alpha^4 x^2 - \alpha^2) e^{-\alpha^2 x^2/2} dx \\
 &= -\frac{\alpha \hbar^2}{2m\sqrt{\pi}} \left(\frac{\alpha\sqrt{\pi}}{2} - \alpha\sqrt{\pi} \right) = \frac{\alpha^2 \hbar^2}{4m} = \frac{1}{4} \hbar \omega
 \end{aligned}$$

2.28 一粒子处于如图所示的一维势阱中，求确定能量本征值的方程。

解：① 先设 $E > V_0$ ，则有

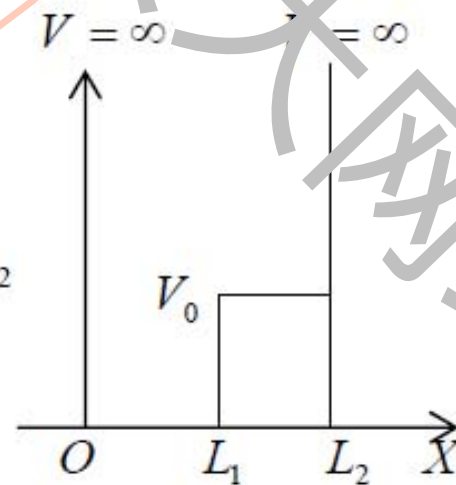
$$\psi'' + k^2 \psi = 0, \quad 0 < x < L_1$$

$$\psi'' + k'^2 \psi = 0, \quad L_1 < x < L_2$$

其中

$$k^2 = 2mE / \hbar^2, \quad k'^2 = 2m(E - V_0) / \hbar^2$$

$$\psi(x) = \begin{cases} A \sin(kx + \eta), & 0 < x < L_1 \\ B \sin(k'x + \delta), & L_1 < x < L_2 \end{cases}$$



边界条件:

$$\psi(0)=0 \Rightarrow \eta=0$$

$$\psi(L_2)=0 \Rightarrow \sin(k'L_2 + \delta) = 0, \quad \delta_n = n\pi - k'L_2$$

$$x=L_1 \text{ 处, } (\ln \psi)' \text{ 连续} \Rightarrow k \cot kL_1 = k' \cot(k'L_1 + \delta_n)$$

将 δ_n 代入, 得

$$k \cot kL_1 = k' \cot k'(L_1 - L_2) \quad (1)$$

②若 $E < V_0$, 则 $k' \rightarrow ik'$, 代入式 (1), 可得

$$k \cot kL_1 = k' \coth k'(L_1 - L_2) \quad (2)$$

式 (1)、式 (2) 即为确定能量本征值的方程。

2.29 质量为 m 的粒子在势场 $V(x)$ 中作一维运动，试建立动量表象中的能量本征方程。

解：采用狄拉克符号，能量本征方程可写成

$$H|\psi\rangle = (T + V)|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (1)$$

在动量表象中，有

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle, \quad \hat{p}|p'\rangle = p'|p'\rangle \quad (2)$$

已知

$$\begin{cases} \varphi(p) = \langle p|\psi\rangle \\ \langle p|p'\rangle = \delta(p-p') \\ \int |p'\rangle\langle p'| dp' = 1 \end{cases} \quad (3)$$

所以

$$|\psi\rangle = \int |p'\rangle \langle p'|\psi\rangle dp' = \int |p'\rangle \varphi(p') dp' \quad (4)$$

式(4)代入式(1), 得

$$(T+V) \int |p'\rangle \varphi(p') dp' = E \int |p'\rangle \varphi(p') dp'$$

以 $\langle p|$ 左乘上式, 得

$$\int \langle p|(T+V)|p'\rangle \varphi(p') dp' = E \int \langle p|p'\rangle \varphi(p') dp' \quad (5)$$

其中

$$\langle p|T|p'\rangle = \frac{p'^2}{2m} \delta(p-p') \quad (6)$$

定义

$$V_{pp'} = \langle p|V|p'\rangle$$

代入式 (5), 得

$$\frac{p^2}{2m}\varphi(p) + \int V_{pp'}\varphi(p')\mathrm{d}p' = E\varphi(p) \quad (7)$$

此即所求的 p 表象中的能量本征方程。

$$\begin{aligned} V_{pp'} &= \int \langle p|x \rangle \langle x|V(x)|x' \rangle \langle x'|p' \rangle \mathrm{d}x' \mathrm{d}x \\ &= \int \psi_p^*(x) V(x) \delta(x-x') \psi_{p'}(x') \mathrm{d}x' \mathrm{d}x \\ &= \int \psi_p^*(x) V(x) \psi_{p'}(x) \mathrm{d}x \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int V(x) e^{i(p'-p)x/\hbar} \mathrm{d}x \end{aligned} \quad (8)$$

若 $V(x) = \sum_n C_n x^n$, 由于

$$x e^{i(p'-p)x/\hbar} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} e^{i(p'-p)x/\hbar}$$

则式 (8) 式变为

$$\begin{aligned} V_{pp'} &= \sum_n C_n \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \right)^n \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{i(p'-p)x/\hbar} dx \\ &= \sum_n C_n \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \right)^n \delta(p-p') = V(\hat{x}) \delta(p-p') \end{aligned} \quad (9)$$

其中

$$\hat{x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \quad (10)$$

式 (9) 代入式 (7), 得

$$\left[\frac{p^2}{2m} + V \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \right) \right] \varphi(p) = E \varphi(p) \quad (11)$$

例如，谐振子，

$$V(\hat{x}) = \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2 = -\frac{1}{2} m \omega^2 \hbar^2 \frac{d^2}{d p^2}$$

能量本征方程为

$$\frac{p^2}{2m} \varphi(p) - \frac{1}{2} m \omega^2 \hbar^2 \frac{d^2}{d p^2} \varphi(p) = E \varphi(p)$$

【动量表象中的能量本征方程，最普遍的形式是式(7)；仅当 $V(x)$ 取 $V(x) = \sum_n C_n x^n$ 的形式时，其形式才为式(11)。】

2.30 质量为 m 的粒子处于长为 l 的一维盒子中,

$$V = \begin{cases} \infty, & x < 0, \quad x > l \\ 0, & 0 < x < l \end{cases}$$

在 $t = 0$ 时, 粒子波函数为

$$\psi = \begin{cases} \sqrt{\frac{30}{l^5}} x(l-x), & 0 < x < l \\ 0, & x < 0, \quad x > l \end{cases}$$

求 $\psi(t)$ 的级数表达式和级数系数表示式。

解:
$$\psi(x, t) = e^{-iHt/\hbar} \psi(x, 0) \quad (1)$$

$$\psi(x, 0) = \sum_n a_n \psi_n(x) \quad (2)$$

$$\psi(x, t) = \sum_n a_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} \quad (3)$$

一维无限深势阱的解为

$$\left. \begin{aligned} \psi_n(x) &= \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n\pi}{l} x \\ E_n &= \frac{1}{2m} \left(\frac{n\pi\hbar}{l} \right)^2 \end{aligned} \right\} \quad n=1, 2, 3, \dots \quad (4)$$

式 (2) 中,

$$\begin{aligned} a_n &= \int \psi_n^*(x) \psi(x, 0) dx = \int \sqrt{\frac{2}{l}} \sin \frac{n\pi x}{l} \cdot \sqrt{\frac{30}{l^5}} x(l-x) dx \\ &= \frac{2\sqrt{15}}{l^3} \left\{ \int_0^l l x \sin \frac{n\pi x}{l} dx - \int_0^l x^2 \sin \frac{n\pi x}{l} dx \right\} \\ &= \frac{2\sqrt{15}}{l^3} \left\{ l \left(\frac{l}{n\pi} \right)^2 (\sin y - y \cos y) \Big|_0^{n\pi} - \left(\frac{l}{n\pi} \right)^3 [2y \sin y - (y^2 - 2) \cos y] \Big|_0^{n\pi} \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{4\sqrt{15}}{(n\pi)^3} (1 - \cos n\pi) = \frac{4\sqrt{15}}{(n\pi)^3} [1 - (-1)^n] \\
 &= \frac{8\sqrt{15}}{(2k+1)^3 \pi^3} \quad k = 0, 1, 2, \dots
 \end{aligned} \tag{5}$$

式 (4)、式 (5) 代入式 (3)，得

$$\psi(x, t) = \sum_{k=0}^{\infty} 8\sqrt{\frac{30}{l}} \cdot \frac{1}{(2k+1)^3 \pi^3} \sin \frac{(2k+1)\pi}{l} x \cdot \exp \left[\frac{-i(2k+1)^2 \pi^2 \hbar t}{2ml^2} \right]$$

2.31 考虑如下一维波函数

$$\psi(x) = A \left(\frac{x}{x_0} \right)^n e^{-x/x_0} \quad (1)$$

其中 A 、 n 、 x_0 为已知常数。

① 利用 S.eq 求位势 $V(x)$ 和能量 E 。对于它们，该波函数为一本征函数（已知当 $x \rightarrow \infty$, $V(x) \rightarrow 0$ ）；

② 该势与轨道角动量为 l 的氢原子态的径向势有何异同？

解：① 定态 S.eq 为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E \psi(x) \quad (2)$$

对题给 $\psi(x)$ 求导：

$$\psi' = A \frac{n}{x_0} \left(\frac{x}{x_0} \right)^{n-1} e^{-x/x_0} + A \left(\frac{x}{x_0} \right)^n \left(-\frac{1}{x_0} \right) e^{-x/x_0} = \left(\frac{n}{x} - \frac{1}{x_0} \right) \psi \quad (3)$$

$$\psi'' = -\frac{n}{x^2} \psi + \left(\frac{n}{x} - \frac{1}{x_0} \right) \psi' = \left[\frac{n(n-1)}{x^2} - \frac{2n}{x_0 x} + \frac{1}{x_0^2} \right] \psi \quad (4)$$

从式 (2) 和 (4) 中消去 $\psi(x)$ ，得

$$E - V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{n(n-1)}{x^2} - \frac{2n}{x_0 x} + \frac{1}{x_0^2} \right] \quad (5)$$

当 $x \rightarrow \infty$, $V(x) \rightarrow 0$ ，所以

$$E = -\frac{\hbar^2}{2mx_0^2} \quad (6)$$

代回式 (5), 解得

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{n(n-1)}{x^2} - \frac{2n}{x_0 x} \right] \quad (7a)$$

② 氢原子有效径向势为

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \quad (8)$$

将式 (7a) 改写为

$$V(x) = -\frac{n\hbar^2/mx_0}{x} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{n(n-1)}{x^2} \quad (7b)$$

2.32 一个质量为 m 的粒子在势 $V(x)$ 作用下作一维运动。假定它处在

$$E = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \text{ 的能量本征态 } \psi(x) = \left(\frac{\alpha^2}{\pi} \right)^{1/4} e^{-\alpha^2 x^2 / 2},$$

① 求粒子的平均位置;

② 求粒子的平均动量;

③ 求 $V(x)$;

④ 求粒子的动量在 $p \rightarrow p + dp$ 间的几

率。

解: ①
$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) x \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x \left(\frac{\alpha^2}{\pi} \right)^{1/2} e^{-\alpha^2 x^2} dx = 0$$

②
$$\langle p \rangle = \left(\frac{\alpha^2}{\pi} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2 x^2 / 2} \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) e^{-\alpha^2 x^2 / 2} dx = 0$$

③ 由 S.eq:
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x) \quad (1)$$

而
$$\frac{d^2}{dx^2} e^{-\alpha^2 x^2/2} = (-\alpha^2 + \alpha^4 x^2) e^{-\alpha^2 x^2/2} \quad (2)$$

注意到
$$E = \hbar^2 \alpha^2 / 2m, \quad (3)$$

将式 (2)、(3) 代入 (1), 可解得

$$V(x) = \hbar^2 \alpha^4 x^2 / 2m \quad (4)$$

④
$$|\psi(x)\rangle = \int |p\rangle \langle p|\psi(x)\rangle dp = \int \varphi(p) |p\rangle dp,$$

$$\varphi(p) = \langle p|\psi(x)\rangle = \int \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx/\hbar} \cdot \psi(x) dx$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left(\frac{\alpha^2}{\pi} \right)^{1/4} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ipx/\hbar} \cdot e^{-\alpha^2 x^2/2} dx \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left(\frac{\alpha^2}{\pi} \right)^{1/4} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\alpha^2}{2}(x^2 + 2ipx/\hbar\alpha^2)} dx \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left(\frac{\alpha^2}{\pi} \right)^{1/4} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\alpha^2}{2}(x+ip/\hbar\alpha^2)^2} \cdot e^{-p^2/2\hbar^2\alpha^2} dx \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left(\frac{\alpha^2}{\pi} \right)^{1/4} \cdot \frac{\sqrt{2}}{\alpha} \cdot e^{-p^2/2\hbar^2\alpha^2} \cdot \sqrt{\pi} = \left(\frac{1}{\hbar^2\alpha^2\pi} \right)^{1/4} e^{-p^2/2\hbar^2\alpha^2}
 \end{aligned}$$

(5)

——波函数的动量表象

粒子的动量在 $p \rightarrow p + dp$ 间的几率为

$$P(p)dp = |\varphi(p)|^2 dp = \left(\frac{1}{\hbar^2\alpha^2\pi} \right)^{1/2} e^{-p^2/\hbar^2\alpha^2} dp \quad (6)$$

2.33 $t = 0$ 时, 处在谐振子势 $V = \frac{1}{2}kx^2$ 中的一粒子波函数为

$$\psi(x, 0) = A e^{-\alpha^2 x^2 / 2} \left[\cos \beta H_0(\alpha x) + \frac{\sin \beta}{2\sqrt{2}} H_2(\alpha x) \right]$$

其中 β, A 为常数, $\alpha^2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{mk}$, 且厄密多项式是归一的, 即

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2 x^2} [H_n(\alpha x)]^2 dx = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} \cdot 2^n n!$$

$$\left[N_n = \left(\frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi}} \right)^{1/2} \right]$$

- ① 写出 $\psi(x, t)$ 表示式;
- ② 在该态下粒子能量的测值及相对几率;
- ③ $t = 0$ 时, $\langle x \rangle = ?$ $\langle x \rangle$ 怎样随 t 变化?

解：① 任意时刻，有

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = H \psi(x, t)$$

形式解为

$$\psi(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \psi(x, 0)$$

$$\psi(x, 0) = \sum_n a_n \psi_n(x)$$

$$\psi(x, t) = \sum_n a_n \psi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$$

$$a_n = \int \psi_n^*(x) \psi(x, 0) dx$$

$$= \int dx N_n e^{-\alpha^2 x^2 / 2} H_n(\alpha x) \cdot A e^{-\alpha^2 x^2 / 2} \cdot \left[\cos \beta \cdot H_0 + \frac{\sin \beta}{2\sqrt{2}} H_2 \right]$$

$$= A \left[\frac{1}{N_0} \cos \beta \delta_{n0} + \frac{1}{N_2} \frac{\sin \beta}{2\sqrt{2}} \delta_{n2} \right]$$

$$N_0 = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \right)^{1/2}, \quad N_2 = \left(\frac{\alpha}{4 \cdot 2 \sqrt{\pi}} \right)^{1/2}$$

所以

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= A \left(\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} \right)^{1/2} \left[\cos \beta \psi_0(x) e^{-iE_0 t / \hbar} + \sin \beta \psi_2(x) e^{-iE_2 t / \hbar} \right] \\ &= A \left(\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} \right)^{1/2} \left[\cos \beta \psi_0(x) e^{-i\omega t / 2} + \sin \beta \psi_2(x) e^{-i5\omega t / 2} \right] \end{aligned}$$

② 可测得的能量为

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega, \quad E_2 = \frac{5}{2} \hbar \omega$$

二者测得的相对几率为

$$P_0 / P_2 = \frac{\cos^2 \beta}{\sin^2 \beta} = \cot^2 \beta$$

③ 因为 $\psi(x,0)$ 仅为 ψ_0 与 ψ_2 的叠加态，而 ψ_0 和 ψ_2 皆为偶宇称，故叠加后仍为偶宇称态，即

$$\psi(-x,0) = \psi(x,0)$$

$t=0$ 时，

$$\langle x \rangle = (\psi(x,0), x\psi(x,0)) = 0$$

由 $(\psi(x,t), x\psi(x,t))$ 立即可以看出，平均值 $\langle x \rangle$ 不随时间 t 变化，即任意时刻 t ，均有 $\langle x \rangle = 0$ 。

2.34 在 $t=0$ 时, 处于势 $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ 中的粒子, 由波函数

$$\psi(x,0) = A \sum_n \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^n \psi_n(x)$$

描述, ψ_n 是能量本征态, $(\psi_n, \psi_{n'}) = \delta_{nn'}$, 求:

- ① 归一化常数 A ;
- ② 给出 $t > 0$ 时, $\psi(x,t)$ 的表式;
- ③ 证明 $|\psi(x,t)|^2$ 是一个周期函数, 求出其最长的周期;
- ④ 求出 $t=0$ 时, 体系能量的平均值。

解: ①

$$(\psi(x,0), \psi(x,0)) = |A|^2 \sum_{n,m} \left(\frac{1}{2} \right)^{\frac{n+m}{2}} (\psi_m, \psi_n) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{2} \right)^n \cdot |A|^2 = 2|A|^2 = 1$$

可取

$$A = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\textcircled{2} \quad \psi(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \psi(x, 0) = \sum_n \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^{n+1} e^{-i \left(n + \frac{1}{2} \right) \omega t} \psi_n(x)$$

$$\begin{aligned} \textcircled{3} \quad |\psi(x, t)|^2 &= \frac{1}{2} \sum_{n, m} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^{n+m} e^{-i \omega (n-m) t} \psi_n(x) \psi_m^*(x) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{2} \right)^n |\psi_n(x)|^2 + \frac{1}{2} \sum_{\substack{n, m=0 \\ m \neq n}}^{\infty} \left(\frac{1}{2} \right)^{\frac{n+m}{2}} e^{-i (n-m) \omega t} \psi_n(x) \psi_m^*(x) \end{aligned}$$

显然，上式是时间 t 的周期函数，最长周期 $\tau = 2\pi/\omega$ 。

④ $t = 0$ 时,

$$\bar{E} = (\psi(x,0), H\psi(x,0)) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2^{n+1}} \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{n}{2^{n+1}} + \frac{1}{2^{n+2}} \right) \hbar \omega \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n}{2^{n+1}} &= \frac{1}{4} + \frac{2}{8} + \frac{3}{16} + \cdots = \frac{1}{4} + \frac{1}{8} + \frac{1}{16} + \cdots + \frac{1}{8} + \frac{1}{16} + \cdots + \frac{1}{16} + \frac{1}{32} + \cdots \\ &= \frac{1/4}{1-1/2} + \frac{1/8}{1-1/2} + \frac{1/16}{1-1/2} + \cdots = \frac{1}{2} + \frac{1}{4} + \frac{1}{8} + \cdots = \frac{1/2}{1-1/2} = 1 \end{aligned} \quad (2)$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2^{n+2}} = \frac{1}{4} + \frac{1}{8} + \frac{1}{16} + \cdots = \frac{1/4}{1-1/2} = \frac{1}{2} \quad (3)$$

式 (2)、式 (3) 代入式 (1), 得

$$\bar{E} = \frac{3}{2} \hbar \omega$$

2.35 设粒子（能量 $E > 0$ ）从左入射，
碰到下列势阱（图），求阱壁处的反射系数。

解：势阱为

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & x < 0, \\ 0, & x > 0. \end{cases}$$

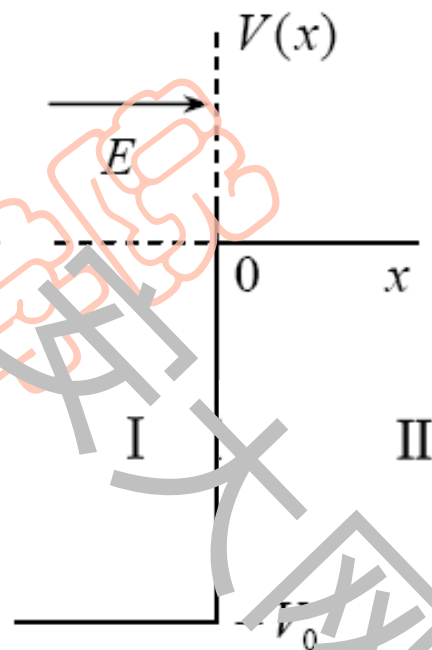
在区域 I 上有入射波与反射波，在区域

II 上仅有透射波。故

$$\psi_1 = A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x}, \quad k_1 = \sqrt{2m(V_0 + E)}/\hbar$$

$$\psi_2 = C e^{ik_2 x}, \quad k_2 = \sqrt{2mE}/\hbar$$

由 $\psi_1(0) = \psi_2(0)$ ，得



$$A + B = C$$

由 $\psi_1'(0) = \psi_2'(0)$ ，得

$$k_1(A - B) = k_2C$$

从上二式消去 C ，得

$$(k_1 - k_2)A = (k_1 + k_2)B$$

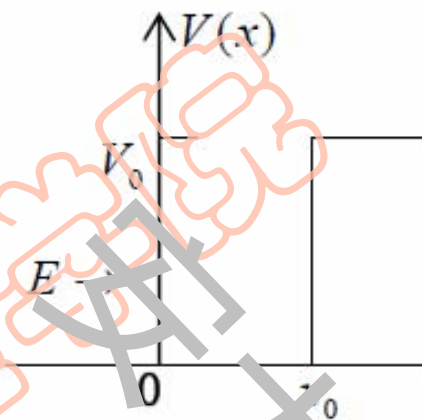
反射系数

$$R = |r|^2 = \frac{B^2}{A^2} = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2}$$

将 k_1, k_2 代入运算，可得

$$R = \frac{V_0^2}{(\sqrt{V_0 + E} + \sqrt{E})^4} = \begin{cases} V_0^2/16E^2, & E \gg V_0 \\ 1 - 4\sqrt{E/V_0}, & E \ll V_0 \end{cases}$$

2.36 一质量为 m ，动量为 p 的粒子从左射向图示阶跃状势垒，计算下列两种情况下粒子向后散射的几率。



① $p^2/2m < V_0$; ② $p^2/2m > V_0$

解：将纵坐标平移至 x_0 处，不影响反射系数的计算结果。

S.eq 为：

$$\begin{cases} \left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \right] \psi(x) = 0, & x < x_0 \\ \left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \right] \psi(x) = 0, & x > x_0 \end{cases} \quad (1)$$

① $E = \frac{p^2}{2m} < V_0$, 解为

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ik(x-x_0)} + r e^{-ik(x-x_0)}, & x < x_0 \\ t e^{-k'(x-x_0)}, & x > x_0 \end{cases} \quad (2)$$

其中

$$k^2 = 2mE/\hbar^2, \quad k'^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2 \quad (3)$$

$x = x_0$ 处 ψ 及 ψ' 分别连续, 得

$$\begin{cases} 1 + r = t \\ ik(1 - r) = -k't \end{cases}$$

所以

$$r = \frac{k' + ik}{-k' + ik} \quad (4)$$

反射系数

$$R = |j_{\text{反}}/j_{\text{入}}| = |r|^2 = 1 \quad (\text{因为是无限宽势垒}) \quad (5)$$

② $E = \frac{p^2}{2m} > V_0$, 方程 (1) 的解为

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ik(x-x_0)} + r e^{-ik(x-x_0)}, & x < x_0 \\ t e^{ik''(x-x_0)} & x > x_0 \end{cases} \quad (6)$$

其中

$$k^2 = 2mE/\hbar^2, \quad k''^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2 \quad (7)$$

$x = x_0$ 处, ψ 及 ψ' 分别连续, 得

$$\begin{cases} 1 + r = t \\ ik(1 - r) = ik''t \end{cases}$$

所以

$$r = \frac{k - k''}{k + k''} \quad (8)$$

反射系数

$$\begin{aligned} R = |r|^2 &= \left(\frac{k - k''}{k + k''} \right)^2 = \frac{(k - k'')^2 (k + k'')^2}{(k + k'')^4} = \frac{(k^2 - k''^2)^2}{(k + k'')^4} \\ &= V_0^2 / (\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0})^4 \end{aligned} \quad (9)$$

透射系数

$$T = 1 - R = 1 - \frac{V_0^2}{(\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0})^4} \quad (10)$$

2.37 若粒子从右边入射，求如图所示一维阶梯势的反射和透射系数。

解：右边入射，显然 $E > V_0$ 。

$x > 0$ 区域：既有入射波，也有反射波。S.eq 为

$$\psi'' + k_1^2 \psi = 0, \quad k_1^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2$$

解为

$$\psi = e^{-ik_1 x} + r e^{ik_1 x} \quad (x > 0)$$

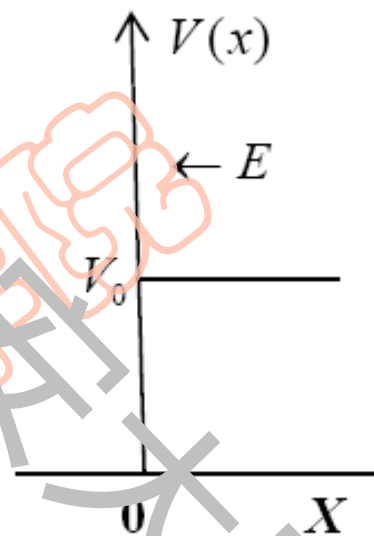
在 $x < 0$ 区域：只有透射波。S.eq 为

$$\psi'' + k_2^2 \psi = 0, \quad (x < 0)$$

$$k_2^2 = 2mE/\hbar^2$$

解为

$$\psi = t e^{-ik_2 x} \quad (x < 0)$$



$x = 0$ 处, ψ 、 ψ' 分别连续, 给出

$$\begin{cases} 1 + r = t \\ k_1(1 - r) = k_2 t \end{cases}$$

所以

$$r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}$$

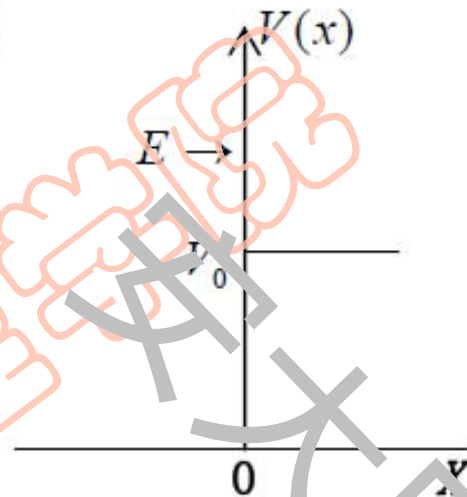
反射系数

$$R = |r|^2 = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 = \frac{(k_1 - k_2)^2 (k_1 + k_2)^2}{(k_1 + k_2)^4}$$
$$= \frac{(k_1^2 - k_2^2)^2}{(k_1 + k_2)^4} = \frac{V_0^2}{(\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0})^4}$$

透射系数

$$T = 1 - R = 1 - \frac{V_0^2}{(\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0})^4}$$

2.38 一质量为 m 的粒子沿 x 正方向以能量 E 向 $x = 0$ 处的势阶运动。当 $x \leq 0$ 时，该势为 0；当 $x > 0$ 时，该势为 $\frac{3}{4}E$ 。问在 $x = 0$ 处粒子被反射的几率多大？



解：Sieg 为

$$\begin{cases} \psi'' + k^2 \psi = 0, & x \leq 0 \\ \psi'' + k'^2 \psi = 0, & x > 0 \end{cases}$$

其中 $k^2 = 2mE/\hbar^2$, $k'^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2 = k^2/4$ $\left(V_0 = \frac{3}{4}E \right)$

方程的解为：

$$\psi = \begin{cases} e^{ikx} + r e^{-ikx}, & x \leq 0 \\ t e^{ikx/2}, & x \geq 0 \end{cases}$$

$x = 0$ 处, ψ 及 ψ' 分别连续, 给出

$$\begin{cases} 1 + r = t \\ k(1 - r) = \frac{k}{2}t \end{cases}$$

解得

$$r = \frac{1}{3}$$

反射系数

$$R = |r|^2 = \frac{1}{9}$$

2.39 证明：对于任意的一维势垒贯穿问题，粒子的反射系数 R 与透射系数 T 总有关系

$$R + T = 1$$

证：对于散射问题，粒子在无限远处不受力的作用，即力总是作用在一个有限的范围，因此在无限远处位势总趋于常数：

$$V(x) \begin{cases} \rightarrow V_L, & x \rightarrow -\infty \\ \rightarrow V_R, & x \rightarrow +\infty \end{cases}$$

于是对于一定能量 E 的粒子，在无限远处的波函数行为如：

$$\begin{aligned} e^{\pm i k x}, & \quad x \rightarrow -\infty, & k = \sqrt{2m(E - V_L)} / \hbar \\ e^{\pm i k' x}, & \quad x \rightarrow +\infty, & k' = \sqrt{2m(E - V_R)} / \hbar \end{aligned}$$

考虑散射边界条件，假定粒子从左边 ($x = -\infty$ 处) 入射，于是在右边 ($x = +\infty$ 处) 只有出射粒子，而向 $x = -\infty$ 处运动的则有被势垒反射的粒子。因此定态波函数的渐近行为是

$$\psi(x) \begin{cases} \rightarrow \psi_1 = e^{ikx} + r e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty \\ \rightarrow \psi_2 = t e^{ik'x}, & x \rightarrow +\infty \end{cases}$$

由于是定态，故几率密度 $\rho = \psi^* \psi$ 与时间无关。于是由几率守恒定律：

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot \vec{j} = 0, \text{ 可知}$$

$$\partial_x \bar{j} = 0$$

\bar{j} 为一维几率流密度。对此式进行空间积分，可得

$$j(-\infty) = j(\infty)$$

$$j_1 = j_2 \quad (1)$$

$$j_1 = -\frac{i\hbar}{2m} \left[\psi_1^* \frac{d}{dx} \psi_1 - c.c. \right] = \frac{\hbar k}{m} (1 - |r|^2) \quad (2)$$

$$= j_{\lambda} + j_{\text{反}} \quad (3)$$

其中

$$j_{\lambda} = \frac{\hbar k}{m}, \quad j_{\text{反}} = -\frac{\hbar k}{m} |r|^2 \quad (4)$$

而

$$j_2 = -\frac{i\hbar}{2m} \left[\psi_2^* \frac{d}{dx} \psi_2 - c.c. \right] = \frac{\hbar k'}{m} |t|^2 \quad (5)$$

反射系数

$$R = |j_{\text{反}} / j_{\lambda}| = |r|^2$$

透射系数

$$T = |j_2/j_\lambda| = \frac{k'}{k} |t|^2$$

由此，

$$R + T = |r|^2 + \frac{k'}{k} |t|^2 \quad (6)$$

式 (2)、式 (5) 代入式 (1)，得

$$k(1 - |r|^2) = k'|t|^2$$

即

$$|r|^2 + \frac{k'}{k} |t|^2 = 1 \quad (7)$$

比较式 (6)、式 (7)，得

$$R + T = 1 \quad (8)$$

***2.40** 对于直角势阱（深 V_0 ，宽 a ）的第 n 个束缚态 ψ_n 、 E_n ，在 $V_0 \gg E_n$ 条件下，计算：

- ① 粒子在阱外出现的几率；
- ② $V(x)$ 和的 $V^2(x)$ 平均值，并和 E_n 比较。

解：① 以偶宇称态为例，定态 S.eg 可写成

$$\begin{cases} \psi'' + k^2\psi = 0, & |x| \leq a/2 \quad (\text{阱内}) \\ \psi'' - \beta^2\psi = 0, & |x| \geq a/2 \quad (\text{阱外}) \end{cases} \quad (1)$$

其中

$$\left. \begin{aligned} k &= \sqrt{2mE}/\hbar \\ \beta &= \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

注意：在 $V_0 \gg E$ 条件下， $\beta \gg k$ 。

式 (1) 的偶宇称解为

$$\begin{aligned}\psi &= \cos kx, & |x| \leq a/2 \\ \psi &= C e^{-\beta|x|}, & |x| \geq a/2\end{aligned}\quad (3)$$

$x = a/2$ 处 ψ 应连续, 由此得出

$$C = e^{\beta a/2} \cos \frac{ka}{2} \quad (4)$$

$x = a/2$ 处 ψ' 应连续, 得出

$$C = \frac{k}{\beta} e^{\beta a/2} \sin \frac{ka}{2} \quad (5)$$

由式 (4)、式 (5) 得能级公式

$$\tan \frac{ka}{2} = \frac{\beta}{k} \quad (6)$$

在 $\beta \gg k$ 条件下, 式 (6) 的解为

$$ka = n\pi, \quad n = 1, 3, 5, \dots \quad (7)$$

代入式 (2)，得能级

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (8)$$

这正是无限深势阱的能级公式。

现在计算粒子在阱内、外出现的几率。由式 (3)、式 (4)，得

$$I_1 = \int_{\text{阱外}} |\psi|^2 dx = 2C^2 \int_{a/2}^{\infty} e^{-2\beta x} dx = \frac{C^2}{\beta} e^{-\beta a} = \frac{1}{\beta} \cos^2 \frac{ka}{2} \quad (9)$$

$$I_2 = \int_{\text{阱内}} |\psi|^2 dx = 2 \int_0^{a/2} \cos^2 kx dx = \frac{a}{2} \left(1 + \frac{\sin ka}{ka} \right) \quad (10)$$

由于式(7), 使得 $\sin ka$ 和 $\cos \frac{ka}{2}$ 均 $\rightarrow 0$ 。可知粒子在阱外出现的几率 $P_{\text{外}}$ 远小于阱内几率 $P_{\text{内}}$, 且有

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx \approx \int_{\text{阱内}} |\psi|^2 dx = \frac{a}{2} \quad (11)$$

阱外几率

$$P_{\text{外}} = \frac{\int_{\text{阱外}} |\psi|^2 dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx} \approx \frac{2}{\beta a} \cos^2 \frac{ka}{2} \quad (12)$$

利用式(6), 得

$$1 + \tan^2 \frac{ka}{2} = \frac{k^2 + \beta^2}{k^2} = \frac{V_0}{E}$$

所以

$$\cos^2 \frac{ka}{2} = \frac{E}{V_0} \quad (13)$$

代入式 (12)，得阱外几率

$$P_{\text{外}} = \frac{2E}{a\beta V_0} \approx \frac{2\hbar}{a\sqrt{2mV_0}} \frac{E}{V_0} \quad (14)$$

考虑到 $V_0 \gg E$ 和式 (8)，有

$$\sqrt{2mV_0} \gg \sqrt{2mE_n} \approx n\pi\hbar/a \quad (15)$$

所以阱外几率

$$P_{\text{外}} \ll 2E/n\pi V_0 \quad (16)$$

$$\textcircled{2} \quad \langle V(x) \rangle = (\text{阱外几率}) \cdot V_0 = \frac{2\hbar E}{a\sqrt{2mV_0}} \ll \frac{2}{n\pi} \cdot E_n \quad (17)$$

$$\langle V^2(x) \rangle = (\text{阱外几率}) \cdot V_0^2 \approx \frac{\hbar E}{ma} \sqrt{2mV_0} > \frac{n\pi\hbar^2 E}{ma^2} = \frac{2}{n\pi} E_n^2 \quad (18)$$

***2.41** 粒子在无限深方势阱（宽为 a ）中运动，处于第 n 个束缚态 ψ_n ，求粒子对于每一侧阱壁的平均作用力。

解：先考虑为有限深（ V_0 ），再过渡到 $V_0 \rightarrow \infty$ 的情况。

即

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| < a/2 \\ V_0, & |x| \geq a/2 \end{cases} \quad (V_0 \rightarrow \infty) \quad (1)$$

粒子所受作用力为 $-dV/dx$ ，其对阱壁的作用力为

$$F(x) = \frac{dV}{dx} = V_0 \delta(x - a/2) - V_0 \delta(x + a/2) \quad (2)$$

（右侧）

（左侧）

$$\langle F_{\text{右}} \rangle = \frac{\int |\psi|^2 V_0 \delta\left(x - \frac{a}{2}\right) dx}{\int |\psi|^2 dx} = \frac{V_0 \left| \psi\left(\frac{a}{2}\right) \right|^2}{\int |\psi|^2 dx} = \frac{V_0 \cos^2(ka/2)}{a/2} = \frac{2E_n}{a} \quad (3)$$

(参 2.40 题式 (13): $V_0 \cos^2(ka/2) = E$ 。) (V_0/E) 越大, 式 (3) 则越正确。由于对称性, 显然有

$$\langle F_{\text{左}} \rangle = -\langle F_{\text{右}} \rangle \quad (4)$$

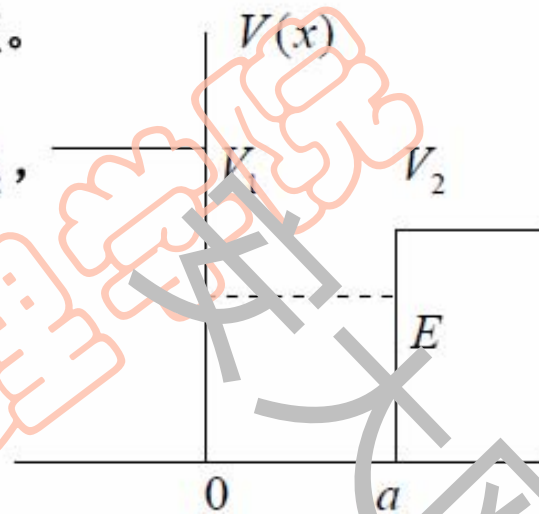
式 (3) 可作如下解释: 设固定阱壁左侧, 而令右侧徐缓外移 Δa , 则粒子对外做功 $\langle F_{\text{右}} \rangle \Delta a$, 导致能级降低。据能量守恒律, 有

$$\langle F_{\text{右}} \rangle = -\frac{\partial E_n}{\partial a} = -\frac{\partial}{\partial a} \left(\frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \right) = \frac{2}{a} E_n \quad (5)$$

这正是式 (3)。

*2.42 求不对称势阱中粒子的能量本征值。

解：仅讨论分立能级的情况，即 $0 < E < V_2$ ，



所以

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} = \frac{2m(V - E)}{\hbar^2} \psi$$

当 $x \rightarrow \pm\infty$ 时， $\psi \rightarrow 0$ ，故有

$$\psi = \begin{cases} A_1 e^{k_1 x}, & x < 0, & k_1 = \sqrt{2m(V_1 - E)}/\hbar \\ A \sin(kx + \delta), & 0 < x < a, & k = \sqrt{2mE}/\hbar, \quad (\delta < \pi) \\ A_2 e^{-k_2 x}, & a < x, & k_2 = \sqrt{2m(V_2 - E)}/\hbar \end{cases}$$

由 $d \ln \psi / dx$ 在 $x = 0$ 、 $x = a$ 处的连续条件，得

$$k_1 = k \cot \delta, \quad (1)$$

$$k_2 = -k \cot(ka + \delta) \quad (2)$$

由式 (1) 可得

$$\sin \delta = \frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_1}} \quad (3)$$

由于 k_1, k_2, k 皆为正值, 故由 (2), 知 $ka + \delta$ 为二、四象限的角。因而

$$\sin(ka + \delta) = \pm \frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_2}} \quad (4)$$

又由式 (1), 余切函数的周期为 π , 故由式 (3), 得

$$\delta = n_1 \pi + \sin^{-1} \frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_1}} \quad (5)$$

由式(4)，得

$$ka + \delta = n_2\pi - \sin^{-1} \frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_2}} \quad (6)$$

结合式(5)、式(6)，得

$$ka = n_2\pi - \sin^{-1} \frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_2}} - n_1\pi - \sin^{-1} \frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_1}}$$

或

$$ka = n\pi - \sin^{-1} \frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_1}} - \sin^{-1} \frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_2}} \quad (7)$$

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

一般而言，给定一个 n 值，有一个解 k_n ，相当于有一个能级：

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} \quad (8)$$

当 $V_2 \neq V_1$ 时，仅当

$$\frac{a\sqrt{2mV_2}}{\hbar} \geq \frac{\pi}{2} - \sin^{-1} \sqrt{\frac{V_2}{V_1}}$$

才有束缚态，故 V_1 、 V_2 给定时，仅当

$$a \geq \frac{\hbar}{\sqrt{2mV_2}} \left(\frac{\pi}{2} - \sin^{-1} \sqrt{\frac{V_2}{V_1}} \right) \quad (9)$$

时才有束缚态（若 $V_1 = V_2 = V$ ，则无论 V 和 a 的值如何，至少总有一个能级）。

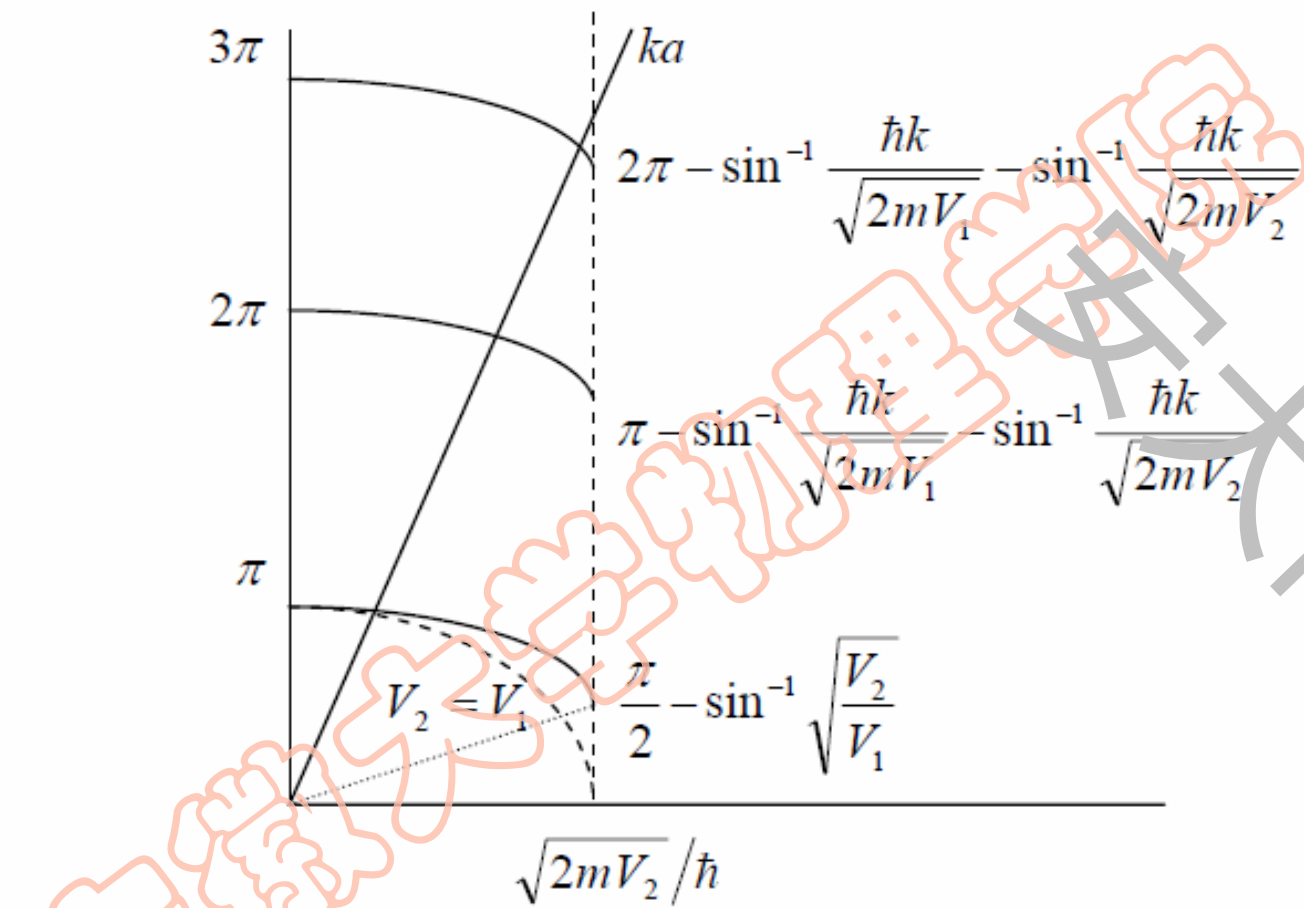
当 V_1 、 V_2 、 a 给定时，由式(8)可求出 n 个能级（若有 n 个能级的话）。

相应的波函数为：

$$\psi_n = \begin{cases} A_n \frac{\hbar k_{1n}}{\sqrt{2mV_1}} e^{k_{1n}x} & , \quad x < 0 \\ A_n \sin(k_n x + \delta_n) & , \quad 0 < x < a \\ A_n (-1)^{n-1} \frac{\hbar k_{2n}}{\sqrt{2mV_2}} e^{-k_{2n}(x-a)} & , \quad x > a \end{cases} \quad , \quad k_{1n} = \sqrt{2m(V_1 - E)}/\hbar$$
$$k_{2n} = \sqrt{2m(V_2 - E)}/\hbar$$

其中

$$A_n = \sqrt{2/(a + 1/k_{1n} + 1/k_{2n})}$$



END