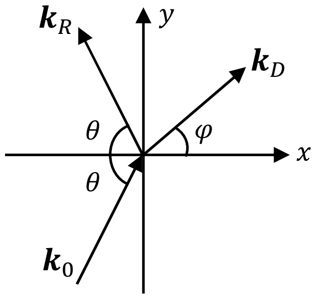
第三周习题

1. 能量为E的平行粒子束以入射角θ射向平面$x=0$，如图所示，在区域$x<0, V=0$；在区域$x>0, V=-V_0$。试分析粒子束的反射和折射规律，将结果用入射角θ和折射率$n=(1+V_0/E)^{1/2}$表示。



提示：显然，入射、反射、折射粒子束均可用平面波表示。取入射面为x-y平面，可以表示成

入射波　　$\psi_0 = e^{i\boldsymbol{k}_0\cdot\boldsymbol{r}} = e^{i(k_1x+k_2y)}$,

反射波　　$\psi_R = Re^{i\boldsymbol{k}_R\cdot\boldsymbol{r}}$,

折射波　　$\psi_D = De^{i\boldsymbol{k}_D\cdot\boldsymbol{r}}$,

求解$\boldsymbol{k}_R, \boldsymbol{k}_D, R, D$。

根据公式$j_x = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right)$,

计算反射流量/入射流量，折射流量/入射流量，并分析正入射时的情况。

解　入射动量为$\hbar\boldsymbol{k}_0$，入射能量和入射角为

$$E = \frac{\hbar^2k_0^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}(k_1^2+k_2^2), \tag{1}$$

$$\theta = \arctan\frac{k_2}{k_1} = \arcsin\frac{k_2}{k_0}. \tag{2}$$

由于$\partial V/\partial y = \partial V/\partial z = 0$，反射和折射时粒子动量的$y$分量和$z$分量不变。以$\boldsymbol{k}_R$表示反射波波矢量，由于反射波出现于$x<0$区域，$V=0$，所以$|\boldsymbol{k}_R|$必须等于$|\boldsymbol{k}_0|$，因此

$$\boldsymbol{k}_R = (-k_1, k_2, 0), \tag{3}$$

所以反射角必然等于入射角。这就是反射定律。折射波出现于$x>0$区域，设波矢量为$\boldsymbol{k}_D$，即折射粒子动量为$\hbar\boldsymbol{k}_D$。$\boldsymbol{k}_D$应满足能量关系

$$\frac{\hbar k_D^2}{2m} = E + V_0. \tag{4}$$

$\boldsymbol{k}_D$的直角坐标分量可以写成

$$\boldsymbol{k}_D = (k, k_2, 0). \tag{5}$$

由式(1)(4)(5)易见，k和k_1间有下列关系

$$k^2 - k_1^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}. \tag{6}$$

设折射角为φ，

$$\sin\theta = \frac{k_2}{k_0}, \qquad \sin\varphi = \frac{k_2}{k_D},$$

$$\frac{\sin\theta}{\sin\varphi} = \frac{k_D}{k_0} = \left(1+\frac{V_0}{E}\right)^{\frac{1}{2}} = n. \tag{7}$$

相当于光学中的折射定律。

下面求入射、反射、折射波的振幅及相位关系，即系数R, D。在分界面两侧，ψ及$\partial\psi/\partial x$应该连续，即

$$(\psi_0+\psi_R)|_{x=0} = \psi_D|_{x=0},$$

$$\left(\frac{\partial\psi_0}{\partial x}+\frac{\partial\psi_R}{\partial x}\right)\bigg|_{x=0}=\frac{\partial\psi_D}{\partial x}\bigg|_{x=0}, \tag{8}$$

即得

$$\begin{aligned}&1+R=D,\\&(1-R)k_1=Dk,\\&R=\frac{k_1-k}{k_1+k},\qquad D=\frac{2k_1}{k_1+k}.\end{aligned} \tag{9}$$

由于$k_1<k$，所以R是负实数，D是正实数。即折射波和入射波同相，反射波和入射波反相。由于

$$k_1=k_0\cos\theta=k_0\sqrt{1-\sin^2\theta},$$

$$k=k_D\cos\varphi=k_0\sqrt{n^2-\sin^2\theta}, \tag{10}$$

式(9)可以写成

$$R=\frac{\cos\theta-\sqrt{n^2-\sin^2\theta}}{\cos\theta+\sqrt{n^2-\sin^2\theta}},\qquad D=\frac{2\cos\theta}{\cos\theta+\sqrt{n^2-\sin^2\theta}}. \tag{11}$$

根据公式

$$j_x=-\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}-\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right),$$

容易得出入射粒子流量为$\hbar k_1/m$，反射粒子流量为$\hbar k_1|R|^2/m$，折射粒子流量为$\hbar k|D|^2/m$。所以

$$\frac{\text{反射流量}}{\text{入射流量}}=|R|^2=\left(\frac{k_1-k}{k_1+k}\right)^2,$$

$$\frac{\text{折射流量}}{\text{入射流量}}=\frac{k}{k_1}|D|^2=\frac{4kk_1}{(k_1+k)^2}, \tag{12}$$

正入射时，$\theta=\varphi=0,k_0=k_1,k_D=k,k/k_1=n,$

$$\frac{\text{反射流量}}{\text{入射流量}}=\left(\frac{n-1}{n+1}\right)^2,\qquad \frac{\text{折射流量}}{\text{入射流量}}=\frac{4n}{(n+1)^2}. \tag{13}$$

本题结果和电磁波的反射、折射规律相似。

2. 质量为m的粒子在势场$V(x)$中作一维运动。试证明，对于能量本征态（限于束缚态）ψ_n（能级E_n），以下平均值公式成立：

$$\langle T\rangle_n=\left\langle\frac{p^2}{2m}\right\rangle_n=\frac{1}{2}\left\langle x\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right\rangle_n,\qquad \left\langle\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right\rangle_n=0.$$

第一式即一维“位力定理”。

证　一维束缚态波函数可取为实函数，并满足归一化条件，即

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^2\mathrm{d}x=1.$$

ψ_n^2可积，所以$x\to\pm\infty$处，$\psi_n\to 0$。ψ_n满足定态薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_n''+V(x)\psi_n=E_n\psi_n.$$

以ψ_n乘上式，并对全空间积分，同时计及归一化条件，即得

$$E_n=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\right)\psi_n\mathrm{d}x+\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n V\psi_n\mathrm{d}x=\langle T\rangle_n+\langle V\rangle_n.$$

$$\langle T\rangle_n=-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n\psi_n''\mathrm{d}x=-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n\mathrm{d}(\psi_n')$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\psi_n\psi_n'\ \Big|_{-\infty}^{\infty}-\int_{-\infty}^{\infty}(\psi_n')^2\mathrm{d}x\right\}=\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}(\psi_n')^2\mathrm{d}x.$$

因为$\langle T\rangle_n$必为有限制，故$(\psi_n')^2$可积，所以$x\to\pm\infty$处，$\psi_n'\to 0$。

$$\begin{aligned}\langle V\rangle_n&=\int_{-\infty}^{\infty}V\psi_n^2\mathrm{d}x=V\,\psi_n^2\ \ x\Big|_{-\infty}^{\infty}-\int_{-\infty}^{\infty}x\mathrm{d}(V\psi_n^2)\\&=-\int_{-\infty}^{\infty}x\psi_n^2\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x-2\int_{-\infty}^{\infty}xV\psi_n\psi_n'\mathrm{d}x\\&=-\left\langle x\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right\rangle_n-2\int_{-\infty}^{\infty}xV\psi_n\psi_n'\mathrm{d}x.\end{aligned}$$

以$2x\psi_n'$乘定态薛定谔方程，积分得到

$$2\int_{-\infty}^{\infty}xV\psi_n\psi_n'\mathrm{d}x=2E_n\int_{-\infty}^{\infty}x\psi_n\psi_n'\mathrm{d}x+\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}2x\psi_n'\psi_n''\mathrm{d}x$$

$$=E_n\int_{-\infty}^{\infty}x\mathrm{d}(\psi_n^2)+\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}x\mathrm{d}(\psi_n')^2$$

$$=E_n\left(x\psi_n^2\ \Big|_{-\infty}^{\infty}-\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^2\mathrm{d}x\right)+\frac{\hbar^2}{2m}\left(x(\psi_n')^2\ \Big|_{-\infty}^{\infty}-\int_{-\infty}^{\infty}(\psi_n')^2\mathrm{d}x\right)$$

$$=-E_n-\langle T\rangle_n.$$

由上述关系得

$$2\langle T\rangle_n+\langle V\rangle_n=\langle V\rangle_n+\left\langle x\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right\rangle_n,$$

$$\langle T\rangle_n=\left\langle\frac{p^2}{2m}\right\rangle_n=\frac{1}{2}\left\langle x\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right\rangle_n.$$

以ψ_n'乘定态薛定谔方程，再对全空间积分得到

$$E_n\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n'\psi_n\mathrm{d}x=E_n\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n\mathrm{d}\psi_n=\frac{1}{2}E_n\,\psi_n^2\ \ \Big|_{-\infty}^{\infty}=0,$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n'\psi_n''\mathrm{d}x=-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n\mathrm{d}\psi_n'=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{2}(\psi_n')^2\ \ \Big|_{-\infty}^{\infty}=0,$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n' V\psi_n \mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{2}V\mathrm{d}(\psi_n^2)=\frac{1}{2}V\,\psi_n^2\ \Big|_{-\infty}^{\infty}-\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^2\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x$$
$$=-\frac{1}{2}\left\langle\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right\rangle_n.$$
合起来有$\left\langle\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right\rangle_n=0$。

3. 对于一维自由粒子，设$\psi(x,0)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\exp(ip_0x/\hbar)$，求$\psi(x,t)$。

解　自由粒子的能量本征函数为平面波，满足
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi_k}{\mathrm{d}x^2}=E_k\psi_k,\qquad \psi_k=e^{ikx},\qquad E_k=\frac{\hbar^2k^2}{2m}.$$
粒子波函数可以用若干能量本征态的叠加表示
$$\psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\phi(k)e^{ikx}\mathrm{d}k\,,$$
$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\phi(k)e^{ikx-i\hbar k^2t/2m}\,\mathrm{d}k.$$
粒子具有确定的动量p_0，波函数为能量本征态，则
$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ip_0x/\hbar-ip_0^2t/2m\hbar}.$$

4. 对于一维自由粒子，设$\psi(x,0)=\delta(x)$，求$|\psi(x,t)|^2$。
提示：利用 Fresnel 积分公式
$$\int_{-\infty}^{\infty}\cos(\xi^2)\,\mathrm{d}\xi=\int_{-\infty}^{\infty}\sin(\xi^2)\,\mathrm{d}\xi=\sqrt{\frac{\pi}{2}},$$
或
$$\int_{-\infty}^{\infty}\exp(i\xi^2)\,\mathrm{d}\xi=\sqrt{\pi}\exp(i\pi/4).$$
解　粒子波函数可以用若干能量本征态（平面波）的叠加表示，
$$\psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\phi(k)e^{ikx}\mathrm{d}k\,,$$
$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\phi(k)e^{ikx-i\hbar k^2t/2m}\,\mathrm{d}k.$$
利用傅里叶展开，可以得到粒子初态的能量本征态展开系数
$$\phi(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi(x,0)e^{-ikx}\mathrm{d}x$$
$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x)e^{-ikx}\mathrm{d}x=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}.$$
则
$$\psi(x,t)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}e^{ikx-i\frac{\hbar k^2}{2m}t}\mathrm{d}k.$$

由$\int_{-\infty}^{\infty}\exp(i\xi^2)\,\mathrm{d}\xi = \sqrt{\pi}\exp\left(\frac{i\pi}{4}\right)$，$\int_{-\infty}^{\infty}\exp(-i\xi^2)\,\mathrm{d}\xi = \sqrt{\pi}\exp\left(-\frac{i\pi}{4}\right)$，

$$\psi(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\left(\sqrt{\frac{\hbar t}{2m}}k-\sqrt{\frac{m}{2\hbar t}}x\right)^2+i\frac{m}{2\hbar t}x^2}\,\mathrm{d}k$$

$$= \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{2m}{\hbar t}}e^{i\frac{m}{2\hbar t}x^2}\sqrt{\pi}e^{-i\frac{\pi}{4}} = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar t}}e^{i\frac{mx^2}{2\hbar t}-i\frac{\pi}{4}},$$

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{m}{2\pi\hbar t}.$$