# 第二周习题

1. 设$V(-x)=V(x)$，则对应于任何一个能量本征值$E$，总可以找到方程$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi+V(x)\psi=E\psi$的一组完备的解，它们中每一个都具有确定的宇称（奇偶性）。（注意，每一个解的宇称并不一定相同。）

   证明

   假设$\psi(x)$为定态薛定谔方程的一个解，属于能量$E$。当$x\to -x$时，$\frac{\mathrm{d}^2}{[\mathrm{d}(-x)]^2}=\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x}$，按假设$V(-x)=V(x)$，所以定态薛定谔方程化为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(-x)+V(x)\psi(-x)=E\psi(-x),$$

   可见$\psi(-x)$也是方程的一个解，也属于$E$。我们可以构造下列具有确定宇称的波函数

$$f(x)=\psi(x)+\psi(-x)=f(-x),$$
$$g(x)=\psi(x)-\psi(-x)=-g(-x),$$

   $f(x)=f(-x)$具有偶宇称，$g(x)=-g(-x)$具有奇宇称。$f(x)$与$g(x)$也是方程的解，属于$E$。而$\psi(x)$与$\psi(-x)$（同属于$E$）均可用$f(x)$和$g(x)$线性叠加来表示，即

$$\psi(x)=\frac{1}{2}[f(x)+g(x)],$$

$$\psi(-x)=\frac{1}{2}[f(x)-g(x)],$$

   定理得证。

2. 设粒子限制在一维无限深势阱中运动，

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

   解的形式为

$$\psi(x)=A\sin kx+B\cos kx\,, k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}},$$

   由$x=0$和$x=a$处的边界条件可得$B=0, k_n=\frac{n\pi}{a}, n=1,2,3,\cdots$，确定定态波函数中系数$A$的值。

   由归一化条件

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x)|^2\mathrm{d}x=1,$$

   可得

$$\int_0^a A^2\sin^2 kx\,\mathrm{d}x=1,$$

$$\Rightarrow A^2\int_0^a\left(\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\cos 2kx\right)\mathrm{d}x=A^2\left(\frac{a}{2}-\frac{1}{2}\cos 2n\pi+\frac{1}{2}\right)=\frac{aA^2}{2},$$

$$A=\sqrt{\frac{2}{a}}.$$

3. 设粒子限制在二维无限深势阱中运动，

$$V(x,y)=\begin{cases}0, & 0<x<a,0<y<b\\ \infty, & \text{其他地方}\end{cases}$$

求粒子能量允许值和相应的波函数。

提示：二维无限深势阱可改写为

$$V(x,y)=V_a(x)+V_b(y),$$

$$V_a(x)=\begin{cases}0, & 0\le x\le a\\ \infty, & x<0,x>a\end{cases},\quad V_b(y)=\begin{cases}0, & 0\le y\le b\\ \infty, & y<0,y>b\end{cases}$$

然后用分离变量法求解。

因二维无限深势阱可写为$V(x,y)=V_a(x)+V_b(y)$，可用分离变量法，设$\psi(x,y)=\psi_a(x)\psi_b(y)$，满足的方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\psi_a(x)\psi_b(y)+[V_a(x)+V_b(y)]\psi_a(x)\psi_b(y)=E\psi_a(x)\psi_b(y),(1)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2\,\partial^2}{2m\partial x^2}+V_a(x)\right]\psi_a(x)\psi_b(y)=E_a\psi_a(x)\psi_b(y),\qquad(2)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2\,\partial^2}{2m\partial y^2}+V_b(y)\right]\psi_a(x)\psi_b(y)=E_b\psi_a(x)\psi_b(y),\qquad(3)$$

$$E=E_a+E_b.\qquad(4)$$

方程(2)中$\psi_a(x)$的解可以表示为

$$\psi_a(x)=A\sin kx+B\cos kx,\qquad k=\sqrt{\frac{2mE_a}{\hbar^2}},\qquad(5)$$

对于无限深势阱，要求波函数在阱壁上及阱壁外为 0，可以得到

$$B=0,\qquad \sin kx=0,\qquad(6)$$

$$k_n=\frac{n\pi}{a},\qquad E_{an}=\frac{\pi^2\hbar^2n^2}{2ma^2},\qquad n=1,2,3,\cdots\qquad(7)$$

利用归一化条件可得

$$\psi_a(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right).\qquad(8)$$

同理方程(3)中$\psi_b(y)$的解为

$$\psi_b(y)=\sqrt{\frac{2}{b}}\sin\left(\frac{n\pi}{b}y\right),\qquad E_{bn}=\frac{\pi^2\hbar^2n^2}{2mb^2},\qquad n=1,2,3,\cdots\qquad(9)$$

因此粒子能量$E=E_a+E_b$的允许值为

$$E_{n_1n_2}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{a^2}+\frac{n_2^2}{b^2}\right),\quad n_1,n_2=1,2,3,\cdots$$

相应的波函数为

$$\psi_{n_1 n_2}(x,y)=\sqrt{\frac{4}{ab}}\sin\left(\frac{n_1\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{n_2\pi}{b}y\right).$$

4. 利用 Hermite 多项式$H_n(\xi)=(-1)^n e^{\xi^2}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}\xi^n}e^{-\xi^2}$的递推关系

$$H_{n+1}(\xi)-2\xi H_n(\xi)+2nH_{n-1}(\xi)=0,$$

求证

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

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

（由此可证明在$\psi_n$态下，谐振子的$\bar{x}=0,\quad \bar{V}=E_n/2$。）

证 根据波函数的形式

$$\psi_n(x)=\left(\frac{\alpha}{2^n\sqrt{\pi}n!}\right)^{\frac{1}{2}}H_n(\alpha x)e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2},\alpha=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}},$$

$$\psi_{n+1}(x)=\sqrt{\frac{1}{2(n+1)}}\left(\frac{\alpha}{2^n\sqrt{\pi}n!}\right)^{\frac{1}{2}}H_{n+1}(\alpha x)e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2},$$

$$\psi_{n-1}(x)=\sqrt{2n}\left(\frac{\alpha}{2^n\sqrt{\pi}n!}\right)^{\frac{1}{2}}H_{n-1}(\alpha x)e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2},$$

由

$$[H_{n+1}(\alpha x)-2\alpha xH_n(\alpha x)+2nH_{n-1}(\alpha x)]\left(\frac{\alpha}{2^n\sqrt{\pi}n!}\right)^{\frac{1}{2}}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}=0,$$

$$\Rightarrow\sqrt{2(n+1)}\psi_{n+1}(x)-2\alpha x\psi_n(x)+\sqrt{2n}\psi_{n-1}(x)=0,$$

即

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

根据此递推关系有

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

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

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