

# 量子力学习题集

马祥芸

August 28, 2022

## Contents

<b>1</b>	<b>薛定谔方程与一维定态问题</b>	<b>2</b>
1.1	一维有限势场	2
1.2	一维 $\delta$ 势	3
1.3	一维分段无限深势阱	3
1.4	半壁无限深势阱	3
1.5	复合势: $\delta(x)$ 和阶梯势	3
1.6	复合势: $\delta(x)$ 和阶梯势	4
1.7	复合势: $\delta(x)$ 和 harmonic 势	4
1.8	反比例势: 合流超几何函数	4
1.9	氢原子势能	4
1.10	反比例势能	4
1.11	已知波函数与 $V(x)$ 的极限	4
1.12	已知波函数与 $V(x)$ 的均值	4
<b>2</b>	<b>力学量算符</b>	<b>5</b>
<b>3</b>	<b>表象</b>	<b>5</b>
<b>4</b>	<b>三维定态问题</b>	<b>5</b>
<b>5</b>	<b>近似方法</b>	<b>5</b>
<b>6</b>	<b>自旋</b>	<b>5</b>
<b>7</b>	<b>全同粒子体系</b>	<b>5</b>
<b>8</b>	<b>散射</b>	<b>5</b>

# 1 薛定谔方程与一维定态问题

## 1.1 一维有限势场

定理 1.1. 势函数具有偶对称  $V(x) = V(-x)$ ,  $\psi(x)$  和  $\psi(-x)$  均是波函数的解

证明.

$$\frac{d^2}{[d(-x)]^2} = \frac{d^2}{dx^2}$$

□

定理 1.2. 设  $V(x) = V(-x)$ , 每一个  $\psi(x)$  都有确定的宇称 (奇偶性) (注意每一个解的宇称可以不相同)

证明. 由于定理 1.1, 构造

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

$$g(x) = \psi(x) - \psi(-x)$$

$f(x)$  为偶宇称,  $g(x)$  为奇宇称, 它们均为能量  $E$  的解  
而  $\psi(x)$  与  $\psi(-x)$  都可以用  $f(x)$  和  $g(x)$  表示

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

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

□

推论 1. 设  $V(-x) = V(x)$ , 而且对应于能量本征值  $E$ , 方程的解无简并, 则该能量本征态必有确定的宇称, 例如一维

谐振子, 一维对称方势阱

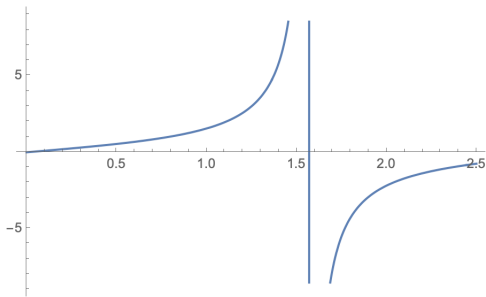
- 若  $E$  非简并 本征函数具有确定宇称 (两种宇称)

$$\psi(-x) = \hat{P}\psi(x) = c\psi \quad c = \pm 1$$

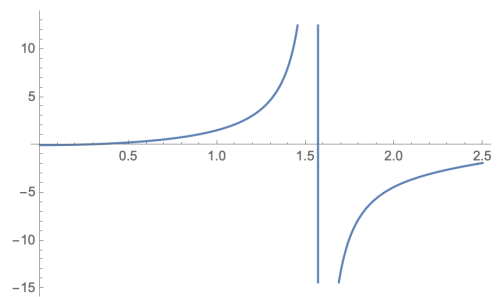
- 若  $E$  简并  $\psi(x)$  和  $\psi(-x)$  分别为独立的波函数, 它们的线性组合是具有宇称的解

$$\psi_{\pm}(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi(x) \pm \psi(-x)]$$

偶宇称涉及到的函数图像如下

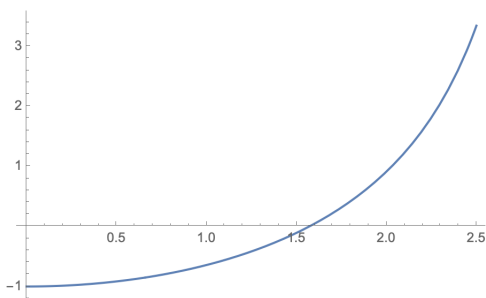


(a)  $y = \tan x$

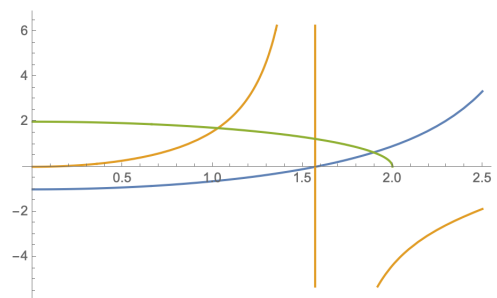


(b)  $y = x \tan x$

奇宇称涉及到的函数图像如下



(a)  $y = -x \cot x$



(b) 三个函数曲线

由于此题的势能函数具有偶对称, 因此波函数可能存在偶 or 奇宇称 (需要分开讨论), 此题中偶宇称至少存在一个交点, 而奇宇称有解必须有条件  $Q > \frac{\pi}{2}$ , 由题意可知存在且仅存在一个束缚态, 所以保留偶宇称的唯一解即可 ( $Q < \frac{\pi}{2}$ )

## 1.2 一维 $\delta$ 势

先不考虑  $x \neq 0$  的局部区域, 丢掉  $\delta(x)$  势阱, 需要用到一阶微分变化值的关系

$$\Delta\left(\frac{d\psi}{dx}\right) = \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \frac{\hbar^2}{2\mu} V(x)\psi(x)dx$$

注意不要丢了  $\delta(x)$  前面的参数, 需要用到其积分性质

$$\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \delta(x)\psi(x)dx = \psi(0)$$

在归一化中, 由于在  $x \neq 0$  其他的区域的波函数具有对称性, 对其中一边积分时其值为  $\frac{1}{2}$

$$\int_0^{+\infty} A^2 e^{-2kx} dx = \frac{1}{2}$$

## 1.3 一维分段无限深势阱

此题的特点是  $x = 0$  处的  $V(x)|_{x=0} = \infty$ , 与  $\delta(x)$  势不一样的是, 虽然在此处的势能大小都是为  $\infty$ , 但是前者的  $\psi(0) = 0$  (也因此  $\Delta\frac{d\psi}{dx}=0$ , 连续) 而后者并不为  $\psi(0) \neq 0$ , 所以  $\delta(x)$  势通常在此点并不连续。

当然由于  $V(x)$  具有偶对称性, 波函数同样具有确定的宇称, 现假设两个排除 0 点的波函数解分别为

$$\psi_1(x) = B \sin(kx) \quad (0 < x < a) \quad \psi_2(x) = D \sin(kx) \quad (-a < x < 0)$$

给两种方法通过宇称判断系数关系

- 全局判断法  
若  $\psi(x)$  在  $|x| < a$  上为奇宇称, 那么恰好为正弦函数  $\sin(kx)$  (奇函数) 的形式  $\Rightarrow B = D$
- 定义法  
由奇宇称的定义  $\psi(x) = -\psi(-x) \Rightarrow B \sin(kx) = -D \sin(-kx) = D \sin(kx) \Rightarrow B = D$

最后需要注意  $n$  的取值范围, 应该是从  $n = 1, 2, 3 \dots$  不能从 0 开始因为  $ka = 0 \Rightarrow k = 0$  (能量为 0) 可能在归一化中需要用到的三角函数数学公式

$$\sin(x+y) = \sin x \cos y + \sin y \cos x \quad \cos(x+y) = \cos x \cos y - \sin x \sin y$$

$$\sin(2x) = 2 \sin x \cos x \quad \cos(2x) = \cos^2 x - \sin^2 x$$

$$\sin^2 x = \frac{1 - \cos(2x)}{2} \quad \cos^2 x = \frac{1 + \cos(2x)}{2}$$

## 1.4 半壁无限深势阱

再次遇到  $y = -x \cot x$ , 记忆关键点的方式可以通过极限来记忆

$$\lim_{x \rightarrow 0} -x \cot x = \lim_{x \rightarrow 0} -\frac{x}{\sin x} + \lim_{x \rightarrow 0} \cos x = -1 \times 1 = -1$$

$$\lim_{x \rightarrow \frac{\pi}{2}} -x \cot x = \lim_{x \rightarrow \frac{\pi}{2}} -\frac{x}{\sin x} + \lim_{x \rightarrow \frac{\pi}{2}} \cos x = -\frac{\pi}{2} \times 0 = 0$$

最后在此题中可变参量为  $a$  与  $V_0$ , 最好化简为不等式一边仅有可变参量, 正如

$$V_0 a^2 \geq \frac{\pi^2 \hbar^2}{8\mu}$$

## 1.5 复合势: $\delta(x)$ 和阶梯势

注意任何含有  $\delta(x)$  的势场其束缚态能量必然是负数, 所以  $E < 0$ , 明确这一点再求解, 同样  $x = 0$  处波函数不连续, 在求一阶微分关系时不要忘记  $\delta(x)$  前面的的所有系数此题束缚态条件比较特殊, 是可解析的等式, 不需要两个方程联立作图求解, 最后保证一方为根式, 另一方包含所有可变参量并要求  $> 0$  即可. 同时在最后的归一化过程中需要全空间积分为 1 (不是对称函数).

## 1.6 复合势: $\delta(x)$ 和阶梯势

此题直接带入波函数的连续性条件得到的方程组是难以求解的, 因此需要特殊技巧

- 获得奇宇称的解, 先无视  $\delta(x)$  势, 采用无限深方势阱的解, 只取在  $x = \frac{a}{2}$  的有效解
- 获得偶宇称解重点在于  $\psi_2(a) = 0$ , 所以不妨让  $\psi_2(x) = A \sin(x - a)$ , 同时在  $x = \frac{a}{2}$  处连续得到  $\psi(x) = -A \sin(x - a)$ , 它是很容易验证在关于  $x = \frac{a}{2}$  对称的.(设对称轴为  $x = b$ )

$$\psi_1(b - x) = \psi_2(b + x) \Rightarrow b = \frac{a}{2}$$

注意在求第一激发态的时候还没有考虑  $a \rightarrow 0$ , 所以对于偶宇称的解的最低能量是在某一个区间, 需要把两种宇称解的最低能量进行对比.

## 1.7 复合势: $\delta(x)$ 和谐振子势

加入  $\delta(x)$  后需要重新考虑  $x = 0$  的一阶连续情况, 也就是  $\psi(0)$  的值, 若  $\psi(0) = 0$  则原来的解仍成立反之不成立, 所以带入  $x = 0$  后发现有  $H(0) = 0$  即可, 事实上仅有  $n = 1, 3, 5 \cdots$  成立

## 1.8 反比例势: 合流超几何函数

关键点

- 整理微分方程形如  $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - k^2\psi(x) + \frac{\beta}{x}\psi(x)$
- 带入  $\psi(x) = xe^{-kx}F(x)$  进一步整理微分方程
- 变量代换  $\xi \rightarrow 2kx$  进一步整理微分方程
- 形如  $\xi \frac{d^2F(\xi)}{d\xi^2} + (\gamma - \xi) \frac{dF(\xi)}{d\xi} - \alpha F(\xi) = 0$

$$E = -|E| \quad \beta = \frac{2\mu a}{\hbar^2} \quad \gamma = 2 \quad \alpha = 1 - \frac{\beta}{2k} = 1 - \frac{\mu a}{k\hbar^2}$$

$$\psi(\xi) = A\xi e^{-\frac{\xi}{2}} F(\alpha, \gamma, \xi)$$

一般不考, 记得反比例势能的解和合流超几何方程有关就行了, 其解为合流超几何函数, 此题和 1.9, 1.10 的差不多

## 1.9 氢原子势能

见1.8题

## 1.10 反比例势能

见1.8题

## 1.11 已知波函数与 $V(x)$ 的极限

此题具有启发性, 当已知波函数时, 那么波函数的二阶导数同样已知, 因此 Schrödinger 方程的未知数仅有  $V(x)$  与  $E$ , 可以得到  $V(E, x)$  方程, 在利用额外条件进行求解, 此题为  $x \rightarrow +\infty \quad V \rightarrow 0$ , 可以解得  $E$ , 再求解  $V(x)$

求导的时候需要小心, 此题的二阶导一共有 4 项

## 1.12 已知波函数与 $V(x)$ 的均值

同题目1.11类似, 不过给出另一个已知条件是  $\langle \psi | V | \psi \rangle = 0$ , 记住利用这类已知条件时不要贸然带入波函数进行求解, 应该凑题目条件, 同时获得一个经验就是能量  $E$  是与坐标变量无关的, 通常是优先求的, 其次在得到  $\int \psi^* E \psi dx$  后不要变成  $\bar{E}$ , 能量的平均值和定态能量并不是同一个东西.

- 2 力学量算符
- 3 表象
- 4 三维定态问题
- 5 近似方法
- 6 自旋
- 7 全同粒子体系
- 8 散射