量子力学习题集

马祥芸

August 28, 2022

Contents

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

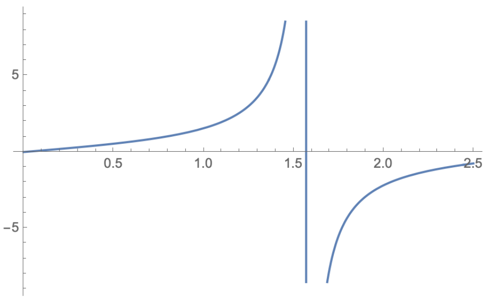
- *若 E 非简并　本征函数具有确定宇称 (两种宇称)*

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

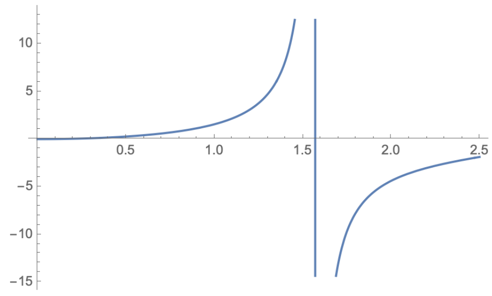
- *若 E 简并　$\psi(x)$ 和 $\psi(-x)$ 分别为独立的波函数，它们的线性组合是具有宇称的解*

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

偶宇称涉及到的函数图像如下

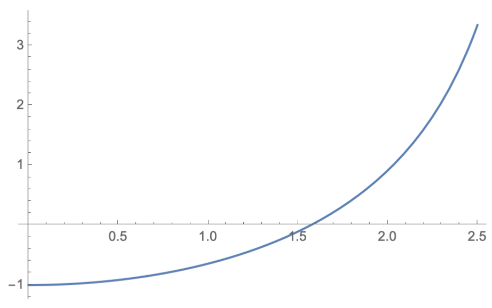


(a) $y = \tan x$

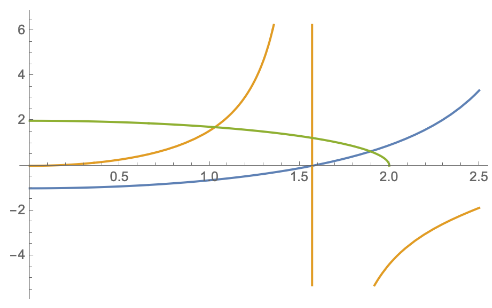


(b) $y = x \tan x$

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 δ 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

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

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 ∞, 但是前者的 $\psi(0) = 0$(也因此 $\triangle\frac{d\psi}{dx}$=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 $n = 1, 2, 3\cdots$ 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

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

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

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 $x=b$)

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

注意在求第一激发态的时候还没有考虑 $a\to 0$, 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 $x=0$ 后发现是 $H(0)=0$ 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 $\xi\to 2kx$ 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 $x\to+\infty \quad V\to 0$, 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