量子力学习题集

马祥芸

September 1, 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*

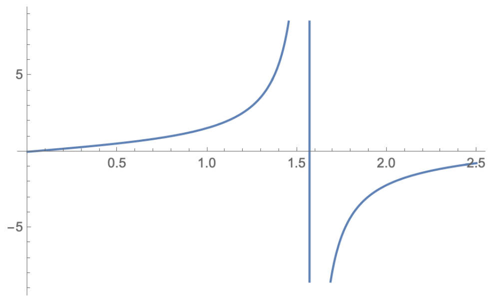
- 若 E 非简并　本征函数具有确定宇称 (两种宇称)

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

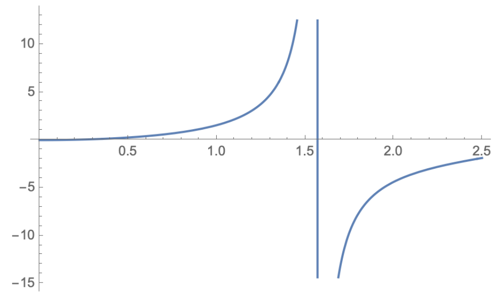
- 若 E 简并　$\psi(x)$ 和 $\psi(-x)$ 分别为独立的波函数，它们的线性组合是具有宇称的解

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

偶宇称涉及到的函数图像如下

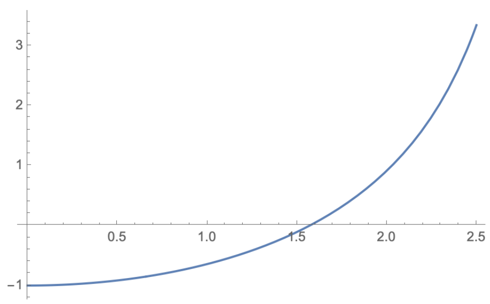


(a) $y = \tan x$

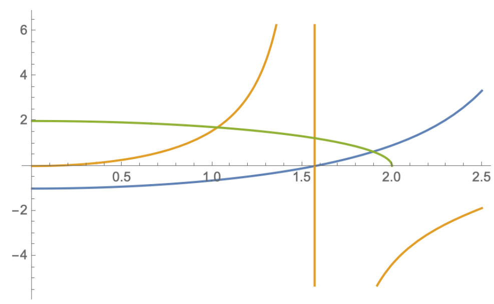


(b) $y = x\tan x$

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.

1.13 已知能量与势能的关系

求解过程中注意三角函数的周期性

$$\arctan{(-1)}=-\frac{\pi}{4}+n\pi \quad (n=1,2,3\cdots)$$

1.14 已知两能量的本征态

此题的关键点

- 两个有能量的本征态具有正交性

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_1^*(x)\psi_2(x)=0$$

但是直接利用以上正交关系来直接求得 b,c 是复杂又难以实现的, 我们需要额外的关系来先求得一个参数化简第二个波函数.

由于 $\psi_1(x)$ 的信息是完全可知的, 因此我们需要利用它来获得关于 $V(x)$ 的信息, 本题可得到 $V(x)$ 具有偶对称性, 因此我们可以化简 $\psi_2(x)$, 只能存在一个偶宇称即 $b=0$.

这个积分可拆分成如下两个积分

$$\int_{-\infty}^{+\infty}ce^{-\beta x^2}dx \quad + \quad \int_{-\infty}^{+\infty}x^2e^{-\beta x^2}dx=0 \quad (1)$$

这两个积分相当典型, 在后面使用高斯试探函数经常会遇到此类积分, 现总结

1.
$$\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-a(x+b)^2}dx=\sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

证明.

$$I=\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-ax^2}dx$$

$$I^2=\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-a(x^2+y^2)}dxdy$$

令 $x=r\cos\theta \quad y=r\sin\theta$

$$I^2=\int_0^{+\infty}\int_0^{2\pi}e^{-ar^2}rdrd\theta$$

$$\begin{aligned}I^2&=\int_0^{+\infty}\pi e^{-ar^2}d(r^2)\\&=\frac{\pi}{a}\Longrightarrow I=\sqrt{\frac{\pi}{a}}\end{aligned}$$

□

2.
$$\int_{-\infty}^{+\infty}x^2e^{-ax^2}dxdx=\frac{1}{2a}\sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

特别的当 $n=1,3,5,7\cdots$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}x^ne^{-ax^2}dxdx=0$$

证明.

$$\frac{d(e^{-ax^2})}{dt}=-2axe^{-ax^2}$$

$$\begin{aligned}I&=-\frac{1}{2a}\int_{-\infty}^{+\infty}xd(e^{-ax^2})\\&=-\frac{1}{2a}(xe^{-ax^2}\Big|_{-\infty}^{+\infty}-\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-ax^2}dx)\end{aligned}$$

洛必达法则

$$\lim_{x\to\pm\infty}xe^{-x^2}=\frac{1}{2xe^{x^2}}\Big|_{x\to\pm\infty}=0^+ \quad and \quad 0^-$$

$$I=\frac{1}{2a}\sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

□

3. 表格积分法 (处理复杂分部积分函数): 被积函数的结构为—(多项式)(函数) (本质是分部积分)

$$\int(x^2+x)e^{3x}dx \quad \int x(x-a)\sin 2x \quad \int e^{3x}\sin 2xdx$$

记为 $f(x)$ $g(x)$

$f(x)$	$f'(x)$	$f''(x)$	$\cdots$	0
$g(x)$	$\int g(x)dx$	$\iint g(x)dxdx$	$\cdots$	$\iiint\ldots$

第二行的项数与第一行保持一致, 共计 [n,n]
$+(1,2)-(2,3)+(3,4)-(4,5)\cdots+c$
注意:(i,i+1) 表示第一行第 i 个元素 $\times$ 第二行的第 $(i+1)$ 个元素, 每一个乘积前的正负号为 [+,-,+,...] 交替, 同时不要漏掉积分常数 c, 如果第一行的函数无法求导到 0, 求导直到出现原函数的常数倍也可以.($\int e^{3x}\sin 2xdx$ 的积分第一行第三项为原函数的 $-\frac{9}{4}$ 倍)

回到原积分 $I_1+I_2=0$, 第一个积分值很容易知道为 $c\sqrt{\frac{\pi}{\beta}}$, 第二个积分值为 $\frac{1}{2\beta}\sqrt{\frac{\pi}{\beta}}$, 求得 $c=-\frac{1}{2\beta}$

方程 (9) 带入波函数求解复杂, 需要细心, 其中有一部需要分解因式 (具有启发性, 二阶导为原函数的一个多项式倍)

$$\begin{aligned}\frac{\psi_2''(x)}{\psi_2(x)}&=\frac{\beta(2\beta^2x^4-11\beta x^2+5)}{2\beta x^2-1}\\&=\frac{\beta(2\beta x^2-1)(\beta x^2-5)}{2\beta x^2-1}\\&=\beta(\beta x^2-5)\end{aligned}$$

1.15 圆圈运动

此题的 x 是以圆环的外周长为度量的, 需要变换波函数的变量便于求解 $x=R\varphi$, 因此 $\frac{d}{dx^2}=\frac{1}{R^2d\varphi^2}$

此时 $V(x)=a\delta(x-L/2)\Longrightarrow V(\varphi)=a\delta[R(\varphi-\pi)]$ 值得注意的一个 $\delta(x)$ 的缩放性质

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(Rx)dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{1}{R}\delta(Rx)d(Rx)=1\Longrightarrow\delta(Rx)=\frac{1}{R}\delta(x)$$

所以我们得到新的势函数 $V(\varphi)=\frac{a}{R}\delta(\varphi-\pi)$, 在求解过程中不使用三角函数解, 使用复幂指数的解更合适 (涉及角度), $\psi(x)=Ae^{-ik\varphi}+Be^{ik\varphi}$

连续性条件发生变化, 发散点为 $\varphi=\pi$, 实际上第三个条件和第一个条件给出的结论是一样的, 而第二个条件往往是被忽略的

$$\psi_1(0)=\psi_2(2\pi) \quad \psi_1'(0)=\psi_2'(2\pi) \quad \psi_1(\pi)=\psi_2(\pi)$$

由前两个条件可以得到如下两个方程组

$$A+B=C+D \tag{1}$$
$$A-B=C-D \tag{2}$$

容易解出 $A=C$ 带入方程 $(1)or(2)$ 会得到 $B=D$,A 与 B 的关系需要一阶波函数在 $\varphi=\pi$ 的连续性关系解出, 之后我们需要再将复幂指数的解在返回三角函数形式并归一化得到

$$\psi(x)=\sqrt{\frac{1}{\pi}}\sin m\varphi$$

存在一个隐藏的周期性边界条件限制 m 的取值

$$\psi(\varphi)=\psi(\varphi+2\pi)\Longrightarrow 2m\varphi=2n\pi \quad (n=1,2,3,4\cdots)\Longrightarrow m=1,2,3,4\cdots$$

由此我们可以反解出

$$E_n=\frac{\hbar^2m^2}{2\mu R^2} \quad (m=1,2,3,4\cdots)$$

1.16 改变哈密顿量求本征值 (表象变换)

此题的关键在于表象的变换, 由坐标表象转化到动量表象 (详见曾书 P_{151} 和 P_{281-6})

$$\hat{\boldsymbol{x}} = i\hbar\frac{\partial}{\partial\hat{\boldsymbol{p}}}$$

证明.

$$\psi_p(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{n}{2}}}e^{\frac{ipx}{\hbar}}$$

$$\delta(x) = \frac{1}{(2\pi)^n}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ipx}dp$$

$$\delta(p) = \frac{1}{(2\pi)^n}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ipx}dx$$

n 为维数, 这里取 1 进行证明, 证明前须知
内积 $\langle x|\psi\rangle$ 就是波动力学的波函数

$$\psi(x) \xlongequal{def} \langle x|\psi\rangle$$

进一步可知动量在坐标表象下即为动量波函数

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{n}{2}}}e^{\frac{ipx}{\hbar}}$$

$$\langle p|x\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{n}{2}}}e^{\frac{-ipx}{\hbar}}$$

算符 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 在坐标表象下的形式为 x, 同理算符 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 在动量表象下为 p

$$\hat{\boldsymbol{x}}|x\rangle = x|x\rangle \quad \hat{\boldsymbol{p}}|p\rangle = p|p\rangle$$

关于 δ 函数

$$\langle x'|x\rangle = \delta(x'-x)$$

坐标算符在自己坐标表象下的矩阵元

$$x_{x'x''} = \langle x'|\hat{\boldsymbol{x}}|x''\rangle = x'\langle x'|x''\rangle = x'\delta(x'-x'')$$

$$\begin{aligned}
x_{p'p''} &= \langle p'|x|p''\rangle \\
&= \langle p'|x'\rangle\langle x'|x|x''\rangle\langle x''|p''\rangle \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)}\iint e^{\frac{-ip'x'}{\hbar}}e^{\frac{ip''x''}{\hbar}}x'\delta(x'-x'')dx'dx'' \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)}\int x'e^{\frac{-ix(p'-p'')}{\hbar}}dx' \\
&= \frac{1}{(2\pi)}\int x'e^{-i(p'-p'')\frac{x}{\hbar}}d(\frac{x'}{\hbar})
\end{aligned}$$

积分内恰好出现了一个 x' 也就是坐标算符

$$\frac{\mathrm{d}e^{\frac{-ix(p'-p'')}{\hbar}}}{\mathrm{d}p'} = -\frac{i}{\hbar}e^{\frac{-ix(p'-p'')}{\hbar}}$$

$$e^{\frac{-ix(p'-p'')}{\hbar}} = i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p'}e^{\frac{-ix(p'-p'')}{\hbar}}$$

因此

$$\begin{aligned}
\frac{1}{(2\pi)}\int x'e^{\frac{-ix(p'-p'')}{\hbar}}dx' &= \frac{1}{(2\pi)}i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p'}2\pi\delta(p'-p'') \\
&= i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p'}\delta(p'-p'')
\end{aligned}$$

有了矩阵元后,考虑算符的一般作用

$$|\varphi\rangle = \hat{\boldsymbol{x}}\,|\psi\rangle \Longrightarrow \langle p|\varphi\rangle = \langle p|\hat{\boldsymbol{x}}|\psi\rangle \Longrightarrow \varphi_p = \int dp' x_{pp'}\psi_{p'}$$

$$\varphi_{p'} = \int dp''[x_{p'p''}]\psi_{p''} = \int dp''[i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p'}\delta(p'-p'')]\psi_{p''} = i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p'}\psi_{p'}$$

□

1.17 期望值问题

此题涉及到两种绘景的选择: 薛定谔绘景和海森堡景

- **薛定谔绘景**
  此绘景下,负责时间演化的算符是一种幺正算符 ($UU^* = U^*U = I_n \quad U^{-1} = U^*$),态向量 $|\psi(0)\rangle_s$,经过时 t,演化到 $|\psi(t)\rangle_s$,演化方程表示为

$$|\psi(t)\rangle_s = U(t,0)\,|\psi(0)\rangle_s$$

  $U(t,0)$ 是时间从 0 流易到 t 的时间演化算符 (或者写为时间 t_0),是幺正算符,假设系统哈密顿量 H 不含时间,则时间演化算符为

$$U(t,0) = e^{\frac{-iHt}{\hbar}}$$

  而且时间演化算符与哈密顿量对易,注意指数函数 $e^{\frac{-iHt}{\hbar}}$ 必须通过泰勒级数进行计算
- **海森堡绘景**
  态向量 $|\psi(t)\rangle_H$,算符 $A_H(t)$ 的定义分别为

$$|\psi(t)\rangle_H \xlongequal{def} |\psi(0)\rangle_H = |\psi(0)\rangle_s$$

$$A_H(t) \xlongequal{def} U^\dagger(t,0)A_sU(t,0)$$

  时间演化算符对时间的偏导数为

$$\frac{\partial U(t,0)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}HU(t,0)$$

$$\frac{\partial U^\dagger(t,0)}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar}U^\dagger(t,0)H$$

  所以算符 $A_H(t)$ 对时间的导数为

$$\frac{\mathrm{d}A_H(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}[U^\dagger A_sU, U_\dagger HU]$$

  不含时间的哈密顿量在两种绘景下完全一样

$$H_H = U^\dagger H_sU = H_s = H$$

  将算符的定义纳入考虑,得到海森堡运动方程

$$\frac{\mathrm{d}A_H(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}[A_H(t),H]$$

$$\frac{\mathrm{d}<A_H(t)>}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}\overline{[A_H(t),H]}$$

  宁外在解题过程中需要用到一个特殊的对易关系

$$[\hat{\boldsymbol{x}}, F(\hat{\boldsymbol{p}})] = i\hbar F'(\hat{\boldsymbol{p}}) \Longleftrightarrow [\hat{\boldsymbol{x}}, \hat{\boldsymbol{p}}^n] = i\hbar n\hat{\boldsymbol{p}}^{n-1}$$

1.18 转子势能突变

自由转子和自由粒子的解的形式相似

$$\psi = Ae^{-imx} + Be^{imx}$$

通常两个传播方向会将其合并

$$\psi_m = Ae^{imx}$$

但是自由转子具有周期性边界条件 $\psi(x) = \psi(x + 2\pi)$ 因此使得 m 的取值只有整数 $m = 0, \pm1, \pm2, \pm3 \cdots$, 也正因为是分立指标, 所以和自由粒子有所不同, 可以简单的写成求和.

波函数由多个波函数线性组合而成

$$\psi(\varphi, t) = \sum_m c_m \psi_m(\varphi) U(t, 0)$$

所以题目要求我们求出处于新的能量基态概率 $|c_0|^2$, 因此我们先要求出 c_m, 事实上它是由初始条件决定的 (初始波函数)

同样的在我们已知了初始波函数与初始能量, 初始波函数仍然可以用 $\psi_m(\varphi)$ 展开 $(t = 0, U(0, 0) = 1)$

$$\psi(\varphi, 0) = \sum_m c_m \psi_m(\varphi)$$

$$\psi_n^*(\varphi)\psi(\varphi, 0) = \sum_m c_m \psi_n^*(\varphi)\psi_m(\varphi)$$

对其进行积分, 只留下了 c_m 项进行积分

$$\int \psi_m^*(\varphi)\psi(\varphi, 0) d\varphi = \int c_m \psi_m^*(\varphi)\psi_m(\varphi) d\varphi$$

$$c_m = \int_0^{\varphi_0} \psi_m^*(\varphi)\psi(\varphi, 0) d\varphi$$

令 $m = 0$

$$c_0 = \int_0^{\varphi_0} \sin\frac{\pi\varphi}{\varphi_0} d\varphi = \frac{2\varphi_0}{\pi\sqrt{\phi\varphi_0}}$$

$$|c_0|^2 = \frac{4\varphi_0}{\pi^3}$$

时间演化算符并不影响粒子处于某个态的概率, 因此当移除壁垒后概率仍旧以移除前的波函数作为初始状态 (初始条件), 这样将初始波函数展开 (移除后的波函数可解), 一些特定的系数可以求解 ($m \neq 0$ 无法求解)

1.19 谐振子势能突变

应该先将势场化为标准的谐振子形式 $V(x) = \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2$, 变 k 实际上是变 ω

$$P = \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0^*(\omega_2, x)\psi_0(\omega_1, x) dx \right|^2$$

实际上和上一题有异曲同工之秒, 总是拿目标基态和初始基态做内积就行了此题的不同点在于求平均能量, 需要用到粒子现在处的态 (波函数), 突然变化的势场会改变处于当前态的概率, 但波函数还来不及变化, 使用初始波函数即可 3 但哈密顿量 H(系数变了) 发生了变化, 不含时所以求解 $t = 0$ 时刻的能量平均值即可, 需要带入新的哈密顿量, 积分过程中和原积分进行比较 (动能没变, 势能变化)

一个重要结论在 $n = 0, 1$ 时动能和势能的期望值相等 (格里菲斯 $P_{33-2.11(c)}$)

$$< T > \quad = \quad < V >$$

建议记谐振子波函数的形式

$$\psi_n(\xi) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

$$\alpha = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}} \quad \xi = \alpha x$$

$$\psi_0(\xi) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

$$\psi_1(\xi) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} \sqrt{2}\xi e^{-\frac{\xi^2}{2}} \quad (H_0(\xi) = 2\xi)$$

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