《量子力学教程》课后习题——第二章 波函数和薛定谔方程

物理（4+4）1801　胡喜平　学号 U201811966

网站 https://hxp.plus/　邮件 hxp201406@gmail.com

2020 年 10 月 10 日

2.1　证明在定态中，概率流密度与时间无关。

解　定态波函数为

$$\psi\left(r,t\right)=\psi\left(r\right)\exp\left[-\frac{iE}{\hbar}t\right]$$

概率流密度为

$$\begin{aligned}J&=\frac{\hbar}{2i\mu}\left|\psi\left(r\right)\right|^2\nabla\ln\left\{\frac{\psi\left(r\right)}{\psi^*\left(r\right)}\exp\left[-\frac{2iE}{\hbar}t\right]\right\}=\frac{\hbar}{2i\mu}\left|\psi\left(r\right)\right|^2\nabla\left\{\ln\left[\frac{\psi\left(r\right)}{\psi^*\left(r\right)}\right]+\frac{2iEt}{\hbar}\right\}\\&=\frac{\hbar}{2i\mu}\left|\psi\left(r\right)\right|^2\nabla\ln\left[\frac{\psi\left(r\right)}{\psi^*\left(r\right)}\right]\end{aligned}$$

与时间无关。

2.2　由下列两定态波函数计算概率流密度。

$$\psi_1=\frac{1}{r}\exp\left[ikr\right]\qquad\qquad\psi_2=\frac{1}{r}\exp\left[-ikr\right]$$

从所得结果说明 ψ_1 表示向外传播的球面波，ψ_2 表示向内（即向原点）传播的球面波。

解

$$\vec{J_1}=\frac{\hbar}{2i\mu}\left|\psi\right|^2\nabla\ln\frac{\psi}{\psi^*}=\frac{\hbar}{2i\mu}\frac{1}{r^2}\nabla\left(2ikr\right)=\frac{\hbar k}{\mu r^2}\vec{e}_r$$

$$\vec{J_2}=\frac{\hbar}{2i\mu}\left|\psi\right|^2\nabla\ln\frac{\psi}{\psi^*}=\frac{\hbar}{2i\mu}\frac{1}{r^2}\nabla\left(-2ikr\right)=-\frac{\hbar k}{\mu r^2}\vec{e}_r$$

ψ_1 是沿着 $\vec{e}_r$ 方向传播的，ψ_2 是沿着 $\vec{e}_r$ 相反方向传播的。

2.3 一粒子在一维势场

$$U(x)=\begin{cases}\infty & x<0\\ 0 & 0\leq x\leq a\\ \infty & x>a\end{cases}$$

中运动，求粒子的能级和对应的波函数。

解 在 $0<x<a$ 时，薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}=E\psi$$

即

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}-\frac{\hbar^2}{2\mu E}\psi=0$$

设

$$\psi=A\cos\alpha x+B\sin\alpha x$$

代入解得

$$\psi=A\cos\alpha x+B\sin\alpha x \qquad \alpha=\sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}$$

由波函数连续条件

$$\psi|_{x=0}=\psi|_{x=a}=0$$

得到

$$A=0 \qquad B\sin\alpha a=0\Rightarrow\sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}=\alpha=\frac{n\pi}{a}\Rightarrow E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}n^2$$

由波函数归一化条件

$$\int_0^a\left[B\sin\frac{n\pi}{a}x\right]^2\mathrm{d}x=B^2\int_0^a\frac{1-\cos\dfrac{2n\pi}{a}x}{2}\mathrm{d}x=\frac{B^2}{2}a=1$$

解得

$$B=\sqrt{\frac{2}{a}}$$

因此波函数为

$$\psi_n\left(x\right)=\begin{cases}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x & 0<x<a\\ 0 & x<0,x>a\end{cases}$$

2.4 证明下式中的归一化因子是 $A'=\frac{1}{\sqrt{a}}$

$$\psi_n=\begin{cases}A'\sin\frac{n\pi}{2a}\left(x+a\right) & \left|x\right|<a\\ 0 & \left|x\right|\geq a\end{cases}$$

解

$$\int_{-a}^{a}\left[A'\sin\frac{n\pi}{a}\left(x+a\right)\right]^2\mathrm{d}x=\frac{A'^2}{2}\int_{-a}^{a}\left[1-\cos\frac{2n\pi}{a}\left(x+a\right)\right]\mathrm{d}x=A'^2a=1\Rightarrow A'=\frac{1}{\sqrt{a}}$$

2.5 求一维谐振子处在第一激发态时概率最大的位置。

解 对应能量 E_n 的波函数是

$$\psi_n\left(\xi\right)=N_n\exp\left[-\frac{\xi^2}{2}\right]H_n\left(\xi\right)\qquad \xi=\alpha x\qquad N_n=\left(\frac{\alpha}{\pi^{\frac{1}{2}}2^nn!}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$n=1$ 时

$$\psi_1\left(x\right)=\left(\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left[-\frac{\alpha^2}{2}x^2\right]\cdot 2\alpha x$$

概率为

$$w\left(x\right)=\left|\psi\left(x\right)\right|^2=\frac{2\alpha^3}{\sqrt{\pi}}x^2\exp\left[-\alpha^2x^2\right]$$

对概率求导数

$$\frac{\mathrm{d}w\left(x\right)}{\mathrm{d}x}=\frac{4\alpha^3}{\sqrt{\pi}}\left[x\left(1-\alpha^2x^2\right)\right]\exp\left[-a^2x^2\right]$$

$$\frac{\mathrm{d}^2w\left(x\right)}{\mathrm{d}x^2}=\frac{4\alpha^3}{\sqrt{\pi}}\left(2\alpha^4-5\alpha^2x^2+1\right)\exp\left[-\alpha^2x^2\right]$$

只有当 $x=\pm\frac{1}{\alpha}$ 时，$\frac{\mathrm{d}w\left(x\right)}{\mathrm{d}x}=0$ 且 $\frac{\mathrm{d}^2w\left(x\right)}{\mathrm{d}x^2}<0$，因此最大概率位置 $x=\pm\frac{1}{\alpha}$

2.6 在一维势场中运动的粒子，势能对原点对称：$U(-x)=U(x)$，证明粒子的定态波函数具有确定的宇称。

解 薛定谔方程为

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E-U(x)\right]\psi(x)=0$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(-x)}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E-U(x)\right]\psi(-x)=0$$

$\psi(x)$ 和 $\psi(-x)$ 是一个方程的解，它们的线性组合也是方程的解。因此下面两个方程是薛定谔方程的解

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

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

其中 $\psi_e(x)$ 是偶函数，$\psi_o(x)$ 是奇函数。因此有确定的宇称。

2.7 一粒子在一维深势阱

$$U(x)=\begin{cases}U_0>0 & |x|>a\\ 0 & |x|\le a\end{cases}$$

中运动，求束缚态（$0<E<U_0$）的能级所满足的方程。

解

2.8 分子间的范德瓦尔斯力所产生的势能可以近似地表示为

$$U(x)=\begin{cases}\infty & x<0\\ U_0 & 0\le x<a\\ -U_1 & a\le x\le b\\ 0 & b<x\end{cases}$$

求束缚态的能级所满足的方程。

解