Homework3 答案

1. 设粒子处于半壁无限高势阱中，一侧势能无穷大，另一侧为0，中间0-a范围里，$V(x) = -V_0$.试求至少存在一个束缚定态的条件和能级方程。
解: 设

$$V(x) = \begin{cases} \infty\ , & x < 0 \\ -V_0\ , & 0 < x < a \\ 0\ , & x > a \end{cases}$$

考虑$-V_0 < E < 0$情况。分三个区域讨论:

- $x < 0$，由于势能无穷大，$\psi = 0$
- $0 < x < a$，由Schrodinger方程

  $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) - V_0\psi(x) = E\psi(x) \tag{1}$$

  可取解为

  $$\psi(x) = Asin(kx + \delta) \tag{2}$$

  其中$k = \sqrt{2m(V_0 + E)}/\hbar$。
  利用$\psi(0) = 0$的边界条件，可知$\delta = 0$，所以

  $$\psi(x) = Asinkx \tag{3}$$

- $x > a$区域，有

  $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = E\psi(x) \tag{4}$$

  可取解为（考虑束缚态波函数在无穷远处为0）

  $$\psi(x) = Be^{-\beta x} \tag{5}$$

  其中$-\beta^2 = 2mE/\hbar^2$。
  再根据$x = a$处$(ln\psi)'$连续，可求出

  $$kcotka = -\beta \tag{6}$$

令$\zeta = ka$，$\eta = \beta a$ 上式可改写为

$$\eta = -\zeta cot\zeta \tag{7}$$

由于

$$\eta^2 + \zeta^2 = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} \equiv Q^2 \tag{8}$$

定态能量E由曲线在(η, ζ)坐标系的第一象限内的交点得到。由下图看出，只有$Q = \sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}} \geq \frac{\pi}{2}$时，两曲线才有交点，故存在束缚态的条件是

$$Q = \sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}} \geq \frac{\pi}{2} \tag{9}$$

将η，ζ用E表示带回(7)，可得能级方程，为$cot\sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}a = -i\sqrt{\frac{E}{E+V_0}}$

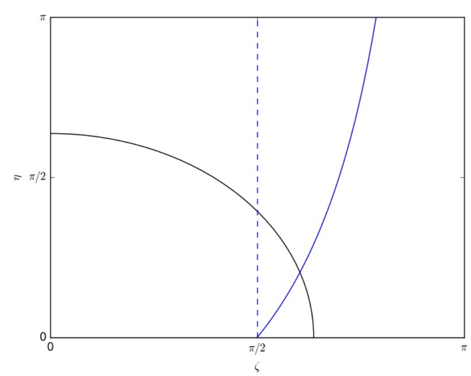

Figure 1: 式（7）（8）图解

2. 质量为m的粒子被约束在半径为R的圆环上运动。哈密顿量为角动量平方除以2倍转动惯量。波函数可以写为$\psi(\phi)$，ϕ为转动角度。那么角动量算符是什么？求能级E_n和归一化波函数ψ_n.（注意，波函数满足‘自然周期’条件：$\psi(\phi) = \psi(\phi + 2\pi)$）。
解：

在极坐标下，e_ϕ方向动量算符$p_\phi = -i\hbar\partial/(r\partial\phi)$，所以被约束在半径为R的圆环上运动，$r$恒等于$R$，因此哈密顿量角动量$L_z = (\vec{r} \times p_\phi)_z = -i\hbar\partial/\partial\phi$.

也可以按如下方式导出：

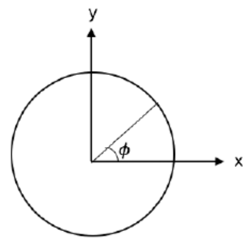

Figure 2: 圆环

由图2可知，$x = Rcos\phi$，$y = Rsin\phi$，$tan\phi = y/x$，则

$$\begin{aligned}
\frac{d(tan\phi)}{d\phi}\frac{d\phi}{dx} &= \frac{\partial(y/x)}{\partial x} \\
\frac{1}{cos^2\phi}\frac{\partial\phi}{\partial x} &= \frac{-y}{x^2} \\
\frac{\partial\phi}{\partial x} &= \frac{-ycos^2\phi}{x^2} \\
&= -\frac{Rsin\phi cos^2\phi}{R^2cos^2\phi} \\
&= -\frac{sin\phi}{R} \qquad (10)
\end{aligned}$$

同理

$$\frac{\partial\phi}{\partial y} = \frac{cos\phi}{R} \qquad (11)$$

那么角动量算符为

$$\begin{aligned}
\hat{L}_z &= x\hat{p_y} - y\hat{p_x} \\
&= -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}) \\
&= -i\hbar(x\frac{\partial\phi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial\phi} - y\frac{\partial\phi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\phi} \\
&= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi} \qquad (12)
\end{aligned}$$

考虑到圆环上只有一个变量ϕ，不必区分偏导数和导数. 则$H = L^2/2I = -\frac{\hbar^2}{2I}\frac{d^2}{d\phi^2}$代入Schrodinger方程,

$$-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{d^2}{d\phi^2}\psi(\phi) = E\psi(\phi) \qquad (13)$$

解得$\psi(\phi)=Ae^{im\phi}$,其中$m=\sqrt{\frac{2EI}{\hbar^2}}$. 又因为波函数满足周期性边界条件$\psi(\phi)=\psi(\phi+2\pi)$,因此m只能取整数，$m=0,\ \pm1,\ \pm2...$ 对波函数进行归一化：

$$|A|^2\int_0^{2\pi}e^{im\phi}e^{-im\phi}d\phi=1\Rightarrow A=\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \tag{14}$$

所以，

$$\begin{aligned}\psi_m(\phi) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi}\\ E_m &= \frac{m^2\hbar^2}{2I}\\ m &= 0,\ \pm1,\ \pm2...\end{aligned}$$

3. Griffiths书2.37题:一维无限深势阱（左端x=0,右端x=a）中一个粒子初始波函数为$\psi(x)=A\sin^3(\frac{\pi x}{a})\ (0\le x\le a)$,求A和$\Psi(x,t)$.计算$\langle x\rangle$随时间变化率.能量期望值.
解：运用三角函数关系$\sin3\theta=3\sin\theta-4\sin^3\theta$,我们可以得到：

$$\sin^3(\frac{\pi x}{a})=\frac{3}{4}\sin(\frac{\pi x}{a})-\frac{1}{4}\sin(\frac{3\pi x}{a}) \tag{15}$$

由于一维无限深势阱的能量本征函数为$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}sin\frac{n\pi x}{a}$，那么我们可以将波函数写为

$$\psi(x,0)=A\sqrt{\frac{a}{2}}\left[\frac{3}{4}\psi_1(x)-\frac{1}{4}\psi_3(x)\right] \tag{16}$$

对上式波函数进行归一化处理，并利用能量本征函数$\psi_n(x)$已归一化及属于不同能量的本征函数彼此正交，容易得到：

$$|A|^2\,\frac{a}{2}\left(\frac{9}{16}+\frac{1}{16}\right)=\frac{5}{16}a\,|A|^2=1\Rightarrow A=\frac{4}{\sqrt{5a}} \tag{17}$$

因此，含时波函数为：

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{10}}\left[3\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar}-\psi_3(x)e^{-iE_3t/\hbar}\right] \tag{18}$$

其中，E_n代表一维无穷深势阱的能级$E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$。
下面计算x平均值

$$\langle x\rangle=\int_0^a x\,|\Psi(x,t)|^2\,dx=\frac{9}{10}\,\langle x\rangle_1+\frac{1}{10}\,\langle x\rangle_3-\frac{3}{5}\cos\left(\frac{E_3-E_1}{\hbar}t\right)\int_0^a x\psi_1(x)\psi_3(x)dx \tag{19}$$

我们知道，x在各个定态上的平均值$\langle x\rangle_n=\frac{a}{2}$,且

$$\int_0^a x\psi_1(x)\psi_3(x)dx=\frac{2}{a}\int_0^a x\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right)dx=\frac{1}{a}\int_0^a x\left[\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)-\cos\left(\frac{4\pi x}{a}\right)\right]dx=0 \tag{20}$$

那么，$\langle x\rangle=\frac{9}{10}\left(\frac{a}{2}\right)+\frac{1}{10}\left(\frac{a}{2}\right)=\frac{a}{2}$;同理$\langle E\rangle=\frac{9}{10}E_1+\frac{1}{10}E_3=\frac{9\pi^2\hbar^2}{10ma^2}$;

4. Griffiths书2.44题一个一维无限深势阱，宽度为a，在其中心有一个强度为$\gamma > 0$的δ势垒。求解定态能级和波函数（不必归一化，作图求解能级）解释为什么奇宇称不受δ势垒影响。讨论$\gamma \to 0$与$\gamma \to \infty$的极限。

解：

$$V(x) = \begin{cases} 0 & -\frac{a}{2} \le x < 0 \quad and \quad 0 < x \le \frac{a}{2} \\ \gamma\delta(x) & x = 0 \\ \infty & x < -\frac{a}{2} \quad or \quad x > \frac{a}{2} \end{cases} \tag{21}$$

已知定态薛定谔方程:

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

$$\text{当}-\frac{a}{2}\le x<0\text{时},-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}=E\psi,\quad \psi^{''}+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi=0,\quad \text{令}k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$$

解为:$\psi_L(x)=A\exp(ikx)+B\exp(-ikx),\because V(x)=V(-x),\therefore$ 波函数满足奇宇称或偶宇称

1)偶宇称

$$0<x\le\frac{a}{2},\psi(x)=\psi(-x),\psi_R(x)=A\exp(-ikx)+B\exp(ikx)$$

$$\psi^{'}(0^+)-\psi^{'}(0^-)=\frac{2m\gamma}{\hbar^2}\psi(0)$$

$$\Rightarrow[A\exp(-ikx)(-ik)+B\exp(ikx)(ik)]\Big|_{x=0}-[A\exp(ikx)(ik)+B\exp(-ikx)(-ik)]\Big|_{x=0}=\frac{2m\gamma}{\hbar^2}(A+B)$$

$\Rightarrow 2ik(B-A)=\frac{2m\gamma}{\hbar^2}(A+B),$ 由边界条件$\psi_L(-\frac{a}{2})=A\exp(-ika/2)+B\exp(ika/2)=0,\Rightarrow\frac{A}{B}=-\exp(ika)$

$ik=\frac{m\gamma}{\hbar^2}\frac{1+\frac{A}{B}}{1-\frac{A}{B}}=\frac{m\gamma}{\hbar^2}\frac{1-\exp(ika)}{1+\exp(ika)}\Rightarrow k=-\frac{m\gamma}{\hbar^2}\tan(\frac{ka}{2})$ 作图可求解能级:$E_n=\frac{\hbar^2k_n^2}{2m}$,$k_n$为超越方程的根

$$\text{波函数为：}\psi(x)=\begin{cases}-\exp(ik(x+a))+\exp(-ikx) & -\frac{a}{2}\le x<0\\ -\exp(ik(-x+a))+\exp(ikx) & 0<x\le\frac{a}{2}\end{cases}$$

2)奇宇称

$$0<x\le\frac{a}{2},\psi_R(x)=-\psi_L(-x),\psi_R(x)=-A\exp(-ikx)-B\exp(ikx)$$

$$\psi(0)=0\Rightarrow A+B=0.$$

$-[A\exp(-ikx)(-ik)+B\exp(ikx)(ik)]\Big|_{x=0}-[A\exp(ikx)(ik)+B\exp(-ikx)(-ik)]\Big|_{x=0}=\frac{2m\gamma}{\hbar^2}(A+B)$显然满足

由:$\frac{A}{B}=-\exp(ika),A+B=0.\Rightarrow\exp(ika)=1\Rightarrow k=\frac{2\pi n}{a},E_n=\frac{\hbar^2k^2}{2m}=\frac{2\pi^2n^2\hbar^2}{ma^2},\psi(x)=\sin\frac{2\pi nx}{a}$

容易看出奇宇称态与无限深势阱奇宇称解相同，没有受到δ势的影响。原因是$\psi(x)$在奇宇称的要求下在$x=0$处必须满足$\psi(0)=0$，使得即使存在δ势垒，波函数导数在$x=0$处仍然是连续的，δ势无影响。

当$\gamma\to 0$时,对于偶宇称态:

$$k=-\frac{m\gamma}{\hbar^2}\tan(\frac{ka}{2})\Rightarrow\tan(\frac{ka}{2})=-\frac{\hbar^2k}{m\gamma},\gamma\to 0,\tan(\frac{ka}{2})\to\infty$$

$\therefore\frac{ka}{2}=\frac{\pi}{2}+n\pi\Rightarrow k=\frac{(2n+1)\pi}{a}$,结合奇宇称态,$k=\frac{\pi}{a},\frac{2\pi}{a},\frac{3\pi}{a},\cdots,\frac{n\pi}{a}$能级与无限深势阱相同

$\gamma\to\infty$

$\tan\frac{ka}{2}=\frac{-\hbar^2k}{m\gamma}\to 0\Rightarrow\frac{ka}{2}=n\pi\Rightarrow k=\frac{2n\pi}{a},\psi(x)=\sin\frac{2n\pi x}{a}$意味着偶宇称态将消失，只剩下奇宇称态。

5. Griffiths书2.47题:双方势阱宽a和深度V_0固定，足够约束几个束缚态，他们边缘相距b.

1. 分$b=0;b\approx a;b\gg a$三种情况，分别画出基态波函数ψ_1和第一激发态波函数ψ_2

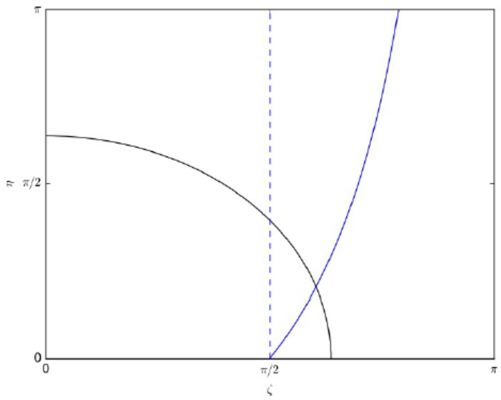

Figure 3: 作图求解$\beta z = -tanz, \beta = \frac{2\hbar^2}{ma\gamma}, z = \frac{ka}{2}$

2. 定性描述b从0到无穷连续变化时，能级E_1和E_2怎样变化？请画出$E_1(b)$和$E_2(b)$随b的变化示意图
3. 这个模型可以描述一个电子在双原子中的势能，根据上问，两个原子核更加倾向于靠近还是分开？

解：(a)1.b=0时，系统依旧是一维方势阱，势阱宽度变成2a，波函数能级都可仿照有限深方势阱写出，势阱外指数衰减，势阱内基态为余弦函数，无节点；第一激发态为正弦函数，有一个节点；（见图3） 2.b=a时，基态偶宇称，波函数在势阱外指数衰减，势阱内正弦曲线；第一激发态奇宇称，波函数在两势阱之间为双曲正弦函数，势阱外指数衰减，势阱内为正弦函数；（见图3）3.$b \gg a$时，情况和b=a时类似，只不过波函数被限制在非常狭小的两个方势阱中，ψ_1和ψ_2是简并的。（见图4）
(b).参考一维无限深势阱能级$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$。当b=0时，势阱宽度为2a,能级可以写成如下形式：

$$E_1 + V_0 \approx \frac{\pi^2\hbar^2}{2m(2a)^2} = \frac{h}{4} \tag{22}$$

$$E_2 + V_0 \approx \frac{4\pi^2\hbar^2}{2m(2a)^2} = h \tag{23}$$

这里$h = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$,而当$b \gg a$时，每个势阱的宽度为a，故

$$E_1 + V_0 \approx E_2 + V_0 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = h \tag{24}$$

图示见图5.
(c).由图5，由于能量越低越稳定，可以看出在基态（b=0时能量最低），原子核趋向于靠近；反之，在第一激发态（能量随b增大而降低），原子核会相互分开。

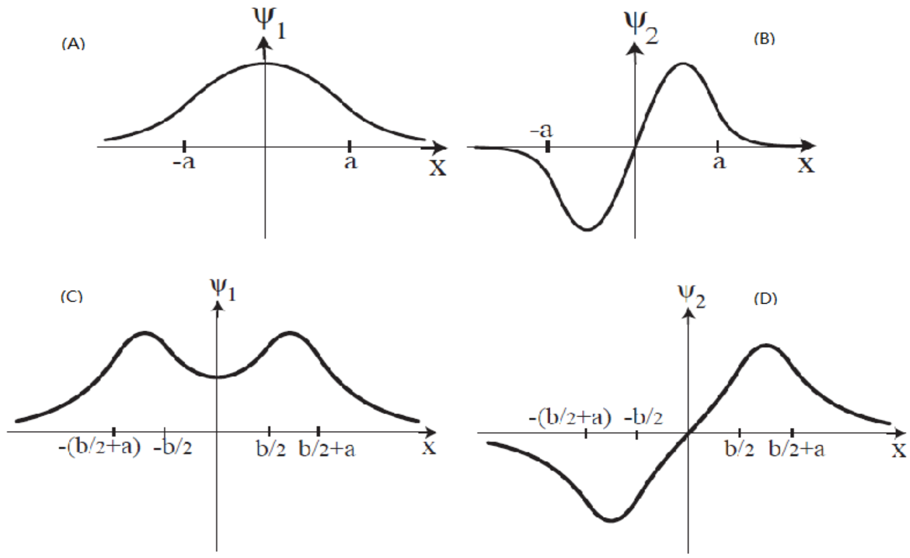

Figure 4: (A)和(B)分别是b=0时基态和第一激发态的波函数；(C)和(D)分别是b=a时基态和第一激发态的波函数

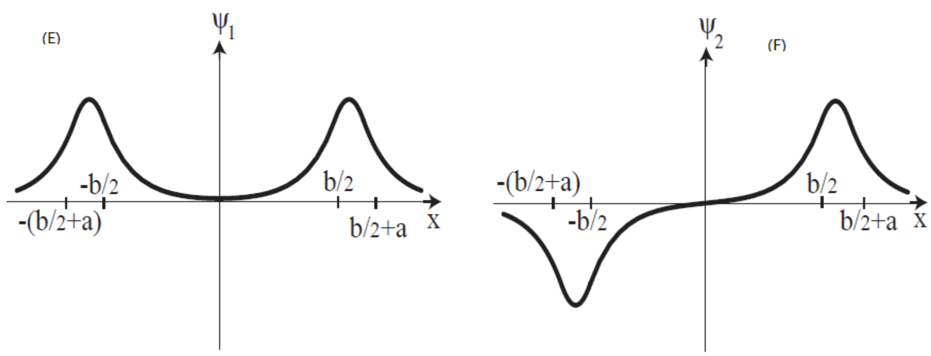

Figure 5: (E)和(F)分别代表$b \gg a$时基态和第一激发态的波函数

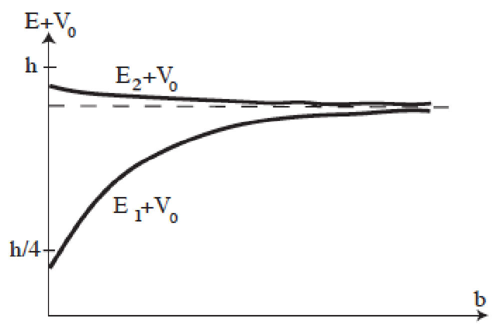

Figure 6: $E_1(b)$和$E_2(b)$随b的变化示意图