2022年10月16日作业答案

题目1 设一个体系的哈密顿算符的本征方程为$\hat{H}\psi_n(r)=E_n\psi_n(r)$ $(n=1,2,3,\cdots)$,该体系的初始波函数 $f(r)$是前两个本征函数的叠加，即$f(r)=c_1\psi_1(r)+c_2\psi_2(r)$,求：

（1）体系在任意 t 时刻的波函数；

（2）任意 t 时刻的概率密度；

（3）体系的能量期望值。

解 （1）任意t时刻体系的波函数为

$$\Psi(\boldsymbol{r},t)=\sum_n c_n\psi_n(\boldsymbol{r})\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n t\right) \tag{2.3.11}$$

将初始波函数$f(\boldsymbol{r})=c_1\psi_1(\boldsymbol{r})+c_2\psi_2(\boldsymbol{r})$代入式(2.3.8),并利用式(2.3.6),得到展开系数

$$c_n=\int\psi_n^*(\boldsymbol{r})[c_1\psi_1(\boldsymbol{r})+c_2\psi_2(\boldsymbol{r})]\mathrm{d}\boldsymbol{r}=\begin{cases}c_1 & (n=1)\\ c_2 & (n=2)\\ 0 & (n\neq 1,2)\end{cases} \tag{2.3.12}$$

这样式(2.3.11)变为

$$\Psi(\boldsymbol{r},t)=c_1\psi_1(\boldsymbol{r})\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_1 t\right)+c_2\psi_2(\boldsymbol{r})\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_2 t\right) \tag{2.3.13}$$

这就是体系在任意t时刻的波函数。

（2）任意t时刻的概率密度为

$$\begin{aligned}|\Psi(\boldsymbol{r},t)|^2=&\left[c_1^*\psi_1^*(\boldsymbol{r})\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_1 t\right)+c_2^*\psi_2^*(\boldsymbol{r})\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_2 t\right)\right]\\&\cdot\left[c_1\psi_1(\boldsymbol{r})\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_1 t\right)+c_2\psi_2(\boldsymbol{r})\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_2 t\right)\right]\\=&|c_1|^2|\psi_1(\boldsymbol{r})|^2+|c_2|^2|\psi_2(\boldsymbol{r})|^2\\&+c_1^*c_2\psi_1^*(\boldsymbol{r})\psi_2(\boldsymbol{r})\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E_2-E_1)t\right]\\&+c_2^*c_1\psi_2^*(\boldsymbol{r})\psi_1(\boldsymbol{r})\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E_2-E_1)t\right]\end{aligned} \tag{2.3.14}$$

设

$$c_1^* c_2 \psi_1^*(\boldsymbol{r}) \psi_2(\boldsymbol{r}) = |c_1 c_2| |\psi_1(\boldsymbol{r}) \psi_2(\boldsymbol{r})| \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta} \tag{2.3.15}$$

令

$$\omega = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} \tag{2.3.16}$$

则式(2.3.14)变为

$$|\Psi(\boldsymbol{r},t)|^2 = |c_1|^2 |\psi_1(\boldsymbol{r})|^2 + |c_2|^2 |\psi_2(\boldsymbol{r})|^2 + 2|c_1 c_2| |\psi_1(\boldsymbol{r}) \psi_2(\boldsymbol{r})| \cos(\omega t - \delta) \tag{2.3.17}$$

式(2.3.17)表示体系的概率密度以 ω 为频率作周期振荡(periodic oscillations),这显然不是一个定态,而是具有不同能量 E_1 和 E_2 的两个定态 $\psi_1(x)\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_1 t\right)$ 和 $\psi_2(x)\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_2 t\right)$ 的叠加,叠加所引起的"干涉"(interference)是 $|\Psi(\boldsymbol{r},t)|^2$ 周期性变化的根源。

(3) 由式(2.3.10)得到体系的能量期待值为 $\langle \hat{H} \rangle = |c_1|^2 E_1 + |c_2|^2 E_2$。

题目 2 设自由粒子的初始波函数为

$$\Psi(x,0) = \begin{cases} A & (|x| < a) \\ 0 & (|x| > a) \end{cases}$$

其中,A 和 a 都是正常数,求自由粒子波包 $\Psi(x,t)$ 和长时间后的波包强度。

解 首先我们需要将初始波函数 $\Psi(x,0)$ 归一化,为此由归一化条件

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,0)|^2 \mathrm{d}x = |A|^2 \int_{-a}^{a} \mathrm{d}x = 2a|A|^2 = 1 \tag{2.3.59}$$

得到 $A = 1/\sqrt{2a}$。然后我们利用式(2.3.29)计算系数 $c(k)$:

$$c(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2a}} \int_{-a}^{a} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \mathrm{d}x = \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar a}} \frac{1}{k} \left(\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}ka} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}ka}}{2\mathrm{i}} \right) = \frac{1}{\sqrt{\pi\hbar a}} \frac{\sin(ka)}{k} \tag{2.3.60}$$

将式(2.3.60)代入式(2.3.30),得到

$$\Psi(x,t)=\frac{1}{\pi\sqrt{2a}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin(ka)}{k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\exp\left(-\mathrm{i}\frac{\hbar t}{2m}k^2\right)\mathrm{d}k$$

$$=\frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{2}{a}}\int_{0}^{\infty}\frac{\sin(ka)\cos(kx)}{k}\exp\left(-\mathrm{i}\frac{\hbar t}{2m}k^2\right)\mathrm{d}k \tag{2.3.61}$$

这个积分不能积出。当 $t=0$ 时,式(2.3.61)给出

$$\Psi(x,0)=\frac{2A}{\pi}\int_{0}^{\infty}\frac{\sin(ka)\cos(kx)}{k}\mathrm{d}k \tag{2.3.62}$$

由积分公式

$$\frac{2}{\pi}\int_{0}^{\infty}\frac{\sin(ak)\cos(kx)}{k}\mathrm{d}k=\begin{cases}1 & (|x|<a)\\ 0 & (|x|>a)\end{cases} \tag{2.3.63}$$

可以看出,式(2.3.62)就是式(2.3.58)所示的初始波函数。

长时间后的波包强度由式(2.3.57)和式(2.3.60)给出为

$$|\Psi(x,t)|^2=\frac{m}{t}\left|\frac{1}{\sqrt{\pi\hbar a}}\frac{\sin\left(\frac{mx}{\hbar t}a\right)}{\frac{mx}{\hbar t}}\right|^2 \tag{2.3.64}$$

下面我们对 $|\Psi(x,t)|^2$ 作数值计算,为此将式(2.3.64)写成无量纲形式:

$$|\Phi(X,\tau)|^2=\frac{\tau}{\pi}\left(\frac{1}{X}\right)^2\sin^2\left(\frac{X}{\tau}\right) \tag{2.3.65}$$

其中,$X=\frac{x}{a}$,$\tau=\frac{\hbar t}{ma^2}$,$|\Phi(X,\tau)|^2=|\Psi(x,t)|^2a$。波包强度式(2.3.65)作为坐标变量 X 的函数,在不同时刻 τ 的图形如图 2.3.3 所示。可以看出,波包随着时间的推移逐渐塌缩下来。

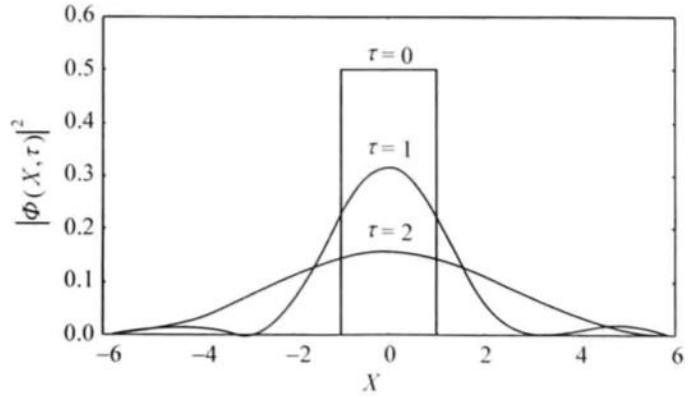

图 2.3.3 波包强度 $|\Phi(X,\tau)|^2$(来自式(2.3.65))在不同时刻的图形

其中 $\tau=0$ 的图形来自式(2.3.58)

题目 3 在一维无限深方势阱中一个粒子的初始波函数由前两个定态组合而成:

$$\Psi(x,0) = A[\psi_1(x) + \psi_2(x)]$$

(a) 归一化$\Psi(x,0)$（即求出 A。如果用ψ_1和ψ_2的正交归一性计算会很简单。记住，在 t=0 时，归一化的波函数Ψ在其他时间也是归一化的——如对此点有疑问，在做完(b)后验证一下。

(b) 求$\Psi(x,t)$和$|\Psi(x,t)|^2$。像教材中的例题 2.1 一样，把后者用时间的正弦函数展开。为了简化结果，令$\omega = \pi^2\hbar/2ma^2$。

(c) 计算$\langle x \rangle$的值。注意它是随时间振荡的。角频率是多少？振幅是多少(如果你得到的振幅大于$a/2$，计算一定有错）？

解：

（a）利用哈密顿本征函数的正交归一性

$$\int \psi_m^* \psi_n \mathrm{d}x = \delta_{mn}$$

$$\begin{aligned}
1 &= \int |\Psi(x,0)|^2 \mathrm{d}x = |A|^2 \int |\psi_1(x) + \psi_2(x)|^2 \mathrm{d}x \\
&= |A|^2 \int [\psi_1(x)^* + \psi_2(x)^*][\psi_1(x) + \psi_2(x)] \mathrm{d}x \\
&= |A|^2 \int [|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + \psi_1^* \psi_2 + \psi_2^* \psi_1] \mathrm{d}x \\
&= 2|A|^2
\end{aligned}$$

所以

$$A = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

（b）

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} + \psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}]$$

$$|\Psi(x,t)|^2 = \frac{1}{2}|\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} + \psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}|^2$$
$$= \frac{1}{2}[|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + \psi_1^*\psi_2 e^{-i(E_2-E_1)t/\hbar} + \psi_1\psi_2^* e^{i(E_2-E_1)t/\hbar}]$$

代入

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \quad (0 \leqslant x \leqslant a)$$
$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

并令

$$\omega \equiv \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$$

$$|\Psi(x,t)|^2 = \frac{1}{2}|\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} + \psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}|^2$$
$$= \frac{1}{a}\left[\sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) + \sin^2\left(\frac{2\pi}{a}x\right) + \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right)(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})\right]$$
$$= \frac{1}{a}\left[\sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) + \sin^2\left(\frac{2\pi}{a}x\right) + 2\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right)\cos\omega t\right]$$

（c）当 $t \neq 0$ 时

$$\langle x \rangle = \int_0^a x|\Psi(x,t)|^2 dx$$
$$= \frac{1}{2}\int_0^a x\frac{2}{a}\left[\sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) + \sin^2\left(\frac{2\pi}{a}x\right) + 2\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right)\cos\omega t\right]dx$$

完成积分得到

$$\langle x \rangle = \frac{a}{2} - \frac{16a}{9\pi^2}\cos\omega t \quad （以 a/2 为中心的振荡）$$

题目 4 尽管波函数中的普乘相因子常量没有任何物理意义(在计算可观测量的时候可以抵消)，但是在式 2.17 中的相对相因子却起作用。例如，假定把习题 2.5 变为

$$\Psi(x,0) = A[\psi_1(x) + e^{i\phi}\psi_2(x)]$$

其中ϕ是常数。求出$\Psi(x,t)$，$|\Psi(x,t)|^2$和$\langle x \rangle$, 并与上题的结果比较。研究$\phi=\pi/2$和$\phi=\pi$的具体情况。

解： 先归一化

$$1 = \int |\Psi(x,0)|^2 dx = |A|^2 \int |\psi_1 + e^{i\phi}\psi_2|^2 dx$$

$$= |A|^2 \int (|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + \psi_1^* \psi_2 e^{i\phi} + \psi_2^* \psi_1 e^{-i\phi}) dx = 2|A|^2$$

$$A = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1 e^{-iE_1 t/\hbar} + e^{i\phi}\psi_2 e^{-iE_2 t/\hbar})$$

$$|\Psi(x,t)|^2 = \frac{1}{2}(\psi_1 e^{-iE_1 t/\hbar} + e^{i\phi}\psi_2 e^{-iE_2 t/\hbar})^* (\psi_1 e^{-iE_1 t/\hbar} + e^{i\phi}\psi_2 e^{-iE_2 t/\hbar})$$

$$= \frac{1}{2}(|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + \psi_1^* \psi_2 e^{i\phi} e^{-i(E_2-E_1)t/\hbar} + \psi_2^* \psi_1 e^{-i\phi} e^{i(E_2-E_1)t/\hbar})$$

$$= \frac{1}{a}\left[\sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right) + 2\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\cos(\omega t - \phi)\right]$$

其中，

$$\omega \equiv \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$$

$$\langle x \rangle = \frac{1}{a}\int_0^a x\left[\sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right) + 2\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\cos(\omega t - \phi)\right]dx$$

$$= \frac{a}{2} - \frac{16a}{9\pi^2}\cos(\omega t - \phi)$$

当 $\phi = \pi/2$ 时，

$$\langle x \rangle = \frac{a}{2} - \frac{16a}{9\pi^2}\cos(\omega t - \pi/2) = \frac{a}{2} - \frac{16a}{9\pi^2}\sin(\omega t)$$

当 $\phi = \pi$ 时，

$$\langle x \rangle = \frac{a}{2} - \frac{16a}{9\pi^2}\cos(\omega t - \pi) = \frac{a}{2} + \frac{16a}{9\pi^2}\cos(\omega t)$$

题目 5　一个处在一维无限深势阱中的粒子，其初始波函数是

$$\Psi(x,0)=\begin{cases}Ax & (0\le x\le a/2)\\ A(a-x) & (a/2\le x\le a)\end{cases}$$

(a)　画出$\Psi(x,0)$的图形然后求出 A。

(b)　求出$\Psi(x,t)$。

(c)　测量能量得到结果为E_1的概率是多少？

(d)　求出能量的期望值。

解：（a）$\Psi(x,0)$的图形如图 2-1 所示。

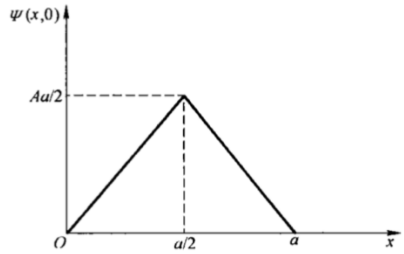

图　2-1

归一化波函数

$$1=\int_{-\infty}^{+\infty}|\Psi(x,0)|^2\mathrm{d}x$$
$$=|A|^2\left[\int_0^{a/2}x^2\mathrm{d}x+\int_{a/2}^{a}(a-x)^2\mathrm{d}x\right]=|A|^2\frac{a^3}{12}$$

所以

$$A=\sqrt{\frac{12}{a^3}}$$

（b）一维无限深势阱的定态波函数为

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\quad(0<x<a)$$

把初始波函数用定态展开

$$\Psi(x,0)=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n(x)$$

其中展开系数为

$$c_n=\int_0^a\psi_n^*(x)\Psi(x,0)\mathrm{d}x=\frac{\sqrt{24}}{a^2}\left[\int_0^{a/2}x\sin(n\pi x/a)\mathrm{d}x+\int_{a/2}^{a}(a-x)\sin(n\pi x/a)\mathrm{d}x\right]$$

利用积分公式

$$\int_b^d x\sin(kx)\mathrm{d}x=\left[\frac{1}{k^2}\sin(kx)-\frac{x}{k}\cos(kx)\right]\Bigg|_b^d$$

可以求出

$$c_n=\frac{4\sqrt{6}}{(n\pi)^2}\sin\left(\frac{n\pi}{2}\right)=\begin{cases}0 & (n=2,4,6,\cdots)\\ (-1)^{(n-1)/2}\dfrac{4\sqrt{6}}{n^2\pi^2} & (n=1,3,5,\cdots)\end{cases}$$

所以

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar} \psi_n(x), E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2}$$

(c) 测量能量得到结果为 E_1 的概率是 $P_1 = |c_1|^2 = \left(\frac{4\sqrt{6}}{\pi^2}\right)^2 = 0.9855$

(d)

$$\langle E \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 E_n = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{16 \times 6}{\pi^2} \sum_{n=\text{奇数}}^{\infty} \frac{1}{n^2} = \frac{6\hbar^2}{ma^2}$$

其中利用了级数求和公式（这些公式可由函数的傅里叶级数展开式得到，可在数学手册上查到）

$$\sum_{n=\text{奇数}}^{\infty} \frac{1}{n^2} = 1 + \frac{1}{3^2} + \frac{1}{5^2} + \frac{1}{7^2} + \cdots = \frac{\pi^2}{8}$$