第三章　一维定态问题

现在从最简单的问题来应用所得的原理和方程：一维，不显含时间的位势。如

$$V(\underline{r}) = V(x) + V(y) + V(z)$$

$$V(\underline{r}) = V(r)$$

则三维问题可化为一维问题处理。所以一维问题是解决三维问题的基础。

§3.1一般性质

设粒子具有质量 m，沿 x 轴运动，位势为 V(x)，于是有

$$(-\frac{h^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x))u(x)=Eu(x)$$

（1）定理 1：一维运动的分立能级(束缚态)，一般是不简并的。

简并度（**degeneracy**）：一个力学量的某个测量值，可在 **n** 个独立的（线性无关的）波函数中测得，则称这一 测量值是具有 **n** 重简并度。

如某能量本征值有 **n** 个独立的定态相对应，则称这能量本征值是 **n** 重简并的。

证：假设 u_1 , u_2 是具有同样能量的波函数

$$(-\frac{h^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x))u_1(x)=Eu_1(x) \qquad (1)$$

$$\left(-\frac{h^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right)u_2(x)=Eu_2(x) \quad (2)$$

$$u_1\times(2)-u_2\times(1)$$

从而得

$$u_2\frac{d^2}{dx^2}u_1(x)-u_1\frac{d^2}{dx^2}u_2(x)=0$$

于是

$$u_2u_1'(x)-u_1u_2'(x)=c \quad (c\text{是与 } x \text{ 无关的常数})$$

对于束缚态 $x \to \pm\infty, u_i \to 0$（或在有限区域有某值使 $u_2 u_1'(x) - u_1 u_2'(x) = 0$ ），所以

$$c = 0$$

$$u_2 u_1'(x) - u_1 u_2'(x) = 0$$

若 $u_2(x) u_1(x)$ 不是处处为零，则有

$$\frac{u_2'}{u_2} = \frac{u_1'}{u_1} \Rightarrow (\ln u_2)' = (\ln u_1)'$$

$$u_1(x) = A u_2(x)$$

应当注意:

i．分立能级是不简并的，而对于连续谱时，若一端 $u \to 0$ ，那也不简并。但如两端都不趋于0（如自由粒子），则有简并。

ii． 当变量在允许值范围内（包括端点），波函数无零点，就可能有简并存在。(因常数 $c \neq 0$)。

iii． 当 V(x) 有奇异点，简并可能存在。因这时可能导致 $u_2(x)u_1(x)$ 处处为零。

推论：一维束缚态的波函数必为实函数（当然可保留一相位因子）。

证

$$(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x))u_n(x)=E_n u_n(x)$$

令 $u_n(x)=R_n(x)+iI_n(x)$（$R_n(x), I_n(x)$ 都是实函数）

则

$$(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x))R_n(x)=E_n R_n(x)$$

$$\left(-\frac{h^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right)I_n(x)=E_nI_n(x)$$

但对束缚态，没有简并，所以只有一个解，因而 R_n和 I_n应是线性相关的，所以

$$I_n=\alpha R_n$$

因此，

$$u_n(x)=(1+i\alpha)R_n(x)$$

$$=Ae^{i\beta}R_n(x)$$

（2）不同的分立能级的波函数是正交的

$$(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x))u_1(x)=E_1u_1(x) \quad (1)$$

$$(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x))u_2(x)=E_2u_2(x) \quad (2)$$

$$u_2^* \times (1) - u_1 \times (2)^*$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(u_2^*(x)u_1''(x)-u_1(x)u_2''^*(x))=(E_1-E_2)u_2^*(x)u_1(x)$$

$$(E_1 - E_2)\int u_2^* u_1 dx = -\frac{h^2}{2m}\int \frac{d}{dx}(u_2^* u_1' - u_1 u_2'^*)dx$$

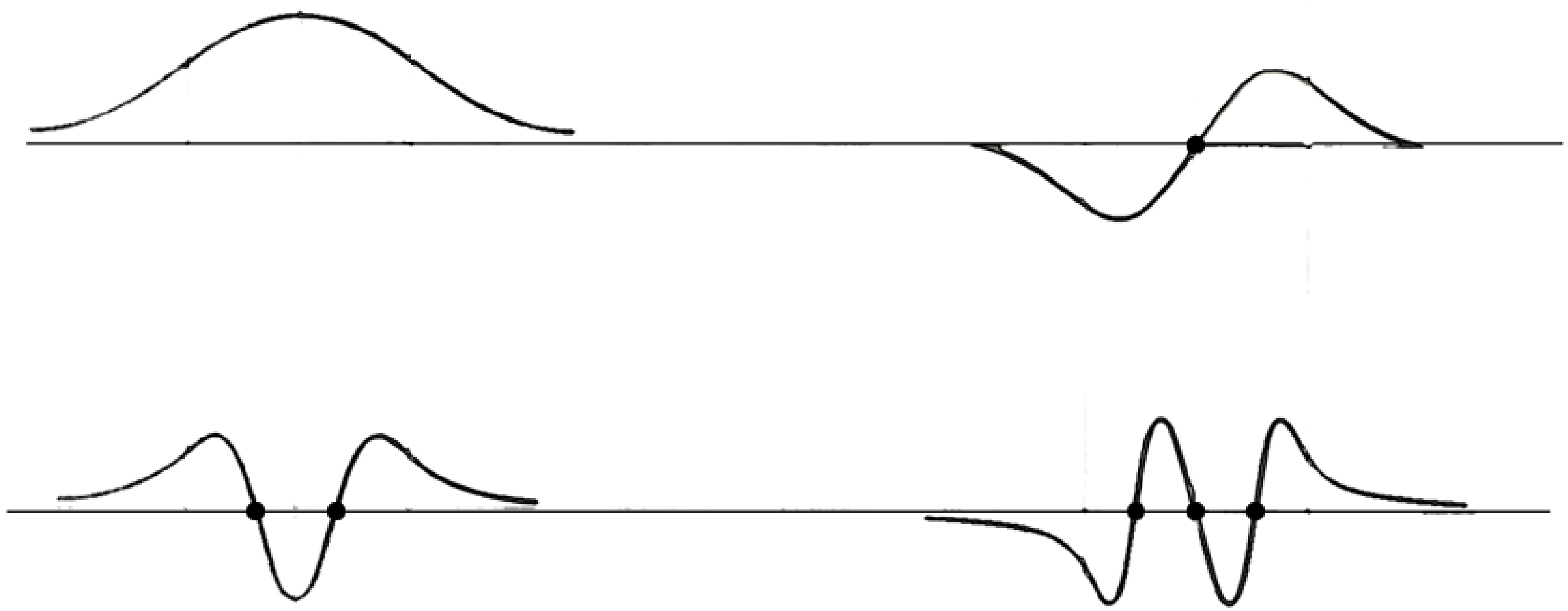
$$= -\frac{h^2}{2m}(u_2^*(x)u_1'(x) - u_1(x)u_2'^*(x))_{-\infty}^{\infty}\Big| = 0$$

从而证得

$$\int u_2^* u_1 dx = 0$$

（3）振荡定理：当分立能级按大小顺序排列，一般而言，第n+1条能级的波函数，在其取值

范围内有 n 个节点（即有 n 个 x 点使 $u_n(x_i)=0$，不包括边界点或∞远）。



基态无节点（当然处处不为零的波函数没有这性质，如 $e^{im\phi}$(它是简并的)，同样，多体波函数由于反对称性，而可能无这性质）

（4）在无穷大位势处的边条件：根据坐标空间的自然条件，波函数应单值，连续，平方可积，

现先证明位势若有有限大小间断时，波函数的导数仍连续。由方程

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right)u(x)=Eu(x)$$

即

$$-\frac{h^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(x)=[(E-V(x)]u(x)$$

由于 $[E-V(x)]u(x)$ 存在，即 $\frac{d^2}{dx^2}u(x)$ 存在，

即$\frac{d}{dx}u(x)$的导数存在，所以

$$\frac{d}{dx}u(x)$$

连续，也就是波函数导数连续。

对于位势是无穷时

设 $\mathbf{E} < \mathbf{V_0}$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V_0\right)u(x) = Eu(x) \qquad x > 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(x) = Eu(x) \qquad x < 0$$

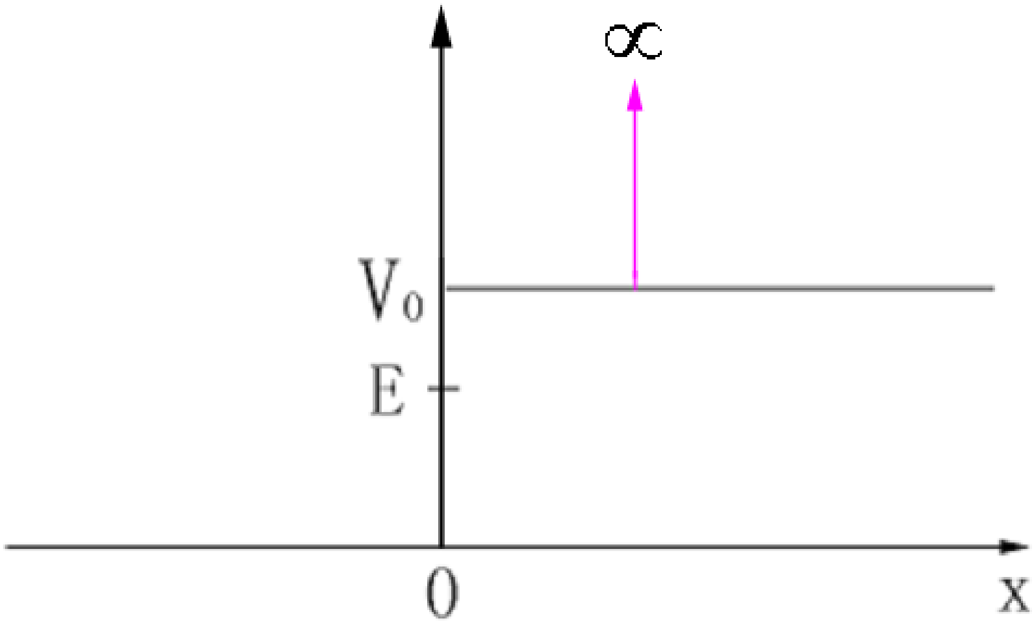
令

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \qquad K = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

所以，

$$u'' = K^2 u \qquad x > 0$$

$$u'' = -k^2 u \qquad x < 0$$



得解

$$u(x) = \begin{cases} Be^{-Kx} + Ce^{Kx} & x > 0 \\ A\sin(kx + \delta) & x < 0 \end{cases}$$

要求波函数有界，所以C＝0，

要求波函数 x=0 处连续，且导数连续

$$A\sin\delta = B$$

$$kA\cos\delta = -KB$$

$$\frac{1}{k}\tan\delta = -\frac{1}{K}$$

当 E 给定， $V_0 \to \infty, K \to \infty$

$$\tan\delta = 0 \Rightarrow \sin\delta = 0.$$

所以，

$$B \to 0$$

于是，当 $V_0 \to \infty$ ，方程有解

$$u(x) = \begin{cases} A\sin kx & x < 0 \\ 0 & x > 0 \end{cases}$$

这表明，在无穷大的位势处，波函数为0，边界上要求波函数连续，但并不要求再计及导数的连续性。当然，概率密度和概率通量矢总是连续的。

§3.2 隧穿效应和扫描隧穿显微镜

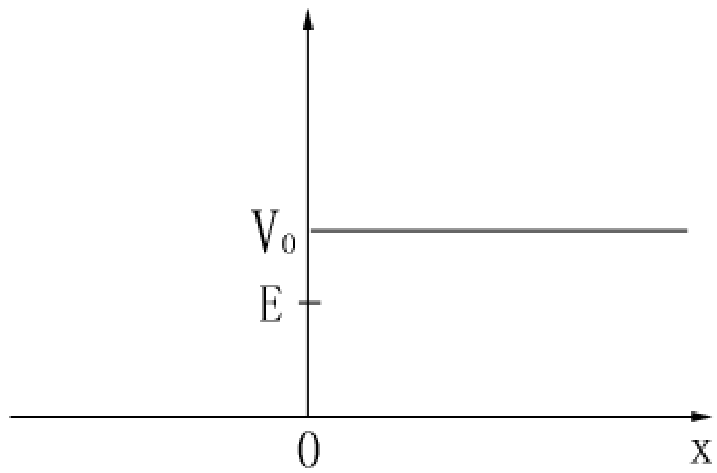
(1)阶梯位势：讨论最简单的定态问题

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

当 $E<V_0$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V_0\right)u(x)=Eu(x)\quad x>0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(x)=Eu(x)\quad x<0$$



令 $k=\sqrt{\dfrac{2mE}{h^2}}$ ， $K=\sqrt{\dfrac{2m(V_0-E)}{h^2}}$

$$\frac{d^2}{dx^2}u(x)=K^2u(x) \qquad x>0$$

$$\frac{d^2}{dx^2}u(x)=-k^2u(x) \qquad x<0$$

$$u(x)=\begin{cases} De^{-Kx}+Ce^{Kx} & x>0 \\ Ae^{ikx}+Be^{-ikx} & x<0 \end{cases}$$

由波函数有界, C＝0

在x＝0处，波函数连续，波函数导数连续，

$$A + B = D$$

$$ik(A - B) = -KD$$

解得

$$A = \frac{D}{2}(1 + \frac{iK}{k}),\quad B = \frac{D}{2}(1 - \frac{iK}{k})$$

$$u_E(x) = \begin{cases} \frac{D}{2}(1 + \frac{iK}{k})e^{ikx} + \frac{D}{2}(1 - \frac{iK}{k})e^{-ikx} & x < 0 \\ De^{-Kx} & x > 0 \end{cases}$$

对 E 没有限制，任何 E 都可取，即取连续值

讨论：

1. $x<0$ 区域，有沿 x 方向的平面波和沿 x 反方向的平面波，且振幅相同，构成一驻波。

$$u_E(x)=D(\cos kx-\frac{K}{k}\sin kx)$$

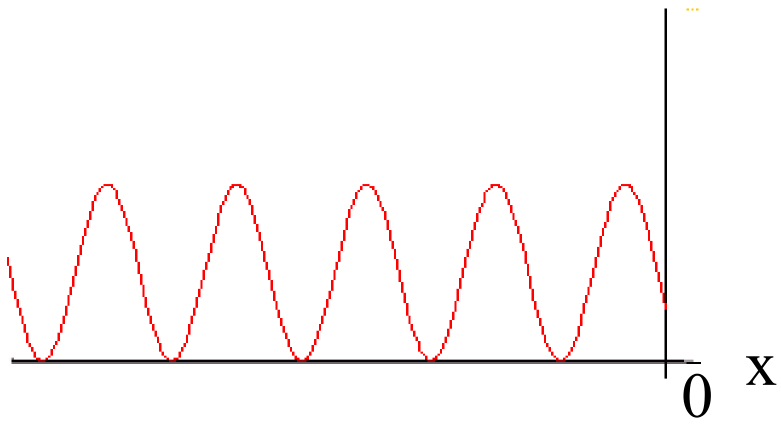
$$=D\sqrt{1+(\frac{K}{k})^2}\cos(kx+\alpha)$$

这一驻波，在

$$\mathbf{kx_n + \alpha = -\frac{2n+1}{2}\pi} \qquad n = 0,1,2☹$$

处为零

$\propto \cos^2(2x+1)$



2. 概率通量矢：

i. 透射概率通量矢（ $x>0$ ） $j_t=0$ （因 e^{-Kx} 是实函数）

ii. 在区域 $x<0$ ，有向右的概率通量，即入射概率通量矢

$$j_i=\mathrm{Re}(\varphi_i^*\frac{\hat{p}_x}{m}\varphi_i)=\frac{hk}{m}\frac{D^2}{4}\left[1+(\frac{K}{k})^2\right] \qquad x<0$$

iii. 在区域 $x<0$，也有向左的概率通量，即反射概率通量矢

$$j_r = \mathrm{Re}(\varphi_r^* \frac{\hat{p}_x}{m} \varphi_r) = -\frac{\hbar k}{m}\frac{D^2}{4}\left[1+(\frac{K}{k})^2\right] \quad x<0$$

所以，总概率通量矢为零。当 $E<V_0$，入射粒子完全被反射回来，没有概率通量流入到区域 $x>0$ 中。

定义： a. 反射份额 $R=\left|\frac{j_R}{j_i}\right|$，现 R=1;

b. 透射份额 $T=\frac{j_T}{j_i}$，现 T=0。

$$T+R=1$$

3. 在区域 $x>0$，概率密度为

$$\rho=\left|u_E(x)\right|^2=\left|D\right|^2 e^{-2Kx}$$

在这一区域，经典粒子是不能到达的。这是量子物理学的结论。它可能带来经典物理学认为不可能出现的物理现象。

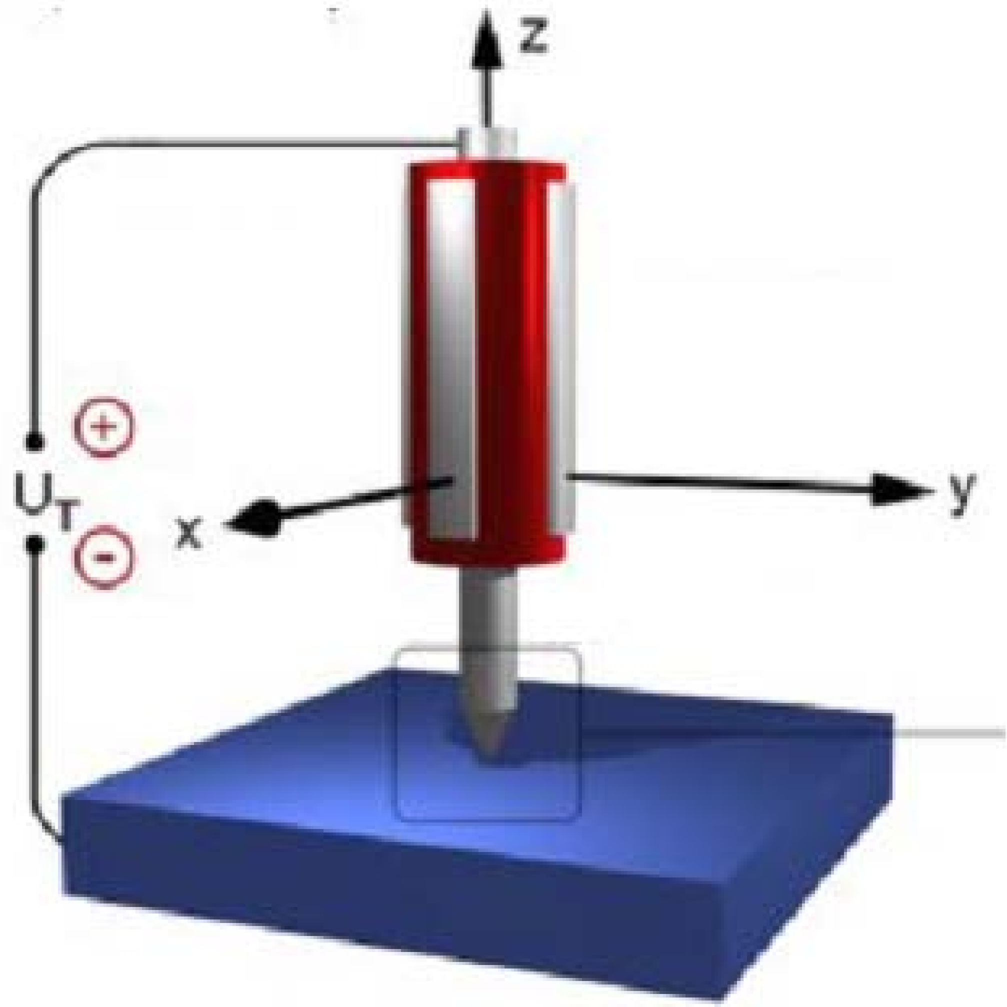
(2) 隧穿效应和扫描隧穿显微镜

在金属中的电子比真空中的自由电子的能量小(称为功函数)。因此，它们之间有一能隙。从经典物理的观点来看，即使在金属表面附近有外加电场，**金属中的电子**仍只能在金属内运动。

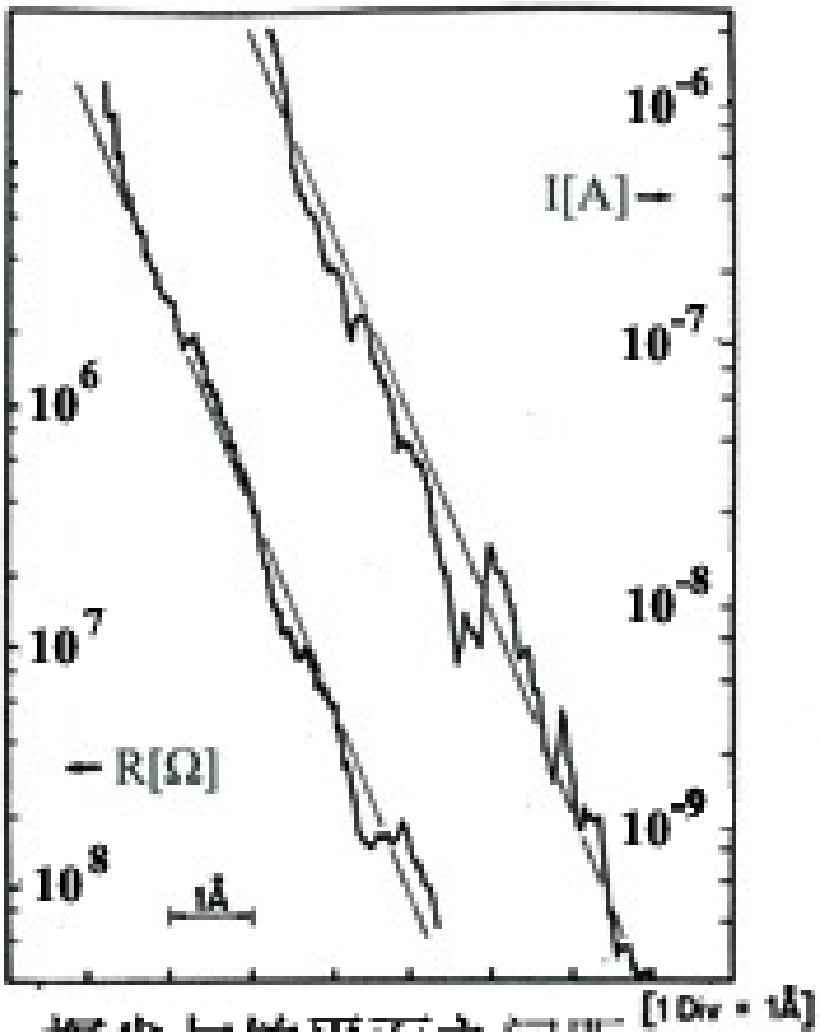
但由上节可知，电子能够穿过比自身动能高的位势而以一定的概率出现在 x >0 的区域中，这即量子粒子的隧穿效应 (tunneling effect)

尽管这一概率随 x 增大而指数衰减，但这是一正确的图象。当在金属表面附近有外加电场，则由于这些电子的移动而可能在金属表面外形成电流.

从实验上获得这一电流或电阻与离金属表面的距离成指数关系。从而进一步证实了这一真空隧穿现象。



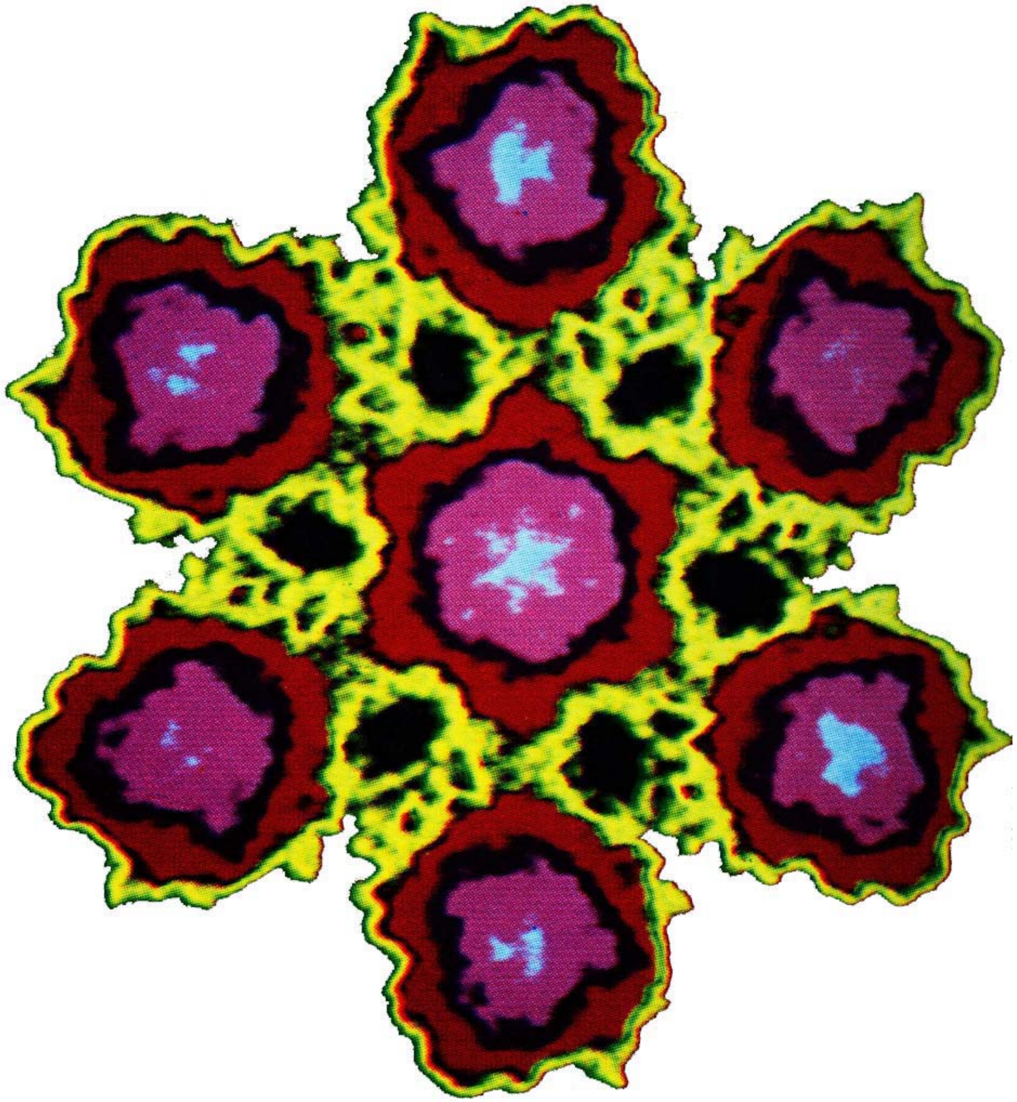
z
y
x
U_T
+
-



探尖与铂平面之间距

G. Binning, H. Rohrer, C. Gerber and Weibel, Phys. Rev. Lett. Vol. 49 , 57(1982)发明了扫描穿显微镜。由于隧穿电流极为敏感探尖与材料表面的距离，因而它的分辨率可达**0.01nm**。从而成为研究材料性能和其分子结构的强有力的工具。

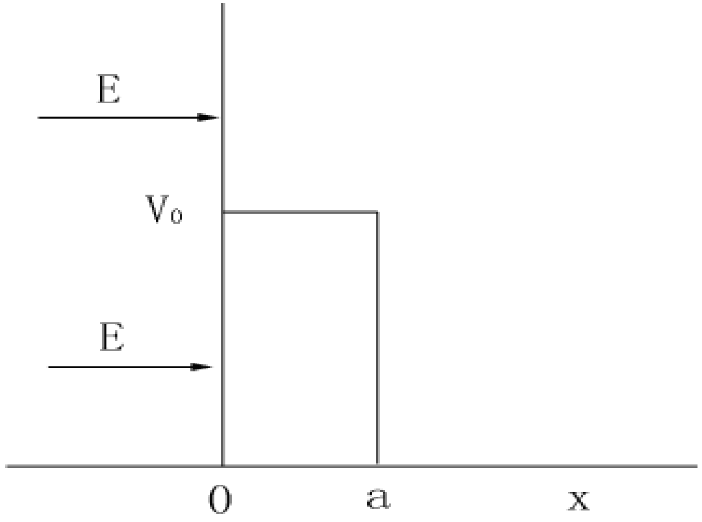
下图显示了用扫描隧穿显微镜获得的铀原子的排列图。



3.1　3.2

§ 3.3 位垒穿透:

（1）$E<V_0$: 从左向右入射，所以在 $x<0$ 区域有解 e^{ikx}（入射波）；e^{-ikx}（反射波）。$x>a$ 区域有解 e^{ikx}（透射波）。



$$u_E(x)=\begin{cases} Se^{ikx} & x>a \\ Ae^{ikx}+Be^{-ikx} & x<0 \end{cases}$$

只要远离作用区，这形式是普遍的。而沿 x 方向的概率通量分别为

$$j_i = \frac{\hbar k}{m}|A|^2, \quad j_r = -\frac{\hbar k}{m}|B|^2, \quad j_t = \frac{\hbar k}{m}|S|^2$$

$$\Downarrow$$

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 \qquad T = \left|\frac{S}{A}\right|^2$$

所以只要求得 $\frac{B}{A}$，$\frac{S}{A}$ 即可。

对于 $0 < x < a$ 有方程

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V_0\right)u(x) = Eu(x) \qquad 0 < x < a$$

有解

$$u_E(x) = De^{Kx} + Fe^{-Kx}$$

其中 $K = \left(\frac{2m(V_0 - E)}{h^2}\right)^{1/2}$

由 $x = 0$ 处，$u_E(x)$，$u'_E(x)$ 连续

$$A + B = D + F$$

$$ik(A - B) = K(D - F)$$

得

$$\begin{pmatrix} D \\ F \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1 + i\frac{k}{K}) & \frac{1}{2}(1 - i\frac{k}{K}) \\ \frac{1}{2}(1 - i\frac{k}{K}) & \frac{1}{2}(1 + i\frac{k}{K}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$$

在 $x = a$ 处， $Se^{ika} = De^{Ka} + Fe^{-Ka}$

$$ikSe^{ika} = K(De^{Ka} - Fe^{-Ka})$$

得

$$\begin{pmatrix} Se^{ika} \\ Se^{ika} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{Ka} & e^{-Ka} \\ -i\frac{K}{k}e^{Ka} & i\frac{K}{k}e^{-Ka} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D \\ F \end{pmatrix}$$

于是有

$$\begin{pmatrix} Se^{ika} \\ Se^{ika} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{Ka} & e^{-Ka} \\ -i\frac{K}{k}e^{Ka} & i\frac{K}{k}e^{-Ka} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1+i\frac{k}{K}) & \frac{1}{2}(1-i\frac{k}{K}) \\ \frac{1}{2}(1-i\frac{k}{K}) & \frac{1}{2}(1+i\frac{k}{K}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \cosh Ka + i\dfrac{k}{K}\sinh ka & \cosh Ka - i\dfrac{k}{K}\sinh ka \\ \cosh Ka - i\dfrac{K}{k}\sinh ka & -\cosh Ka - i\dfrac{K}{k}\sinh ka \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$$

从而得

$$B = \frac{-(k^2 + K^2)\sinh Ka}{(K^2 - k^2)\sinh Ka - 2iKk\cosh Ka} A$$

代回得

$$S = \frac{-2iKke^{-ika}}{(K^2 - k^2)\sinh Ka - 2iKk\cosh Ka} A$$

于是有

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \left[1 + \frac{4E(V_0 - E)}{V_0^2 \sinh^2 Ka}\right]^{-1}$$

$$T = \left|\frac{S}{A}\right|^2 = \left[1 + \frac{V_0^2 \sinh^2 Ka}{4E(V_0 - E)}\right]^{-1}$$

（2）当 $E > V_0$

这时只要将 $K = -ik_1$，并由 $\sinh Ka = -i\sin k_1 a$，

得

$$B = \frac{-i(k^2 - k_1{}^2)\sin k_1 a}{2kk_1 \cos k_1 a - i(k_1{}^2 + k^2)\sin k_1 a} A$$

$$S = \frac{2kk_1 e^{-ika}}{2kk_1 \cos k_1 a - i(k_1^{\ 2} + k^2)\sin k_1 a} A$$

从而有

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \left[1 + \frac{4E(E-V_0)}{V_0 \sin^2 k_1 a}\right]^{-1}$$

$$T = \left|\frac{S}{A}\right|^2 = \left[1 + \frac{V_0 \sin^2 k_1 a}{4E(E-V_0)}\right]^{-1}$$

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{h^2}} \qquad k_1 = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{h^2}}$$

（3）结果讨论：

A. $R+T=1$（ $E<V_0$ 或 $E>V_0$ ），即概率通量矢连续。当 $E>V_0$ 时，仍有一定概率通量透射过去；

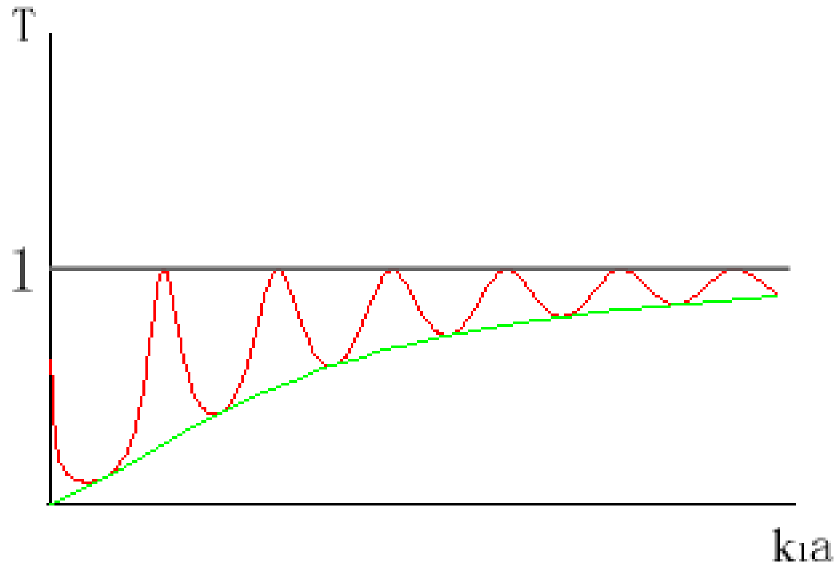
B. 当 $E>V_0$ 时，仍有一定概率通量被反射，但当 $k_1a=n\pi$ 时，T＝1，即完全透射过去。这种现象称为**共振透射**（仅在 $E>V_0$ 条件下发生）这时

$$E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2+V_0$$

被称为**共振能级**。

这种现象是量子现象。

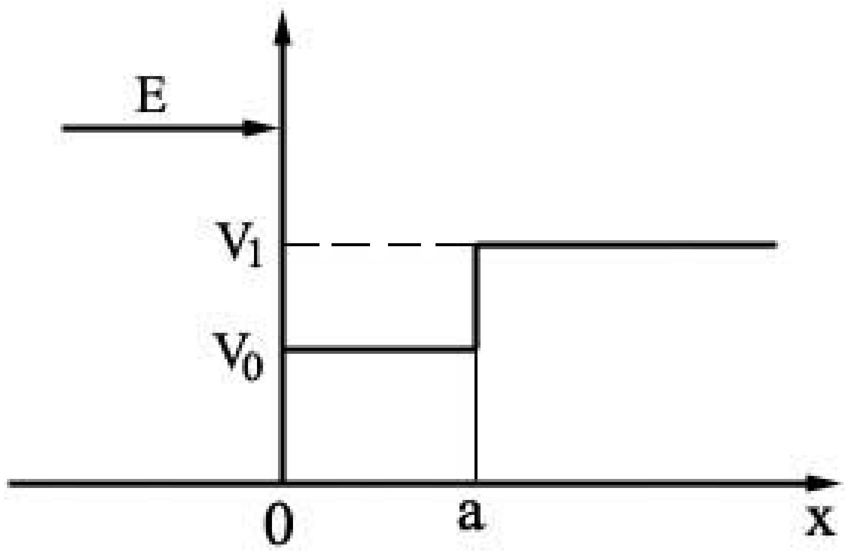
如一种解释，认为 $k_1a = n\pi$ ，所以，$a = \frac{n\pi}{k_1} = n\frac{\lambda_1}{2}$ ，即位垒宽是半波长的整数倍时，



则经过多次反射而透射出去的波的相位相同，从而出现共振透射。

例：能量为 E 的粒子从左边入射到双阶梯式的位垒

$$V(x)=\begin{cases} 0 & x<0 \\ V_0 & 0<x<a \\ V_1 & x>a \end{cases} \qquad (E>V_1>V_0)$$



求最大透射份额的条件。

解：根据条件，波函数可表为

$$\psi(x)=\begin{cases} Ae^{ikx}+Be^{-ikx} & x<0 \\ Ce^{ik_0x}+De^{-ik_0x} & 0<x<a \\ Fe^{ik_1x} & x>a \end{cases}$$

其中

$$k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}},\quad k_0=\sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}},\quad k_1=\sqrt{\frac{2m(E-V_1)}{\hbar^2}}$$

要求波函数及其导数在 $x=0$ 和 $x=a$ 处连续：

$$A+B=C+D$$

$$ik(A-B)=ik_0(C-D)$$

$$Ce^{ik_0a}+De^{-ik_0a}=Fe^{ik_1a}$$

$$ik_0(Ce^{ik_0a}-De^{-ik_0a})=ik_1Fe^{ik_1a}$$

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1+\frac{k_0}{k}) & \frac{1}{2}(1-\frac{k_0}{k}) \\ \frac{1}{2}(1-\frac{k_0}{k}) & \frac{1}{2}(1+\frac{k_0}{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1+\frac{k_1}{k_0})e^{i(k_1-k_0)a}F \\ \frac{1}{2}(1-\frac{k_1}{k_0})e^{i(k_1+k_0)a}F \end{pmatrix}$$

于是有

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1+\frac{k_0}{k}) & \frac{1}{2}(1-\frac{k_0}{k}) \\ \frac{1}{2}(1-\frac{k_0}{k}) & \frac{1}{2}(1+\frac{k_0}{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1+\frac{k_1}{k_0})e^{i(k_1-k_0)a}F \\ \frac{1}{2}(1-\frac{k_1}{k_0})e^{i(k_1+k_0)a}F \end{pmatrix}$$

从而得

$$\frac{F}{A} = \frac{4}{(1+\frac{k_0}{k})(1+\frac{k_1}{k_0})e^{i(k_1-k_0)a} + (1-\frac{k_0}{k})(1-\frac{k_1}{k_0})e^{i(k_1+k_0)a}}$$

透射份额为

$$T=\frac{k_1}{k}\left|\frac{F}{A}\right|^2=\sqrt{\frac{E-V_1}{E}}\left\{\frac{4}{\left[1+\sqrt{\frac{E-V_1}{E}}\right]^2-\left[(V_1-V_0)V_0/E(E-V_0)\right]\sin^2 k_0a}\right\}$$

这表明，

$$k_0a=\left(\frac{2n+1}{2}\right)\pi$$

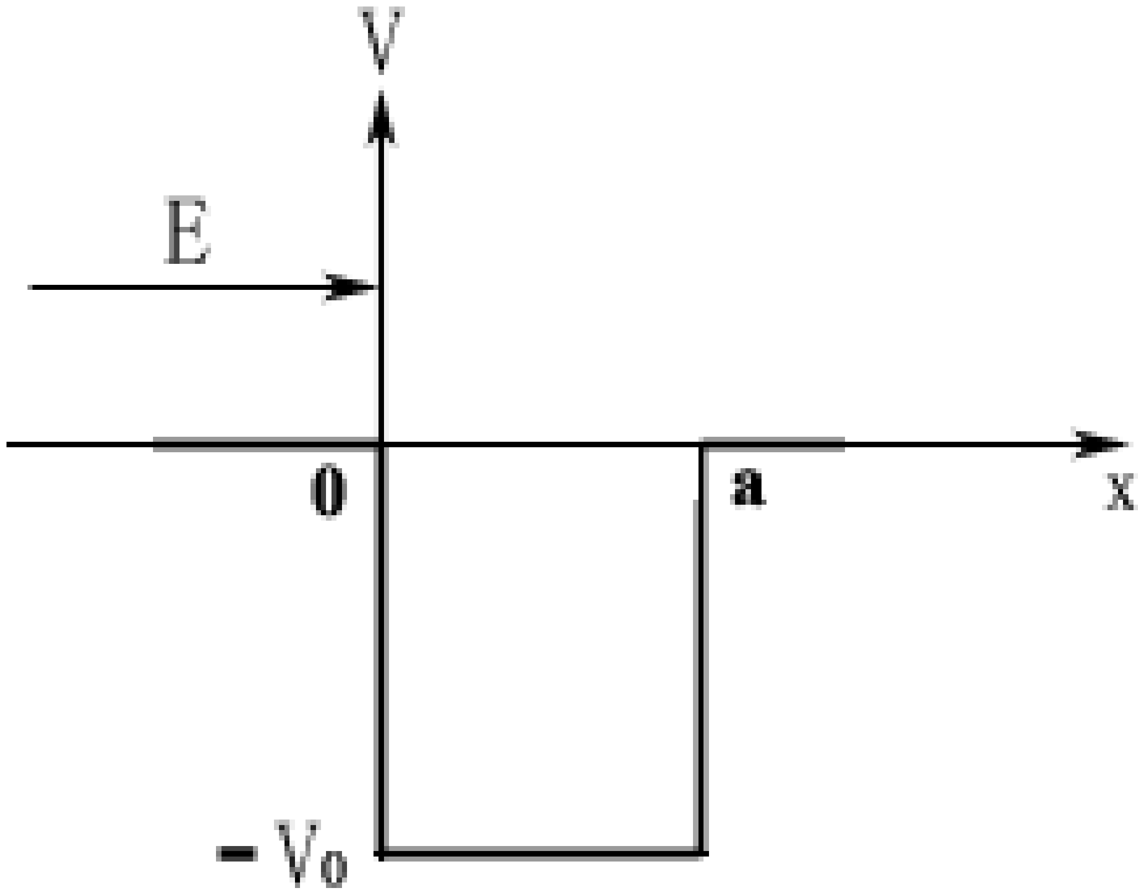
时，透射份额取极大。所以，$k_0a=n\pi$ 并不是透射份额取极大（象$V_1<V_0$时那样）的必要条件。

§3.4 方位阱穿透：这时只要将 $V_0 \to -V_0$ 即可。

$$B = \frac{-i(k^2 - k_1^2)\sin k_1 a}{2kk_1\cos k_1 a - i(k_1^2 + k^2)\sin k_1 a} A$$

$$S = \frac{2kk_1 e^{-ika}}{2kk_1\cos k_1 a - i(k_1^2 + k^2)\sin k_1 a} A$$

$$\mathbf{R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \left[1 + \frac{4E(E+V_0)}{V_0^2 \sin^2 k_1 a}\right]^{-1}}$$


V
E
0
a
x
- V0

$$T = \left|\frac{S}{A}\right|^2 = \left[1 + \frac{V_0^2 \sin^2 k_1 a}{4E(E+V_0)}\right]^{-1}$$

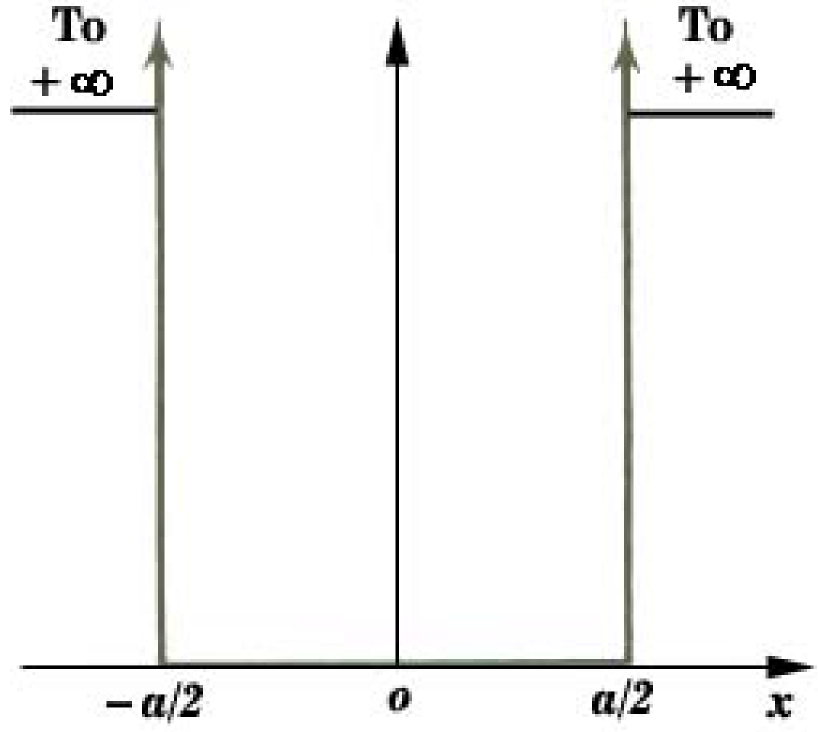
其中 $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ ，$k_1 = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}$ 。

当 $k_1 a = n\pi$ 时，则同样出现 $T=1$ ，即共振透射。这时，

$$E_n = \frac{\pi^2 h^2}{2ma^2} n^2 - V_0$$ （n 取值应保证 E_n 大于零）

§3.5一维无限深方位阱

$$V(x)=\begin{cases}0 & |x|<\dfrac{a}{2}\\ \infty & |x|>\dfrac{a}{2}\end{cases}$$



（1）能量本征值和本征函数：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(x)=Eu(x)\qquad |x|<\frac{a}{2}$$

$$u(x)=0\qquad |x|>\frac{a}{2}$$

有解

$$u(x)=\begin{cases}A\sin kx+B\cos kx & |x|<\frac{a}{2}\\ 0 & |x|>\frac{a}{2}\end{cases}$$

其中

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

要求波函数在 $\pm \mathbf{a}/2$ 处连续（当然，并不要求导数连续）

$$-A\sin k\frac{a}{2} + B\cos k\frac{a}{2} = 0$$

$$A\sin k\frac{a}{2} + B\cos k\frac{a}{2} = 0$$

要求 A，B 不同时为零，则必须系数行列式为零，即

$$\begin{vmatrix} -\sin k\frac{a}{2} & \cos k\frac{a}{2} \\ \sin k\frac{a}{2} & \cos k\frac{a}{2} \end{vmatrix} = 0$$

$$\sin k\frac{a}{2}\cos k\frac{a}{2} = 0$$

i． $\sin k\frac{a}{2} = 0 \Rightarrow k = \frac{n\pi}{a}$ $\quad n = 2,4$☹

代入方程得

$$\mathbf{B = 0}$$

ii． $\cos k\frac{a}{2} = 0 \Rightarrow k = \frac{n\pi}{a}$ $\quad n = 1,3,5$☹

代入方程得

$$\mathbf{A = 0}$$

$$u_n(x) = \begin{cases} A\sin\dfrac{n\pi}{a}x & n = 2,4,6,\cdots \\ B\cos\dfrac{n\pi}{a} & n = 1,3,5,\cdots \end{cases} \quad |x| < \frac{a}{2}$$

$$u_n(x) = 0 \qquad |x| > \frac{a}{2}$$

相应的本征能量为

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2$$

（2）结果讨论：

A. 根据一定边条件，要求($x=\pm\frac{a}{2}$ 处，波函数连续），薛定谔方程自然地给出能级的量子化，即分立能级

B. 一个经典粒子处于无限深位阱中，可以安静地躺着不动。但对量子粒子而言，

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{h}{2}$$

所以，$\Delta x \neq 0$，$\Delta p_x \neq 0$，即 p_x不能仅取零。因此，无限深方位势的粒子最低能量不为零。

C. 对基态：

$$E_1 = \frac{h^2\pi^2}{2ma^2}$$

$$u_1(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}}\cos\frac{\pi}{a}x & |x| < \frac{a}{2} \\ 0 & |x| > \frac{a}{2} \end{cases}$$

无零点，即无节点，是偶函数。

第一激发态：

$$E_2 = \frac{h^2\pi^2}{2ma^2}2^2$$

$$u_2(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{2\pi}{a}x & |x| < \frac{a}{2} \\ 0 & |x| > \frac{a}{2} \end{cases}$$

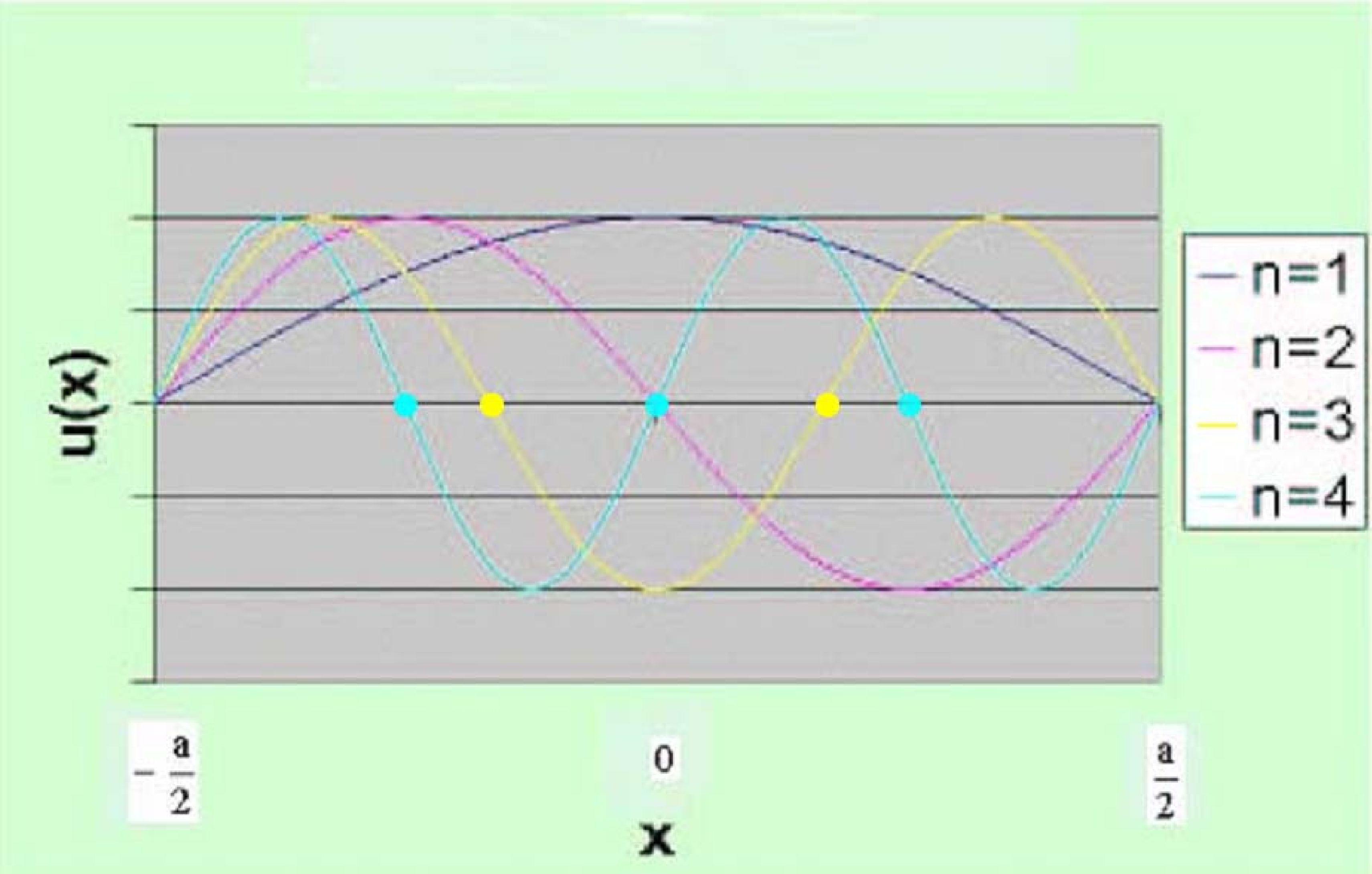
有一零点，即有一节点，是奇函数。

第二激发态：

$$E_3 = \frac{h^2\pi^2}{2ma^2}3^2$$

$$u_3(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}}\cos\frac{3\pi}{a}x & |x| < \frac{a}{2} \\ 0 & |x| > \frac{a}{2} \end{cases}$$

有二个零点，即有二个节点，是偶函数。



u(x)
n=1
n=2
n=3
n=4
$-\frac{a}{2}$
0
$\frac{a}{2}$
x

§3.6 宇称，一维有限深方势阱，双 δ 位势

（1）宇称：对称无限深位阱的能量本征函数有两类形式：

$$
u_n(x)=\begin{cases} u_{1n}=\sqrt{\dfrac{2}{a}}\cos\dfrac{n\pi}{a}x \quad n=1,3,5\cdots \\ u_{2n}=\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi}{a}x \quad n=2,4,6,\cdots \end{cases} \quad |x|<\frac{a}{2}
$$

$$
u_n(x)=0 \quad |x|>\frac{a}{2}
$$

显然

$$u_{1n}(x) = u_{1n}(-x)$$

$$u_{2n}(x) = -u_{2n}(-x)$$

偶函数描述的态称为偶宇称态

奇函数描述的态称为奇宇称态。

这不是偶然的，它是由于位势在 $x \to -x$ 的变换下不变

$$V(-x) = V(x)$$

的结果。

现对这一问题作进一步的讨论：如位势为偶函数

$$V(x) = V(-x)$$

当 $u(x)$ 是方程的解

$$\left[-\frac{h^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]u(x) = Eu(x)$$

在 $x \to -x$ 变换下，有

$$\left[-\frac{h^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(-x)\right]u(-x)=Eu(-x)$$

于是有，

$$\left(-\frac{h^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right)u(-x)=Eu(-x)$$

所以，当 $u(x)$ 是解，则 $u(-x)$ 也是解。

A. 当能级不简并时：令 $\hat{\Pi}$ 为宇称算符，我们有

$$\hat{\Pi}u(x) = u(-x) = cu(x)$$

$$\hat{\Pi}^2 u(x) = \hat{\Pi}u(-x) = u(x) = c^2 u(x)$$

即 $c = \pm 1$

因此，当体系在对称位势下运动（空间反射是对称的）。若能级不简并，其所处的状态，也是宇称算符的本征态，而本征值为 ±1 ，即

所得的解必有确定宇称。 $u(-x)=\pm u(x)$

B. 当能级简并时，那所得解当然不一定有确定的宇称。但奇、偶部分分别是解。

已证明，$u(x)$是解，则$u(-x)$ 也是解。由于能级是简并的，则$u(-x)$ 可能不等于 $cu(x)$

如果 $u(-x)\neq cu(x)$ ，则可作线性组合，

$$u(x)+u(-x) \qquad u(x)-u(-x)$$

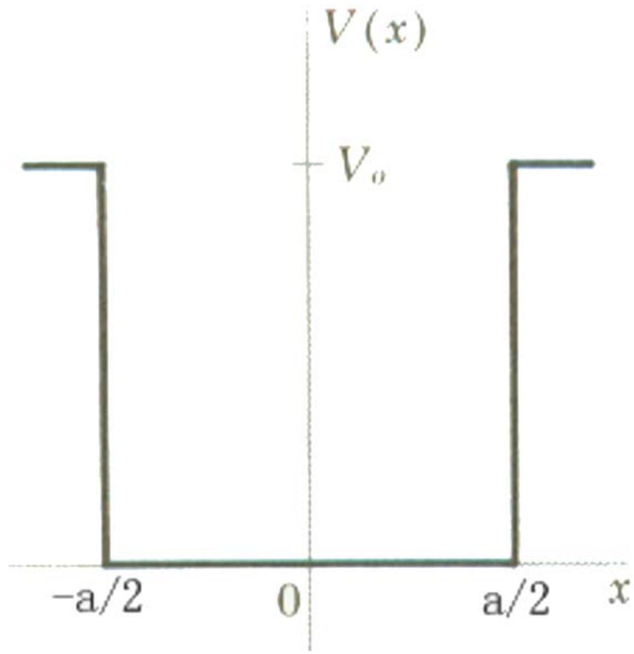
前者为偶宇称解，后者为奇宇称解。

因此，在一维对称位势下，我们总可选具有确定的宇称的函数作为能量本征态的解，而这将使问题处理简化。

宇称的概念是量子力学所特有的 。

（2）有限对称方位阱：

$$V(x)=\begin{cases} V_0 & |x|>\dfrac{a}{2} \\ 0 & |x|<\dfrac{a}{2} \end{cases}$$



仅讨论束缚态，所以 $V_0 > E > 0$

只要在 $x > 0$ 区域中求解。

A. 偶宇称解：

$$u(x) = \begin{cases} A\cos\alpha x & 0 < x < \dfrac{a}{2} \\ Ce^{-\beta x} & x > \dfrac{a}{2} \end{cases}$$

$$\alpha = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\beta = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

在 $x = \dfrac{a}{2}$ 处 $\dfrac{u'}{u}$ 连续，得

$$\xi \tan\xi = \eta$$

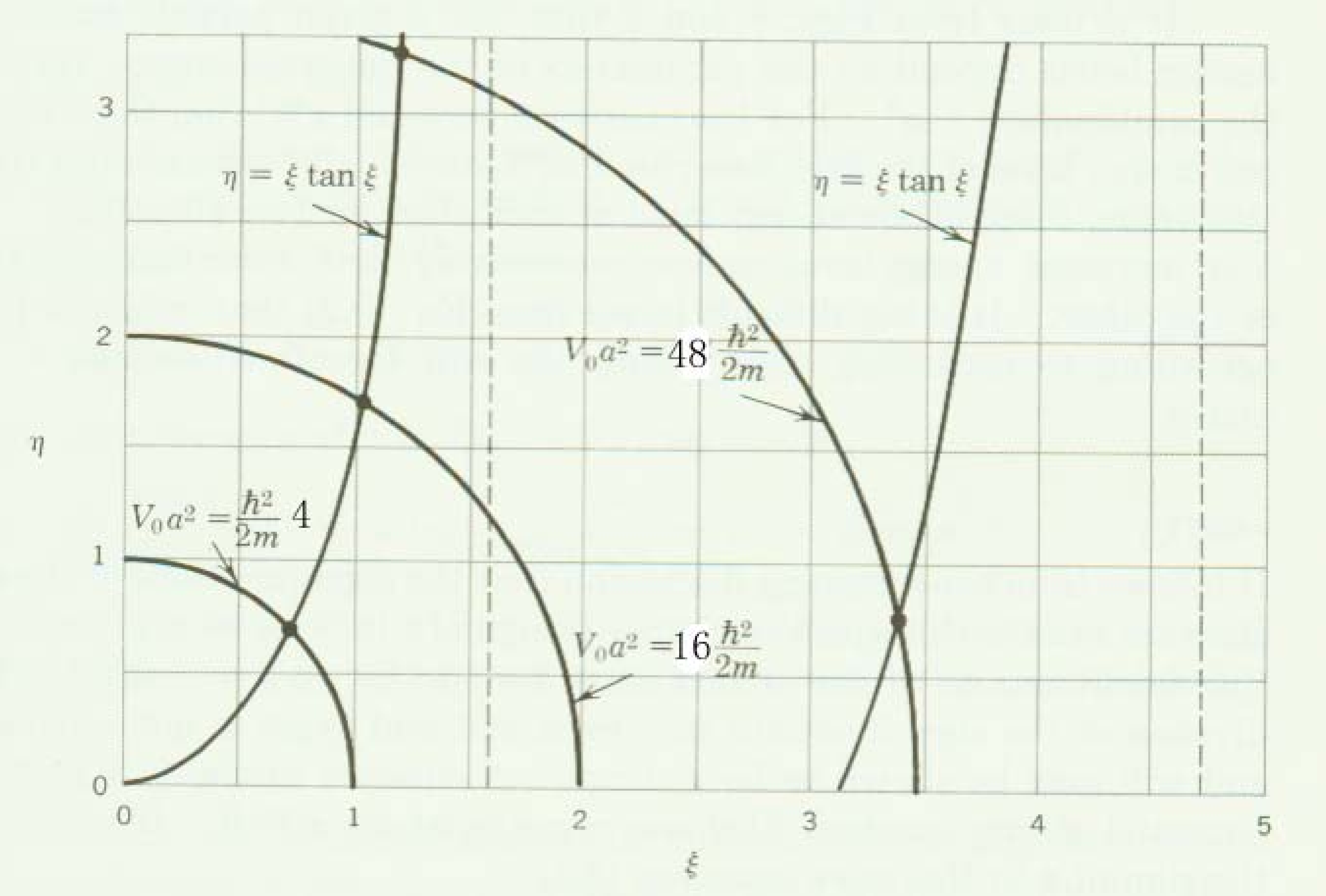
$$\xi = \alpha\frac{a}{2}, \eta = \beta\frac{a}{2}$$

$$\xi^2+\eta^2=\frac{mV_0}{2h^2}a^2$$

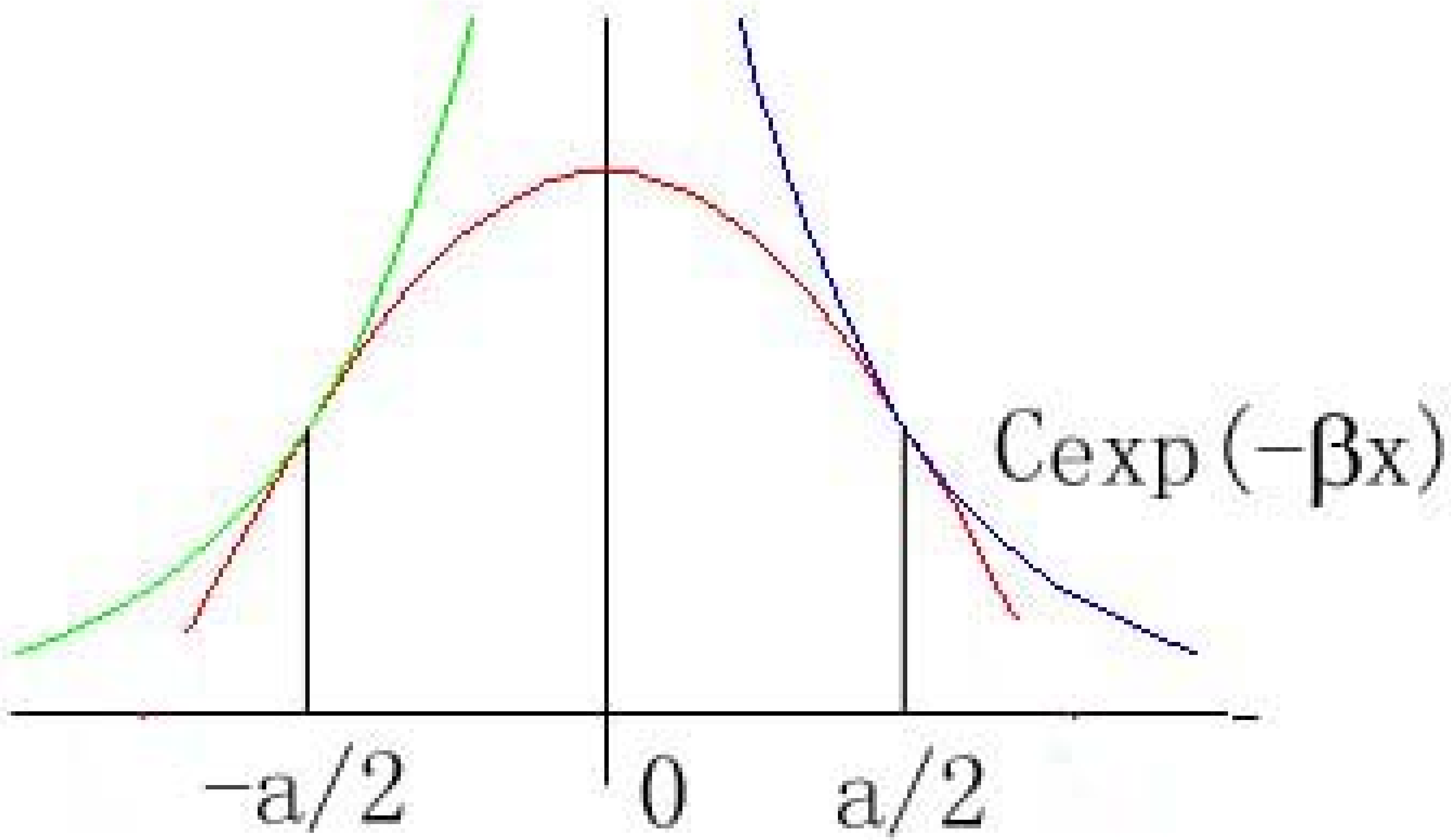
由这两个方程 $\Rightarrow \xi \Rightarrow \alpha \rightarrow \ E=\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}$

（$\eta>0$,所以，ξ在第一和第三象限 ）。

$$u(x)=\begin{cases} Ce^{-\beta x} & x>\frac{a}{2} \\ A\cos\alpha x & |x|<\frac{a}{2} \\ Ce^{\beta x} & x<-\frac{a}{2} \end{cases}$$



η = ξ tan ξ
η = ξ tan ξ
V₀a² = 48 ħ²/2m
V₀a² = ħ²/2m 4
V₀a² = 16 ħ²/2m
η
ξ
0
1
2
3
4
5


Cexp(−βx)
−a/2
0
a/2

B．奇宇称解：由于是奇宇称解，波函数在 $x = 0$ 处应为0，得解的形式

$$u(x) = \begin{cases} B\sin\alpha x & 0 < x < \dfrac{a}{2} \\ Ce^{-\beta x} & x > \dfrac{a}{2} \end{cases}$$

同理在 $x = \dfrac{a}{2}$ 处 $\dfrac{u'}{u}$ 连续，得

$$-\xi\cot\xi = \eta$$

另外

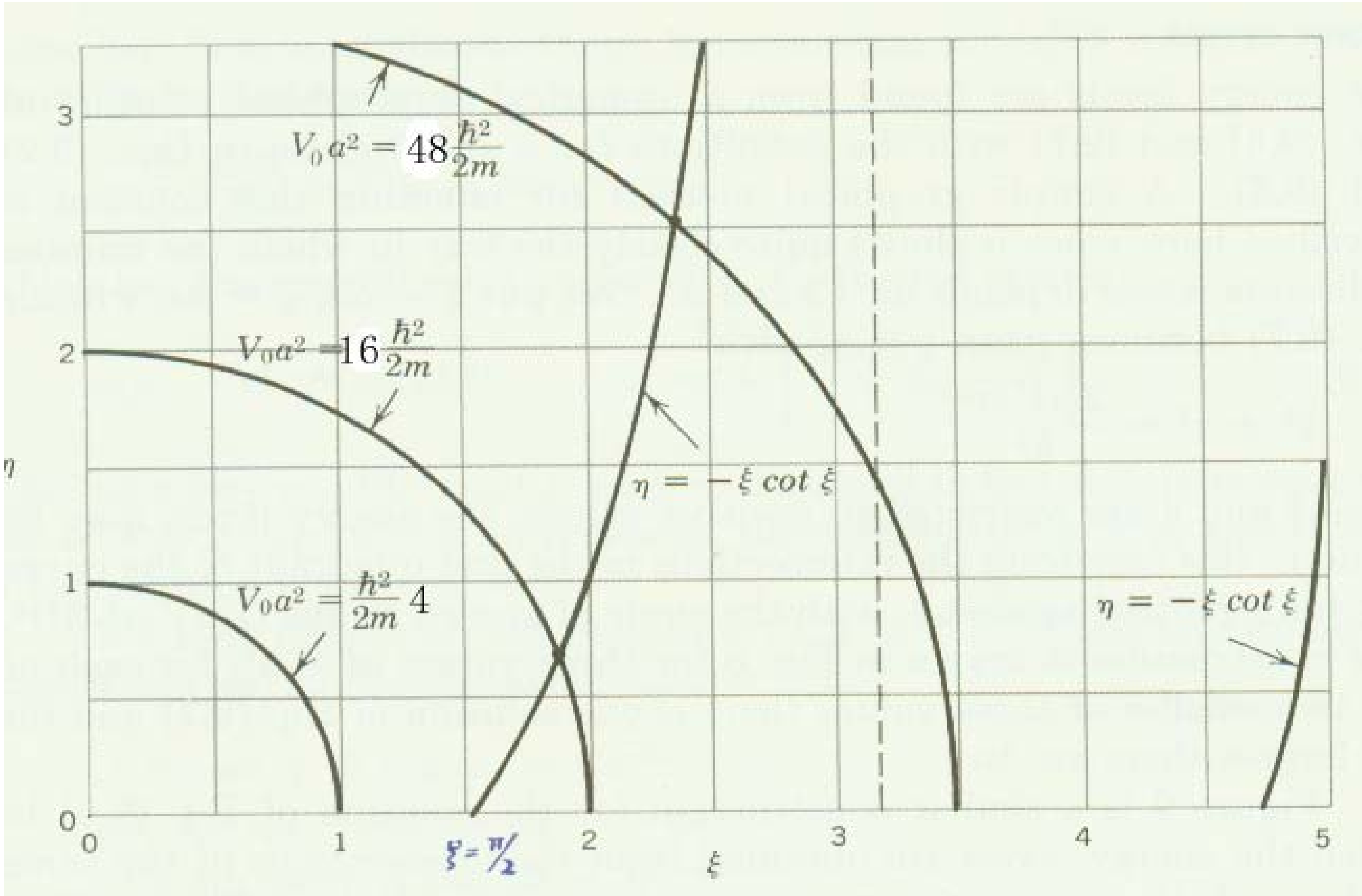
$$\xi^2+\eta^2=\frac{mV_0}{2\hbar^2}a^2$$

从而求得 $\Rightarrow \xi \Rightarrow \alpha \quad \rightarrow \quad E=\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}$

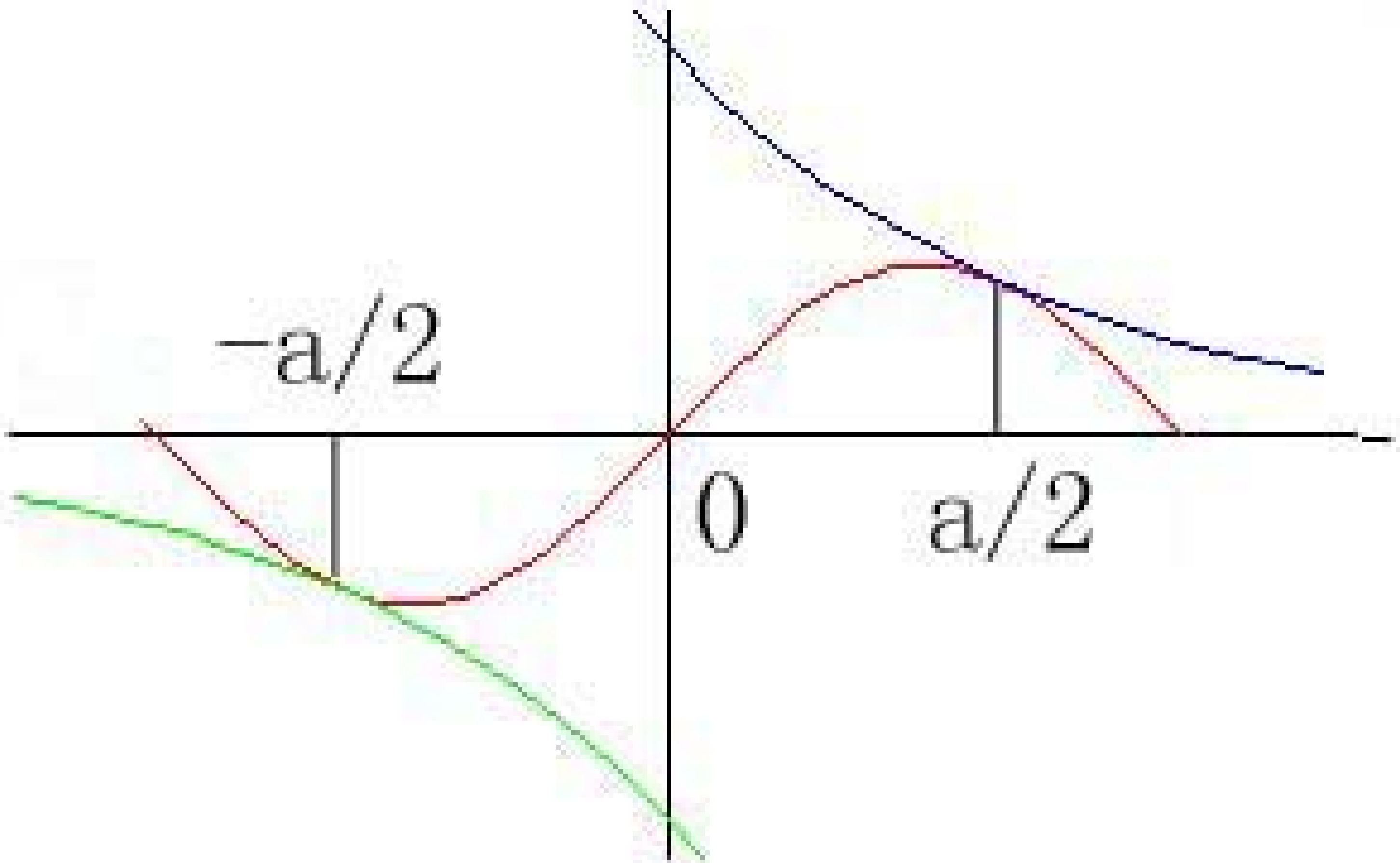
（ $\eta>0$,所以，ξ 在第二和第四象限 ）

而相应波函数为

$$u(x)=\begin{cases} Ce^{-\beta x} & x>\frac{a}{2} \\ B\sin\alpha x & |x|<\frac{a}{2} \\ -Ce^{\beta x} & x<-\frac{a}{2} \end{cases}$$



$V_0 a^2 = 48\frac{\hbar^2}{2m}$
$V_0 a^2 = 16\frac{\hbar^2}{2m}$
$V_0 a^2 = \frac{\hbar^2}{2m}4$
$\eta = -\xi \cot \xi$
$\eta = -\xi \cot \xi$
η
ξ
$\xi = \pi/2$
0
1
2
3
4
5


-a/2
0
a/2

C. 讨论

1. 当

$$\frac{mV_0a^2}{2\hbar^2} < \left(\frac{\pi}{2}\right)^2$$

即 $\xi^2+\eta^2<\left(\frac{\pi}{2}\right)^2$ ，只有一个解。而在区域

$$|\alpha x| < \frac{\pi}{2}$$

中无零点，即为基态；

当

$$\left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \leq \frac{mV_0a^2}{2\hbar^2} < \left(\frac{2\pi}{2}\right)^2$$

时，这时交二个点，即有二个分立能级。

基态无零点；第一激发态有一个零点

当

$$\left(\frac{(n_0-1)\pi}{2}\right)^2 \leq \frac{mV_0a^2}{2\hbar^2} < \left(\frac{n_0\pi}{2}\right)^2$$

时，交 n_0 个点，有 n_0 条能级

等高有限方位势，分立能级数目取决于

$$mV_0a^2$$

的大小。但不管如何小，总有分立能级，至少一个。

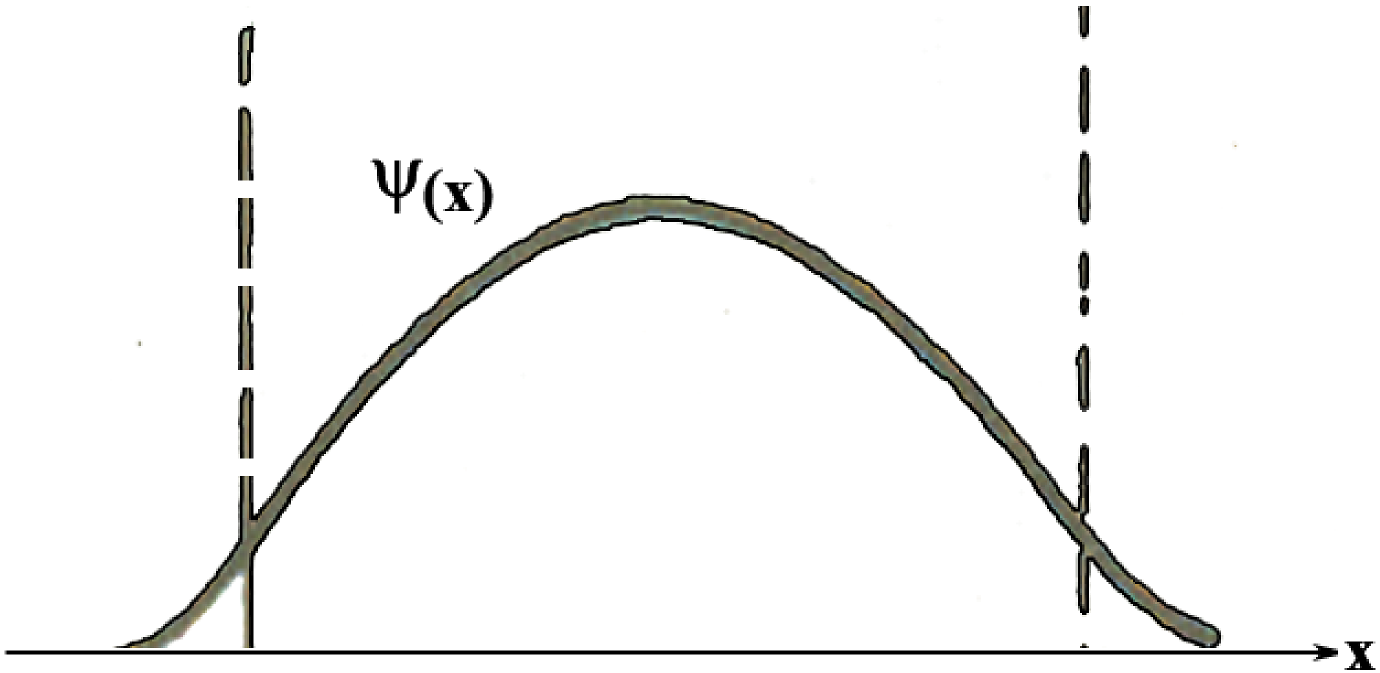
2. 在经典力学中，当

$$E < V_0$$

时，粒子只能处于区域 $-\frac{a}{2}-\frac{a}{2}$ 中。而量子粒子，

则有一定的概率处于 $V_0 > E$ 区域中，而且必须有。正是由于这一点，无论 $\mathbf{mV_0a^2}$ 如何小，至少有一个解。

3.3 3.5 3.6



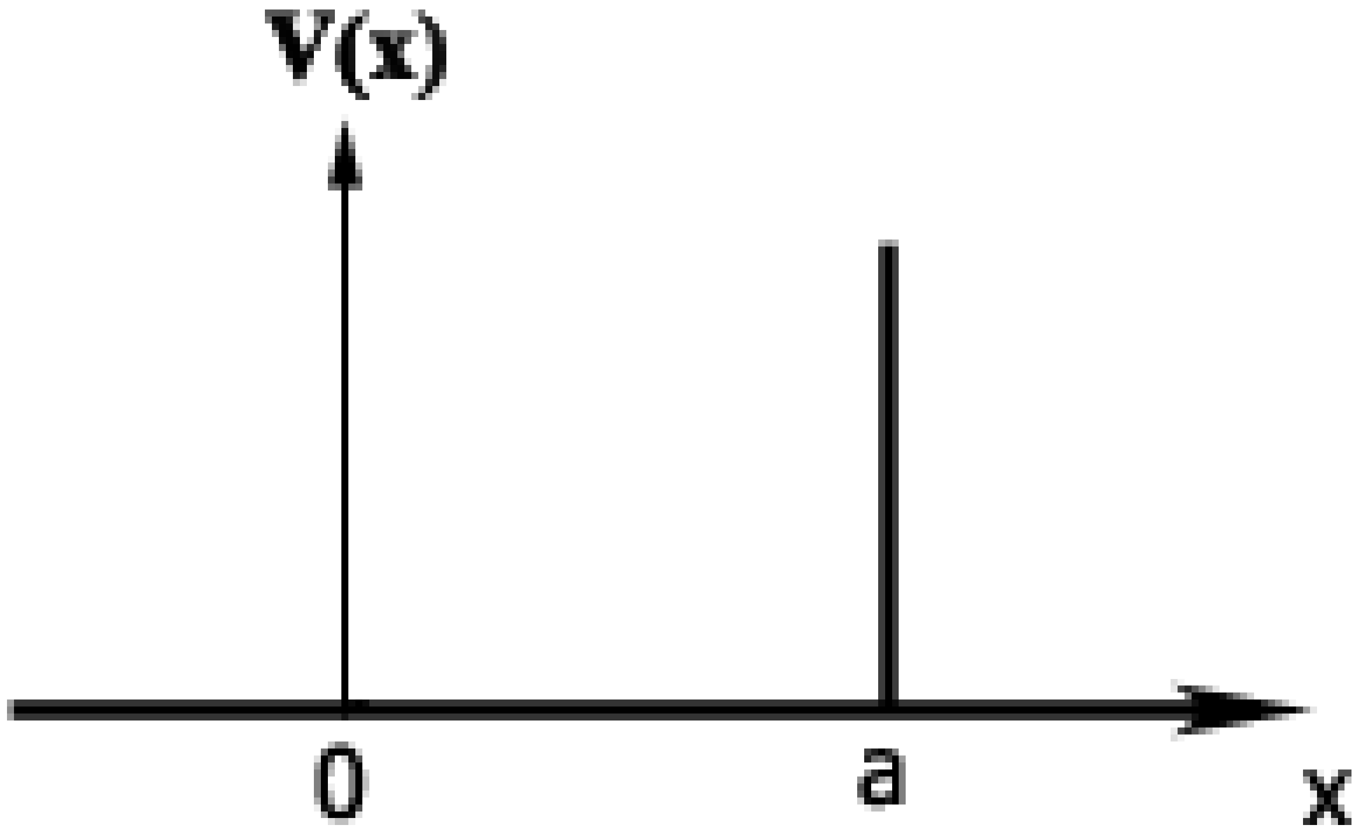
基态波函数示意图

（3）求粒子在双 δ 位阱中运动

A. δ 位势两边的波函数导数间的关系

$$-\frac{\hbar^2}{2m}u''(x)+V(x)u(x)=Eu(x)$$

$$\mathbf{V(x)=V_0\delta(x-a)}$$



$V_0\delta(x-a)$ 势

3.3 3.5 3.6 3.7 3.8

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} u''dx + \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} V_0\delta(x-a)u(x)dx = \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} Eu(x)dx$$

$$-\frac{h^2}{2m}\left[u'(a+\varepsilon)-u'(a-\varepsilon)\right]+V_0u(a)=Eu(a+\Delta\cdot\varepsilon)\cdot 2\varepsilon$$

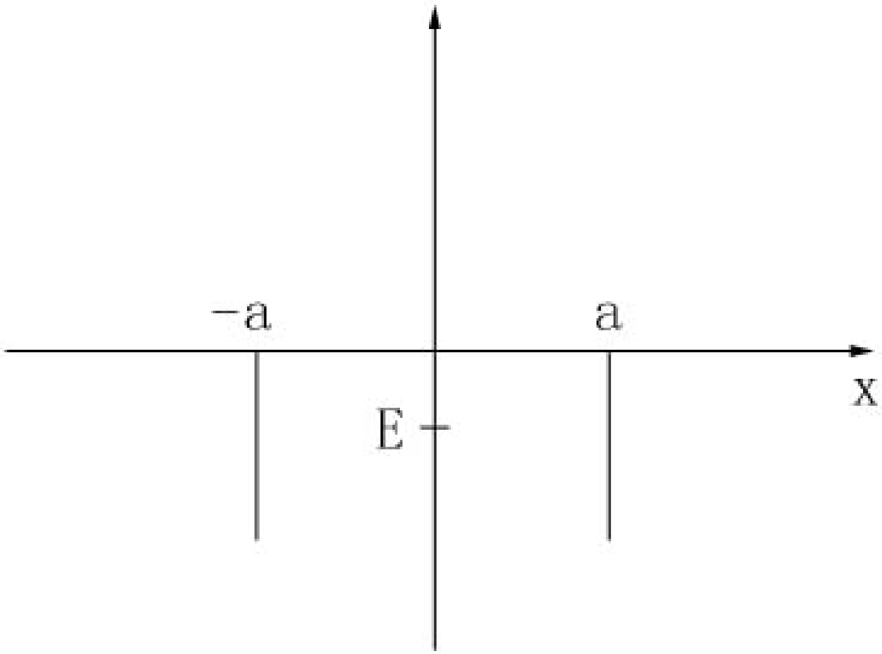
当 $\varepsilon \to 0$ ，

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[u'(a+0)-u'(a-0)\right]+V_0u(a)=0$$

$$\left[u'(a+0)-u'(a-0)\right]=\frac{2mV_0}{h^2}u(a)$$

B．求双 δ 位阱解

$$V(x) = -V_0\left[\delta(x-a)+\delta(x+a)\right]$$



$$-\frac{\hbar^2}{2m}u''(x) = Eu(x) \qquad 0 < x < a$$

$$x > a$$

令 $K = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}}$

在 $(0,a)$ 区域有解 e^{Kx}, e^{-Kx}，即

$$B\cosh Kx + C\sinh Kx$$

其中 $\cosh Kx = \dfrac{e^{Kx} + e^{-Kx}}{2}$ $\sinh Kx = \dfrac{e^{Kx} - e^{-Kx}}{2}$

在 $x > a$ 区域有界, 于是有解

$$Ae^{-Kx}$$

1．偶宇称态解

$$u(x) = \begin{cases} B\cosh Kx & 0 < x < a \\ Ae^{-Kx} & x > a \end{cases}$$

由波函数在 a 处连续

$$Ae^{-Ka} = B\cosh Ka$$

由导数间的关系为

$$-AKe^{-Ka} - BK\sinh Ka = -\frac{2mV_0}{\hbar^2} Ae^{-Ka}$$

所以，

$$\frac{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - K}{K} Ae^{-Ka} = B\sinh Ka$$

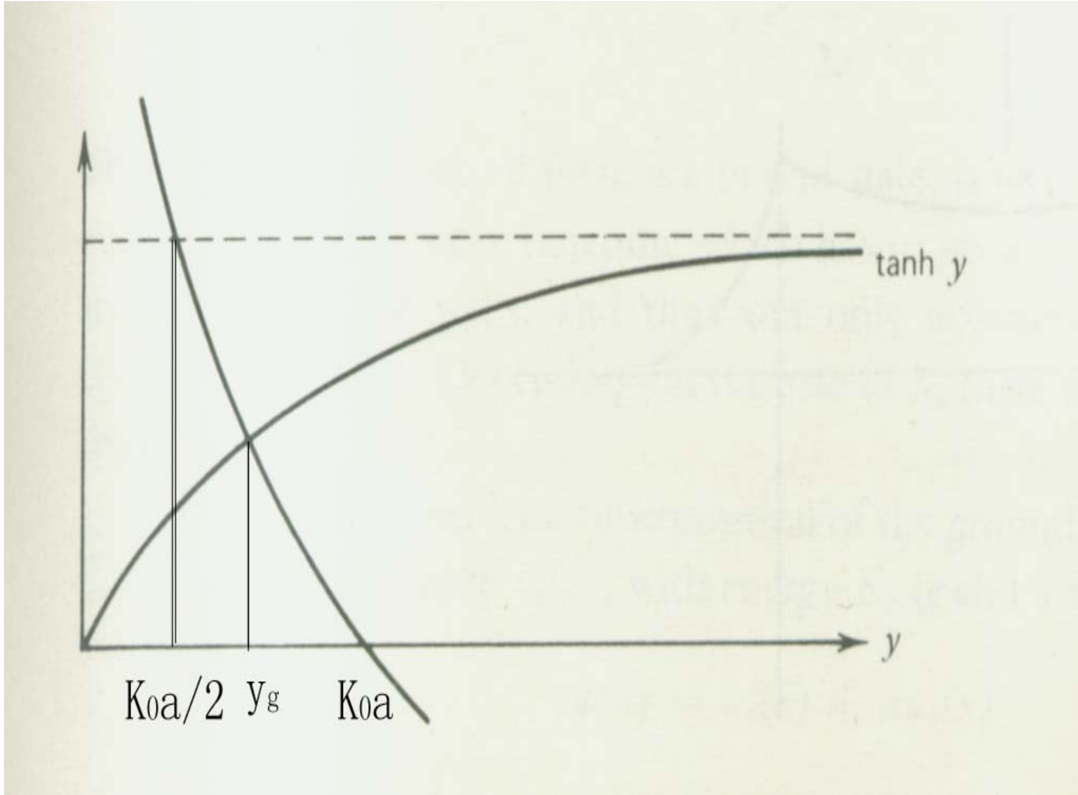
于是有

$$\tanh Ka = \frac{K_0}{K} - 1 \qquad K_0 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$$

取　　$y = Ka$

得

$$\tanh y = \frac{K_0 a}{y} - 1$$



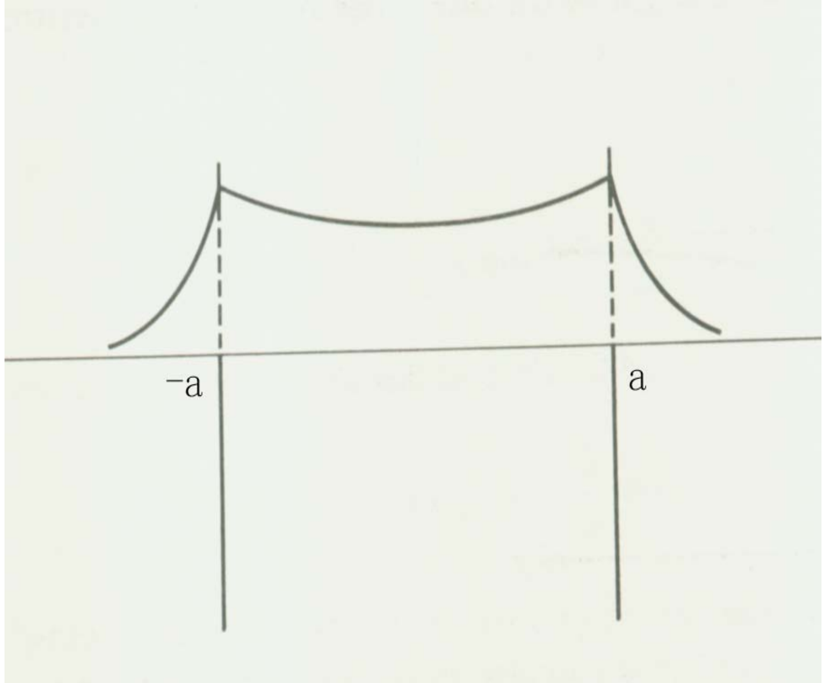
偶宇称态的能量为

$$E_g = -\frac{\hbar^2 y_g^2}{2ma^2}$$

$$\frac{1}{2}K_0 a < y_g < K_0 a$$

其相应的波函数为

$$u(x)=\begin{cases} Ae^{-y_g x/a} & x>a \\ B\cosh y_g x/a & |x|<a \\ Ae^{y_g x/a} & x<-a \end{cases}$$



2．奇宇称解：

由波函数在 $x=0$ 处为零，于是有

$$u(x)=\begin{cases} B\sinh Kx & 0<x<a \\ Ae^{-Kx} & x>a \end{cases}$$

由波函数在 $x=a$ 处连续

$$B\sinh Ka = Ae^{-Ka}$$

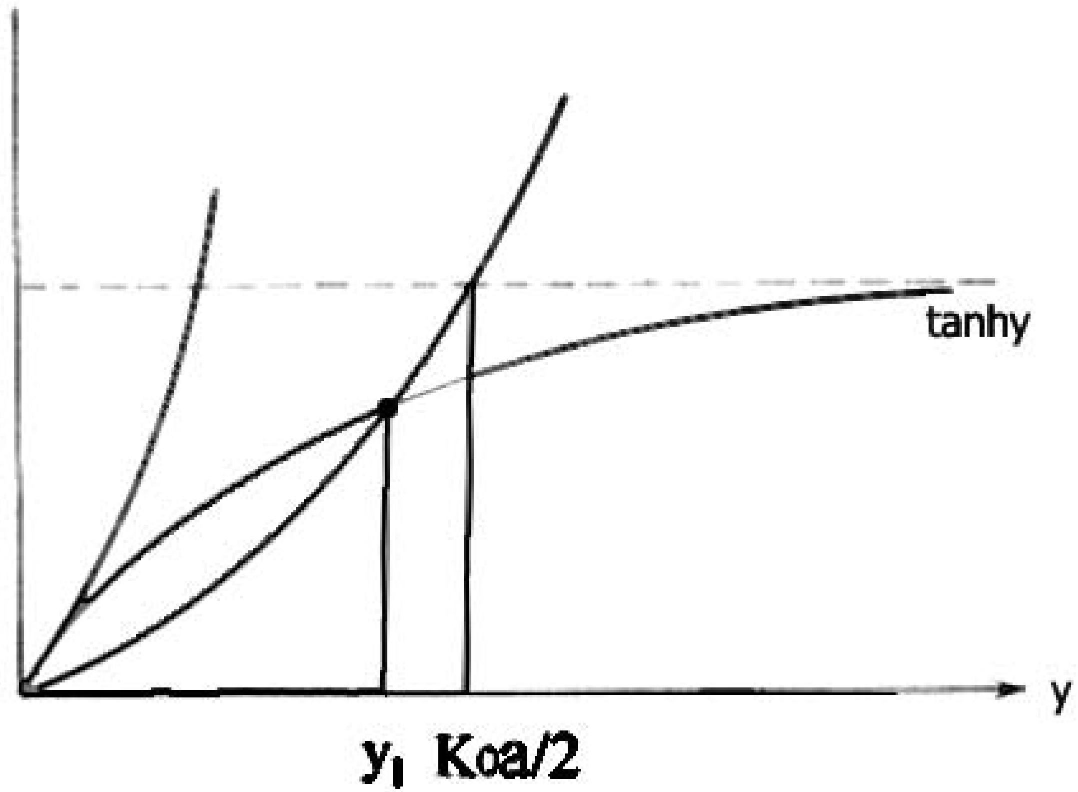
波函数导数在 $x=a$ 处的联系

$$-AKe^{-Ka} - BK\cosh Ka = -\frac{2mV_0}{h^2}Ae^{-Ka}$$

$$B\cosh Ka = \frac{K_0 - K}{K}Ae^{-Ka}$$

得

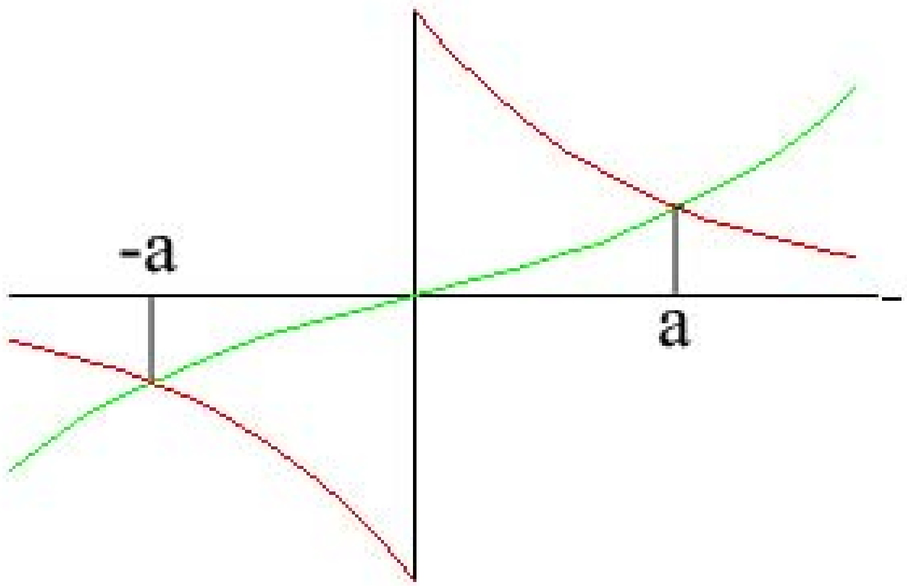
$$\tanh y = \frac{y}{K_0 a - y}$$



奇宇称态的能量为

$$E_1 = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{y_1}{a}\right)^2 \qquad 0 < y_1 < \frac{K_0 a}{2}$$

$$u_1(x) = \begin{cases} Ae^{-y_1 x/a} & x > a \\ B\sinh y_1 x/a & |x| < a \\ -Ae^{y_1 x/a} & x < -a \end{cases}$$



结论：① 当位势有对称性时，用宇称概念求解简易得多。

② 位势如为δ势，

$$V = V_0\delta(x - a)$$

则在 **x＝a** 处的波函数导数间的联系为

$$[u'(a+0) - u'(a-0)] = \frac{2mV_0}{\hbar^2}u(a)$$

§ 3.8 一维谐振子的算符代数法的解法：

若粒子在

$$V(x) = \frac{1}{2}Kx^2$$

中运动

$$(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}Kx^2)u = Eu$$

令 $\omega = \sqrt{\frac{K}{m}}$，则

$$(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2)u = Eu$$

该问题还有其他办法求解，那就是用算符代数法来求解。

（1）能量本征值

我们定义二个没有量纲的算符

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{1}{2}}\left[i(mh\omega)^{-1/2}\hat{p}_x + \left(\frac{m\omega}{h}\right)^{1/2}\hat{x} \right]$$

$$\hat{a}^{\dagger} = \sqrt{\frac{1}{2}}\left[-i(mh\omega)^{-1/2}\hat{p}_x + \left(\frac{m\omega}{h}\right)^{1/2}\hat{x} \right]$$

现看

$$\hat{a}\hat{a}^{\dagger} = \frac{1}{2}\left[\frac{1}{m\hbar\omega}\hat{p}_x^2 + \frac{m\omega}{\hbar}\hat{x}^2 + \frac{i}{\hbar}(\hat{p}_x\hat{x} - \hat{x}\hat{p}_x)\right]$$

$$= \frac{1}{\hbar\omega}\left(\hat{H} + \frac{1}{2}\hbar\omega\right)$$

$$\hat{a}^{\dagger}\hat{a} = \frac{1}{2}[\frac{1}{m\hbar\omega}\hat{p}_x^2 + \frac{m\omega}{\hbar}\hat{x}^2 - \frac{i}{\hbar}(\hat{p}_x\hat{x} - \hat{x}\hat{p}_x)]$$

$$= \frac{1}{\hbar\omega}\left(\hat{H} - \frac{1}{2}\hbar\omega\right)$$

于是，有二个重要结论：

A. $[\hat{a},\hat{a}^{\dagger}]=\hat{a}\hat{a}^{\dagger}-\hat{a}^{\dagger}\hat{a}=1$

B. $\hat{H}=(\hat{a}^{\dagger}\hat{a}+\frac{1}{2})h\omega=(\hat{a}\hat{a}^{\dagger}-\frac{1}{2})h\omega$

现看

$$\hat{H}\hat{a}=(\hat{a}\hat{a}^{\dagger}-\frac{1}{2})h\omega\hat{a}$$

$$=\hat{a}(\hat{a}^{\dagger}\hat{a}-\frac{1}{2})h\omega$$

$$\hat{H}\hat{a}=\hat{a}(\hat{H}-\hbar\omega)$$

若 u_n 是 $\hat{H}$ 的本征态，相应本征值为 E_n

$$\hat{H}u_n = E_n u_n$$

$$\hat{H}\hat{a}u_n = \hat{a}(\hat{H}-\hbar\omega)u_n = (E_n-\hbar\omega)\hat{a}u_n$$

$\hat{a}u_n$ 也是 $\hat{H}$ 的本征态，本征值为 $E_n-\hbar\omega$ 能量下降了一个 $\hbar\omega$（即称为一个量子)，即湮没一个量子。通常称

$$\hat{a}$$

为声子湮没算符

同样有

$$\hat{H}\hat{a}^{\dagger}u_n=(\hat{a}^{\dagger}\hat{a}+\frac{1}{2})\hbar\omega\hat{a}^{\dagger}u_n=\hat{a}^{\dagger}(\hat{a}\hat{a}^{\dagger}+\frac{1}{2})\hbar\omega u_n$$

$$=\hat{a}^{\dagger}(\hat{a}\hat{a}^{\dagger}-\frac{1}{2}+1)\hbar\omega u_n=(E_n+\hbar\omega)\hat{a}^{\dagger}u_n$$

$$\hat{H}\hat{a}^{\dagger}u_n=(E_n+\hbar\omega)\hat{a}^{\dagger}u_n$$

$\hat{a}^{\dagger}u_n$也是$\hat{H}$的本征函数，相应本征值为$E_n+\hbar\omega$

即能量增加 $\hbar\omega$，所以，

$$\hat{a}^{\dagger}$$

被称为声子的产生算符。

由于 $\hat{H}$ 是二个平方项之和，所以它的能量本征值恒为正。因此必存在能量最小的本征态

u_0　　　　E_0

$\hat{a}u_0 \neq 0$　　　　$E_0 - \hbar\omega$

这与 u_0为最低能量所对应的本征态的假设相冲突

$$\hat{a}u_0 = 0$$

$$\hat{H}u_0 = E_0 u_0 = (\hat{a}^{\dagger}\hat{a} + \frac{1}{2})\hbar\omega u_0$$

$$= \frac{1}{2}\hbar\omega u_0$$

所以，最低能量为 $\frac{1}{2}\hbar\omega$

任一激发态 u_n ，在算符 $\hat{a}$ 的连续作用下，最终必须到态 u_0 。

若 u_n 经 $\hat{a}^n u_n \to u_0$ ，则 u_n 的本征值应为

$$(n + \frac{1}{2})\hbar\omega$$

$$\hat{H}u_n \propto (\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2})\hbar\omega(\hat{a}^\dagger)^n u_0$$

$$= (n + \frac{1}{2})\hbar\omega(\hat{a}^\dagger)^n u_0$$

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}(\hat{a}^\dagger)^n u_0$$

$$= n(\hat{a}^\dagger\hat{a})^n u_0$$

所以，$\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$ 称为声子数算符。

谐振子的能量本征值，即能级是等间距的

$$(n + 1/2)\hbar\omega$$

(2) 能量本征函数

A. 归一化的能量本征态

谐振子的能量本征态，可由 $\hat{a}^\dagger$ 作用而获得

$$u_n \propto \left(\hat{a}^\dagger\right)^n u_0$$

现求归一化系数

假设：u_s 是归一化的，相应本征值 $(s+\frac{1}{2})\hbar\omega$

那

$$\hat{a}^\dagger u_s \qquad (s+1+\frac{1}{2})\hbar\omega$$

$$\hat{a}^{\dagger} = \sqrt{\frac{1}{2}}\left[-i(mh\omega)^{-1/2}\hat{p}_x + \left(\frac{m\omega}{h}\right)^{1/2}\hat{x}\right] = \sqrt{\frac{1}{2}}\left(-\frac{d}{d\xi} + \xi\right)$$

$$\xi = \alpha x \qquad\qquad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{h}}$$

$$\int\left(\hat{a}^{\dagger}u_s\right)^{*}\left(\hat{a}^{\dagger}u_s\right)dx$$

$$=\int \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\left(-\frac{d}{d\xi}+\xi\right)u_s^*\right]\left(\hat{a}^\dagger u_s\right)dx$$

$$=-\frac{1}{\sqrt{2\alpha}}u_s^*\left(\hat{a}^\dagger u_s\right)\Big|_{-\infty}^{+\infty}+\frac{1}{\sqrt{2}}\int u_s^*\left(\frac{d}{d\xi}+\xi\right)\left(\hat{a}^\dagger u_s\right)dx$$

$$=\int u_s^*\left(\hat{a}\hat{a}^\dagger\right)u_s dx$$

$$=(s+1)\int u_s^* u_s dx$$

$$=(s+1)$$

$$u_{s+1} = \frac{\hat{a}^{\dagger} u_s}{\sqrt{(s+1)}}$$

$$u_1 = \frac{\hat{a}^{\dagger} u_0}{\sqrt{1}}$$

$$u_2 = \frac{\hat{a}^{\dagger} u_1}{\sqrt{2}} = \frac{\hat{a}^{\dagger}(\hat{a}^{\dagger} u_0)}{\sqrt{2 \cdot 1}} = \frac{(\hat{a}^{\dagger})^2 u_0}{\sqrt{2!}}$$

$$u_3 = \frac{\hat{a}^\dagger u_2}{\sqrt{3}} = \frac{(\hat{a}^\dagger)^3 u_0}{\sqrt{3!}}$$

所以，

$$u_n = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n u_0}{\sqrt{n!}} \qquad \hat{a}u_0 = 0$$

至此，对谐振子势下的本征值，本征态都已求出，问题已完全解决。

例如：求 $\bar{x}$, $\overline{x^2}$

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{1}{2}}[i(mh\omega)^{-1/2}\hat{p}_x + \left(\frac{m\omega}{h}\right)^{1/2}\hat{x}]$$

$$\hat{a}^{\dagger} = \sqrt{\frac{1}{2}}[-i(mh\omega)^{-1/2}\hat{p}_x + \left(\frac{m\omega}{h}\right)^{1/2}\hat{x}]$$

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{h}{2m\omega}}\left(\hat{a} + \hat{a}^{\dagger}\right)$$

$$\hat{x}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}\left(\left(\hat{a}^\dagger\right)^2 + \left(\hat{a}\right)^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}\right)$$

于是 $\bar{x} = \int u_n^* \hat{x} u_n dx$

$$= \int u_n^* \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\hat{a}\hat{a}^\dagger \frac{\left(\hat{a}^\dagger\right)^{n-1} u_0}{\sqrt{n!}} + \frac{\left(\hat{a}^\dagger\right)^{n+1} u_0}{\sqrt{n!}} \right) dx$$

$$= \int u_n^* \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(n \frac{\left(\hat{a}^\dagger\right)^{n-1} u_0}{\sqrt{n!}} + \sqrt{n+1}\, u_{n+1} \right) dx$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \int u_n^* \left(\sqrt{n}\, u_{n-1} + \sqrt{n+1}\, u_{n+1} \right) dx$$

$$= 0$$

$$\overline{x} = 0$$

$$\overline{x^2} = \int u_n^* \hat{x}^2 u_n \, dx$$

$$= \frac{h}{2m\omega} \int u_n^* \left(\frac{\left(\hat{a}^\dagger\right)^{n+2} u_0}{\sqrt{n!}} + \hat{a}\hat{a}\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger \frac{\left(\hat{a}^\dagger\right)^{n-2} u_0}{\sqrt{n!}} + \hat{a}\hat{a}^\dagger u_n + \hat{a}^\dagger \hat{a} u_n \right) dx$$

$$= \frac{h}{2m\omega}\int u_n^* \left(\sqrt{(n+1)(n+2)}\,u_{n+2} + \hat{a}(\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1)\hat{a}^\dagger \frac{u_{n-2}}{\sqrt{n(n-1)}} + (n+1)u_n + n u_n \right) dx$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega}\int u_n^* \left(n(n-1)\frac{u_{n-2}}{\sqrt{n(n-1)}} + (n+1)u_n + n u_n \right) dx$$

$$= \frac{\hbar}{m\omega}\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

$$\overline{x^2} = \frac{\hbar}{m\omega}\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

B. 能量本征函数

$$\hat{a}u_0 = 0$$

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{1}{2}}[i(mh\omega)^{-1/2}\hat{p}_x + \left(\frac{m\omega}{h}\right)^{1/2}\hat{x}] = \sqrt{\frac{1}{2}}(\frac{d}{d\xi} + \xi)$$

其中，$\xi = \alpha x$ 是没有量纲的量，$\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ 。

所以

$$\frac{d}{d\xi}u_0 = -\xi u_0$$

于是有 $u_0(x) = Ae^{-\xi^2/2}$

由归一化

$$A^2\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2}dx = A^2\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2}\sqrt{\pi} = 1$$

$$A = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$$

$$u_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi h}\right)^{1/4} e^{-\xi^2/2} = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-\alpha^2x^2/2}$$

$$u_0 = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-\xi^2/2}$$

$$u_n = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n u_0}{\sqrt{n!}}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(-\frac{d}{d\xi} + \xi\right)^n \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-\xi^2/2}$$

而算符

$$\left(-\frac{d}{d\xi}+\xi\right) \equiv -e^{\xi^2/2}\frac{d}{d\xi}e^{-\xi^2/2}$$

$$\left(-\frac{d}{d\xi}+\xi\right)^2 \equiv \left(-\frac{d}{d\xi}+\xi\right)(-1)e^{\xi^2/2}\frac{d}{d\xi}e^{-\xi^2/2}$$

$$\equiv (-1)^2 e^{\xi^2/2}\frac{d}{d\xi}e^{-\xi^2/2}e^{\xi^2/2}\frac{d}{d\xi}e^{-\xi^2/2}$$

$$\equiv (-1)^2 e^{\xi^2/2}\frac{d^2}{d\xi^2}e^{-\xi^2/2}$$

$$\left(-\frac{d}{d\xi}+\xi\right)^n \equiv (-1)^n e^{\xi^2/2}\frac{d^n}{d\xi^n}e^{-\xi^2/2}$$

所以，

$$u_n(x) = \left(\frac{\alpha}{2^n n!\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} (-1)^n e^{\xi^2/2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2/2} e^{-\xi^2/2}$$

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

其中

$$H_n(\alpha x) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}$$

它是一多项式，最高幂次为 n ，系数为 2^n；宇称为 $(-1)^n$，被称为厄米多项式（ Hermit Polynomials ）。

（3）讨论和结论

A. 当粒子运动于谐振子势 $\frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ 中，其能量取分立值

$$(n+\frac{1}{2})h\omega$$

$$\hat{H}u_n=(n+\frac{1}{2})h\omega u_n \qquad \hat{H}=(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\frac{1}{2})h\omega \qquad [\hat{a},\hat{a}^\dagger]=1$$

$\hbar\omega$ 为一个声子所带的能量。相应的归一化本征态

$$u_n=\frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n u_0 \quad （而 \ \hat{a}u_0=0 \ ）$$

在坐标空间中，归一化的本征函数

$$u_n(x) = \left(\frac{\alpha}{2^n n!\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-\xi^2/2} H_n(\alpha x)$$

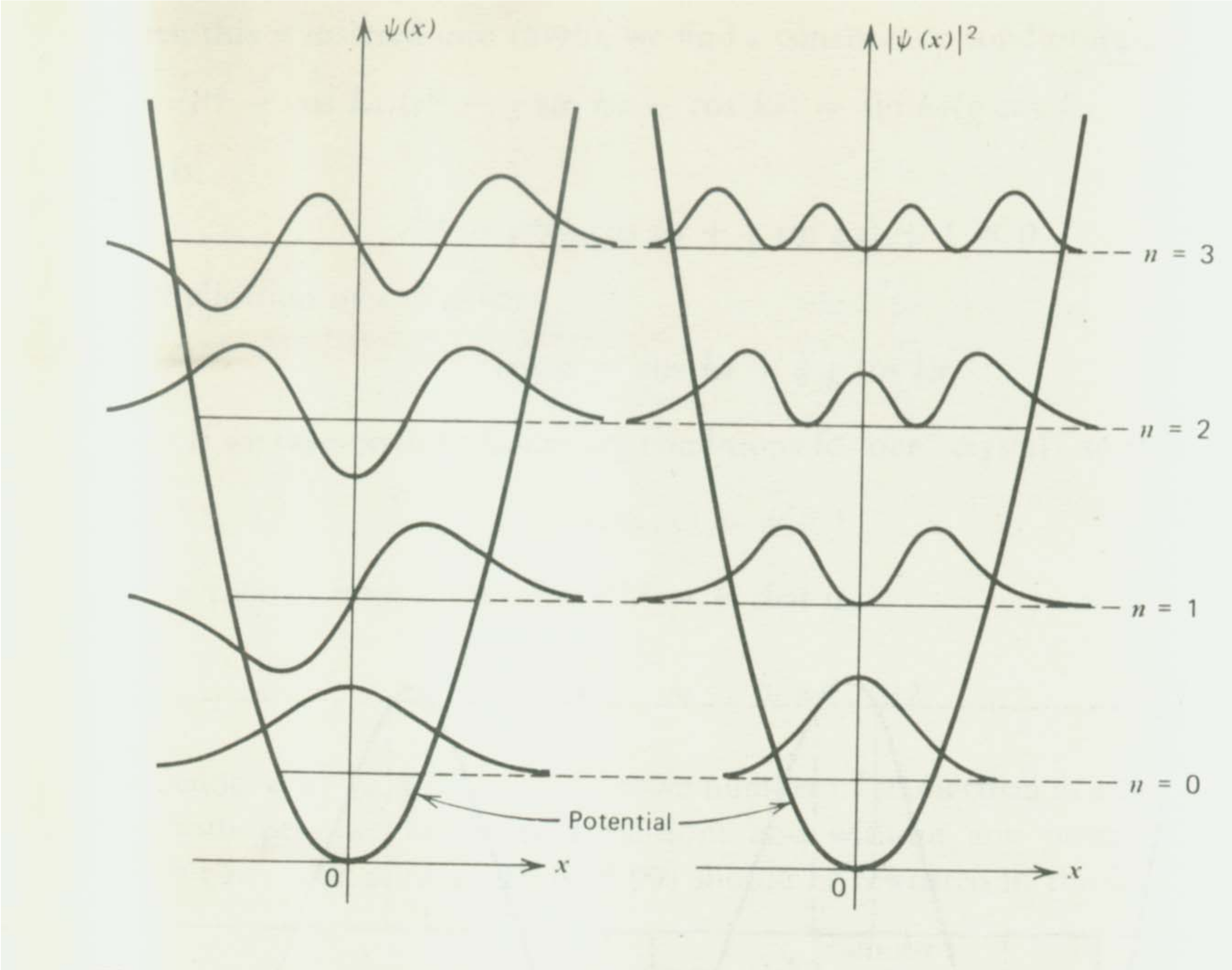
$$H_n(\alpha x) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \qquad \xi = \alpha x \qquad (\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{h}})$$

具体而言

$$u_0 = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-\alpha^2 x^2/2}$$

$$u_1(x) = \left(\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-\alpha^2 x^2/2} 2\alpha x$$

$$u_2(x) = \left(\frac{\alpha}{8\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-\alpha^2 x^2/2} [4(\alpha x)^2 - 1]$$



ψ(x)
|ψ(x)|²
n = 3
n = 2
n = 1
n = 0
Potential
0
x
0
x

B. u_0 **显然是偶函数，** 而 $\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(-\frac{d}{d\xi}+\xi)$ 是

改变奇偶性的算符，所以 $u_n(x)$ 的宇称为 $(-1)^n$，即每条能级的宇称是确定的。

C. 零点能与不确定关系： 当体系处于最低态，则

$$\overline{\hat{H}}\Big|_{u_0} = \frac{1}{2}\hbar\omega = \frac{1}{2m}\overline{\hat{p}_x^2}_0 + \frac{1}{2}m\omega^2\overline{\hat{x}^2}_0$$

对于任何实数 A＋B＝C，则有

$$\frac{C^2}{4} \geq AB$$

于是有

$$\overline{\hat{p}_{x}^{2}}_{0}\cdot\overline{\hat{x}^{2}}_{0}\le\frac{1}{4}\left(\frac{1}{2}h\omega\right)^{2}\cdot 2m\cdot\frac{2}{m\omega^{2}}=\frac{h^{2}}{4}$$

而

$$\Delta x_{0}=\sqrt{\overline{\left(x-\overline{x}\right)^{2}}_{0}}=\sqrt{\overline{x^{2}}_{0}}$$

$$\Delta p_{x0}=\sqrt{\overline{\left(p_{x}-\overline{p_{x}}\right)^{2}}_{0}}=\sqrt{\overline{p_{x}^{2}}_{0}}$$

所以

$$\Delta x_{0}\cdot\Delta p_{x0}\le\frac{h}{2}$$

但由不确定关系要求

$$\Delta x_0 \cdot \Delta p_{x0} \geq \frac{\hbar}{2}$$

因而，只有

$$\Delta x_0 \cdot \Delta p_{x0} = \frac{\hbar}{2}$$

才不违背不确定关系。

这表明，处于谐振子势中的粒子，最低能量不能小于$\frac{1}{2}\hbar\omega$。这与经典不同，经典粒子可停在原点，能量为零。

D. 可以证明：u_n 有 n 个节点（它是第n+1条能级的态）

$$u_n(x)=\left(\frac{\alpha}{2^n n!\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-\xi^2/2}H_n(\alpha x)$$

这表明，在 $(n-\frac{1}{2})\hbar\omega$ 和 $(n+\frac{1}{2})\hbar\omega$ 能级之间不可能有另外能级，所以解是完全的。

E. 递推关系：

我们将导出基本的递推关系

1. $$\hat{a}^{\dagger}u_n=\hat{a}^{\dagger}\frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^{\dagger})^n u_0$$

$$=\frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^{\dagger})^{n+1}u_0$$

$$\hat{a}^{\dagger}u_n=\sqrt{n+1}\,u_{n+1}$$

2. $$\hat{a}u_n=\hat{a}\hat{a}^{\dagger}\frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^{\dagger})^{n-1}u_0$$

$$=n\frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^{\dagger})^{n-1}u_0$$

$$\hat{a}u_n = \sqrt{n}u_{n-1}$$

3.

$$xu_n = \sqrt{\frac{h}{2m\omega}}\left(\hat{a} + \hat{a}^{\dagger}\right)u_n$$

$$= \frac{1}{\alpha}\left(\sqrt{\frac{n}{2}}u_{n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}}u_{n+1}\right)$$

4.

$$\frac{d}{dx}u_n = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{a}-\hat{a}^+\right)u_n$$

$$= \alpha\left(\sqrt{\frac{n}{2}}u_{n-1} - \sqrt{\frac{n+1}{2}}u_{n+1}\right)$$

3.7 3.8 3.13

§ 3.9 相干态

（1）湮灭算符 $\hat{a}$ 的本征态

$$\hat{a}\psi_c = c\psi_c$$

令

$$\psi_c = \sum_n b_n u_n$$

于是有

$$\hat{a}\psi_c = \sum_n b_n \hat{a} u_n$$

$$= \sum_n b_n \sqrt{n} u_{n-1}$$

$$= c\sum_{n'} b_{n'} u_{n'}$$

可得

$$b_n\sqrt{n} = cb_{n-1} \Rightarrow b_n = b_0 \frac{c^n}{\sqrt{n!}}$$

由 V_c 归一化得

$$\int V_c^* V_c d\underline{r} = |b_0|^2 \sum_n \frac{|c|^{2n}}{n!} = |b_0|^2 e^{|c|^2} = 1$$

$$b_0 = e^{-\frac{1}{2}|c|^2}$$

所以 $\hat{a}$ 相应于本征值为 c 的归一化本征态

$$V_c = e^{-\frac{1}{2}|c|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c^n}{\sqrt{n!}} u_n = e^{-\frac{1}{2}|c|^2 + c\hat{a}^\dagger} u_0$$

我们看到 $\hat{x}$ ，$\hat{p}$ ，没有共同的本征态，但其线性组合

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{1}{2}}[i(m\hbar\omega)^{-1/2}\hat{p}_x + \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}\hat{x}]$$

有本征态。这类态称为相干态。它有性质：

A. 在该态中位置和动量满足最小不确定关系

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = \frac{1}{2}\hbar$$

$$\bar{x} = \int V_c^* \hat{x} V_c dx = e^{-|c|^2} \sum_{n,s} \frac{c^{n^*}}{\sqrt{n!}} \int u_n^* \hat{x} \frac{c^s}{\sqrt{s!}} u_s dx$$

$$= e^{-|c|^2} \sum_{n,s} \frac{c^{n^*}}{\sqrt{n!}} \int u_n^* \frac{c^s}{\sqrt{s!}} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \left(\sqrt{\frac{s}{2}} u_{s-1} + \sqrt{\frac{s+1}{2}} u_{s+1}\right) dx$$

$$= e^{-|c|^2} \sum_n \frac{c^{n^*}}{\sqrt{n!}} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\frac{c^{n+1}}{\sqrt{n!}} + \frac{c^{n-1}\sqrt{n}}{\sqrt{(n-1)!}}\right)$$

$$= \sqrt{\frac{h}{2m\omega}}(c + c^*)$$

同理有

$$\overline{p}_x = \int V_c^* \hat{p}_x V_c dx = e^{-|c|^2} \sum_{n,s} \frac{c^{n^*}}{\sqrt{n!}} \int u_n^* \hat{p}_x \frac{c^s}{\sqrt{s!}} u_s dx$$

$$= e^{-|c|^2} (-ih) \sum_{n,s} \frac{c^{n^*}}{\sqrt{n!}} \int u_n^* \sqrt{\frac{m\omega}{h}} \frac{c^s}{\sqrt{s!}} \left(\sqrt{\frac{s}{2}} u_{s-1} - \sqrt{\frac{s+1}{2}} u_{s+1}\right) dx$$

$$=(-i\hbar)\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}e^{-|c|^2}\left(\sum_{n=0}\frac{|c|^{2n}c}{n!}-\sum_{n=1}\frac{|c|^{n-1}c^*}{\sqrt{(n-1)!}}\right)$$

$$=-i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(c-c^*)$$

$$\overline{x^2}=\int V_c^*\hat{x}^2V_c dx=\frac{\hbar}{2m\omega}(c^2+1+2|c|^2+c^{*2})$$

$$\overline{p_x^2}=\int V_c^*\hat{p}_x^2V_c dx=\frac{m\hbar\omega}{2}(-c^2+1+2|c|^2-c^{*2})$$

于是有

$$\Delta x^2 = \overline{x^2} - \bar{x}^2$$

$$= \frac{h}{2m\omega}(c^2 + 1 + 2|c|^2 + c^{*2}) - \frac{h}{2m\omega}(c + c^*)^2$$

$$= \frac{h}{2m\omega}$$

$$\Delta p_x^{\ 2} = \overline{p_x^2} - \bar{p}_x^{\ 2}$$

$$= \frac{h}{2m\omega}(-c^2 + 1 + 2|c|^2 - c^{*2}) + \frac{h}{2m\omega}(c - c^*)^2$$

$$= \frac{mh\omega}{2}$$

$$\Delta x \cdot \Delta p_x = \frac{1}{2}\hbar$$

B. 相干态随时间的演化

若处于谐振子势的粒子，在 $t=0$ 时，处于相干态 ψ_c ，则 t 时，体系的波函数为

$$\psi_c(x,t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}\psi_c$$

$$= e^{-\frac{1}{2}|c|^2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{c^n}{\sqrt{n!}}e^{-i\hat{H}t/h}u_n$$

$$= e^{-\frac{1}{2}|c|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{c^n}{\sqrt{n!}} e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega t} u_n$$

$$= e^{-i\omega t/2} V_{ce^{-i\omega t}}$$

于是

$$\hat{a} e^{-i\omega t/2} V_{ce^{-i\omega t}} = ce^{-i\omega t} (e^{-i\omega t/2} V_{ce^{-i\omega t}})$$

这表明 $\hat{a}$ 的本征值在 $t=0$ 时为 c ，而在 t 时刻为

$$ce^{-i\omega t}$$

我们有平均值

$$\bar{\hat{a}} = \int V_c^*(x,t)\hat{a}V_c(x,t)dx$$

$$= \sqrt{\frac{1}{2}}\int V_c^*(x,t)\left[i(mh\omega)^{-1/2}\hat{p}_x + \sqrt{\frac{m\omega}{h}}\hat{x}\right]V_c(x,t)dx$$

$$= \sqrt{\frac{1}{2}}\left[i(mh\omega)^{-1/2}\overline{\hat{p}_x} + \sqrt{\frac{m\omega}{h}}\overline{\hat{x}}\right]$$

$$= ce^{-i\omega t}$$

我们也有平均值

$$\overline{\hat{a}^{\dagger}} = \int V_c^*(x,t)\hat{a}^{+}V_c(x,t)dx$$

$$= \sqrt{\frac{1}{2}}\left[-i(m\hbar\omega)^{-1/2}\overline{\hat{p}_x} + \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,\overline{\hat{x}}\right]$$

$$= c^* e^{i\omega t}$$

所以，

$$\overline{\hat{x}(t)} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\overline{\hat{a}} + \overline{\hat{a}^{\dagger}})$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(ce^{-i\omega t} + c^{*}e^{i\omega t})$$

$$= x(0)\cos(\alpha - \omega t)$$

其中

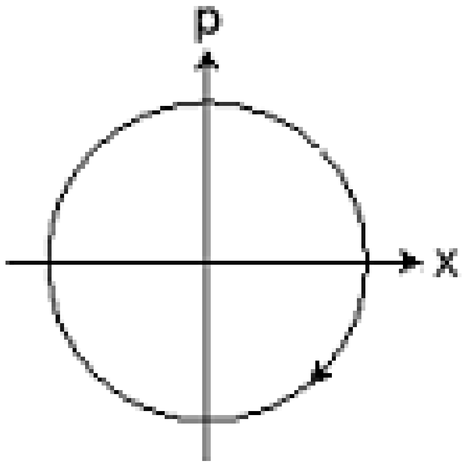
$$c = |c|e^{i\alpha} \qquad x(0) = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}|c|$$

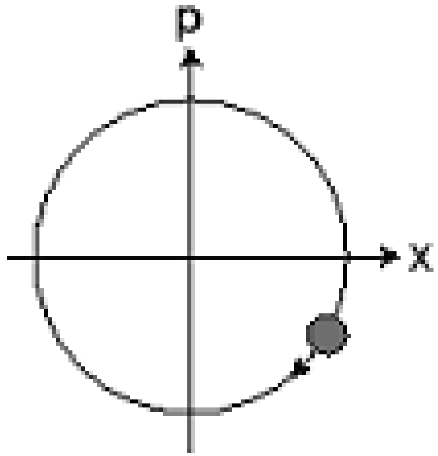
$$\overline{\hat{p}_x(t)} = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\,\frac{(\overline{\hat{a}} - \overline{\hat{a}^{\dagger}})}{i}$$

$$= \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\,\frac{(ce^{-i\omega t} - c^{*}e^{i\omega t})}{i}$$

$$= m\omega x(0)\sin(\alpha - \omega t)$$

它随 **t** 的演化很接近经典谐振子的运动。





从另一个角度来看

$$\hat{a}V(x,t) = ce^{-i\omega t}V(x,t)$$

$$= \rho e^{i\alpha}e^{-i\omega t}V(x,t) = \gamma V(x,t)$$

而

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{1}{2}}\left[i(mh\omega)^{-1/2}\hat{p}_x + \sqrt{\frac{m\omega}{h}}\hat{x}\right]$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{2h}}\hat{x} + \sqrt{\frac{h}{2m\omega}}\frac{d}{dx}$$

$$= \frac{1}{2\sigma}x + \sigma\frac{d}{dx}$$

其中

$$\sigma^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} \qquad \gamma = \rho e^{i\theta} \qquad \theta = \alpha - \omega t$$

从而得

$$\frac{d}{dx}V(x,t) = \frac{\gamma}{\sigma}V(x,t) - \frac{x}{2\sigma^2}V(x,t)$$

于是，得解

$$V(x,t) = Ae^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}+\frac{\gamma}{\sigma}x}$$

由

$$|V(x,t)|^2 = |A|^2 e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}+\frac{x}{\sigma}(\gamma+\gamma^*)}$$

$$= |A|^2 e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}+\frac{x}{\sigma}2\rho\cos\theta}$$

$$= |A|^2 e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}+\frac{x_0^2}{2\sigma^2}}$$

其中

$$x_0 = 2\sigma\rho\cos\theta = 2\sigma\rho\cos(\alpha-\omega t)$$

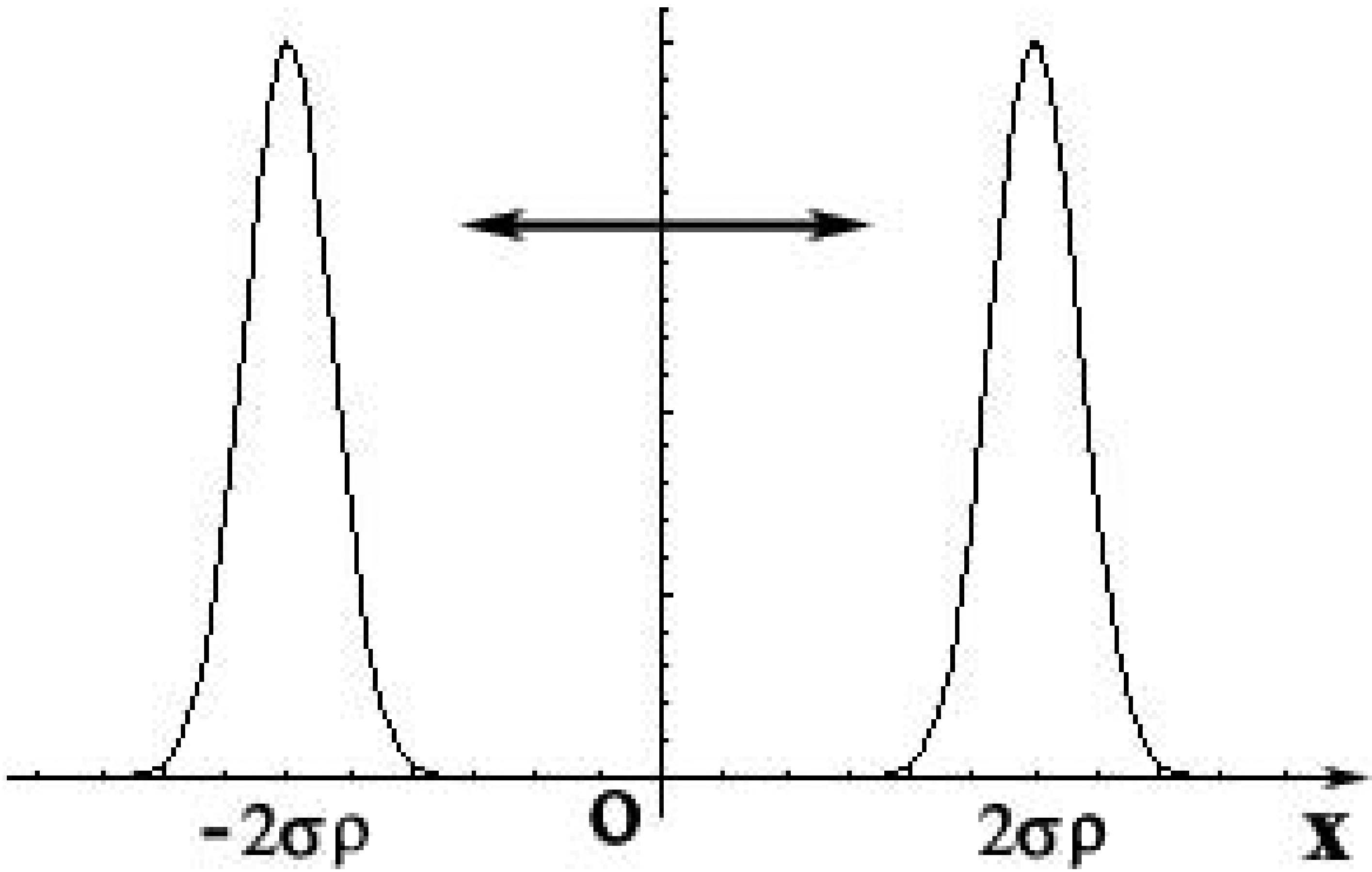
归一化的

$$|V(x,t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}$$

所以，t 时刻算符 $\hat{a}$ 的本征值为

$$ce^{-i\omega t}$$

所对应的本征函数是一高斯型函数，它随时间作简谐振荡。



-2σρ
O
2σρ
x

C. 本征值为实的相干态正是受迫振动的基态

受迫振动体系的哈密顿量为

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - Fx$$

于是，我们有

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 (x - x_0)^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 x_0{}^2$$

其中

$$x_0 = \frac{F}{m\omega^2}$$

如令

$$X = x - x_0$$

- 则

$$\hat{H}_X = \frac{\hat{p}_X^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 x_0^2$$

它的基态满足

$$\hat{A}u_0(X) = 0$$

而

$$\hat{A} = \sqrt{\frac{1}{2}}[i(m\hbar\omega)^{-1/2}\hat{p}_X + \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{X}]$$

$$= \sqrt{\frac{1}{2}}[i(m\hbar\omega)^{-1/2}\hat{p}_X + \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}(\hat{x} - x_0)]$$

$$= \hat{a} - \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x_0$$

所以

$$(\hat{a} - \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x_0) u_0(X) = 0$$

即

$$\hat{a} u_0(X) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x_0 u_0(X)$$

这表明

$$u_0(X) = V_c(x)$$

这时

$$c = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x_0$$

所以，受迫振动的基态 $u_0(X)$ 是哈密顿量

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

的相干态 $V_c(x) = u_0(X)$

$$\hat{a}u_0(X) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x_0 u_0(X)$$

其本征值

$$c = \sqrt{\frac{m\omega}{2h}}x_0$$