

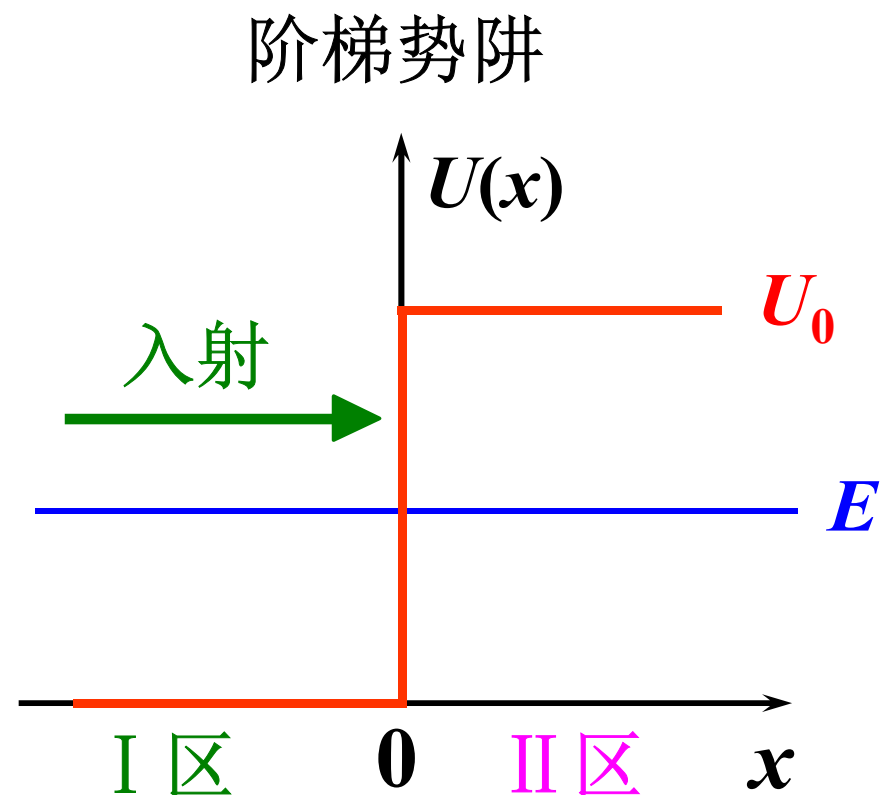
## § 20-3 势垒穿透

### 一 有限深势阱

#### 1 势函数

给定势函数  
(一维势垒)：

$$U(x) = \begin{cases} 0, & (x \leq 0) \\ U_0, & (x > 0) \end{cases}$$



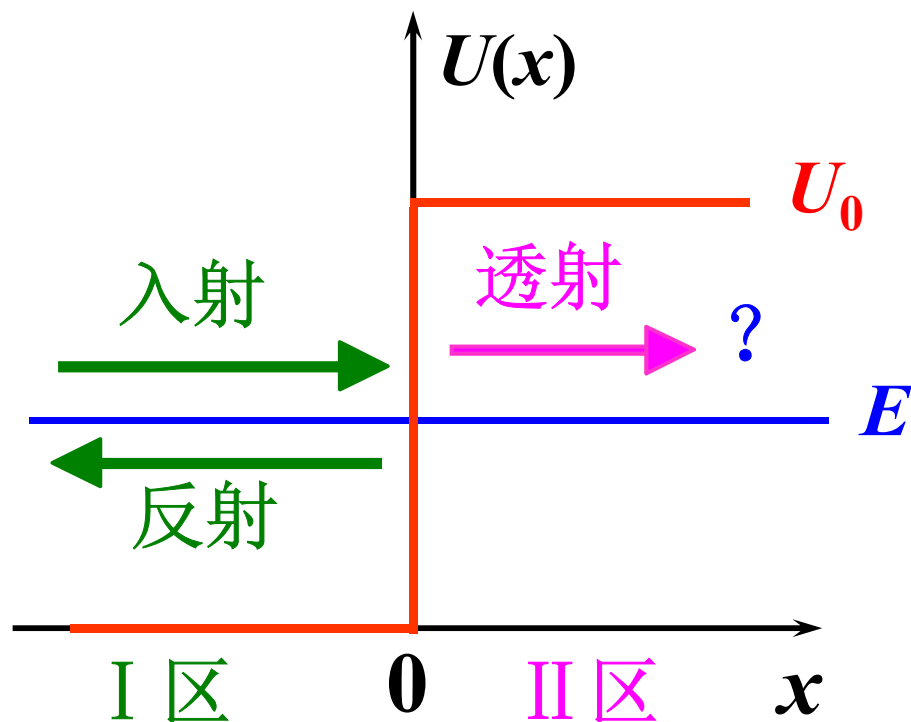
粒子从  $x = -\infty$  处以能量  $E$  入射，

入射能量  $E < U_0$

## 势垒的物理模型：

金属或半导体接触处势能隆起，形成势垒。

这是比无限深势阱更符合实际的模型。



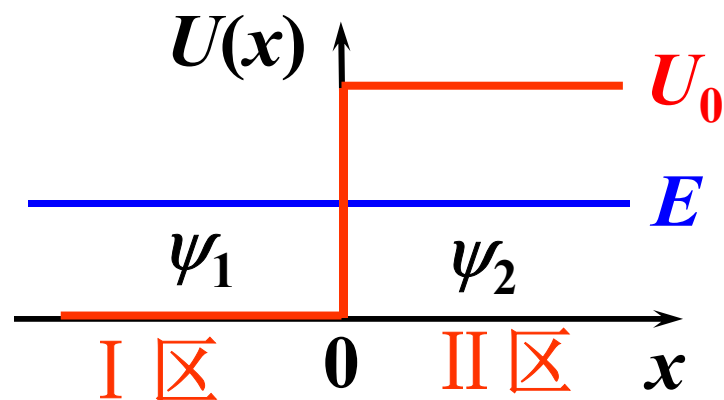
入射能量  $E < U_0$   
粒子能否进入II区

金属内的自由电子的  
能量比逸出功低，  
电子能否从表面逸出？

经典理论认为不可能  
量子理论如何认为？

量子隧道效应已经得到重大应用，量子器件已经制成

## 2. 定态薛定谔方程



入射能量  $E < U_0$

**I 区** ( $x \leq 0$ ) :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_1(x)}{dx^2} = E \psi_1(x)$$

$$\text{令 } k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad k_1 > 0,$$

$$\text{有 } \frac{d^2 \psi_1}{dx^2} + k_1^2 \psi_1 = 0$$

**II 区** ( $x > 0$ ) :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U_0 \right] \psi_2 = E \psi_2$$

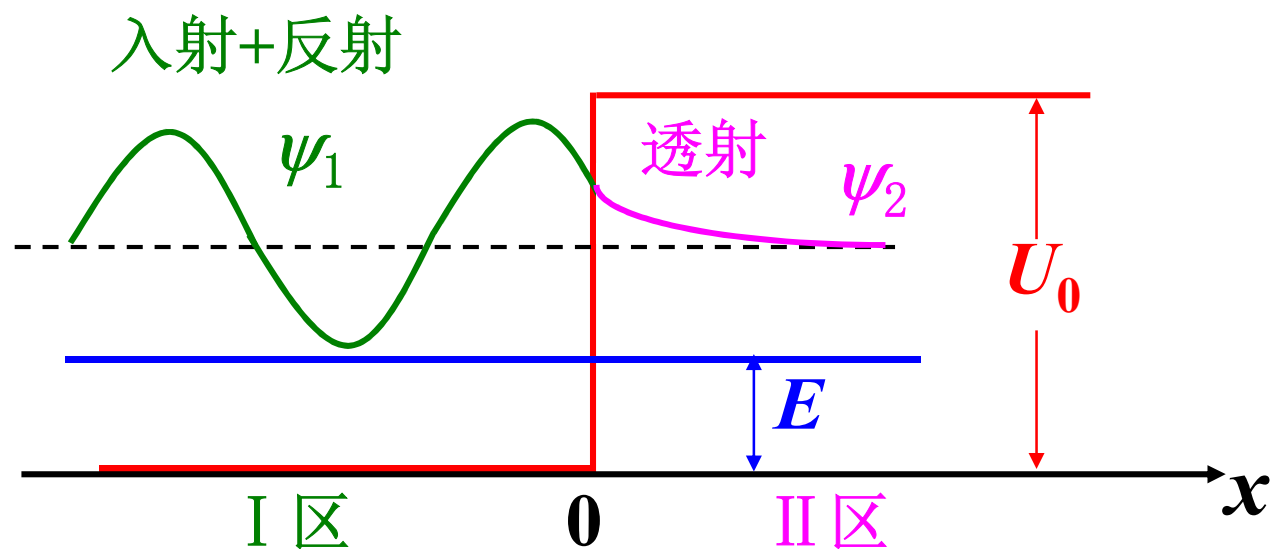
$$\text{令 } ik_2 = \sqrt{\frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}}, \quad k_2 > 0, \quad \text{有 } \frac{d^2 \psi_2}{dx^2} + (ik_2)^2 \psi_2 = 0$$

### 3 通解

$$\frac{d^2 \psi_1}{dx^2} + k_1^2 \psi_1 = 0$$

$$\frac{d^2 \psi_2}{dx^2} + (ik_2)^2 \psi_2 = 0$$

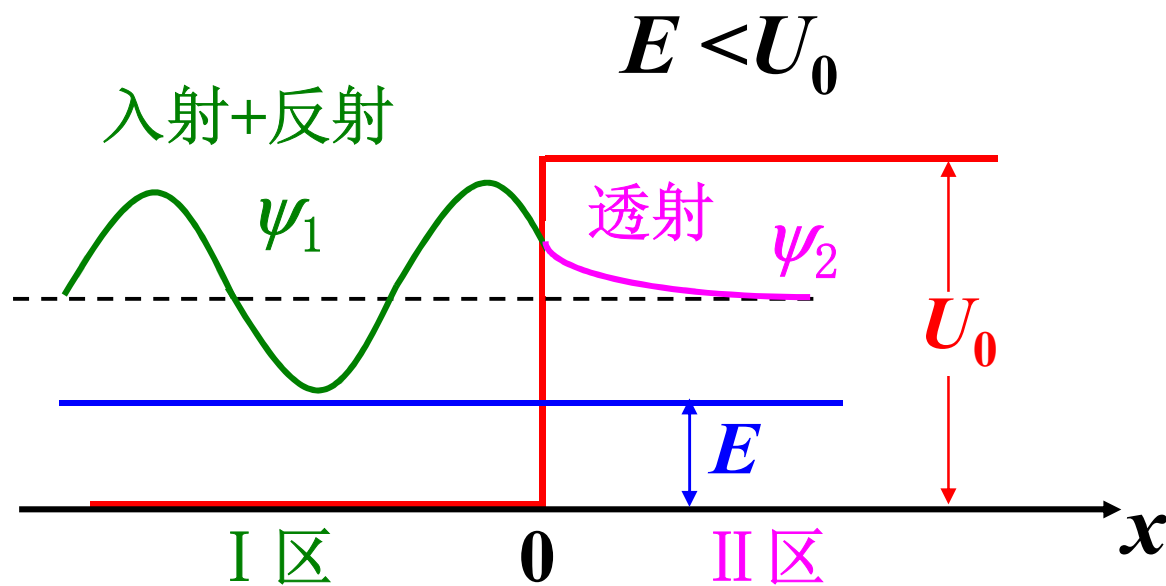
$$\begin{cases} \psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \\ \psi_2(x) = Ce^{-k_2x} + De^{k_2x} \end{cases}$$



$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

$$\psi_2(x) = Ce^{-k_2x} + De^{k_2x}$$

当  $x \rightarrow \infty$  时,  
 $\psi_2(x)$  应有限,  
 得  $D = 0$ ,



$$\begin{cases} \psi_1(x) = \underset{\text{入射波}}{Ae^{ik_1x}} + \underset{\text{反射波}}{Be^{-ik_1x}} & \text{(波动型解)} \\ \psi_2(x) = \underset{\text{透射}}{Ce^{-k_2x}} = Ce^{-\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}x} & \text{(指数型解)} \end{cases}$$

## 4 概率密度（II 区）

$$|\psi(x)|^2 \propto e^{-\frac{2x}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}}$$

$$\psi_2(x) = Ce^{-\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}x}$$

可见在（ $E < U_0$ ）的区域粒子出现的概率  $\neq 0$

经典：粒子不能进入  $E < U$  的区域（动能  $< 0$ ）。

量子：粒子可透入势垒。

例如，电子可逸出金属表面，  
在金属表面形成一层电子气。

$U_0 \uparrow$ 、 $x \uparrow \Rightarrow$  透入的概率  $\downarrow$

势阱越深，粒子能够越过势阱的几率越小；  
粒子能够到达阱外的几率随距离的增加而按指数衰减。

## 方形势阱（阅读）

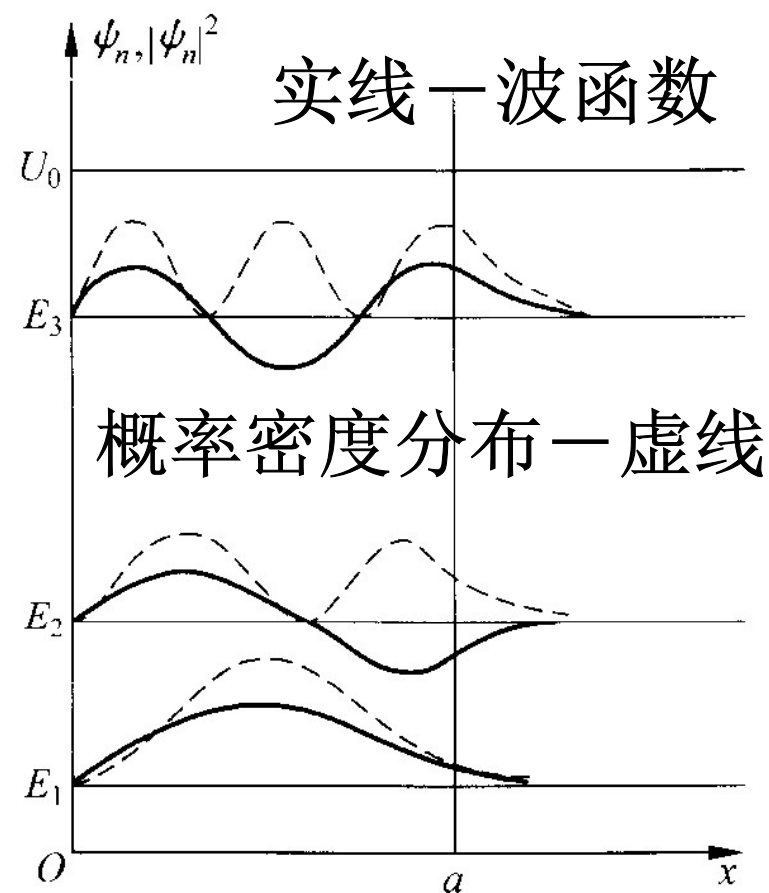
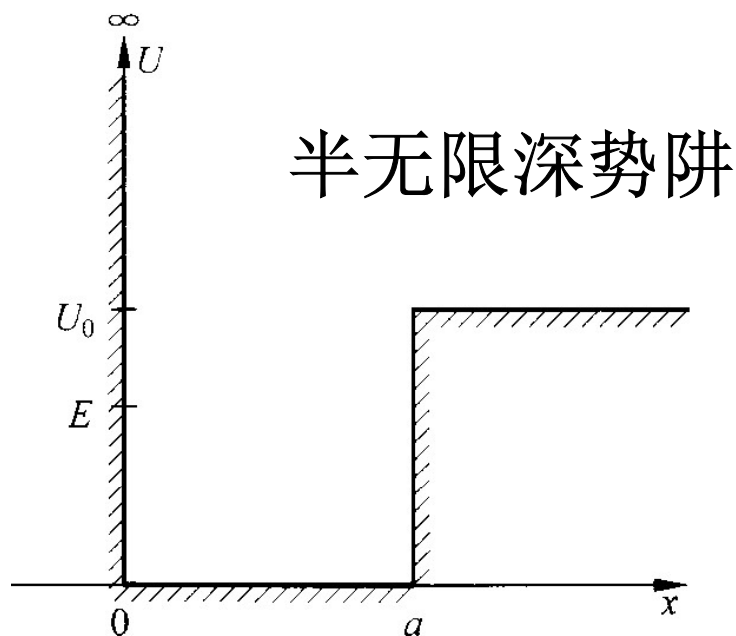


当  $E < U_0$  时，粒子可以到达阱外的两边；

当  $E > U_0$  时，粒子可以被两个阱边反射。

经典物理观点，  
粒子决不会被低于自己总能量的势垒反弹。

## 半无限深势阱（阅读）



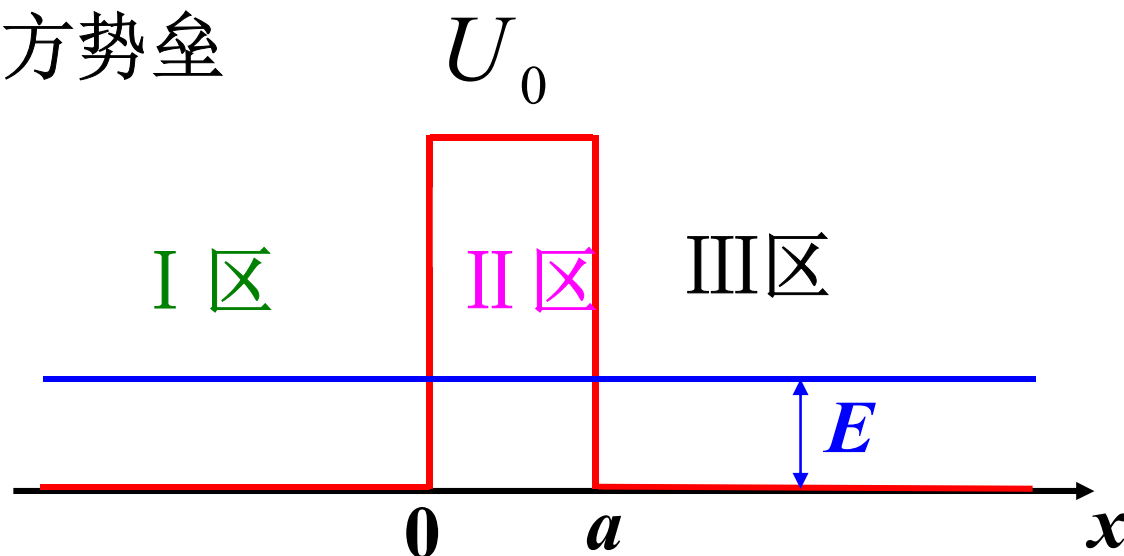
对于束缚在阱内的粒子，其能量也是量子化的。

对于适当的  $U_0$  值，  
粒子处于可能的基态和第1、2激发态



## 二 有限高势垒与量子隧道效应

方势垒



势函数为

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

入射粒子能量  
小于势垒高度

$$E < U_0$$

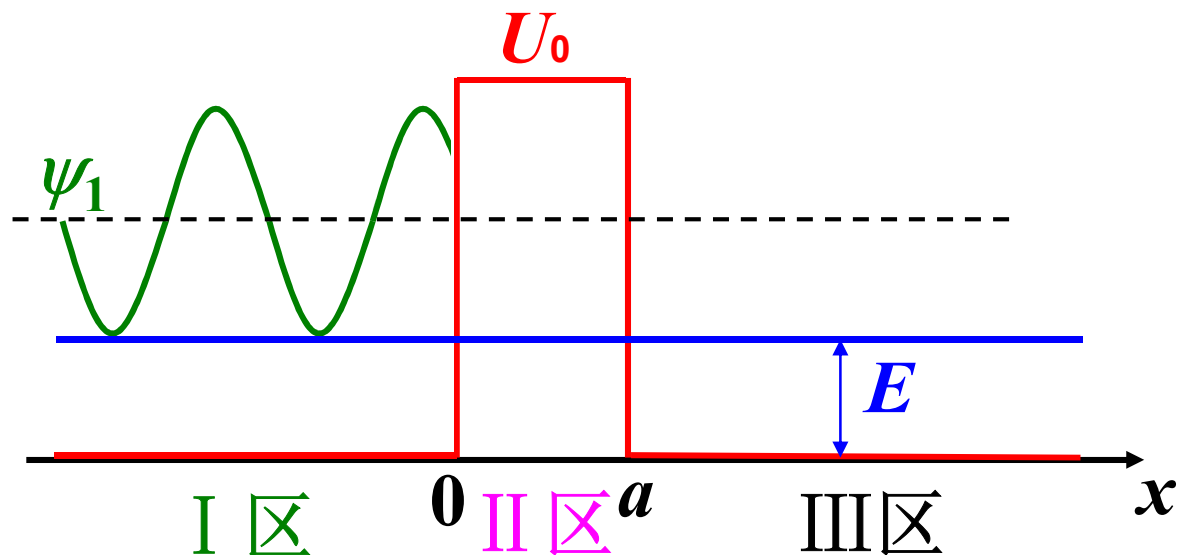
经典力学认为  
粒子不能进入  
和穿过势垒。  
将完全被弹回

量子力学  
如何认为?

在区域 I

$$x < 0$$

$$U(x) = 0$$



定态薛定谔方程：

$$\frac{d^2 \psi_1(x)}{dx^2} + k_1^2 \psi_1(x) = 0 \quad k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, k_1 > 0$$

方程的解：

$$\psi_1(x) = A_1 \sin(k_1 x + \varphi_1)$$

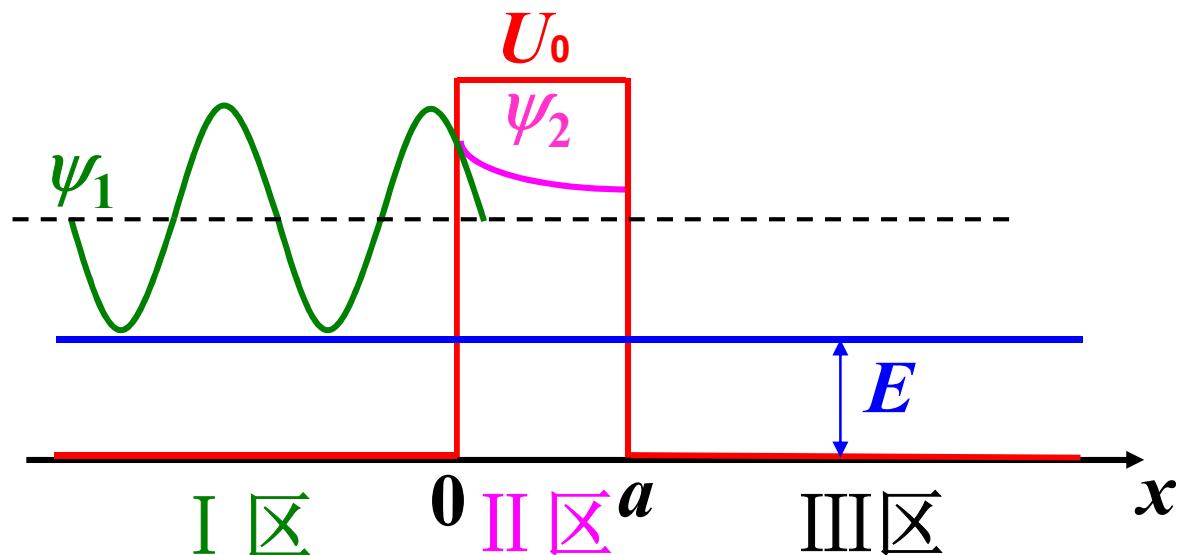
这是一个平面波解

在 II 区

$$0 < x < a$$

$$U(x) = U_0 > E$$

薛定谔方程:



$$\frac{d^2 \psi_2(x)}{dx^2} - k_2^2 \psi_2(x) = 0 \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}, k_2 > 0$$

解:

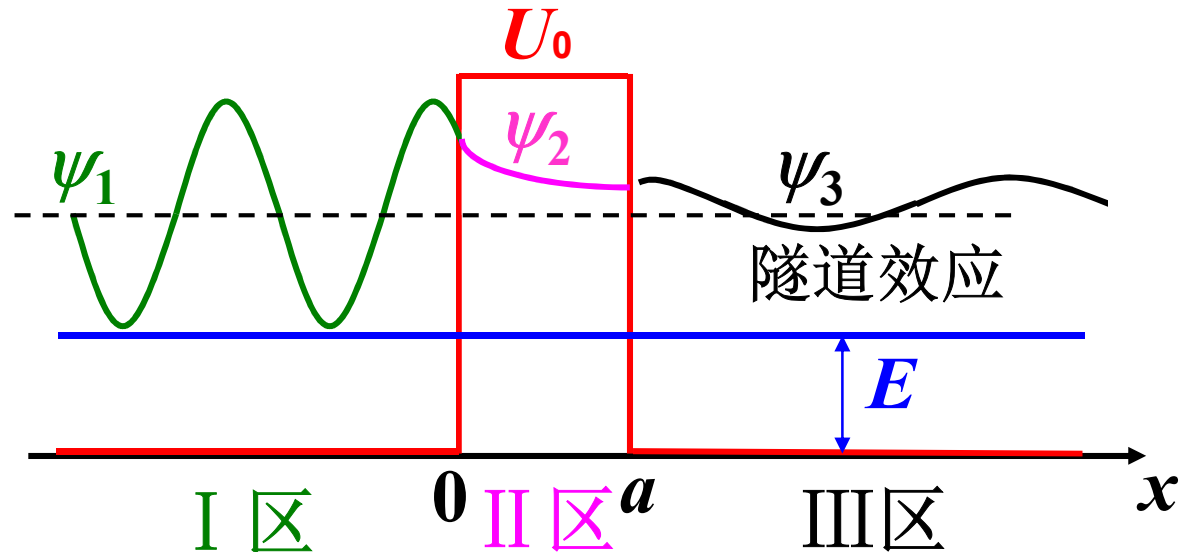
$$\begin{aligned} \psi_2(x) &= A_2 \exp(-k_2 x) \\ &= A_2 \exp\left[-\frac{x}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}\right] \end{aligned}$$

这是一个  
指数衰减波解

在区域III

$$x > a$$

$$U(x) = 0$$



定态薛定谔方程:

$$\frac{d^2 \psi_3(x)}{dx^2} + k_3^2 \psi_3(x) = 0 \quad k_3 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, k_3 > 0$$

方程的解:

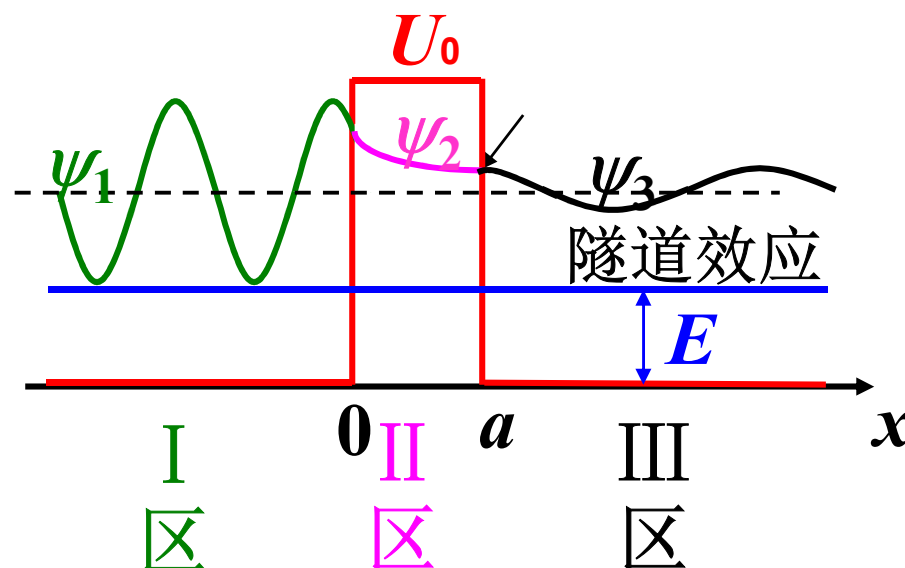
$$\psi_3(x) = A_3 \sin(k_3 x + \varphi_3)$$

这也是一个平面波解。

$$\psi_1(x) = A_1 \sin(k_1 x + \varphi_1)$$

$$\psi_2(x) = A_2 \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} x\right]$$

$$\psi_3(x) = A_3 \sin(k_3 x + \varphi_3)$$



待定常数，由问题的边界条件和归一化条件决定。

由此可见，区域III中的波函数并不为零，

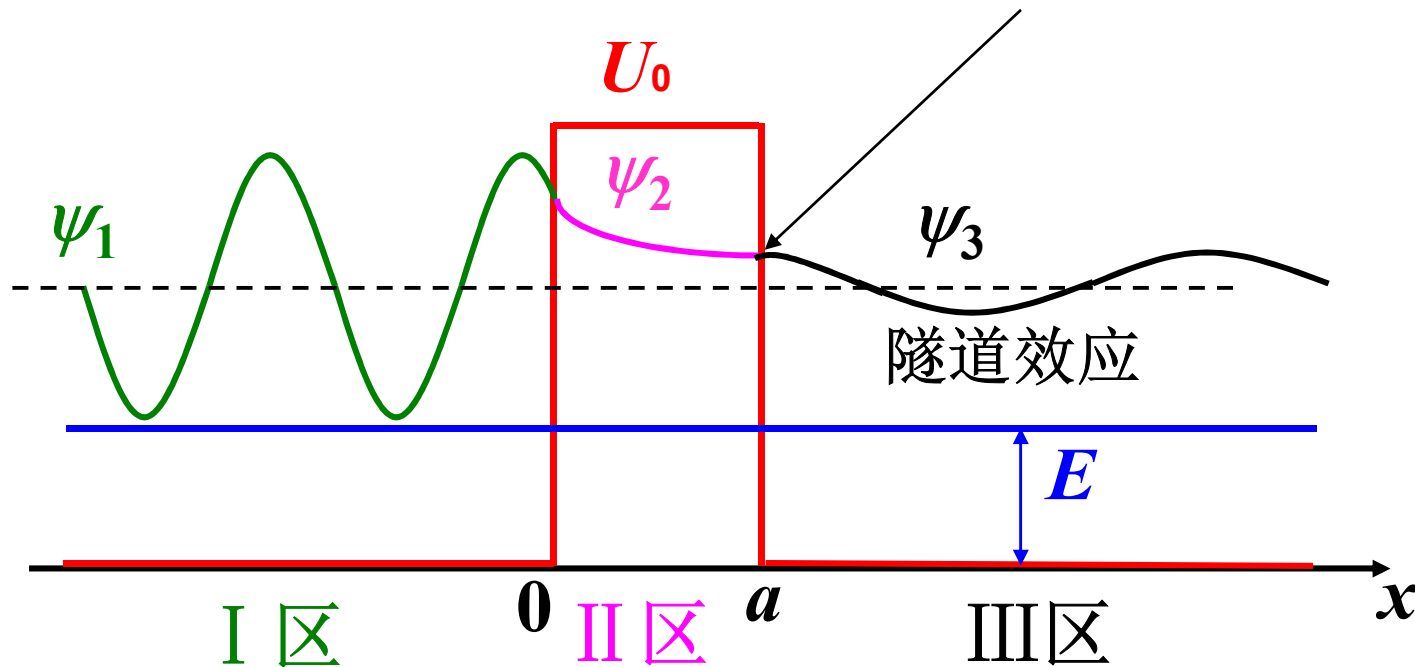
波穿过后，

将以平面波的形式继续前进  $\psi_3(x)$ ，

振幅为

$$\psi_2(a) = \psi_3(a) = A_2 \exp\left[-\frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}\right]$$

$$\psi_2(a) = \psi_3(a) = A_2 \exp\left[-\frac{a}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}\right]$$



本来在区域 I 中的粒子具有  
穿透势垒进入区域III的概率。  
这种现象称为量子隧穿效应。

## 1. 穿透系数

$$T \propto \exp\left[-\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}\right]$$

$$\left\{ \begin{array}{l} a \uparrow \rightarrow T \downarrow \quad (\text{势垒越宽, 透射越低}) \\ (U_0 - E) \uparrow \rightarrow T \downarrow \quad (\text{势垒越高, 透射越低}) \end{array} \right.$$

当  $U_0 - E = 5\text{eV}$ , 势垒宽度  $a$  约  $50\text{nm}$  以上时, 穿透系数会小6个数量级以上。此时隧道效应实际上已没有意义了, 量子概念过渡到了经典。

## 2. 怎样理解粒子通过势垒区？

**经典物理：**从能量守恒的角度看是不可能的。

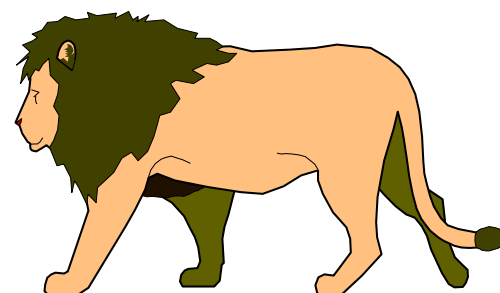
**量子物理：**粒子有波动性，遵从不确定关系，  
粒子穿过势垒区和能量守恒并不矛盾。  
只要势垒区宽度 $\Delta x = a$ 不是无限大，  
粒子能量就有不确定量 $\Delta E$ 。

$$E = \frac{p^2}{2m} \rightarrow \Delta E = \frac{2p \Delta p}{2m} = \frac{p \Delta p}{m}$$

$\Delta x = a$  很小时， $\Delta p$ 很大，使 $\Delta E$ 也很大，以至  
可以有： $\Delta E > U_0 - E \rightarrow E + \Delta E > U_0$

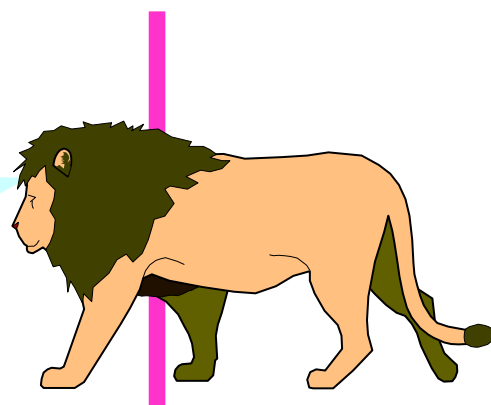


经典



隧道  
效应

量子





**Giaever**



**Josephson**



**Leo Esaki**

江崎玲于奈（**Leo Esaki, 1925-**）和  
加埃沃（**Ivar Giaever, 1929-**）  
因分别发现半导体和超导体中的隧道贯穿、  
约瑟夫森（**Brian David Josephson, 1940-**）  
因从理论上预言了通过隧道阻挡层的超电流的性质，  
特别是被称为“约瑟夫森效应”的实验现象，  
共同分享了**1973**年度诺贝尔物理学奖。

### 三 量子隧道效应的应用

在集成电路密集成度越来越高时，  
进一步提高集成度的主要困难将  
不是制作工艺方面的，  
最根本的是量子效应的限制。

隧道二极管，金属场致发射，  
核的 $\alpha$ 衰变，...

# 扫描隧道显微镜 (STM)

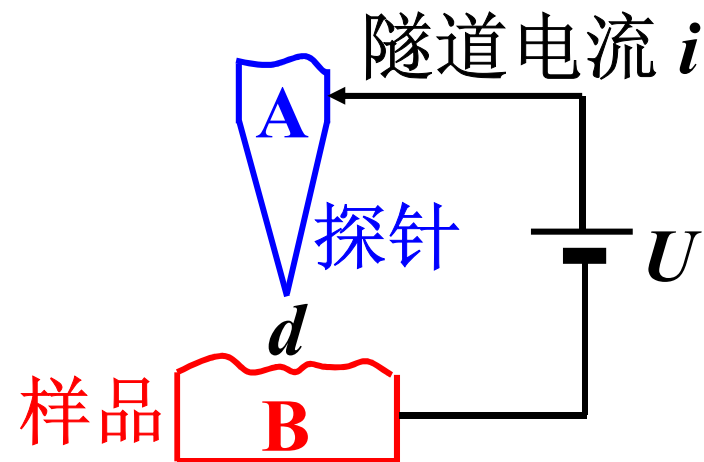
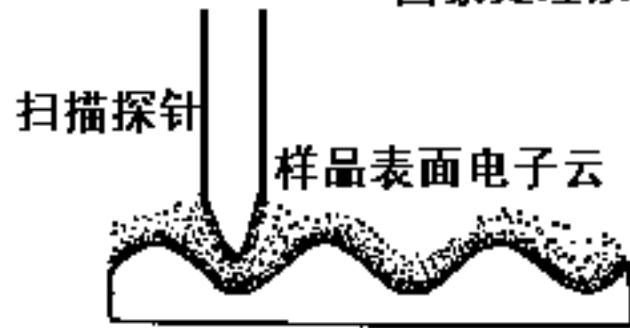
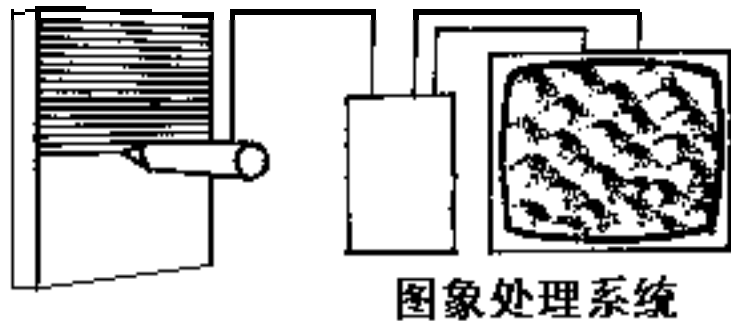
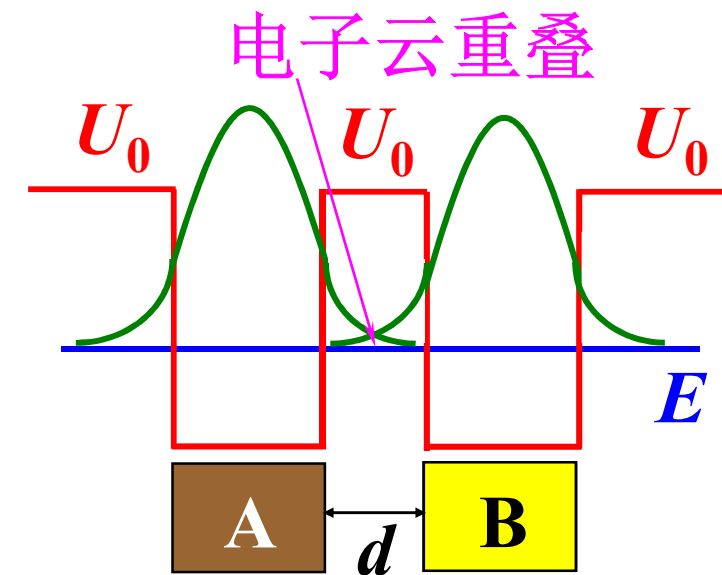
## (Scanning Tunneling Microscopy)

1986. Nob: 毕宁 (G.Binning) } 发明STM  
罗尔 (Rohrer)

鲁斯卡 (E.Ruska) 1932发明电  
子显微镜

**STM**是一项技术上的重大发明，用于观察  
表面的微观结构（不接触、不破坏样品）。

原理：利用量子力学的隧道效应



$$i \propto U e^{-A\sqrt{\phi} d}$$

$A$  — 常量

$\phi$  — 样品表面平均势垒高度 ( $\sim \text{eV}$ )

$$d \sim 1\text{nm} \quad (10\text{\AA})$$

$d$  变  $\rightarrow$   $i$  变, 反映表面情况。

隧道电流 $i$ ，对针尖和样品表面之间的距离 $d$ 非常敏感。用金属探针在样品表面扫描，通过隧道电流的变化就能记录下样品表面的微观形貌和电子分布等信息。

扫描隧道显微镜在表面物理、材料科学、化学和生物等很多领域的科学研究中都有重要的应用。

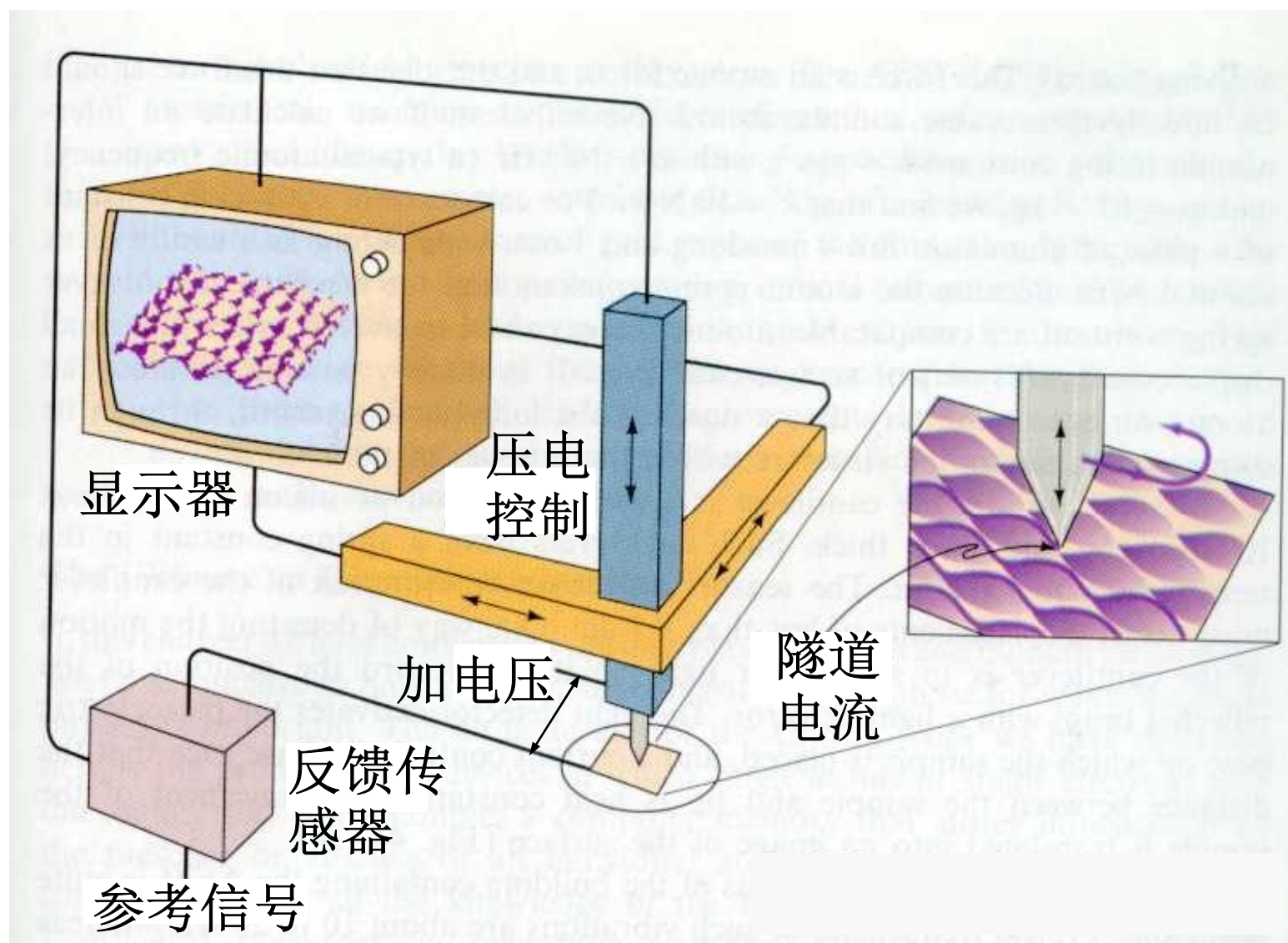
$d$  变  $\sim 0.1\text{nm}$   $\rightarrow i$  变几十倍，非常灵敏。

竖直分辨本领可达约  $10^{-2}\text{nm}$ ;

横向分辨本领与探针、样品材料及绝缘物有关，  
在真空中可达  $0.2\text{nm}$ 。

技术关键：

1. 消震：多级弹簧，底部铜盘涡流阻尼。
2. 探针尖加工：电化学腐蚀，强电场去污，  
针尖只有1~2个原子！
3. 驱动和到位：利用压电效应的逆效应 — 电致伸缩，  
一步步扫描，扫描一步  $0.04\text{nm}$ ，扫描  $1(\mu\text{m})^2$  约  $0.7\text{s}$ 。
4. 反馈：保持  $i$  不变  $\rightarrow d$  不变（不撞坏针尖）。

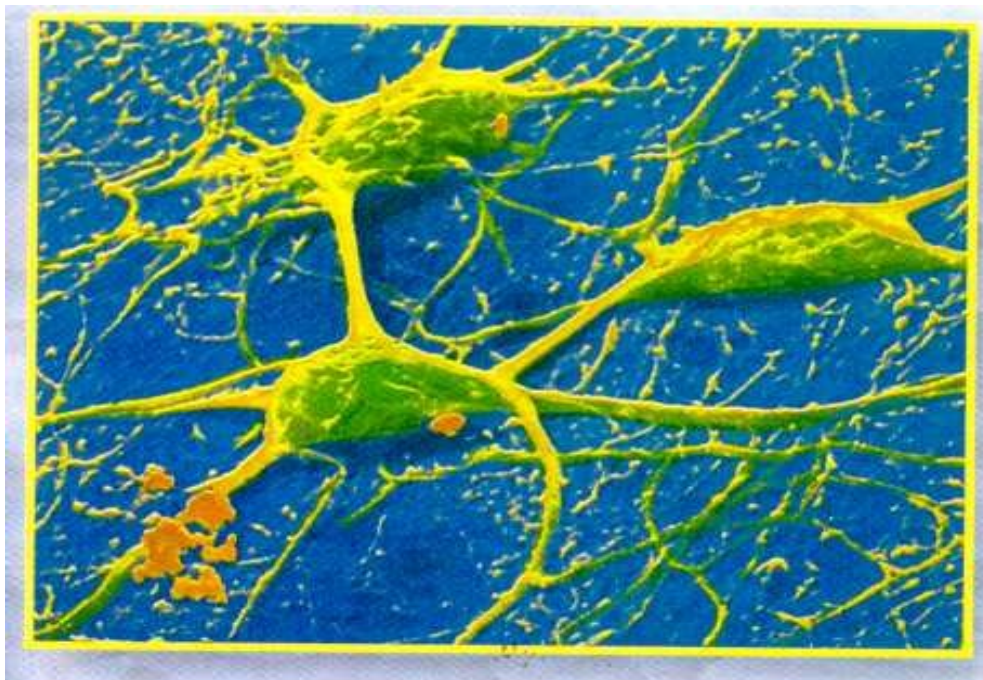


扫描隧道显微镜示意图





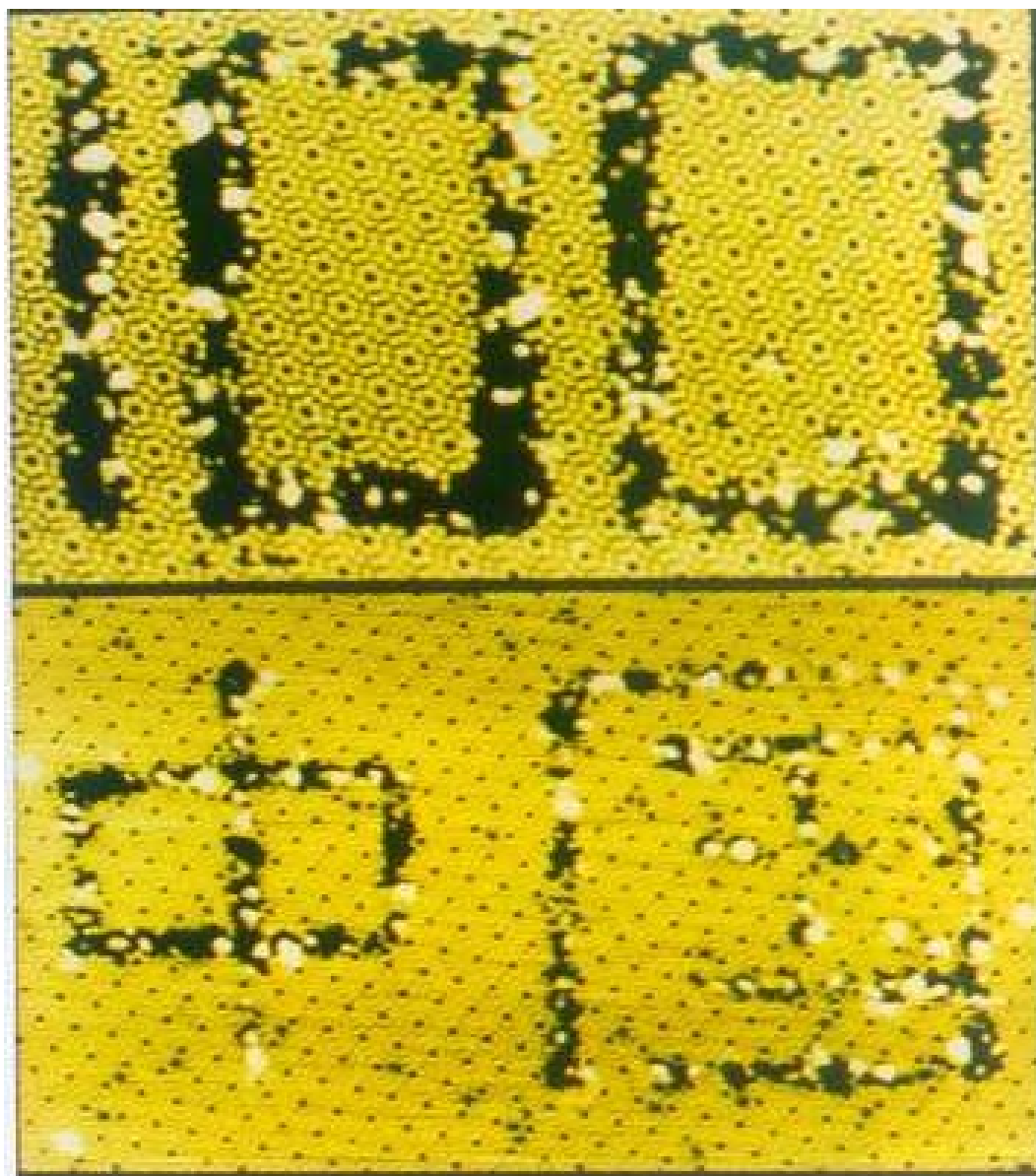
中国科学院化学研究所研制的CSTM-9000型 **STM**



用STM得到的神经细胞象



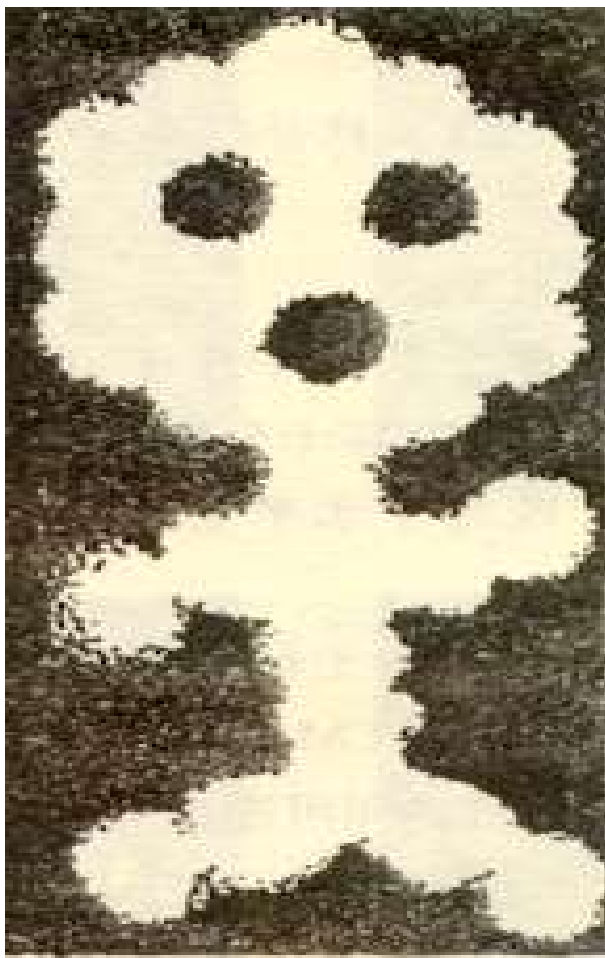
硅表面STM扫描图象



用原子操纵写出的“100”和“中国”



1991年恩格勒等用STM在镍单晶表面逐个移动  
氩原子，拼成了字母**IBM**，每个字母长5纳米



1991年2月IBM的“原子书法”小组又创造出“分子绘画”艺术

### —“CO 小人”

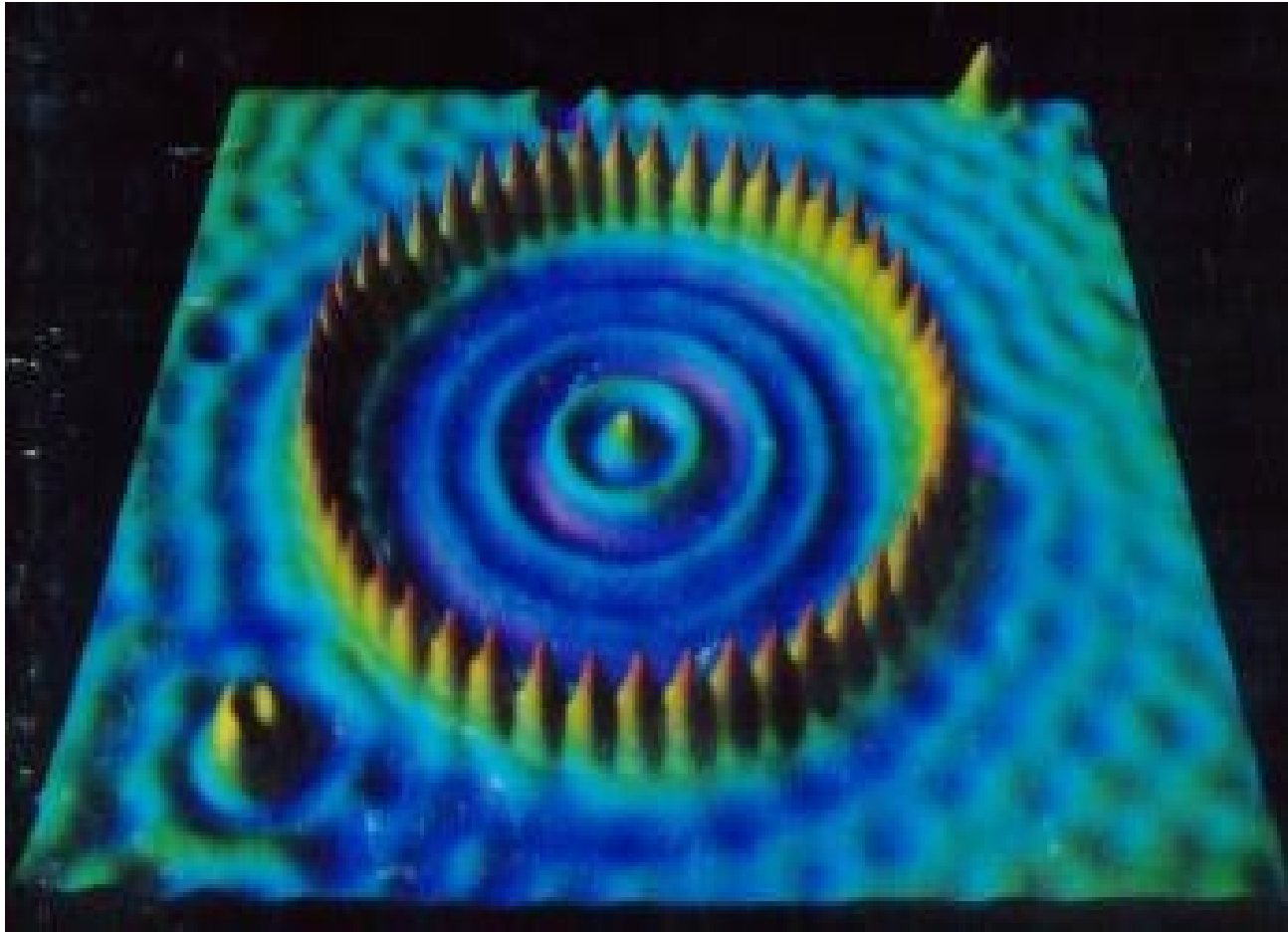
图中每个白团是单个CO分子竖在铂片表面上的图象，  
上端为氧原子

CO分子的间距：0.5 nm

“分子人”身高：5 nm

堪称世界上最小的“小人图”

移动分子实验的成功，表明人们朝着用单一原子和小分子构成新分子的目标又前进了一步，其内在意义目前尚无法估量。



镶嵌了48个Fe原子的Cu表面的STM照片

48个Fe原子形成“量子围栏”，围栏中的电子形成驻波。

Fe原子间距：0.95 nm，圆圈平均半径：7.13 nm



**Rohrer**



**Ruska**



**Binning**

鲁斯卡(**Ernest Ruska, 1906-1988**)因发明电子显微镜  
宾尼(**Gerd Binning, 1947-**)和  
罗雷尔(**Heinrich Rohrer, 1933-**)  
因发明扫描隧道电子显微镜,  
共同分享了**1986**年度诺贝尔物理学奖。

## § 20-4 一维谐振子

谐振子不仅是经典物理的重要模型，  
而且也是量子物理的重要模型。

如：黑体辐射、

分子振动，

晶格点阵振动。



## 一、 势能

若选线性谐振子平衡位置为坐标原点和势能零点，  
则一维线性谐振子的势能可以表示为：

$$U(x) = \frac{1}{2} kx^2 = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

$m$  — 粒子的质量

$k$  — 谐振子劲度系数

谐振子的角频率  $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$

## 二、谐振子的定态薛定谔方程

由  $\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)] \psi = 0$

和  $U(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$

$$a = m\omega/\hbar$$

$$\lambda = 2mE/\hbar^2$$

有  $\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[ E - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right] \psi = 0$

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + (\lambda - a^2 x^2) \psi = 0$$

### 三、谐振子的能量

可以证明，只有下式成立时

$$\frac{\lambda}{a} = 2n + 1, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

波函数才能满足单值、有限、连续的条件

谐振子量子化能量

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \left(n + \frac{1}{2}\right)h\nu, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$E_0 = \frac{1}{2}h\nu,$$

是谐振子的零点能

能量特点:

(1) 量子化, 等间距:  $\Delta E = h\nu$

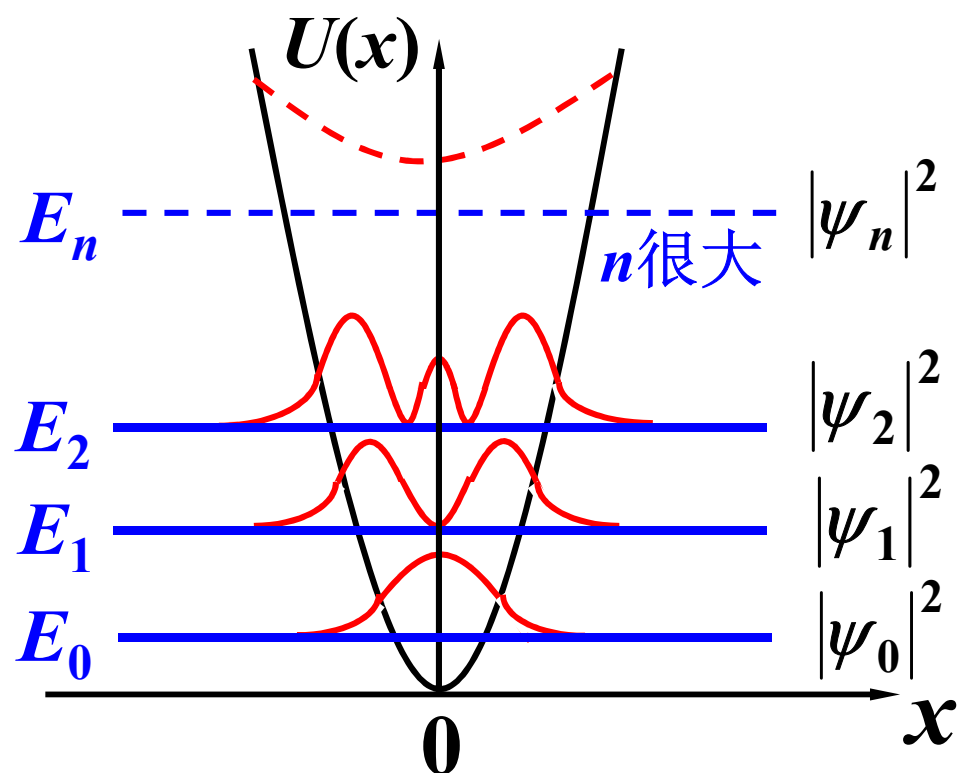
(2) 有零点能:  $E_0 = \frac{1}{2}h\nu$ ,

符合不确定关系

(3) 当  $n \rightarrow \infty$  时,

$$\frac{\Delta E}{E_n} \rightarrow 0,$$

能量量子化  
→ 能量连续



(宏观振子能量相应  $n \sim 10^{25}$ ,  $\Delta E \sim 10^{-33}\text{J}$ )

## 四、 谐振子的波函数

$$\psi_n(x) = \left(\frac{\alpha}{2n\sqrt{\pi}n!}\right)^{1/2} \underline{\underline{H_n(\alpha x)}} \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2\right), \quad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

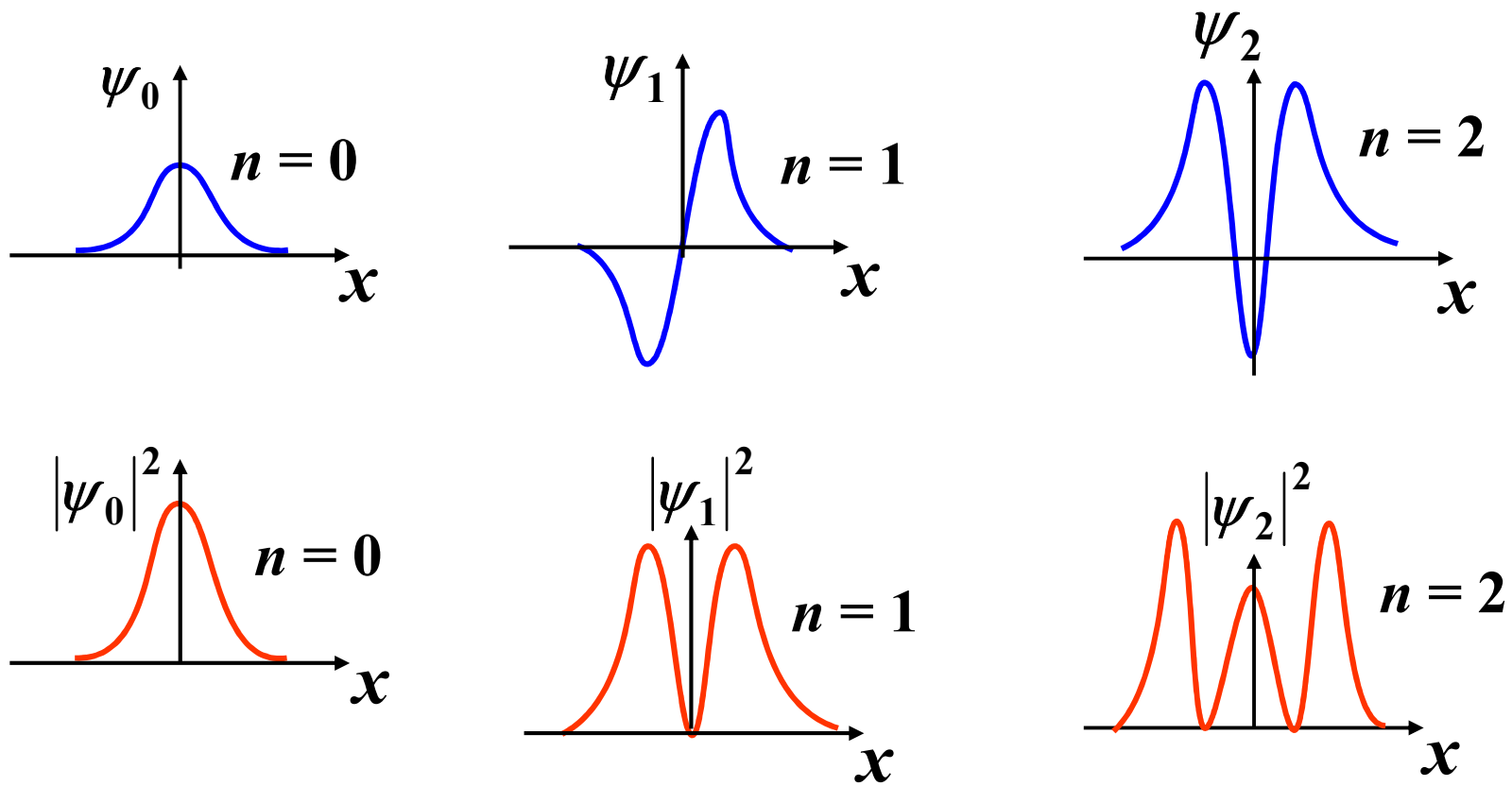
$H_n$ 是厄密（**Hermite**）多项式，最高阶是  $(\alpha x)^n$ ,

$$\psi_0(x) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2\right)$$

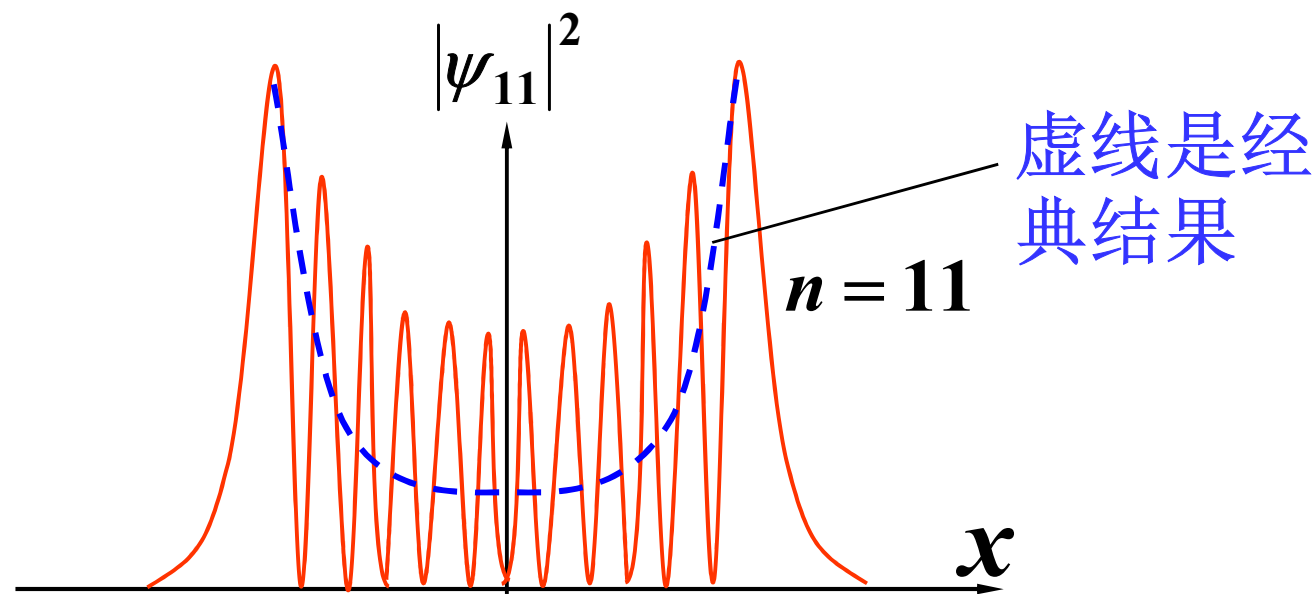
$$\psi_1(x) = \left(\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \cdot 2(\alpha x) \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2\right)$$

$$\psi_2(x) = \left(\frac{\alpha}{8\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} [2 - 4(\alpha x)^2] \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2\right)$$

## 五、 概率密度

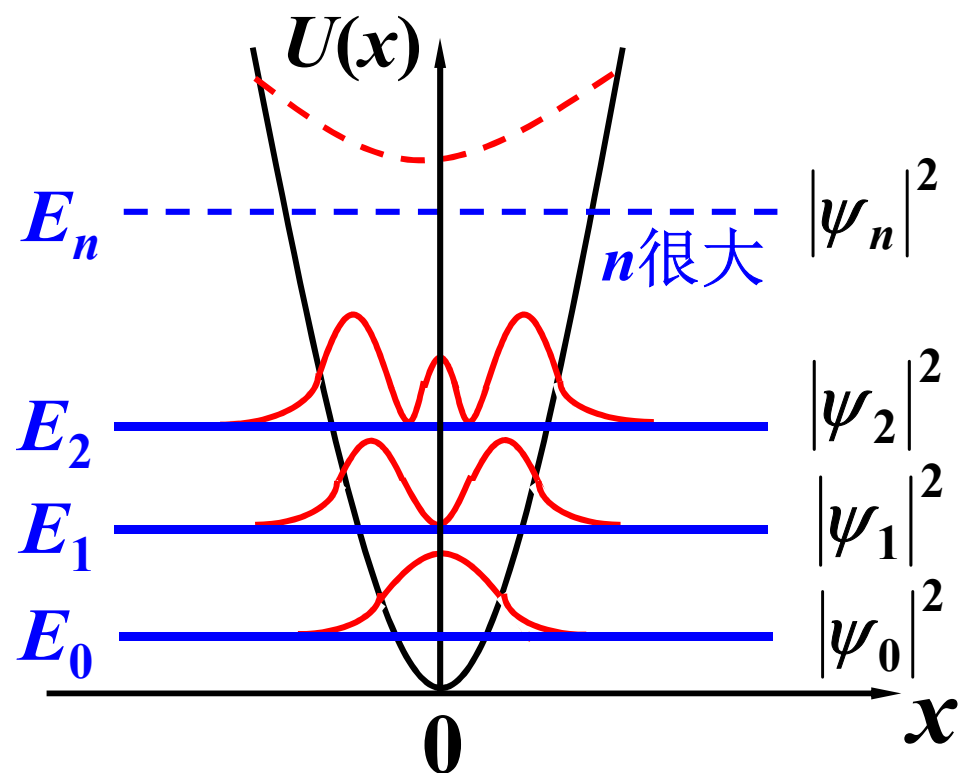


线性谐振子  $n=11$  时的概率密度分布:



经典谐振子在原点速度最大，停留时间短，粒子出现的概率小；振子在两端速度为零，出现的概率最大。

概率密度的特点:



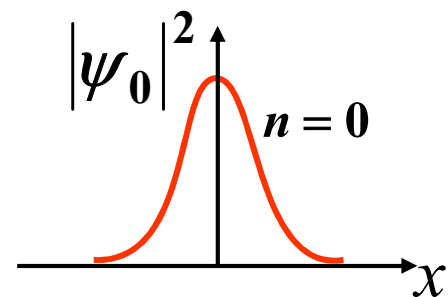
(1) 概率在  $E < U$  区仍有分布 —— 隧道效应



(2)  $n$ 小时, 概率分布与经典谐振子完全不同

例如基态位置概率分布在  $x = 0$  处最大,

$$W_0(x) = |\psi_0(x)|^2 = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \exp(-\alpha^2 x^2)$$

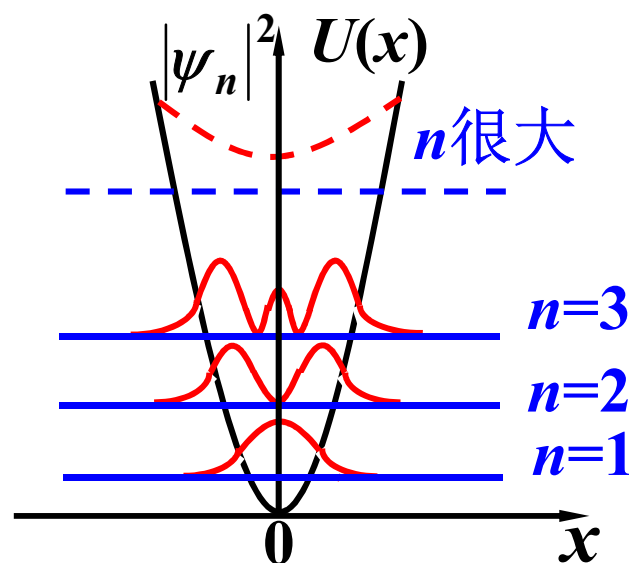


经典振子在  $x = 0$  处概率最小。

(3) 当  $n \rightarrow \infty$  时,

量子概率分布

→ 经典概率分布,



【例】设体系的初始状态为

$$\Psi(x,0) = \sqrt{\frac{1}{3}}\Phi_0(x) + \sqrt{\frac{2}{3}}\Phi_2(x)$$

其中  $\Phi_0$  和  $\Phi_2$  分别是频率为  $\nu$  的  $n=0$  和  $2$  的简谐振子能量本征态。

(1)  $\Psi(x,0)$  是定态吗？在  $\Psi(x,0)$  上测量体系的能量，能测到哪些值？测到这些值的概率是多大？测量值的平均值是多少？

(2) 求  $t$  时刻体系的状态  $\Psi(x,t)$ 。

(1)  $\Psi(x,0) = \sqrt{\frac{1}{3}}\Phi_0(x) + \sqrt{\frac{2}{3}}\Phi_2(x)$  不是定态。

在状态  $\Psi(x,0)$  上测量体系的能量，能测到的值为

$$E_0 = \frac{1}{2}h\nu, \quad E_2 = \left(2 + \frac{1}{2}\right)h\nu = \frac{5}{2}h\nu$$

测到  $E_0$  的概率：1/3；测到  $E_2$  的概率：2/3；它们分别等于展开式中相应展开系数的模方。

测量值的平均值： $\bar{E} = \frac{1}{3}E_0 + \frac{2}{3}E_2 = \frac{11}{6}h\nu$

$$(2) \text{ 求 } \Psi(x,t) = \sum_n C_n \Phi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$$

$$\begin{aligned} C_n &= \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_n^*(x) \Psi(x,0) dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_n^*(x) \Phi_0(x) dx + \sqrt{\frac{2}{3}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_n^*(x) \Phi_2(x) dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}} \delta_{n,0} + \sqrt{\frac{2}{3}} \delta_{n,2} \end{aligned}$$

$$C_0 = \frac{1}{\sqrt{3}}, C_1 = 0, C_2 = \sqrt{\frac{2}{3}}, C_3 = 0, \dots$$

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{3}} \Phi_0(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_0 t} + \sqrt{\frac{2}{3}} \Phi_2(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_2 t}$$

## \* § 20-5 力学量算符及其本征值问题

以位矢  $\vec{r}$  为自变量的空间，称“位置表象”。

由不确定关系知，在位置表象中动量  $\vec{p}(\vec{r})$  并不存在，否则“轨道”概念就成立了。

在量子力学中，处理诸如动量、角动量和能量等力学量问题时，需要将这些力学量“算符化”。

# 一、力学量算符的引入

一维自由粒子波函数  $\Psi(x,t) = \Psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x - E t)}$

对  $\Psi$  求导，得到方程：

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = -\frac{i}{\hbar} E \Psi(x,t) \longrightarrow$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow E$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \Psi(x,t) = \frac{i}{\hbar} p_x \Psi(x,t) \longrightarrow$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \rightarrow p_x$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x,t) = -\frac{p_x^2}{\hbar^2} \Psi(x,t) \longrightarrow$$

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rightarrow p_x^2$$

由以上对波函数的求导操作得到物理启示：  
定义能量算符、动量算符和坐标算符分别为

$$\hat{E} \equiv i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \hat{p}_x \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{x} \equiv x$$

将它们作用到一维自由粒子波函数上，有

$$\hat{E}\Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[ \Psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x - Et)} \right] = E\Psi(x,t)$$

$$\hat{p}_x\Psi(x,t) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \left[ \Psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x - Et)} \right] = p_x\Psi(x,t)$$

$$\hat{x}\Psi(x,t) = x\Psi(x,t)$$

所以在位置表象中，算符化的规则是：

$$\vec{r} \rightarrow \hat{\vec{r}} = \vec{r}, \quad \vec{p} \rightarrow \hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla, \quad E \rightarrow \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

坐标函数的力学量，其量子力学所对应的算符形式不变。如势能  $U(\vec{r})$  和作用力  $f(\vec{r})$ 。

与动量有关的经典力学量，其量子力学所对应的算符可用动量的对应关系得出。

例如，动能算符的表达式：由  $E_k = \frac{p^2}{2m}$ ,

$$\text{给出 } \hat{E}_k = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$$

(在直角坐标中)



角动量算符的表达式:

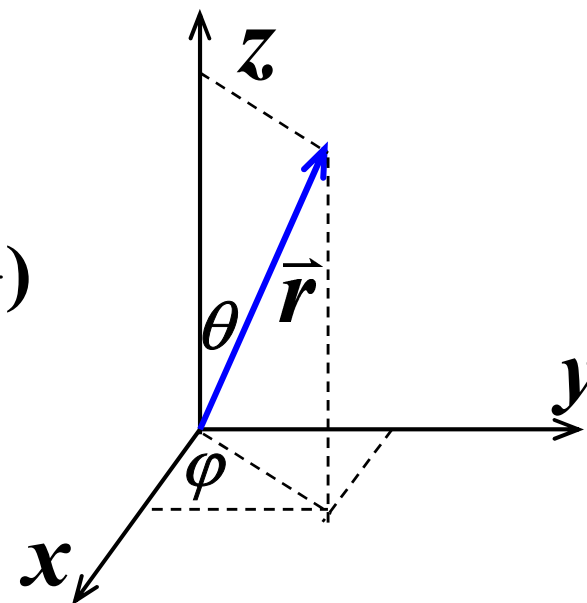
$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} = -i\hbar \hat{\vec{r}} \times \nabla$$

在直角坐标中:

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{L}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y = -i\hbar(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}) \\ \hat{L}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z = -i\hbar(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}) \\ \hat{L}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}) \end{array} \right.$$

在球极坐标中：

$$\begin{cases} \hat{L}_x = i\hbar(\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \operatorname{ctg}\theta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi}) \\ \hat{L}_y = i\hbar(-\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \operatorname{ctg}\theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi}) \\ \hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi} \end{cases}$$



角动量算符的模方为：

$$\hat{L}^2 = \hat{\vec{L}} \cdot \hat{\vec{L}} = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \quad (\text{直角坐标})$$

$$= -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right] \quad (\text{球极})$$

任一力学量  $A(\vec{r}, \vec{p}) \rightarrow \hat{A}(\vec{r}, -i\hbar\nabla)$   
(经典) (量子)

## 二、力学量算符的本征值和本征函数

当算符  $\hat{A}$  作用在函数  $\psi_n$  上，若其结果是同一个函数乘以一个常量时：

$$\boxed{\hat{A}\psi_n = A_n\psi_n} \quad \left( \text{例如 } \frac{\partial}{\partial x} e^{ax} = a \cdot e^{ax} \right)$$

称上式为算符  $\hat{A}$  的本征方程 (eigenequation)

$A_n$  称为力学量  $A$  的一个本征值 (eigenvalue)

$\psi_n$  描述力学量  $A$  取确定值  $A_n$  时的本征态

$\psi_n$  称为相应于  $A_n$  的本征函数 (eigenfunction)

由本征方程解出的全部本征值就是相应力学量的可能取值。

$\{A_1, A_2 \cdots\}$  构成力学量  $A$  的本征值谱 (spectrum)

$\{\psi_1, \psi_2 \cdots\}$  构成力学量  $A$  的本征函数系

$\hat{A}$  的本函数  $\psi_n$  是  $A$  取定值  $A_n$  的本征态。

在态  $\psi_n$  上测量力学量  $A$ ，只能测得  $A_n$ 。

如定态薛定谔方程： $\hat{H}\Phi(x) = E\Phi(x)$

就是能量的本征方程， $\hat{H}$  就是能量算符，

$\Phi_n$  就是能量取本征值  $E_n$  时的本征函数。

例如动量算符  $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$  的本征方程是

$$\hat{p}_x \psi = p_x \psi$$

在直角坐标系下，该动量本征方程的解为：

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i p_x x / \hbar}$$

这正是一维自由粒子波函数的空间部分，  
它给定了自由粒子的动量  $p_x$ 。

### 三、本征函数的性质（以一维为例）

1.  $\hat{A}$  的本函数  $\psi_n(x)$  是  $A$  取定值  $A_n$  的态。

在态  $\psi_n(x)$  上测量力学量  $A$ ，只能测得  $A_n$ 。

2.  $\hat{A}$  的本函数系  $\{\psi_n(x)\}$  构成正交、归一的完备函数系：

(1) 本征函数总可以归一化：

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x) \psi_n(x) dx = 1$$

(2) 本征函数有正交性（可严格证明）：

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx = \delta_{mn} = \begin{cases} 1, & m = n \\ 0, & m \neq n \end{cases}$$

### (3) 本征函数具有完备性:

任一物理上合理的归一化波函数，都可由力学量  $A$  的本征函数系展开：

$$\Psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \psi_n(x)$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} |C_n|^2 = 1$$

$|C_n|^2$  为  $\Psi(x)$  中包含  $\psi_n(x)$  状态的百分比。

### 3. 力学量 $A$ 的平均值

在状态  $\Psi(x)$  上对力学量  $A$  作多次（大数）测量，则  $A$  的平均值为

$$\bar{A} = \sum_{n=1}^{\infty} |C_n|^2 A_n$$

可以证明有

$$\bar{A} = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x) \hat{A} \Psi(x) dx$$

即由本征函数可计算力学量的平均值。