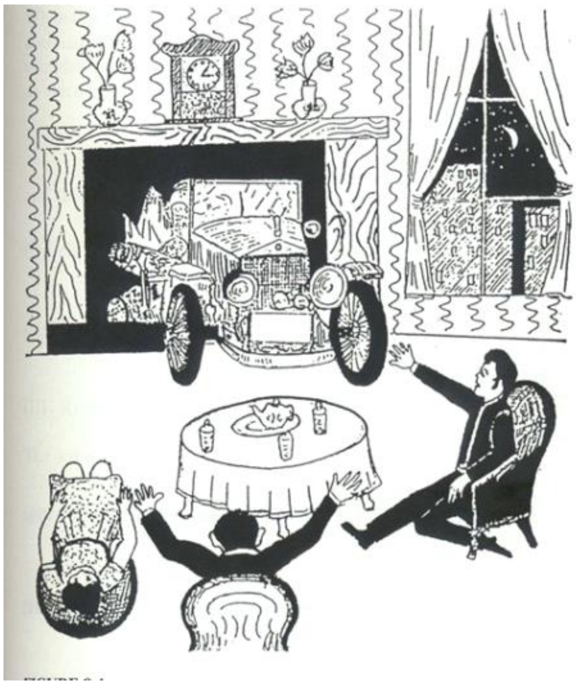
第3章：一维定态问题

2017年3月14日　　18:33



- 一维定态的一般性质
- 无限深方势阱
- 势垒的贯穿和势阱的穿透
- 一维谐振子
- δ势

一维定态的一般性质

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x}+V(x)\right]\psi(x)=E\psi(x)$$

$$\rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x}\psi(x)=\frac{2m}{\hbar^2}(V(x)-E)\psi(x)$$

$V(x)$的边界条件 → 驻波条件 → 量子化能量 E_n (Eigenvalues) → 能量本征态$\psi_n(x)$ (Eigenstates)

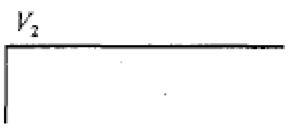
$\psi_n(x,t)=\psi_n(x)e^{-iE_nt/\hbar}$

★ 在量子力学中，如不作特别的声明，都假定势能V取实数: $V(x)=V^*(x)$

- 设 $\psi(x)$ 是定态Schrödinger方程的一个解，对应的能量本征值为 E, 则 $\psi^*(x)$ 也是定态Schrödinger方程的解，对应的能量也是 E.
- 设能级 E 不简并 (degenerate)，则相应的能量本征函数总可以取为实函数.

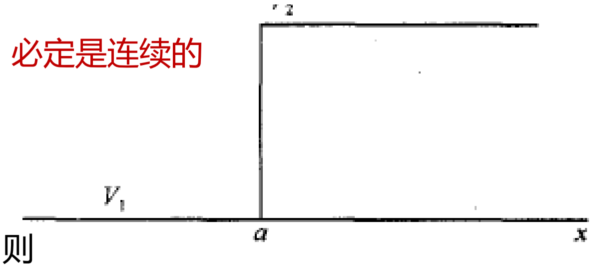
  简并 (degenerate): 同一能级对应多个能量本征态
- 对应于某个能量本征值 E ，总可以找到定态Schrödinger方程的一组完备的实解，即凡是属于 E 的任何解，均可表示为这一组实解的线性叠加.
- 设$V(x)$ 具有空间反射不变性， $V(-x)\ =V(x)$. 如 $\psi(x)$ 为定态Schrödinger方程的一个解, 属于 E, 则 $\psi(-x)$ 也是定态Schrödinger方程 的一个解，也属于 E.
- 设 $V(-x)=V(x)$, 则对应于任何一个能量本征值 E ，总可以找到定态Schrödinger方程的一组完备的解，它们中每一个都具有确定的宇称(奇偶性). (注意:各个解的宇称不一定相同.)

  $$\begin{cases}\psi(x)=\psi(-x) & \text{偶宇称}\\ \psi(x)=-\psi(-x) & \text{奇宇称}\end{cases}$$
- 设 $V(-x)=V(x)$, 而且对应于能量本征值 E, 定态Schrödinger方程的解不简并，则该能量本征态必有确定的宇称.
- 如$V(x)$是 x 的连续函数，按定态Schrödinger方程， $\psi''(x)$ 是存在的，因此以 $\psi(x)$ 和 $\psi'(x)$ 必为x的连续函数. 但如 $V(x)$ 不连续变化，或有某种奇异性，则关于$\psi(x)$ 及其各阶导数的连续性要具体分析.



对于阶梯形方势，粒子的定态波函数$\psi(x)$ 及 $\psi'(x)$ 必定是连续的

但要具体分析：

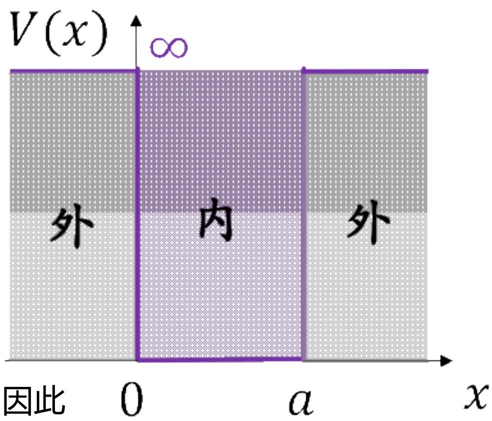


对于阶梯形方势，粒子的定态波函数$\psi(x)$及$\psi'(x)$必定是连续的

$$V(x)=\begin{cases}V_1 & x<a\\ V_2 & x>a\end{cases}\quad (V_2-V_1)\text{有限}$$

- [ ] 对于一维运动粒子，设$\psi_1(x)$与$\psi_2(x)$是定态Schrödinger方程的属于能量本征值E的两个解，则$\psi_1\psi_2'-\psi_1'\psi_2=$常数
- [ ] 设$V(X)$是规则的(regular)势场，如存在束缚态，则必定是不简并的.

一维无限深方势阱



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

定态Schrödinger方程

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

势阱外（x＜0，x>a）

由于势阱无限深，在物理上粒子无法达到阱外区域，因此

$\psi(x)=0\ (x<0,x>a)$

势阱内（$0<x<a$）

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi=0$$

令$k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\,(E>0)$，得到

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+k^2\psi=0$$

通解为$\psi=A\sin(kx+\delta)$

边界条件+连续性条件：$\begin{cases}\psi(0)=0\\ \psi(a)=0\end{cases}$

$$\begin{cases}\psi(0)=A\sin\delta=0\\ \psi(a)=A\sin(ka+\delta)=0\end{cases}\Rightarrow\begin{cases}\delta=0\\ A\neq 0\\ \sin(ka)=0\end{cases}$$

于是有量子化条件

$ka=n\pi, n=1,2,3,\cdots$

能量本征值：$E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$

本征波函数：$\psi_n(x)=A\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$

归一化条件：$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi_n(x)|^2dx=1$

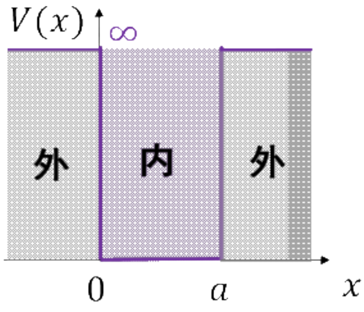
$$\underbrace{\int_{-\infty}^{0}|\psi_n(x)|^2dx}_{=0}+\int_0^a|\psi_n(x)|^2dx+\underbrace{\int_a^{+\infty}|\psi_n(x)|^2dx}_{=0}=1$$

$$\Rightarrow A=\sqrt{\frac{2}{a}}$$

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

★

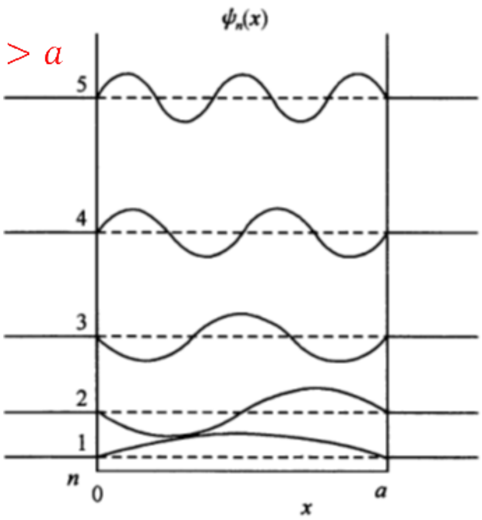
一维无限深方势阱



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

能量本征值 $E_n=\dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$

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



★ 能级和能量本征态的一些性质

$E_n\propto n^2$,能级分布是不均匀的，能级越高，密度越小;

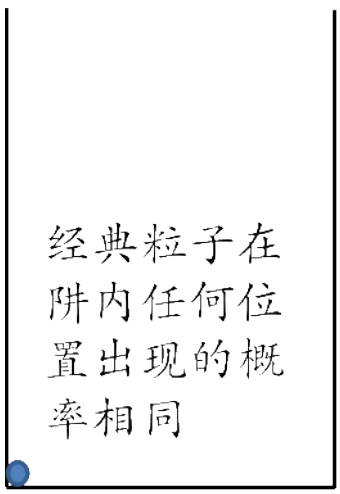
波函数是驻波;

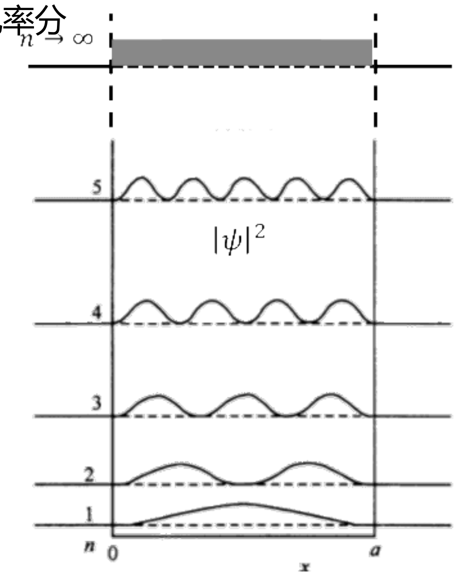
基态波函数(n=1)无节点，第一激发态(n=2)有一个节点，第k个激发态(n=k+1)波函数的节点有k个节点

! 无限深方势阱⟺经典阱中的运动

□→∞时，量子几率分布回到经典力学的结论

□较小的时候，量子几率分布明显不同于经典几率分布





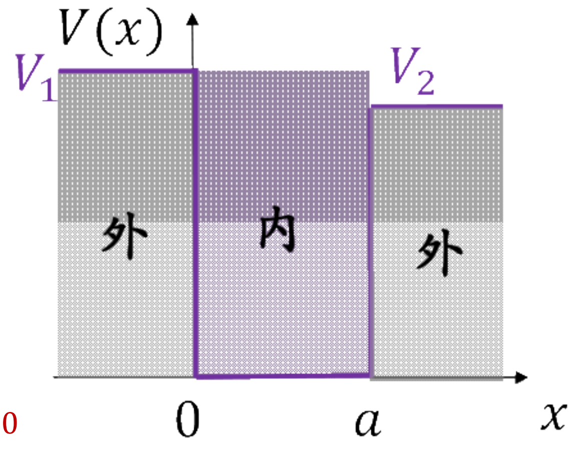
? 波函数正交归一

? 能量平移？$V(x)=V\ (0<x<a)$

? 三维无限深势阱

? 对称势阱

? 有限深势阱



★ 一维有限深方势阱

$$V(x)=\begin{cases}V_1, & x<0\\ 0, & 0<x<a\\ V_2 & x>a\end{cases}$$

定态Schrödinger方程

$$\begin{cases}\dfrac{\partial^2}{\partial x}\psi(x)=\dfrac{2m}{\hbar^2}(V_1-E)\psi(x), & x<0\\ \dfrac{\partial^2}{\partial x}\psi(x)=-\dfrac{2mE}{\hbar^2}\psi(x), & 0<x<a\\ \dfrac{\partial^2}{\partial x}\psi(x)=\dfrac{2m}{\hbar^2}(V_2-E)\psi(x), & x>a\end{cases}$$

■ 分析：假设 $V_2>V_1>E$

$$\begin{cases}\psi_1(x)=A_1e^{\alpha x}+B_1e^{-\alpha x}, & x<0\\ \psi_2(x)=C\sin(kx+\delta), & 0<x<a\\ \psi_3(x)=A_2e^{\beta x}+B_2e^{-\beta x}, & x>a\end{cases}$$

$$\alpha=\frac{\sqrt{2m(V_1-E)}}{\hbar},k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar},\beta=\frac{\sqrt{2m(V_2-E)}}{\hbar}$$

■ 边界条件：束缚态：$\psi\xrightarrow{x\to\infty}0: B_1=0, A_2=0$

■ 连续性条件：ψ,ψ'连续

$$\begin{cases}A_1=C\sin\delta, & \alpha A_1=kC\cos\delta\\ B_2e^{-\beta a}=C\sin(ka+\delta), & -\beta B_2e^{-\beta a}=kC\cos(ka+\delta),\end{cases}$$

$$\Rightarrow\begin{cases}\tan\delta=k/\alpha\\ \tan(ka+\delta)=-k/\beta\end{cases}$$

$$\Rightarrow\begin{cases}\delta=m\pi+\arctan k/\alpha\\ ka+\delta=m'\pi-\arctan k/\beta\end{cases}$$

$$\Rightarrow ka=n\pi-\arcsin\frac{k}{\sqrt{k^2+\beta^2}}-\arcsin\frac{k}{\sqrt{k^2+\alpha^2}}\quad n=1,2,\ldots$$

$$\Rightarrow\frac{\sqrt{2ma^2E}}{\hbar}=n\pi-\arcsin\sqrt{\frac{E}{V_1}}-\arcsin\sqrt{\frac{E}{V_2}}$$

对于对称方势阱

$$\frac{\sqrt{2ma^2E}}{\hbar}=n\pi-2\arcsin\sqrt{\frac{E}{V}}$$

对于无限深方势阱

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

? 无法求解对称方势阱超越方程

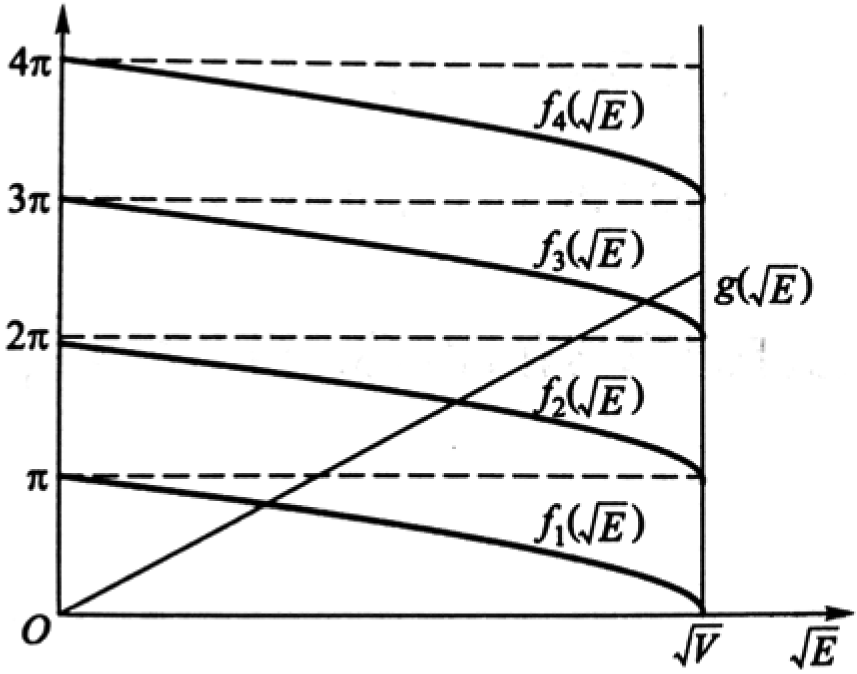
$$\frac{\sqrt{2ma^2E}}{\hbar}=n\pi-2\arcsin\sqrt{\frac{E}{V}}$$

图解法或者数值模拟

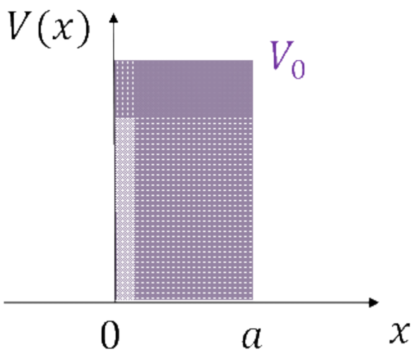
$$f_n(\sqrt{E}) = n\pi - 2\arcsin\sqrt{\frac{E}{V}}$$

$$g_n(\sqrt{E}) = \frac{\sqrt{2ma^2E}}{\hbar}$$

作图，二者交点即为能量本征值



一维方势垒



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

定态Schrödinger方程

$$\begin{cases} \frac{\partial^2}{\partial x}\psi(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x), & x<0 \\ \frac{\partial^2}{\partial x}\psi(x) = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)\psi(x), & 0<x<a \\ \frac{\partial^2}{\partial x}\psi(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x), & x>a \end{cases}$$

由于在 $x<0, x>a$ 区域没有势的束缚，因而这两个区域中没有束缚态解，因而无法归一化（没有无穷远处波函数为0条件）。于是这一自由粒子入射问题，我们要想研究粒子的概率分布，实际上相当于研究了一个一维散射问题，研究对象变为透射系数和反射系数。

在这两个区域（经典允许区），波函数两个线性无关解为

$\psi \sim e^{\pm ikx} \quad k = \sqrt{2mE}/\hbar$

如果考虑粒子从左侧入射，那么在小于0区域，既有入射波也有反射波。在大于a区域则最多只能有透射波。平面波指数上x为正证明向右传播是入射，投射波；反之为反射波。于是有

$$\begin{cases} \psi_1(x) = e^{ikx} + Re^{-ikx}, & x<0 \\ \psi_3(x) = Se^{ikx}, & x>a \end{cases}$$

而反射系数，透射系数为反射，投射流密度比入射流密度，即 $|j_{r,t}/j_i|$

由

$$j_i=\frac{\hbar}{2mi}\left(e^{-ikx}\frac{\partial}{\partial x}e^{ikx}-e^{ikx}\frac{\partial}{\partial x}e^{-ikx}\right)=\frac{\hbar k}{m}=v$$

$$j_r=-|R|^2v$$

$$j_t=|S|^2v$$

可知，

- ⭐ 反射系数为 $|R|^2$
- ⭐ 透射系数为 $|S|^2$

要想求得 R,S, 需要利用与 $0<x<a$ 区域的连续性条件

■ $0<x<a$ 区域（经典禁区）分两种情况讨论，首先讨论 $V_0>E$

$$\psi=Ae^{\kappa x}+Be^{-\kappa x}$$

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

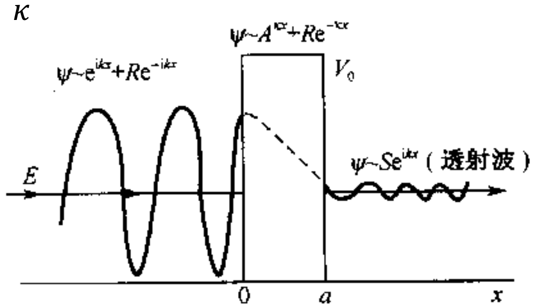
! 连续性条件：ψ,ψ'连续

$$\begin{cases}1+R=A+B, & \dfrac{ik}{\kappa}(1-R)=A-B\\ Ae^{\kappa a}+Be^{-\kappa a}=Se^{ika}, & Ae^{\kappa a}-Be^{-\kappa a}=\dfrac{ik}{\kappa}Se^{ika}\end{cases}$$

$$\Rightarrow T=|S|^2=\frac{4k^2\kappa^2}{(k^2+\kappa^2)^2\mathrm{sh}^2\kappa a+4k^2\kappa^2}$$

$$=\left[1+\frac{\mathrm{sh}^2\kappa a}{\frac{E}{V_0}\left(1-\frac{E}{V_0}\right)}\right]^{-1}$$

以及 $|R|^2=\frac{(k^2+\kappa^2)^2\mathrm{sh}^2\kappa a}{(k^2+\kappa^2)^2\mathrm{sh}^2\kappa a+4k^2\kappa^2}$

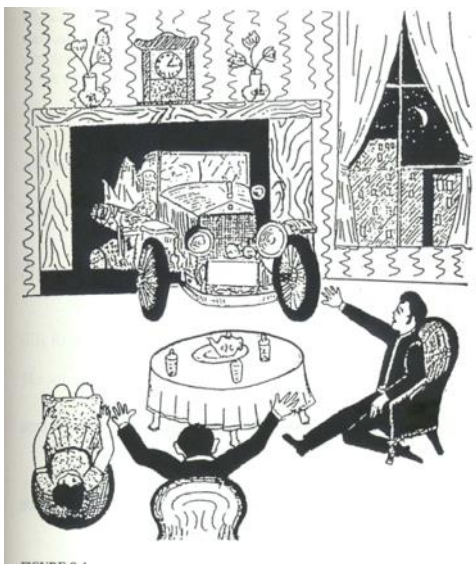


于是有 $|S|^2+|R|^2=1$, 概率守恒

✎ 经典力学：粒子根本不可能穿过势垒

量子力学：粒子能穿过比他能量更高的势垒——隧道效应

? 穿墙的汽车



如果 $\kappa a\gg1$ 则有 $\mathrm{sh}\kappa a\sim\frac{1}{2}e^{\kappa a}\gg1$

$$T\approx\frac{16E(V_0-E)}{V_0}e^{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0-E)}}$$

m越大，T越小

■ $V_0<E$情况

$\kappa\rightarrow ik'$ $k=\sqrt{2m(E-V_0)}/\hbar$

$\mathrm{sh}(ik'a)=i\sin k'a$

$$T=\frac{4k^2k'^2}{(k^2+k'^2)^2\sin^2k'a+4k^2k'^2}$$

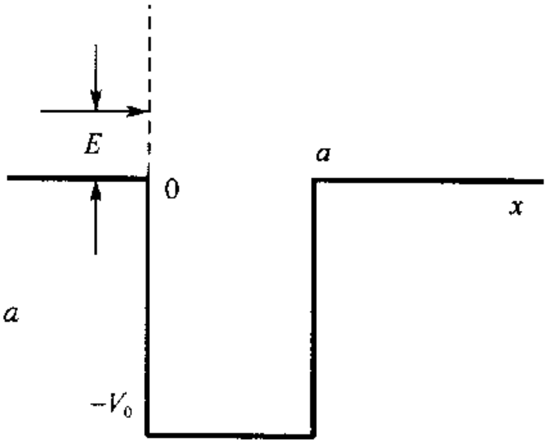
$$=\frac{1}{1+\frac{1}{4}\left(\frac{k}{k'}-\frac{k'}{k}\right)^2\sin^2k'a}<1$$

能量比势垒大也无法完全穿透！波动性

📖 一维方势阱

能量比势垒大也无法完全穿透！波动性

一维方势阱

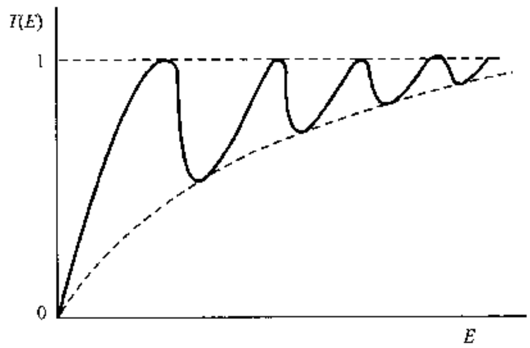


$$k' = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}} \geqslant k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Re^{-ikx}, & x < 0 \\ Ae^{ik'x} + Be^{-ik'x}, & 0 < x < a \\ Se^{ikx}, & x > a \end{cases}$$

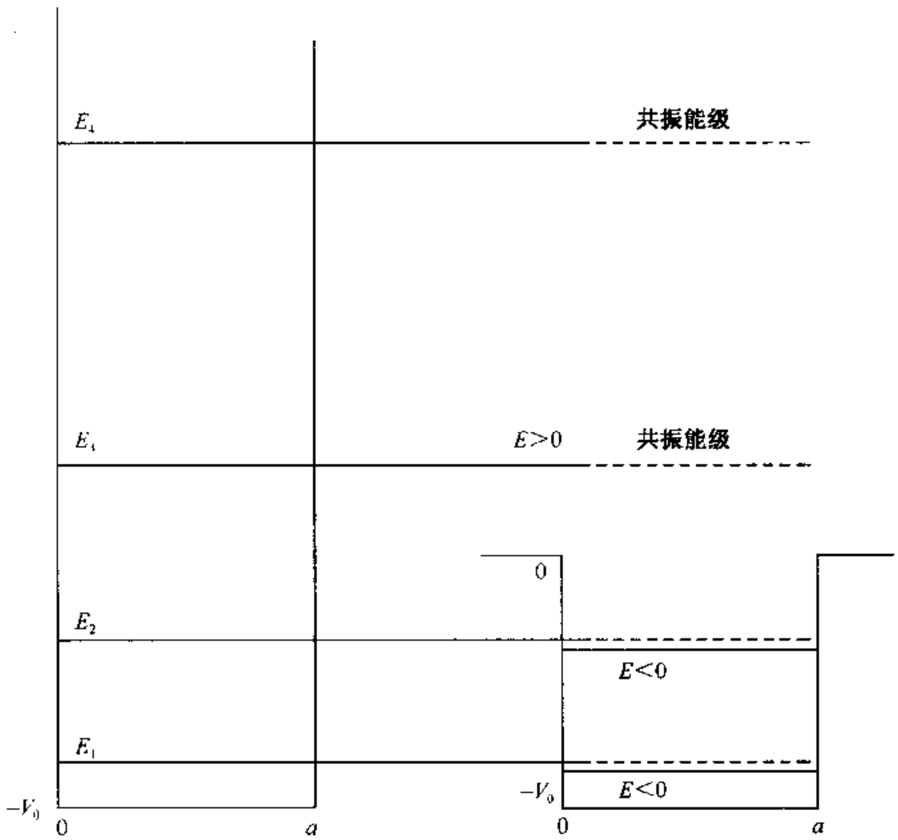
$$T = |S|^2 = \left[1 + \frac{1}{4}\left(\frac{k}{k'} + \frac{k'}{k}\right)^2 \sin^2 k'a\right]^{-1}$$

$$= \left[1 + \frac{\sin^2 k'a}{4\frac{E}{V_0}\left(1+\frac{E}{V_0}\right)}\right]^{-1}$$



- ✓ $V_0 \to 0, T = 1$
- ✓ $V_0 \neq 0, T < 1$
- ✓ $\sin k'a = 0, k'a = n\pi,\ T = 1$共振透射

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



无限深方势阱中束缚态

$E_n = -V_0 + n^2\pi^2\hbar^2/2ma^2$

$n = 1,2,3,\cdots$

有限深方势阱中
束缚态与共振态

求解一维定态问题的一般步骤

★ 求解一维定态问题的一般步骤

1. 按照势能 V 的形式列出不同区域的定态Schrödinger方程

★ 对于方（位）势 $\begin{cases} V > E \to \frac{\partial^2}{\partial x}\psi(x) = \frac{2m}{\hbar^2}(V-E)\psi(x) \\ V < E \to \frac{\partial^2}{\partial x}\psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\psi(x) \end{cases}$

2. 分析每个区域势能 V 与能量 E 之间的关系，分两种情况讨论。
   a. 如果 V 能够束缚 E，束缚态问题。此类问题典型例子（一维无限深势阱，一维有限深势阱，一维 δ 势阱，一维谐振子）
      i. 求解各区域定态Schrödinger方程。

      对于方（位）势

      $$\begin{cases} V > E \to \frac{\partial^2}{\partial x}\psi - \alpha^2\psi = 0 \left(\alpha = \sqrt{2m(V-E)}/\hbar\right) \to \psi = Ae^{\alpha x} + Be^{-\alpha x} \\ V < E \to \frac{\partial^2}{\partial x}\psi + k^2\psi = 0 \left(k = \sqrt{2m(E-V)}/\hbar\right) \to \psi = C\sin(kx+\delta) \end{cases}$$

      ii. 利用

      区域之间的连续性条件（ψ连续以及ψ'连续（δ 势除外））

      边界条件 $\psi \xrightarrow{x\to\pm\infty} 0$

      确定各个系数，得到驻波条件，求出能量本征值和能量本征函数；

      iii. 求出归一化常数

   b. 如果 V 不能够束缚 E，散射问题。此类问题典型例子（一维方势垒，一维δ 势垒），此时无束缚态解，无归一化条件，考虑物理上的散射问题
      i. 求解各区域定态Schrödinger方程。

      对于方势垒，势垒外部 $V = 0$ $\left(k = \sqrt{2m\mathrm{E}}/\hbar\right)$

      $$\begin{cases} \psi_i(x) = e^{ikx} + Re^{-ikx}, & \text{入射波} \\ \psi_{ir}(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & \text{其他无势垒区域} \\ \psi_t(x) = Se^{ikx}, & \text{出射波} \end{cases}$$

      势垒内部

      $$\begin{cases} V > E \to \frac{\partial^2}{\partial x}\psi - \alpha^2\psi = 0 \left(\alpha = \sqrt{2m(V-E)}/\hbar\right) \to \psi = Ae^{\alpha x} + Be^{-\alpha x} \\ V < E \to \frac{\partial^2}{\partial x}\psi + \beta^2\psi = 0 \left(k = \sqrt{2m(E-V)}/\hbar\right) \to \psi = Ce^{\beta x} + De^{-\beta x} \end{cases}$$

      ii. 利用区域之间的连续性条件（波函数连续以及波函数一阶导数连续（δ 势除外）），求得反射透射系数

V为实	ψ为实	束缚态
$V(-x) = V(x)$	ψ确定宇称	束缚态
V连续	ψ, ψ'连续	一维谐振子
V不连续：方势	ψ, ψ'连续	方势

V不连续：δ势	ψ连续, ψ'不连续	δ势

Kronecker δ函数 $\delta_{ij} = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ 1 & i = j \end{cases}$

Dirac δ函数 $\delta(x - x_0) = \begin{cases} \infty & x = x_0 \\ 0 & x \neq x_0 \end{cases}$

性质

$$\int_{x_0-\varepsilon}^{x_0+\varepsilon} \delta(x-x_0)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-x_0)dx = 1 \qquad (\varepsilon > 0)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-x_0)dx = f(x_0)$$

$$\delta(-x) = \delta(x)$$

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x)$$

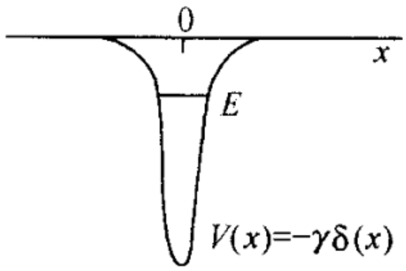
$$f(x)\delta(x-x_0) = f(x_0)\delta(x-x_0)$$

一维δ势

一维δ势阱

$V(x) = -\gamma\delta(x)$

定态Schrödinger方程



$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2}{\partial x}\psi(x) = -\dfrac{2mE}{\hbar^2}\psi(x), & x \neq 0 \\ \dfrac{\partial^2}{\partial x}\psi(x) = -\dfrac{2m}{\hbar^2}(\gamma\delta(x) + E)\psi(x), & x = 0 \end{cases}$$

- $V(-x) = V(x)$, 确定宇称
- 束缚态：$E < 0$. 边界条件 $\psi \xrightarrow{x \to \pm\infty} 0$
- 连续性条件：ψ连续. ψ'连续?
  - 跃变条件 $\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -\frac{2m\gamma}{\hbar^2}\psi(0)$

$\frac{\partial^2}{\partial x}\psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}(\gamma\delta(x) + E)\psi(x)$在0点附近积分两边积分$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dx$, $(\varepsilon \to 0)$

左$= \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{\partial^2}{\partial x}\psi(x)dx = \psi'(0^+) - \psi'(0^-)$

$=$右$= \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} -\frac{2m}{\hbar^2}(\gamma\delta(x) + E)\psi(x)dx$ （波函数连续 $\psi(0^+) = \psi(0^-) = \psi(0)$ ）

$$= -\frac{2m\gamma}{\hbar^2}\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \delta(x)\psi(x)dx = -\frac{2m\gamma}{\hbar^2}\psi(0)$$

$$\begin{cases} \psi_1(x) = A_1e^{\beta x} + B_1e^{-\beta x}, & x < 0 \\ \psi_2(x) = A_2e^{\beta x} + B_2e^{-\beta x}, & x > 0 \end{cases} \qquad \beta = \sqrt{-2mE}/\hbar$$

边界条件 $\psi \xrightarrow{x \to \pm\infty} 0$

$$\begin{cases} \psi_1(x) = A_1e^{\beta x}, & x < 0 \\ \psi_2(x) = B_2e^{-\beta x}, & x > 0 \end{cases}$$

$V(-x) = V(x)$, 确定宇称

奇宇称

$$\begin{cases} \psi_1(x) = Ae^{\beta x}, & x < 0 \\ \psi_2(x) = -Ae^{-\beta x}, & x > 0 \end{cases}$$

$\psi(0^+) = A = \psi(0^-) = -A \to A = 0 \to \psi = 0$

不存在奇宇称束缚态！

偶宇称

$$\begin{cases} \psi_1(x) = Ae^{\beta x}, & x < 0 \\ \psi_2(x) = Ae^{-\beta x}, & x > 0 \end{cases}$$

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

能量本征值

$$E = -\frac{m\gamma^2}{2\hbar^2}$$

$\psi(x) = Ae^{-\beta|x|}$

归一化条件

$$\int_{-\infty}^{\infty} |A|^2 e^{-2\beta|x|}\, dx = \frac{|A|^2}{\beta} = 1 \qquad \left(\int e^{ax} dx = \frac{1}{a} e^{ax}\right)$$

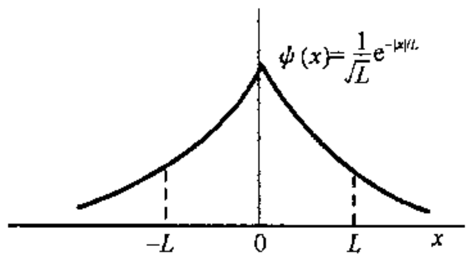
能量本征函数

$\psi(x) = \sqrt{\beta} e^{-\beta|x|}$

$L = \frac{\hbar^2}{\mu\gamma}$ 是 δ 势的特征长度

其图形见图 3.25. 不难计算出，在 $|x| > L$ 区域中找到粒子的概率为

$$2\int_L^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = e^{-2} = 0.1353$$



一维δ势垒

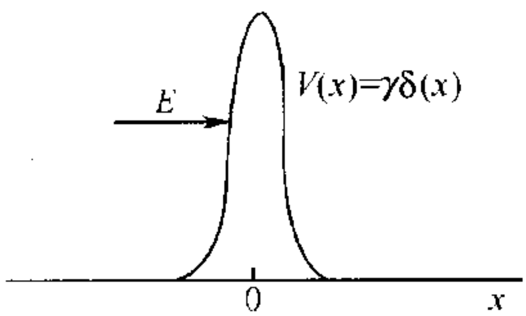
$V(x) = \gamma\delta(x)$

定态Schrödinger方程

$$\begin{cases} \frac{\partial^2}{\partial x}\psi(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x), & x \neq 0 \\ \frac{\partial^2}{\partial x}\psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - \gamma\delta(x))\psi(x), & x = 0 \end{cases}$$

- 粒子散射问题：$E > 0$
- 连续性条件：ψ连续. ψ'不连续

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



$$\begin{cases} \psi_1(x) = e^{ikx} + Re^{-ikx}, & x < 0 \\ \psi_2(x) = Se^{ikx}, & x > 0 \end{cases}$$

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

$$1+R=S$$
$$1-R=S-\frac{2m\gamma S}{i\hbar^2 k}$$

消去 R，得

$$S=\frac{1}{1-\mathrm{i}\mu\gamma/\hbar^2 k}$$

从而可求出

$$R=S-1=-\frac{\mathrm{i}\mu\gamma}{\hbar^2 k}\Big/\left(1+\frac{\mathrm{i}\mu\gamma}{\hbar^2 k}\right)$$

由于入射波的波幅为 1，所以

$$\text{透射系数}=|S|^2=\frac{1}{1+\mu^2\gamma^2/\hbar^4 k^2}=\frac{1}{1+\mu\gamma^2/2\hbar^2 E}$$

$$\text{反射系数}=|R|^2=\frac{\mu\gamma^2}{2\hbar^2 E}\Big/\left(1+\frac{\mu\gamma^2}{2\hbar^2 E}\right)$$

可见

$$|S|^2+|R|^2=1$$

这是粒子数守恒(几率守恒)的表现.

注意：虽然 ψ' 在 $x=0$ 不连续，但粒子流密度

$$j_x=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2\mu}\left(\psi^*\frac{\partial}{\partial x}\psi-\psi\frac{\partial}{\partial x}\psi^*\right)$$

却是连续的. 事实上

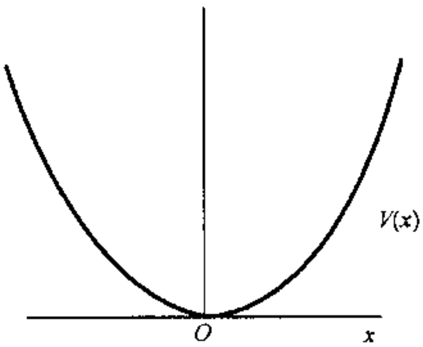
$$j_x(0^+)=\frac{\hbar k}{\mu}|S|^2$$

$$j_x(0^-)=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2\mu}\left[S^*\left(\mathrm{i}kS-\frac{2\mu\gamma}{\hbar^2}S\right)-\text{c. c.}\right]=\frac{\hbar k}{\mu}|S|^2$$

这是由于流密度公式中含有互为复共轭的两项，虽然 ψ' 不连续(更确切说 ψ' 的实部不连续)，但两项相减就抵消了

- 从流密度的连续性并不能得出 ψ' 的连续性
- δ势垒换为δ势阱，$\gamma\to-\gamma$ 透射系数$|R|^2$及反射系数 $|S|^2$不变
  - $E\gg\frac{\mu\gamma^2}{\hbar^2}\to|S|^2\sim1$
  - $E\ll\frac{\mu\gamma^2}{\hbar^2}\to|R|^2\sim1$

一维谐振子



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

$$\frac{\partial^2}{\partial x}\psi(x)=\frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}m\omega^2x^2-E\right)\psi(x)$$

- $V(-x)=V(x)$, 确定宇称
- 严格的谐振子势类似一个无限深势阱，束缚态：$E<V(x)$
- 连续性条件：ψ连续. ψ连续

- 边界条件$\psi \xrightarrow{x\to\pm\infty} 0$

能量本征值（过程见课本）

$$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega, n = 0,1,2,\ldots$$

能量本征函数

$$\psi_n(x) = N_n \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2\right) H_n(\alpha x)$$

$$N_n = [\alpha/\sqrt{\pi}2^n n!]^{\frac{1}{2}} \qquad \text{（归一化常数）}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m(x)\psi_n(x)\mathrm{d}x = \delta_{mn}$$

$$\alpha = \sqrt{\mu\omega_0/\hbar}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_m(\xi)H_n(\xi)\exp(-\xi^2)\mathrm{d}\xi = \sqrt{\pi}2^n n!\delta_{mn}$$

$$H_0(\xi) = 1$$
$$H_1(\xi) = 2\xi$$
$$H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2$$
$$H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi$$
$$\cdots\cdots$$

$$\psi_0(x) = \frac{\sqrt{\alpha}}{\pi^{1/4}}\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2\right)$$

$$\psi_1(x) = \frac{\sqrt{2\alpha}}{\pi^{1/4}}\alpha x\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2\right)$$

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

$$\psi_3(x) = \frac{\sqrt{3\alpha}}{\pi^{1/4}}\alpha x\left(\frac{2}{3}\alpha^2 x^2 - 1\right)\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2\right)$$

★ 波函数性质

- [ ] $\psi_n(-x) = (-1)^n\psi_n(x)$

$$x\psi_n(x)=\frac{1}{\alpha}\left[\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}(x)+\sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}(x)\right]$$

$$x^2\psi_n(x)=\frac{1}{2\alpha^2}\left[\sqrt{n(n-1)}\psi_{n-2}+(2n+1)\psi_n+\sqrt{(n+1)(n+2)}\psi_{n+2}\right]$$

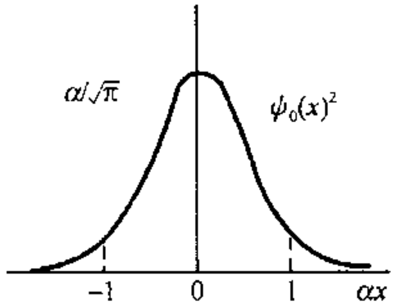
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_n(x)=\alpha\left(\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}-\sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}\right)$$

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_n(x)=\frac{\alpha^2}{2}\left[\sqrt{n(n-1)}\psi_{n-2}-(2n+1)\psi_n+\sqrt{(n+1)(n+2)}\psi_{n+2}\right]$$

基态，

$$E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega_0$$

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



量子	经典
在$x=0$处找到谐振子的概率最大	在$x=0$处概率最小
在经典禁区概率 $\int_1^\infty \exp(-\xi^2)\mathrm{d}\xi \Big/ \int_0^\infty \exp(-\xi^2)\mathrm{d}\xi \approx 16\%$	由于基态能量为$E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega$，按照经典力学，粒子将限制在$|\alpha x|\le 1$范围中因为在$|\alpha x|=1$处，势能$V=1/2\ \hbar\omega$，即等于总能量

随能量增大，经典→量子 （对应原理）

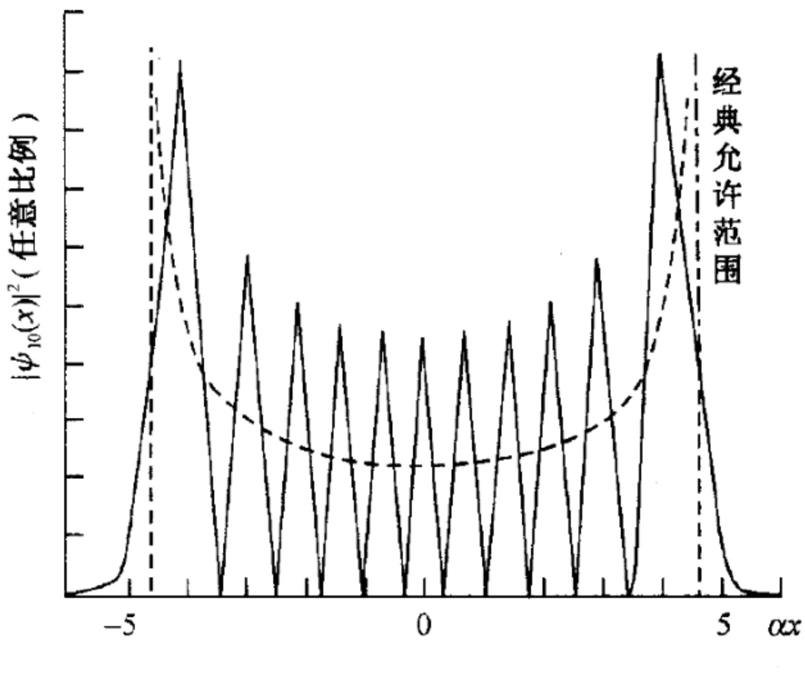


图 3.22 谐振子 $n=10$ 态的位置分布概率①