南京大学2022-2023学年第二学期本科生课程

量 子 力 学

南京大學
NANJING UNIVERSITY

物理学院
SCHOOL OF PHYSICS

现代物理学的两大支柱

- 在20世纪之交，相对论和量子力学的出现不仅标志着一种新理论的发现，而且标志着两种全新的物理学框架的发现。
- 相对论改变了我们对时空本质的看法。
- 量子力学将不确定性、概率和非定域性引入物理学的基础之中。
- 两者都引入了新的逻辑，带来了改变牛顿物理学的革命，并挑战我们的“经典”思维。
- 狭义相对论研究速度与光速相当的系统。
- 广义相对论研究具有强引力场或者加速度的系统。
- 量子力学的研究主要集中在在极小的（原子、亚原子）尺度上，但是在宏观尺度上也有非常重要的应用（超流体、超导体等）。

"I think I can safely say that *nobody* understands quantum mechanics. ... I am going to tell you what nature behaves like. If you will simply admit that maybe she does behave like this, you will find her a delightful, entrancing thing. … Do not keep saying to yourself, if you can possibly avoid it, "But how can it be like that?", because you will get down the drain, into a blind alley from which nobody has escaped. Nobody knows how it can be like that."

---- R. P. Feynman, The Messenger Lectures, 1964, Cornell

"Those who are not shocked when they first come across quantum theory cannot possibly have understood it."

---- N. Bohr, 1952, Copenhagen

W. Heisenberg, *Physics and Beyond*, 1971

- 宏观世界, 大多数现象都很好地遵循经典牛顿力学

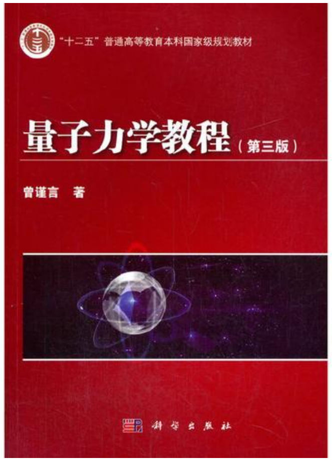
  ➡ 我们的直觉是经典的，因此我们很容易接受牛顿力学

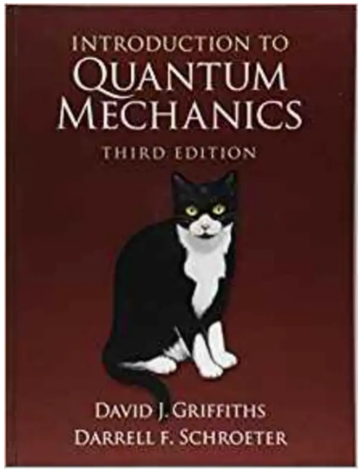
- 微观世界，如原子或者更小的粒子，显示出新的量子现象

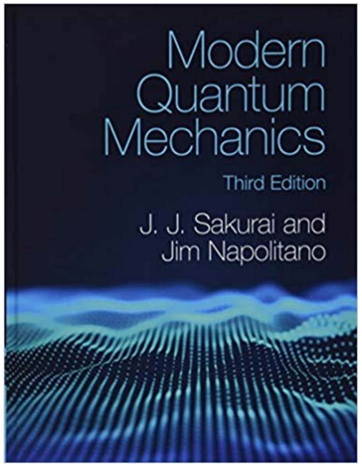
  ➡ 我们的经典直觉不再可靠，因此我们更难接受量子力学

主要参考书

- 曾谨言：《量子力学教程》，北京，科学出版社，（2014）.
- D. J. Griffiths, Introduction to Quantum Mechanics, Prentice Hall (2004).
- J. J. Sakurai, Modern Quantum Mechanics, Cambridge University Press (2020).







课程主要内容

第1章 绪论

1.1 波粒二象性

1.2 波函数的统计解释和态叠加原理

1.3 力学量的算符表示和期待值

1.4 Heisenberg不确定关系

1.5 Schrödinger方程

1.6 几个简单的一维问题

第2章 量子力学的形式理论

2.1 右矢、左矢和Hilbert空间

2.2 线性算符和可观测量

2.3 量子化条件

2.4 表象和表象变换

2.5 运动方程

第3章 基本应用一

3.1 一维谐振子

3.2 角动量

第4章 对称性和守恒量

4.1 力学量期待值的时间演化与守恒量

4.2 对称性和守恒量的关系

4.3 时间反演对称性

4.4 应用举例

课程主要内容

第5章 基本应用二

5.1 中心立场

5.2 自旋

5.3 角动量相加

5.4 带电粒子在电磁场中的运动

第6章 全同粒子

6.1 Bose子和Fermi子

6.2 两电子系统

6.3 交换相互作用

第7章 微扰理论

7.1 不含时微扰理论

7.2 含时微扰理论

第8章 变分法

8.1 量子力学的变分原理

8.2 氦原子的基态能量

第9章 散射问题

9.1 Lippmann-Schwinger方程和散射截面

9.2 Born近似

9.3 分波法

9.4 全同粒子散射

第10章 绝热近似和Berry相位

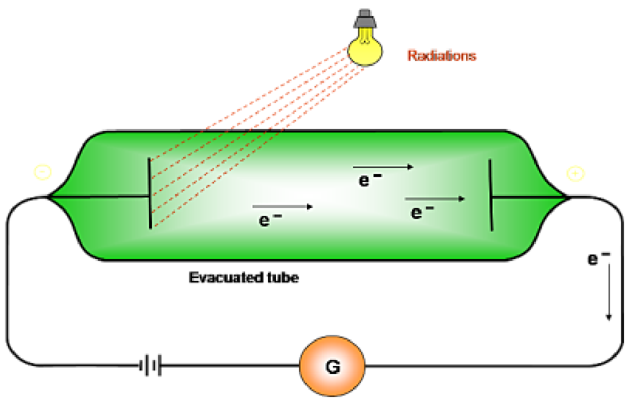
10.1 绝热定理

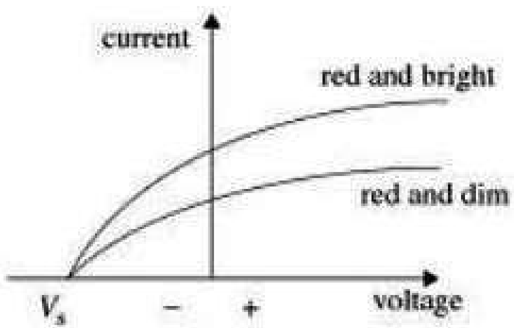
10.2 Berry相位

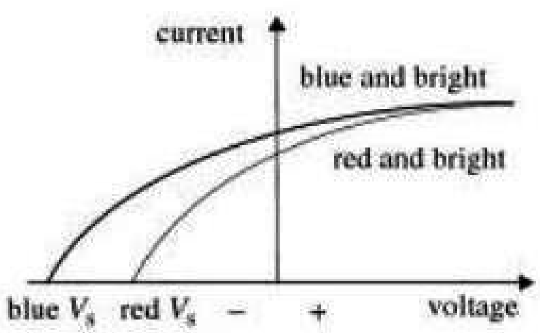
第一章 绪论

1.1 波粒二象性

光电效应







Einstein光量子理论

- Einstein认为光是由具有能量$h\nu$的光量子组成，其中ν是频率，h是普朗克常数。

$$h = 6.626 \times 10^{-34}\,\mathrm{J \cdot s}$$

$$E = \sqrt{p^2c^2 + (m_0c^2)^2} = h\nu$$

- 对于光子

$$m_0 = 0$$

$$p = h\nu/c$$

- 增加光的强度会增加光子的数量

1.1 波粒二象性

- 我们经常使用“角频率”： $\omega = 2\pi\nu$

  因此我们定义： $\hbar = h/2\pi$ $\Rightarrow \begin{cases} E = \hbar\omega \\ \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \end{cases}$

  我们定义了波矢 $\mathbf{k}$，其强度为波数 $k = \omega/c$

- 光既可以看做粒子也可以看做波。波和粒子性的共存被称为“波粒二象性”。光的干涉等实验现象体现的是光的波动性，而光电效应体现的则是光的粒子性，也就是说波动性和粒子性的展现依赖于观测方式。

de Broglie物质波

- L. de Broglie认为实物粒子（静止质量不为零）也具有波动性，即和光一样，也具有波粒二象性。
- de Broglie方程

$$\begin{cases} E = \hbar\omega \\ \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \end{cases}$$

❖ 实验验证

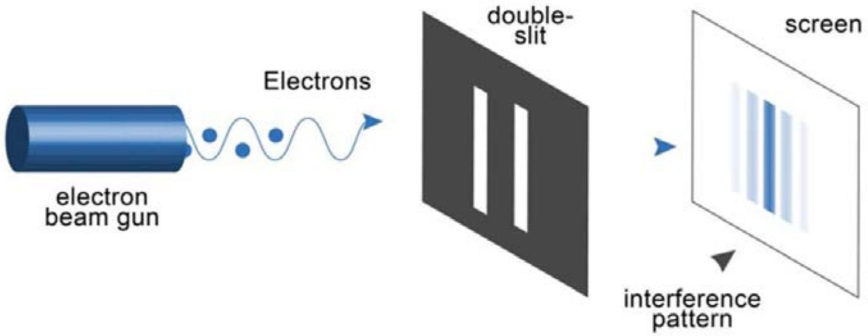
粒子对应的de Broglie波长为

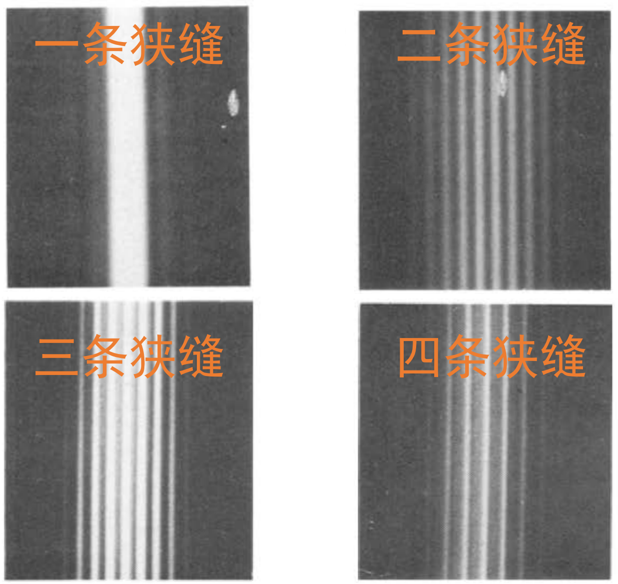
$$\lambda = 2\pi\hbar/p$$

最好选择质量小的粒子

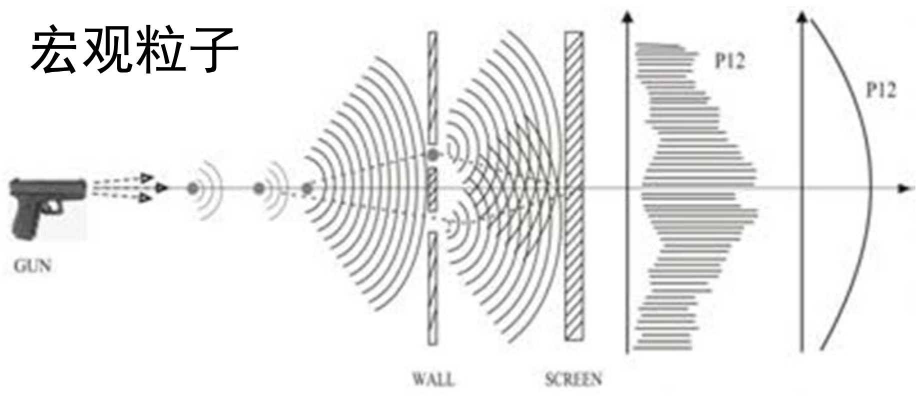
1.1 波粒二象性

➢ 电子的狭缝干涉实验





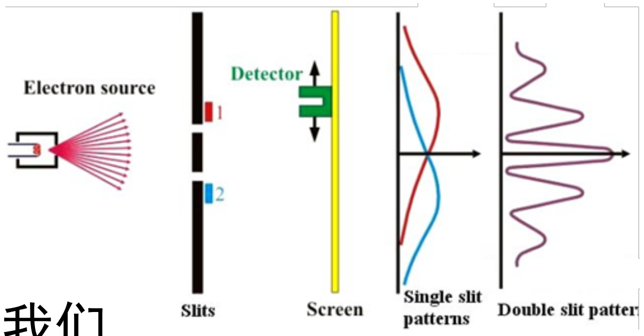
➢ 宏观粒子



波长非常短，干涉条纹靠得非常近，实验无法分辨，只能看到平均效果

➢ 随着技术的进步，实验上可以观测到干涉现象的物质的质量不断增加，目前已经可以观测到10000个原子质量的有机分子的干涉条纹。

1.1 波粒二象性



- **一个问题：**
  - 在双缝干涉实验中，我们能否知道电子通过的是上面的狭缝还是下面的狭缝？
  - 作为对比，考虑一个有前后两个门的教室，我们能否知道一个同学是通过哪个门进入教室的？
- 在教室问题中，即使我们没有看到那位同学是如何进入教室的，我们也可以确定该同学不是从前门就是从后门进入的教室。
- 这个逻辑在双缝干涉实验中是不适用的
  - 这个逻辑的前提是电子只能从上面或者下面狭缝中的一个通过。
  - 那么后面屏上接收到的电子就是通过两个狭缝的电子分布的叠加。
  - 实验结果告诉我们，真实情况并不是这样。
- **量子力学的逻辑：**我们不能问粒子是通过哪个狭缝的，除非我们做测量。
- 测量的影响是什么？

1.2 波函数的统计解释和态叠加原理

- 经典力学中，一个物理系统的各种可能运动状态用位置**r**和动量**p**来表示
- 量子力学中，由于粒子的波动性，系统的状态用波函数来描写，我们称其为量子态

波函数的统计解释

- 波函数是一个概率幅，它给出量子系统各种可能测量值出现的概率。
  - 例如，假定波函数为 $\Psi(\mathbf{r},t)$，则 $|\Psi(\mathbf{r},t)|^2$ 给出了在位置 $\mathbf{r}$，时刻 t 粒子出现的概率。
  - 波函数本身没有明确的物理意义。
  - 根据波函数的统计解释，我们很自然地要求总概率为1（不考虑粒子的产生和消灭），即

$$\int |\Psi(\mathbf{r},t)|^2 d^3r = 1$$

1.2 波函数的统计解释和态叠加原理

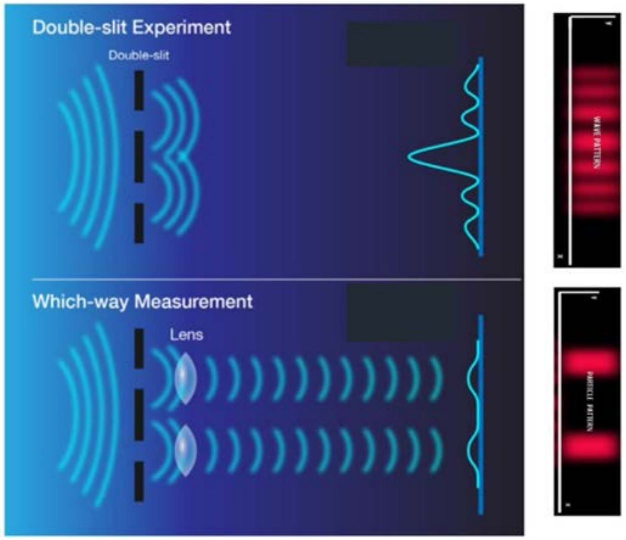
态叠加原理

- 任何一个量子态都是其它的两个或者更多个量子态叠加的结果，而任何两个或者多个量子态的叠加产生一个新的量子态。
  - 这里的叠加指的是线性叠加，假设 ψ_1、ψ_2，$\cdots$，ψ_N 是系统的N个态，则 $\Psi=\sum_{i=1}^{N} c_i\psi_i$ 也是系统的态，其中 c_i 是任意复数。
  - 与经典力学完全不同的奇特现象：系统可能同时处在A态和B态。例如，双缝干涉实验，电子就是处在可以同时通过两个狭缝的叠加态。
- 即使我们知道量子力学可以告诉我们的所有信息，我们依然不能准确预测一次实验测量的结果，量子力学只能告诉我们关于可能测量结果的统计信息。
  - 例如，对于由 $\Psi(\mathbf{r})$ 描述的量子态，对粒子的位置进行测量，测得结果为$\mathbf{r}$的概率为 $|\Psi(\mathbf{r})|^2$ 。

1.2 波函数的统计解释和态叠加原理

测量和塌缩

- 测量会对被测系统，产生影响，会改变系统的状态。
- 测量后系统会变为只产生一种特定测量结果的状态（被测量物理量的本征态），这个过程称为“塌缩”，而且是一种突然不连续的塌缩。



- 波函数的绝对相位没有意义，即 $e^{i\theta}\Psi(\mathbf{r},t)$ 和 $\Psi(\mathbf{r},t)$ 描述的是同一个状态，因为 $|\Psi(\mathbf{r},t)|^2$ 才是可观测量，差一个绝对相位并不影响 $|\Psi(\mathbf{r},t)|^2$ 的值。但是，通过态叠加原理我们发现叠加时两个波函数的相对相位是有意义的，它可以决定系统的物理性质。例如双缝干涉实验中就是相对相位起了重要作用。

1.3 力学量的算符表示和期待值

- ◆ 经典力学中，力学量用数来表示，运动状态用力学量（**r**和**p**）表示。
- ◆ 量子力学中，运动状态用波函数描述，并且力学量的测量结果通常没有确定值，因此，力学量不能用数来表示，而是用算符表示。

➢ 坐标空间中位置和动量算符的表示

$$\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}$$

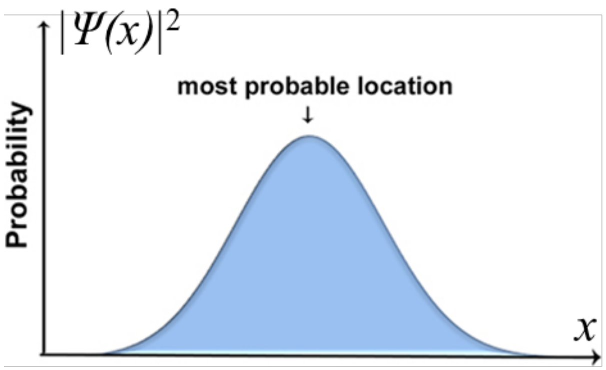
$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$$

➢ 期待值

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int \psi^*(\mathbf{r})(-i\hbar\nabla)\psi(\mathbf{r})d^3r$$

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int \psi^*(\mathbf{r})\mathbf{r}\psi(\mathbf{r})d^3r$$

❖ 一次测量只能给出一个确定的值（测量值）



它们是测量值的统计平均值。

1.3 力学量的算符表示和期待值

- 其他力学量的算符表示可以用 $\hat{\mathbf{r}}$ 和 $\hat{\mathbf{p}}$ 的函数来表示，即 $\hat{F}=F(\hat{\mathbf{r}},\hat{\mathbf{p}})$

  - 期待值

$$\langle\hat{F}\rangle=\int\psi^*(\mathbf{r})\hat{F}\psi(\mathbf{r})d^3r$$

  - 例如，动能算符

$$\hat{T}=\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$$

- $e^{i\theta}\Psi(\mathbf{r},t)$ 和 $\Psi(\mathbf{r},t)$ 描述的是同一个态，$e^{i\theta(\mathbf{r})}\Psi(\mathbf{r},t)$ 和 $\Psi(\mathbf{r},t)$ 是不同的态。

- 虽然对于任意的复数 c，$\phi(\mathbf{r},t)=c\Psi(\mathbf{r},t)$ 和 $\Psi(\mathbf{r},t)$ 描述的是同一个态，但是计算物理量的期待值的时候要将波函数归一化，或者

$$\langle\hat{A}\rangle=\frac{\int\phi^*(\mathbf{r})\hat{A}\phi(\mathbf{r})d^3r}{\int\phi^*(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r})d^3r}$$

1.4 Heisenberg不确定关系

- 量子力学中，力学量不一定有确定的测量值，而期待值是测量结果的理论平均值。
- 位置和动量测量值的标准差（不确定度）

$$\Delta x = \sqrt{\langle(\hat{x} - \langle\hat{x}\rangle)^2\rangle} = \sqrt{\langle\hat{x}^2\rangle - \langle\hat{x}\rangle^2}$$

$$\Delta p = \sqrt{\langle(\hat{p} - \langle\hat{p}\rangle)^2\rangle} = \sqrt{\langle\hat{p}^2\rangle - \langle\hat{p}\rangle^2}$$

- Heisenberg不确定关系

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

- 对于一个波函数（或者一个态），粒子的位置和动量不可能同时精确的确定，位置越精确，动量就越不精确，反之亦然。也就是说，对于一个系统如果测量位置很精确，即只有一个确定的值，那么对于动量的测量就会得到各种可能值，不可能精确的得到只有一个确定的值。

1.4 Heisenberg不确定关系

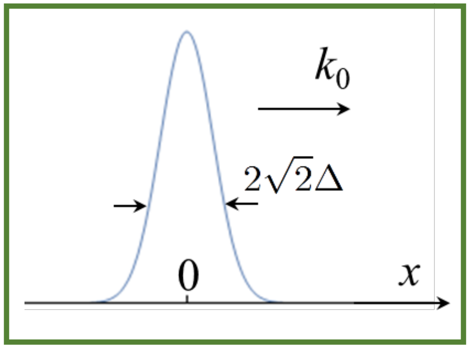
❖ **例题**：假设粒子由波函数 $\psi(x)=Ae^{ik_0x}e^{-x^2/2\Delta^2}$ 描述（即Gaussian波包），分别计算位置和动量的不确定度。

解：由 $\int|\psi(x)|^2dx=A^2\int e^{-x^2/\Delta^2}dx=1$ 得 $A=1/(\pi\Delta^2)^{1/4}$，其中用到了积分公式 $\int_{-\infty}^{+\infty}dxe^{-\alpha x^2}=\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$。显然 $\langle x\rangle=0$。利用 $\int_{-\infty}^{\infty}dxx^2e^{-x^2}=\frac{\sqrt{\pi}}{2}$，我们有 $\langle x^2\rangle=1/(\pi\Delta^2)^{1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}dxx^2e^{-x^2/\Delta^2}=\Delta^2/2$，因此 $\Delta x=\Delta/\sqrt{2}$。

根据

$$\langle p\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}dx\psi^*(x)(-i\hbar\frac{d}{dx})\psi(x)=\hbar k_0$$

$$\langle p^2\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}dx\psi^*(x)(-\hbar^2\frac{d^2}{dx^2})\psi(x)=\hbar^2k_0^2+\frac{\hbar^2}{2\Delta^2}$$



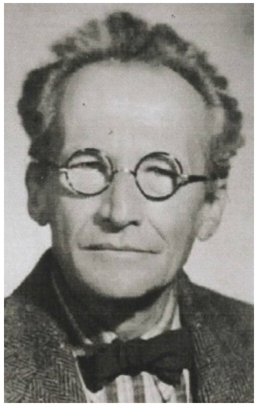
我们有 $\Delta p=\frac{\hbar}{\sqrt{2}\Delta}$。所以，$\Delta x\Delta p=\frac{\hbar}{2}$。

❖ 由于 $\hbar\sim10^{-34}$，我们可以选择 Δ，使得位置和动量的不确定度都在 10^{-17} 范围，因此，这个波包可以近似描写位置在 $x=0$，动量为 $p=\hbar k_0$ 的经典粒子。

1.5 Schrödinger方程

➢ Schrödinger方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t)=[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\mathbf{r},t)]\psi(\mathbf{r},t)$$



其中，$\hat{H}(\mathbf{r},t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\mathbf{r},t)$ 是Hamiltonian算符。

❖ 一个简单的理解

经典力学：$E=\mathbf{p}^2/2m+V(\mathbf{r},t)$

量子力学：$E \quad\rightarrow\quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ ， $\mathbf{p}\quad\rightarrow\quad -i\hbar\nabla$

➢ 概率守恒

❖ 连续性方程：$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\mathbf{r},t)+\nabla\cdot\mathbf{j}(\mathbf{r},t)=0$

❖ 概率密度：$\rho(\mathbf{r},t)=\psi^*(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)$

❖ 概率流密度：$\mathbf{j}(\mathbf{r},t)=-\frac{i\hbar}{2m}[\psi^*(\mathbf{r},t)\nabla\psi(\mathbf{r},t)-\psi(\mathbf{r},t)\nabla\psi^*(\mathbf{r},t)]$

1.5 Schrödinger方程

根据Schrödinger方程：
$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t)=[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\mathbf{r},t)]\psi(\mathbf{r},t)$$
$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(\mathbf{r},t)=[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\mathbf{r},t)]\psi^*(\mathbf{r},t)$$

我们有
$$\begin{aligned}i\hbar\frac{\partial}{\partial t}[(\psi^*(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)] &= -\frac{\hbar^2}{2m}[\psi^*(\mathbf{r},t)\nabla^2\psi(\mathbf{r},t)-\psi(\mathbf{r},t)\nabla^2\psi^*(\mathbf{r},t)]\\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\cdot[\psi^*(\mathbf{r},t)\nabla\psi(\mathbf{r},t)-\psi(\mathbf{r},t)\nabla\psi^*(\mathbf{r},t)]\\ &= -i\hbar\nabla\cdot\mathbf{j}(\mathbf{r},t).\end{aligned}$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r},t)=-\frac{i\hbar}{2m}[\psi^*(\mathbf{r},t)\nabla\psi(\mathbf{r},t)-\psi(\mathbf{r},t)\nabla\psi^*(\mathbf{r},t)]=\frac{\hbar}{m}\mathrm{Im}[\psi^*(\mathbf{r},t)\nabla\psi(\mathbf{r},t)]$$

于是，我们可以得到 $$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\mathbf{r},t)+\nabla\cdot\mathbf{j}(\mathbf{r},t)=0$$

如果将波函数写为 $$\psi(\mathbf{r},t)=A(\mathbf{r},t)e^{i\theta(\mathbf{r},t)/\hbar}$$

概率流密度也可以写为 $$\mathbf{j}(\mathbf{r},t)=\frac{A^2(\mathbf{r},t)}{m}\nabla\theta(\mathbf{r},t)$$

1.5 Schrödinger方程

- 定态Schrödinger方程
  - 如果势$V(\mathbf{r},t)$与时间无关，那么

$$\psi(\mathbf{r},t)=\psi(\mathbf{r})f(t)$$

  - 代入Schrödinger方程，做变量分离

$$\frac{i\hbar}{f(t)}\frac{df(t)}{dt}=\frac{1}{\psi(\mathbf{r})}[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\mathbf{r})]\psi(\mathbf{r})=E$$

  - 解得 $f(t)=e^{-iEt/\hbar}$ ，

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\mathbf{r})]\psi(\mathbf{r})=E\psi(\mathbf{r})$$ 定态Schrödinger方程

- 能量本征态具有正交完备性，任意态的时间演化可以表示为

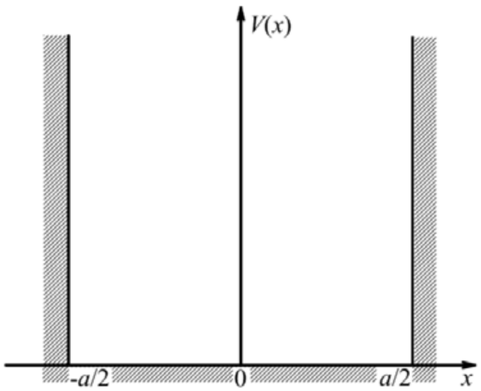
$$\Phi(\mathbf{r},t)=\sum_n \phi_n\psi_n(\mathbf{r})e^{-iE_nt/\hbar}$$

$$\phi_n=\int d^3r\psi_n^*(\mathbf{r})\Phi(\mathbf{r},0)$$

1.6 几个简单的一维问题

1.6.1 无限深势井

$$V(x) = \begin{cases} 0, & -a/2 \le x \le a/2; \\ \infty, & x < -a/2,\ x > a/2. \end{cases}$$



- 势井外 $\psi(x) = 0$
- 势井内
  - 定态Schrödinger方程 $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = E\psi(x) \qquad E \ge 0$$

    即 $$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + k^2\psi(x) = 0 \qquad k = \sqrt{2mE}/\hbar$$
  - 通解 $$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$
  - 通过 $\psi(x)$ 和 $d\psi(x)/dx$ 的边界条件确定A和B的值。

1.6 几个简单的一维问题

$\psi(x)$ 和 $d\psi(x)/dx$ 的边界条件

- 一般来说，$\psi(x)$ 和 $d\psi(x)/dx$ 都是连续的。
- 对于势存在发散的情况，允许 $d\psi(x)/dx$ 不连续。
- 对于势不发散，即使存在跃变的情况，$d\psi(x)/dx$ 依然连续。

❖ 根据定态Schrödinger方程，我们有

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

在跃变点 x_0 附近的邻域内

$$\frac{d\psi(x_0+0^+)}{dx} - \frac{d\psi(x_0-0^+)}{dx} = -\frac{2m}{\hbar^2}\lim_{\eta\to 0^+}\int_{x_0-\eta}^{x_0+\eta} dx[E - V(x)]\psi(x)$$

因为$V(x)$的跃变有限，所以 $d\psi(x_0+0^+)/dx = d\psi(x_0-0^+)/dx$。

1.6 几个简单的一维问题

❖ $\psi(x)$ 的连续性：$\psi(-a/2)=\psi(a/2)=0$

通解

$$\psi(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}$$

即 $$\begin{cases} Ae^{-ika/2}+Be^{ika/2}=0 \\ Ae^{ika/2}+Be^{-ika/2}=0 \end{cases}$$

因此 $$\begin{vmatrix} e^{-ika/2} & e^{ika/2} \\ e^{ika/2} & e^{-ika/2} \end{vmatrix}=0 \quad \Rightarrow \quad \begin{matrix} ka=n\pi \\ n=0,\pm1,\pm2,\cdots \end{matrix}$$

于是 $$\psi(x)=2iAe^{-i\frac{n\pi}{2}}\sin\frac{n\pi}{a}(x+\frac{a}{2})$$

❖ k 和 $-k$ 对应同一个量子态，而且波函数不能为零，所以我们取

$$k=\frac{n\pi}{a}, \qquad n=1,2,3,\cdots$$

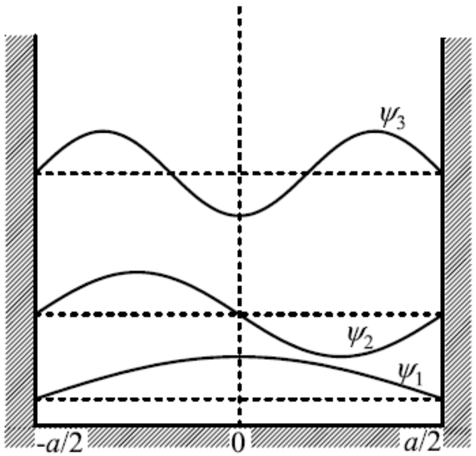
❖ 利用归一化条件 $\int_{-a/2}^{a/2}|\psi(x)|^2dx=1$，确定待定系数$A$

1.6 几个简单的一维问题

❖ 本征能量和归一化本征波函数为

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

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}(x+\frac{a}{2})$$



➢ 能量最低的状态称为基态，其他状态按能量由低到高依次称为第1，2，…，j激发态。

➢ 波函数相对于势井中心具有确定的奇偶性

这是 $V(x) = V(-x)$ 情况的普遍性质，即能量本征态具有确定的宇称。

➢ 本征函数之间是正交的

$$\text{对于 } m \neq n, \quad \int_{-a/2}^{a/2} \psi_m^*(x)\psi_n(x)dx = 0$$

1.6 几个简单的一维问题

1.6.2 自由粒子

在空间各处都有 $V(x)=0$ 或者 $V(x)=$ 常数。

- 定态Schrödinger方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)=E\psi(x) \quad 即 \quad \frac{d^2}{dx^2}\psi(x)+k^2\psi(x)=0\,, \quad k=\sqrt{2mE}/\hbar$$

- 本征函数 $\psi_k(x)=Ae^{ikx}$

  或者 $\psi_p(x)=Ae^{ipx/\hbar}$

通解

$$\psi(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}$$

❖ 优点：这些能量本征函数同时也是动量本征函数

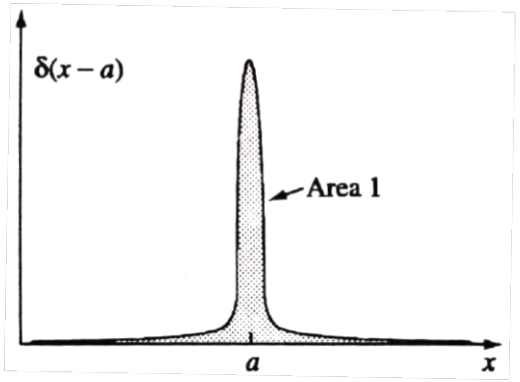
$$\hat{p}\psi_p(x)=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}Ae^{ipx/\hbar}=p\psi_p(x)$$

- 这些本征函数不能归一化 $\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_k^*(x)\psi_k(x)dx\rightarrow\infty$

❖ 平面波并不代表物理上可实现的状态

1.6 几个简单的一维问题

利用δ函数归一化



- δ函数的定义：

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

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

- 用传统函数近似：

$$\delta(x-x_0)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}dk e^{ik(x-x_0)}$$

$$\delta(x-x_0)=\frac{1}{\pi}\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{\varepsilon}{(x-x_0)^2+\varepsilon^2}$$

$$\delta(x-x_0)=\frac{1}{\pi}\lim_{\alpha\to\infty}\frac{\sin\alpha(x-x_0)}{x-x_0}$$

1.6 几个简单的一维问题

➢ δ函数的性质：

$$\delta[\alpha(x-x_0)]=\frac{1}{|\alpha|}\delta(x-x_0)$$

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

$$\int_{-\infty}^{+\infty}dx\delta(x-x_0)\delta(x-x_1)=\delta(x_0-x_1)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}dx[\frac{\partial^n}{\partial x^n}\delta(x-x_0)]f(x)=(-1)^n\frac{\partial^n}{\partial x_0^n}f(x_0)$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\delta[\alpha(x-x_0)]=\pm\frac{1}{\alpha^2}\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x_0),\qquad \alpha\gtrless 0$$

$$(x-x_0)\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x_0)=-\delta(x-x_0)$$

1.6 几个简单的一维问题

➢ 利用δ函数表示平面波的归一化

根据

$$\delta(x-x_0)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}dke^{ik(x-x_0)}$$

可以将 $\psi_k(x)=Ae^{ikx}$ 改写为

$$\psi_k(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx} \qquad 即 \qquad A=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

使得

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_k^*(x)\psi_{k'}(x)dx=\delta(k-k')$$

同理可得

$$\psi_p(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ipx/\hbar}$$

1.6 几个简单的一维问题

箱归一化

- 先考虑粒子在[-L/2,L/2]范围内运动，最后让L→∞
- 采用周期性边界条件：$\psi(-L/2) = \psi(L/2)$
- 我们有

$$e^{-ipL/2\hbar} = e^{ipL/2\hbar} \quad \text{即} \quad e^{ipL/\hbar} = 1$$

- 因此，动量 p 的可能取值为

$$p_n = \frac{2\pi\hbar}{L}n, \qquad n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$$

- 归一化本征函数为

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{\frac{ip_n x}{\hbar}} = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\frac{2\pi n x}{L}}$$

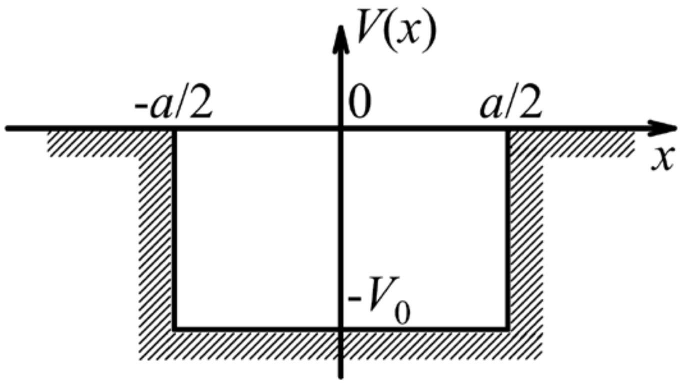
- 这些本征函数具有正交归一性

$$\int_{-L/2}^{L/2} \psi_m^*(x)\psi_n(x)dx = \delta_{mn}$$

1.6 几个简单的一维问题

1.6.3 有限深势井

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & -a/2 \le x \le a/2; \\ 0, & \text{其他情况}. \end{cases}$$



- **束缚态：** $\psi(x \to \pm\infty) = 0$，

  对于Hamiltonian本征态有

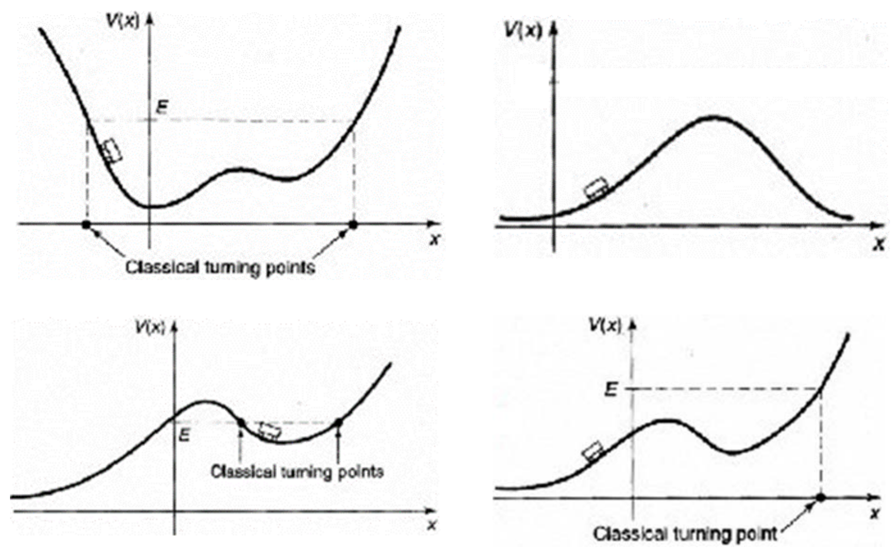
  $$E < V(\pm\infty)$$

- **散射态：** $\psi(x \to \pm\infty) \neq 0$，

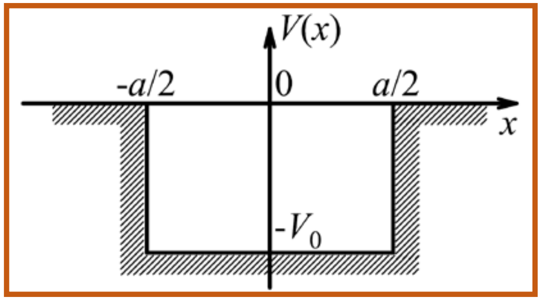
  对于Hamiltonian本征态有

  $$E > V(+\infty) \text{ 或 } V(-\infty)$$

经典情况



1.6 几个简单的一维问题



束缚态

➢ 在 $x < -a/2$ 的区域，定态Schrödinger方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \kappa^2\psi(x), \quad \kappa = \sqrt{-2mE}/\hbar$$

❖ 通解为 $\psi(x) = Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x}$

❖ 第一项在 $x \to -\infty$ 时发散，所以物理上允许的解为

$$\psi(x) = Be^{\kappa x}$$

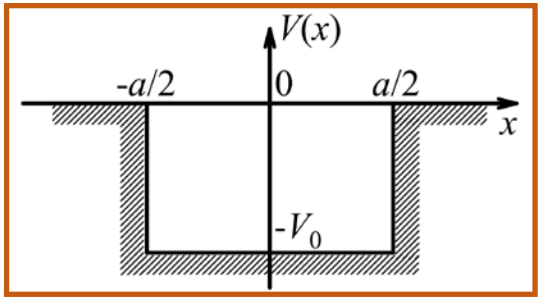
➢ 在 $-a/2 \le x \le a/2$ 的区域，$V(x) = -V_0$，定态Schrödinger方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - V_0\psi(x) = E\psi(x) \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2\psi(x), \quad k = \sqrt{2m(E+V_0)}/\hbar$$

❖ 对于 $V(x) = V(-x)$，波函数具有确定的奇偶性，所以

$$\psi(x) = C(e^{ikx} \pm e^{-ikx})$$

1.6 几个简单的一维问题



- 在 $x > a/2$ 区域，势也为零，因此通解为

$$\psi(x) = De^{-\kappa x} + Fe^{\kappa x}$$

  - 第二项在 $x \to +\infty$ 时发散，所以

$$\psi(x) = De^{-\kappa x} = \pm Be^{-\kappa x}$$

  其中，正号对应偶宇称解，负号对应奇宇称解。

- 待定系数可以根据边界条件来确定，由于束缚态解具有确定的宇称，我们只需要 $x = a/2$ 处的边界条件即可

以偶宇称解为例

- 寻找如下形式的解

$$\psi(x) = \begin{cases} Be^{\kappa x}, & x < -a/2; \\ C(e^{ikx} + e^{-ikx}), & -a/2 \le x \le a/2; \\ Be^{-\kappa x}, & x > a/2. \end{cases}$$

1.6 几个简单的一维问题

$$\psi(x) = \begin{cases} Be^{\kappa x}, & x < -a/2; \\ C(e^{ikx} + e^{-ikx}), & -a/2 \le x \le a/2; \\ Be^{-\kappa x}, & x > a/2. \end{cases}$$

- $\psi(x)$在 $x = a/2$ 处连续

$$Be^{-\kappa a/2} - 2C\cos(\frac{1}{2}ka) = 0$$

- $d\psi(x)/dx$ 在 $x = a/2$ 处连续

$$B\kappa e^{-\kappa a/2} - 2Ck\sin(\frac{1}{2}ka) = 0$$

- B和C的非平庸解要求

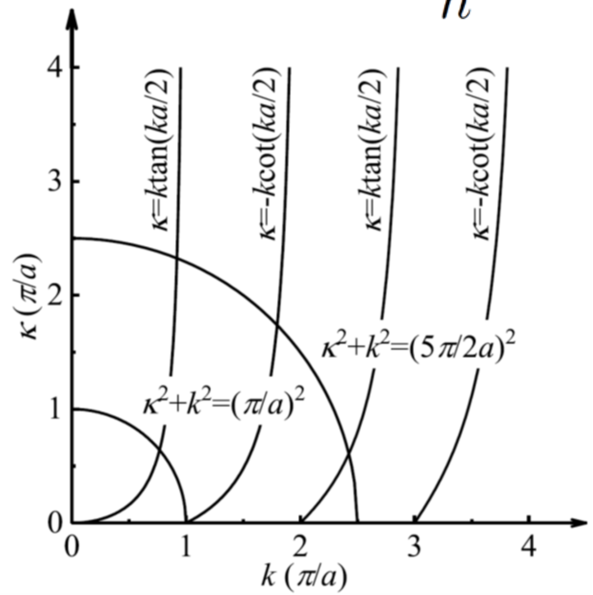
$$\begin{vmatrix} e^{-\kappa a/2} & 2\cos(\frac{1}{2}ka) \\ \kappa e^{-\kappa a/2} & 2k\sin(\frac{1}{2}ka) \end{vmatrix} = 0$$

- 解得 $\quad \kappa = k\tan(\frac{1}{2}ka)$
- 同样方法，对于奇宇称解，可得

$$\kappa = -k\cot(\frac{1}{2}ka)$$

❖ 根据 κ 和 k 的定义

$$\kappa^2 + k^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$$

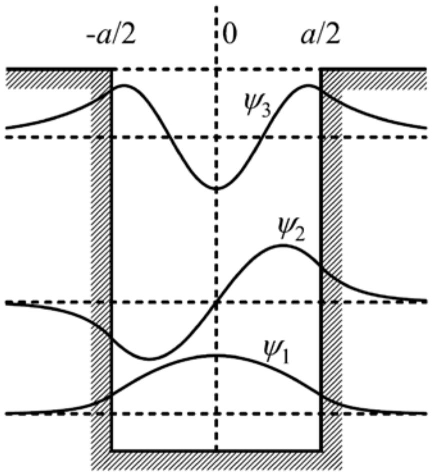


❖ 束缚态数目取决于V_0

❖ 至少有一个束缚态

1.6 几个简单的一维问题

束缚态能量本征函数



两个普遍性质

- 所有的束缚态本征能量不简并，即每个束缚态能量本征函数的能量都不相同。
- 第 n 个束缚态能量本征函数 $\psi_n(x)$ 有 $n-1$ 个节点（不包括两个端点）

- 假设 $\psi_1(x)$ 和 $\psi_2(x)$ 是两个不同的本征函数但具有相同的能量

$$\frac{1}{\psi_1(x)}\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2}=\frac{2m}{\hbar^2}[V(x)-E]=\frac{1}{\psi_2(x)}\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2}$$

- 利用 $$\psi_2(x)\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2}-\psi_1(x)\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2}$$
$$=\frac{d}{dx}[\psi_2(x)\frac{d\psi_1(x)}{dx}-\psi_1(x)\frac{d\psi_2(x)}{dx}]$$

- 我们有 $\psi_2(x)\frac{d\psi_1(x)}{dx}-\psi_1(x)\frac{d\psi_2(x)}{dx}=$ 常数

- 根据 $x\to\pm\infty$ 时 $\psi_1(x)=\psi_2(x)=0$，有

$$\psi_2(x)\frac{d\psi_1(x)}{dx}-\psi_1(x)\frac{d\psi_2(x)}{dx}=0$$
$$\Rightarrow\quad\frac{1}{\psi_1(x)}\frac{d\psi_1(x)}{dx}=\frac{1}{\psi_2(x)}\frac{d\psi_2(x)}{dx}$$

- 因此，$\psi_1(x)=\lambda\psi_2(x)$，它们描述的是同一个态。

1.6 几个简单的一维问题

- 假设 $\psi_1(x)$ 和 $\psi_2(x)$ 是两个不同的本征函数，并且 $E_1 < E_2$
- $\psi_1(x)$ 和 $\psi_2(x)$ 是实函数，利用定态Schrödinger 方程，我们有

$$\frac{1}{\psi_1(x)}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2}+E_1=V(x)=\frac{1}{\psi_2(x)}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2}+E_2$$

$$\Rightarrow \quad \frac{d}{dx}[\psi_2(x)\frac{d\psi_1(x)}{dx}-\psi_1(x)\frac{d\psi_2(x)}{dx}]=\frac{2m}{\hbar^2}(E_2-E_1)\psi_1(x)\psi_2(x)$$

- 设 $x=a$ 和 $x=b$ 是 $\psi_1(x)$ 的两个连续节点，从 $x=a$ 到 $x=b$ 积分，有

$$[\psi_2(b)\frac{d\psi_1(b)}{dx}-\psi_1(b)\frac{d\psi_2(b)}{dx}]-[\psi_2(a)\frac{d\psi_1(a)}{dx}-\psi_1(a)\frac{d\psi_2(a)}{dx}]$$

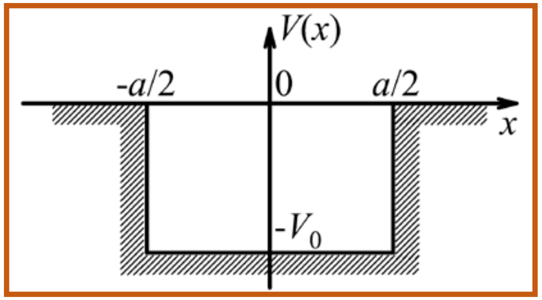
$$=\frac{2m}{\hbar^2}(E_2-E_1)\int_a^b\psi_1(x)\psi_2(x)dx$$

- 因为 $\psi_1(a)=\psi_1(b)=0$，所以

$$\psi_2(b)\frac{d\psi_1(b)}{dx}-\psi_2(a)\frac{d\psi_1(a)}{dx}=\frac{2m}{\hbar^2}(E_2-E_1)\int_a^b\psi_1(x)\psi_2(x)dx$$

- 在 $[a,b]$ 范围内，$\psi_1(x)$ 不变号，不妨设 $\psi_1(x)>0$，那么 $d\psi_1(a)/dx>0$，$d\psi_1(b)/dx<0$。如果在 $[a,b]$ 范围内 $\psi_2(x)$ 恒大（小）于零，那么等式右边恒大（小）于零，但是等式左边恒小（大）于零，产生矛盾。

1.6 几个简单的一维问题



散射态

- 在 $x < -a/2$ 的区域，定态Schrödinger方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \kappa^2\psi(x), \quad \kappa = \sqrt{2mE}/\hbar$$

  - 通解为 $\psi(x) = Ae^{i\kappa x} + Be^{-i\kappa x}$

- 在 $-a/2 \le x \le a/2$ 的区域，$V(x) = -V_0$，定态Schrödinger方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - V_0\psi(x) = E\psi(x) \Rightarrow \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2\psi(x), \quad k = \sqrt{2m(E+V_0)}/\hbar$$

  - 通解为 $\psi(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx}$

- 在 $x > a/2$ 区域，假定粒子流从左边入射进来，我们有

$$\psi(x) = Fe^{i\kappa x}$$

- $Ae^{i\kappa x}$ 代表入射波，$Be^{-i\kappa x}$ 代表反射波，$Fe^{i\kappa x}$ 代表透射波

1.6 几个简单的一维问题

- $-a/2$ 处 $\psi(x)$ 连续

$$Ae^{-i\kappa a/2} + Be^{i\kappa a/2} = Ce^{-ika/2} + De^{ika/2}$$

- $-a/2$ 处 $d\psi(x)/dx$ 连续

$$A\kappa e^{-i\kappa a/2} - B\kappa e^{i\kappa a/2} = Cke^{-ika/2} - Dke^{ika/2}$$

- $a/2$ 处 $\psi(x)$ 连续

$$Ce^{ika/2} + De^{-ika/2} = Fe^{i\kappa a/2}$$

- $a/2$ 处 $d\psi(x)/dx$ 连续

$$Cke^{ika/2} - Dke^{-ika/2} = F\kappa e^{i\kappa a/2}$$

- 解得

$$B = i\frac{\sin(ka)}{2\kappa k}(k^2 - \kappa^2)F$$

$$F = \frac{e^{-i\kappa a}A}{\cos(ka) - i\frac{\sin(ka)}{2\kappa k}(\kappa^2 + k^2)}$$

$$\psi(x) = Ae^{i\kappa x} + Be^{-i\kappa x}, \quad (x < -a/2)$$
$$\psi(x) = Ce^{ikx} + De^{-ikx}, \quad (-a/2 \le x \le a/2)$$
$$\psi(x) = Fe^{i\kappa x}, \quad (x > a/2)$$

- 透射系数 $T = |j_t/j_i|$

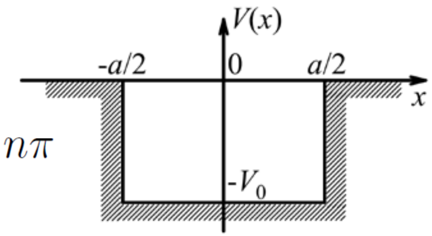
$$T = \frac{4\kappa^2k^2}{4\kappa^2k^2 + (\kappa^2 - k^2)^2\sin^2(ka)} = \frac{4E(E+V_0)}{4E(E+V_0) + V_0^2\sin^2(a\sqrt{2m(E+V_0)}/\hbar)}$$

- 反射系数 $R = |j_r/j_i|$

$$R = \frac{V_0^2\sin^2(a\sqrt{2m(E+V_0)}/\hbar)}{4E(E+V_0) + V_0^2\sin^2(a\sqrt{2m(E+V_0)}/\hbar)}$$

❖ 共振透射

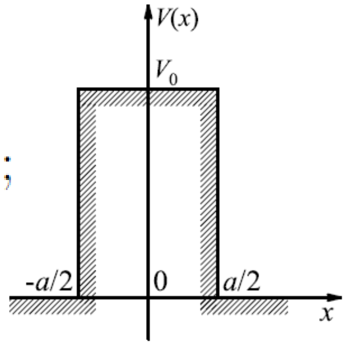
$$\frac{a}{\hbar}\sqrt{2m(E_n+V_0)} = n\pi$$



1.6 几个简单的一维问题

1.6.4 方势垒

$$V(x)=\begin{cases} V_0, & -a/2\le x\le a/2; \\ 0, & \text{其它情况}. \end{cases}$$



- 不存在束缚态
- 对于$E>V_0$的情况，和有限深方势井类似，只需要将V_0换成$-V_0$即可

- 对于$E<V_0$的情况

$$\psi(x)=\begin{cases} Ae^{ikx}+Be^{-ikx}, & x<-a/2; \\ Ce^{\kappa x}+De^{-\kappa x}, & -a/2\le x\le a/2; \\ Fe^{ikx}, & x>a/2. \end{cases}$$

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

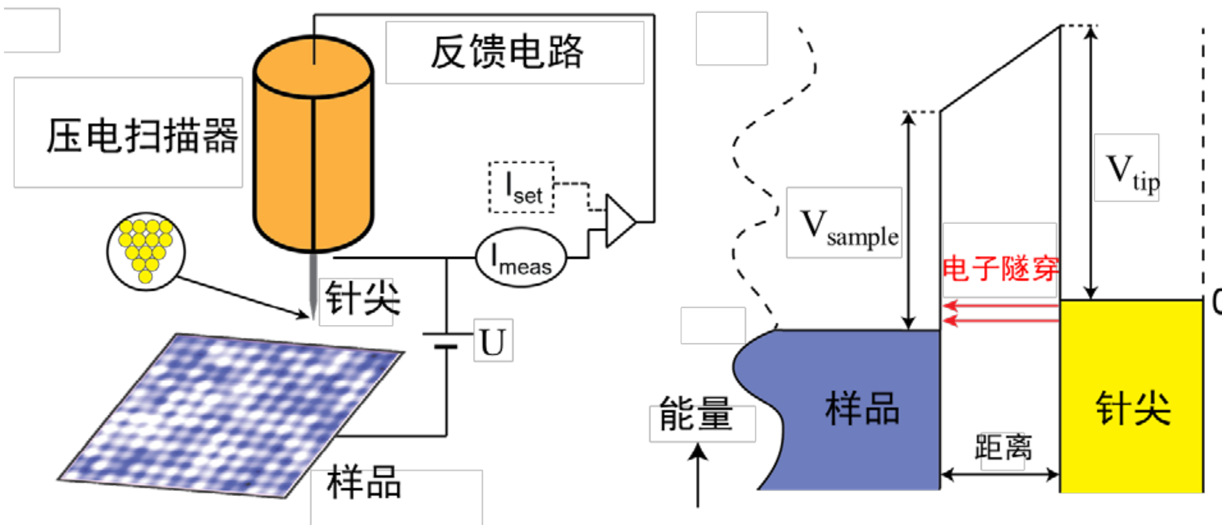
- 反射系数 $R=\dfrac{(k^2+\kappa^2)^2\sinh^2\kappa a}{(k^2+\kappa^2)^2\sinh^2\kappa a+4k^2\kappa^2}$

- 透射系数 $T=\dfrac{4k^2\kappa^2}{(k^2+\kappa^2)^2\sinh^2\kappa a+4k^2\kappa^2}$

- 即使粒子能量低于势垒高度，粒子仍然有一定概率穿透势垒。

1.6 几个简单的一维问题

扫描隧道显微镜



$$T = \frac{4k^2\kappa^2}{(k^2+\kappa^2)^2\sinh^2\kappa a + 4k^2\kappa^2}$$

$$T \sim 16\epsilon(1-\epsilon)e^{-2\kappa a}$$

$$\epsilon = E/V_0$$

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

❖ 恒电流模式：通过反馈电路控制隧穿电流不变，隧穿电流依赖针尖和样品之间的距离，针尖会随着样品表面的高低起伏而作相同的起伏运动，可以获得样品表面的三维立体信息。

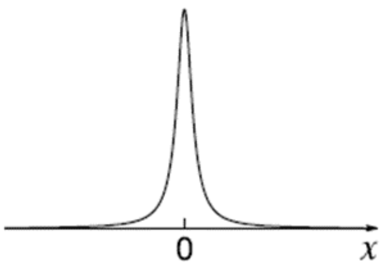
❖ 恒高度模式：保持针尖的绝对高度不变，不需要使用反馈系统，扫描速度快，适用于观察动态过程和测量动力学信息。

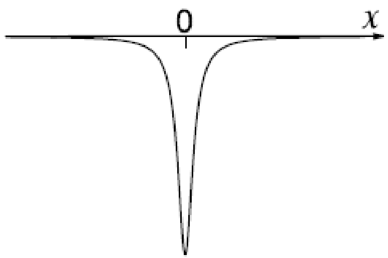
1.6 几个简单的一维问题

➡1.6.5 δ函数势

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

$\gamma > 0$ 表示势垒，$\gamma < 0$ 表示势井





- 定态Schrödinger方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \gamma\delta(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

- 由于$\delta(x)$在 $x = 0$处的奇点，波函数的二阶导数发散，因而一阶导数不连续。对定态Schrödinger方程两边做积分 $\lim\limits_{\eta\to 0^+}\int_{-\eta}^{+\eta} dx$ ，有

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

这就是波函数的一阶导数满足的边界条件。

1.6 几个简单的一维问题

δ势散射

- 粒子能量 $E>0$
- 在 $x\neq 0$区域，定态Schrödinger方程改写为

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)+k^2\psi(x)=0,\qquad k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

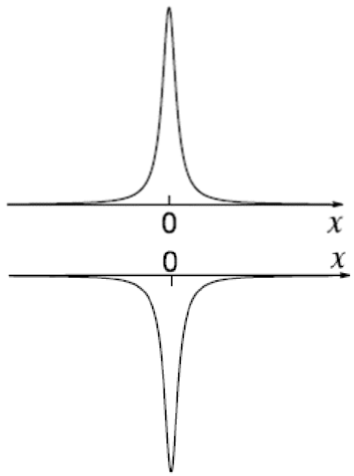
- 考虑粒子从左边入射

$$\psi(x)=\begin{cases}Ae^{ikx}+Be^{-ikx}, & x<0;\\ Ce^{ikx}, & x>0.\end{cases}$$

- 根据x=0处的边界条件

$$\begin{cases}A+B=C,\\ A-B=C-\frac{2m\gamma C}{i\hbar^2 k}.\end{cases}$$

- 可得 $\begin{cases}B=\frac{m\gamma}{i\hbar^2k-m\gamma}A,\\ C=\frac{i\hbar^2k}{i\hbar^2k-m\gamma}A.\end{cases}$



- 反射系数

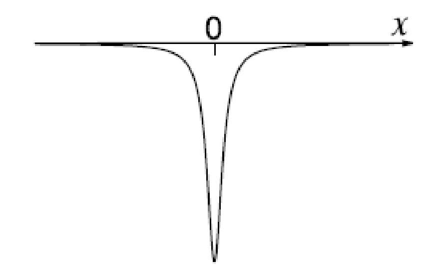
$$R=\frac{|j_r|}{|j_i|}=\frac{m\gamma^2}{2\hbar^2E+m\gamma^2}$$

- 透射系数

$$T=\frac{|j_t|}{|j_i|}=\frac{2\hbar^2E}{2\hbar^2E+m\gamma^2}$$

1.6 几个简单的一维问题

δ势井中的束缚态



- 在 $x \neq 0$ 区域，定态Schrödinger方程改写为

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) - \kappa^2\psi(x) = 0, \qquad \kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$$

- 通解为 $\psi(x) = Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x}$

- 束缚态解的形式为 $\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa x}, & x < 0; \\ Be^{-\kappa x}, & x > 0. \end{cases}$

- 根据x=0处的边界条件 $\begin{cases} A = B, \\ -\kappa B - \kappa A = -\frac{2m\gamma}{\hbar^2}A, \end{cases}$

- 可得 $\kappa = \frac{m\gamma}{\hbar^2}$ ，即 $E = -\frac{m\gamma^2}{2\hbar^2}$

- 利用归一化条件 $\int_{-\infty}^{\infty} dx|\psi(x)|^2 = \frac{A^2}{\kappa} = 1$，可得 $A = \sqrt{\kappa} = \frac{\sqrt{m\gamma}}{\hbar}$

❖ 只有一个束缚态，而且是偶宇称