第二章、一维势场中的粒子运动

$ 2.1 **一维谐振子**

除了氢原子之外， Bohr 的量子理论还可以解决一维谐振子运动。同一问题，后来被 Heisenberg 和 Schrödinger 分别用矩阵力学及波动力学重新求解。两种解法各自都有十分重要的应用，我们将逐一加以介绍。

在这一章中，我们先介绍 Schrödinger 的解法。首先，一维谐振子的势函数可以写作

$$V(x)=\frac{1}{2}Kx^2=\frac{1}{2}m\frac{K}{m}x^2=\frac{1}{2}m\omega_0^2x^2. \tag{1}$$

因此，相应的 Schrödinger 方程为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,\,t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,\,t)+\frac{1}{2}m\omega_0^2x^2\psi(x,\,t). \tag{2}$$

注意到 $V(x)$ 与时间无关。此时，我们可以取

$$\psi(x,\,t)=\varphi(x)e^{-i\omega t}. \tag{3}$$

将其代入方程后，我们得到

$$\hbar\omega\varphi(x)=E\varphi(x)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x)+\frac{1}{2}m\omega_0^2x^2\varphi(x). \tag{4}$$

这里， $E=\hbar\omega$ 称为这一微分方程的本征值。相应的量子力学问题称为定态问题。

由于当 $|x|\to\infty$ 时，$V(x)\to\infty$，所有可能的粒子态必皆为束缚态。因此，我们要求

$$\lim_{|x|\to\infty}\varphi(x)=0. \tag{5}$$

我们现在考虑 $\varphi(x)$ 的奇异点。当 $|x|\to\infty$ 时，方程退化为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x)+\frac{1}{2}m\omega_0^2x^2\varphi(x)\cong 0. \tag{6}$$

此方程的近似解为

$$\tilde{\varphi}(x)=\exp\left(\pm\frac{1}{2}\frac{m\omega_0}{\hbar}x^2\right). \tag{7}$$

实际上，我们有

$$\widetilde{\varphi}'(x) = \pm\frac{2}{2}\frac{m\omega_0}{\hbar}x\exp\left(\pm\frac{1}{2}\frac{m\omega_0}{\hbar}x^2\right). \tag{8}$$

再求导一次后得到

$$\begin{aligned}\widetilde{\varphi}''(x) &= \left(\frac{m\omega_0}{\hbar}\right)^2\exp\left(\pm\frac{1}{2}\frac{m\omega_0}{\hbar}x^2\right)x^2 \pm \frac{m\omega_0}{\hbar}\exp\left(\pm\frac{1}{2}\frac{m\omega_0}{\hbar}x^2\right)\\ &\cong \left(\frac{m\omega_0}{\hbar}\right)^2\exp\left(\pm\frac{1}{2}\frac{m\omega_0}{\hbar}x^2\right)x^2. \end{aligned}\tag{9}$$

代入方程后,我们看到两边近似相等。又由于我们需要的是满足条件 $\lim_{|x|\to\infty}\varphi(x) = 0$ 的解，我们取

$$\widetilde{\varphi}(x) = \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{m\omega_0}{\hbar}x^2\right). \tag{10}$$

现在，我们令

$$\varphi(x) = \widetilde{\varphi}(x)\chi(x) = \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{m\omega_0}{\hbar}x^2\right)\chi(x). \tag{11}$$

求一阶导数后，我们有

$$\varphi'(x) = -\frac{m\omega_0}{\hbar}x\exp\left(-\frac{1}{2}\frac{m\omega_0}{\hbar}x^2\right)\chi(x) + \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{m\omega_0}{\hbar}x^2\right)\chi'(x). \tag{12}$$

而二阶求导则给出

$$\begin{aligned}\varphi''(x) &= \left[\left(\frac{m\omega_0}{\hbar}\right)^2x^2 - \frac{m\omega_0}{\hbar}\right]\exp\left(-\frac{1}{2}\frac{m\omega_0}{\hbar}x^2\right)\chi(x)\\ &- 2\frac{m\omega_0}{\hbar}x\exp\left(-\frac{1}{2}\frac{m\omega_0}{\hbar}x^2\right)\chi'(x) + \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{m\omega_0}{\hbar}x^2\right)\chi''(x). \end{aligned}\tag{13}$$

将之代入方程后，我们得到

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{m\omega_0}{\hbar}\chi(x) - \frac{\hbar^2}{2m}\chi''(x) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{2m\omega_0}{\hbar}x\chi'(x) = E\chi(x). \tag{14}$$

整理后有

$$\frac{\hbar^2}{2m}\chi''(x) - \hbar\omega_0 x\chi'(x) + \left(E - \frac{\hbar\omega_0}{2}\right)\chi(x) = 0. \tag{15}$$

现在，我们要求此方程形为

$$\chi(x) = \sum_{n=0}^{\infty}C_n x^n \tag{16}$$

的级数解。把它代入方程后，我们得到各系数之间的递推关系。例如，这个级数的前几个系数满足关系式

$$\frac{\hbar^2}{2m}2C_2 + \left(E - \frac{\hbar\omega_0}{2}\right)C_0 = 0, \tag{17}$$

以及

$$\frac{\hbar^2}{2m}6C_3 - \hbar\omega_0 C_1 + \left(E - \frac{\hbar\omega_0}{2}\right)C_1 = 0. \tag{18}$$

显然，若我们给定 C_0 和 C_1 确定的值，比如说 $C_0 = 1$ 和 $C_1 = 0$ ，我们就可由这些递推关系求出其它的系数，进而求得函数 $\chi(x)$ 。但是，不难证明，这样得到的函数，在 $|x| \to \infty$ 时，其渐进形式为

$$\chi(x) \sim e^{\frac{m\omega_0}{\hbar}x^2}. \tag{19}$$

因此，当 $|x| \to \infty$ 时，

$$\varphi(x) = \tilde{\varphi}(x)\chi(x) \sim e^{\frac{m\omega_0}{2\hbar}x^2} \to \infty. \tag{20}$$

按照 Born 对于波函数的几率解释，这是不允许的。因此，我们必须将 $\chi(x)$ 截断成多项式。例如，为了让 C_2 为零，我们可以取

$$E_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2}. \tag{21}$$

并且，由此我们得到

$$C_4 = C_6 = \cdots = 0. \tag{22}$$

同时，由给定条件 $C_1 = 0$ ，我们得到

$$C_3 = C_5 = \cdots = 0. \tag{23}$$

这样，我们就得到了一维谐振子的基态能量和未归一的波函数。同理，若我们取的系数初始值为 $C_0 = 0$ 和 $C_1 = 1$ ，并且令

$$E = E_1 = \left(1 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0, \tag{24}$$

则可以使得

$$C_3 = C_5 = \cdots = 0, \quad C_4 = C_6 = \cdots = 0 \tag{25}$$

同时成立。不难证明，当 E 取值为

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_0 \tag{26}$$

时， $\chi(x)$ 的级数解会在某一阶截断，成为多项式。这样，我们就得到了一维谐振子的全部本征值。而相应的本征函数 (已归一) 则为

$$\varphi_n(x) = A_n \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{m\omega_0}{\hbar}x^2\right) H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}}x\right), \tag{27}$$

这里，归一化系数为

$$A_n = \left(\frac{\sqrt{m\omega_0/\hbar}}{\sqrt{\pi}2^n n!}\right)^{1/2}. \tag{28}$$

这些本征函数满足下面的正交归一条件

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_m^*(x)\varphi_n(x)\, dx = \delta_{mn}. \tag{29}$$

(公式中出现的 $H_n(y)$ 称为厄密多项式。有关厄密多项式的详细介绍，可以在教科书 513 页上的附录三中找到) 。

令 $\alpha = \sqrt{m\omega_0/\hbar}$，则一维谐振子的前三个本征函数为

$$\varphi_0(x) = \frac{\sqrt{\alpha}}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}, \quad \varphi_1(x) = \frac{\sqrt{2\alpha}}{\pi^{1/4}} \alpha x e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}},$$
$$\varphi_2(x) = \frac{\sqrt{\alpha/2}}{\pi^{1/4}} \left(2\alpha^2 x^2 - 1\right) e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}. \tag{30}$$

这些函数的图形可以在教科书 84 页上看到。

这里，有两个重要的物理现象需要强调一下。首先，当 $n = 0$ 时，谐振子处于基态。但是，其能量 $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0 \neq 0$ 。这与经典力学的结论是完全相反的。我们知道，在经典力学中，谐振子的能量最低状态为静止态，即具有坐标 $x = 0$ 和 $p_x = 0$ 的态。但在量子力学中，由于测不准关系

$$\overline{(\Delta x)^2} \cdot \overline{(\Delta p_x)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4} \tag{31}$$

的缘故，x 和 p_x 不可能同时为零，尽管它们的值都很接近于零。因此，我们可以认为

$$\overline{(\Delta x)^2} \sim x^2, \quad \overline{(\Delta p_x)^2} \sim p_x^2, \tag{32}$$

并且

$$x^2 \cdot p_x^2 \sim \overline{(\Delta x)^2} \cdot \overline{(\Delta p_x)^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}. \tag{33}$$

由此解得

$$x^2 \sim \frac{\hbar^2}{4} \frac{1}{p_x^2}. \tag{34}$$

将这一结果代入能量表达式，我们得到

$$E = \frac{1}{2m} p_x^2 + \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2 \cong \frac{1}{2m} p_x^2 + \frac{1}{2} m \omega_0^2 \frac{\hbar^2}{4 p_x^2}. \tag{35}$$

我们要求此式的极小值 (基态能量)。首先，将 E 对于 p_x^2 求导并令之为零后，我们有

$$\frac{dE}{dp_x^2} = \frac{1}{2m} - \frac{1}{2} m \omega_0^2 \frac{\hbar^2}{4 p_x^4} = 0. \tag{36}$$

由此解得

$$\widetilde{p}_x^2 = \frac{m \hbar \omega_0}{2}. \tag{37}$$

将其代入能量的表达式后，我们得到谐振子量子力学基态能量的近似值为

$$E_0 = \frac{1}{4} \hbar \omega_0 + \frac{1}{4} \hbar \omega_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega_0. \tag{38}$$

因此，不为零的基态能量 E_0 是由于测不准原理所引起的量子涨落导致的，称为一维谐振子的零点能。一般而言，它并不会引起任何可观测的效应。但在某些特殊情况下，它也会带来一些间接的效应，例如 Casimir 效应。

另外一点需要指出的是，不难看到

$$\alpha^{-1} = \sqrt{\frac{\hbar}{m \omega_0}} \tag{39}$$

是一个具有长度的量纲，称为谐振子的特征长度。为了看清它所蕴涵的物理意义，我们将它重新写作

$$\alpha^{-1} = \sqrt{\frac{\frac{1}{2} \hbar \omega_0}{\frac{1}{2} m \omega_0^2}} = \sqrt{\frac{E_0}{\frac{1}{2} m \omega_0^2}}. \tag{40}$$

它代表能量为 E_0 的谐振子可以运动的经典区域的长度 (的一半) 。按照经典力学，粒子是不能进入 $|x| > \alpha^{-1}$ 的区域的。但从教科书 84 页上的图 3.21 中可以看到，粒子进入经典禁区的几率并不为零。这一现象称为量子隧道穿透效应，是由于测不准原理引起的。今后我们会看到，这一效应会带来许多有趣的物理结果。

$ 2.2 **一维定态体系的一些基本性质**

现在，我们可以讨论一维定态体系本征波函数的一些基本性质。

定理 1: 设势能函数 $V(x)$ 为一实函数。若 $\psi(x)$ 是本征方程

$$E\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) \tag{41}$$

的一个解，则 $\psi^*(x)$ 也是一个解，对应的本征值也是 E 。

证明: 将上面的方程取复共轭后，我们得到

$$E\psi^*(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi^*(x) + V(x)\psi^*(x). \tag{42}$$

显然，定理是成立的。

这个定理的一个直接推论是,若方程的本征值 E 是非简并的,则相应的本征函数可以取做实函数。以一维谐振子为例。它的每一个本征值 $E_n = (n+1/2)\hbar\omega_0$ 都是非简并的，而相应的本征函数 $\varphi_n(x)$ 也都是实函数。

定理 2: 设势能函数 $V(x)$ 为一实函数。则对应于任何方程的本征值 E ，总可以找到方程的一组实函数解。凡是属于本征值 E 的任何一个解，都可以表示成这组实函数解的线性叠加。

证明: 若 $\psi(x)$ 是方程的一个实解，则可将它归入到实解的集合中去。若它是复解，则按定理 1 ， $\psi^*(x)$ 也是一个解。现在我们定义

$$\varphi(x) = \psi(x) + \psi^*(x), \quad \chi(x) = -i(\psi(x) - \psi^*(x)), \tag{43}$$

则根据线性叠加原理，它们也是方程对应于本征值 E 的线性无关解，并且是实解。

定理 3: 设势能函数 $V(x)$ 具有空间反射对称性, 即满足条件 $V(-x)=V(x)$ 。若 $\psi(x)$ 是方程的一个解，则 $\psi(-x)$ 亦是该方程的一个解。

证明: 令 $x'=-x$ ，则我们有

$$\begin{aligned}
&-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(-x)+V(x)\psi(-x)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx'^2}\psi(x')+V(-x')\psi(x') \\
=\ &-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx'^2}\psi(x')+V(x')\psi(x')=E\psi(x')=E\psi(-x). \qquad (44)
\end{aligned}$$

因此，定理得证。

特别是当 E 为非简并时，我们有

$$\hat{P}\psi(x)=\psi(-x)=C\psi(x). \qquad (45)$$

两次反射后，我们得到

$$\hat{P}^2\psi(x)=\hat{P}(C\psi(x))=C^2\psi(x). \qquad (46)$$

因此，我们有

$$C^2=1, \qquad (47)$$

或是 $C=\pm1$ 。

在量子力学中， $\hat{P}$ 称为宇称算符。若 $\hat{P}\psi(x)=\psi(-x)$ ，则称 $\psi(x)$ 具有偶宇称。同理，若 $\hat{P}\psi(x)=-\psi(x)$ 成立，则称 $\psi(x)$ 具有奇宇称。还是以一维谐振子为例。由于它的每一条能级都是非简并的，因此相应的本征函数都具有确定的宇称。事实上，我们有

$$\hat{P}\varphi_n(x)=\varphi(-x)=(-1)^n\varphi_n(x). \qquad (48)$$

从教科书 84 页的图 3.20 中，我们可以看到，波函数 $\varphi_0(x)$ 和 $\varphi_2(x)$ 具有偶宇称，而 $\varphi_1(x)$ 具有奇宇称。

定理 4: 设势能函数 $V(x)$ 具有空间反射对称性。则对应于任何一个本征值 E , 我们总可以找到方程的一组解，它们的每一个都具有确定的宇称。而且，任何对应于本征值 E 的解 $\psi(x)$ 都可以按照它们来展开。

证明: 这一定理的证明方法同定理 2 的证明相类似。若 $\psi(x)$ 和 $\psi(-x)$ 是线性无关的，则我们可以定义新的解

$$\phi(x) \equiv \psi(x) + \psi(-x), \quad \chi(x) \equiv \psi(x) - \psi(-x). \tag{49}$$

显然，它们也是线性无关的。并且， $\phi(x)$ 具有偶宇称，而 $\chi(x)$ 具有奇宇称。

定理 5: 对于一维空间的定态 Schrödinger 方程，若 $\psi_1(x)$ 和 $\psi_2(x)$ 是对应于同一本征值 E 的两个解，则我们有

$$\psi_1(x)\psi_2'(x) - \psi_1'(x)\psi_2(x) = 常数. \tag{50}$$

证明: 我们从方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_1(x) + V(x)\psi_1(x) = E\psi_1(x) \tag{51}$$

和

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_2(x) + V(x)\psi_2(x) = E\psi_2(x) \tag{52}$$

出发。将方程 (51) 乘以 $\psi_2(x)$ ，再减去方程 (52) 乘以 $\psi_1(x)$ ，我们得到

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\psi_2(x)\frac{d^2}{dx^2}\psi_1(x) - \psi_1(x)\frac{d^2}{dx^2}\psi_1(x)\right) = 0. \tag{53}$$

从此方程我们得到

$$\frac{d}{dx}\left(\psi_1(x)\psi_2'(x) - \psi_2(x)\psi_1'(x)\right) = 0. \tag{54}$$

因此，我们有

$$\psi_1(x)\psi_2'(x) - \psi_1'(x)\psi_2(x) = 常数. \tag{55}$$

定理得证。

定理 6: 假设粒子在一个一维空间中规则 (regular ，既没有奇异点) 的势函数 $V(x)$ 中运动。则其束缚态必为非简并的。

证明: 我们要求势函数 $V(x)$ 为规则的，是要保证 Schrödinger 方程的任何一个解 $\psi(x)$ 及其一阶导数 $\psi'(x)$ 在空间的每一点都连续。现在，假设 E_n 是粒子

的一个束缚态的本征值，并且简并。则我们可以找到至少两个本征函数 $\psi_1(x)$ 和 $\psi_2(x)$ 与它对应。另一方面，根据定理 5 ，我们有

$$\psi_1(x)\psi_2'(x) - \psi_1'(x)\psi_2(x) = 常数. \tag{56}$$

但是，对于束缚态而言，我们有渐近关系

$$\lim_{|x|\to\infty} \psi_1(x) = \lim_{|x|\to\infty} \psi_2(x) = 0. \tag{57}$$

因此，公式 (56) 中的常数实际上为零。这就使得我们可以将上式改写成

$$\frac{\psi_1'(x)}{\psi_1(x)} = \frac{\psi_2'(x)}{\psi_2(x)}. \tag{58}$$

它在不包含波函数零点的区间上成立。积分后，我们有

$$\ln\psi_1(x) = \ln\psi_2(x) + C, \tag{59}$$

或是

$$\psi_1(x) = e^C\psi_2(x) = A\psi_2(x), \tag{60}$$

即 $\psi_1(x)$ 与 $\psi_2(x)$ 是线性相关的。这与我们上面的假设相违，因此定理得证。

以一维谐振子为例。它的每一个本征态都是束缚态。因此，根据定理 6 ，都应该是非简并的。需要强调一点的是，这一结论在高维空间是不成立的。例如，我们将会看到，三维谐振子的束缚态除了基态之外，都是简并的。

\$ 2.3 一维方势阱

一般而言，一个给定的量子力学的势能函数可能比较复杂。但在实际工作中，人们发现往往可以利用一个方势阱来代替它。由此得到的结果在定性上与真实的情况出入并不大。

\$ 2.3.1 无穷深一维方势阱

我们先考虑一个理想情况。此时，体系的势能函数为

$$V(x) = \begin{cases} +\infty, & x \leq 0; \\ 0, & 0 \leq x \leq a; \\ +\infty, & x \geq a. \end{cases} \tag{61}$$

此时，我们有定态的 Schrödinger 方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = E\psi(x) \tag{62}$$

在区间 $0 \le x \le a$ 内成立。解此方程，我们得到

$$\psi_1(x) = \exp\left(i\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\right), \quad \psi_2(x) = \exp\left(-i\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\right). \tag{63}$$

同时，我们还需要将边条件

$$\psi(x)|_{x=0} = \psi(x)|_{x=a} = 0 \tag{64}$$

考虑进来。为此，我们取 $\psi_1(x)$ 和 $\psi_2(x)$ 的一个线性组合

$$\psi(x) = C_1\psi_1(x) + C_2\psi_2(x). \tag{65}$$

由条件 $\psi(0) = 0$ ，我们得到

$$C_1 + C_2 = 0, \tag{66}$$

或是 $C_1 = -C_2$ 。因此，我们有

$$\psi(x) = C_1(\psi_1(x) - \psi_2(x)) = 2iC_1 \sin\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\, x\right) = D\sin\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\, x\right). \tag{67}$$

又从条件 $\psi(a) = 0$ 出发，我们得到

$$\psi(a) = D\sin\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} a\right) = 0. \tag{68}$$

这就要求

$$\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} a = n\pi, \quad n = 1,\ 2,\ 3, \cdots \tag{69}$$

成立。解此方程，我们得到

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}, \tag{70}$$

而相应的波函数为

$$\psi_n(x) = D_n \sin\frac{n\pi}{a}x. \tag{71}$$

归一化常数 D_n 由方程

$$1=\int_0^a dx\psi_n^2(x)=D_n^2\int_0^a dx\sin^2\frac{n\pi}{a}x=\frac{1}{2}D_n^2 a \tag{72}$$

定出。因此，我们最后有

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x. \tag{73}$$

可以很容易地验证，上述定理的结论对于这一波函数都是成立的。

$ 2.3.2 **有限深对称方势阱**

现在，我们再考虑如下的方势阱。

$$V(x)=\begin{cases}0, & -\frac{a}{2}\leq x\leq\frac{a}{2};\\ V_0, & |x|\geq\frac{a}{2}.\end{cases} \tag{74}$$

这样的势阱称为有限深对称方势阱。此时，体系的 Schrödinger 方程可以写作

$$\begin{aligned}&-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)=E\psi(x),\ \text{当}\ -\frac{a}{2}\leq x\leq\frac{a}{2}\ \text{时};\\ &-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)+V_0\psi(x)=E\psi(x),\ \text{当}\ |x|\geq\frac{a}{2}\ \text{时}.\end{aligned} \tag{75}$$

从第一个方程，我们得到，在区域 $-\frac{a}{2}\leq x\leq\frac{a}{2}$ 中，

$$\psi(x)=C_1e^{ikx}+C_2e^{-ikx}, \tag{76}$$

这里 $k=\sqrt{2mE/\hbar^2}$ 。而在区域 $|x|\geq\frac{a}{2}$ 内，我们有

$$\psi(x)=\begin{cases}Ae^{-\beta x}, & x\geq\frac{a}{2};\\ Be^{\beta x}, & x\leq-\frac{a}{2}.\end{cases} \tag{77}$$

这里， $\beta=\sqrt{2m(V_0-E)/\hbar^2}$ 。

我们现在要利用波函数 $\psi(x)$ 及其导数 $\psi'(x)$ 在 $x=\frac{a}{2}$ 和 $x=-\frac{a}{2}$ 处连续的条件来决定系数 A, B, C_1 和 C_2 。首先，我们有

$$Ae^{-\beta\frac{a}{2}}=C_1e^{ik\frac{a}{2}}+C_2e^{-ik\frac{a}{2}}, \tag{78}$$

以及

$$-\beta A e^{-\beta\frac{a}{2}} = ikC_1 e^{ik\frac{a}{2}} - ikC_2 e^{-ik\frac{a}{2}}. \tag{79}$$

两式相除后我们得到

$$-\beta = ik\frac{C_1 e^{ik\frac{a}{2}} - C_2 e^{-ik\frac{a}{2}}}{C_1 e^{ik\frac{a}{2}} + C_2 e^{-ik\frac{a}{2}}}. \tag{80}$$

同理，在 $x = -\frac{a}{2}$ 处，我们有

$$\beta = ik\frac{C_1 e^{-ik\frac{a}{2}} - C_2 e^{ik\frac{a}{2}}}{C_1 e^{-ik\frac{a}{2}} + C_2 e^{ik\frac{a}{2}}}. \tag{81}$$

比较两式后，我们得到

$$C_1 = \pm C_2. \tag{82}$$

当 $C_1 = C_2$ 时，我们有

$$\beta = -ik\frac{e^{ik\frac{a}{2}} - e^{-ik\frac{a}{2}}}{e^{ik\frac{a}{2}} + e^{-ik\frac{a}{2}}} = k\tan\frac{ka}{2}. \tag{83}$$

令 $\frac{ka}{2} = \xi$ 和 $\frac{\beta a}{2} = \eta$，则上式可被写作

$$\eta = \xi\ \tan\xi. \tag{84}$$

将此方程与方程

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{a^2}{4}\left(k^2 + \beta^2\right) = \frac{a^2}{4}\left(\frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\right) = \frac{mV_0 a^2}{2\hbar^2} \tag{85}$$

联立后，我们可用数值求解的办法来求出 ξ 和 η 的值，从而解得本征值 E。(详情见教科书 70 页上的图 3.5)。此时，在区域 $-\frac{a}{2} \le x \le \frac{a}{2}$ 中，波函数为

$$\psi(x) = 2C_1\cos kx = D\cos kx. \tag{86}$$

这是一个具有偶宇称的波函数。因此，我们很自然地要求 $A = B$，以使得波函数在全部一维空间上是一个偶函数。最后，利用归一化条件

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |\psi(x)|^2 = 1 \tag{87}$$

和边条件

$$D\cos\frac{ka}{2}=Ae^{-\beta\frac{a}{2}}, \tag{88}$$

我们可以唯一地定出系数 A 和 D 来。

同理，当 $C_1=-C_2$ 时，我们可以由方程

$$-k\,\mathrm{ctg}\frac{ka}{2}=\beta, \tag{89}$$

或是

$$-\xi\,\mathrm{ctg}\xi=\eta \tag{90}$$

以及方程

$$\xi^2+\eta^2=\frac{mV_0a^2}{2\hbar^2} \tag{91}$$

来定出相应的本征值和本征函数。此时我们有

$$\psi(x)=D\sin kx \tag{92}$$

在区间 $-\frac{a}{2}\le x\le\frac{a}{2}$ 内成立。这是一个奇宇称的本征函数。因此，我们要求 $A=-B$ 。

对于一个方势阱，一个非常重要的结论是，无论 V_0 的数值多么小，都会存在一个束缚态，其宇称是偶的。这一结论在二维或三维空间中并不成立。

另外值得强调一下的是，对于处于束缚态的粒子而言，区域 $|x|\ge\frac{a}{2}$ 在物理上是经典禁绝区，即在经典力学中，粒子是不可能出现在这一区域中的。但在量子力学中，我们发现在这一区域中，波函数为

$$\psi(x)\sim e^{\pm\beta x},\quad \beta=\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}. \tag{93}$$

因此，粒子在这一区域中某一处 x_0 出现的几率

$$\rho(x_0)dx=|\psi(x_0)|^2\,dx\sim e^{\pm2\beta x_0}\,dx \tag{94}$$

并不为零，尽管它随 $|x|$ 的增大而呈指数衰减。这一现象称为隧道穿透，会带来许多有趣的物理结果。

$ 2.4 方势垒的反射与穿透

现在，我们考虑另外一类一维问题。设有一个如教科书上 74 页上图 3.11 所示的外势。若有一个粒子从左向右入射。显然，它可能被反射回去，也可能透射到区域的右边。我们想要计算一下这两种物理过程发生的几率。

在区域的的左边 $(x<0)$，粒子的运动满足定态 Schrödinger 方程

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x)=0. \tag{95}$$

显然，这一方程在区域 $x>a$ 中也成立。它的一般解为

$$\begin{aligned}\psi(x) &= C_1\exp(ikx)+C_2\exp(-ikx)\\ &= C_1\exp\left(i\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\,x\right)+C_2\exp\left(-i\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\,x\right).\end{aligned} \tag{96}$$

若我们规定 e^{ikx} 为从左向右传播的行波，则 e^{-ikx} 意味着从右向左传播的行波。根据现在的具体问题，我们假设

$$\psi(x)=\begin{cases} e^{ikx}+Re^{-ikx} & x<0,\\ Se^{ikx} & x>a\end{cases} \tag{97}$$

上面，仅仅是为了方便，我们将入射波的振幅取作 1 。按照几率流密度的定义，入射流密度应为

$$j_{\rm in}=\frac{\hbar}{2mi}\left(e^{-ikx}\frac{d}{dx}e^{ikx}-e^{ikx}\frac{d}{dx}e^{-ikx}\right)=\frac{\hbar}{2mi}2ik=\frac{\hbar k}{m}=\frac{p}{m}=v_{\rm in}. \tag{98}$$

相应地，反射流和透射流密度分别为

$$j_{\rm r}=|R|^2v_{\rm in},\quad j_{\rm t}=|S|^2v_{\rm in}. \tag{99}$$

由此，我们分别定义反射系数 $\mathcal{R}$ 和透射系数 $\mathcal{T}$ 为

$$\mathcal{R}=j_{\rm r}/j_{\rm in}=|R|^2,\quad \mathcal{T}=j_{\rm t}/j_{\rm in}=|S|^2. \tag{100}$$

下面，我们来计算这些系数。

在势垒内部，粒子的运动满足 Schrödinger 方程

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) - \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\psi(x) = 0, \quad 0 < x < a. \tag{101}$$

这里，有两种情况需要分别考虑。

(1) $0 < E < V_0$ 。此时，上面方程的通解为

$$\psi(x) = Ae^{\beta x} + Be^{-\beta x}, \quad \beta = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}. \tag{102}$$

我们需要通过波函数 $\psi(x)$ 及其导数 $\psi'(x)$ 在 $x = 0$ 处和 $x = a$ 处的连续性来定出这些系数。先看在 $x = 0$ 处。我们有

$$\begin{aligned} &e^{ik0} + Re^{-ik0} = 1 + R = Ae^{\beta 0} + Be^{-\beta 0} = A + B, \\ &ik\left(e^{ik0} - Re^{-ik0}\right) = ik(1 - R) = \beta\left(Ae^{\beta 0} - Be^{-\beta 0}\right) = \beta(A - B). \end{aligned} \tag{103}$$

由此，我们解出

$$A = \frac{1}{2}\left[\left(1 + \frac{ik}{\beta}\right) + R\left(1 - \frac{ik}{\beta}\right)\right], \quad B = \frac{1}{2}\left[\left(1 - \frac{ik}{\beta}\right) + R\left(1 + \frac{ik}{\beta}\right)\right]. \tag{104}$$

类似地，在 $x = a$ 处，我们有

$$Ae^{\beta a} + Be^{-\beta a} = Se^{ika}, \quad \beta\left(Ae^{\beta a} - Be^{-\beta a}\right) = ikSe^{ika}. \tag{105}$$

由此，我们解出

$$A = \frac{S}{2}\left[1 + \frac{ik}{\beta}\right]e^{ika - \beta a}, \quad B = \frac{S}{2}\left[1 - \frac{ik}{\beta}\right]e^{ika + \beta a}. \tag{106}$$

消去系数 A 和 B 后，我们得到 R 和 S 所满足的方程

$$\begin{aligned} \left(1 + \frac{ik}{\beta}\right) + R\left(1 - \frac{ik}{\beta}\right) &= S\left(1 + \frac{ik}{\beta}\right)e^{ika - \beta a}, \\ \left(1 - \frac{ik}{\beta}\right) + R\left(1 + \frac{ik}{\beta}\right) &= S\left(1 - \frac{ik}{\beta}\right)e^{ika + \beta a}. \end{aligned} \tag{107}$$

消去 R 后，我们进一步得到

$$\left(1 + \frac{ik}{\beta}\right)^2 - \left(1 - \frac{ik}{\beta}\right)^2 = Se^{ika}\left[\left(1 + \frac{ik}{\beta}\right)^2 e^{-\beta a} - \left(1 - \frac{ik}{\beta}\right)^2 e^{\beta a}\right]. \tag{108}$$

由此我们解出

$$
\begin{aligned}
Se^{ika} &= \frac{4ik/\beta}{[-2+2(k/\beta)^2]\,\mathrm{sh}\beta a+4i(k/\beta)\mathrm{ch}\beta a} \\
&= \frac{-2ik/\beta}{[1-(k/\beta)^2]\,\mathrm{sh}\beta a-2i(k/\beta)\mathrm{ch}\beta a}.
\end{aligned} \tag{109}
$$

因此，透射系数为

$$
\begin{aligned}
\mathcal{T} &= |S|^2 = \frac{4k^2\beta^2}{\left(\beta^2-k^2\right)^2\mathrm{sh}^2\beta a+4k^2\beta^2\mathrm{ch}^2\beta a} \\
&= \frac{4k^2\beta^2}{\left(\beta^2-k^2\right)^2\mathrm{sh}^2\beta a+4k^2\beta^2+4k^2\beta^2\mathrm{sh}^2\beta a} \\
&= \frac{4k^2\beta^2}{\left(\beta^2+k^2\right)^2\mathrm{sh}^2\beta a+4k^2\beta^2} = \frac{1}{1+\frac{\left(\beta^2+k^2\right)^2}{4k^2\beta^2}\mathrm{sh}^2\beta a}.
\end{aligned} \tag{110}
$$

按照定义，我们有

$$
k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad \beta^2 = \frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}. \tag{111}
$$

因此，我们进一步有

$$
\frac{\left(k^2+\beta^2\right)^2}{4k^2\beta^2} = \frac{4m^2V_0^2/\hbar^4}{16m^2E(V_0-E)/\hbar^4} = \frac{V_0^2}{4E(V_0-E)} = \frac{1}{4\frac{E}{V_0}\left(1-\frac{E}{V_0}\right)}. \tag{112}
$$

代入透射系数的表达式后，我们最后得到

$$
\mathcal{T} = |S|^2 = \left[1+\frac{\mathrm{sh}^2\beta a}{4\frac{E}{V_0}\left(1-\frac{E}{V_0}\right)}\right]^{-1}. \tag{113}
$$

同理，我们可以得到反射系数的表达式为

$$
\mathcal{R} = |R|^2 = \frac{\left(k^2+\beta^2\right)^2\mathrm{sh}^2\beta a}{\left(k^2+\beta^2\right)^2\mathrm{sh}^2\beta a+4k^2\beta^2}. \tag{114}
$$

不难验证，关系式

$$
\mathcal{R}+\mathcal{T} = |R|^2+|S|^2 = 1 \tag{115}
$$

成立。换句话说，粒子的几率流是守恒的。除此之外，我们也看到，在量子力学中，即使粒子的能量 $E < V_0$，透射系数 $\mathcal{T}$ 也不为零。这是由于隧道穿透效应引起的。

当 $\beta a \gg 1$，也就是说 $\sqrt{2m(V_0-E)a^2/\hbar^2} \gg 1$ 时，我们近似地有

$$\mathrm{sh}\beta a = \frac{e^{\beta a}-e^{-\beta a}}{2} \cong \frac{1}{2}e^{\beta a}. \tag{116}$$

代入 $\mathcal{T}$ 的表达式后，我们有

$$\begin{aligned}
\mathcal{T} &\cong \left[1+\frac{1}{4\frac{E}{V_0}\left(1-\frac{E}{V_0}\right)}\frac{1}{4}e^{2\beta a}\right]^{-1} \\
&= \left[\frac{1}{4\frac{E}{V_0}\left(1-\frac{E}{V_0}\right)}\frac{1}{4}e^{2\beta a}\right]^{-1} \\
&= \frac{16E(V_0-E)}{V_0^2}e^{-2\beta a} \\
&= \frac{16E(V_0-E)}{V_0^2}\exp\left[-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0-E)}\right].
\end{aligned} \tag{117}$$

可以看到，透射系数 $\mathcal{T}$ 对于粒子的质量 m, 势垒宽度 a 和 V_0-E 的数值非常敏感。这一公式在原子核物理和介观物理中有较大的应用。

(2) 现在，我们考虑 $E>V_0$ 的情况。此时，我们仅需将前面运算中的 β 改写作 $i\beta'$ 即可。这里

$$\beta' = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}. \tag{118}$$

将恒等式

$$\mathrm{sh}(i\beta' a) = i\sin\beta' a \tag{119}$$

以及 $\beta = i\beta'$ 代入公式 (110) 后，我们立刻可得透射系数

$$\begin{aligned}
\mathcal{T} &= \frac{4k^2\beta'^2}{(k^2-\beta'^2)^2\sin^2\beta' a+4k^2\beta'^2} \\
&= \left[1+\frac{1}{4}\left(\frac{k}{\beta'}-\frac{\beta'}{k}\right)^2\sin^2\beta' a\right]^{-1}.
\end{aligned} \tag{120}$$

$ 2.5 **方势阱的反射，透射与共振**

我们经常遇到的另外一种反射问题是所谓方势阱的反射。此时，势函数 V_0 被 $-V_0$ 所代替。因此，我们有

$$\beta' = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}} \geq k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \tag{121}$$

代入透射系数的表达式 (120) 后，我们有

$$\begin{aligned}\mathcal{T} &= \left[1+\frac{1}{4}\left(\frac{k}{\beta'}-\frac{\beta'}{k}\right)^2\sin^2\beta' a\right]^{-1} \\ &= \left[1+\frac{\sin^2\beta' a}{4\frac{E}{V_0}\left(1+\frac{E}{V_0}\right)}\right]^{-1}.\end{aligned} \tag{122}$$

当 $V_0 \to 0$ 时，我们有 $\mathcal{T} \to 1$ 。但当 $V_0 \neq 0$ 时， $\mathcal{T} < 1$ 。这是一种量子力学波函数的干涉效应，不是经典力学能够解释的。

一般而言，在 $E \ll V_0$ 时，透射系数 $\mathcal{T}$ 是很小的。然而，当

$$\beta' a = n\pi,\ \ n = 1,\, 2,\, 3, \cdots \tag{123}$$

时，我们有 $\sin\beta' a = 0$ 。因此， $\mathcal{T} = 1$ 。这种现象称为共振隧穿。其物理意义是，入射粒子在进入势阱后，碰到两侧阱壁时将发生反射与透射。若能量合适，使它在阱内的波长 λ' 满足关系

$$n\lambda' = 2a, \tag{124}$$

则经过各次反射后透射出去的波的相位都相同，彼此相干叠加，从而使得透射波的波幅大增，形成共振透射。

按照定义，我们可以求出发生共振透射时，粒子的能量为

$$E = E_n = -V_0 + \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2},\ \ n = 1,\, 2,\, 3, \cdots. \tag{125}$$

可以看出，除了常数项 $-V_0$ 之外，上式与在无限深方势阱中运动的粒子的能级表达式相吻合的。这些能级称为共振能级。

练习：

(1) 阅读教科书书 86 至 90 页上有关 δ 势的讨论。

(2) 习题集： 1.6 ， 1.7 ， 2.1 ， 2.2 ， 2.3 ， 3.5 。