[Cohen 量子力学 Vol.1] Chap.1 基本概念

张沐华

July 24th 2020

1 波粒二象性

基于对黑体辐射、光电效应、康普顿效应等的研究，物理学家总结出了针对光的波动性参量（时间参量角频率 $\omega = 2\pi\nu$ ，其中 ν 是频率；空间参量波矢 $\boldsymbol{k}$ ，此处 $|\boldsymbol{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$ ，其中 λ 是波长）与粒子性参量（光子的能量 E 和动量 $\boldsymbol{p}$ ）之间的基本联系：普朗克-爱因斯坦关系

$$E = h\nu = \hbar\omega$$

$$\boldsymbol{p} = \frac{h}{\lambda} = \hbar\boldsymbol{k}$$

在每个基元过程中，总能量与总动量都是守恒的。这个关系体现了光的波粒二象性。

1923 年，德布罗意对于物质粒子也提出了完全类似的假说，

$$E = h\nu = \hbar\omega$$

$$\boldsymbol{p} = \frac{h}{\lambda} = \hbar\boldsymbol{k}$$

表明对于物质粒子来说，存在一个与之相联系的波。这是物质粒子的波粒二象性。

2 波动力学基础

几个要点：

一、用随时间 t 演化的态，代替经典的轨道概念，而这个态包含了关于对象的全部信息，并能决定它以后的演化。例如，若借助于空间坐标表征，则就是所谓的波函数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ ；

注：量子态不同于经典态可由有限个参量决定，量子态需要无穷多个参数，例如波函数在各点的值。

二、 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 解释为概率幅。其意义在于，粒子在时间 t 时出现在空间位置 $\boldsymbol{r}$ 处的体积元 $\mathrm{d}^3r=\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z$ 中的概率为无穷小量 $\mathrm{d}\mathscr{P}(\boldsymbol{r},t)=C|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2\mathrm{d}^3r$ ，即概率密度为 $|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2$ 。

此处 C 是归一化因子，满足 $\int_{Total}C|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2\mathrm{d}^3r=1$ 。这是因为分布概率实际上只关注相对值，$\psi(\boldsymbol{r},t)$ 与 $C\psi(\boldsymbol{r},t)$ 代表同一个态，其中 C 是任意复数。

注：对波函数的概率诠释显然也要求了，波函数必须是平方可积函数。

三、对任意物理量 $\mathscr{A}$ 的测量，均满足谱分解原理。具体来说：

对于待测物理量 $\mathscr{A}$ ，测量仪器只能给出某些特定的结果 λ_i ，即测量结果是量子化的。这些结果称为是待测量的本征值。每一本征值都对应于系统相应的一个态 ϕ_i ，称为是待测量 $\mathscr{A}$ 相应于该本征值的本征态。

但是测量之前系统可能处于的态却并不一定是这些本征态，而可能是它们的复线性组合：$\phi=\sum_i\alpha_i\phi_i$ 。假若测量之前系统即处于某一本征态，则测量结果必定是它的本征值；若处于本征态的线性组合 $\phi=\sum_i\alpha_i\phi_i$ ，则测量得到本征值 λ_i 的概率，为 $\frac{|\alpha_i|^2}{\sum_i|\alpha_i|^2}$ 。同时，经过测量后的系统的态必然也会成为对应的本征态。

四、在不测量情况下，态随时间的自然演化方程为薛定谔方程，它是量子力学的基本方程（公理化假设），不可被证明；具体来说：假设粒子的质量为 m ，处于势场 $V(\boldsymbol{r},t)$ 的作用，则它的波函数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 的演化方程为

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

该方程称为量子力学的波动方程，其解就被解释为前述物质粒子对应的波。该方程是线性、齐次的；因而对于物质粒子来说，波的叠加原理也成立。

此外，该方程对时间是一阶的，这也符合前述假设。

态包含了关于对象的全部信息，并能决定它以后的演化。否则若是对时间更高阶的方程，就需要额外信息（例如态的高阶导数）。

3 粒子的量子描述；波包

对于前述薛定谔方程，首先讨论一个最简单的情况，即自由粒子。这样的模型可以最大限度地忽略掉外部环境的影响而只讨论一个微观粒子本身可以如何在量子力学框架下来描述。

3.1 自由粒子

若 $V(\boldsymbol{r},t)$ 在各处均为零（或常值），代表粒子不受外力的作用，

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{r},t)$$

3.1.1 平面波解

显然，平面波是它的解

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}$$

且其中必有关系 $\omega=\omega(\boldsymbol{k})=\frac{\hbar\boldsymbol{k}^2}{2m}$ ，这被称为色散关系。利用德布罗意关系显然得到 $E=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}$ ，这与经典力学的能量-动量关系是一样的。

平面波代表什么状态的粒子呢？由于 $|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2=|A|^2$ ，可见平面波代表在空间各处出现概率均相同的粒子。

注：平面波显然不平方可积；实际上严格的的平面波在物理上也是不可实现的，但是下面将要讲的平面波的叠加，即波包，却是平方可积的。

3.1.2 波包解

根据叠加原理可知，任意合法平面波的一切线性组合，也是前述方程的解。这样的叠加可以写作：

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int g(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{\mathrm{i}[\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega(\boldsymbol{k})t]}\mathrm{d}^3\boldsymbol{k}$$

称之为一个三维波包。其中 $g(\boldsymbol{k})$ 作用相当于线性组合系数，它可以是复函数，但必须可以在积分下求其微商。可以证明，自由粒子薛定谔方程的一切平方可积解都可以写成这种形式。

一维波包是典型的简化模型，即同向平面波的叠加：

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}g(k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}[kx-\omega(k)t]}\mathrm{d}^3k$$

特别地，波包在选定的 t=0 时刻

$$\psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}g(k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{d}k$$

可见 $g(k)$ 就是 $\psi(x,0)$ 的傅里叶变换：

$$g(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x,0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\mathrm{d}x$$

事实上上述波函数与系数之间的傅里叶变换关系不仅适用于自由粒子，任意势场内的 $t=0$ 时刻的波函数 $\psi(x,0)$ 都可以表达成上述形式。

3.2 选定时刻波包的形状

首先选定任意一个时刻，不妨将之指定为时间起始点，考察波包 $\psi(x,0)$ 的形状。

$g(k)$ 作为 $\psi(x,0)$ 的傅里叶变换，表示它的频域分量。假设 $g(k)$ 曲线具有一个明显的高峰，极大值（峰中心）位于在 $k=k_0$ 处，它的宽度 Δk 可以定义为极大附近两个半极大高度处的距离，也可定义为极大附近两个零点的距离。这个假设相当于是说，$\psi(x,0)$ 叠加的平面波分量，是在 k_0 附近的连续分布，且峰中心附近的平面波分量振幅最大。

直观来说，不同频率的平面波相叠加，会产生极大值的区域，因为在这区域附近各个波的相位基本相同，干涉相长；而由于频率不同，在其他区域就会干涉相消。对于有限个平面波的叠加，是存在周期的，每个周期内都有一个极大；而若是无穷多个连续频率的波叠加，则可以认为周期无穷大，定义域内只会产生一个极大。这也是其得名“波包”的由来。

复函数可以表示为

$$g(k)=|g(k)|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha(k)}$$

若其模长 $|g(k)|$ 具有明显值的区间为 $\left[k_0-\frac{\Delta k}{2},k_0+\frac{\Delta k}{2}\right]$ ，辐角 $\alpha(k)$ 的变化充分正规，则可以展开

$$\alpha(k)\simeq\alpha(k_0)+(k-k_0)\left.\frac{\mathrm{d}\alpha}{\mathrm{d}k}\right|_{k=k_0}$$

记 $x_0=-\left.\frac{\mathrm{d}\alpha}{\mathrm{d}k}\right|_{k=k_0}$ ，于是

$$\psi(x,0) \simeq \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}[k_0x+\alpha(k_0)]}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} |g(k)|\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k-k_0)(x-x_0)}\mathrm{d}k$$

可见，在远离 x_0 的 x 处，$|x-x_0|$ 较大，积分号下的函数在宽度 Δk 中剧烈振荡而导致干涉相消，概率幅很低。而若 x_0 在 x 附近，则被积函数变化缓慢，积分产生极大值。因此实际上前述的 $x_0 = -\left.\frac{\mathrm{d}\alpha}{\mathrm{d}k}\right|_{k=k_0}$ 正是波包的峰中心，理论分析的原因如下：

要得到波包峰中心 x_0 ，可以认为在频域中心 k_0 附近主要波分量（即靠近 k_0 的振幅比较大的平面波）在该点的相位 $kx_0+\alpha(k)$ 在 $k=k_0$ 附近没有明显变化，即对 k 的导数在 $k=k_0$ 处近似为零，此即相位稳定条件：

$$\left.\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k}\left[kx_0+\alpha(k)\right]\right)\right|_{k=k_0} = x_0 + \left.\frac{\mathrm{d}\alpha}{\mathrm{d}k}\right|_{k=k_0} = 0 \Longrightarrow x_0 = -\left.\frac{\mathrm{d}\alpha}{\mathrm{d}k}\right|_{k=k_0}$$

当 x 远离 x_0 时概率幅会减小。若在某一位置 x 处，在 k 取遍区间 Δk 中所有值时，函数 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k-k_0)(x-x_0)}$ 大约振荡一个周期，即 $\Delta k(x-x_0)\simeq 1$ ，则说明这一位置的概率幅很小若波包宽度近似为 Δx ，则两个宽度的乘积 $\Delta x\cdot\Delta k$ 具有下界 $\Delta x\cdot\Delta k \gtrsim 1$ ，下界的精确值取决于宽度的精确定义。

注：“下界”的意义是指，虽然不能构造出一个乘积比 1 小得多的波包，但实际上存在宽度乘积任意大的波包。

综上，波包的物理意义是：在 $t=0$ 时刻，以 x_0 为中心，近似宽度为 Δx 的范围内集中了粒子出现的几乎全部概率。

3.3 海森堡不确定性原理

继续深入研究前述关于宽度乘积的不等式，就会得到非常重要的海森堡不确定性原理。

极端例子是平面波，它的概率分布在全空间，即粗糙来说，Δx 无穷大；而此时波矢 k_0 和角频率 ω_0 是唯一确定的，表明粒子的能量和动量都精确确定，即粗糙来说，$\Delta k=0$ 。事实上这样的平面波可以看作是波包在 $g(k)=\delta(k-k_0)$ 时的特例。

因此实际上对于平面波 $A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$ 测量动量会给出唯一确定值 $p=\hbar k$ ，换句话说平面波是动量的本征态；由于平面波的波矢 k 为连续分布，因而对于自由粒子来说，其可能具有的动量构成一个连续统（非量子化）。

回顾

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\mathrm{d}k$$

可见 $|g(k)|^2$ 还可被解释为正比于动量的概率分布密度。具体来说，若将之改写成

$$\psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\phi(p)\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}p$$

有帕斯瓦尔等式

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x,0)|^2\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{+\infty}|\phi(p)|^2\mathrm{d}p=C$$

则

$$\mathrm{d}\mathscr{P}(x)=\frac{1}{C}|\psi(x,0)|^2\mathrm{d}x$$

表示粒子位置的概率密度；同样，

$$\mathrm{d}\mathscr{P}(p)=\frac{1}{C}|\phi(p)|^2\mathrm{d}p$$

表示粒子动量的概率密度。可见对于粒子来说，其位置和动量是具有傅里叶变换关系，一般称之为“共轭关系”。

则前述的宽度乘积下限不等式可以写作

$$\Delta x\cdot\Delta p\geq\hbar$$

直观来讲，粒子位置的不确定度与动量的不确定度的乘积存在下限，提高其一的精确度则会降低另一者的精确度，无法同时确定。

注：$\Delta x\cdot\Delta k\gtrsim 1$ 其实只是傅里叶变换的一个普遍数学性质，没有物理意义；真正引入物理意义的是德布罗意关系，即将波矢与动量相联系，因而得到的 $\Delta x\cdot\Delta p\geq\hbar$ 才具有物理意义。

3.4 自由波包随时间的演化

前面讨论的都是指定时刻（并且不妨设为时间起点）的波包的性质；而实际上波包会随着时间演化。

还是首先考虑平面波 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)}$ ，其相速度（定义为恒定相位点的移动速度）为

$$V_p(k)=\left.\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}\right|_{kx-\omega t=\mathrm{count}}=\frac{\omega}{k}$$

平面波只有相速度，因为它只能通过宗量——相位 $(kx-\omega t)$ 来依赖于 x 和 t 。结合色散关系，得到

$$V_p(k) = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{p}{2m}$$

可见对于不同的平面波（对应于不同的动量），其相速度不同。

当考虑波包时，若干平面波相叠加。由于不同的分量其相速度不同，因而随着时间的演化，其干涉相长的波数也会发生变化（因为干涉相长是不同分量的波峰相叠加，而不同的波峰速度不同）。波包峰中心的运动是描述波包随时间演化的一个重要方式。

已知 $t=0$ 时刻的波包峰中心为 $x_M(0)=x_0$ ，想要获得任意 t 时刻的波包峰中心为 $x_M(t)$ ，可以同样利用稳定相位条件。根据傅里叶变换理论，其实要从 $\psi(x,0)$ 过渡到 $\psi(x,t)$ 只需将 $g(k)$ 换成 $g(k)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(k)t}$ ，则辐角变为 $\alpha(k)-\omega(k)t$ 。则：

$$x_M(t) = \left.\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}\right|_{k=k_0} t - \left.\frac{\mathrm{d}\alpha}{\mathrm{d}k}\right|_{k=k_0}$$

波包峰中心的速度定义为波包的群速度：

$$V_g(k_0) = \left.\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}\right|_{k=k_0}$$

利用色散关系可知：

$$V_g(k_0) = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = 2V_p(k_0)$$

群速度的重要意义在于，它又回到了对经典自由粒子速度的描述：$v=p/m$ 。在量子力学中，波包的峰就类似于它所对应的经典粒子那样运动。

上面是关于波包峰中心的讨论；实际上波包的形状——主要是宽度——也会随时间演化。比方说，若 Δp 是个运动常量，则 Δx 会随时间增长而无限展宽，称之为波包的扩展。

4　时间无关标量势场中的粒子

微观粒子的量子特性是否明显，很大程度上与所考虑问题的尺度有关。若是这个尺度与粒子运动的特征长度——在这里也就是波长——处于同量级甚至更短，量子效应就会十分明显。构造这种环境一般是通过外加势场来实现的。

4.1 分离变量；定态

与时间无关的标量势场中粒子的薛定谔方程为

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

4.1.1 1.1 定态解

首先寻找它是否具有时空坐标分离变量的解形式：$\psi(\boldsymbol{r},t)=\varphi(\boldsymbol{r})\chi(t)$

代入原方程并分离变量得到

$$\frac{\mathrm{i}\hbar}{\chi(t)}\frac{\mathrm{d}\chi(t)}{\mathrm{d}t}=-\frac{1}{\varphi(\boldsymbol{r})}\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi(\boldsymbol{r})+V(\boldsymbol{r})$$

左边是仅与时间相关的函数，右边则是仅与坐标相关的函数，等式成立说明两边都等于同一常数，且应具有能量量纲，不妨记为 E 。则会得到两个微分方程，

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\chi(t)}{\mathrm{d}t}=E\chi(t)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\varphi(\boldsymbol{r})+V(\boldsymbol{r})\varphi(\boldsymbol{r})=E\varphi(\boldsymbol{r})$$

第一个微分方程的解是简谐振荡因子：

$$\chi(t)=A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar}$$

因而总的波函数就能够表达为

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\varphi(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar}$$

可以看到，它是一个空间分布函数的简谐振荡模式，由此得到的概率密度 $|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2=|\varphi(\boldsymbol{r})|^2$ 是时间无关的，单从波函数的概率诠释意义的角度来看，其实 $\varphi(\boldsymbol{r})$ 就已经完全包含了关于概率分布的一切信息，因而该方程又称之为薛定谔方程的定态解。由于上述定态波函数只含有唯一一个角频率即 $\frac{E}{\hbar}$ ，因此根据德布罗意关系，$\hbar\frac{E}{\hbar}=E$ 代表的正是粒子的总能量。从而 $\varphi(\boldsymbol{r})$ 所满足的方程可以写作：

$$\hat{H}\varphi(\boldsymbol{r})=E\varphi(\boldsymbol{r})$$

称之为“不含时薛定谔方程”。其中 $\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\boldsymbol{r})$ 是一个线性算符，该方程就是 $\hat{H}$ 的本征方程，其本征值是粒子的总能量，而求解出的 $\varphi(\boldsymbol{r})$ 则是它的本征态，因此在不含时标量势场中，每个定态都可由它的能量所唯一标记；换句话说，定态的区别即是能量的区别。因而借助经典力学的概念，将 $\hat{H}$ 称为“哈密顿算符”。而关于这个本征方程的解，将会看到只有一些特定的 E 值，$\varphi(\boldsymbol{r})$ 才是平方可积的，这也是能量量子化的起因。

“含时薛定谔方程”给出波函数的演化情况，而不区分粒子的态如何（能量如何）；“不含时薛定谔方程”则可以用来寻找定态（确定能量。）

4.1.2 定态的叠加

前面说到定态可由一系列离散的能量值来标记，则不含时薛定谔方程可记为

$$\hat{H}\varphi_n(\boldsymbol{r})=E_n\varphi_n(\boldsymbol{r})$$

定态波函数则为 $\psi_n(\boldsymbol{r},t)=\varphi_n(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt/\hbar}$ ，它们的线性组合也是时间无关的标量势场中粒子的薛定谔方程的解：

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\sum_n c_n\varphi_n(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt/\hbar}$$

特别地，$\psi(\boldsymbol{r})=\sum_n c_n\varphi_n(\boldsymbol{r})$ 。

回顾平面波是动量的本征态，而任意满足自由粒子薛定谔方程的解都可以表为平面波的叠加；因而平面波构成一组完备本征基矢，对任意波包测量动量总会到某一平面波上。与此类似，定态也构成一组完备本征基矢，任何满足时间无关标量势场中的粒子的薛定谔方程的解也都能够依定态展开，如上式所示。

可见对于叠加解来说，各项的相因子是不一样的（与定态能量 E_n 有关），而只有在定态的情况下，对时间的依赖关系才是简单的一个指数。

4.2 一维方势

考虑一种理想化的势函数，例如

$$V(x)=\begin{cases}V_1 & a\leq\ x\\ V_0 & a>x\end{cases}$$

用以近似表示实际中在某些点附近的较小区间内变化比较剧烈的势函数。一般来说，只有当实际势场发生变化的区间长度远小于粒子的波长（以及其他涉及到的长度量），这种近似才会是有效的。从经典力学的直观来看，在变化点附近粒子受到的作用将会非常大。

首先需要考虑势能为常数的区域中波函数的性态。记 V(x)=V ，则一维不含时薛定谔方程为：

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\varphi(x)+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\varphi(x)=0$$

若 $E>V$ ，则解为 $\varphi(x)=A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+A'\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$ ，其中 A 、A' 为复常数，k 满足 $E-V=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$ 。$\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$ 代表平面波，在经典力学中这种情况也是允许的。

若 $E<V$ ，则解为 $\varphi(x)=B\mathrm{e}^{-\rho x}+B'\mathrm{e}^{\rho x}$ ，其中 B 、B' 为复常数，ρ 满足 $V-E=\frac{\hbar^2\rho^2}{2m}$ 。$\mathrm{e}^{-\rho x}$ 代表倏逝波，在经典力学中粒子不可能进入这种区域；而上式表明量子力学中是存在一定的概率的，但是概率非常小，且随着深入的距离增加而指数减小。一般来说，当深入距离达到 $l=1/\rho$ 时倏逝波即可忽略。

若 $E=V$ ，则解 $\varphi(x)$ 是 x 的线性函数。

其次考虑波函数在势能间断点处的行为。数学上可以证明，在势能的跳跃间断点（即左右势能都是有限值）处波函数的边界条件要求：一阶连续性，即波函数本身及其一阶导数，都应保持连续（不发生突变）。具体过程略去。

若是无穷间断点（常见于无限深势阱、无限高势阶势垒等模型，实际上物理不可实现），则只能满足波函数本身连续，而不能满足一阶导数也连续。

4.2.1 一维方势阶

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

其中 $V_0>0$ ，这样的势函数称为一维方势阶。从左到右的区域依次编号 1,2 ，考虑一个总能量为 E 的粒子。

（**部分反射**）若 $E>V_0$ ，则

$$\varphi_1(x)=A_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1x}+A_1'\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1x}\quad k_1=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\varphi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + A_2' e^{-ik_2 x} \quad k_2 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

波函数的一阶连续性只给出两个条件式，但是即便在归一化因子的意义下只有系数之间的相对比值有意义，四个复系数也需要三个比值。因此，取 $A_2' = 0$ ，这相当于只考虑粒子从 $-\infty$ 向势阶入射的情况。可以得出：

$$\frac{A_1'}{A_1} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}$$
$$\frac{A_2}{A_1} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}$$

从而可以解释其物理意义：$\varphi_1(x)$ 由正向、反向两部分叠加而成，分别代表入射波和反射波；$\varphi_2(x)$ 仅由一个波构成，代表透射波。根据概率诠释，可以定义

反射系数：$R = \left|\frac{A_1'}{A_1}\right|^2 = 1 - \frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2}$

透射系数：$T = \frac{k_2}{k_1}\left|\frac{A_2}{A_1}\right|^2 = \frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2}$

注意到这样的透射和反射并不会引起相位变化，因比值 $\frac{A_1'}{A_1}$ 、$\frac{A_2}{A_1}$ 都是实数。

（**全反射**）若 $E < V_0$ ，则

$\varphi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x}$ ，其中 $k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

$\varphi_2(x) = B_2 e^{-\rho_2 x} + B_2' e^{\rho_2 x}$ ，其中 $\rho_2 = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$

同样为使 $x \to +\infty$ 时波函数有限，取 $B_2' = 0$ 。可以得出：

$$\frac{A_1'}{A_1} = \frac{k_1 - i\rho_2}{k_1 + i\rho_2}$$
$$\frac{B_2}{A_1} = \frac{2k_1}{k_1 + i\rho_2}$$

其反射系数为 $R = \left|\frac{A_1'}{A_1}\right|^2 = 1$

物理上看，粒子几乎一定被反射；但是由于 $\varphi_2(x) = B_2 e^{-\rho_2 x}$ 倏逝波的存在，则在势阶后仍存在一定的非零概率，但是随着深入的距离按指数衰减。V_0 越高，ρ_2 越大，意味着衰减越快。

同时，这时的反射将会出现相位变化，因 $\frac{A_1'}{A_1}$ 是复数。

无限高势阶，即 $V_0 \to +\infty$ ，则 $\rho_2 \to +\infty$ ，于是 $A_1' \to -A_1$ ，$B_2 \to 0$ ，这造成倏逝波基本不存在，且在势阶壁 $x = a$ 处波函数变为零（才能保证连续性；这时导数不再连续）。

4.2.2 一维方势垒

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & a \le x \le b \\ 0 & x < a \quad \text{or} \quad x > b \end{cases}$$

其中 $V_0 > 0$ ，这样的势函数称为一维方势垒。从左到右的区域依次编号 1,2,3 ，考虑一个总能量为 E 的粒子。

（**共振**）若 $E > V_0$ ，则

$\varphi_1(x) = A_1 \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1 x} + A_1' \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1 x}$ ，其中 $k_1 = \sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$

$\varphi_2(x) = A_2 \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_2 x} + A_2' \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_2 x}$ ，其中 $k_2 = \sqrt{\dfrac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$

$\varphi_3(x) = A_3 \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1 x} + A_3' \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1 x}$ ，其中 $k_1 = \sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$

同样取 $A_3' = 0$ 。根据边界条件可得

$$\frac{A_1'}{A_1} = \frac{\mathrm{i}(k_1^2 - k_2^2)\sin^2 k_2 l}{2k_1 k_2 \cos k_2 l - \mathrm{i}(k_1^2 + k_2^2)\sin^2 k_2 l}$$

$$\frac{A_3}{A_1} = \frac{2k_1 k_2 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1 l}}{2k_1 k_2 \cos k_2 l - \mathrm{i}(k_1^2 + k_2^2)\sin^2 k_2 l}$$

可得

$$R = \left|\frac{A_1'}{A_1}\right|^2 = \frac{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2 l}{4k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2 l}$$

$$T = \left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2 = \frac{4k_1^2 k_2^2}{4k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2 l}$$

透射系数还可通过能量来表示：

$$T = \frac{4E(E-V_0)}{4E(E-V_0) + V_0^2 \sinh^2 \sqrt{2m(E-V_0)}(b-a)/\hbar}$$

它随势垒厚度的增长而在极大值 1 和极小值 $\left[1+\frac{V_0^2}{4E(E-V_0)}\right]^{-1}$ 之间周期性振荡；而当势垒厚度等于粒子在势垒中的半波长的整数倍时，即 $k_2l=n\pi$ ，便会由于多次反射而干涉产生驻波。若是波包透过势垒传播，则会需要较长时间才能通过，这被称为“共振散射”；而若是势垒厚度与共振厚度相差较大，则会由于多次反射而干涉相消，导致波函数的值变得很小。

（**隧穿效应**）若 $E<V_0$ ，则

$\varphi_1(x)=A_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1x}+A_1'\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1x}$ ，其中 $k_1=\sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$

$\varphi_2(x)=B_2\mathrm{e}^{-\rho_2x}+B_2'\mathrm{e}^{\rho_2x}$ ，其中 $\rho_2=\sqrt{\dfrac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$

$\varphi_3(x)=A_3\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1x}+A_3'\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1x}$ ，其中 $k_1=\sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$

当 $\rho_2l\gg1$ 时，$T\simeq\frac{16E(V_0^2-E)}{V_0^2}\mathrm{e}^{-2\rho_2l}$ ，可见不同于经典物理，粒子有一定的概率会穿过势垒到达另一边。若当势垒厚度 $l<1/\rho_2$ ，则在透过势垒的一侧波函数会具有不可忽略的效应，即粒子穿过势垒的概率较大，称之为“隧穿效应”。势垒厚度越小，粒子能量越大，质量越小，则隧穿的概率越大。

注：无限高势垒相当于无限高势阶。

4.2.3 一维方势阱（束缚态）

有限深势阱：

$$V(x)=\begin{cases}-V_0 & a\le x\le b\\ 0 & x<a \text{ or } x>b\end{cases}$$

其中 $V_0>0$ ，这样的势函数称为一维有限深方势阱。从左到右的区域依次编号 1,2,3 ，考虑一个总能量为 E 的粒子。

若 $-V_0<E<0$ ，则

$\varphi_1(x)=B_1\mathrm{e}^{-\rho_1x}+B_1'\mathrm{e}^{\rho_1x}$ ，其中 $\rho_1=\sqrt{-\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$

$\varphi_2(x)=A_2\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_2x}+A_2'\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_2x}$ ，其中 $k_2=\sqrt{\dfrac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}$

$\varphi_3(x)=B_3\mathrm{e}^{-\rho_1x}+B_3'\mathrm{e}^{\rho_1x}$ ，其中 $\rho_1=\sqrt{-\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$

下面的以后再回来重新理解：

由于波函数在区域 1 、3 应该有限，则取 $B_1 = B_3' = 0$ ，再结合边界条件可得

$$\left(\frac{\rho - \mathrm{i}k}{\rho + \mathrm{i}k}\right)^2 = \mathrm{e}^{2\mathrm{i}kl}$$

这个方程实际上给出了对于能量的一个限制，可见只要规定波函数处处有限，便会导致能量的量子化，也即只有某些特定的能量的定态才能稳定存在于方势阱中，称之为“能级”。具体来说又分为两种情况。如果 $\frac{\rho-\mathrm{i}k}{\rho+\mathrm{i}k} = -\mathrm{e}^{\mathrm{i}kl}$ ，则 $\frac{\rho}{k} = \tan\frac{kl}{2}$ 。令 $k_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}} = \sqrt{k^2+\rho^2}$ ，可得 $\cos^2\frac{kl}{2} = \frac{k}{k_0}$ ，于是方程又等价于 $\begin{cases} \left|\cos\frac{kl}{2}\right| = \frac{k}{k_0} \\ \tan\frac{kl}{2} > 0 \end{cases}$ 。由此可见能级决定于斜率为 $1/k_0$ 的直线与余弦曲线的交点。与之对应的波函数都是偶函数；因此这类定态称为偶宇称态。如果 $\frac{\rho-\mathrm{i}k}{\rho+\mathrm{i}k} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kl}$ ，同样的分析可知 $\begin{cases} \left|\sin\frac{kl}{2}\right| = \frac{k}{k_0} \\ \tan\frac{kl}{2} > 0 \end{cases}$ ，能级决定于斜率为 $1/k_0$ 的直线与正弦曲线的交点。与之对应的波函数都是奇函数；因此这类定态称为奇宇称态。若 $k_0 \leq \pi/a$ $V_0 \leq V_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ml^2}$ ，方程只有一个束缚态解，对应于偶波函数，因此无论 $V_0 l^2$ 多么小（即无论势阱多浅、多窄），至少都存在一个解，称为基态，是一个偶解。而当 $V_1 \leq V_0 < 4V_1$ 则开始出现第一个奇能级；此后随着势阱继续变深变宽，偶能级与奇能级交替出现。

当 $V_0 \geq V_1$ 时，直线斜率 $1/k_0$ 很小，则对于低能级来说近似有 $k = \frac{n\pi}{l}$

因而 $E = E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ml^2} - V_0$ 。

无限深势阱

$$V(x) = \begin{cases} 0 & a \leq x \leq b \\ +\infty & x < a \ \text{ or } \ x > b \end{cases}$$

称为一维无限深方势阱。

令 $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ ，能够解得波函数在势阱外和势阱壁处为零，内部则具有 $\varphi(x) = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + A'\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$ 的形式。根据在左边界处为零的条件可得 $A' = -A$ ，从而

$$\varphi(x) = 2\mathrm{i}A\sin kx$$

又根据在右边界处为零，可得驻波条件 $k = \frac{n\pi}{l}$ 。将上式归一化并代入驻波条件即得

$$\varphi(x) = \sqrt{\frac{2}{l}}\sin\frac{n\pi}{l}x$$

对应的能量为 $E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ml^2}$ 。

综上，可见对于方势阱（束缚态）系统来说，能量量子化是很自然的。从波的角度来讲，只有满足特定能量（即频率）条件的波才会形成稳定驻波；而其它频率（对应于能量）的波则都在多次反射中干涉相消，无法稳定存在。

结合有限深和无限深势阱的情况考虑，可知对于无限深势阱来说情况比较简单，定态条件就是势阱宽度为半波长整数倍；但对于有限深势阱则非如此，差异来源于：粒子在有限高势阶处反射不会带来相位变化，但是无限高势阶处反射则会有相位变化。