

第27章 薛定谔方程及应用简例

§ 27.1 非相对论量子力学的基本假定

§ 27.2 薛定谔方程 ►

§ 27.3 无限深方势阱中的粒子 ►

§ 27.4 势垒穿透 ►

§ 27.5 谐振子 ►

掌握量子力学的基本理论框架

掌握量子力学给出的一些重要的结论

§ 27.1 非相对论量子力学的基本假定

一、状态的描述

1. 经典力学中的质点由 \vec{r} \vec{p} 描述

1) 每一时刻这两个物理量具有完全确定的值，且随时间连续变化。 $\vec{r}(t)$ 描写粒子的运动轨道。

2) 质点的其他力学量(E_k , v , \vec{L})都可表示为 \vec{r} \vec{p} 的函数。

3) 质点状态的变化遵从牛顿定律。若已知 \vec{r}_0 \vec{p}_0 ,

则任意时刻的 $\vec{r}(t)$ $\vec{p}(t)$ 唯一确定

$$\begin{cases} \vec{P}(t) = \int_0^t \vec{F} dt + \vec{P}_0 \\ \vec{r}(t) = \int_0^t \vec{v}(t) dt + \vec{r}_0 \end{cases}$$

2. 量子力学中微观粒子的状态由波函数 $\Psi(\vec{r}, t)$ 描写

- 1) 微观粒子不可能同时具有确定的 \vec{r} \vec{p} ，
也就是没有确定的轨道；
- 2) 为描写粒子的状态，量子力学中用反映粒子波粒二象性的波函数描写。波函数完全描述了体系的量子状态(简称量子态)，因而波函数亦称为态函数；
- 3) $\Psi(\vec{r}, t)$ 的变化遵从 Schrödinger 方程。

二、坐标表象和动量表象上的波函数

描述粒子状态的波函数可以表示为以坐标为变量的波函数 $\Psi(\vec{r}, t)$ ，也可以表示为以动量为变量的波函数 $\phi(\vec{p}, t)$ 。称 $\Psi(\vec{r}, t)$ 是态矢量在坐标表象上的表示， $\phi(\vec{p}, t)$ 是动量表象上的表示。它们描述的是同一状态，只是表象（representation）不同而已。

就像描述经典粒子运动可以采用不同坐标系表示一样。不同表象的波函数之间有一确定的变换关系。

坐标表象

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \Psi(\vec{r}, t)^* \Psi(\vec{r}, t)$$

它代表 t 时刻，在 \vec{r} 端点处单位体积中发现一个粒子的
概率。代表粒子空间分布的概率密度。

$$\text{动量表象 } |\phi(\vec{p}, t)|^2$$

它代表 t 时刻，在 \vec{p} 端点处单位动量间隔中发现
一个粒子的 概率。

代表粒子动量分布的概率密度。

回顾热学分布函数的普遍意义

$$f(v) = \frac{dN_v}{Ndv}$$

速率分布函数

也称概率密度

$$f(\vec{v}) = \frac{dN_{\vec{v}}}{Nd\vec{v}}$$

速度分布函数

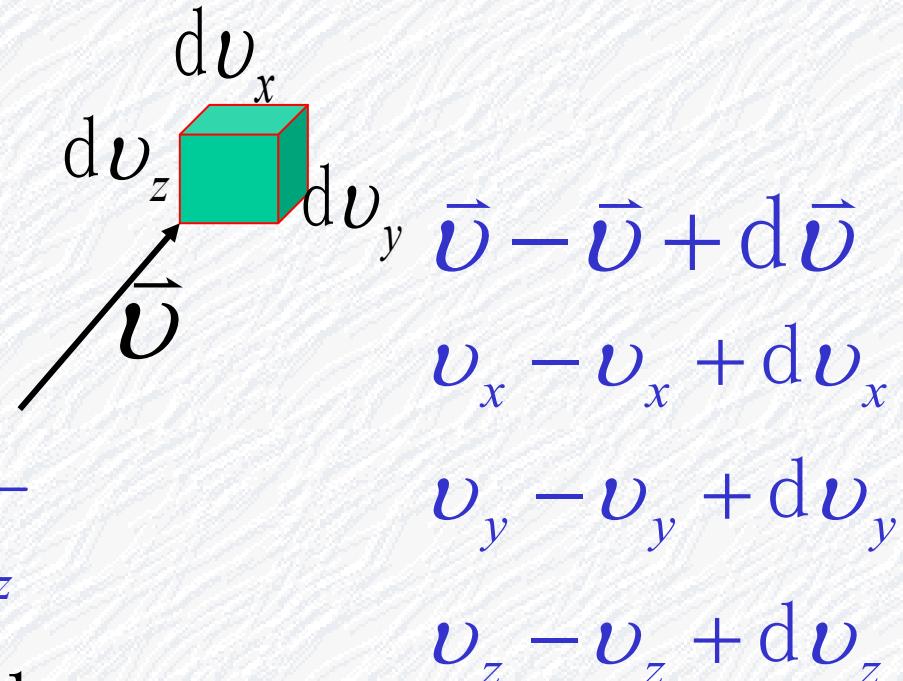
$$= \frac{dN_{\vec{v}}}{Ndv_x dv_y dv_z}$$

$$f(\epsilon) = \frac{dN_\epsilon}{Nd\epsilon} \quad \epsilon - \epsilon + d\epsilon$$

能量分布函数

分子速率在 v 附近

单位速率间隔内的分子数占总分子数的百分比



§ 27.1 非相对论量子力学的基本假定

一、状态的描述

二、坐标表象和动量表象上的波函数

三、非相对论量子力学基本假定

三、非相对论量子力学基本假定

1. 波函数假定（波函数公设）

微观粒子的状态由波函数描述。

2. 薛定谔方程假定（动力学演化公设）

波函数随时间的演化满足Schrödinger方程

单粒子在外势场 $U(\vec{r}, t)$ 中运动

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U(\vec{r}, t) \Psi$$

(单)粒子运动的Schrödinger方程(1926)

3. 力学量算符假定 (算符公设)

(单)粒子运动的Schrödinger方程

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U(\vec{r}, t) \Psi$$

(单)自由粒子满足的方程(一维情形):

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

对时间、坐标求偏导...

涉及对波函数的运算、变换或操作。

1) 算符(operator)

量子力学中，算符表示对波函数的一种运算。

$\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)$ ：算符 $\frac{\partial}{\partial t}$ 代表对波函数对 t 求导。

$\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,t)$ ：算符 $\frac{\partial}{\partial x}$ 代表对波函数对 x 求导。

$\hat{x}\Psi(x,t)=x\Psi(x,t)$ ：算符 \hat{x} 代表用 x 乘波函数。

$\Psi^*(x,t)$ ：对波函数取复共轭。

自由粒子波函数：自由粒子的薛定谔方程的“引进”

$$\Psi(x,t) = A e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x - E t)}$$

微分, 得到方程

注意替代关系

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

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

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

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

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

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

自由粒子波函数:

$$\Psi(x,t) = A e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x - E t)}$$

微分, 得到方程

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = E \Psi(x,t) \quad (1)$$

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

(1)+(2):

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}) \Psi(x, t) = \left(E - \frac{p_x^2}{2m}\right) \Psi(x, t) = 0$$

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

自由粒子的薛定谔方程

非相对论自由粒子有关系式

$$E = \frac{p_x^2}{2m}$$

物理量与
算符替代
关系

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

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

令其作用于波函数 $\Psi(x, t)$ 上

得自由粒子的薛定谔方程

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

2) 力学量算符假定 坐标表象算符假定

力学量上面加[^]，
表示相应力学量的算符。

动量算符

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$$

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar \left(\vec{i} \frac{\partial}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial}{\partial z} \right) = -i\hbar \nabla$$

坐标算符

$$\hat{x} = x, \quad \hat{y} = y, \quad \hat{z} = z$$

$$\hat{\vec{r}} = x\vec{i} + y\vec{j} + z\vec{k}$$

对于有经典对应的力学量，例如动能、势能和轨道角动量，如果在经典力学中它们的函数形式为 $F = F(\vec{r}, \vec{p})$

那么在量子力学中相应力学量算符则假定为

$$\hat{F} = F(\hat{r}, \hat{p})$$

例如轨道角动量 $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$

$$\hat{\vec{L}} = \vec{r} \times \hat{\vec{p}} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ \hat{p}_x & \hat{p}_y & \hat{p}_z \end{vmatrix} = \vec{i}\hat{L}_x + \vec{j}\hat{L}_y + \vec{k}\hat{L}_z$$

$$\hat{L}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$$

$$\hat{L}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

$$\hat{L}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$$

引入哈密顿(H)算符

$$H = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r})$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{\vec{r}}, t) = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}, t)$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}, t)$$

$$\hat{p}^2 = \hat{\vec{p}} \cdot \hat{\vec{p}} = -\hbar^2 \nabla^2$$
$$p^2 = \vec{p} \cdot \vec{p}$$

$$\hat{\vec{r}} = \vec{r}$$

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

∇^2 : 拉普拉斯算符

直角坐标系

$$\nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

•薛定谔方程的“引进”

$$E = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r})$$

物理量与
算符替代
关系

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow E \quad \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{\vec{r}}, t) = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}, t)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}, t) \right] \Psi(\vec{r}, t)$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}, t)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \hat{H} \Psi(\vec{r}, t)$$

(单)粒子运动的Schrödinger方程(1926)

4-1. 测量假定(测量公设)

量子力学唯一可以和实验进行比较的是力学量的平均值

按玻恩统计诠释，波函数模方代表粒子空间分布的概率密度。粒子的坐标在状态 $\Psi(x)$ 上的平均值为

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} x |\Psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) \hat{x} \Psi(x) dx$$

受此启发，有平均值假定：

在任意状态 Ψ 上力学量 \hat{F} 的平均值(一维情形)

$$\bar{F} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{F} \Psi dx$$

$$\int_{\Omega} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV = 1 \quad (\Omega - \text{全空间})$$

回顾热学：

$$1) \quad \bar{v} = \int_0^{\infty} vf(v) dv$$

$$f(v) = \frac{dN_v}{Ndv}$$

速率分布函数
也称概率密度

规律：任意 v 的函数 $\varphi(v)$ 对全体分子的平均值都可以用速率分布函数由上式求得：

$$\overline{\varphi(v)} = \int_0^{\infty} \varphi(v) f(v) dv$$

量子力学中还会碰到类似计算

【例】计算一维自由粒子动量的平均值

$$\Psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{\frac{i}{\hbar} p x} \quad -L/2 \leq x \leq L/2$$

$$\bar{p} = \int_{-L/2}^{L/2} \Psi_p^*(x) \hat{p}_x \Psi_p(x) dx$$

$$= \int_{-L/2}^{L/2} \Psi_p^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \frac{1}{\sqrt{L}} e^{\frac{i}{\hbar} p x} dx \quad \hat{\vec{p}} = -i\hbar \nabla$$

$$= -i\hbar \left(\frac{i}{\hbar} \right) p \int_{-L/2}^{L/2} \Psi_p^*(x) \Psi_p(x) dx = p$$

自由粒子： $\vec{p} = \text{const.}$

先放着，等讲完“本征值”
后再回来！

4-2. 测量假定(测量公设)

$\{\Phi_n(x)\}$: 力学量 \hat{F} 的本征函数系

根据叠加原理，任何状态都可展开成这些本征态叠加

$$\Psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \Phi_n(x) \quad \sum_{n=1}^{\infty} |C_n|^2 = 1$$

单次测量所得 F 的数值总是随机的（除非是的某个本征态），但必属本征值中的某一个 F_n ，测量到该本征值的概率 $|C_n|^2$ (处于 Φ_n 状态的概率)

测量完毕，即相应突变(塌缩)为该本征值的本征态。

对相同的系统(系综)多次重复实验时，力学量的平均值(期望值):

$$\bar{F} = \sum |C_n|^2 F_n$$

5. 全同性原理假定（微观粒子全同性原理公设）

两个全同粒子的交换，不改变体系的状态。

非相对论量子力学基本假定

1. 波函数假定（波函数公设）
2. 薛定谔方程假定（动力学演化公设）
3. 力学量算符假定（算符公设）
4. 测量假定(测量公设)
5. 全同性原理假定（微观粒子全同性原理公设）



§ 27.2 薛定谔方程



薛定谔

Erwin Schrodinger

奥地利人

1887-1961

创立量子力学

获1933年诺贝尔物理学奖

1926年，在一次学术讨论会上年轻的薛定谔介绍德布罗意关于粒子波动性假说的论文，在薛定谔讲完后，物理学家德拜（P.Debey）评论说：认真地讨论波动，必须有波动方程。

几个星期后，薛定谔又作了一次报告。开头就兴奋地说：你们要的波动方程，我找到了！这个方程，就是现在熟知的著名的薛定谔方程。（教材P356）

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}, t) \right] \Psi(\vec{r}, t)$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}, t)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \hat{H} \Psi(\vec{r}, t)$$

单粒子的哈密顿算符

(单)粒子运动的Schrödinger方程(1926)

Schrödinger 方程的一般形式

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}, t)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi$$

(单)粒子的哈密顿算符

量子力学最基本的方程，
一个“基本假定”，
不能由其它更加基本的原理推导出来。
它的计算结果和实验一致，
表明了它的正确性。

Schrödinger 方程反映了微观粒子的运动规律。
地位同经典力学的牛顿方程。

§ 27.2 薛定谔方程

一、关于薛定谔方程的讨论

二、定态薛定谔方程(能量本征方程)

三、力学量算符的本征方程

一、关于薛定谔方程的讨论

1. 薛定谔方程的解满足态叠加原理

若 $\psi_1(\vec{r}, t)$ 和 $\psi_2(\vec{r}, t)$ 是薛定谔方程的解

则 $c_1\psi_1(\vec{r}, t) + c_2\psi_2(\vec{r}, t)$ 也是薛定谔方程的解

这是因为薛定谔方程是

线性、齐次偏微分方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi$$

2.薛定谔方程中含有虚数*i*

它的解 Ψ 是复函数

复数不能直接测量

而 Ψ 的模方：概率密度，可测量。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi$$

$$\bar{F} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \hat{F} \Psi \, dx$$

3. 算符只是一种抽象的数学记号，本身并不象经典力学中的力学量那样具有实在的物理含义。

但正是由于引进了力学量算符，加上用波函数表达状态，理论上才能解释微观体系的实验结果。这些实验结果用经典力学是无法解释的。

力学量用算符表示

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}, t)$$

单粒子哈密顿(能量)算符

4. 外界对粒子的作用以及粒子间作用，包括不能用力来表达的微观相互作用，一般都可以用哈密顿量中的势函数 $U(\vec{r}, t)$ 来概括。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi$$

5. 哈密顿量决定了微观粒子波函数随时间的演化，对于任何复杂体系，关键在于写出 \hat{H} 的具体表达式。

波函数完全描述了体系的量子状态， Ψ 可以决定微观粒子的一切力学量和行为。

怎么解方程？

二、定态薛定谔方程(能量本征方程)

常常遇到微观粒子的势能函数 U 与时间 t 无关的稳定的势场问题，例如

自由运动的粒子: $U=0$

氢原子中的电子: $U = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$

势场稳定时，波函数 ψ 可以分离为一个空间坐标的函数和一个时间函数的乘积，解Schrödinger方程也变得更为简单了。

当粒子在一个与时间无关的有势场中运动时

即 $U = U(\vec{r})$ 与时间 t 无关

则哈密顿量 \hat{H} 不显含时间

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r})$$

可以用分离变量求解波函数

波函数写成

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Phi(\vec{r})T(t)$$

将 $\Psi(\vec{r}, t) = \Phi(\vec{r})T(t)$

代入 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \hat{H} \Psi(\vec{r}, t)$

得 $i\hbar \frac{dT(t)}{dt} \Phi(\vec{r}) = [\hat{H} \Phi(\vec{r})] T(t)$

左右两边同除 $\Phi(\vec{r})T(t)$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r})$$

得 $i\hbar \frac{dT(t)}{dt} \frac{1}{T(t)} = \frac{1}{\Phi(\vec{r})} \hat{H} \Phi(\vec{r})$

$$i\hbar \frac{dT(t)}{dt} \frac{1}{T(t)} = \frac{1}{\Phi(\vec{r})} \hat{H} \Phi(\vec{r})$$

令 $= E$

上式 左边是 t 的函数

右边是 \vec{r} 的函数

且两变量相互独立

两边必须等
于同一个常
量时才成立

得到两个独立的方程

$$i\hbar \frac{dT(t)}{dt} = ET(t)$$

$$\hat{H} \Phi(\vec{r}) = E \Phi(\vec{r})$$

$$i\hbar \frac{dT(t)}{dt} = ET(t) \quad (1)$$

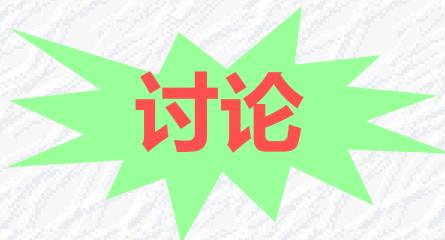
$$\hat{H}\Phi(\vec{r}) = E\Phi(\vec{r}) \quad (2)$$

解方程 (1) 得

$$T(t) = Ce^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

—振动因子

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Phi(\vec{r})T(t)$$



$$T(t) = Ce^{-\frac{i}{\hbar}Et} \quad - \text{振动因子}$$

1) 对比爱因斯坦—德布罗意关系式，

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

常数 E 的物理意义正是粒子的能量。

2) 从推导过程可知

$$i\hbar \frac{dT(t)}{dt} = ET(t) \quad (1)$$

方程(1)的解与具体势函数无关，

所以在类似问题中作为已知结果使用。

3) 物理上主要任务是解方程(2)

哈密顿量 \hat{H} 不显含时间

$$\hat{H}\Phi(\vec{r}) = E\Phi(\vec{r}) \quad (2) \quad \text{定态薛定谔方程}$$

单粒子定态薛定谔方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right] \Phi(\vec{r}) = E\Phi(\vec{r})$$

方程的解是什么呢？

- 依赖于 $U(\vec{r})$ 的具体形式

数学上： E 不论取何值，方程都有解。

物理上： E 只有取一些特定值，方程的解才能满足波函数的条件（**单值、有限、连续**）。

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right) \Phi(\vec{r}) = E \Phi(\vec{r})$$

单粒子定态薛定谔方程

- 满足方程的特定的 E 值，称为能量本征值。

Φ_E 称为与 E 对应的能量本征函数。

故该方程又称为：能量本征值方程

振动因子

- 能量本征波函数： $\Psi_E(\vec{r}, t) = \Phi_E(\vec{r}) T(t) = C \Phi_E(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} Et}$ [或 $\Phi_E(\vec{r})$]
- 每个能量本征波函数所描述的状态为粒子的能量本征态。（能量为确定值）
- 定态：能量取确定值的状态。
每个能量本征波函数所描述的状态均为定态。
能量本征波函数又称为定态波函数。

§ 27.2 薛定谔方程

一、关于薛定谔方程的讨论

二、定态薛定谔方程(能量本征方程)

三、力学量算符的本征方程

三、力学量算符的本征方程

算符只是抽象的数学记号，其本身并不象经典力学中力学量那样代表物理量的取值。

算符和相应力学量的取值之间，是通过本征方程联系起来的。

力学量算符 \hat{F} 的本征方程，指下述类型方程

本征值 本征波函数

$$\hat{F} \Phi_\lambda = F_\lambda \Phi_\lambda$$

F_λ 称为力学量算符 \hat{F} 本征值。

Φ_λ 称为算符 \hat{F} 本征值为 F_λ 的本征函数。₄₃

本征值谱&本征函数系

$$\hat{F} \Phi_\lambda = F_\lambda \Phi_\lambda$$

本征值的集合 $\{F_\lambda\}$ — 本征值谱;

本征波函数的集合 $\{\Phi_\lambda\}$ — 本征函数系。

本征值可以取一系列分立的值，也可以取连续值。

如自由粒子能量:可取任意值。

• 能量本征值方程 $\hat{H}\Phi(\vec{r}) = E\Phi(\vec{r})$

本征值谱 $\{E_n, n=1,2,3,\dots\}$

本征波函数系 $\{\Phi_{En}, n=1,2,3,\dots\}$

★ 再论状态叠加原理

1) 如果 Ψ_1 和 Ψ_2 是体系的可能状态, 那么

$\Psi = c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2$ (c_1, c_2 是复常数) 也是体系的可能状态。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi$$

2) 态叠加原理的第二层含义

$\{\Phi_n\}$: 力学量 \hat{F} 的本征函数系 $\{F_n\}$ 本征值谱

任何状态都可以展开成这些本征态的叠加形式

$$\Psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \Phi_n(x) \quad \sum_{n=1}^{\infty} |C_n|^2 = 1$$

单次测量所得 F 的数值总是随机的（除非是 \hat{F} 的某个本征态），但必属本征值中的某一个 F_n ，测量到该本征值的概率

$|C_n|^2$ (处于 Φ_n 状态的概率)

测量完毕，即相应突变(塌缩)为该本征值的本征态。

对相同的系统(系综)多次重复实验时，力学量的平均值(期望值):

$$\bar{F} = \sum |C_n|^2 F_n$$

4-2. 测量假定(测量公设)

$\{\Phi_n(x)\}$: 力学量 \hat{F} 的本征函数系

根据叠加原理, 任何状态都可展开成这些本征态叠加

$$\Psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \Phi_n(x) \quad \sum_{n=1}^{\infty} |C_n|^2 = 1$$

单次测量所得 F 的数值总是随机的 (除非是 \hat{F} 的某个本征态), 但必属本征值中的某一个 F_n , 测量到该本征值的概率 $|C_n|^2$ (处于 Φ_n 状态的概率)

测量完毕, 即相应突变(塌缩)为该本征值的本征态。

对相同的系统(系综)多次重复实验时, 力学量的平均值(期望值):

$$\bar{F} = \sum |C_n|^2 F_n$$

$\{\Phi_n\}$: 力学量 \hat{F} 的本征函数系 $\{F_n\}$ 本征值谱

$$\hat{F} \Phi_n = F_n \Phi_n$$

本征波函数描述的状态是粒子的本征态。

如果粒子处于本征波函数 ϕ_n 对应的状态，则系统处于力学量 F 的本征态 (ϕ_n)。此时，系统 (粒子) 力学量 F 的取值是完全确定的，等于相应的本征值 F_n 。

接下来举几个典型的例子

- 1)说明量子力学解题的思路,
- 2)掌握量子力学给出的一些重要的结论。

本课程只讨论单粒子势函数 U 与时间无关的情况。

核心：求解单粒子一维定态薛定谔方程：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right] \Phi(x) = E \Phi(x)$$

能量本征值方程

• 定态波函数：

$$\Psi_E(x,t) = \Phi_E(x) T(t) = C \Phi_E(x) e^{-\frac{i}{\hbar} Et}$$

振动因子 与具体势函数无关

核心：求解单粒子一维定态薛定谔方程：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right] \Phi(x) = E \Phi(x)$$

能量本征值方程

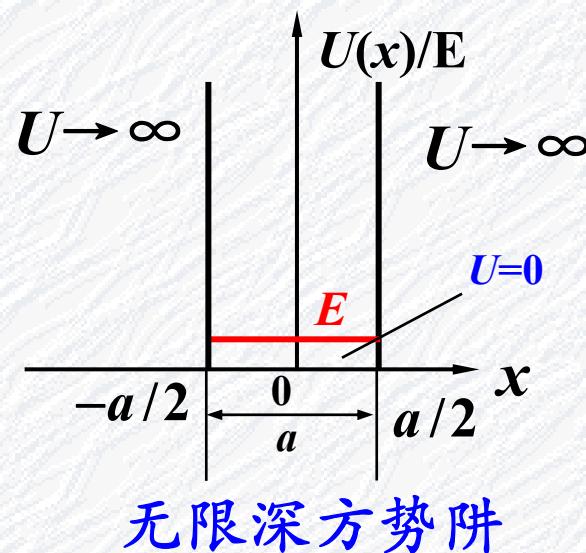
求解两类问题：

- 一类：给定势能函数 $U(x)$ ，求粒子的能量 E_n 的取值(本征值)和相应的本征波函数 $\Phi_n(x)$ — 结构问题；

能量本征值谱

能量本征函数系 (束缚态)

- 另一类：给定 $U(x)$ 和粒子能量 E ，求 $\Phi(x)$ — 散射问题。



金属中价电子，原子中电子，核中质子等限制在一定范围运动——束缚态。

如图，粒子能量 E 为束缚态。粒子只能束缚在宽为 a 的区域内。

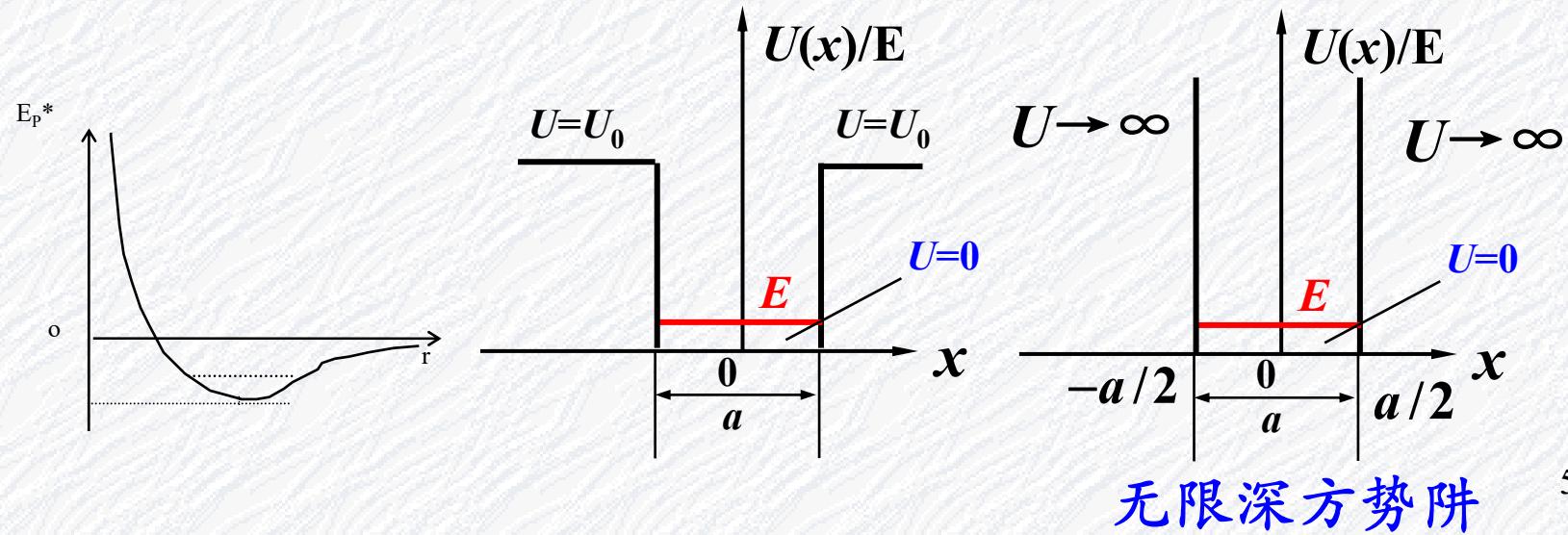


§ 27.3 无限深方势阱中的粒子

金属中价电子，原子中电子，核中质子等限制
在一定范围运动——束缚态。

一般势能曲线：取势能最低点为势能零点，
将势能曲线近似为抛物线；

再简化为矩形——方势阱，再简化为无限深方势阱。



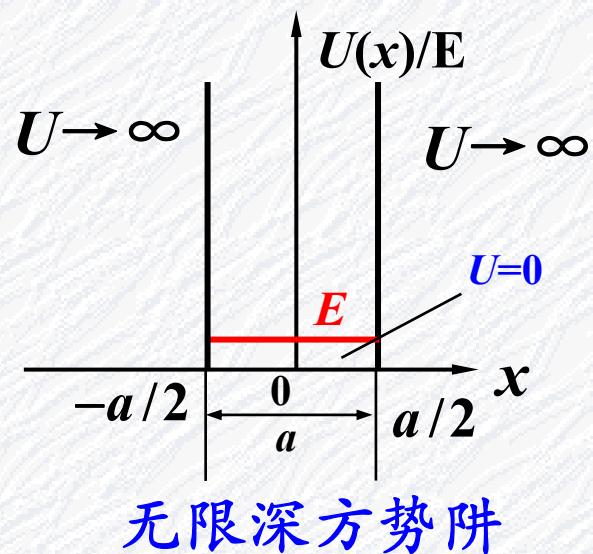
给定势能函数 $U(x)$, 求 E_n 和 $\Phi_n(x)$ – 结构问题。

1. 势函数

(束缚态)

$$|x| > a/2 \quad U(x) = \infty \quad |x| \leq a/2 \quad U(x) = 0$$

特点：



无限深方势阱

粒子在势阱内受力为零
势能为零
在阱内自由运动
在阱外势能为无穷大
在阱壁上受极大的斥力
不能到阱外

2. 哈密顿量

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x)$$

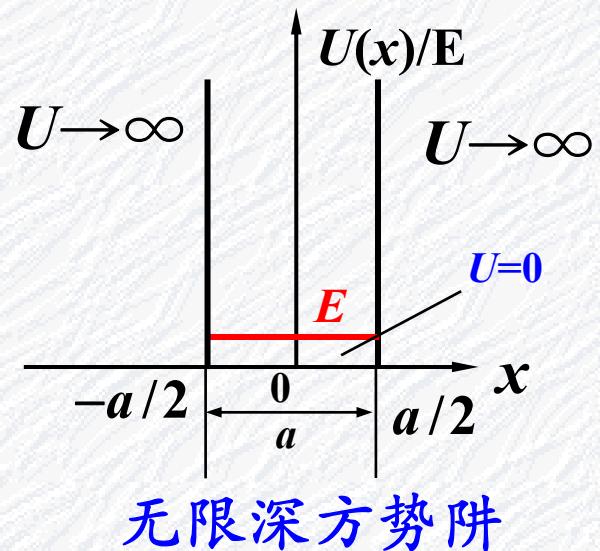
3. 定态薛定谔方程

阱外:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \infty \right] \Phi_2(x) = E \Phi_2(x)$$

能量本征值方程

阱内: $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Phi_1(x) = E \Phi_1(x)$



4. 分区求通解

1) 阈外 $\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \infty \right] \Phi_2(x) = E \Phi_2(x)$

根据波函数有限的条件

阱外

$$\Phi_2(x) = 0 \quad (x \geq a/2, x \leq -a/2)$$

2) 阈内

为了方便, 将波函数脚标及变量去掉。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Phi_1(x) = E \Phi_1(x) \rightarrow \frac{d^2 \Phi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \Phi$$

$$\because E \geq 0, \quad \therefore \text{可令} \quad (动能)$$

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2$$

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

通解: $\Phi(x) = A \sin(kx + \varphi)$

通解已自然满足单值, 有限的条件。

如何确定 A 、 φ & k ? 由 Φ 应满足的物理条件决定。

定 φ

$$\Phi(x) = A \sin(kx + \varphi)$$

连续条件：由于边界外 $\Phi=0$ ，所以有：

$$\Phi(-a/2) = 0 \rightarrow A \sin(-ka/2 + \varphi) = 0$$

$$\Phi(a/2) = 0 \rightarrow A \sin(ka/2 + \varphi) = 0$$

由此得： $-ka/2 + \varphi = l_1 \pi$ ， $ka/2 + \varphi = l_2 \pi$ ，

其中 l_1 和 l_2 是整数。将上两式相加得：

$$2\varphi = (l_1 + l_2)\pi \stackrel{\text{令}}{=} l\pi,$$

即 $\varphi = l \frac{\pi}{2}$, l 是整数

l 取0或1时 $\Phi(x)$ 有以下两种表示：

定 φ

$$\varphi = l \frac{\pi}{2}$$

$$\Phi(x) = A \sin(kx + \varphi)$$

▲ $l=0$ 时, $\varphi=0$, $\Phi_0 = A \sin kx$ 是奇函数

▲ $l=1$ 时, $\varphi=\pi/2$, $\Phi_e = A \cos kx$ 是偶函数

l 为其他整数值时, 所得解与 $\Phi_0(x)$ 、 $\Phi_e(x)$ 形式相同 (可能差正、负号, 但不影响 $|\Phi|^2$)。

5. 能量本征值 E 能量本征值谱

从能量的意义看, 应有 $E \geq 0$, 但能否 $E=0$ 呢? 在限定粒子的位置范围的情况下 (在势阱中), 由不确定关系知, 动量的不确定量应不为零,

$$E > 0 \quad k \neq 0$$

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2$$

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2$$

k的取值?

$$\Phi_0 = A \sin kx$$

$$\Phi_e = A \cos kx$$

能量 E 能连续吗?

由 $\Phi_0(\pm a/2) = A \sin(\pm ka/2) = 0$

$\rightarrow ka = n\pi, n = 2, 4, 6, \dots$ ($k \neq 0 \rightarrow n \neq 0$)

由 $\Phi_e(\pm a/2) = A \cos(\pm ka/2) = 0$

$\rightarrow ka = n\pi, n = 1, 3, 5, \dots$

两者合并在一起, 可得

$$ka = n\pi, n = 1, 2, 3, 4, 5, \dots$$

由 $\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2 = \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2$

能量本征值谱

得

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

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

能量本征值谱

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

束缚态：能量量子化

✓ 能量取离散值 E_n (能级)

—— 能量量子化(能谱是离散谱)

n 称为量子数

✓ 最低能量(基态能量)

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} > 0$$

波动性的表现 —— 零点能

E 不能为零

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

✓ 能级分布的不均匀性

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (2n+1)$$

$$E_n \propto n^2, \quad \Delta E_n \approx \frac{\hbar^2 \pi^2}{ma^2} n$$

$n \gg 1$

$$n \uparrow \rightarrow \frac{\Delta E_n}{E_n} \downarrow$$

$$\left. \begin{array}{c} a \uparrow \\ m \uparrow \end{array} \right\} \rightarrow \Delta E_n \downarrow,$$

宏观情况或量子数很大时，可认为能量连续。

6. 定态波函数 Ψ

$$ka = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, 4, 5, \dots$$

(1) 本征函数系

$$\Phi_0 = A \sin kx = A \sin \frac{n\pi}{a} x = \Phi_{0n} \quad (n = 2, 4, 6, \dots)$$

$$\Phi_e = A \cos kx = A \cos \frac{n\pi}{a} x = \Phi_{en} \quad (n = 1, 3, 5, \dots)$$

归一化条件：

$$1 = \int_{-a/2}^{a/2} |\Phi_{0n}|^2 dx = A^2 \int_{-a/2}^{a/2} \sin^2 \left(\frac{n\pi}{a} x \right) dx = \frac{a}{2} A^2$$

由此得

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

能量本征函数系

$$\left\{ \begin{array}{l} \Phi_{on} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x \quad (n = 2, 4, 6, \dots) \\ \Phi_{en} = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{n\pi}{a} x \quad (n = 1, 3, 5, \dots) \\ \Phi = 0 \end{array} \right. \begin{array}{l} |x| \leq \frac{a}{2} \\ |x| > \frac{a}{2} \end{array}$$

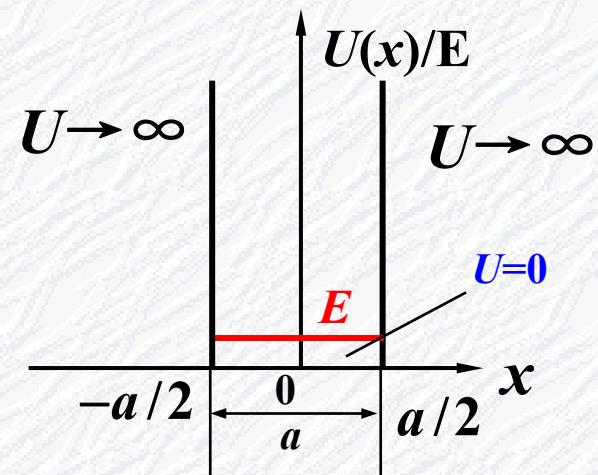
$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2$$

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

能量本征值谱

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Phi_1(x) = E \Phi_1(x)$$

能量本征值方程



无限深方势阱

$$\left. \begin{array}{l} \Phi_{\text{o}n} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x \quad (n=2,4,6,\dots) \\ \Phi_{\text{e}n} = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{n\pi}{a} x \quad (n=1,3,5\dots) \end{array} \right\} |x| \leq \frac{a}{2}$$

(2) 能量本征波函数(定态波函数)

考慮振动因子有 $\Psi_n(x,t) = \Phi_n(x) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$

$$\Psi = A e^{-i(\varphi \mp kx)} \cdot e^{-i\omega t} \quad (\text{驻波解})$$

(3) 概率密度: $|\Psi_n(x,t)|^2 = |\Phi_n(x)|^2$

✓ 德布罗意波长

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2 \rightarrow \sqrt{2mE} = \hbar k$$

由能量、动量关系 $p_n = \sqrt{2mE_n} = \hbar k$

德布罗意关系 $p = \frac{\hbar}{\lambda} = \hbar k$

波矢量

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \hat{n}$$

$$ka = n\pi$$

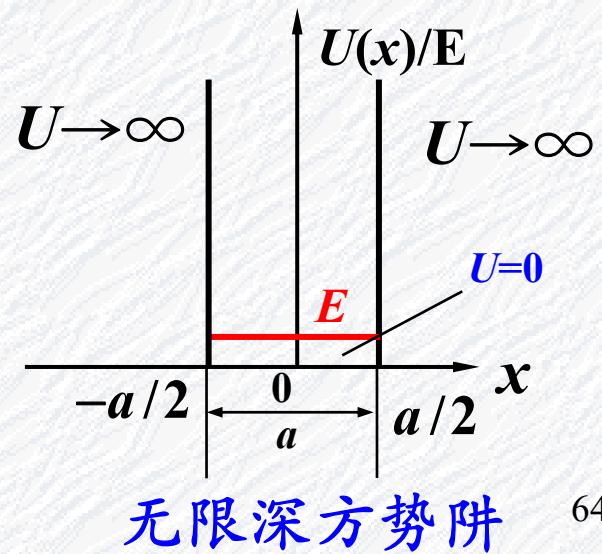
$$\lambda_n = \frac{2a}{n}$$

德布罗意波长

每一个能量本征态，

对应于德布罗意波的一个特定波长的驻波。

波长量子化



无限深方势阱

64

小结：本征能量和本征函数的可能取值

能量本征值谱

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

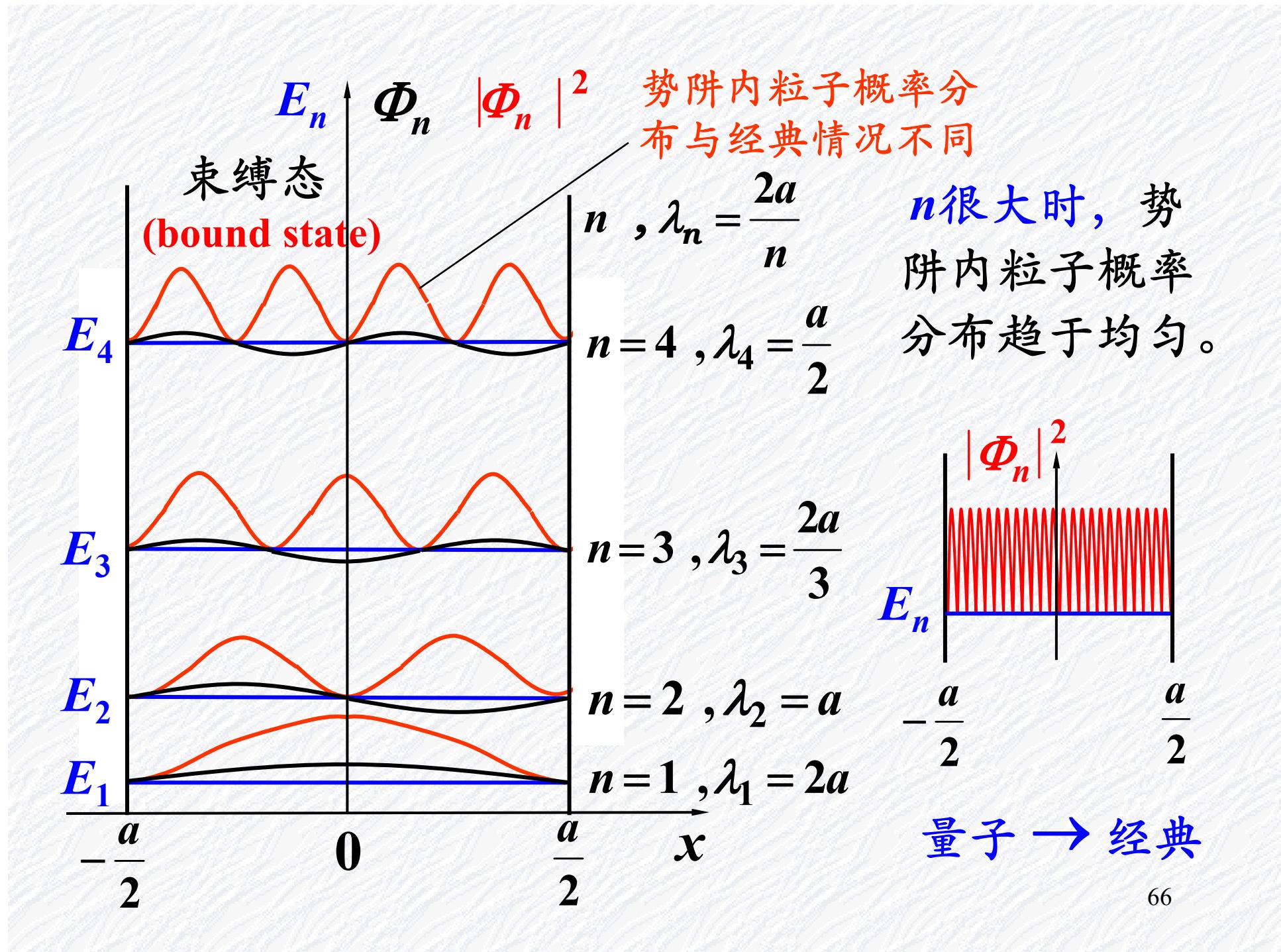
$$\Phi_{on} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x \quad (n = 2, 4, 6, \dots)$$

能量本征函数系 阵内

$$\Phi_{en} = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{n\pi}{a} x \quad (n = 1, 3, 5, \dots)$$

n	E_n	Φ_n	$ \Phi_n ^2$
基态 1	$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$	$\Phi_1 = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{\pi}{a} x$	$\frac{2}{a} \cos^2 \frac{\pi x}{a}$
第1激发态 2	$E_2 = 4E_1$	$\Phi_2 = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{2\pi}{a} x$	$\frac{2}{a} \sin^2 \frac{2\pi x}{a}$
第2激发态 3	$E_3 = 9E_1$	$\Phi_3 = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{3\pi}{a} x$	$\frac{2}{a} \cos^2 \frac{3\pi x}{a}$

阱外 $\Phi_2(x) = 0$



[例] 在阱宽为 a 的无限深势阱中，粒子处于基态和第一激发态的叠加态：

$$\Psi_{12}(x,t) = \frac{1}{2} \Psi_1(x,t) + \frac{\sqrt{3}}{2} \Psi_2(x,t)$$

(1) $\Psi_{12}(x,t)$ 是定态吗？ 叠加态的概率分布 $P(x,t)$

(2) 在 $\Psi_{12}(x,t)$ 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？

$$\Psi_n(x,t) = \Phi_n(x) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 \quad \Phi_{on} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x \quad \Phi_{en} = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{n\pi}{a} x$$

4. 测量假定(测量公设)

$\psi_n(x)$: 力学量 \hat{F} 的本征函数系

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

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

(1) $\Psi(x,t)$ 是定态吗?

$$\Psi_{12}(x,t) = \frac{1}{2} \Psi_1(x,t) + \frac{\sqrt{3}}{2} \Psi_2(x,t)$$

单次测量所得 F 的数值总是随机的（除非是的某个本征态），但必属本征值中的某一个 F_n ，测量到该本征值的概率 $|C_n|^2$ (处于 Ψ_n 状态的概率)

测量完毕，即相应突变(塌缩)为该本征值的本征态。

对相同的系统(系综)多次重复实验时，力学量的平均值(期望值):

$$\bar{F} = \sum |C_n|^2 F_n$$

(1) 叠加态的概率分布 $P(x,t)$ 教材P361例27.3

$$\Psi_{12}(x,t) = \frac{1}{2}\Psi_1(x,t) + \frac{\sqrt{3}}{2}\Psi_2(x,t)$$

$$\Psi_1(x,t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{\pi}{a}x\right) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t}$$

$$\Psi_2(x,t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}$$

$$P_{12}(x,t) = |\Psi_{12}(x,t)|^2 = \Psi^{*}_{12}(x,t) \cdot \Psi_{12}(x,t)$$

$$= \frac{1}{2a} \cos^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) + \frac{3}{2a} \sin^2\left(\frac{2\pi}{a}x\right)$$

$$+ \frac{\sqrt{3}}{a} \cos\left(\frac{\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) \cos[(E_2 - E_1)t/\hbar]$$

$$\Phi_{on} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

$$\Phi_{en} = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

$$\boxed{\Psi_n(x,t) = \Phi_n(x) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}}$$

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

$$\Psi_{12}(x,t) = \frac{1}{2}\Psi_1(x,t) + \frac{\sqrt{3}}{2}\Psi_2(x,t)$$

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

(2) 在 $\Psi(x,t)$ 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？

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad E_2 = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{ma^2}$$

$$P_{E_1} = \frac{1}{4} \quad P_{E_2} = \frac{3}{4}$$

$$\bar{E}_{12} = \frac{1}{4} \times \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} + \frac{3}{4} \times \frac{2\pi^2 \hbar^2}{ma^2} = \frac{13\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}$$



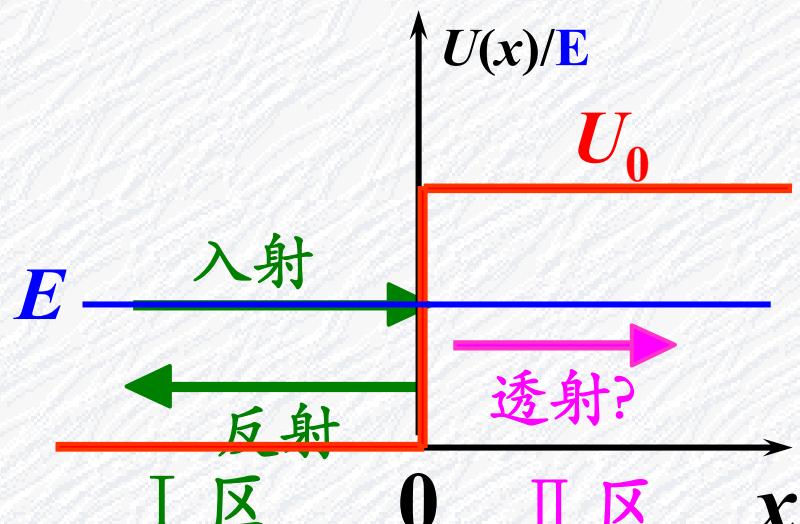
§ 27.4 势垒穿透 (barrier penetration)

一、粒子进入势垒

1. 势函数

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

讨论入射能量 $E < U_0$ 情况



Φ_1

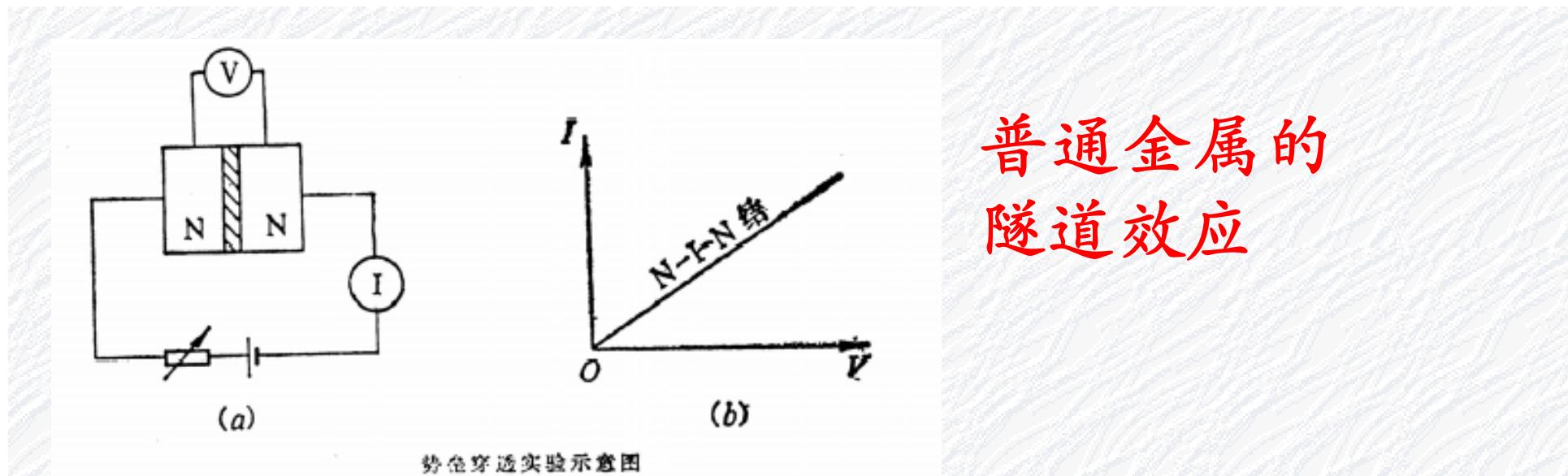
Φ_2

势垒举例

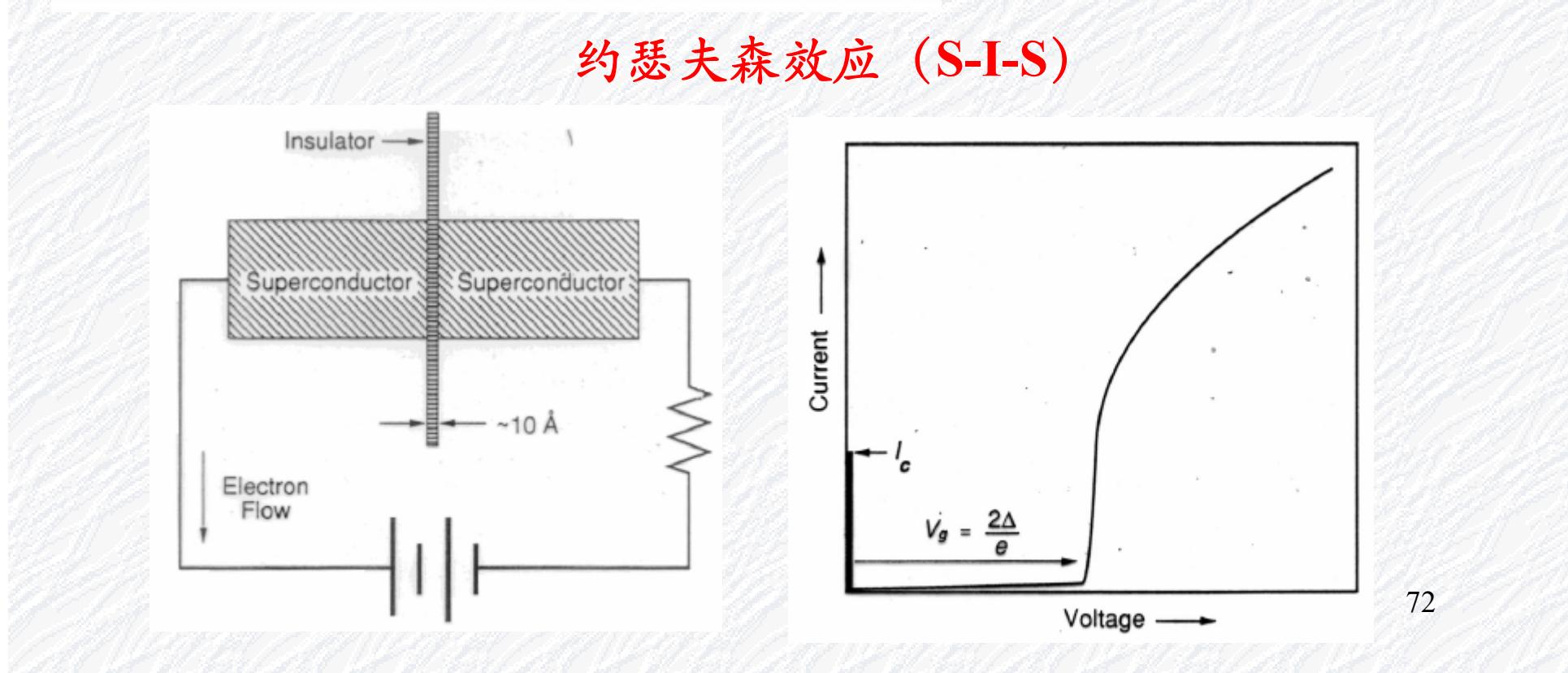
两块金属间夹一绝缘层

入射粒子能量为 E 的本征态问题

给定 $U(x)$ 和粒子能量 E ，求
 $\Phi(x)$ — 散射问题。



普通金属的
隧道效应



2. 定态薛定谔方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right] \Phi(x) = E \Phi(x)$$

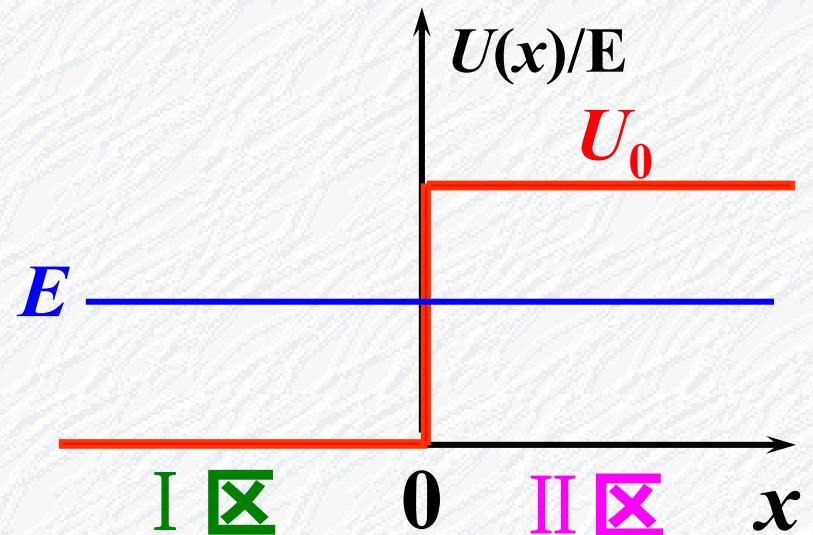
I 区

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Phi_1(x)}{dx^2} = E \Phi_1(x) \quad x \leq 0$$

令 $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

方程为

$$\frac{d^2 \Phi_1(x)}{dx^2} + k^2 \Phi_1(x) = 0 \quad x \leq 0$$



II 区

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Phi_2(x)}{dx^2} + U_0 \Phi_2(x) = E \Phi_2(x) \quad x > 0$$

$$\frac{d^2\Phi_2(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) \Phi_2(x) = 0 \quad x > 0$$



令 $\frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) = -\beta^2 \quad \beta > 0$

$$\frac{d^2\Phi_2(x)}{dx^2} - \beta^2 \Phi_2(x) = 0 \quad x > 0$$

3.薛定谔方程通解

$$\Psi_E(x,t) = C\Phi_E(x) e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

I 区

$$\frac{d^2\Phi_1(x)}{dx^2} + k^2\Phi_1(x) = 0 \quad x \leq 0$$

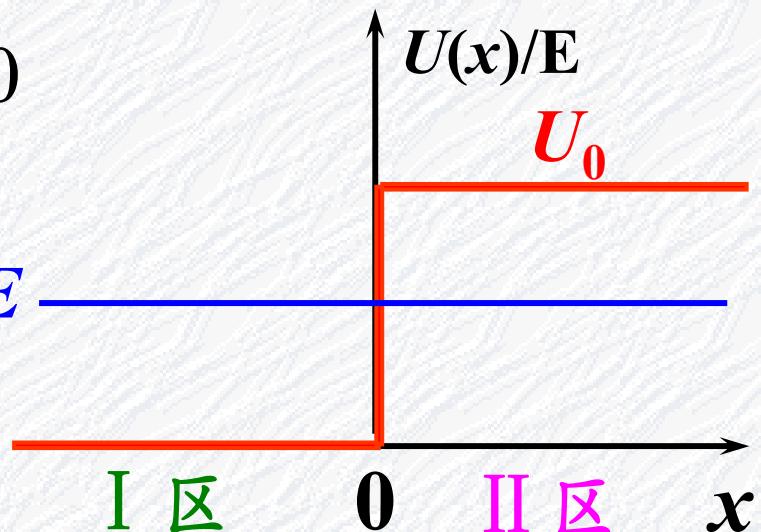
通解 $\Phi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$
(入射波)(反射波)

II 区

$$\frac{d^2\Phi_2(x)}{dx^2} - \beta^2\Phi_2(x) = 0 \quad x > 0$$

通解 $\Phi_2(x) = Ce^{-\beta x} + De^{\beta x}$

指数增加和衰减



II区

通解

考虑物理上的要求

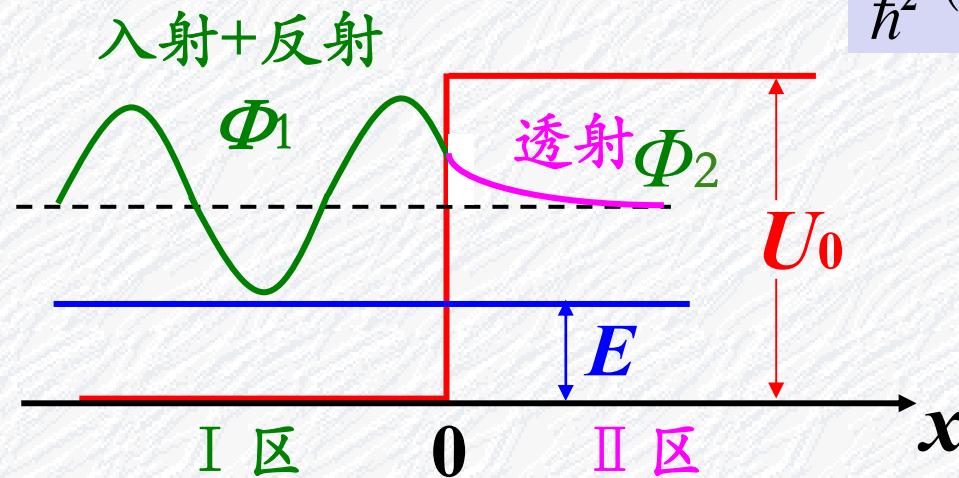
$$\Phi_2(x) = Ce^{-\beta x} + De^{\beta x}$$

当 $x \rightarrow \infty$ 时 $\Phi_2(x)$ 应有限

所以 $D = 0$

于是 $\Phi_2(x) = Ce^{-\beta x} = Ce^{-\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}x}$

$$\frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0) = -\beta^2$$



4. 概率密度 ($x > 0$ 区)

本征波函数 $\Phi_2(x) = Ce^{-\beta x} = Ce^{-\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}x}$

概率密度 $|\Phi_2(x)|^2 \propto e^{-2\beta x}$

$$|\Phi_2(x)|^2 \propto e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}x}$$

$x > 0$ 区 ($E < U_0$) 粒子出现的概率 $\neq 0$

$U_0 \uparrow \quad x \uparrow \Rightarrow$ 概率 \downarrow

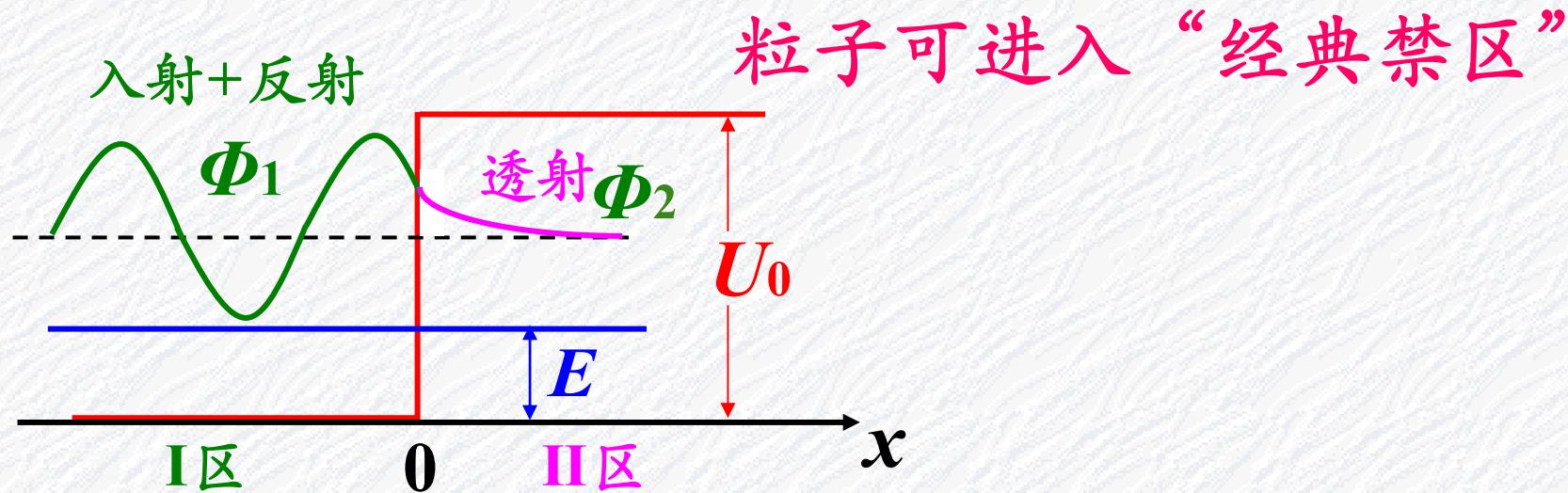
经典：电子不能进入 $E < U$ 的区域(因动能<0)

量子：电子可透入势垒 “经典禁区”

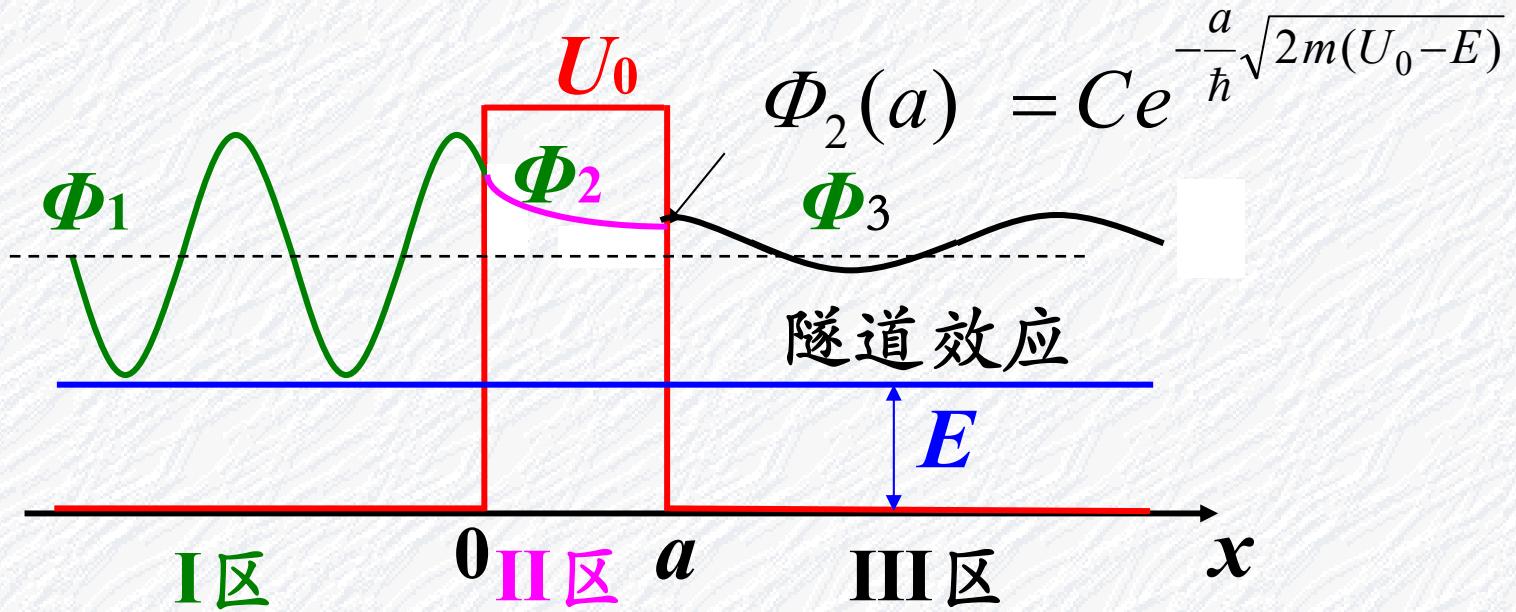
若势垒宽度不大,如金属表面：

电子可逸出金属表面，

在金属表面形成一层电子气。

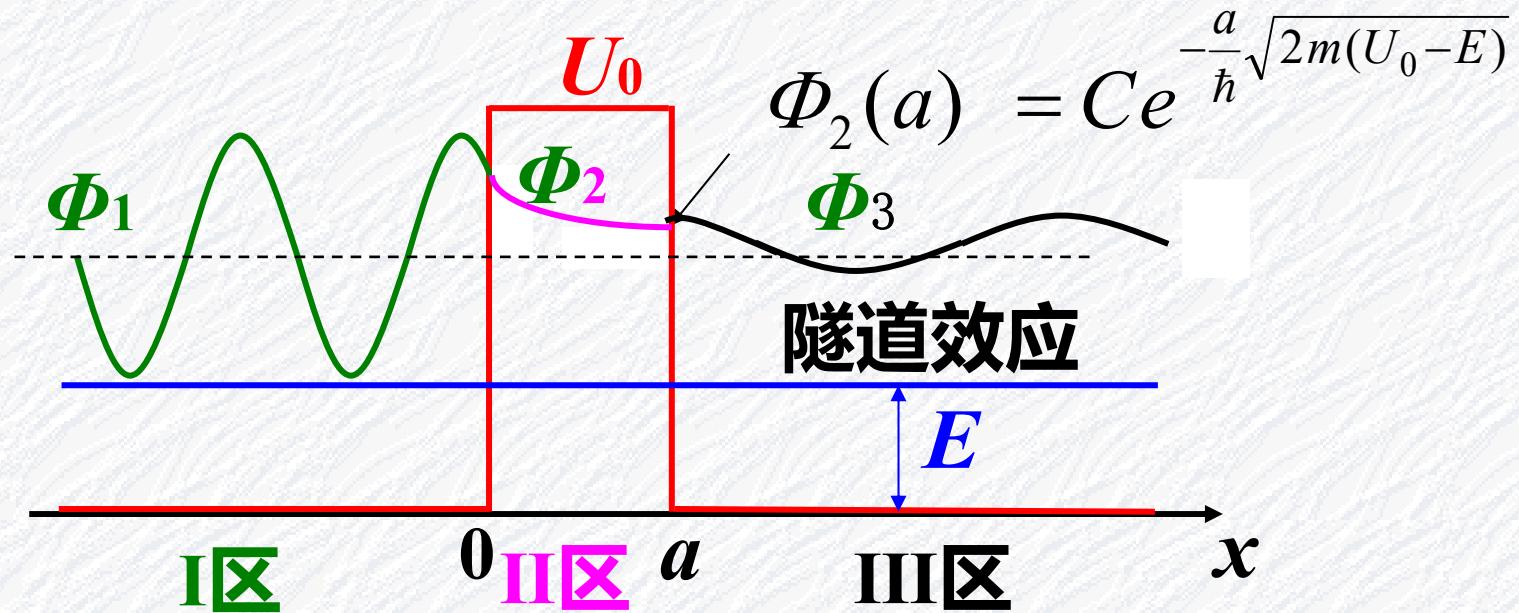


二、有限宽势垒和隧道效应



$$\Phi_2(x) = Ce^{-\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}x}$$

$$x = a \quad \Phi_2(a) = Ce^{-\frac{a}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}}$$

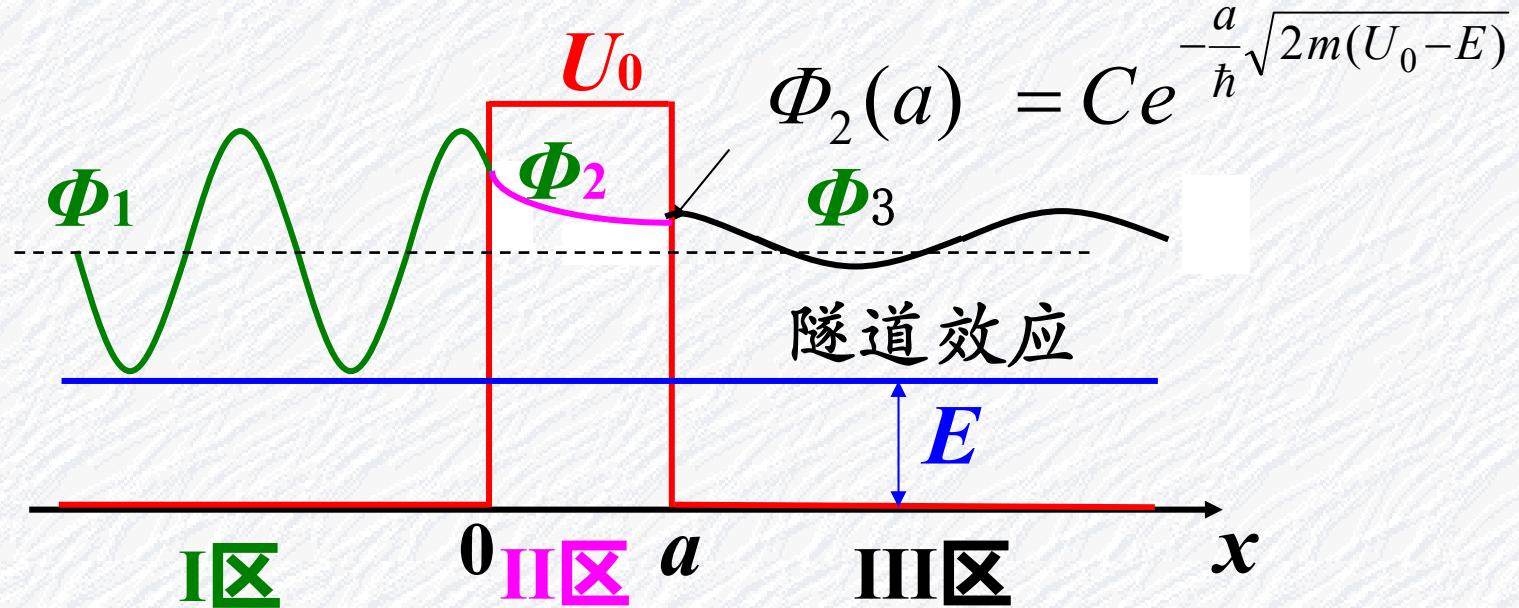


波穿过势垒后，将以平面波的形式继续前进

振幅为 $\Phi_2(a)$

粒子这种可穿透经典禁区的现象，

称为势垒穿透或隧道效应。



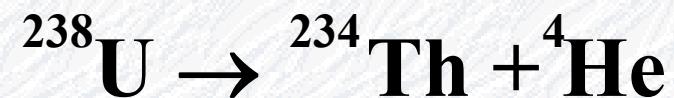
$$(U_0 - E) \uparrow \quad a \uparrow \Rightarrow \text{概率} \downarrow$$

当 $U_0 - E = 5 \text{ eV}$, 势垒宽度 a 约 **50nm** 以上时,
穿透概率已经基本为**0**。此时隧道效应在实际
上已没有意义了, 量子概念过渡到了经典。

三、隧道效应的应用

隧道二极管、金属场致发射、核的 α 衰变...

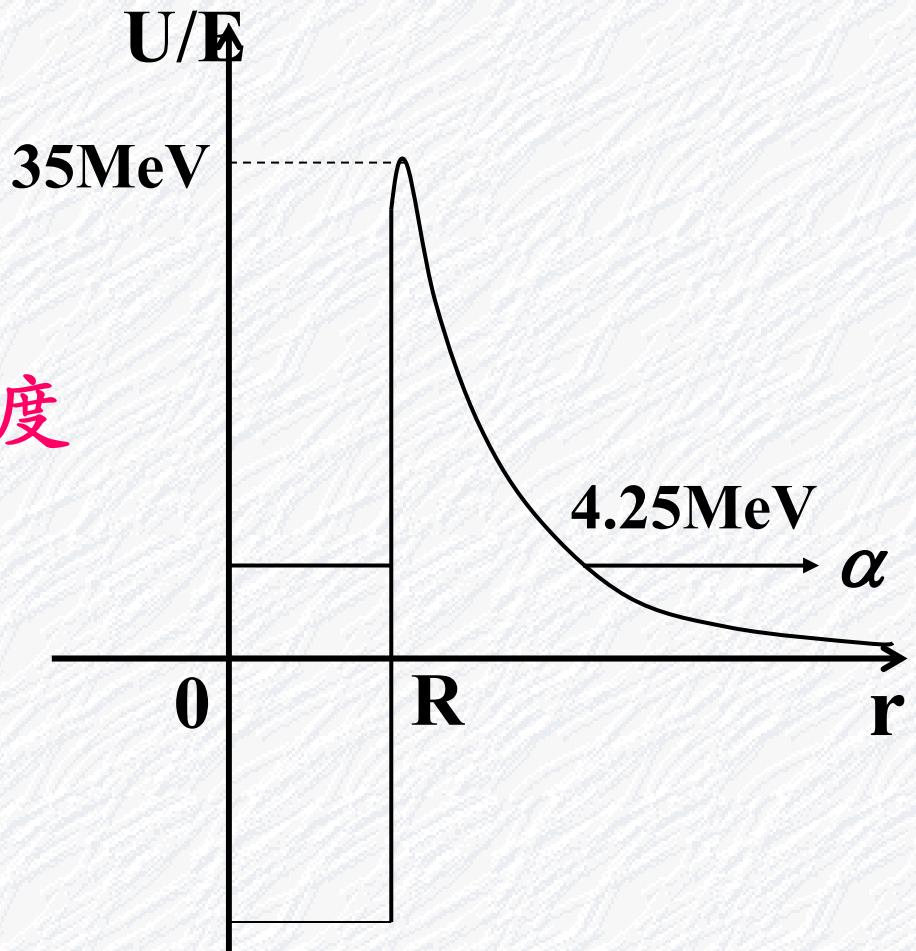
1. 核的 α 衰变



$$E_\alpha = 4.25 \text{ MeV} << \text{势垒高度}$$

α 粒子怎么过去的呢?
通过隧道效应出来的。

对不同的核算出的衰变
概率和实验一致。



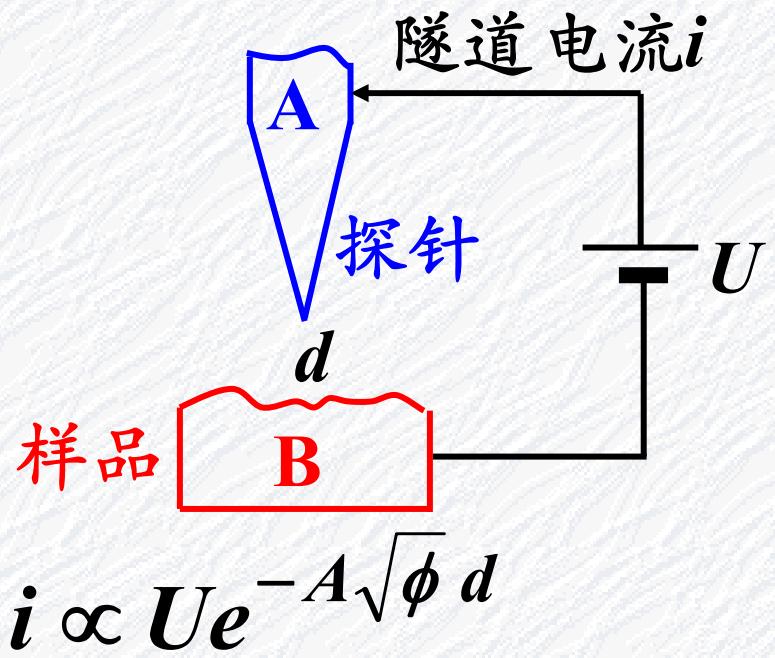
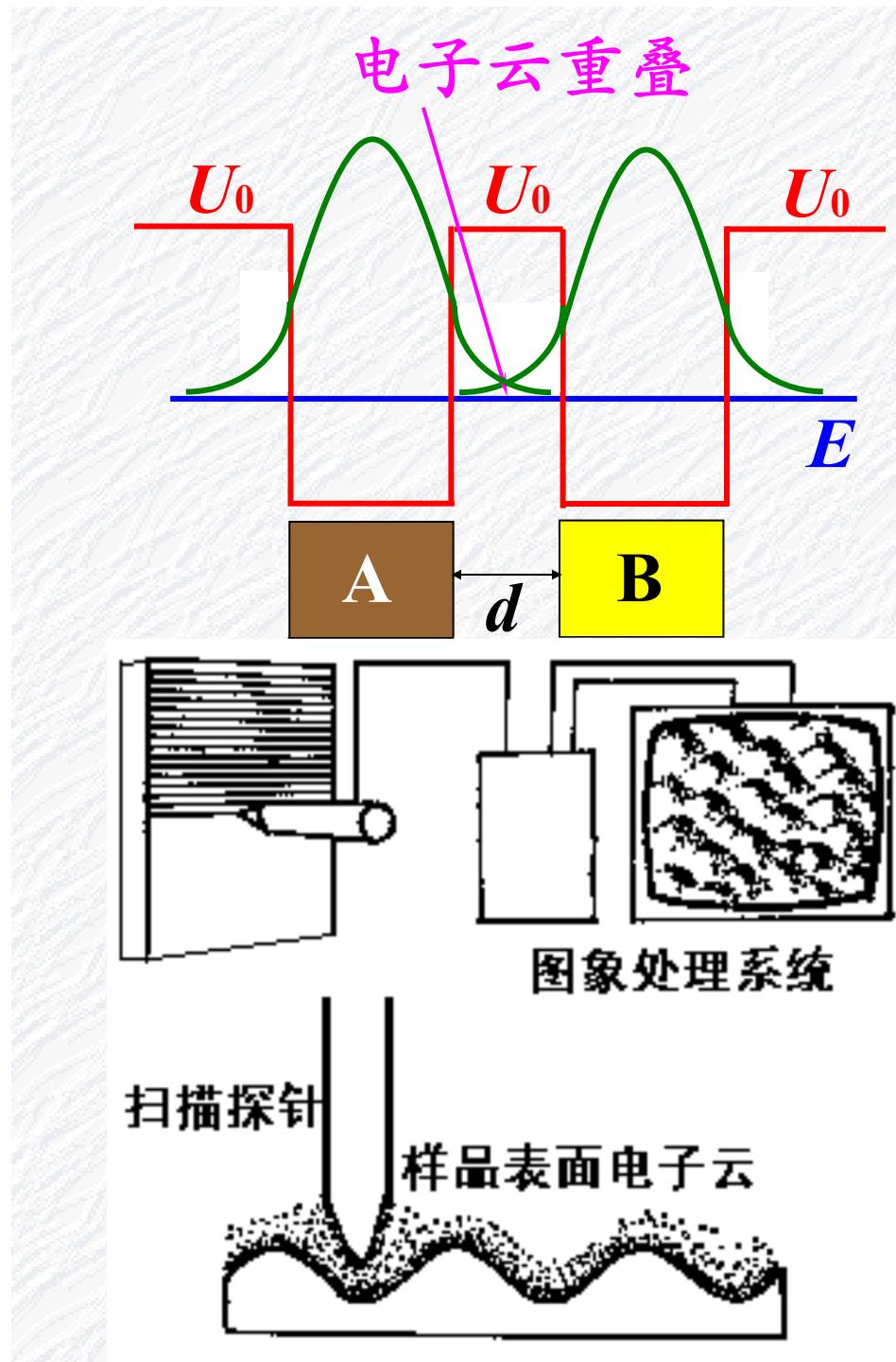
2. 扫描隧道显微镜 (STM) (Scanning Tunneling Microscopy)

1986年的诺贝尔物理奖
获奖者：

宾宁 (G.Binning) } 1981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

ϕ — 样品表面平均势垒高度 (\sim eV)

$$d \sim 10 \text{ \AA}$$

d 变 $\longrightarrow i$ 变
反映表面情况

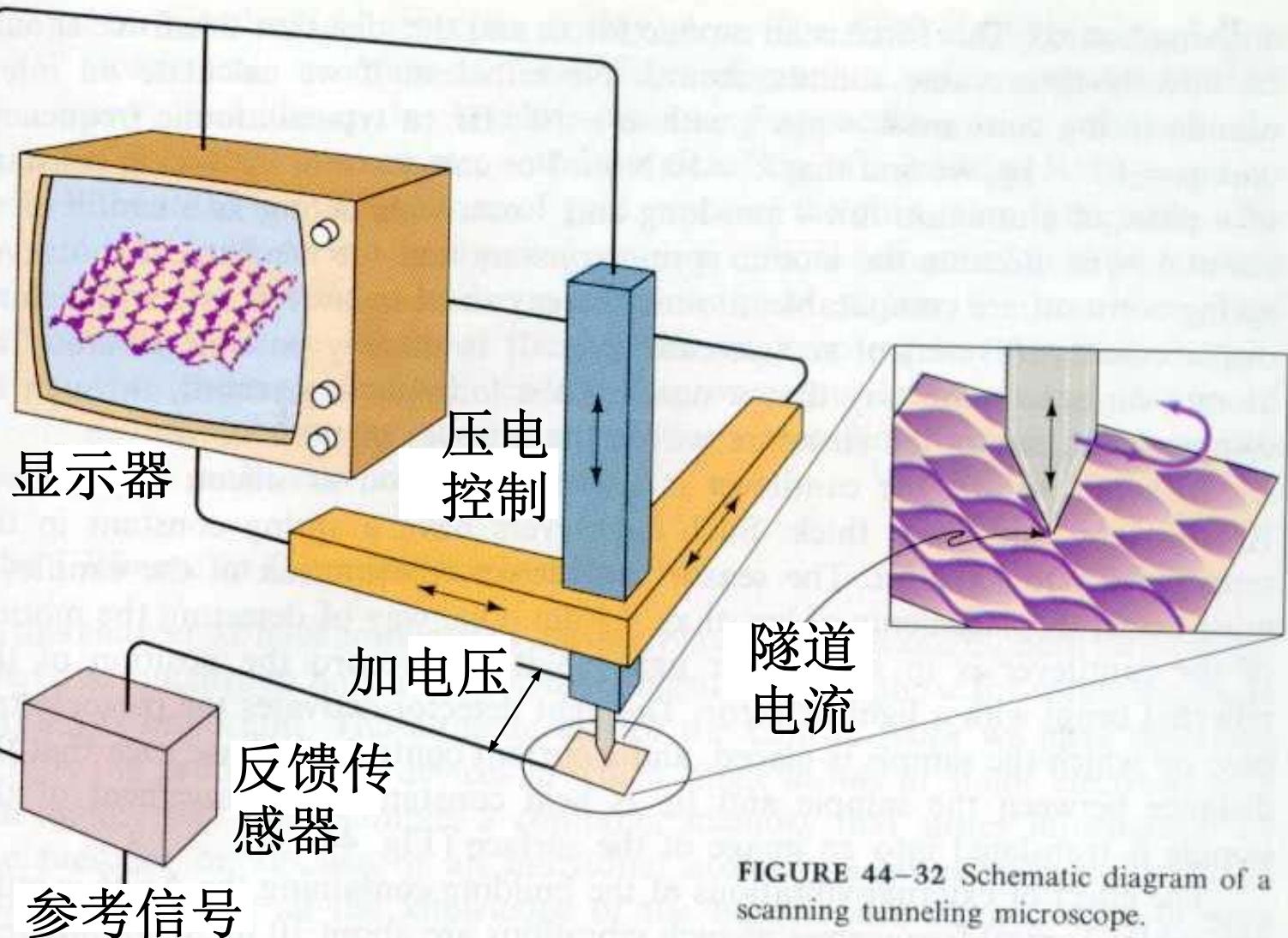
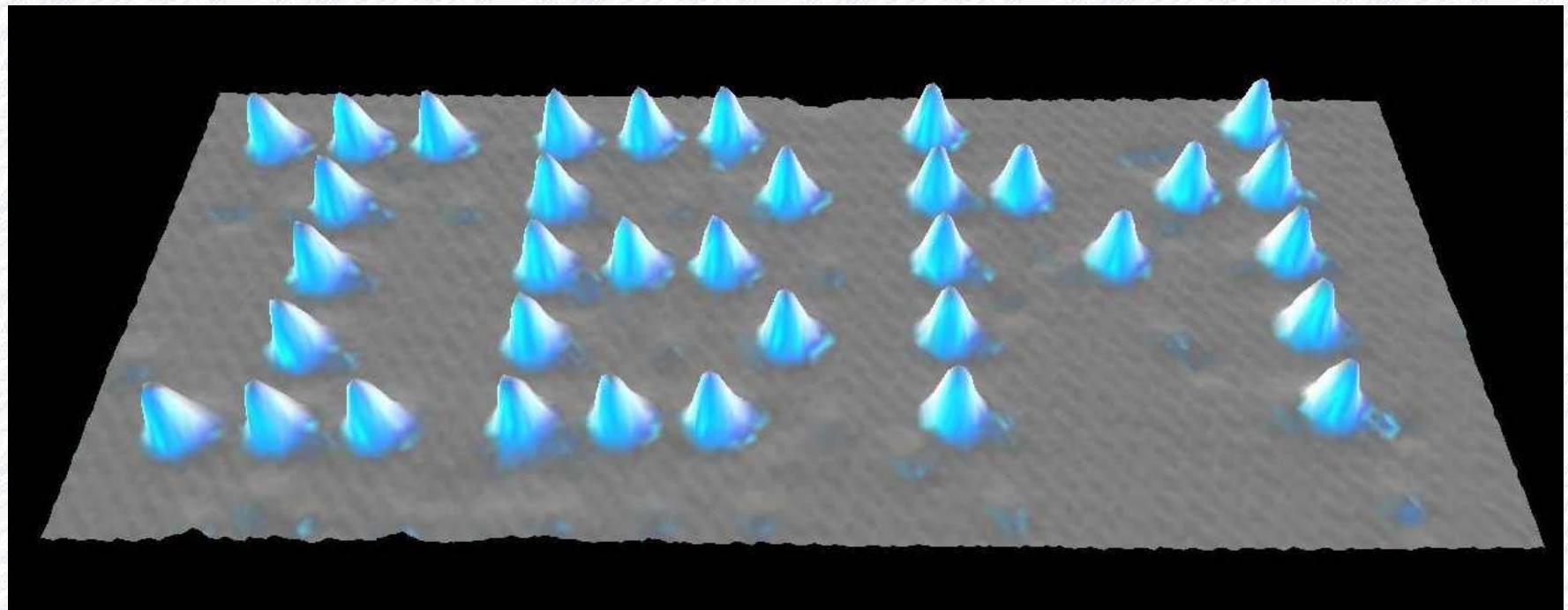
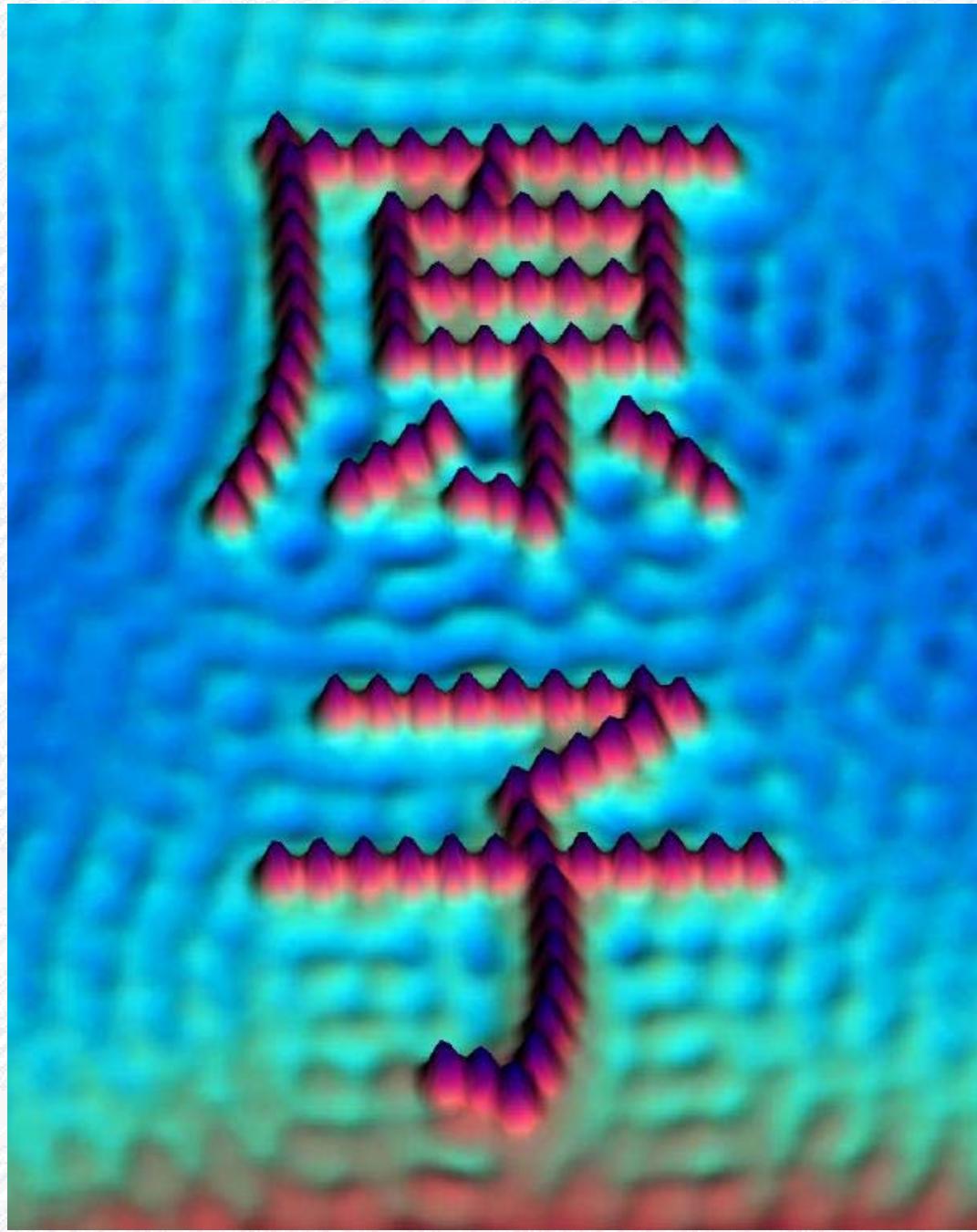


FIGURE 44–32 Schematic diagram of a scanning tunneling microscope.

扫描隧道显微镜示意图

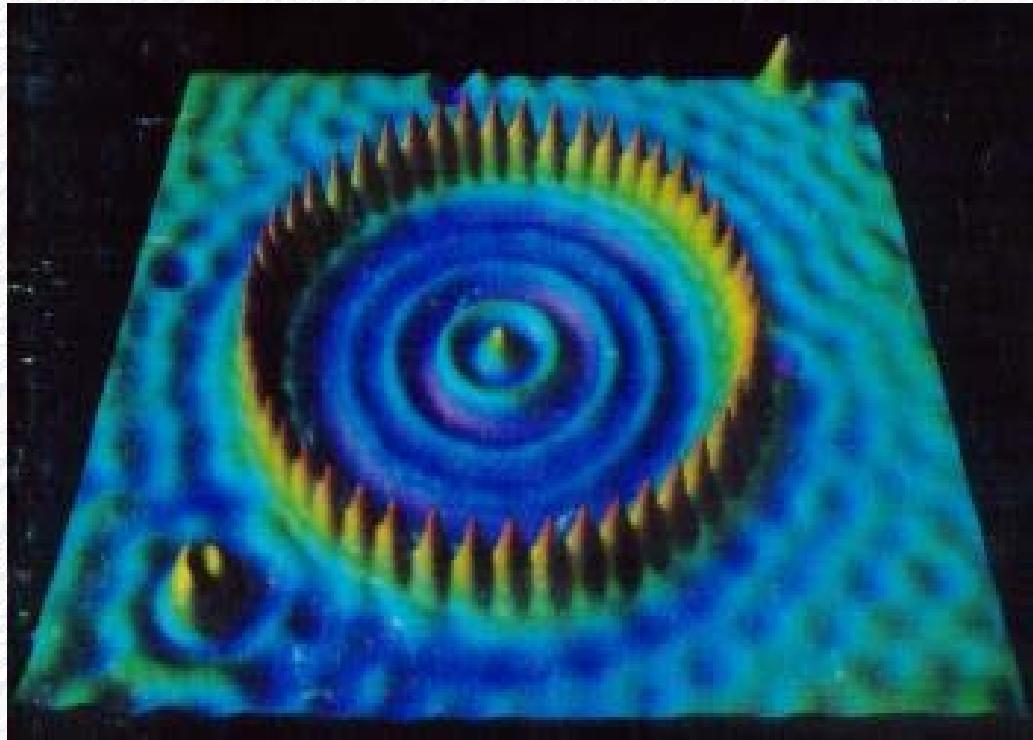
1991年 恩格勒等用STM在镍单晶表面逐个移动氙原子拼成了字母IBM，每个字母长5纳米，







用STM得到的神经细胞象



1993年第一次实验上看到定态波函数：电子在Fe原子上强烈反射，被禁锢在这个“量子围栏”中，

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

扫描隧道显微镜（截选1）.MPG

3. 黑洞

- 黑洞边界是物质(包括光)只能进，不能出的“单向壁”；

对黑洞内的物质来说，“单向壁”就是一个绝高的势垒；黑洞内的物质可通过隧道效应逸出(教材p364, 理论物理学家霍金观点)

--- 黑洞蒸发

4. 热核反应

- 释放的核能：来自两个带正电的核(如 ^2H 和 ^3H)的聚合，两核间的库仑斥力作用相当于一高势垒；

^2H 和 ^3H 通过隧道效应聚合到一起：

核的能量越大，势垒高度越小，聚合的概率越大。

这是热核反应需 10^8K 的高温的原因。

27.3 在如图27.2所示的无限深斜底势阱中有一粒子。

试示意画出它处于 $n = 5$ 的激发态时的波函数曲线。

解：由于粒子动能 $E_k = E - U$ ，而粒子的德布罗意波长 $\lambda = h/p$ 若势阱底升高，则 E_k 减小，所以 λ 增大。同时由于 E_k 减小，速度也减小，粒子出现的概率就会增大，因而波函数振幅应增大。又，在边界处若势垒有限，则波函数曲线有可能进入势阱之外（隧道效应）。

再者，根据一维无限深方势阱中粒子的波函数曲线可知，第 n 激发态的曲线和X轴有 $n - 1$ 个交点（两端除外）。根据这些原则，作出如图27.2中的波函数曲线。

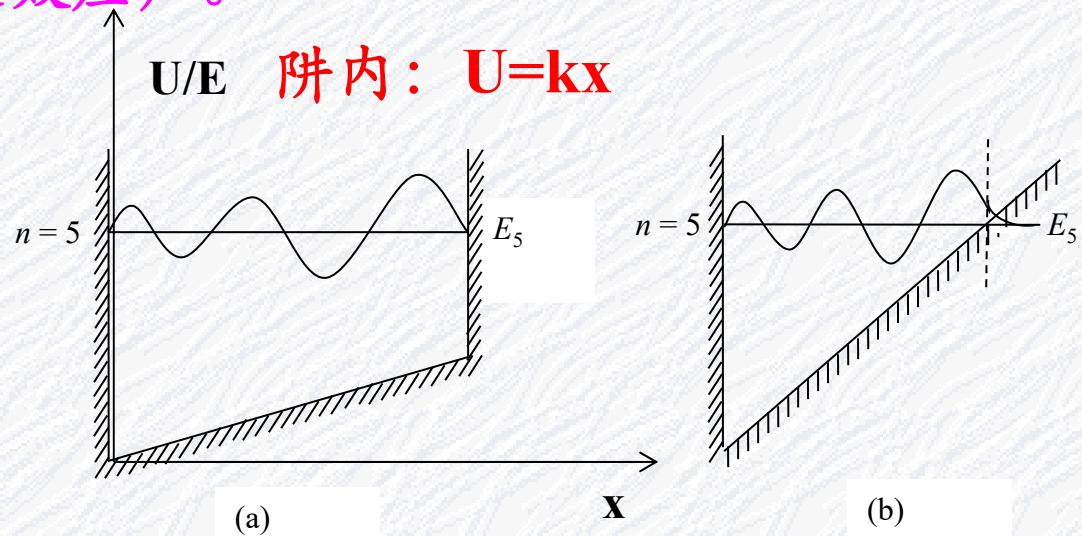
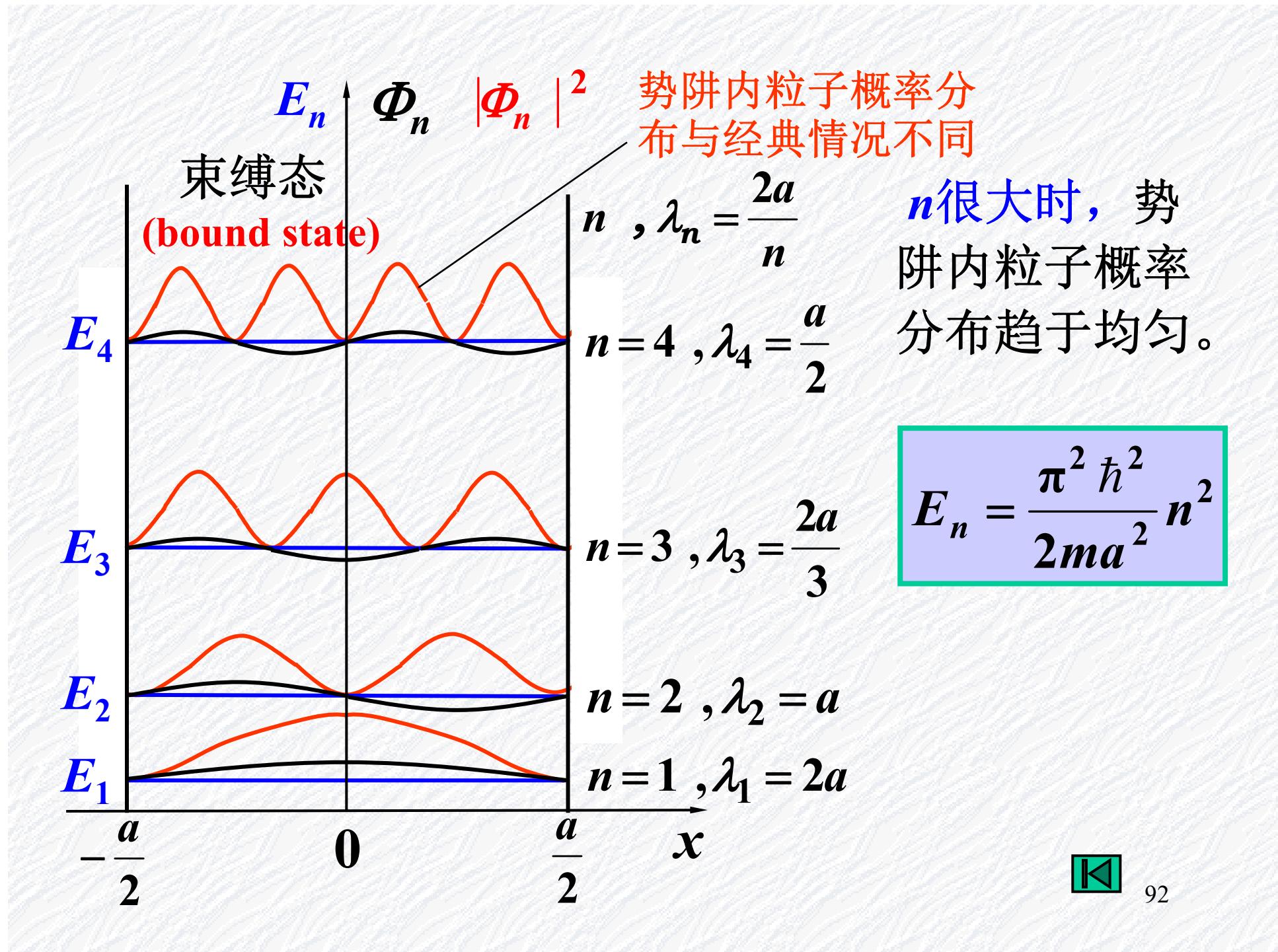


图27.2 习题27.3解用图



§ 27.5 一维谐振子

单粒子系统

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。

1. 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：

$$U(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad m \text{ — 粒子的质量}$$

k — 谐振子劲度系数

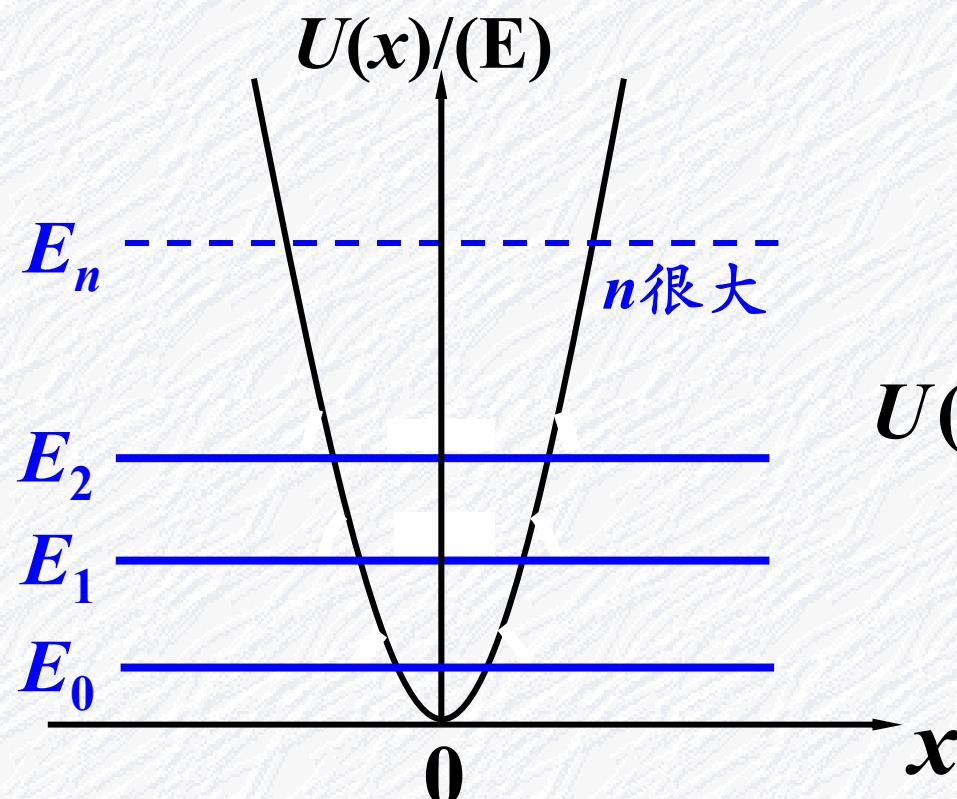
谐振子的固有角频率 $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$

给定势能函数 $U(x)$, 求 E_n 和 $\Phi_n(x)$ —— 结构问题

能量本征值谱

(束缚态) 能量本征函数系

一定的能量: 粒子的运动限制在一定范围。



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

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right] \Phi(x) = E \Phi(x)$$

2. 谐振子的能量本征方程(定态薛定方程)

由 $\frac{d^2 \phi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x)] \phi = 0$ 和 $U(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$

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

3. 能量本征值 解能量本征方程

能量本征值谱

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

$$E_0 = \frac{1}{2} h \nu, \quad E_1 = \frac{3}{2} h \nu, \quad E_2 = \frac{5}{2} h \nu, \dots$$

$$\boxed{\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}}$$

ν : 谐振子的固有频率

能量特点：

能量本征值谱

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) h\nu,$$

(1) 量子化，等间距： $\Delta E = h\nu$

分子振动 $\Delta E \sim (10^{-2} - 10^{-1} \text{ eV}) > kT$ (室温)，

所以室温下分子可视为刚性。

(2) 有零点能： $E_0 = \frac{1}{2} h\nu$

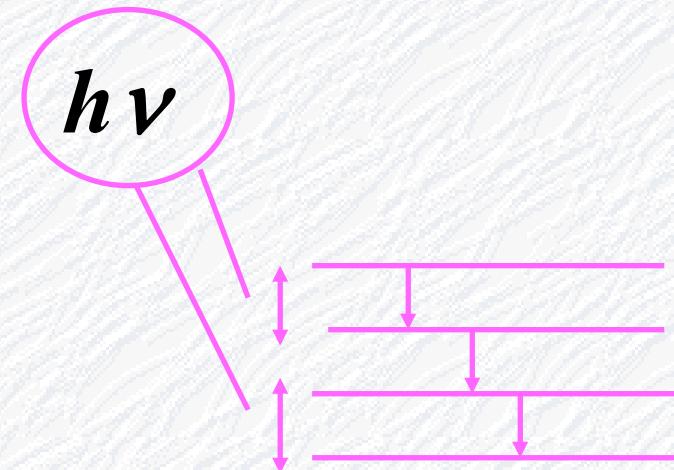
(3) 当 $n \rightarrow \infty$ 时， $\frac{\Delta E}{E_n} \rightarrow 0$ ，能量量子化 \rightarrow 能量连续

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

(4) 跃迁有选择定则： $\Delta n = \pm 1$

- 跃迁只能逐级进行

各跃迁发出的频率相同
只有一条谱线。



ν : 谐振子的固有频率

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

4. 谐振子的能量本征函数

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

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

$$\phi_0(x) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \right)^{1/2} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$$

$$\phi_1(x) = \left(\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}} \right)^{1/2} \cdot 2(\alpha x) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$$

$$\phi_2(x) = \left(\frac{\alpha}{8\sqrt{\pi}} \right)^{1/2} [4(\alpha x)^2 - 2] e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$$

⋮

⋮

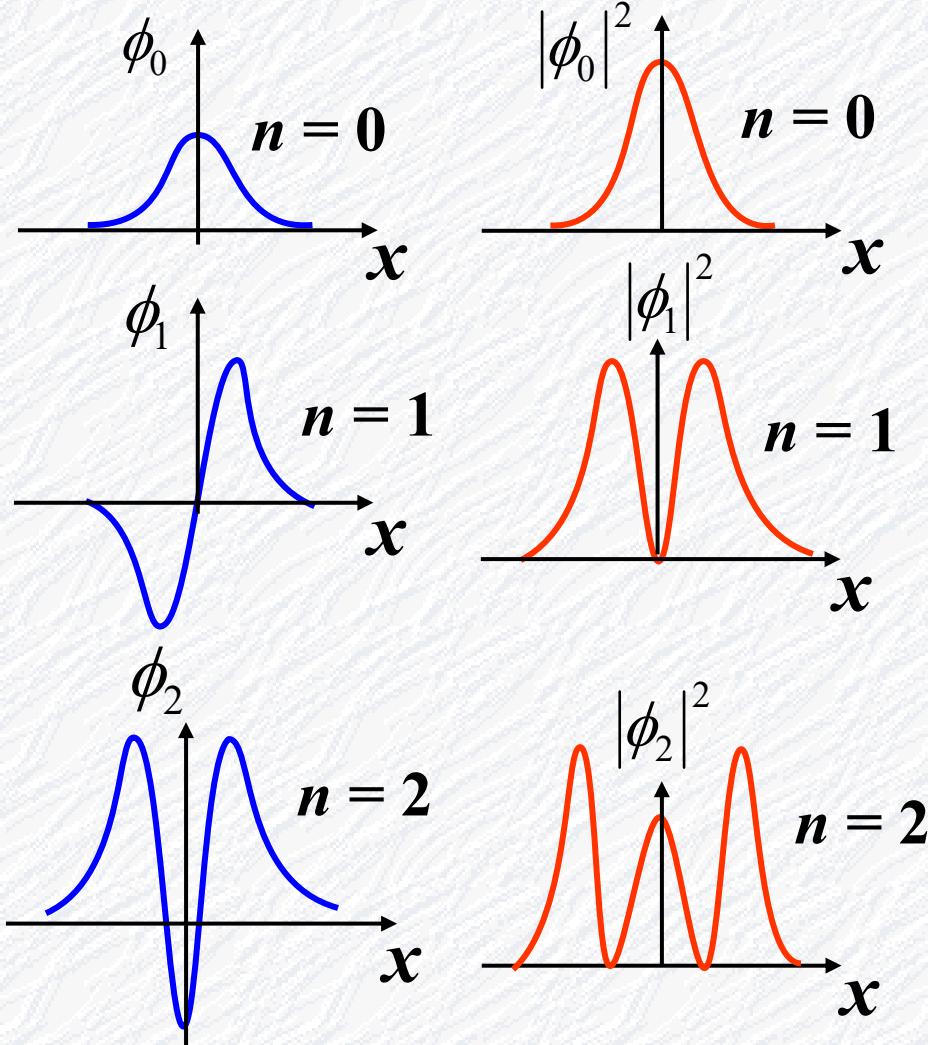
能量本征波函数

$$\Psi_n(x, t) = \Phi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$$

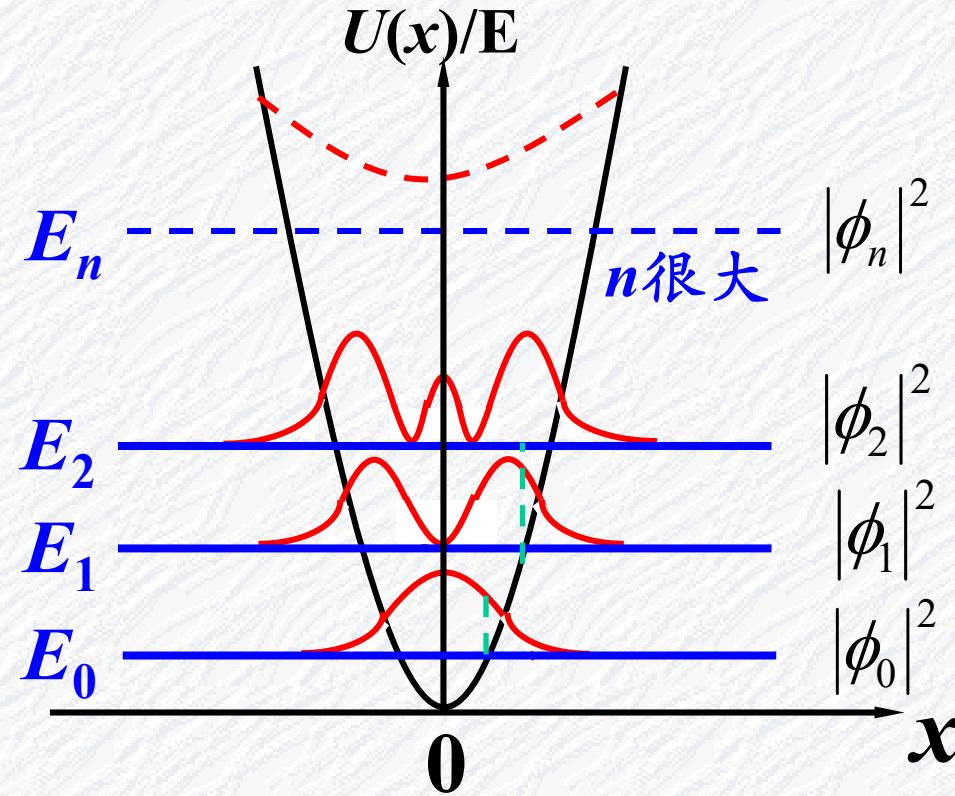
5. 概率密度

波函数

概率密度



概率密度的特点：



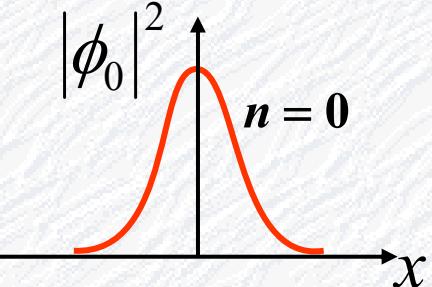
(1) 概率在 $E < U$ 区仍有分布 —— 隧道效应

粒子进入了“经典禁区”。

(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，

$$W_0(x) = |\phi_0(x)|^2 = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha^2 x^2}$$

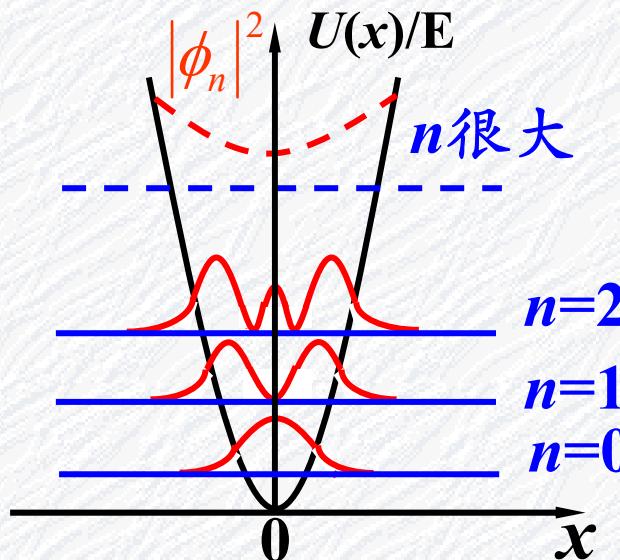


经典振子在 $x = 0$ 处概率最小。

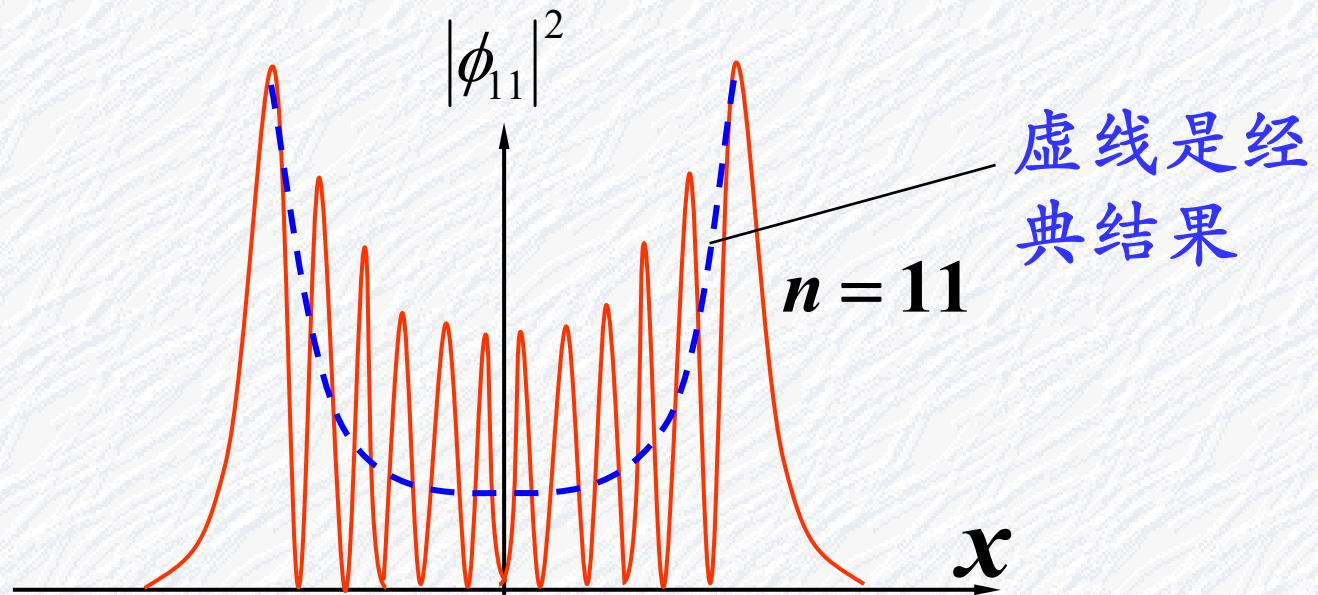
(3) 当 $n \rightarrow \infty$ 时，

量子概率分布

→ 经典概率分布，



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；
在两端速度为零出现的概率最大。





第27章结束