§ 19.5 一维定态问题

一、一维定态薛定谔方程解的一般性质

考虑质量为***m***的粒子在势场***U*(*x*)**中运动，薛定谔方程为

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

由于***U*(*x*)**与时间无关，分离变量后，则有特解 $\Psi(x,t)=e^{-\frac{iEt}{\hbar}}\psi(x)$

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

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \qquad \hat{H} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + U(x)\right]$$

定态薛定谔方程解的性质：

1、本征值*E*为实数

证： 薛定谔方程取复共轭，由于***U*(*x*)**为实函数，所以 $\hat{H}\psi^*(x) = E^*\psi^*(x)$

乘以***ψ*(*x*)**积分得
$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + U(x)\right]\psi^*(x)dx = E^*\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)\psi^*(x)dx$$

左边第一部分分部积分两次，得
$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + U(x)\right]\psi(x)dx = E^*\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)\psi^*(x)dx$$

左边利用薛定谔方程得
$$E\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)\psi(x)dx = E^*\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)\psi^*(x)dx$$

即 $E = E^*$

得证。

2、共轭定理

如果 $\psi(x)$ 是薛定谔方程的解，对应能量为 E，则 $\psi^*(x)$ 也是薛定谔方程的解，对应能量为 E。

证：

$$\hat{H}\psi^*(x) = E^*\psi^*(x)$$

由于 $E = E^*$

$$\hat{H}\psi^*(x) = E\psi^*(x)$$

即证。

3、不同本征值的波函数彼此正交

设 $\psi_1(x)$和$\psi_2(x)$ 分别对应于两个不同的本征值E_1和E_2

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+U(x)\right]\psi_1(x)=E_1\psi_1(x) \qquad \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+U(x)\right]\psi_2^*(x)=E_2\psi_2^*(x)$$

第一式乘以$\psi_2^*(x)$，第二式乘以 $\psi_1(x)$，再两式积分，得

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_2^*(x)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+U(x)\right]\psi_1(x)dx=E_1\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_2^*(x)\psi_1(x)dx$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1(x)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+U(x)\right]\psi_2^*(x)dx=E_2\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_2^*(x)\psi_1(x)dx \Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_2^*(x)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+U(x)\right]\psi_1(x)dx=E_2\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_2^*(x)\psi_1(x)dx$$

所得两式相减，有 $(E_1-E_2)\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_2^*(x)\psi_1(x)dx=0$

当 $E_1\neq E_2$ ，则有 $\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_2^*(x)\psi_1(x)dx=0$

简并和非简并(Degeneracy and Non-degeneracy)： 若对一个给定的能量E，只存在一个线性独立的本征函数，则称该能级是非简并的； 反之，多个相互独立的能量本征函数具有相同能量本征值的现象称为简并，而把对应的独立本征函数的个数为它的简并度。

宇称 (i) 空间反射：空间反射的操作。

$$x \Rightarrow -x \qquad\qquad \psi(x) \Rightarrow \psi(-x)$$

定义空间反射算符$\hat{P}$：$\hat{P}\psi(x) = \psi(-x)$

(ii) 如果波函数满足：$\psi(-x) = \pm\psi(x)$

$\psi(-x) = +\psi(x)$ 称波函数具有正宇称（或偶宇称）；

$\psi(-x) = -\psi(x)$ 称波函数具有负宇称（或奇宇称）；

(iii) 如果在空间反射下， $\psi(-x) \neq \pm\psi(x)$ 则波函数没有确定的宇称。

4、如果势函数***U*(*x*)**关于原点对称（反射不变性），若$\psi(x)$是能量本征方程属于能量本征值***E***的解，则$\psi(-x)$也是该方程同一能量本征值***E***的解。

证：

将薛定谔方程 $$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+U(x)\right]\psi(x)=E\psi(x)$$

做空间反射变换，由于 ***U*(*x*)=*U*(-*x*)**，则有

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

即$\psi(-x)$也是该方程同一能量本征值***E***的解。

推论： 当势函数$U(x)$具有反射不变性时，

(i) 对于无简并的能级，定态波函数必有确定的宇称。

(ii) 若能级有简并，则总能找到一组简并的定态波函数，其中每一个波函数都有确定的宇称。

证： **(i)** 对于无简并的能级

$\psi(x)$和$\psi(-x)$ 都是薛定谔方程同一能量本征值E的解。

$$\psi(-x) = c\psi(x)$$

$$\psi(x) = c\psi(-x) = c^2\psi(x)$$

$c^2 = 1$ $\qquad c = \pm 1$ $\qquad \psi(-x) = \pm\psi(x)$

(ii) 若能级有简并

设集合$\{\psi_i(x)\,|\,i=1,2,\cdots f\}$ 是与能量***E***对应的本征波函数

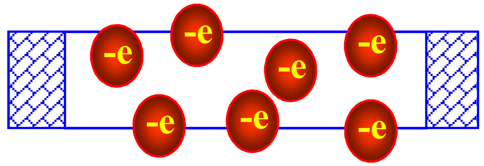
$$\hat{H}\psi_i(x)=E\psi_i(x) \qquad i=1,2,\cdots,f$$

$$\hat{H}\psi_i(-x)=E\psi_i(-x)$$

集合$\{\psi_i(-x)\,|\,i=1,2,\cdots f\}$是与能量***E***对应的本征波函数集合。

只要$\{\psi_i(x)\}$ 中有一个无确定宇称的波函数， 例如 $\psi_j(x)$ ，就可用有确定宇称的组合$\frac{1}{2}\left[\psi_j(x)\pm\psi_j(-x)\right]$替代， 最后总能组合成 一组具有确定宇称的解。

二、一维无限深势阱

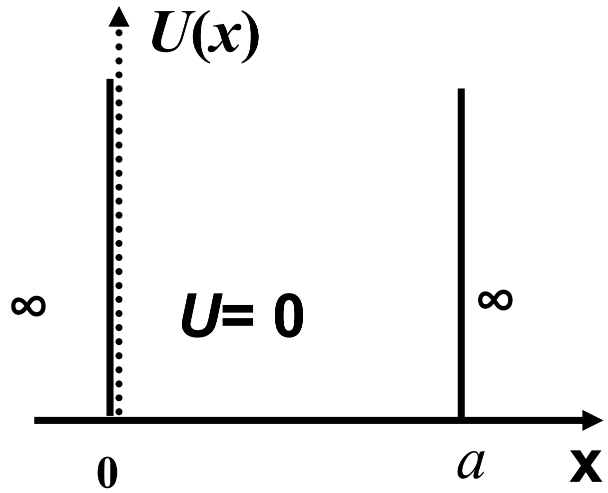


金属中的电子由于金属表面势能（势垒）的束缚被限制在一个有限的空间范围内运动。

如果金属表面势垒很高，可以将金属表面看为一刚性盒子。如果只考虑一维运动，就是一维刚性盒子。势能函数为：

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

称为一维无限深势阱。



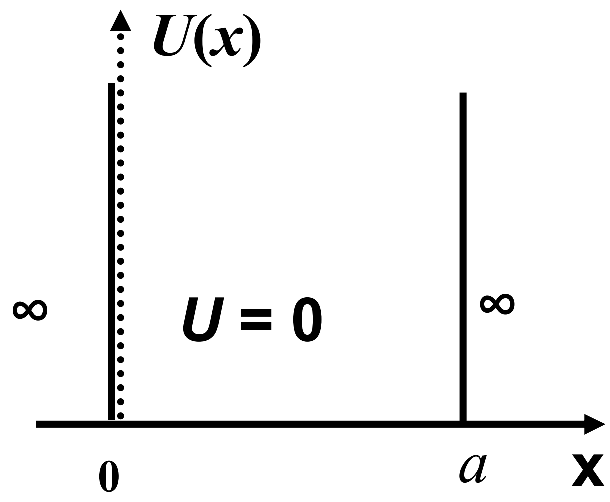
无限深势阱

- 在势阱内，定态薛定谔方程

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

令 $\boldsymbol{k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}}$ 得

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



无限深方势阱

解为：

$$\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx) \quad 0 < x < a$$

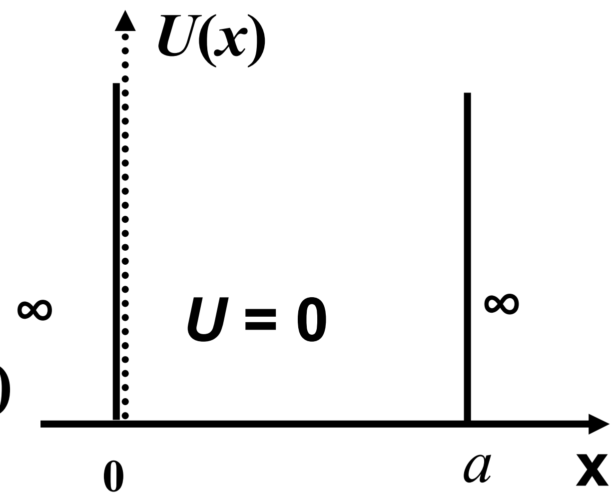
待定常数$\boldsymbol{A}$和$\boldsymbol{B}$由波函数的边界条件确定。

- 在势阱外，定态薛定谔方程

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

该方程的解只能是：

$$\psi(x)\equiv 0 \quad x>a, or \quad x<0$$



无限深方势阱

波函数在阱壁上的连续

$$\left[A\sin(kx)+B\cos(kx)\right]_{x=0}=0$$

$$\left[A\sin(kx)+B\cos(kx)\right]_{x=a}=0$$

可得

$$B = 0$$

$$A\sin(ka) = 0 \Rightarrow ka = n\pi$$

$$n = 1,2,....$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$ ⇨ 粒子的能量：

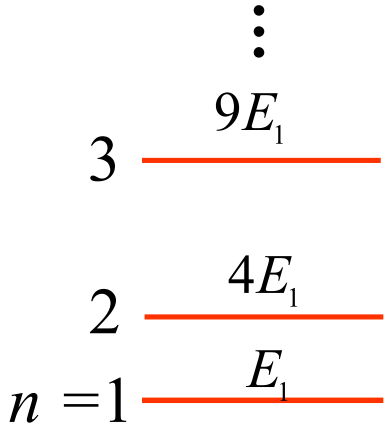
$$\boxed{E = \frac{k^2\hbar^2}{2m} = n^2 E_1}$$

其中 $E_1 = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$

能量取分立值（能级），能量是量子化的。

能量间隔为：

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = (2n+1)E_1$$



$n\uparrow, \Delta E\uparrow$ 能级增大,能级间隔递增

$a\uparrow, \Delta E\downarrow$ 阱变宽,能级间隔下降

$m\uparrow, \Delta E\downarrow$ 大质量粒子的能级间隔小

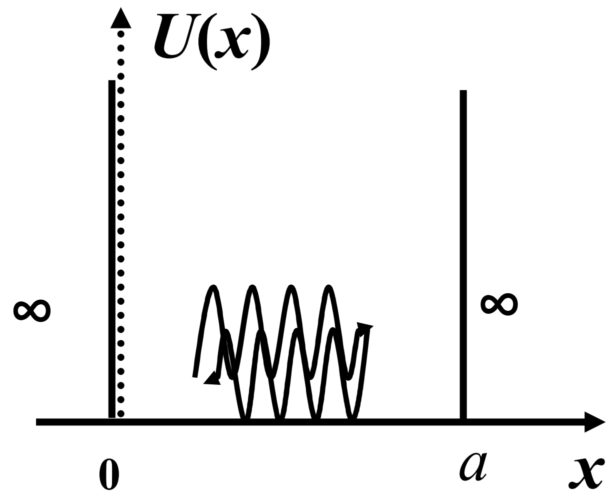
a很大或 ***m*** 很大，能级几乎连续

$$E=\frac{k^2\hbar^2}{2m}=n^2E_1$$

最低能量(零点能)

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

— 波动性



定态波函数和粒子在阱内的几率分布

- 归一化常数*A*和定态波函数

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\rho(x)\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x)|^2\,\mathrm{d}x=1$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x)|^2\,\mathrm{d}x=\int_0^a A^2\sin^2\frac{n\pi x}{a}\mathrm{d}x=1$$

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

定态波函数为

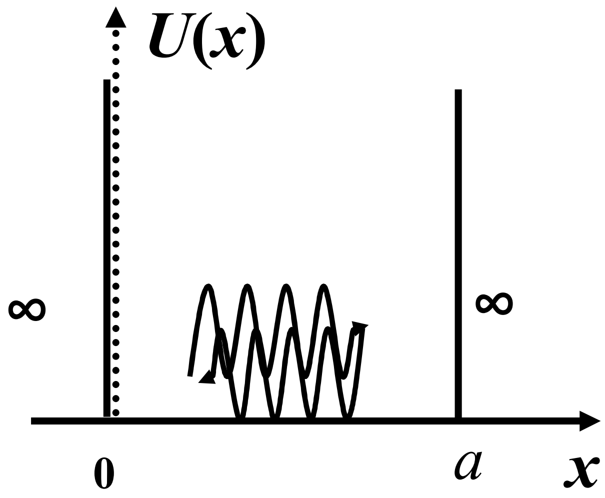
$$\psi_n(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi}{a}x, & 0\le x\le a\\ 0, & 0>x,\quad x>a\end{cases}$$

粒子在阱内的波函数为

$$\Psi(x,t)=\psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin kx e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

$$=\frac{1}{2i}\sqrt{\frac{2}{a}}(e^{ikx}-e^{-ikx})e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

$$=\frac{1}{2i}\sqrt{\frac{2}{a}}[e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)}-e^{-\frac{i}{\hbar}(Et+px)}]$$

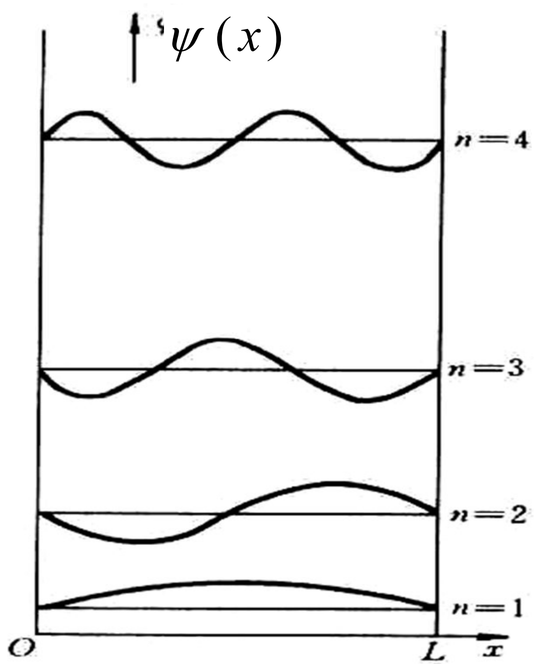


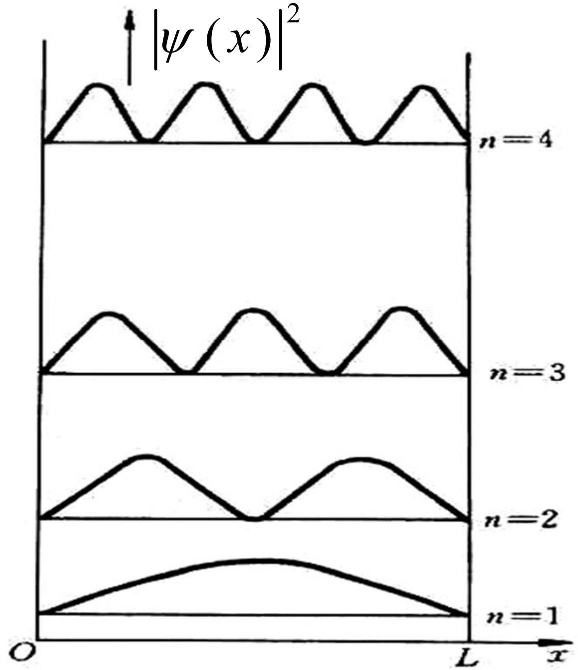
波函数为频率相同、波长相同、传播方向相反的两单色平面波的叠加——形成驻波。

每一个能量本征态正好对应于德布罗意波的一个特定波长的驻波（两个单色波的叠加）。

粒子在势阱中的几率分布：

$$\rho(x)=\psi^2(x)=\begin{cases}\dfrac{2}{a}\sin^2\dfrac{n\pi}{a}x, & 0\le x\le a\\ 0, & 0>x,x>a\end{cases}$$





定态波函数为

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

性质：

1、不同本征值的波函数彼此正交 $\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_m^*(x)\psi_n(x)dx=\delta_{mn}$

2、本征波函数构成完备集，即任意波函数$\psi(x)$，可表示为

$$\psi(x)=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sum_{n=1}^{\infty}c_n\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$ 傅里叶级数

$$c_n=\sqrt{\frac{2}{a}}\int_0^a\psi(x)\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx$$

3、含时本征波函数

$$\Psi_n(x,t)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi}{a}x e^{-i\frac{n^2\pi^2\hbar t}{2ma^2}}, & 0\le x\le a\\ 0, & 0>x,\quad x>a\end{cases}$$

4、薛定谔方程

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

通解

$$\Psi(x,t)=\sum_{n=1}^{\infty}c_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}\psi_n(x)$$

5、通过初始条件确定c_n

设粒子最初处于波函数为 $\Psi(\vec{r},t=0)$ 的状态

$$\Psi(x,t)=\sum_{n=1}^{\infty}c_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}\psi_n(x) \Longrightarrow \Psi(x,0)=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n(x)$$

将表达式左乘以 $\psi_m^*(x)$，再积分：$\int\psi_m^*(x)\Psi(x,0)d\vec{r}=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\int\psi_m^*(x)\psi_n(x)d\vec{r}$

利用 $\int\psi_m^*(x)\psi_n(x)dx=\delta_{mn}$

求和里仅有**$n=m$**项不为零，即得 $\boxed{c_m=\int\psi_m^*(x)\Psi(x,0)dx}$

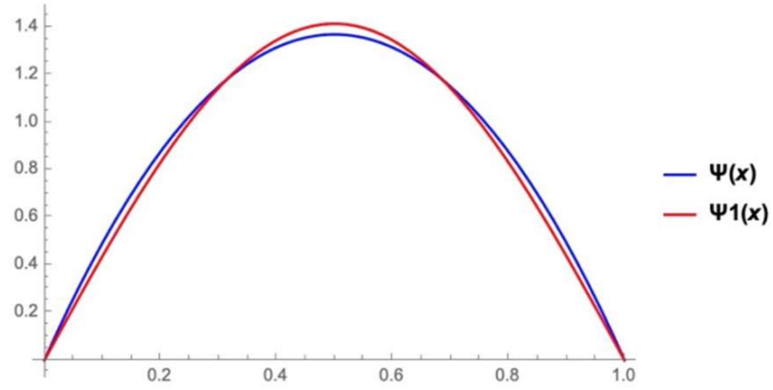
例：

处于无限深势阱中的粒子，最初处于状态：

$$\Psi(x,t=0)=\begin{cases} Ax(a-x), & 0\le x\le a \\ 0, & 0>x,\ \ x>a \end{cases}$$

利用归一化条件 $\int\left|\Psi(x,t=0)\right|^2 dx=1$

$$\int_0^a |A|^2 x^2(a-x)^2 dx=1 \Rightarrow |A|^2\frac{a^5}{30}=1 \Rightarrow A=\sqrt{\frac{30}{a^5}}$$



$$c_n=\int_0^a \psi_n^*\Psi(x,0)dx=\frac{\sqrt{60}}{a^3}\int_0^a x(a-x)\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx=\frac{4\sqrt{15}}{\pi^3 n^3}\left[1-(-1)^n\right]$$

$$\left|c_1\right|^2=0.998555$$

6、能量的平均值

$$< H > = \int \Psi^*(\vec{r},t)\left[\hat{H}\Psi(\vec{r},t)\right]d\vec{r} = \sum_{n=1}^{\infty}|c_n|^2 E_n$$

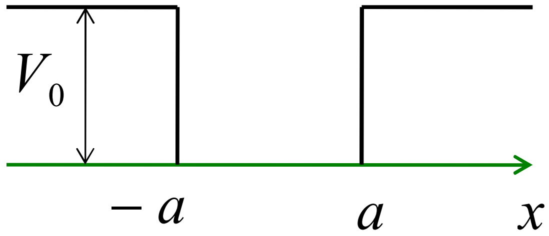
例：处于无限深势阱中的粒子，最初处于状态：

$$\Psi(x,t=0) = \begin{cases} Ax(a-x), & 0 \le x \le a \\ 0, & 0 > x, \quad x > a \end{cases}$$

$$\left.\begin{aligned} c_n &= \frac{4\sqrt{15}}{\pi^3 n^3}\left[1-(-1)^n\right] \\ E_n &= \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \end{aligned}\right\} \Rightarrow \langle H \rangle = \sum_{n=1}^{\infty}|c_n|^2 E_n = \sum_{n_{odd}=1}^{\infty}\frac{960}{\pi^6 n^6}\frac{\pi^2 n^2\hbar^2}{2ma^2} = \frac{5\hbar^2}{ma^2}$$

二、一维有限深势阱

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



量子阱的具体物理实现:
半导体材料$Al_xGa_{1-x}As$和GaAs的异质结

可应用于制作红外发光器件

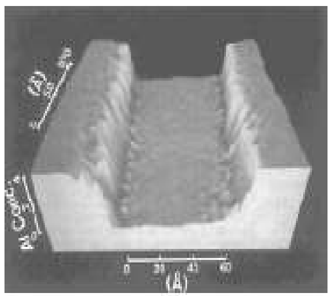


Fig. 4.5. Sandwich composed of AlGaAs – GaAs – AlGaAs. The central part, consisting of GaAs, is 6 nm wide. The vertical scale indicates the concentration of aluminum (from 0 to 40%), which controls the potential (averaged over a distance of the order of the lattice spacing) seen by a conduction electron. Photograph courtesy of Abbas Ourmazd, ATT Bell Labs

如何求解这样的方势阱中定态薛定谔方程的能量本征值和本征函数？

定态薛定谔方程 $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+V(x)\psi=E\psi$$

所以 $$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi=0 \qquad |x|<a$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_0)\psi=0 \qquad |x|>a$$

讨论 $0<E<V_0$情况 设 $k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$， $k'^2=\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}$

则 $$\frac{d^2\psi}{dx^2}+k^2\psi=0 \qquad |x|<a$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}-k'^2\psi=0 \qquad |x|>a$$

解为：$\psi(x)=\begin{cases} A\sin(kx+\delta) & |x|<a \\ Be^{-k'x}+Ce^{k'x} & |x|>a \end{cases}$

A,B,C,δ　　为待定常数

要求：波函数在$|x|\to\infty$时不发散，　$|x|>a$的解可分成

$$\psi(x)=\begin{cases} Be^{-k'x} & x>a \\ Ce^{k'x} & x<-a \end{cases}$$

则
$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+k^2\psi=0 \qquad |x|<a$$
$$\frac{d^2\psi}{dx^2}-k'^2\psi=0 \qquad |x|>a$$

解为：$\psi(x)=\begin{cases} A\sin(kx+\delta) & |x|<a \\ Be^{-k'x}+Ce^{k'x} & |x|>a \end{cases}$

A,B,C,δ 为待定常数

要求：波函数在 $|x|\to\infty$ 时不发散， $|x|>a$ 的解可分成

$$\psi(x)=\begin{cases} Be^{-k'x} & x>a \\ Ce^{k'x} & x<-a \end{cases}$$

波函数连接条件：在 $x=\pm a$ 处波函数及其导数连续可得

$x=a$ $\quad k\cot(ka+\delta)=-k'$

$x=-a$ $\quad k\cot(-ka+\delta)=k'$

$\Rightarrow$ $\cot(ka+\delta)=-\cot(-ka+\delta)$

$\cot(ka+\delta) = -\cot(-ka+\delta)$ 有二组解 $\delta = \begin{cases} n\pi \\ (n+\frac{1}{2})\pi \end{cases}$ $n = 0,\pm1,\pm2,\cdots$

只取 $n=0$ 即可，其它 n 值并不导致新的结果 所以 $\delta = 0$ 或 $\frac{\pi}{2}$

取 $\delta = 0$

$$\psi = \begin{cases} A\sin kx & |x|<a \\ Be^{-k'x} & x>a \\ Ce^{k'x} & x<-a \end{cases}$$

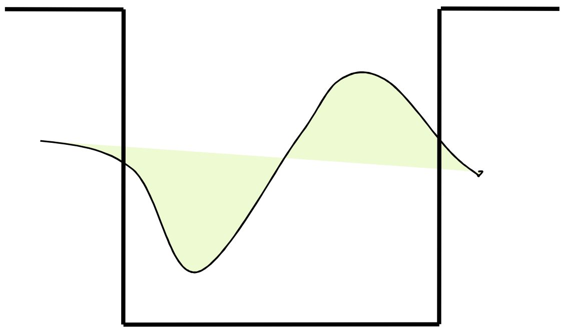
$x=a$ 连续 $\Rightarrow$ $A\sin(ka) = Be^{-k'a}$

$x=-a$ 连续 $\Rightarrow$ $A\sin(-ka) = Ce^{-k'a}$

$B=-C$

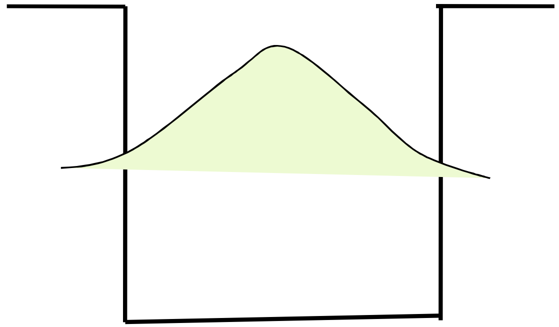
奇宇称 反对称波函数

$$\psi_A = \begin{cases} A\sin kx & |x|<a \\ Be^{-k'x} & x>a \\ -Be^{k'x} & x<-a \end{cases}$$



取 $\delta = \dfrac{\pi}{2}$

$$\psi_S = \begin{cases} A\cos kx & |x| < a \\ Be^{-k'x} & x > a \\ Be^{k'x} & x < -a \end{cases}$$



偶宇称

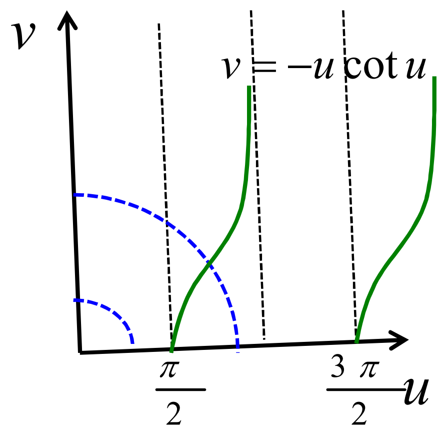
对称波函数

常数 A, B 可由连接条件以及波函数归一化条件定出

研究能量本征值问题

奇宇称（ $\delta = 0$ ） 能量本征值可由方程解出 $\boxed{k \cot ka = -k'}$

采用作图法求解



令 $u = ka, \quad v = k'a$

$$u \cot u = -v$$

而 $u^2 + v^2 = (k^2 + k'^2)a^2 = \dfrac{2mV_0}{\hbar^2}a^2$

V_0, a 是给定的，由上面二个方程作$u-v$ 曲线交点即所求的解

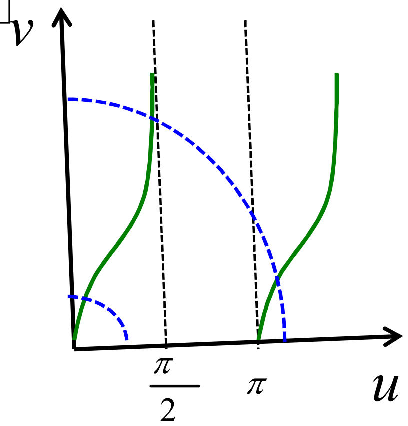
当 $\dfrac{2mV_0a^2}{\hbar^2} \geq \dfrac{\pi^2}{4}$ 时，才有一奇宇称的束缚态

偶宇称 $(\delta = \frac{\pi}{2})$

$$\boxed{k \tan ka = k'}$$

$$u \tan u = v$$

$$u^2 + v^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} a^2$$



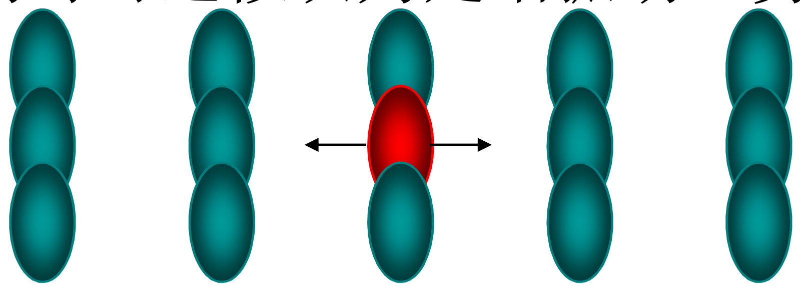
无论 $V_0 a^2$ 多小，总存在一束缚态，因此对一维方势阱总存在一个偶宇称的束缚态（基态）

当 $\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} \geq \pi^2$ 时，偶宇称第一激发态亦为束缚态

三、一维谐振子（抛物线势阱）

晶体中原子围绕平衡位置作小振动时可近似认为是谐振动，势函数为：

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



哈密顿量

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

定态薛定谔方程

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

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-\frac{1}{2}m\omega^2x^2)\psi=0$$

利用级数展开法解该微分方程。波函数满足的自然条件进一步限制了能量***E***的取值。主要结论如下：

1. 谐振子能量

- 能量***E***是量子化的

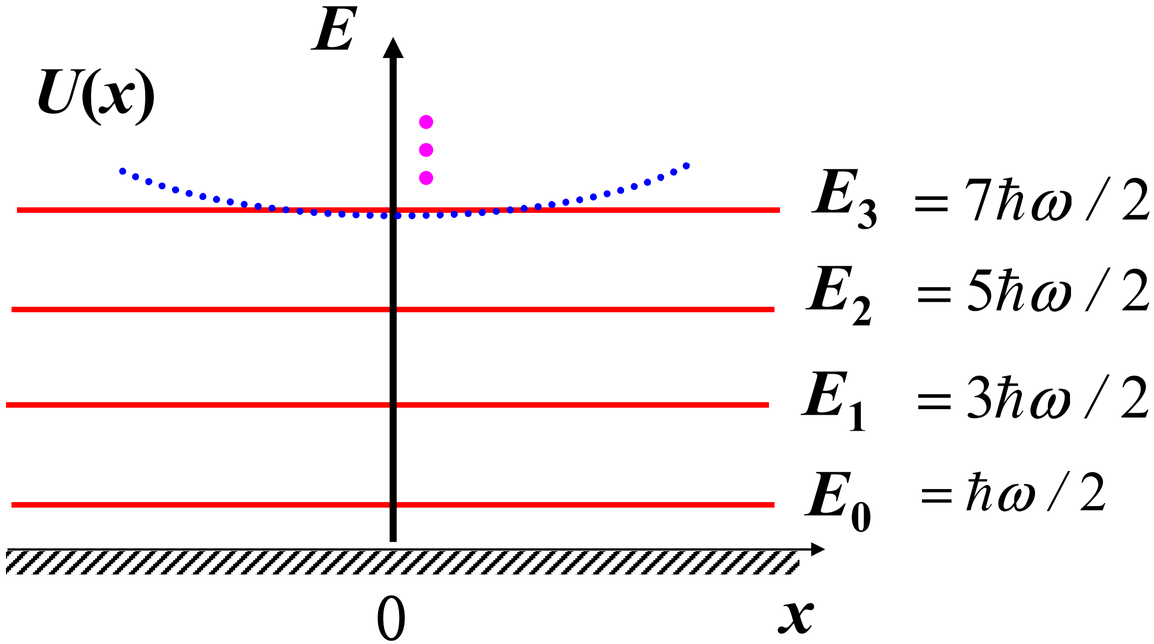
$$E_n=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega \qquad n=0,1,2,\cdots$$

- 能量间隔均匀： $\Delta E_n=\hbar\omega$

- 最低能量(零点能)不为零

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \neq 0$$

与**Planck**假设不同！



2. 谐振子波函数

$$\psi_n(x)=(\frac{\alpha}{2^n\sqrt{\pi}n!})^{1/2}H_n(\alpha x)e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2},$$

$$\alpha=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

H_n**是厄密（Hermite）多项式，**

最高阶是 $(\alpha x)^n$

$$\psi_0(x)=(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}})^{1/2}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$$

$$\psi_1(x)=(\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}})^{1/2}\cdot 2(\alpha x)e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$$

$$\psi_2(x)=(\frac{\alpha}{8\sqrt{\pi}})^{1/2}[2-4(\alpha x)^2]e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$$

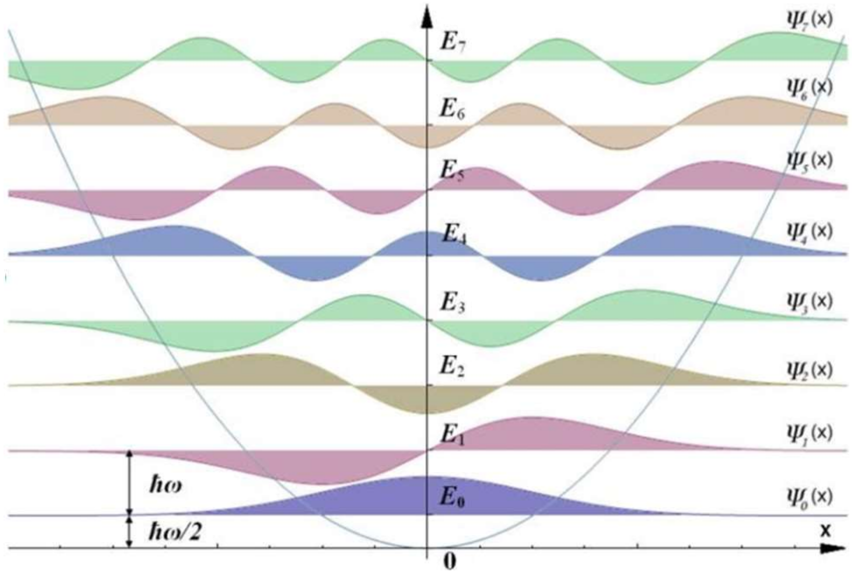
……

3. 本征波函数具有确定的宇称

$$H_n(-\alpha x) = (-1)^n H_n(\alpha x)$$

$$\hat{P}\psi_n(x) = \left(\frac{\alpha}{2^n\sqrt{\pi}n!}\right)^{1/2} H_n(-\alpha x) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$$

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

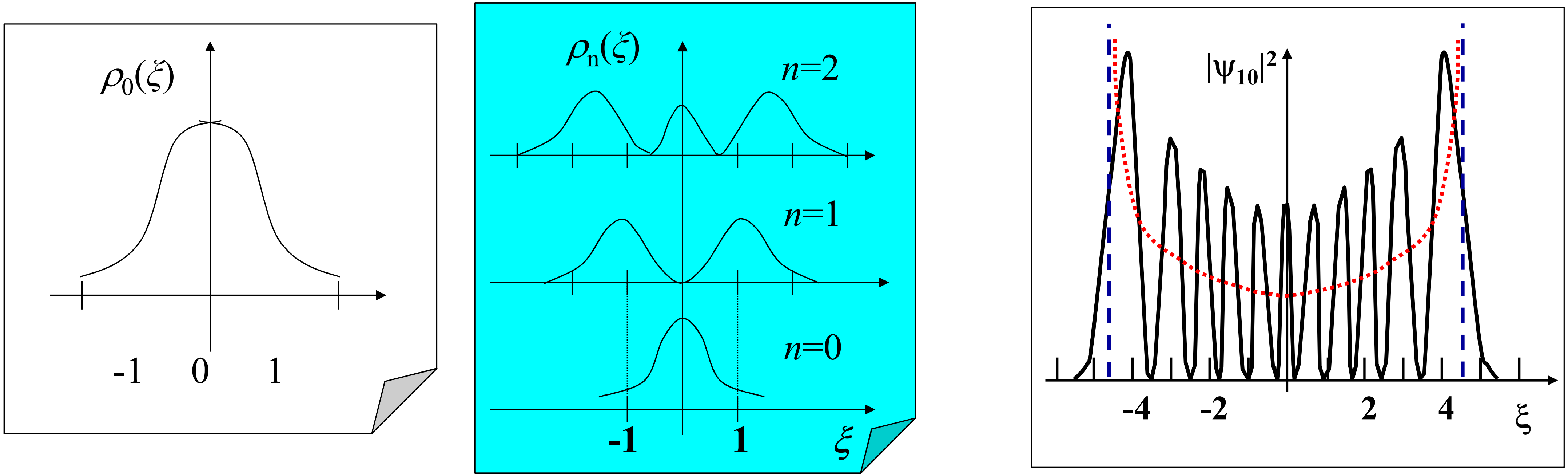


4. 对应一个谐振子能级只有一个本征函数，即一个状态，所以能级是非简并的。

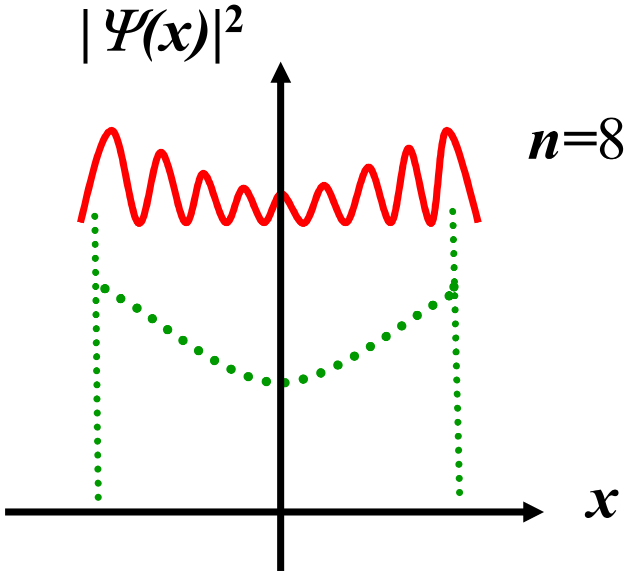
5. 位置几率分布

在经典情形下，粒子将被限制在$|\alpha x| < 1$

量子情形下粒子位置几率密度 $\rho_n = |\Psi_n(x,t)|^2 = |\psi_n(x)|^2$



$$\xi = \alpha x = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$$



当$n\to\infty$时

- 量子概率分布→经典概率分布(图示虚线）
- 能量量子化 →能量取连续值

——玻尔对应原理

【例】已知一维谐振子定态薛定谔方程及波函数，求

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

α=_____, E=________

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x)=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2}\left(-\alpha^2+\alpha^4x^2\right)e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$$

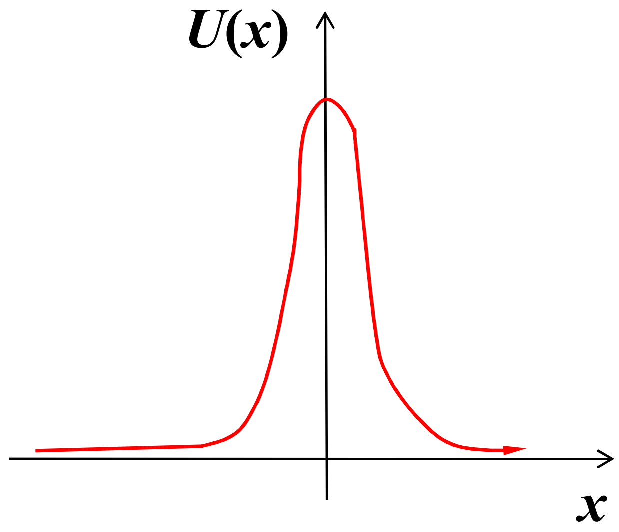
$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\alpha^2+\alpha^4x^2\right)\psi(x)=\left(\mathrm{E}-\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\psi(x)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\alpha^2=E \qquad \frac{\hbar^2}{2m}\alpha^4=\frac{1}{2}m\omega^2$$

$$\alpha=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \qquad E=\frac{1}{2}\hbar\omega$$

四、一维散射问题

势垒：
$$\begin{cases} V(x)\big|_{|x|\to\infty}=0, \quad or \quad C \\ a<x<b, \quad V(x)\neq 0 \end{cases}$$



一维散射问题

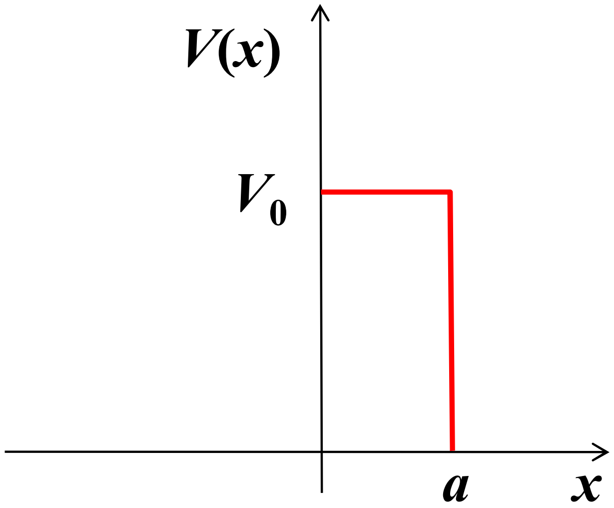
粒子从 $x=-\infty$ 入射，如何运动？

经典回答：

$$\begin{cases} E_{in}\geq\left(V\left(x\right)\right)_{\max} & 穿过 \\ E_{in}<\left(V\left(x\right)\right)_{\max} & 反射 \end{cases}$$

方势垒

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



薛定谔方程

$$\begin{cases}-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2}\psi+U_0\psi=E\psi & 0<x<a\\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2}\psi=E\psi & x\leq 0,\quad x\geq a\end{cases}$$

分两种情况来讨论

(I) $E<V_0$

定义 $k^2=\dfrac{2mE}{\hbar^2};k'^2=\dfrac{2m\left(V_0-E\right)}{\hbar^2}$

解得

$$\begin{cases}\psi_1(x)=Ae^{ikx}+A'e^{-ikx} & x<0\\ \psi_2(x)=Be^{k'x}+B'e^{-k'x} & 0\leq x\leq a\\ \psi_3(x)=Ce^{ikx}+C'e^{-ikx} & a<x\end{cases}$$

边界条件

$$\begin{cases}\psi_1(0)=\psi_2(0)\\ \left(\dfrac{d\psi_1}{dx}\right)_{x=0}=\left(\dfrac{d\psi_2}{dx}\right)_{x=0}\\ \psi_2(a)=\psi_3(a)\\ \left(\dfrac{d\psi_2}{dx}\right)_{x=a}=\left(\dfrac{d\psi_3}{dx}\right)_{x=a}\end{cases}$$

透射系数 $$T=\frac{|C|^2}{|A|^2}=\frac{4k^2k'^2}{(k^2+k'^2)^2\sinh^2 k'a+4k^2k'^2}$$

反射系数 $$R=\frac{|A'|^2}{|A|^2}=\frac{(k^2+k'^2)^2\sinh^2 k'a}{(k^2+k'^2)^2\sinh^2 k'a+4k^2k'^2}$$

显然 $T+R=1$ 粒子数守恒

因为入射粒子不是被透射就是被反射

当 $k'a >> 1$ 时， $\sinh k'a = \dfrac{e^{k'a} - e^{-k'a}}{2} \approx \dfrac{1}{2} e^{k'a}$ $\sinh^2 k'a \approx \dfrac{1}{4} e^{2k'a}$

$$T \sim \frac{16E}{V_0}(1 - \frac{E}{V_0}) e^{-2k'a} \sim T_0 \exp[-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}a]$$

势垒越高，宽度越宽，穿透几率越小，但总有一定几率穿透，这一现象称为量子隧道效应

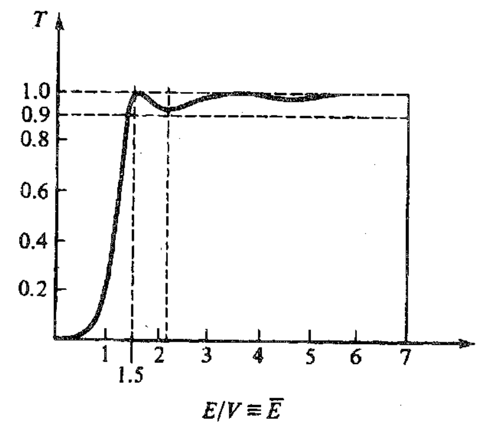
另外, 量子隧道效应中穿透几率T 对势垒的宽度 a 的变化很敏感

(II) $E > V_0$ 完全一样处理，只是把 $k' \to ik'$ $k'^2 = \dfrac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)$

结果为 $T = \dfrac{4k^2k'^2}{(k^2 - k'^2)^2 \sin^2 k'a + 4k^2k'^2}$

或 $T = \dfrac{1}{1 + \dfrac{1}{4}\dfrac{V_0^2}{E(E - V_0)}\sin^2 k'a}$

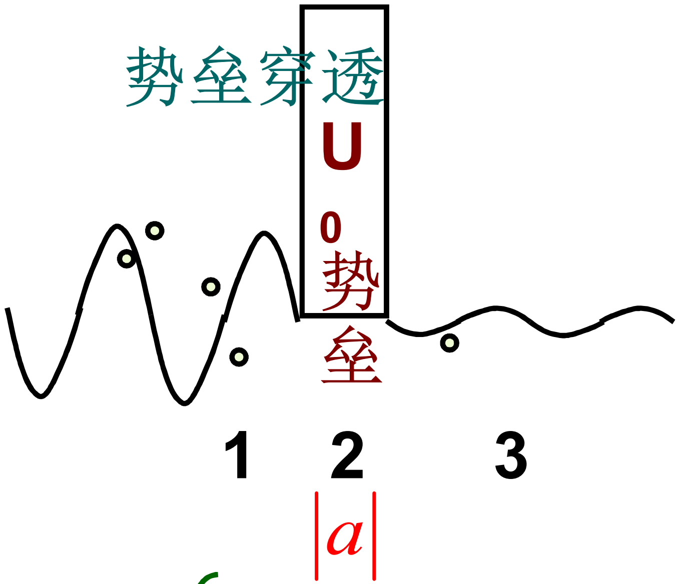
$$R = \frac{(k^2 - k'^2)^2 \sin^2 k'a}{(k^2 - k'^2)^2 \sin^2 k'a + 4k^2k'^2}$$



$$T + R = 1$$

当 $k'a = n\pi$，$(n = 1,2,\cdots)$ 令 $k' = \dfrac{2\pi}{\lambda}$，则有 $a = n\dfrac{\lambda}{2}$ 时，$T = 1$

即当势垒宽度为半波长整数倍时，发生共振透射这与光学中情况类似



经典理论：
1. $E > U_0$的粒子，越过势垒。
2. $E < U_0$的粒子，不能越过势垒。

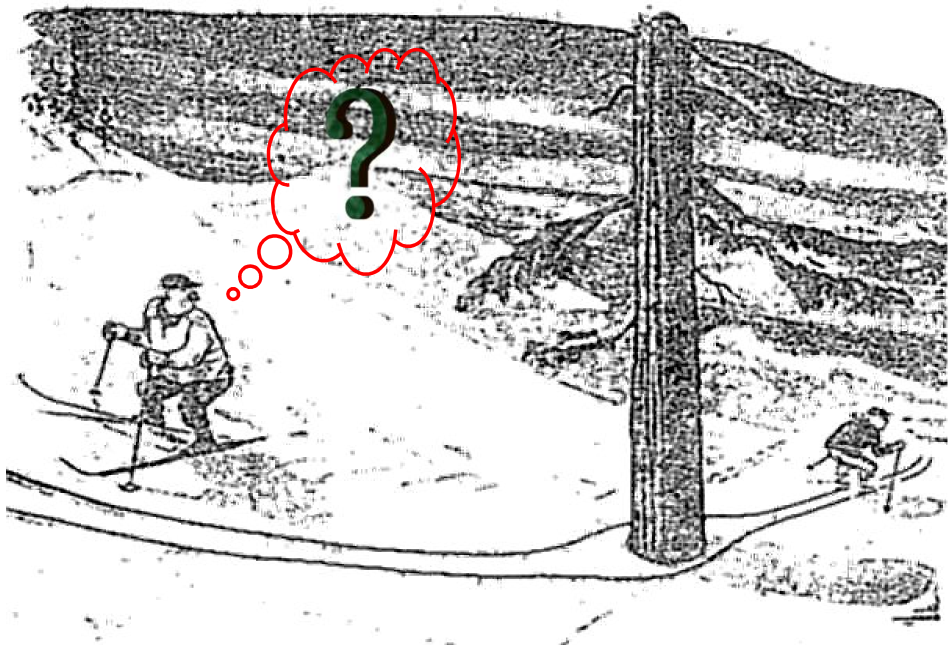
量子理论：
1. $E > U_0$的粒子，也存在被弹回的概率—— 反射波。
2. $E < U_0$的粒子，也可能越过势垒到达3区—— 隧道效应。

经典理论

量子理论

电子等微观对象的行为方式不像你以前看到过的任何东西，你以前曾经看到过的事物的经验是不完全的。

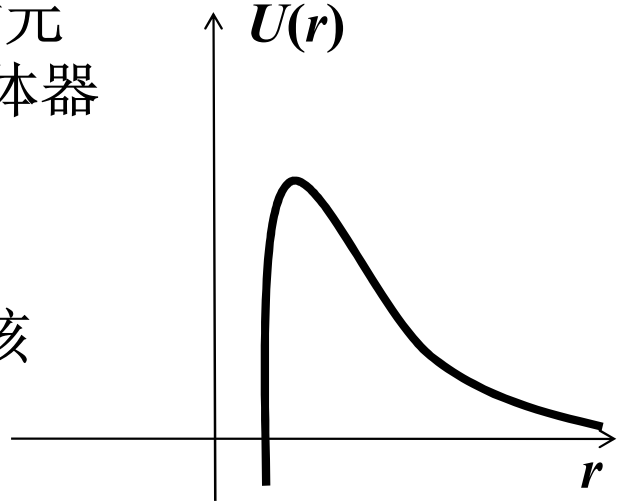
一定要找一些过去已经熟悉的东西来做类比才能够理解新的自然规律这种意愿，实际上不过是一种“心理上的障碍”罢了。



— 费曼

量子隧道效应应用实例

微观粒子势垒贯穿的现象已被很多实验所证实。在波动力学提出后，伽莫夫(**Gamow**)首先用势垒贯穿解释了放射元素的**α**衰变现象。后来利用量子隧道效应效应做出了固体器件，如半导体隧道二极管、超导隧道结等。



量子力学势垒贯穿可以解释铀核的**α**粒子衰变。

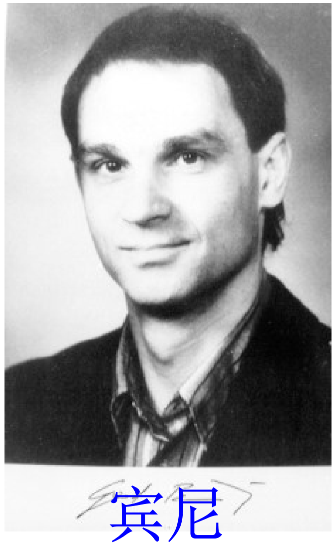
在原子核内部，因为短程核力强烈吸引，势能很小。能量为***E***的**α**粒子的平均寿命长达**45**亿年，且在核内振动极快。但是它们从核内总有一定几率透势垒，概率幅虽然小但为有限值。尽管透过率极其微小，因为有足够多的铀核，而且等待足够长的时间的，总有粒子从核内跑出来。

量子隧道效应一个重要的应用：扫描隧穿显微镜

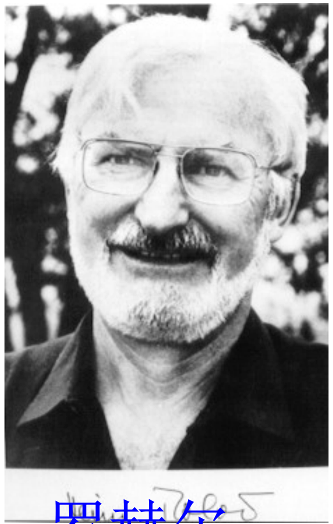
宾尼、罗赫尔和鲁斯卡

三人分享了 **1986**年度的诺贝尔物理奖。

前两人是扫描隧穿显微镜的直接发明者，第三人是 **1932**年电子显微镜的发明者，这里是为了追朔他的功劳。

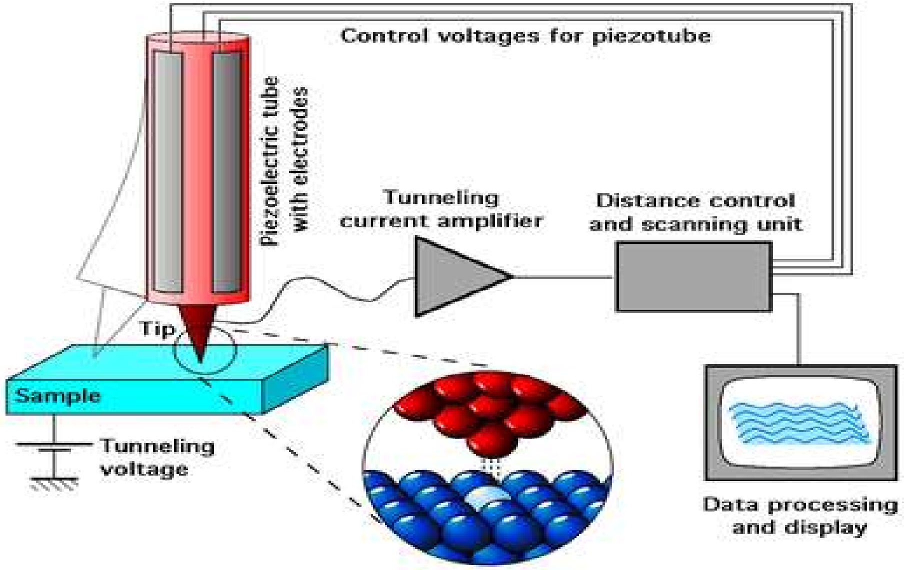


宾尼



罗赫尔

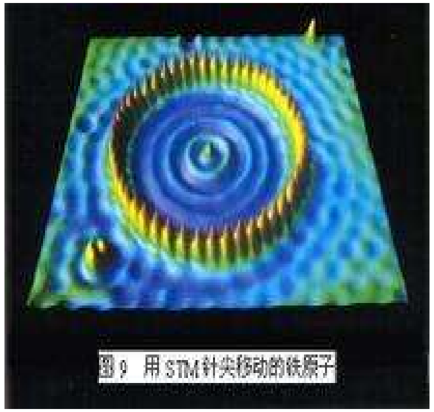
鲁斯卡


Control voltages for piezotube
Piezoelectric tube
with electrodes
Tunneling
current amplifier
Distance control
and scanning unit
Tip
Sample
Tunneling
voltage
Data processing
and display

工作原理简图

依赖于STM能够操纵原子的原理，诞生了一门在0.1——100nm尺度空间内研究电子、原子、分子运动规律与特性的新科技——纳米科技，纳米科技的最终目标是人类能按照自己的意志直接操纵单个原子，制造具有特定功能的新产品。

血细胞



量子围栏