

### 第三章 一维势场中的粒子

#### §3.1 一维运动问题的一般分析

一维问题的实际背景是平面型固体器件，“超晶格”，以及从高维问题约化下来的一维问题。

##### 3.1.1 一维定态 Schrödinger 方程的解的一般特征

一维定态 Schrödinger 方程是

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

或者写为二阶常微分方程的标准形式

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi = 0.$$

在经典力学的意义上  $E = T + V$ ，其中  $T$  是动能，永远  $\geq 0$ ，因此我们永远有  $E - V \geq 0$ 。而在量子力学里由于有不确定关系的缘故，我们完全谈不上粒子在某点处有多大的动能，因此即使在  $E - V < 0$  的区域里，波函数仍然有非零解。然而方程在  $E - V < 0$  的区域和  $E - V > 0$  的区域解的特征是完全不同的。我们把  $E - V > 0$  的区域称为**经典允许区**， $E - V < 0$  的区域称为**经典禁戒区**。

把方程重写为

$$\frac{1}{\psi} \frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V),$$

并假设  $\psi$  是实函数。画出  $\psi(x)$  vs  $(x)$  的曲线，那么我们发现：

在经典允许区( $E - V > 0$  即  $E > V$ )里， $\psi(x)$  在横轴上方是向上凸的，在横轴下方是向下凹的；

在经典禁戒区( $E - V < 0$  即  $E < V$ )里， $\psi(x)$  在横轴上方是向下凹的，在横轴下方是向上凸的。

所以，在经典允许区里  $\psi(x)$  呈现出振荡式的行为，而在经典禁戒区里  $\psi(x)$  通常是单调变化的。

这样一个直观的图像对于我们理解以后的问题很有帮助。

##### 3.1.2 关于一维定态 Schrödinger 方程的解的基本定理

朗斯基(Wronski)定理：若势能  $V(x)$  在  $-\infty < x < +\infty$  上没有奇点， $\psi_1(x)$  和  $\psi_2(x)$  都是一维定态 Schrödinger 方程的解，而且属于相同的能量，那么

$$\Delta \equiv \begin{vmatrix} \psi_1 & \psi_2 \\ \psi_1' & \psi_2' \end{vmatrix} \equiv \psi_1\psi_2' - \psi_1'\psi_2 = \text{常数},$$

其中  $\psi' \equiv d\psi/dx$ 。证明： $\psi_1(x)$  和  $\psi_2(x)$  分别满足

$$\psi_1'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi_1 = 0,$$

$$\psi_2'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi_2 = 0,$$

前式乘以  $\psi_2$ ，后式乘以  $\psi_1$ ，再把后式减去前式，得

$$\psi_1\psi_2'' - \psi_1''\psi_2 = (\psi_1\psi_2' - \psi_1'\psi_2)' = 0,$$

所以

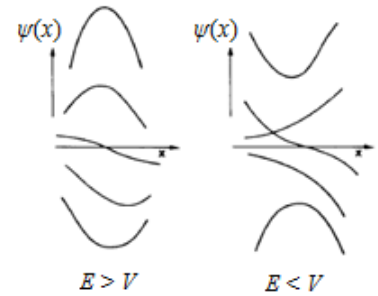
$$\psi_1\psi_2' - \psi_1'\psi_2 = c. \blacksquare$$

$\Delta$  称为  $\psi_1(x)$  和  $\psi_2(x)$  的朗斯基行列式(Wronskian)。它的意义在于：当  $\Delta = 0$  时， $\psi_1(x)$  和  $\psi_2(x)$  是线性相关的，也就是说它们只相差一个常数因子，而当  $\Delta \neq 0$  时， $\psi_1(x)$  和  $\psi_2(x)$  是线性无关的。

以下我们只考虑非奇异的势能函数。

##### 3.1.3 一维定态的分类 束缚态与非束缚态

一个量子体系的状态可以从不同的角度加以分类。区分**束缚态**与**非束缚态**是其中重要的分类方法。它们的定义是：如果



$$\psi(x) \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} 0,$$

从而粒子在无穷远处出现的几率为零，那么这样的量子状态就称为束缚态，否则（也就是说在  $x \rightarrow +\infty$  或  $x \rightarrow -\infty$  或  $x \rightarrow \pm\infty$  时  $\psi(x) \neq 0$ ）称为非束缚态，或称散射态。

粒子处于束缚态还是非束缚态的判据是：假设  $V(x)$  在  $x \rightarrow \pm\infty$  时有确定的极限（也允许  $\rightarrow \infty$ ），分别记为  $V(+\infty)$  和  $V(-\infty)$ ，那么在能量  $E$  满足

$$E < V(+\infty) \text{ 和 } V(-\infty)$$

时粒子处于束缚态，而在

$$E > V(+\infty) \text{ 或 } V(-\infty) \text{ 或二者兼有}$$

时粒子处于非束缚态。

在束缚态下，粒子只在有限的空间范围内运动，而在非束缚态下，粒子可以在无穷远处出现。

束缚态和非束缚态有重要的区别。这些区别将在今后通过具体的例子进行介绍。

把束缚态和非束缚态的概念推广到高维空间是直接的。

### 3.1.4 一维束缚态的一般性质

首先我们指出下面两个定理和两个定义。

共轭定理：若  $\psi(x)$  是定态 Schrödinger 方程的解，则  $\psi^*(x)$  也是该方程的解（且能量相同）。

当然，这里要假定势能  $V(x)$  是实函数。

反射定理：设势能函数  $V(x)$  是关于原点对称的，即满足

$$V(x) = V(-x),$$

那么若  $\psi(x)$  是该方程的解，则  $\psi(-x)$  也是该方程的解（且能量相同）。

这两个定理的证明都很容易，不再详述。

定义：如果对一个给定的能量  $E$ ，只有一个线性独立的波函数存在，则称该能级是**非简并的**，否则称它是**简并的**，其线性独立的波函数的个数称为它的**简并度**。

定义：如果波函数  $\psi(x)$  满足

$$\psi(-x) = \pm \psi(x),$$

则称  $\psi(x)$  有正的（当 + 号成立时）或负的（当 - 号成立时）**宇称**。如果量子态有确定的宇称，它的宇称是正还是负就有重要的意义。宇称具有纯量子力学的特征，在经典力学中没有对应物。在二维或三维空间中，宇称的定义推广为

$$\psi(-\vec{r}) = \pm \psi(\vec{r}).$$

关于一维束缚态有以下的一系列定理。

不简并定理：一维束缚态必是非简并态。

证明：假设  $\psi_1(x)$  和  $\psi_2(x)$  是一维定态 Schrödinger 方程在同一能量下的任意两个解，并且都是束缚态，那么首先根据 Wronski 定理，

$$\Delta \equiv \begin{vmatrix} \psi_1 & \psi_2 \\ \psi_1' & \psi_2' \end{vmatrix} = c,$$

其中  $c$  是与  $x$  无关的常数，因此可以在  $X$  轴的任意点上计算它的值。再根据束缚态的定义，当  $|x| \rightarrow \infty$  时  $\psi(x) \rightarrow 0$ ，我们就可以在  $|x| \rightarrow \infty$  处计算  $\Delta$ ，当然得到

$$\Delta = 0,$$

所以  $\psi_1(x)$  和  $\psi_2(x)$  是线性相关的，即

$$\psi_1(x) = A\psi_2(x), \quad (A \text{ 是常数})$$

而这就表示  $\psi_1(x)$  和  $\psi_2(x)$  代表相同的量子状态，所以它是非简并态。 ■

注意，这个定理的两个前提“一维”和“束缚态”缺一不可。

波函数既然是复函数，它就可以写成下面的形式：

$$\psi(x) = \rho(x)e^{i\theta(x)},$$

其中  $\rho(x)$  和  $\theta(x)$  都是实函数， $\rho(x)$  称为波函数的模， $\theta(x)$  称为波函数的相位。

定理：一维束缚态波函数的位相函数  $\theta(x)$  必是常数。

证明：借助于共轭定理和不简并定理，一维束缚态波函数和它的复共轭必然只相差一个常数，即

$$\psi(x) = A\psi^*(x),$$

所以

$$e^{i\theta(x)} = Ae^{-i\theta(x)} \rightarrow e^{i2\theta(x)} = A = \text{常数},$$

由此就得到

$$\theta(x) = \text{常数} \quad \blacksquare$$

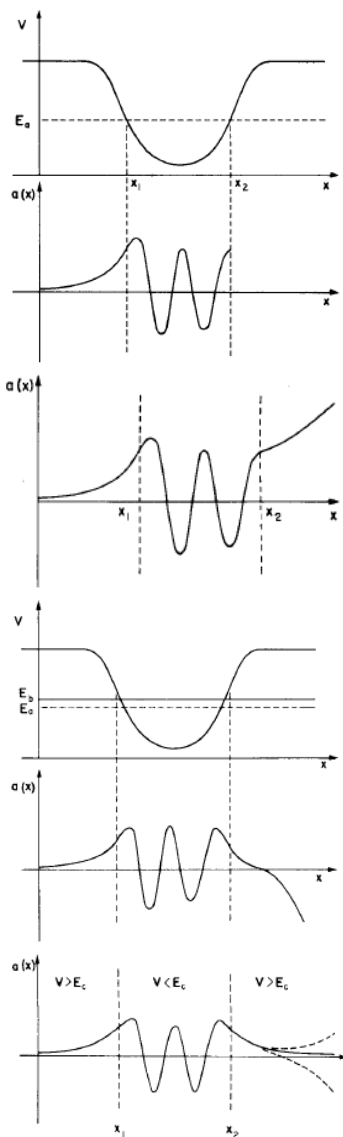
推论：一维束缚态波函数可以取为实函数。这是因为上式中的常数可以取作零。

说明：非束缚态（散射态）的波函数是根据边界条件来确定的，通常不会导致实的波函数。

宇称定理：如果  $V(-x) = V(x)$ ，则一维束缚态波函数必有确定的宇称，即  $\psi(-x) = \pm \psi(x)$ 。

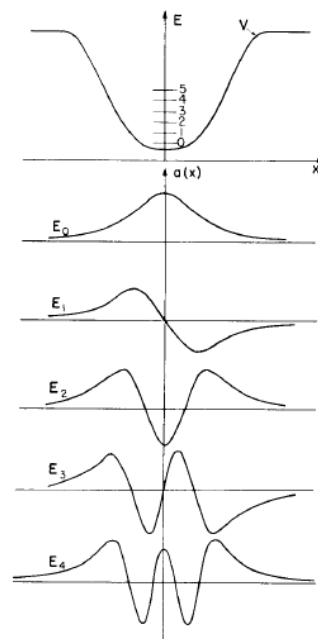
这个定理的证明不再详述。

束缚态（不只是一维束缚态）还有一个更重要的特征：它的能级是不连续地（离散地）变化的，即是说，仅仅当  $E$  取某些离散的数值时，定态 Schrödinger 方程才有单值、有限、连续的解。这就是通常所说的“能量的量子化”。在直观上，可以利用一维 Schrödinger 方程的解的一般特征做如下的说明。



见左图。假设粒子从  $x = -\infty$  向右方跑来。 $x < x_1$  是经典禁戒区， $\psi$  只能从 0 开始单调地增加，在  $x = x_1$  处达到  $\psi'' = 0$ 。 $x_1 < x < x_2$  是经典允许区， $\psi$  振荡地变化，到  $x = x_2$  时再次有  $\psi'' = 0$ 。在  $x > x_2$  的区间里， $\psi$  又是单调地变化，具体的行为取决于  $x = x_2$  那一点的  $\psi$  和  $\psi'$ ，而它们已经被  $x < x_2$  的解完全决定了。所以就有这种可能：在  $x = x_2$  处的  $\psi$  和  $\psi'$  都  $> 0$ ，因此  $\psi$  会一直增长下去，在  $x \rightarrow +\infty$  时  $\psi \rightarrow +\infty$ ，这当然不行。为了避免这样的情况发生，我们应该增加一点  $E$  的值。而如果  $E$  增加得太多， $\psi$  在  $x \rightarrow +\infty$  时又可能  $\rightarrow -\infty$ ，这也不行。所以情况是如此微妙，就是存在一个能量  $E_c$ ，恰好使  $x \rightarrow +\infty$  时  $\psi \rightarrow 0$ 。这样的能量  $E_c$  就是实际存在的能级。当然，图中所画的情况—— $\psi$  在  $x_1 < x < x_2$  中 4 次跨过横轴，并不是必然的。把能量降低得充分多，我们可以依次找到使  $\psi$  在  $x_1 < x < x_2$  中 3 次，2 次，1 次跨过横轴乃至与横轴完全不相交的能级，见右图。

在数学上，有严格的理论—Sturm-Liouville 理论，可以证明离散本征值的存在。



## §3.2 方势阱

### 3.2.1 一维无限深势阱

一维无限深势阱的势能函数是：

$$V(x) = \begin{cases} 0, & -a < x < a \\ +\infty, & x < -a \text{ 或 } x > a \end{cases}$$

它的物理图像是：在  $x = a$  和  $x = -a$  处放有两块无限刚性（不可穿透）的平行板，粒子在两板之间自由运动，运动方向与板面垂直。

从方程来看，在势阱外  $V = +\infty$ ，必有：

$$\psi(x) \equiv 0. \quad (x < -a \text{ 或 } x > a)$$

直观地说，由于平行板是不可穿透的，所以粒子不可能跑出势阱之外。在势阱内， $\psi(x)$  满足方程

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0. \quad (-a < x < a)$$

显然  $E$  必须  $> 0$ ，所以记

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar},$$

那么方程变成：

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

它的一般解是：

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

这三段 ( $x < -a$ ,  $-a < x < a$ ,  $x > a$ ) 的解必须在  $x = \pm a$  处衔接起来。在势能有无限大跳跃的地方，衔接条件只有  $\psi$  本身的连续性。所以现在

$$\begin{cases} A \cos ka + B \sin ka = 0, & (\text{当 } x = a) \\ A \cos ka - B \sin ka = 0, & (\text{当 } x = -a) \end{cases}$$

因而

$$\begin{cases} A \cos ka = 0, \\ B \sin ka = 0. \end{cases}$$

有两种情形的解：

(1)  $B = 0, \cos ka = 0$ ，所以

$$\begin{aligned} k &= \frac{\left(n + \frac{1}{2}\right)\pi}{a}, \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \\ E &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \left(n + \frac{1}{2}\right)^2, \\ \psi(x) &= A \cos \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{\pi x}{a}. \quad (\text{偶宇称}) \end{aligned}$$

(2)  $A = 0, \sin ka = 0$ ，所以

$$\begin{aligned} k &= \frac{n\pi}{a}, \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \\ E &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2, \\ \psi(x) &= B \sin \frac{n\pi x}{a}. \quad (\text{奇宇称}) \end{aligned}$$

二者合起来可以写为：

$$k_n = \frac{n\pi}{2a}, \quad (n=1,2,3,\cdots)$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} n^2,$$

$$\psi_n(x) = A'_n \sin \frac{n\pi}{2a}(x+a).$$

波函数的归一化条件是：

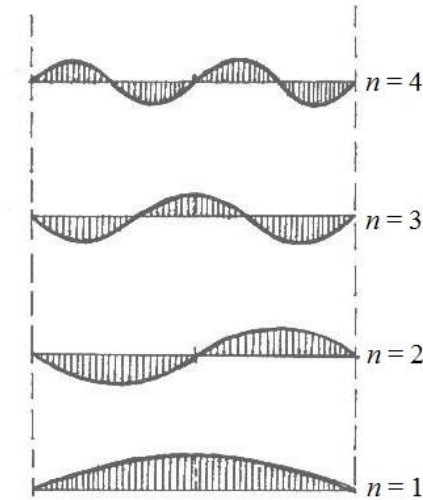
$$\int_{-a}^a |\psi(x)|^2 dx = 1,$$

计算得

$$A'_n = \frac{1}{\sqrt{a}}, \quad (\text{与 } n \text{ 无关})$$

最后，波函数是：

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin \frac{n\pi}{2a}(x+a).$$



分析。

(1) 粒子的量子状态是离散的，量子化条件是  $k = n\pi/2a$  ( $n=1,2,\cdots$ )，而  $\hbar k = p$  ( $p$  是粒子的动量)，所以  $2Lp = nh$  ( $n=1,2,3,\cdots$ ) ( $L=2a$  是势阱的宽度)。这表明：在粒子的相空间即  $(x, p_x)$  空间中看，每个量子状态占有  $h$  这么大的体积。这一点在统计力学中有重要的应用。

(2) 能量也是量子化的， $E_n \propto n^2$ 。 $E_1$  最低但  $\neq 0$ ，对应的状态称为**基态**， $E_1 = \hbar^2 \pi^2 / 2mL^2$  称为**零点能**。非零的零点能的出现是由于微观粒子服从不确定关系，是量子力学中的普遍现象。

(3) 波函数是**驻波**。

(4) 态的**宇称**是偶奇相间，基态为**偶宇称**。

(5) 波函数的**节点数**为  $n-1$ 。

这些特点都是有代表性的。

也可以把一维无限深势阱的区间取在  $0 < x < L$ ，这时波函数比较简单，但失去了宇称特征。

### 3.2.2 对称有限深方势阱

它的势能函数是

$$U(x) = \begin{cases} 0, & -a < x < a \\ V_0 (> 0), & x < -a \text{ 或 } x > a \end{cases}$$

对于束缚态，

$$0 < E < V_0,$$

所以方程是：

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

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \beta^2\psi(x) = 0. \quad (\beta = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar, x < -a \text{ 或 } x > a)$$

第二个方程的一般解是：

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

对  $x < -a$ ，当  $x \rightarrow -\infty$  时  $e^{-\beta x} \rightarrow +\infty$ ，应该舍去。同理对于  $x > a$  应该舍去  $e^{\beta x}$ 。所以波函数是：

$$\psi(x) = \begin{cases} Ce^{\beta x}, & (x < -a) \\ A\cos kx + B\sin kx, & (-a < x < a) \\ De^{-\beta x}, & (a < x) \end{cases}$$

按说应该把它们在  $x = \pm a$  两点衔接起来，但是回忆以前讲过的宇称定理，我们可以做得更简单些。

(1) 偶宇称解

$$B = 0, C = D.$$

在  $x = a$  处让  $\psi(x)$  和  $d\psi/dx$  都连续，或者说让  $(\ln \psi(x))'$  连续：

$$(\ln \cos kx)' \Big|_{x=a} = (\ln e^{-\beta x})' \Big|_{x=a},$$

得到

$$k \tan ka = \beta. \quad \left( k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \beta = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \right)$$

(2) 奇宇称解

$$A = 0, C = -D.$$

类似地可得：

$$k \cot ka = -\beta. \quad \left( k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \beta = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \right)$$

它们是含有  $E$  的超越方程，可以从中解出  $E$ 。为了看出能级的分布情况，可以采用图解法。令

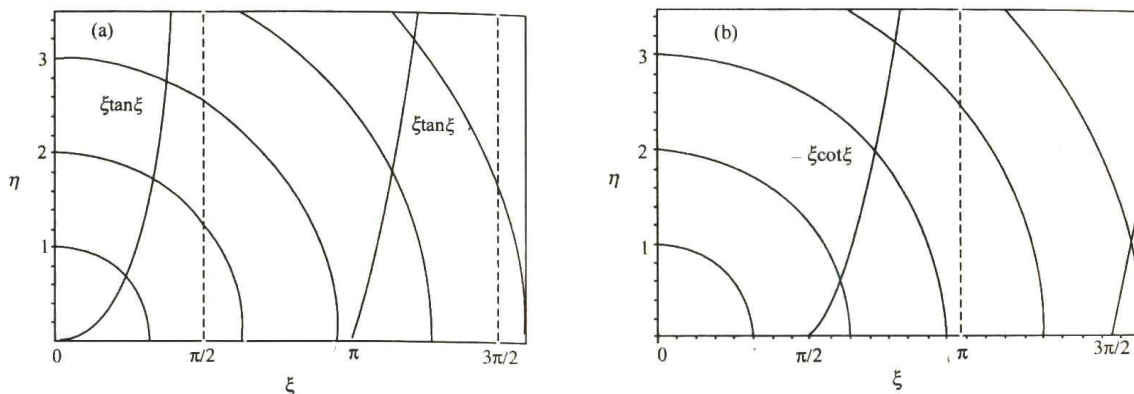
$$\xi = ka, \eta = \beta a. \quad (\xi, \eta > 0, \text{无量纲})$$

则方程成为

$$\begin{cases} \eta = \xi \tan \xi \text{ (偶宇称解) 或 } \eta = -\xi \cot \xi \text{ (奇宇称解),} \\ \xi^2 + \eta^2 = \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2}. \end{cases}$$

找出这两族曲线的交点，记交点的  $\xi$  值为  $\xi_1, \xi_2, \dots$ ，则能级就是：

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \xi_n^2.$$



讨论:

(1) 能级的宇称是偶奇相间, 最低的能级是偶宇称。

(2)  $0 < \xi_1 < (\pi/2) < \xi_2 < \pi < \dots$ , 所以每个能级都比无限深势阱的相应能级低一些。在  $V_0 \rightarrow \infty$  时它们分别趋近于无限深势阱的对应能级, 而且波函数也分别趋近于无限深势阱中的波函数。这从另一个角度表明我们对无限深势阱中的波函数提出的条件 (在势阱的边界处只要求波函数连续而不要求它的一阶导数连续) 是正确的。

(3) 不论势阱多浅或多窄, 至少存在一个束缚态 (这只适用于一维空间)。

(4) 在给定的势阱中, 束缚态能级的个数是  $\geq \sqrt{8mV_0a^2 / \hbar^2\pi^2}$  而最接近它的正整数。

(5) 基态波函数没有节点, 能级每向上升高一级, 波函数的节点就增加 1 个。

### §3.3 $\delta$ 函数势阱

#### 3.3.1 $\delta$ 函数的定义和主要性质

$\delta$  函数的概念是 Dirac 首先提出来的, 它有直接的物理背景。例如考虑一些电荷分布在一条直线上, 可以引入线电荷密度  $\rho(x)$  来描写这个分布, 它的定义是

$$\rho(x) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta q}{\Delta x},$$

其中  $\Delta q$  是分布在间隔  $\Delta x$  中的电荷, 而这条直线上的总电荷  $Q$  由  $\rho(x)$  的积分给出:

$$Q = \int \rho(x) dx.$$

如果实际的电荷分布是在  $x = a$  处有一个点电荷  $Q$ , 其它各处都没有电荷, 那么显然  $\rho(x)$  在  $x \neq a$  的地方处处是零, 而在  $x = a$  这一点变成了无穷大。Dirac 建议: 把这时的线电荷密度  $\rho(x)$  记为

$$\rho(x) = Q \delta(x - a),$$

其中的  $\delta(x - a)$  就称为  $\delta$  函数。它显然是一种非常“奇异”的函数。

可以这样来理解  $\delta$  函数:

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

并且

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - a) dx = 1.$$

但是严格地说  $\infty$  不是数, 所以上面这种表达  $\delta$  函数的方法并不符合数学中关于函数的定义。严格一点, 可以认为  $\delta$  函数是一种特殊的积分核, 按照下式来定义:

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

其中函数  $f(x)$  在  $x = a$  ( $-\infty < a < +\infty$ ) 处是连续的。但是这里的积分仍然不是黎曼(Riemann)积分, 所以  $\delta$  函数是一种广义函数。

可以把  $\delta$  函数看作是一些含参数的连续函数的极限情形。例如考虑

$$\delta(x, \alpha) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \alpha e^{-\alpha^2 x^2} \quad (\alpha > 0)$$

在  $\alpha \rightarrow +\infty$  时的极限。显然

$$\lim_{\alpha \rightarrow +\infty} \alpha e^{-\alpha^2 x^2} = \begin{cases} 0, & (x \neq 0) \\ +\infty, & (x = 0) \end{cases}$$

同时

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha^2 x^2} dx = 1,$$

所以这个极限函数满足  $\delta$  函数的条件, 也就是说

$$\lim_{\alpha \rightarrow +\infty} \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha^2 x^2} = \delta(x).$$

类似的极限还有

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \frac{\sin kx}{\pi x} = \delta(x),$$

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \frac{\sin^2 kx}{\pi k x^2} = \delta(x),$$

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \frac{1 - \cos kx}{\pi k x^2} = \delta(x),$$

它们将陆续在本课程的后续内容中得到应用。

某些含有  $\delta$  函数的公式:

(1)



$$\delta(x) = \frac{d\varepsilon(x)}{dx},$$

其中  $\varepsilon(x)$  是单位阶跃函数:

$$\varepsilon(x) = \begin{cases} 0, & (x < 0) \\ 1, & (x > 0) \end{cases}$$

当然, 这里的微分也是广义的。

(2) 对于任何非零实数  $\lambda$ ,

$$\delta(\lambda x) = \frac{1}{|\lambda|} \delta(x).$$

推论:  $\delta(x)$  是偶函数, 即  $\delta(-x) = \delta(x)$ 。更一般地说,

$$\delta(f(x)) = \sum_i \frac{\delta(x - x_i)}{|f'(x_i)|},$$

其中  $x_i$  ( $i = 1, 2, \dots$ ) 是方程  $f(x) = 0$  的各个单实根 (重根的情况另外考虑),  $f'(x)$  代表一阶导数。

(3)

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta'(x - a) dx = -f'(a), \quad \left( f'(x) \equiv \frac{df}{dx} \right)$$

更一般地,

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta^{(n)}(x - a) dx = (-1)^n f^{(n)}(a). \quad \left( f^{(n)}(x) \equiv \frac{d^n f}{dx^n} \right)$$

(4)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dx = 2\pi \delta(k).$$

这个等式应该按下式的意义来理解:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dx = \lim_{M \rightarrow +\infty} \int_{-M}^{+M} e^{ikx} dx = 2 \lim_{M \rightarrow +\infty} \frac{\sin kM}{k} = 2\pi \delta(k).$$

### 3.3.2 一维 $\delta$ 函数势阱中的束缚态

设势能函数是

$$V(x) = -\gamma \delta(x). \quad (\gamma > 0)$$

那么只有  $E < 0$  才是束缚态。注意到在  $x = 0$  处  $V(x)$  有无限大的跳跃, 所以  $\psi'(0)$  是不连续的。把此时的 Schrödinger 方程

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

在  $-\varepsilon < x < +\varepsilon$  ( $\varepsilon \rightarrow 0^+$ ) 上积分, 可以得到  $\psi'(0)$  的跃变条件

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

在  $x \neq 0$  的区域, 方程是

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} - \beta^2 \psi = 0, \quad \left( \beta = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar} \right)$$

所以对于偶宇称态, 波函数为

$$\psi(x) = \begin{cases} C e^{\beta x}, & (x < 0) \\ C e^{-\beta x}, & (x > 0) \end{cases}$$

把  $\psi'(0)$  的跃变条件代进去, 得到

$$\beta = \frac{m\gamma}{\hbar^2},$$

所以粒子的能量本征值为

$$E = -\frac{\hbar^2 \beta^2}{2m} = -\frac{m\gamma^2}{2\hbar^2}.$$

波函数的归一化是

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \frac{|C|^2}{\beta} = 1,$$

所以

$$C = \sqrt{\beta}.$$

通常记

$$L = \frac{1}{\beta} = \frac{\hbar^2}{m\gamma},$$

称为 $\delta$ 势的**特征长度**，它代表了这个 $\delta$ 势的影响范围，那么 $\delta$ 函数势阱又可以写为

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{mL} \delta(x),$$

所以 Schrödinger 方程成为

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left( \frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{2}{L} \delta(x) \right) \psi = 0,$$

它的束缚态波函数是

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{-|x|/L},$$

而能量本征值是

$$E = -\frac{\hbar^2}{2mL^2}.$$

不难证明：奇宇称态不可能满足在 $x=0$ 点波函数连续的条件，除非 $\psi(x) \equiv 0$ 。所以在 $\delta$ 势阱中仅存在一个偶宇称的束缚态。

### 3.3.3 $\delta$ 函数势阱与方势阱的关系

我们可以先假设一个有限深和有限宽的方势阱

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & (V_0 > 0), \quad (|x| < \varepsilon) \\ 0 & (|x| > \varepsilon) \end{cases}$$

然后让波函数在 $x = \pm \varepsilon$ 处满足本身连续而且一阶导数也连续的条件，那么不难证明：如果取极限

$$\varepsilon \rightarrow 0, V_0 \rightarrow +\infty, 2\varepsilon V_0 \rightarrow \gamma,$$

则波函数本身在 $x=0$ 点仍然连续但一阶导数有跃变：

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

这正是 $\delta$ 函数势阱 $V(x) = -\gamma\delta(x)$ 要求的波函数条件。所以， $\delta$ 势阱是短程作用的一种理想化近似。

### §3.4 线性谐振子

关于谐振子的研究，无论在理论上还是应用上都很重要。

#### 3.4.1 方程的无量纲化和化简

线性谐振子的势能函数是：

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

其中  $\omega$  是谐振子的固有圆频率，所以它的 Schrödinger 方程是：

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left( \frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} x^2 \right) \psi = 0.$$

在方程中做如下的无量纲化变换：

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \equiv \alpha x, \quad \left( \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \right)$$

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega},$$

则方程变成

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\psi(\xi) = 0.$$

观察  $\xi \rightarrow \pm\infty$  的情形，方程近似为：

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} \approx \xi^2\psi.$$

它有近似解

$$\psi(\xi) \sim e^{\pm\xi^2/2}.$$

但是  $e^{+\xi^2/2}$  应该舍去。再进行变换：

$$\psi(\xi) = e^{-\xi^2/2} H(\xi),$$

可得关于  $H(\xi)$  的如下方程：

$$\frac{d^2H}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH}{d\xi} + (\lambda - 1)H = 0.$$

#### 3.4.2 厄密(Hermite)多项式

可以用级数法求解  $H(\xi)$ ，即令

$$H(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \xi^k,$$

代入方程中得

$$\sum_{k=2}^{\infty} k(k-1)c_k \xi^{k-2} - \sum_{k=0}^{\infty} (2k+1-\lambda)c_k \xi^k = 0,$$

所以系数  $\{c_k\}$  必须满足递推公式

$$c_{k+2} = \frac{2k+1-\lambda}{(k+1)(k+2)} c_k, \quad (k=0,1,2,3,\dots).$$

可以证明：如果  $H(\xi)$  是真无穷级数，也就是  $k \rightarrow \infty$  时  $c_k \neq 0$ ，那么在  $x \rightarrow \pm\infty$  的时候  $H(\xi)$  就  $\rightarrow e^{\xi^2}$ ，仍然使  $\psi(\xi)$  发散。能够避免这种情形出现的唯一出路是级数中止，即退化为多项式，而这就要求  $\lambda$  只能取一些特殊的值。设要求  $H(\xi)$  是  $\xi$  的  $n$  次多项式，那么  $c_n \neq 0$  而  $c_{n+2} = 0$ ，从递推公式可知此时

$$\lambda = 2n+1, \quad n=0,1,2,3,\dots.$$

这样，我们首先得到了能量本征值：

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

其次，现在  $H(\xi)$  的方程成为：

$$\frac{d^2 H_n}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH_n}{d\xi} + 2nH_n = 0.$$

不难用数学归纳法验证下面的  $n$  次多项式满足这个方程：

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2},$$

它称为  $n$  次 Hermite 多项式。又，函数  $G(s, \xi) \equiv e^{-s^2 + 2\xi s}$  称为 Hermitian 多项式  $H_n(\xi)$  的母函数（生成函数），因为

$$e^{-s^2 + 2\xi s} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} s^n.$$

头 3 个 Hermite 多项式是：

$$H_0(\xi) = 1,$$

$$H_1(\xi) = 2\xi,$$

$$H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2.$$

一般地说， $n$  次 Hermite 多项式的奇偶性是

$$H_n(-\xi) = (-1)^n H_n(\xi),$$

并且  $H_n(\xi)$  的最高幂项是  $(2\xi)^n$ 。

### 3.4.3 线性谐振子的能级和波函数

我们把线性谐振子的能级和波函数总结如下。能级是

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots,$$

对应的波函数是：

$$\psi_n(x) = N_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2} = N_n H_n(\alpha x) e^{-\alpha^2 x^2/2}, \quad (\alpha = \sqrt{m\omega/\hbar})$$

$N_n$  是归一化常数，使  $\psi_n(x)$  满足

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = 1.$$

利用 Hermite 多项式的带权  $e^{-\xi^2}$  正交性

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_m(\xi) H_n(\xi) e^{-\xi^2} d\xi = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{mn},$$

其中

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ 1, & m = n \end{cases}$$

可得

$$N_n = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!}}.$$

所以最低的 3 个谐振子能级的波函数是

$$\psi_0(x) = \frac{\sqrt{\alpha}}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\alpha^2 x^2/2},$$

$$\psi_1(x) = \frac{\sqrt{2\alpha}}{\sqrt[4]{\pi}} \alpha x e^{-\alpha^2 x^2/2},$$

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

讨论。

- (1) 能级是等间隔的；
- (2) 零点能是  $E_0 = \hbar\omega/2$ ；
- (3) 能级的宇称是偶奇相间，基态是偶宇称；
- (4)  $\psi_n(x)$  有  $n$  个节点；

(5) 粒子具有一定的概率出现在经典允许区之外。对于基态能量  $E_0 = \hbar\omega/2$ ，按照经典力学，粒子将被限制在  $|\alpha x| \leq 1$ （经典允许区）之内，但是按照量子力学，粒子有一定的概率出现在经典允许区之外。对于基态，这个概率为

$$\frac{\int_0^\infty e^{-\xi^2} d\xi}{\int_0^\infty e^{-\xi^2} d\xi} \approx 16\%.$$

这是一种量子效应，在基态表现得最为明显。随着能量的增加，这个概率逐渐减小。这使 Bohr 提出了“对应原理”：在大量子数极限下，量子状态趋近于经典状态。但是这个问题现在有了新的观点，叫做“相干态”，本课将在以后适当的时候介绍相干态。

### §3.5 一维散射问题

#### 3.5.1 一维散射问题的一般提法

为简单起见, 考虑

$$V(+\infty) = V(-\infty) = 0, \quad E > 0,$$

的情形, 所以这时的状态是非束缚态, 或称散射态。现在  $E > 0$  的任何值都可以使方程有单值、有限、连续的解, 即能量有连续谱, 所以问题不再是求能量本征值, 而是求散射几率。问题的提法如下。

在  $x \rightarrow \pm\infty$  时  $V = 0$ , 方程是

$$\psi'' + k^2 \psi = 0, \quad (k = \sqrt{2mE} / \hbar)$$

所以

$$\psi(x) = e^{ikx} \text{ 和 } e^{-ikx} \text{ 的线性组合,}$$

其中  $e^{ikx}$  是正向行波,  $e^{-ikx}$  是反向行波。实际情况是: 粒子从一边入射, 被势场散射而分成了反射和透射两个部分。这给方程提出了如下的定解条件:

$$\text{如果粒子从左方入射, 那么 } x \rightarrow +\infty \text{ 时 } \psi(x) \rightarrow C e^{ikx},$$

$$\text{如果粒子从右方入射, 那么 } x \rightarrow -\infty \text{ 时 } \psi(x) \rightarrow C e^{-ikx}.$$

下面以左方入射为例, 边界条件是:

$$x \rightarrow -\infty \text{ 时 } \psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}, \quad (\text{入射加反射})$$

$$x \rightarrow +\infty \text{ 时 } \psi(x) = C e^{ikx}. \quad (\text{只有透射})$$

在  $\psi = A e^{ikx}$  时, 粒子的几率流密度是:

$$J = \frac{i\hbar}{2m} \left( \psi \frac{d\psi^*}{dx} - \psi^* \frac{d\psi}{dx} \right) = |A|^2 \frac{\hbar k}{m} = |A|^2 v,$$

其中  $v = \hbar k / m = p / m$  是粒子的经典速度。所以在上面的边界条件下,

$$\text{入射几率流密度是 } J_I = |A|^2 v,$$

$$\text{反射几率流密度是 } J_R = |B|^2 v,$$

$$\text{透射几率流密度是 } J_T = |C|^2 v,$$

由此定义:

$$\text{反射系数 } R = J_R / J_I = |B|^2 / |A|^2,$$

$$\text{透射系数 } T = J_T / J_I = |C|^2 / |A|^2,$$

它们是实验上可以测量的, 也是理论上要计算的。由于  $R, T$  分别依赖于比值  $B/A, C/A$  而不是它们的绝对数值, 所以经常取  $A=1$ , 这时

$$R = |B|^2, \quad T = |C|^2.$$

#### 3.5.2 方势垒的量子隧穿

方势垒是:

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

取  $0 < E < V_0$ , 所以方程是:

$$\begin{cases} \psi'' + k^2 \psi = 0, & x < 0 \text{ 或 } x > a \\ \psi'' - \alpha^2 \psi = 0, & 0 < x < a, \quad \alpha = \sqrt{2m(V_0 - E) / \hbar^2} \end{cases}$$

当粒子从左方入射时, 据前述应假设

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + B e^{-ikx}, & x < 0 \\ F \sinh \alpha x + G \cosh \alpha x, & 0 < x < a \\ C e^{ikx}, & x > a \end{cases}$$

让  $\psi$  和  $\psi'$  在  $x=0$  和  $x=a$  处连续, 我们得到 4 个方程, 从中可以解出  $B, C, F, G$ 。结果是

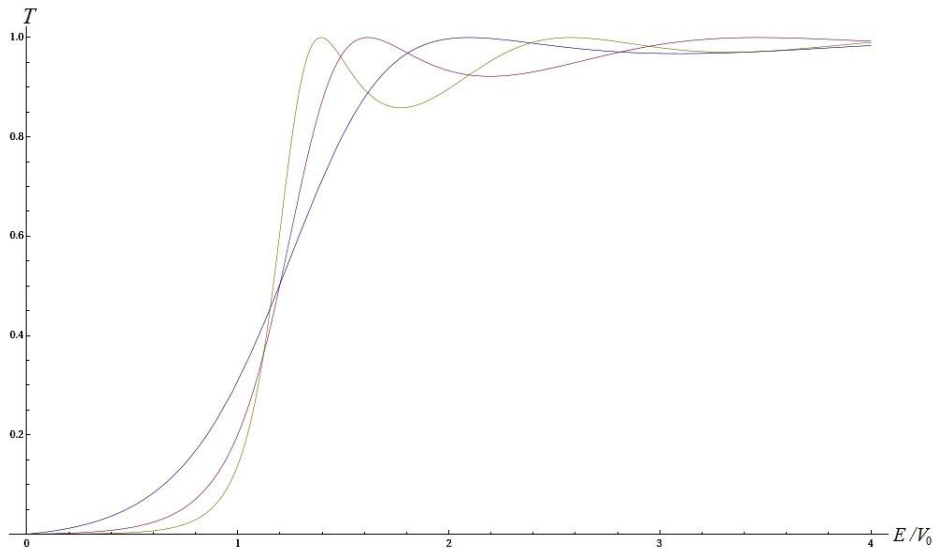
$$B = \frac{(k^2 + \alpha^2) \sinh \alpha a}{(k^2 - \alpha^2) \sinh \alpha a + 2i k \alpha \cosh \alpha a},$$

$$C = \frac{2i k \alpha e^{-ika}}{(k^2 - \alpha^2) \sinh \alpha a + 2i k \alpha \cosh \alpha a},$$

所以反射系数和透射系数分别是:

$$R = |B|^2 = \frac{(k^2 + \alpha^2)^2 \sinh^2 \alpha a}{(k^2 + \alpha^2)^2 \sinh^2 \alpha a + 4k^2 \alpha^2},$$

$$T = |C|^2 = \frac{4k^2 \alpha^2}{(k^2 + \alpha^2)^2 \sinh^2 \alpha a + 4k^2 \alpha^2}.$$



讨论。

- (1)  $R + T = 1$ , 即是几率守恒;
- (2) 在  $E < U_0$  时  $T \neq 0$ , 这是经典力学不能解释的, 称为**量子隧道效应**, 或简称**量子隧穿**;
- (3) 如果  $\alpha a \gg 1$ , 则近似有(WKB 近似)

$$T \approx T_0 e^{-2\alpha a}, \quad \alpha a = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)a^2}}{\hbar}, \quad T_0 = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2}.$$

它对势垒高度( $V_0$ )、宽度( $a$ )和粒子能量( $E$ )非常敏感。

量子隧穿的应用: 解释放射性元素的  $\alpha$  衰变, 隧道二极管, 扫描隧道显微镜, 电子的冷发射, 等。

### 3.5.3 方势阱的共振透射

如果把方势垒改成方势阱, 那就要把前面的  $V_0$  变为  $-V_0$  ( $V_0 > 0$ )。这时整个实轴都是经典允许区, 不存在量子隧穿的问题, 但是我们在这里仍然发现了波动的特征, 即共振现象。

不难证明, 对于势阱情况下的透射系数, 只需对上面的结果略做改变, 即变为

$$T = \frac{4k^2 k'^2}{(k^2 - k'^2)^2 \sin^2 k'a + 4k^2 k'^2},$$

其中

$$k' = \sqrt{2m(E + V_0)} / \hbar.$$

我们发现：当

$$k'a = n\pi \quad (n=1, 2, 3, \dots)$$

的时候，

$$\sin k'a = 0, \quad T = 1.$$

也就是说透射系数取得极大值。 $k'a = n\pi$  的条件也就是

$$E = -V_0 + \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2},$$

其中  $n$  的取值要使得  $E > 0$ ，这正是以  $-V_0$  为势能起点、宽度为  $a$  的无限深势阱中的能级公式。之所以如此，是因为在散射问题中透射系数出现极大值和无限深势阱中形成束缚态的物理原因是相同的，就是在势阱的两个壁上的反射回波在势阱里边产生了共振，这时势阱的宽度恰好成为半波长的整数倍。所以这种现象称为共振透射。也可以说，当入射粒子的能量恰好与势阱内的“虚”能级相重合时，就会发生共振透射。实际上，在量子隧穿中也有共振隧穿的现象发生，这时隧穿几率明显增大并达到极大值。



### \*§3.6 $\delta$ 势的穿透

#### \*3.6.1 $\delta$ 势垒的穿透

$\delta$  势垒是

$$V(x) = \gamma \delta(x), \quad (\gamma > 0)$$

设粒子能量  $E > 0$ ，即考虑散射问题。Schrödinger 方程为

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

所以  $\psi'(0)$  要满足跃变条件

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

在  $x \neq 0$  的区域  $V(x) \equiv 0$ ，所以当粒子从左方入射时，波函数是

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + R e^{-ikx}, & x < 0 \\ S e^{ikx}, & x > 0 \end{cases} \quad (k = \sqrt{2mE} / \hbar).$$

利用  $\psi(0)$  连续和  $\psi'(0)$  跃变的条件，得方程组

$$\begin{cases} 1 + R = S, \\ 1 - R = \left(1 - \frac{2m\gamma}{i\hbar^2 k}\right) S, \end{cases}$$

解得

$$S = \frac{\hbar^2 k}{\hbar^2 k + i m \gamma},$$

$$R = -\frac{i m \gamma}{\hbar^2 k + i m \gamma},$$

所以透射系数为

$$|S|^2 = \frac{1}{1 + (m^2 \gamma^2 / \hbar^4 k^2)} = \frac{1}{1 + (m \gamma^2 / 2 \hbar^2 E)},$$

反射系数为

$$|R|^2 = \frac{m^2 \gamma^2 / \hbar^4 k^2}{1 + (m^2 \gamma^2 / \hbar^4 k^2)} = \frac{m \gamma^2 / 2 \hbar^2 E}{1 + (m \gamma^2 / 2 \hbar^2 E)},$$

显然  $|S|^2 + |R|^2 = 1$ ，体现了几率守恒也就是粒子数守恒。

#### \*3.6.2 $\delta$ 势阱的穿透

如果将  $\delta$  势垒换成  $\delta$  势阱，就意味着把  $\gamma$  换成  $-\gamma$ ，而我们发现上面得到的透射系数和反射系数只依赖于  $\gamma^2$ ，所以它们都不变。

讨论：

(1)  $\delta$  势的特征长度是  $L = \hbar^2 / m\gamma$ ，入射粒子的圆波长是  $\tilde{\lambda} = \lambda / 2\pi = 1/k$ ，所以透射系数和反射系数又可以分别写为

$$|S|^2 = \frac{1}{1 + (\tilde{\lambda} / L)^2}, \quad |R|^2 = \frac{(\tilde{\lambda} / L)^2}{1 + (\tilde{\lambda} / L)^2}.$$

(2) 当入射粒子的能量非常高因而波长非常短的时候，就有

$$\tilde{\lambda} \ll L,$$

所以

$$|S|^2 \approx 1,$$

即高能粒子几乎可以完全穿过  $\delta$  势垒。