

第二章 波函数与薛定谔方程

3 波函数的统计诠释

一、波函数及其统计诠释

1 状态的描述

1.1 经典力学：质点

- 每一时刻具有确定的 \vec{r} , $\vec{p}(v)$
- 其他力学量可表示为 \vec{r} , \vec{p} 的函数
- 其状态变化服从牛顿运动定律

1.2 量子力学：波函数

- 粒子不可能同时具有确定的 \vec{r} 和 \vec{p}
- 粒子的状态由波函数 $\Psi(\vec{r}, t)$ 描述
- 其状态变化服从薛定谔方程

2 波粒二象性

2.1 实物粒子的波粒二象性

- 理论： $\lambda = \frac{h}{p}$, $v = \frac{E}{h}$
- 实验： C_{60} 分子的干涉实验

2.2 实物粒子二象性的理解

- 粒子性：与物质相互作用时的“整体性”，具有集中的能量 E 和动量 \vec{p}
- 波动性：在空间传播时的“可叠加性”，具有波长 λ 和波矢 \vec{k}
- 物质波包观点：夸大了波动性，抹杀了粒子性
- 疏密波观点：夸大了粒子性，抹杀了波动性

3.1 概率波

- 粒子的状态可由波函数 $\Psi(\vec{r}, t)$ 完全描述
- 其模平方 $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ 表示粒子空间分布的概率密度，波函数本身称为概率振幅

3.2 波函数的归一

- 空间概率密度： $w(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2$
- 归一化条件：
$$\int_{\infty} w(\vec{r}, t) d\tau = \int_{\infty} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d\tau = 1$$
- 注1：即使归一化后，波函数仍有一整体位相因子 $e^{i\delta}$ 不能确定
- 注2：某些理想（非物理）情况无法归一，如平面波

3.3 多粒子波函数

- 波函数： $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N; t)$
- 归一化条件：
$$\int_{\infty}^{(N)} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N; t) d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \dots d^3\vec{r}_N = 1$$

3.4 统计诠释对波函数的要求

- 波函数平方可积
- 满足归一化条件，但不排除某些理想波函数
- $|\Psi(\vec{r})|^2$ 单值，但不要求 $\Psi(\vec{r})$ 单值
- 一般 Ψ 和 $\nabla\Psi$ 连续，但 $\nabla\Psi$ 在势能无限大跳变处可以不连续

二、量子态叠加原理

1 量子态及其表象

1.1 态函数

- 动量表象： $c(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \psi(\vec{r}) e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} d^3\vec{r}$
- 坐标表象： $\psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int c(\vec{p}) e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} d^3\vec{p}$
- 注： $\psi(\vec{r})$ 和 $c(\vec{p})$ 构成傅里叶变换对

1.2 表象

- 含义：量子力学中态和力学量的表示方式
- 常用表象：坐标表象 $\psi(\vec{r})$ ，动量表象 $c(\vec{p})$ 等

2 量子态叠加原理

2.1 原理

若 $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n$ 是体系可能状态，则 $\Phi = \sum_n c_n \Psi_n$ 也是体系的可能状态，其中 c_n 为复常数

2.2 讨论

- 态矢量集合 $\{\Psi\}$ 对线性叠加封闭，故构成一个线性空间
- 态叠加原理要求态矢量的时间演化方程为线性齐次方程
- 叠加态 $\Phi = \sum_n c_n \Psi_n$ 处于态 Ψ_k 的概率与 $|c_k|^2$ 成正比

2.3 与经典叠加原理的区别

- Ψ 和 $c\Psi$ 描述的是同一个状态

- 波函数无直接物理意义，其叠加为概率波函数的叠加，而非概率密度的叠加

三、薛定谔方程

1 建立

1.1 算符

- 能量算符： $E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$
- 动量算符： $p \rightarrow -i\hbar \nabla$

1.2 方程

- 能量守恒： $E = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}, t)$
- 薛定谔方程： $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U(\vec{r}, t) \Psi$

2 讨论

2.1 连续性方程

- 空间概率密度： $w(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \Psi^*(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t)$
- 概率流密度矢量： $\vec{J} = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi)$
- 连续性方程： $\frac{\partial w}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} = 0$
- 物理意义：概率守恒，单位时间内体积V中增加的概率，等于从边界流入V的概率通量

2.2 质量守恒定律与电荷守恒定律

- 质量守恒： $\frac{\partial w_m}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}_m = 0$
- 电荷守恒： $\frac{\partial w_q}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}_q = 0$

2.3 说明

- 薛定谔方程是量子力学的一个基本假设
- 薛定谔方程是线性偏微分方程，满足态叠加原理

3 定态薛定谔方程

3.1 定态薛定谔方程

- 定义：粒子的势能函数 U 与时间 t 无关的稳定势场问题
- 定态波函数： $\Psi(\vec{r}, t) = e^{-\frac{iE}{\hbar}t}\psi(\vec{r})$
- 定态薛定谔方程： $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + U(\vec{r})\psi = E\psi$

3.2 定态与非定态

- 定态：体系的能量有确定值的状态
- 非定态：由若干个能量不同的本征态叠加所形成的态，即 $\Psi(\vec{r}, t) = \sum_E c_E \psi(\vec{r}) e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$

3.3 定态的特征

- 粒子的空间概率密度 $\omega(\vec{r})$ 和概率流密度 \vec{j} 不随时间改变
- 任何不显含时力学量的平均值不随时间改变
- 任何不显含时力学量的测值概率分布不随时间改变

4 哈密顿算符

- 薛定谔方程的普遍表达： $i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi$
- 单粒子的哈密顿算符： $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r})$

- 多粒子的哈密顿算符： $\hat{H} = \sum_{i=1}^N (-\frac{\hbar^2}{2m_i}\nabla_i^2 + U_i(\vec{r}_i)) + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$
- 能量本征方程： $\hat{H}\Psi = E\Psi$

四、一维运动问题的一般分析

1 一维定态薛定谔方程

- 方程： $[-\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)]\psi(x) = E\psi(x)$
- 其中 $E, U(x)$ 均为实数

2 一维定态的分类

2.1 束缚态与非束缚态

- 束缚态：粒子局限在有限的空间中，即 $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi(x) = 0$
- 非束缚态：粒子可以出现在无限远处的状态，即 $\lim_{x \rightarrow +\infty} \psi(x) > 0$ 或 $\lim_{x \rightarrow -\infty} \psi(x) > 0$

2.2 简并与非简并

- 定义：若对于给定的能级 E ，只有一个线性无关的波函数存在，则称该能级是非简并的；否则称其为简并的
- 简并度：简并态中线性独立的波函数个数称为其简并度

3 一维定态薛定谔方程的性质

定理1 共轭定理

- 若 $\psi(x)$ 是定态方程的解，则 $\psi(x)^*$ 也是方程的解，且能量相同

- 推论：若某能量本征值 E 的解无简并，则可取为实解

若 $U(x)$ 的不连续点跳变值有限，则能量本征函数 $\psi(x)$ 及其导数 $\psi(x)'$ 连续

定理2

对于任意能量本征值 E ，总可以找到定态方程的一组实解，其线性组合可以表示属于 E 的任何解

定理3 反射定理

3.1 定理

若 $U(x)$ 具有空间反射不变性，即 $U(x) = U(-x)$ ，那么若 $\psi(x)$ 是方程的解，则 $\psi(-x)$ 也是方程的解，且能量相同

3.2 宇称

- 空间反射算符： $\hat{P}\Psi(x) = \Psi(-x)$
- 本征方程： $\hat{P}\Psi(x) = \pi\Psi(x)$
- 宇称：空间反射算符的本征值， $\pi = 1$ 为偶宇称， $\pi = -1$ 为奇宇称

3.3 推论

若 $U(x) = U(-x)$ ，且某能量本征值 E 的解无简并，则该解必有确定的宇称

定理4

若 $U(x) = U(-x)$ ，则对于任意能量本征值 E ，总可以找到一组有确定宇称的解，其线性组合可以表示属于 E 的任何解

定理5

定理6 Wronskian定理

- Wronskian行列式：

$$\psi_1(x)\psi_2'(x) - \psi_2(x)\psi_1'(x)$$

称为 $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$ 的Wronskian行列式

- 若 $\psi_1(x)$ 和 $\psi_2(x)$ 均为方程的解且能量相同，则 $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$ 的Wronskian行列式为与 x 无关的常数，即 $\psi_1(x)\psi_2'(x) - \psi_2(x)\psi_1'(x) = c$

定理7 不简并定理

- 定理：设 $U(x)$ 为规则势场（即无奇点），若粒子存在束缚态，则该状态一定是非简并的
- 注：对于常见的非规则势场（如无限深势阱， δ 势阱），上述定理仍然成立

五、一维无限深势阱和方势阱

1 一维无限深势阱

1.1 势能函数

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

1.2 定态薛定谔方程

- 阱内： $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi(x)$
- 阱外： $(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \infty)\psi(x) = E\psi(x)$

1.3 列写通解

- 阱内: $\psi(x) = A \sin(kx + \delta)$, 其中 $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$
- 阱外: $\psi(x) = 0$

$$U(x) = \begin{cases} 0, & |x| < \frac{a}{2} \\ U_0, & |x| > \frac{a}{2} \end{cases}$$

1.4 边界条件

- 利用边界条件 $\psi(0) = 0, \psi(a) = 0$, 得 $ka = n\pi, n = 1, 2, 3, \dots$
- 能级: $E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}, n = 1, 2, 3, \dots$
- 波函数: $\psi_n(x) = A_n \sin(\frac{n\pi}{a}x), n = 1, 2, 3, \dots$

1.5 归一化条件

- 利用归一化条件 $\int_0^a |\psi_n(x)|^2 dx = 1$, 得 $A_n = \sqrt{\frac{2}{a}}$
- 归一化波函数:

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

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

1.6 讨论

- 能量本征值: 无限深势阱的能量是量子化的, 其最低能级为 $E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$
- 本征函数系: 本征函数是两两正交的, 即 $\int_0^a \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx = \delta_{m,n}$

2 有限深对称方势阱

2.1 势能函数

2.2 定态薛定谔方程

考虑束缚态, 即 $0 < E < U_0$ 时

- 阱内: $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0$, 其中 $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$
- 阱外: $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \beta^2\psi(x) = 0$, 其中 $\beta = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}$

2.3 列写通解

- 阱内: $\psi(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx)$
- 阱外: $\psi(x) = C e^{\beta x} + D e^{-\beta x}$

2.4 物理分析

- 束缚态条件: 注意到 $E < U_0$ 为束缚态, 有 $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi(x) = 0$, 故波函数为

$$\psi(x) = \begin{cases} C e^{\beta x}, & x < -\frac{a}{2} \\ A \cos(kx) + B \sin(kx), & -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \\ D e^{-\beta x}, & x > \frac{a}{2} \end{cases}$$

- 势能对称性: 注意到 $U(x) = U(-x)$, 故定态波函数必有确定的宇称, 下分偶宇称和奇宇称分别进行讨论

2.5 边界条件

- 偶宇称: $B = 0, C = D$, 由边界条件得

$$\begin{cases} A \cos(\frac{ka}{2}) = D e^{-\frac{\beta a}{2}} \\ -k A \sin(\frac{ka}{2}) = -\beta D e^{-\frac{\beta a}{2}} \end{cases} \Rightarrow k \tan(\frac{ka}{2}) = \beta$$

- 奇宇称: $A = 0, C = -D$, 由边界条件得

$$\begin{cases} B \sin(\frac{ka}{2}) = D e^{-\frac{\beta a}{2}} \\ k B \sin(\frac{ka}{2}) = -\beta D e^{-\frac{\beta a}{2}} \end{cases} \Rightarrow k \cot(\frac{ka}{2}) = -\beta$$

- 图解法: 引入 $\xi = \frac{ka}{2}, \eta = \frac{\beta a}{2}$, 采用图解法解如下超越方程

$$\begin{cases} \eta = \xi \tan \xi \\ \eta^2 + \xi^2 = \frac{mU_0 a^2}{2\hbar^2} \end{cases} \quad \text{or} \quad \begin{cases} \eta = -\xi \cot \xi \\ \eta^2 + \xi^2 = \frac{mU_0 a^2}{2\hbar^2} \end{cases}$$

- 能级: $E_n = \frac{2\hbar^2}{ma^2} \xi_n^2$

2.6 讨论

由图解法可得:

- 无论势阱深浅, 至少存在一个束缚态(基态)
- 能级的宇称奇偶相间, 最低能级为偶宇称
- 有限深势阱的各能级都低于无限深势阱能级; 当 $n \rightarrow \infty$ 时, 各能级趋近于无限深势阱的响应能级
- 束缚态能级总数 $N = 1 + [\frac{a}{h\pi} \sqrt{2mU_0}]$

3 束缚态与离散谱

3.1 束缚态能级

束缚能量本征态的能级是离散的

3.2 波函数性质

- 在经典允许区, 即 $U(x) < E$ 时: 波函数为震荡函数 ($\sin kx, \cos kx$), $\psi(x)$ 总是向 x 轴弯曲
- 在经典禁区, 即 $U(x) > E$ 时: 波函数为单调函数 ($e^{\pm\beta x}$), $\psi(x)$ 总是背离 x 轴弯曲

3.3 基态与激发态

- 基态: 除 $\pm\infty$ 外, 在 x 有限的区域内基态波函数无节点
- 激发态: 随能级递增, 波函数节点数一次增加一个

六、量子隧穿效应

1 隧穿效应

1.1 势能函数

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

考虑 $0 < E < U_0$ 时的情况

1.2 定态薛定谔方程

$$\begin{cases} \frac{d^2 \psi_1(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi_1(x) = 0 & x < 0 \\ \frac{d^2 \psi_2(x)}{dx^2} - \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} \psi_2(x) = 0, & 0 < x < a \\ \frac{d^2 \psi_3(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi_3(x) = 0 & x > a \end{cases}$$

1.3 列写通解

$$\begin{cases} \psi_1(x) = e^{ikx} + Be^{-ikx} & x < 0 \\ \psi_2(x) = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}, & 0 < x < a \\ \psi_3(x) = Se^{ikx} & x > a \end{cases}$$

$$\text{其中 } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \kappa = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}$$

1.4 物理分析

- 透射波：从物理上分析，透射波 $\psi_3(x)$ 中只可能存在向右传播的 e^{ikx} 波，因此不存在 e^{-ikx} 项
- 概率流密度： $\vec{J} = \frac{i\hbar}{2m}(\Psi\nabla\Psi^* - \Psi^*\nabla\Psi)$ ，故有

$$J_i = |1|^2 \frac{\hbar k}{m} = v$$

$$J_r = |B|^2 \frac{\hbar k}{m} = |B|^2 v$$

$$J_t = |S|^2 \frac{\hbar k}{m} = |S|^2 v$$

- 透射概率： $T = \frac{J_t}{J_i} = |S|^2$
- 反射概率： $R = \frac{J_r}{J_i} = |B|^2$

1.5 边界条件

- 利用边界条件有：

$$\begin{cases} \psi_1(0) = \psi_2(0) \\ \psi_1'(0) = \psi_2'(0) \\ \psi_2(a) = \psi_3(a) \\ \psi_2'(a) = \psi_3'(a) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 1 + B = C + D \\ ik(1 - B) = \kappa(C - D) \\ Ce^{\kappa a} + De^{-\kappa a} = Se^{ika} \\ \kappa Ce^{\kappa a} - \kappa De^{-\kappa a} = ikSe^{ika} \end{cases} \begin{cases} \frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_1(x) = 0 & x < 0 \\ \frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} + \frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}\psi_2(x) = 0, & 0 < x < a \\ \frac{d^2\psi_3(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_3(x) = 0 & x > a \end{cases}$$

- 解得：

$$T = |S|^2 = \frac{4k^2\kappa^2}{(k^2 + \kappa^2)^2 sh^2\kappa a + 4k^2\kappa^2}$$

$$R = |B|^2 = \frac{(k^2 + \kappa^2)^2 sh^2\kappa a}{(k^2 + \kappa^2)^2 sh^2\kappa a + 4k^2\kappa^2}$$

1.6 讨论

- 概率非负：分析下式可知 $0 < T < 1$

$$T = [1 + \frac{(k^2 + \kappa^2)^2}{4k^2\kappa^2} sh^2\kappa a]^{-1} = [1 + \frac{1}{4\frac{E}{U_0}(1 - \frac{E}{U_0})} sh^2\kappa a]^{-1}$$

- 概率守恒： $R + T = 1$
- 近似公式：若满足条件 $\kappa a \gg 1$ ，利用 $sh\kappa a \approx \frac{1}{2}e^{\kappa a} \gg 1$ 可得

$$T \approx \frac{16k^2\kappa^2}{(k^2 + \kappa^2)^2} e^{-2\kappa a} \approx T_0 e^{-\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}}$$

分析可知 T 敏感地依赖于势垒高度 U_0 ，宽度 a ，粒子质量 m 和能量 E

- 粒子隧穿一般形状势垒的透射概率：

$$T \approx T_0 e^{-\frac{2}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2m(U(x) - E)} dx}$$

2 共振隧穿

考虑 $E > U_0$ 时的情况

2.1 定态薛定谔方程

2.2 列写通解

$$\begin{cases} \psi_1(x) = e^{ikx} + Be^{-ikx} & x < 0 \\ \psi_2(x) = Ce^{ik'x} + De^{-ik'x}, & 0 < x < a \\ \psi_3(x) = Se^{ikx} & x > a \end{cases}$$

$$\text{其中 } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, k' = \sqrt{\frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}}$$

2.3 物理分析

- 注意到在 $0 < E < U_0$ 时, $\kappa = \sqrt{\frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}}$, 故可将下关系式代入前表达式即可求得透射概率 T

$$\kappa = ik, \operatorname{sh}(ik'a) = i \sin(k'a)$$

- 透射概率:

$$T = [1 + \frac{1}{4}(\frac{k}{k'} - \frac{k'}{k})^2 \sin^2 k'a]^{-1}$$

分析可知: 当 $k'a = n\pi$ 时, $T = 1$

3 方势阱的反射、透射与共振

3.1 物理分析

- 将 $U_0 = -U_0$, $k\beta = \sqrt{\frac{2m(E+U_0)}{\hbar^2}}$ 代入前表达式可得

$$\begin{aligned} T &= [1 + \frac{1}{4}(\frac{k}{k'} - \frac{k'}{k})^2 \sin^2 k'a]^{-1} \\ &= [1 + \frac{\sin^2 k'a}{4\frac{E}{U_0}(1 + \frac{E}{U_0})}]^{-1} \end{aligned}$$

3.2 讨论

- 若 $U_0 = 0$, 则 $T = 1$
- 若 $U_0 \neq 0$, 则 $T < 1$, $|R|^2 \neq 0$
- 当 $k'a = n\pi$, $n = 1, 2, 3, \dots$ 时, $T = 1$, 称为共振透射, 此时有共振能级

$$E_n = -U_0 + \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}, n = 1, 2, 3, \dots$$

- 当 $k'a = (n + \frac{1}{2})\pi$, $n = 1, 2, 3, \dots$ 时, 反射最强

七、一维谐振子

1 势能函数

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

2 定态薛定谔方程

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

3 方程求解

3.1 无量纲变换

令 $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x = \alpha x$, $\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$, 则原方程化为

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

3.2 渐近分析

当 $\xi \rightarrow \pm\infty$ 时, 有 $\frac{d^2\psi}{d\xi^2} \approx \xi^2\psi(\xi)$, 从而 $\psi(\xi) \sim e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$, 故设 $\psi(\xi) = H(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$, 代入原方程得 Hermite 方程

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

3.3 级数解法

- 对 $H(\xi)$ 做幂级数展开 $H(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k$, 代入 Hermite 方程得到递推关系

$$a_{k+2} = \frac{2k - (\lambda - 1)}{(k+2)(k+1)} a_k, k = 0, 1, 2, \dots$$

- 取 $\lambda = 2n + 1, n = 0, 1, 2, \dots$, 则 $a_{k+2} =$ **4.5 性质**

$$\frac{2(k-n)}{(k+2)(k+1)} a_k, \text{ 解得}$$

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}, n = 0, 1, 2, \dots$$

- 简单的Hermite多项式:

$$H_0(\xi) = 1$$

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

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

4 能级和波函数

4.1 能级

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

4.2 波函数

$$\psi_n(x) = A_n H_n(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = A_n H_n(\alpha x) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}, n = 0, 1, 2, \dots$$

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

4.3 归一化系数

$$A_n = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!}}, n = 0, 1, 2, \dots$$

4.4 Hermite多项式

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}, n = 0, 1, 2, \dots$$

- 宇称: $\psi_n(-x) = (-1)^n \psi_n(x)$
- 正交性: $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m(x) \psi_n(x) dx = \delta_{mn}$

5 讨论

- 零点能: $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$
- 能量量子化: $E_{n+1} - E_n = \hbar\omega$, 源于粒子德布罗意波的自身干涉
- 宇称: 能量本征态的宇称奇偶相间, 基态为偶宇称
- 节点: $\psi_n(x)$ 有 n 个节点
- 与经典谐振子的比较: n 较小时, 概率分布与经典谐振子完全不同; $n \rightarrow \infty$ 时, 概率分布趋于经典概率分布, 能量量子化趋于能量取连续值
- 对应原理: 在大量子数极限下, 量子论将渐近地趋于经典理论