一维运动问题的
一般分析

一维运动问题的一般分析

一维定态 Schrödinger 方程是

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

写为二阶常微分方程的标准形式

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

单选题 1分

设置

关于定态薛定谔方程的解，下面说法正确的是：

A 只能是实函数。

B 只能是虚函数。

C 可以是虚函数，也可以是实函数。

D 不确定。

提交

在经典力学的意义上

$$E = T + V$$

T 是动能，永远 ≥ 0

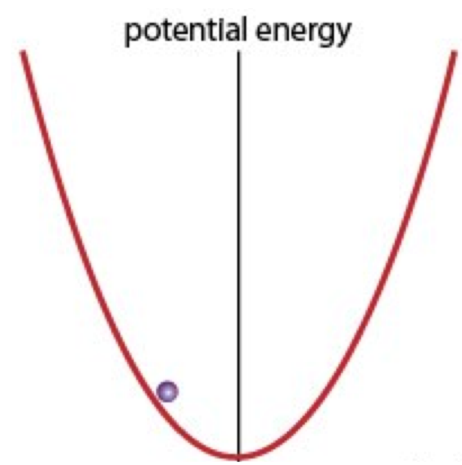
因此有 $$E - V \geq 0$$

而在量子力学中，由于不确定关系，无法谈粒子“在某点处的动能”

因此即使在 $E - V < 0$ 的区域

波函数仍然有非零解

粒子仍然会在那些区域出现



方程在 $E-V<0$ 的区域**和**

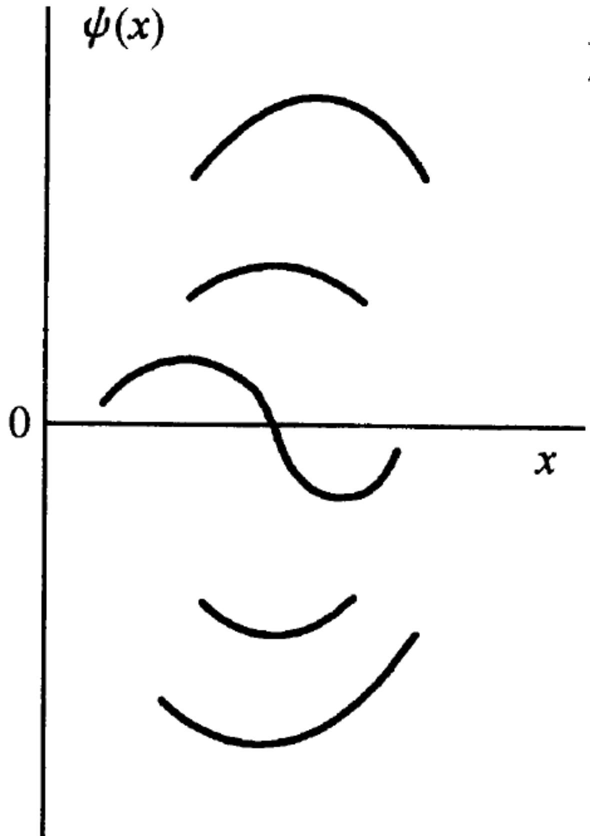
$E-V>0$ 的区域解的特征是完全不同的

$E-V>0$ 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

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



在 $V(x)<E$ 区域（经典允许区）中

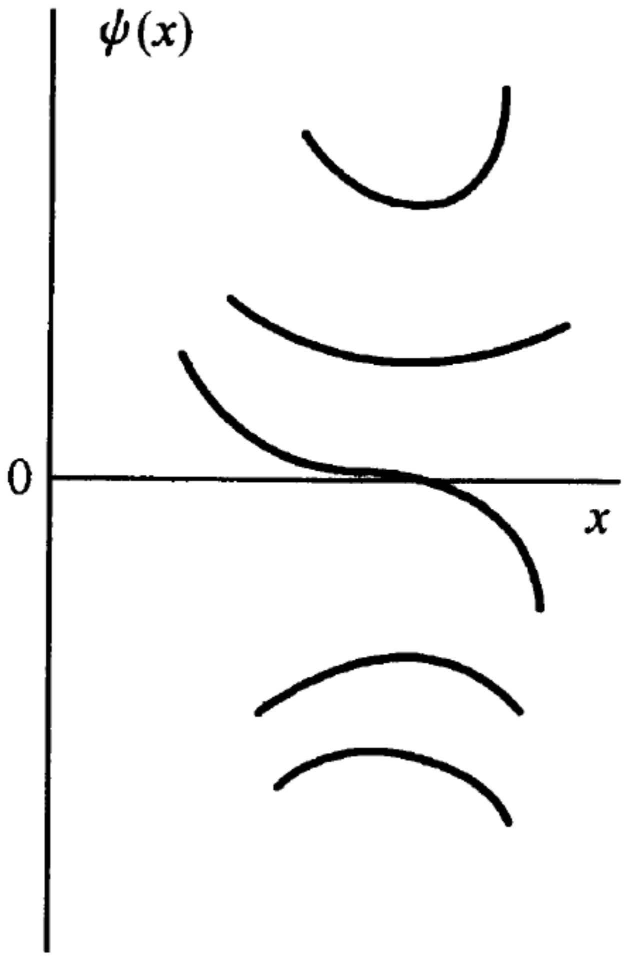
ψ'' 与 ψ 的正负号相反

当 $\psi>0$ 时，$\psi''<0$，曲线向下弯

当 $\psi<0$ 时，$\psi''>0$，曲线向上弯

曲线有些像 $\sin x$ 或 $\cos x$ 曲线

在经典允许区里 $\psi(x)$ 呈现出振荡式的行为



在 $V(x)>E$ 区域(经典禁区)

ψ''与ψ的正负号相同

当 $\psi>0$ 时,曲线向上弯

当 $\psi<0$ 时,曲线向下弯

一般是单调变化的（无穷远处为0）

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。

一维定态Schrödinger方程是

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E-U(x)\right]\psi(x)=0.$$

它的解有如下的规律：

(1) Wronskian定理：

若$\psi_{1,2}(x)$都是一维定态Schrodinger方程（能量相同）的解，

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

其中 $\psi'\equiv\dfrac{d\psi}{dx}$

证明：

$$\psi_1'' + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E - U(x)\right]\psi_1 = 0$$

$$\psi_2'' + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E - U(x)\right]\psi_2 = 0$$

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

所以

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

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

称为$\psi_{1,2}(x)$的**Wronskian行列式**。

当$\Delta = 0$时，$\psi_{1,2}(x)$ 是**线性相关**的，即它们只相差一个常数因子 .

而当 $\Delta \neq 0$ 时，$\psi_{1,2}(x)$ 是**线性无关**的。

$\boxed{\text{如何证明？}}$

（2）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）

如何证明？

（3）反射定理：

设势能函数 $U(x)$

是关于原点对称的，即它满足

$$U(x) = U(-x)$$

那么若 $\psi(x)$

是Schrodinger方程的解，则

如何证明？

$\psi(-x)$ 也是该方程的解（且能量相同）。

一维定态的分类：束缚态与非束缚态

定义：如果 $\psi(x) \xrightarrow{|x| \to \infty} 0$

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，否则如果

$$x \to +\infty, \quad \text{或} \quad x \to -\infty, \quad \text{或} \quad x \to \pm\infty$$

$$\psi(x) \neq 0$$

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：

假设 $U(x)$ 在 $x \to \pm\infty$ 时有确定的极限，那么当

$$E < U(+\infty, -\infty)$$

时粒子处于束缚态。 而在

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

时粒子处于非束缚态

束缚态和非束缚态有重要的物理区别

单选题 1分 设置

为什么只有在$E < U(\infty, -\infty)$时，粒子处于束缚态？

A 不一定是这样。

B 因为E<U时，粒子的势能才小于0。

C 因为E<U时，粒子的动能才大于0。

D 因为在E>U时，粒子处于经典允许区，波函数震荡但不为0。

提交

单选题 1分

设置

一维自由态粒子（U=0）的能量可以是负的吗？

- A 不可以。
- B 可以。
- C 不确定。

提交

一维束缚态的一般性质

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。

不简并定理：一维束缚态必是非简并态

证明：假设

$$\psi_1(x) \quad 和 \quad \psi_2(x)$$

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**Wronskian定理**，

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

c与x无关，因此可以在x轴的任意一点上计算它的值。

再根据束缚态的定义，

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

可以在 $|x| \to \infty$ 处计算Δ，于是

$$\Delta = c = 0$$

所以 $\psi_1(x)$ 和 $\psi_2(x)$ 是线性相关的，即

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

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**”是缺一不可的

波函数是复函数，可以写成下面的形式：

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

$\rho(x)$ 称为波函数的模

$\theta(x)$ 称为波函数的相位

推论1：一维束缚态本征波函数的相位必是常数

如何证明？

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

宇称是量子态的重要性质（如果量子态有确定的宇称的话），它具有“纯量子力学”的特征，在经典力学中没有对应物(尽管在经典物理中也可以讨论系统对反射的对称性，但是在经典物理中没有波函数的概念，更没有波函数的相位)

李政道和杨振宁发现在弱相互作用中宇称不守恒（1956）

推论2（宇称定理）：如果 $U(-x) = U(x)$

则一维束缚态本征波函数必有确定的宇称

如何证明？

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，即仅仅当取某些离散的数值时，定态Schrödinger方程才有符合单值、有限、连续条件的解。这就是通常意义的“量子化”

一维运动问题

一维自由粒子（$U=0$）的定态方程

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

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x)+\frac{p^2}{\hbar^2}\psi(x)=0,\quad p\equiv\sqrt{2mE}$$

单选题 1分

设置

一维自由粒子波函数有简并吗?

A 有简并，因为对应同一个能级E有两个线性无关解。

B 无简并，因为自由粒子处于非束缚态。

C 不确定。

提交

一维自由粒子（U=0）的定态方程

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

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x)+\frac{p^2}{\hbar^2}\psi(x)=0,\quad p\equiv\sqrt{2mE}$$

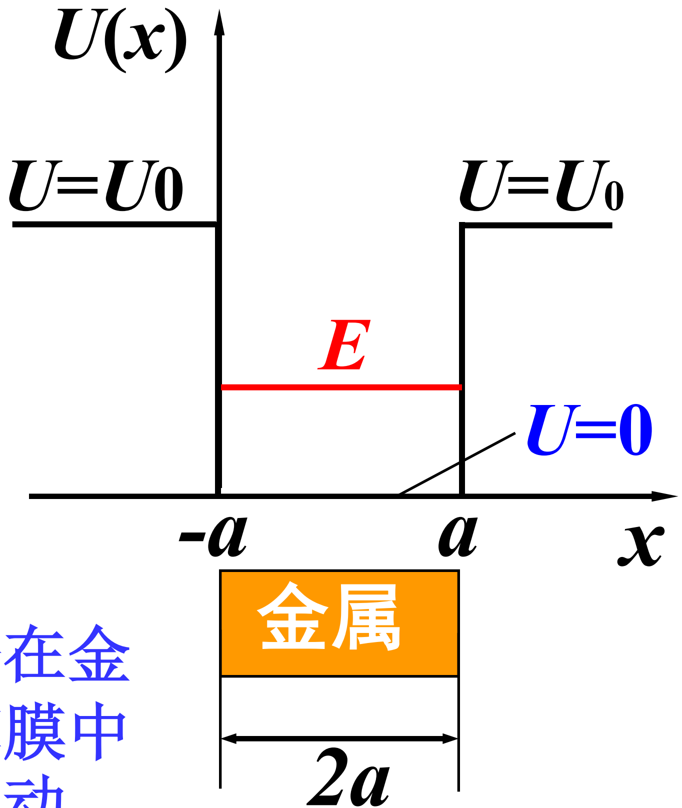
通解：$\psi(x)=c_1 e^{\frac{i}{\hbar}px}+c_2 e^{-\frac{i}{\hbar}px}$

通解：$\Psi(x,t)=c_1 e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}+c_2 e^{-\frac{i}{\hbar}(px+Et)}$

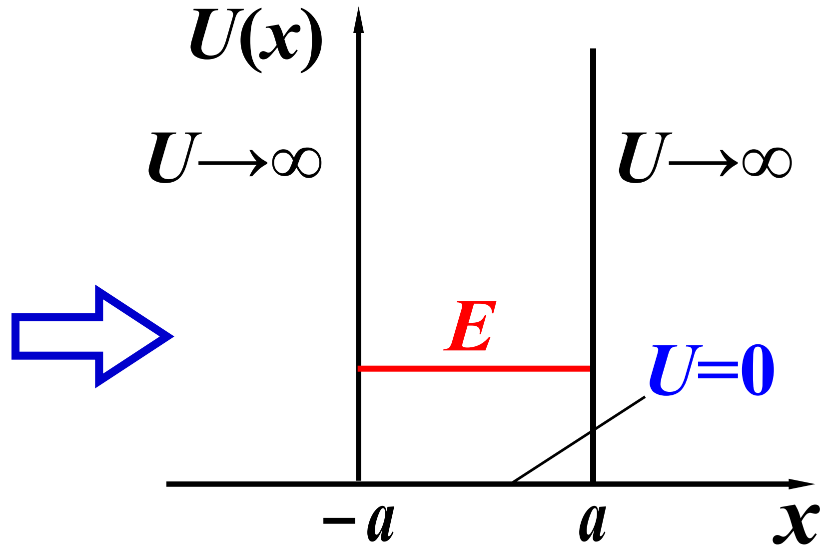
x　　　　x

自由粒子的能量是连续的(非束缚态)

一维无限深方势阱



电子在金属薄膜中的运动



无限深方势阱

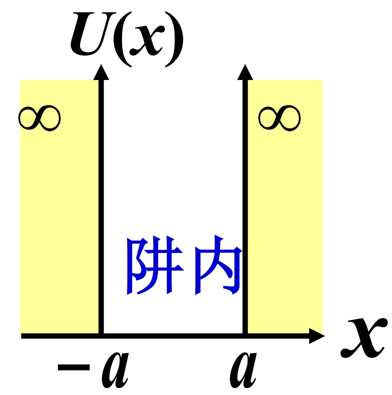
如果$E<<U_0$,则可近似认为U_0无限大-无限深势阱

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

定态薛定谔方程的形式：

势阱内 $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2\psi_1}{\mathrm{d}x^2}=E\psi_1,\quad |x|<a$

势阱外 $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2\psi_2}{\mathrm{d}x^2}+U_0\psi_2=E\psi_2,\quad |x|>a$



1、阱外 $|x|\geq a \rightarrow U(x)=\infty,\ \psi_2=0$

粒子被束缚在势阱内（束缚态 $\lim\limits_{x\to\pm\infty}\psi_2(x)=0$）

2、阱内 $|x|<a \rightarrow U=0$

方程的形式类似于一维自由粒子

势阱内解的一般形式：

$$\psi(x)=c_1e^{\frac{i}{\hbar}px}+c_2e^{-\frac{i}{\hbar}px}，\quad p\equiv\sqrt{2mE}$$

c_1，c_2 为待定常数，由波函数应满足的“单值、有限、连续”条件决定。“单值、有限”已经满足，下面看连续条件：

$$\begin{cases}\psi(-a)=0 \;\Rightarrow\; c_1e^{-\frac{i}{\hbar}pa}+c_2e^{\frac{i}{\hbar}pa}=0\\ \psi(a)=0 \;\Rightarrow\; c_1e^{\frac{i}{\hbar}pa}+c_2e^{-\frac{i}{\hbar}pa}=0\end{cases}$$

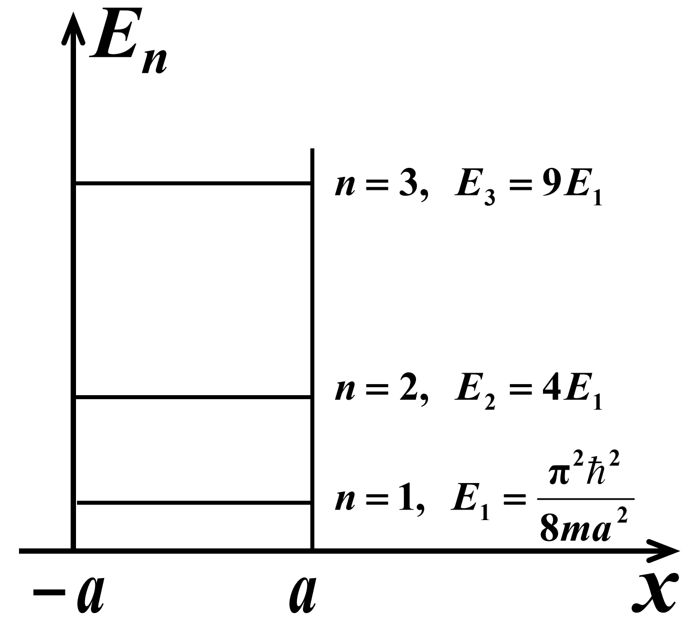
$$\begin{cases} c_1 e^{-\frac{i}{\hbar}pa} + c_2 e^{\frac{i}{\hbar}pa} = 0 \\ c_1 e^{\frac{i}{\hbar}pa} + c_2 e^{-\frac{i}{\hbar}pa} = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} c_1 / c_2 = -e^{\frac{2i}{\hbar}pa} \\ c_1 / c_2 = -e^{-\frac{2i}{\hbar}pa} \end{cases}$$

$$\Rightarrow e^{\frac{4i}{\hbar}pa} = 1 \text{ or } \frac{4i}{\hbar}pa = 2in\pi,\ n = 1,2,3..$$

$$\Rightarrow E_n = \frac{p^2}{2m} = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{8ma^2}, n = 1,2,3..$$

一维无限深势阱能量本征值：

$$\boxed{E_n = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{8ma^2},\ n = 1,2,3..}$$



其中n称为量子数，n=1代表基态，取其它值代表激发态。这表明，一维无限深方势阱中运动粒子的能量是量子化的