

第二章 波函数和薛定谔方程

这一章中,我们将以实验所揭示出的微观粒子的波粒二象性为根据,引进描述微观粒子状态的波函数,讨论波函数的性质,建立非相对论量子力学的基本方程——薛定谔(Schrödinger)方程,并把这方程应用到几个比较简单的力学体系中去,求出方程的解和阐明这些解的物理意义.

§ 2.1 波函数的统计解释

第一章中我们已看到,为了表示微观粒子(以后简称粒子)的波粒二象性,可以用平面波来描写自由粒子,平面波的频率和波长与自由粒子的能量和动量由德布罗意关系(1.4.1)和(1.4.2)联系起来.平面波的频率和波矢都是不随时间或位置改变的,这和自由粒子的能量和动量不随时间或位置改变相对应.如果粒子受到随时间或位置变化的力场的作用,它的动量和能量不再是常量,这时粒子就不能用平面波来描写,而必须用较复杂的波来描写.在一般情况下,我们用一个函数表示描写粒子的波,并称这个函数为波函数.它是一个复数.描写自由粒子的德布罗意平面波是波函数的一个特例.

究竟怎样理解波和它所描写的粒子之间的关系呢?

对这个问题曾经有过各种不同的看法.例如,有人认为波是由它所描写的粒子组成的.这种看法是不正确的.我们知道,衍射现象是由波的干涉而产生的,如果波真是由它所描写的粒子所组成,则粒子流的衍射现象应当是由于组成波的这些粒子相互作用而形成的.但事实证明,在粒子流衍射实验中,照片上所显示出来的衍射图样和入射粒子流强度无关,也就是说和单位体积中粒子的数目无关.如果减小入射粒子流强度,同时延长实验的时间,使投射到照片上粒子的总数保持不变,则得到的衍射图样将完全相同.即使把粒子流强度减小到使得粒子一个一个地被衍射,粒子一个个随机地打到屏幕上各处,显示了粒子性.但是,只要经过足够长的时间,所得到的衍射图样也还是一样.这说明每一个粒子被衍射的现象和其他粒子无关,衍射图样不是由粒子之间的相互作用而产生的.

除了上面这个看法外,还有其他一些企图解释波函数的尝试,但都因与实验事实不符而被否定.

为人们所普遍接受的对于波函数的解释,是由玻恩(Born)首先提出的.为了说明玻恩的解释,我们仍考察上述粒子衍射实验.如果入射电子流的强度很大,即单位时间内有许多电子被晶体反射,则照片上很快就出现衍射图样.如果入射电子流强度很小,电子一个一个地从晶体表面上反射,这时照片上就出现一个一个的点子,显示出电子的粒子性.这些点在照片上的位置并不都是重合在一起的.开始时,它们看起来似乎是毫无规则地散布着,随着时间的延长,点子数目逐渐增多,它们在照片上的分布就形成了衍射图样,显示出电子的波动性.由此可见,实验所显示的电子的波动性是许多电子在同一实验中的统计结果,或者是一个电子在多次相同实验中的统计结果.波函数正是为描写粒子的这种行为而引进的.玻恩就是在这个基础上,提出了波函数的统计解释,即:波函数在空间中某一点的强度(振幅绝对值的平方)和在该点找到粒子的概率成比例.按照这种解释,描写粒子的波乃是概率波.

现在我们根据对波函数的这种统计解释再来看看衍射实验.粒子被晶体反射后,描写粒子的波发生衍射,在照片的衍射图样中,有许多衍射极大和衍射极小.在衍射极大的地方,波的强度大,每个粒子投射到这里的概率也大,因而投射到这里的粒子多;在衍射极小的地方,波的强度很小或等于零,粒子投射到这里的概率也很小或等于零,因而投射到这里的粒子很少或者没有.

知道了描写微观体系(如在晶体上反射后的电子)的波函数后,由波函数振幅绝对值的平方,就可以得出粒子在空间任意一点出现的概率.以后我们将看到,由波函数还可以得出体系的各种性质,因此我们说波函数(也称概率幅)描写体系的量子状态(简称状态或态).

这种描写状态的方式和经典力学中描写质点(宏观粒子)状态的方式完全不一样,在经典力学中,通常是用质点的坐标和动量(或速度)的值来描写质点的状态.质点的其他力学量,如能量等,是坐标和动量的函数,当坐标和动量确定后,其他力学量也就随之确定了.但是,在量子力学中,不可能同时用粒子坐标和动量的确定值来描写粒子的量子状态,因为微观粒子具有波粒二象性,粒子的坐标和动量不可能同时具有确定值.第三章我们将看到,当粒子处于某一量子状态时,它的力学量(如坐标、动量等)一般有许多可能值,这些可能值各自以一定的概率出现,这些概率都可以由波函数得出.

由于粒子必定要在空间中的某一点出现,所以粒子在空间各点出现的概率总和等于1,因而粒子在空间各点出现的概率只决定于波函数在空间各点的相对强度,而不决定于强度的绝对大小.如果把波函数在空间各点的振幅同时加大一倍,并不影响粒子在空间各点的概率,换句话说,将波函数乘上一个常数后,所描写的粒子的状态并不改变.量子力学中的波函数的这种性质是其他波动过程(如声波、光波等等)所没有的.对于声波、光波等,体系的状态随振幅的大小而

改变,如果把各处振幅同时加大为二倍,那么声或光的强度到处都加大为四倍,这就完全是另一个状态了.

下面用数学来表达波函数的这些性质. 设波函数 $\Phi(x, y, z, t)$ 描写粒子的状态, 在空间一点 (x, y, z) 和时刻 t , 波的强度是 $|\Phi|^2 = \Phi^* \Phi$, Φ^* 表示 Φ 的共轭复数. 以 $dW(x, y, z, t)$ 表示在时刻 t 、在坐标 x 到 $x + dx$ 、 y 到 $y + dy$ 、 z 到 $z + dz$ 的无限小区域内找到粒子的概率, 则 dW 除了和这个区域的体积 $d\tau = dx dy dz$ 成比例外, 也和在这个区域内每一点找到粒子的概率成比例. 按照波函数的统计解释, 在这个区域内一点找到粒子的概率与 $|\Phi(x, y, z, t)|^2$ 成比例, 所以

$$dW(x, y, z, t) = C |\Phi(x, y, z, t)|^2 d\tau, \quad (2.1.1)$$

式中 C 是比例常数. 以体积 $d\tau$ 除概率 dW , 得到在时刻 t 、在 (x, y, z) 点附近单位体积内找到粒子的概率, 我们称这个概率为概率密度, 并以 $w(x, y, z, t)$ 表示:

$$w(x, y, z, t) = \frac{dW(x, y, z, t)}{d\tau} = C |\Phi(x, y, z, t)|^2. \quad (2.1.2)$$

将(2.1.1)式对整个空间积分, 得到粒子在整个空间中出现的概率, 由于粒子存在于空间中, 这个概率等于 1, 所以有

$$C \int_{\infty} |\Phi(x, y, z, t)|^2 d\tau = 1, \quad (2.1.3)$$

式中积分号下的无限大符号表示对整个空间积分. 由(2.1.3)式有

$$C = \frac{1}{\int_{\infty} |\Phi|^2 d\tau}. \quad (2.1.4)$$

前面曾提到, 波函数乘上一个常数后, 并不改变在空间各点找到粒子的概率, 即不改变波函数所描写的状态. 现在把(2.1.4)式所确定的 C 开方后乘 Φ , 并以 Ψ 表示所得出的函数:

$$\Psi(x, y, z, t) = \sqrt{C} \Phi(x, y, z, t),$$

则波函数 Ψ 和 Φ 所描写的是同一个状态. 于是, 由(2.1.1)式, 在 t 时刻、在 (x, y, z) 点附近体积元 $d\tau$ 内找到粒子的概率是

$$dW(x, y, z, t) = |\Psi(x, y, z, t)|^2 d\tau, \quad (2.1.5)$$

概率密度是

$$w(x, y, z, t) = |\Psi(x, y, z, t)|^2. \quad (2.1.6)$$

而(2.1.3)式改写为

$$\int_{\infty} |\Psi(x, y, z, t)|^2 d\tau = 1. \quad (2.1.7)$$

满足(2.1.7)式的波函数称为归一化波函数, (2.1.7)式称为归一化条件, 把 Φ 换成 Ψ 的步骤称为归一化, 使 Φ 换成 Ψ 的常数 $\sqrt{C}$ 称为归一化因子.

波函数在归一化后也还不是完全确定的. 我们可以用一个常数 $e^{i\delta}$ (δ 是实常

数)去乘波函数,这样既不影响空间各点找到粒子的概率,也不影响波函数的归一化;因为 $|e^{i\delta}|^2 = 1$, 如果 $|\Psi|^2$ 对整个空间积分等于 1, 则 $|e^{i\delta}\Psi|^2$ 对整个空间积分也等于 1. $e^{i\delta}$ 称为相因子. 归一化波函数可以含有一任意相因子.

还必须指出,并不是所有的波函数都可以按(2.1.7)式的要求归一化. 这种归一化条件要求波函数绝对值平方 $|\Phi|^2$ 在整个空间是可以积分的,即要求 $\int_{-\infty}^{\infty} |\Phi|^2 d\tau$ 为有限. 如果这个条件不被满足,即 $\int_{-\infty}^{\infty} |\Phi|^2 d\tau$ 发散,则由公式(2.1.4)得出的归一化因子 $\sqrt{C}$ 等于零,这种归一化显然是没有意义的. 自由粒子的波函数

$$\Psi_p(\mathbf{r}, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)}$$

就是不满足这个条件的一个例子. 至于这种波函数应怎样归一化的问题,将留到第三章中再讨论. 在波函数 Φ 不能按(2.1.7)式归一化的情况下, $|\Phi|^2$ 仍然和概率成比例,它被称为相对概率密度.

§ 2.2 态叠加原理

由 § 2.1 我们知道量子力学中用波函数描写微观粒子的量子状态. 当一粒子处于以波函数 Ψ 所描写的量子状态时,粒子的力学量如坐标、动量等一般可以有許多可能值,每个可能值各自以一定的概率出现,例如粒子处于小体积元 dV [点 (x, y, z) 在 dV 内] 中的概率是 $\Psi^*(x, y, z) \Psi(x, y, z) dV$. 同样,粒子的动量为 p 的概率也可由波函数给出. 这就是波函数的统计解释.

量子力学中这样描述微观粒子量子状态的方式和经典力学中同时用坐标和动量的确定值来描述质点的状态完全不同. 这种差别来源于微观粒子的波粒二象性. 波函数的统计解释是波粒二象性的一个表现,微观粒子的波粒二象性还通过量子力学中关于状态的一个基本原理——态叠加原理表现出来.

在经典物理中,声波和光波都遵从叠加原理:两个可能的波动过程 ϕ_1 和 ϕ_2 线性叠加的结果 $a\phi_1 + b\phi_2$ 也是一个可能的波动过程. 光学中惠更斯原理就是这样的一个原理,它告诉我们:在空间任意一点 P 的光波强度可以由前一时刻波前上所有各点传播出来的光波在 P 点线性叠加起来而得出. 在声学 and 光学中,利用这个原理可以解释声和光的干涉、衍射现象.

现在我们来介绍量子力学中的态叠加原理. 以粒子的双狭缝衍射实验为例. 在这个实验中(图 1.5),用 Ψ_1 表示粒子穿过上面狭缝到达屏 B 的状态,用 Ψ_2 表示粒子穿过下面狭缝到达屏 B 的状态,再用 Ψ 表示粒子穿过两个狭缝到达屏 B 的状态. 那么 Ψ 可以写为 Ψ_1 和 Ψ_2 的线性叠加,即 $\Psi = c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2$, 式中 c_1 和

c_2 是复数.

对于一般的情况,如果 Ψ_1 和 Ψ_2 是体系的可能状态,那么,它们的线性叠加

$$\Psi = c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2 \quad (c_1, c_2 \text{ 是复数}) \quad (2.2.1)$$

也是这个体系的一个可能状态,这就是量子力学中的态叠加原理.

态叠加原理还有下面的含义:当粒子处于态 Ψ_1 和态 Ψ_2 的线性叠加态 Ψ 时,粒子是既处在态 Ψ_1 ,又处在态 Ψ_2 .

按照态叠加原理,粒子在屏 B 上一点 P 出现的概率密度是

$$\begin{aligned} |\Psi|^2 &= |c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2|^2 = (c_1^* \Psi_1^* + c_2^* \Psi_2^*)(c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2) \\ &= |c_1 \Psi_1|^2 + |c_2 \Psi_2|^2 + c_1^* c_2 \Psi_1^* \Psi_2 + c_1 c_2^* \Psi_1 \Psi_2^*. \end{aligned} \quad (2.2.2)$$

上式右边第一项是粒子穿过上狭缝出现在 P 点的概率密度,第二项是粒子穿过下狭缝出现在 P 点的概率密度,第三、第四项是 Ψ_1 和 Ψ_2 的干涉项. (2.2.2) 式告诉我们:粒子穿过双狭缝后在 P 点出现的概率密度 $|\Psi|^2$ 一般不等于粒子穿过上狭缝到达 P 点的概率密度 $|c_1 \Psi_1|^2$ 与穿过下狭缝到达 P 点的概率密度 $|c_2 \Psi_2|^2$ 之和,而是等于 $|c_1 \Psi_1|^2 + |c_2 \Psi_2|^2$ 再加上干涉项. 衍射图样的产生证实了干涉项的存在.

在(2.2.1)式中 Ψ 表示为两个态 Ψ_1 和 Ψ_2 的线性叠加,推广到更一般的情况,态 Ψ 可以表示为许多态 $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n, \dots$ 的线性叠加,即

$$\Psi = c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2 + \dots + c_n \Psi_n + \dots = \sum_n c_n \Psi_n. \quad (2.2.3)$$

$c_1, c_2, \dots, c_n, \dots$ 为复数. 这时态叠加原理表述如下:当 $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n, \dots$ 是体系的可能状态时,它们的线性叠加 Ψ [(2.2.3) 式] 也是体系的一个可能状态;也可以说,当体系处于态 Ψ [(2.2.3) 式] 时,体系部分地处于态 $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n, \dots$ 中;相应的概率分别为 $|c_1|^2, |c_2|^2, \dots, |c_n|^2, \dots$. 要注意的是,态叠加原理指的是波函数(概率幅)的线性叠加,而不是概率的叠加.

例如在第一章叙述的电子在晶体上衍射的实验中,粒子在晶体表面上反射后,可能以各种不同的动量 $\mathbf{p}$ 运动. 以一个确定的动量 $\mathbf{p}$ 运动的状态用波函数

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) = A e^{-\frac{i}{\hbar}(E t - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})} \quad (2.2.4)$$

描写. 按照态叠加原理,在晶体上反射后,粒子的状态 Ψ 可以表示为 $\mathbf{p}$ 取各种可能值的平面波的线性叠加:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{p}} c(\mathbf{p}) \Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t). \quad (2.2.5)$$

粒子经过晶体上反射后所产生的衍射现象,就是这许多平面波 $\Psi_{\mathbf{p}}$ 相互干涉的结果. 由于 $\mathbf{p}$ 可以连续变化, (2.2.5) 式中对 $\mathbf{p}$ 求和应该以对 p_x, p_y, p_z 积分来代替.

现在我们来证明:任何一个波函数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 都可以看做是各种不同动量的

平面波的叠加. 换句话说, 任何波函数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 都可以写成如下形式:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \iiint_{-\infty}^{\infty} c(\mathbf{p}, t) \Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) d\mathbf{p}_x d\mathbf{p}_y d\mathbf{p}_z, \quad (2.2.6)$$

式中

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) \equiv \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}. \quad (2.2.7)$$

这里, 我们已经取(2.2.4)式中平面波的归一化因子 A 等于 $(2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}}$, 这一点将在 § 3.2 中详细讨论.

以 $\Psi_{\mathbf{p}'}^*(\mathbf{r})$ 乘(2.2.6)式, 对 $\mathbf{r}$ 在全空间积分得

$$\begin{aligned} \int \Psi_{\mathbf{p}'}^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} &= \int_{-\infty}^{\infty} c(\mathbf{p}, t) \left[\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{\mathbf{p}'}^*(\mathbf{r}) \Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right] d\mathbf{p} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} c(\mathbf{p}, t) \left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r} \right] d\mathbf{p} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} c(\mathbf{p}, t) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') d\mathbf{p} = c(\mathbf{p}', t), \end{aligned}$$

方括号积分利用了 δ 函数的积分表达式和积分性质. 即(2.2.6)式中的函数 $c(\mathbf{p}, t)$ 由下式给出:

$$c(\mathbf{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \iiint_{-\infty}^{\infty} \Psi(\mathbf{r}, t) e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} dx dy dz. \quad (2.2.8)$$

把(2.2.7)式代入(2.2.6)式中得到

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \iiint_{-\infty}^{\infty} c(\mathbf{p}, t) e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{p}_x d\mathbf{p}_y d\mathbf{p}_z. \quad (2.2.9)$$

(2.2.9)和(2.2.8)式说明 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 和 $c(\mathbf{p}, t)$ 互为傅里叶变换式, 因而在一般情况下, 它们总是成立的.

从(2.2.8)式和(2.2.9)式可以看出, $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 给定后, $c(\mathbf{p}, t)$ 就可以由(2.2.8)式完全确定, 同样 $c(\mathbf{p}, t)$ 给定后, $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 就可以由(2.2.9)式完全确定. 由此可见, $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 和 $c(\mathbf{p}, t)$ 是波函数的两种不同的描述方式. $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 是以坐标为自变量的波函数; 在 § 4.1 中我们将看到 $c(\mathbf{p}, t)$ 则是以动量为自变量的波函数, $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ 是粒子 t 时刻在 $\mathbf{r}$ 处的概率密度, $|c(\mathbf{p}, t)|^2$ 是粒子 t 时刻具有动量 $\mathbf{p}$ 的概率密度.

在一维的情况下, (2.2.8)式和(2.2.9)式写为

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} c(p, t) e^{\frac{i}{\hbar}px} dp, \quad (2.2.10)$$

$$c(p, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x, t) e^{-\frac{i}{\hbar}px} dx. \quad (2.2.11)$$

§ 2.3 薛定谔方程

§ 2.1 节中,我们讨论了微观粒子在某一时刻 t 的状态,以及描写这个状态的波函数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 的性质,但未涉及当时间改变时粒子的状态将怎样随着变化的问题. 本节中我们来讨论粒子状态随时间变化所遵从的规律.

在经典力学中,当质点在某一时刻的状态为已知时,由质点的运动方程就可以求出以后任一时刻质点的状态. 在量子力学中情况也是这样,当微观粒子在某一时刻的状态为已知时,以后时刻粒子所处的状态也要由一个方程来决定. 所不同的是,在经典力学中,质点的状态用质点的坐标和速度来描写,质点的运动方程就是我们所熟知的牛顿运动方程;而在量子力学中,微观粒子的状态则用波函数来描写,决定粒子状态变化的方程不再是牛顿运动方程,而是下面我们要建立的薛定谔方程.

由于我们要建立的是描写波函数随时间变化的方程,因此它必须是波函数应满足的含有对时间微商的微分方程. 此外,这方程还应满足下面两个条件: (1) 方程是线性的,即如果 Ψ_1 和 Ψ_2 都是这方程的解,那么 Ψ_1 和 Ψ_2 的线性叠加 $a\Psi_1 + b\Psi_2$ 也是方程的解. 这是因为根据态叠加原理,如果 Ψ_1 和 Ψ_2 都是粒子可能的状态,那么 $a\Psi_1 + b\Psi_2$ 也应是粒子可能的状态; (2) 这个方程的系数不应包含状态的参量,如动量、能量等,因为方程的系数如含有状态的参量,则方程只能被粒子的部分状态所满足,而不能被各种可能的状态所满足.

现在来建立满足上述条件的方程. 我们采取的步骤是先对波函数已知的自由粒子得出这种方程,然后把它推广到一般情况中去. 用平面波描写自由粒子的波函数:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)}, \quad (2.3.1)$$

它是所要建立的方程的解. 将 (2.3.1) 式对时间求偏微商,得到

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}E\Psi. \quad (2.3.2)$$

但这还不是我们所要求的方程,因为它的系数中还含有能量 E . 再把 (2.3.1) 式对坐标求二次偏微商,得到

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{Ap_x^2}{\hbar^2}e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y + p_z z - Et)} = -\frac{p_x^2}{\hbar^2}\Psi,$$

同理有

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} = -\frac{p_y^2}{\hbar^2}\Psi,$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = -\frac{p_z^2}{\hbar^2}\Psi.$$

将以上三式相加,得

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = \nabla^2 \Psi = -\frac{p^2}{\hbar^2} \Psi. \quad (2.3.3)$$

利用自由粒子的能量和动量的关系式:

$$E = \frac{p^2}{2m}, \quad (2.3.4)$$

式中 m 是粒子的质量. 比较(2.3.2)和(2.3.3)两式,我们得到自由粒子波函数所满足的微分方程:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi, \quad (2.3.5)$$

它满足前面所述的条件.

(2.3.2)和(2.3.3)两式可改写为如下形式:

$$E\Psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi, \quad (2.3.6)$$

$$(\mathbf{p} \cdot \mathbf{p})\Psi = (-i\hbar \nabla) \cdot (-i\hbar \nabla)\Psi, \quad (2.3.7)$$

式中 ∇ 是拉普拉斯算符:

$$\nabla = i \frac{\partial}{\partial x} + j \frac{\partial}{\partial y} + k \frac{\partial}{\partial z}.$$

由(2.3.6)式和(2.3.7)式可以看出,粒子能量 E 和动量 $\mathbf{p}$ 各与下列作用在波函数上的算符相当:

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \mathbf{p} \rightarrow -i\hbar \nabla. \quad (2.3.8)$$

这两个算符依次称为能量算符和动量算符. 把(2.3.4)式两边右乘 Ψ ,再以(2.3.8)式代入,即得微分方程(2.3.5).

现在利用关系式(2.3.8)来建立在力场中粒子波函数所满足的微分方程. 设粒子在力场中的势能为 $U(\mathbf{r})$. 在这种情况下,粒子的能量和动量的关系式是

$$E = \frac{p^2}{2m} + U(\mathbf{r}). \quad (2.3.9)$$

上式两边乘以波函数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$,并以(2.3.8)式代入,便得到 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 所满足的微分方程

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U(\mathbf{r}) \Psi. \quad (2.3.10)$$

这个方程称为薛定谔波动方程,或薛定谔方程,也常简称为波动方程,它描写在势场 $U(\mathbf{r})$ 中粒子状态随时间的变化. 必须注意,上面我们只是建立了薛定谔方程,而不是从数学上将它推导出来. 这个方程的建立是从描写自由粒子的平面波(2.3.1)式[即(1.4.4)式]出发的. 如果我们不从这个复数表示式出发而从平面

波的实数表示式(1.4.3)出发,我们就得不出薛定谔方程.读者很容易验证 $A \cos \frac{1}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)$ 不是方程(2.3.5)的解.这就是我们用(1.4.4)式而不用(1.4.3)式作为自由粒子波函数的原因.薛定谔方程可视为量子力学的一个基本假设(见结束语),它反映了微观粒子的运动规律,它的正确性是由在各种具体情况下从方程得出的结论和实验结果相比较来验证的.前面,我们用平面波(2.3.1)式描述自由粒子的波函数.实际上,自由粒子薛定谔方程(2.3.5)的任何解,都是自由粒子的波函数,它不一定具有确定的动量,例如(2.3.1)的任意线性叠加.第六章散射问题中的出射球面波也是一种自由粒子波函数.

上面讨论的是一个粒子的情况.我们可以把它推广到多粒子的情况.

如果所讨论的体系不只含一个粒子,而是 N 个粒子($N > 1$),我们就称这体系为多粒子体系.以 $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N$ 表示 N 个粒子的坐标,那么描写体系状态的波函数 Ψ 是 $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N$ 的函数.体系的能量写成

$$E = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} + U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (2.3.11)$$

式中 m_i 是第 i 个粒子的质量, $\mathbf{p}_i$ 是第 i 个粒子的动量, $U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ 是体系的势能,它包括体系在外场中的能量和粒子间相互作用能量.用(2.3.11)式两边乘波函数 $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, t)$ 并作代换

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \mathbf{p}_i \rightarrow -i\hbar \nabla_i;$$

∇_i 是对第 i 个粒子坐标微商的拉普拉斯算符,

$$\nabla_i = \mathbf{i} \frac{\partial}{\partial x_i} + \mathbf{j} \frac{\partial}{\partial y_i} + \mathbf{k} \frac{\partial}{\partial z_i}.$$

于是得到

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = - \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 \Psi + U\Psi, \quad (2.3.12)$$

这就是多粒子体系(非相对论)的薛定谔方程.

§ 2.4 粒子流密度和粒子数守恒定律

在讨论了状态或波函数随时间变化的规律后,我们进一步讨论粒子在一定空间区域内出现的概率将怎样随时间变化.

设描写粒子状态的波函数是 $\Psi(\mathbf{r}, t)$, 则由 § 2.1 得知,在时刻 t 在 $\mathbf{r}$ 点周围单位体积内粒子出现的概率(即概率密度)是

$$w(\mathbf{r}, t) = \Psi^*(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (2.4.1)$$

概率密度随时间的变化率是

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi. \quad (2.4.2)$$

由薛定谔方程(2.3.10)和它的共轭复数方程[注意 $U(\mathbf{r})$ 是实数]可得

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 \Psi + \frac{1}{i\hbar} U(\mathbf{r}) \Psi$$

及

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 \Psi^* - \frac{1}{i\hbar} U(\mathbf{r}) \Psi^*.$$

将这两式代入(2.4.2)式中,有

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^*) = \frac{i\hbar}{2m} \nabla \cdot (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*). \quad (2.4.3)$$

令

$$\mathbf{J} \equiv \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi), \quad (2.4.4)$$

则(2.4.3)式可写为

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0. \quad (2.4.5)$$

这方程是概率(粒子数)守恒定律的微分形式,它具有连续性方程的形式. 为了说明方程(2.4.5)和矢量 $\mathbf{J}$ 的意义,将(2.4.5)式对空间任意一个体积 V 求积分

$$\int_V \frac{\partial w}{\partial t} d\tau = \frac{\partial}{\partial t} \int_V w d\tau = - \int_V \nabla \cdot \mathbf{J} d\tau. \quad (2.4.6)$$

应用矢量分析中的高斯(Gauss)定理,把上面等式右边的体积分变为面积分,得到

$$\int_V \frac{\partial w}{\partial t} d\tau = - \oint_S \mathbf{J} \cdot d\mathbf{S} = - \oint_S J_n dS, \quad (2.4.7)$$

面积分是对包围体积 V 的封闭面 S 进行的. (2.4.7)式左边表示单位时间内体积 V 中概率的增加,右边是矢量 $\mathbf{J}$ 在体积 V 的边界面 S 上法向分量的面积分. 因而很自然地可以把 $\mathbf{J}$ 解释为概率流密度矢量,它在 S 面上的法向分量表示单位时间内流过 S 面上单位面积的概率. (2.4.7)式说明单位时间内体积 V 中增加的概率,等于从体积 V 外部穿过 V 的边界面 S 而流进 V 内的概率. 如果波函数在无限远处为零,我们可以把积分区域 V 扩展到整个空间,这时(2.4.7)式右边的面积分显然为零. 所以有

$$\frac{d}{dt} \int_{\infty} w d\tau = \frac{d}{dt} \int_{\infty} \Psi^* \Psi d\tau = 0, \quad (2.4.8)$$

即在整个空间内找到粒子的概率与时间无关. 如果波函数 Ψ 是归一的, $\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi d\tau = 1$, 那么(2.4.8) 式告诉我们 Ψ 将保持归一的性质, 而不随时间改变.

以粒子质量 m 乘 w 和 J , 则

$$w_m \equiv mw = m |\Psi(x, y, z, t)|^2$$

是在时刻 t 在点 (x, y, z) 的质量密度,

$$J_m \equiv mJ = \frac{i\hbar}{2} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi)$$

是质量流密度. 以 m 乘方程(2.4.5), 得到 w_m 和 J_m 所满足的方程

$$\frac{\partial w_m}{\partial t} + \nabla \cdot J_m = 0. \quad (2.4.9)$$

像上面一样, 将(2.4.9)式对空间任意体积积分后可以得到下述结论: 单位时间内体积 V 内质量的增加, 等于穿过 V 的边界面 S 流进的质量. (2.4.9) 式是量子力学中的质量守恒定律.

同样, 以粒子电荷 q 乘 w 和 J 后, 得到 $w_q = qw$ 是电荷密度, $J_q \equiv qJ$ 是电流密度, 方程

$$\frac{\partial w_q}{\partial t} + \nabla \cdot J_q = 0 \quad (2.4.10)$$

是量子力学中的电荷守恒定律, 它说明粒子的电荷总量不随时间改变.

到目前为止, 我们只提到粒子的状态可以用波函数来描写, 至于怎样的函数才能作为波函数, 或者波函数一般应满足哪些条件则未涉及. 现在, 在建立了薛定谔方程和证明了粒子数守恒定律之后, 就可以对这个问题进行讨论了. 由于概率密度和概率流密度应当连续, 所以 Ψ 必须在变量变化的全部区域内是有限的和连续的, 并且有连续的微商 (在有限个点上, Ψ 和它的微商在保持积分为可积的条件下可以趋于无限大). 此外, 由于 $w = \Psi^* \Psi$ 是粒子出现的概率, 它应是坐标和时间的单值函数, 这样才能使粒子的概率在时刻 t 、在 r 点有唯一的确定值. 由以上讨论可知, 波函数在变量变化的全部区域内通常应满足三个条件: 有限性、连续性和导致可测量的单值性. 这三个条件称为波函数的标准条件. 以后我们将看到, 波函数的标准条件在解量子力学问题中占有很重要的地位.

§ 2.5 定态薛定谔方程

现在我们来讨论薛定谔方程(2.3.10)的解. 一般情况下 $U(\mathbf{r})$ 也可以是时间的函数, 这种情况将在第五章中讨论. 目前我们只讨论 $U(\mathbf{r})$ 与时间无关的情况.

如果 $U(\mathbf{r})$ 不含时间: 薛定谔方程(2.3.10)可以用分离变量法进行求解. 考虑这方程的一种特解:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})f(t). \quad (2.5.1)$$

方程(2.3.10)的解可以表示为许多这种特解之和. 将(2.5.1)式代入方程(2.3.10)中, 并把方程两边用 $\psi(\mathbf{r})f(t)$ 去除, 得到

$$\frac{i\hbar}{f} \frac{df}{dt} = \frac{1}{\psi} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U(\mathbf{r})\psi \right].$$

因为这个等式的左边只是 t 的函数, 右边只是 $\mathbf{r}$ 的函数, 而 t 和 $\mathbf{r}$ 是相互独立的变量, 所以只有当两边都等于同一常量时, 等式才能被满足. 以 E 表示这个常量, 则由等式左边等于 E , 有

$$i\hbar \frac{df}{dt} = Ef. \quad (2.5.2)$$

由等式右边等于 E , 有

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U(\mathbf{r})\psi = E\psi. \quad (2.5.3)$$

方程(2.5.2)的解可以直接得出:

$$f(t) = Ce^{-\frac{iE}{\hbar}t},$$

C 为任意常数. 将这结果代入(2.5.1)式中, 并把常数 C 放到 $\psi(\mathbf{r})$ 里面去, 这样就得到薛定谔方程(2.3.10)的特解

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-\frac{iE}{\hbar}t}. \quad (2.5.4)$$

这个波函数的角频率是确定的 $\omega = \frac{E}{\hbar}$. 按照德布罗意关系, E 就是体系处于这个波函数所描写的状态时的能量. 由此可见, 体系处于(2.5.4)式所描写的状态时, 能量具有确定值, 所以这种状态称为定态. (2.5.4)式称为定态波函数. 在定态中概率密度和概率流密度都与时间无关. 函数 $\psi(\mathbf{r})$ 由方程(2.5.3)和在具体问题中波函数应满足的条件得出. 方程(2.5.3)称为定态薛定谔方程. 函数 $\psi(\mathbf{r})$ 也称为波函数, 因为知道 $\psi(\mathbf{r})$ 后, 由(2.5.4)式就可以求出 $\Psi(\mathbf{r}, t)$.

以 $\psi(\mathbf{r})$ 乘方程(2.5.2)两边, $e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$ 乘(2.5.3)式两边, 可以看出定态波函数(2.5.4)满足下列两方程:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E\Psi, \quad (2.5.5)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right] \Psi = E\Psi. \quad (2.5.6)$$

这两个方程的类型相同,它们都是以一个算符 (在(2.5.5)式中是 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$,在

(2.5.6)式中是 $\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right]$) 作用在波函数 Ψ 上得出一个数量 E 乘 Ψ .

算符 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ 和 $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r})$ 是完全相当的,这可以由它们作用在定态波函数

(2.5.4)上看出.而且从薛定谔方程(2.3.10)中还可以看出,它们作用在体系的任意一个波函数上都是相当的.这两个算符都称为能量算符.此外,由于算符 $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r})$ 是在(2.3.9)式中作(2.3.8)式代换而来的,(2.3.9)式在经典

力学中称为哈密顿(Hamilton)函数,所以这种算符又称为哈密顿算符,通常以 $\hat{H}$ 表示.于是(2.5.6)可写为

$$\hat{H}\Psi = E\Psi. \quad (2.5.7)$$

这种类型的方程称为本征值方程, E 称为算符 $\hat{H}$ 的本征值, Ψ 称为算符 $\hat{H}$ 属于本征值 E 的本征函数.由上面的讨论可知,当体系处于能量算符本征函数所描写的状态(以后简称能量本征态)时,粒子的能量有确定的数值,这个数值就是与这个本征函数相对应的能量算符的本征值.

讨论定态问题就是要求出体系可能有的定态波函数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 和在这些态中的能量 E ; 由于定态波函数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 和函数 $\psi(\mathbf{r})$ 以公式(2.5.4)联系起来,问题就归结为解定态薛定谔方程(2.5.3),求出能量的可能值 E 和波函数 $\psi(\mathbf{r})$. 在本章下面几节中将讨论几个具体的定态问题.

一般来说,本征值方程(2.5.7)有一系列(无穷多个)本征值.以 E_n 表示体系能量算符的第 n 个本征值, ψ_n 是与 E_n 相应的本征函数,则体系的第 n 个定态波函数是

$$\Psi_n(\mathbf{r}, t) = \psi_n(\mathbf{r}) e^{-\frac{iE_n}{\hbar}t}.$$

含时间的薛定谔方程(2.3.10)的一般解,可以写为这些定态波函数的线性叠加:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n \psi_n(\mathbf{r}) e^{-\frac{iE_n}{\hbar}t},$$

式中复数 c_n 是常系数.

§ 2.6 一维无限深方势阱

考虑在一维空间中运动的粒子, 它的势能在一定区域内 ($-a < x < a$) 为零, 而在此区域外势能为无限大 (图 2.1), 即

$$\begin{aligned} U(x) &= 0, & |x| < a, \\ U(x) &= \infty, & |x| > a. \end{aligned} \quad (2.6.1)$$

这种势称为一维无限深方势阱. 在阱内 ($|x| < a$), 体系所满足的定态薛定谔方程是

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi, \quad |x| < a. \quad (2.6.2)$$

在阱外 ($|x| > a$), 定态薛定谔方程是

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U_0\psi = E\psi, \quad |x| > a. \quad (2.6.3)$$

(2.6.3) 式中, $U_0 \rightarrow \infty$. 根据波函数应满足的连续性和有限性条件, 只有当 $\psi = 0$ 时, (2.6.3) 式才能成立^①, 所以有

$$\psi = 0, \quad |x| > a. \quad (2.6.4)$$

这是解 (2.6.2) 式时需要用到的边界条件.

为方便起见, 引入符号

$$\alpha = \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (2.6.5)$$

则 (2.6.2) 式简写为

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \alpha^2\psi = 0, \quad |x| < a.$$

它的解是

$$\psi = A \sin \alpha x + B \cos \alpha x, \quad |x| < a. \quad (2.6.6)$$

根据 ψ 的连续性, 由 (2.6.4) $\psi(\pm a) = 0$, 代入 (2.6.6), 有

$$\begin{aligned} A \sin \alpha a + B \cos \alpha a &= 0, \\ -A \sin \alpha a + B \cos \alpha a &= 0. \end{aligned}$$

^① 关于这一点的详细论证, 见附录 (I).

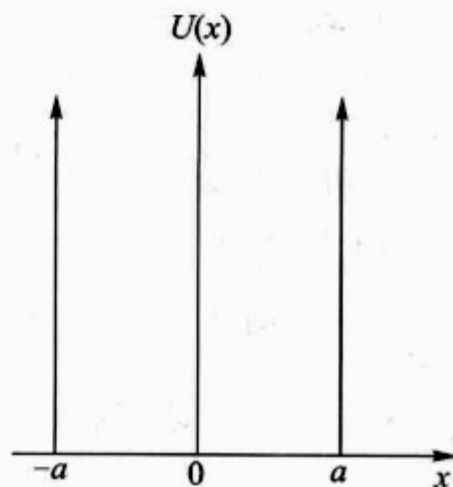


图 2.1 一维无限深方势阱

由此得到

$$\begin{aligned} A \sin \alpha a &= 0, \\ B \cos \alpha a &= 0. \end{aligned} \quad (2.6.7)$$

A 和 B 不能同时为零, 否则 ψ 到处为零, 这在物理上是没有意义的. 因此, 我们得到两组解:

$$(1) \quad A = 0, \quad \cos \alpha a = 0, \quad (2.6.8)$$

$$(2) \quad B = 0, \quad \sin \alpha a = 0. \quad (2.6.9)$$

由此可求得

$$\alpha a = \frac{n}{2} \pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.6.10)$$

对于第一组解, n 为奇数; 对于第二组解, n 为偶数. $n=0$ 对应于 ψ 恒为零的解, n 等于负整数时解与 n 等于相应正整数解线性相关 (仅差一负号), 都不取.

由 (2.6.5) 式和 (2.6.10) 式, 得到体系的能量为

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{8ma^2}, \quad n = \text{正整数}. \quad (2.6.11)$$

对应于量子数 n 的全部可能值, 有无限多个能量值, 它们组成体系的分立能级.

将 (2.6.8) 式、(2.6.9) 式依次代入 (2.6.6) 式中, 并考虑 (2.6.10) 及 (2.6.4) 两式, 得到一组解的波函数为

$$\psi_n = \begin{cases} A \sin \frac{n\pi}{2a} x, & n \text{ 为正偶数}, \quad |x| < a, \\ 0, & |x| \geq a. \end{cases} \quad (2.6.12)$$

另一组解的波函数为

$$\psi_n = \begin{cases} B \cos \frac{n\pi}{2a} x, & n \text{ 为正奇数}, \quad |x| < a, \\ 0, & |x| \geq a. \end{cases} \quad (2.6.13)$$

(2.6.12) 和 (2.6.13) 两式可以并为一个式子

$$\psi_n = \begin{cases} A' \sin \frac{n\pi}{2a} (x+a), & n \text{ 为正整数}, \quad |x| < a, \\ 0, & |x| \geq a, \end{cases} \quad (2.6.14)$$

常系数 A' 可由归一化条件

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = 1$$

求出为 $A' = \frac{1}{\sqrt{a}}$, 请读者自己验证[见习题 2.4].

一维无限深方势阱中粒子的定态波函数是

$$\begin{aligned}\Psi_n(x, t) &= \Psi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \\ &= A' \sin \frac{n\pi}{2a} (x + a) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}.\end{aligned}$$

应用公式 $\sin \theta = \frac{e^{i\theta} - e^{-i\theta}}{2i}$ 将上式中的正弦函数写成指数函数, 有

$$\Psi_n(x, t) = C_1 e^{\frac{i}{\hbar} (\frac{n\pi\hbar}{2a}x - E_n t)} + C_2 e^{-\frac{i}{\hbar} (\frac{n\pi\hbar}{2a}x + E_n t)}.$$

C_1 和 C_2 是两个常数. 由此可知, $\Psi_n(x, t)$ 是由两个沿相反方向传播的平面波叠加而成的驻波.

波函数(2.6.12)和(2.6.13)在 $|x| \geq a$ 时均为零, 即粒子被束缚在势阱内部. 通常把在无限远处为零的波函数所描写的状态称为束缚态. 一般地说, 束缚态所属的能级是分立的.

体系能量最低的态称为基态. 一维无限深方势阱中粒子的基态是 $n=1$ 的本征态; 基态能量和波函数分别由(2.6.11)及(2.6.13)两式令 $n=1$ 得出.

当 n 为偶数时, 由(2.6.12)式, $\psi_n(-x) = -\psi_n(x)$, ψ_n 是 x 的奇函数. 当 n 为奇数时, 由(2.6.13)式, $\psi_n(-x) = \psi_n(x)$, ψ_n 是 x 的偶函数. 本征函数所具有的这种确定的奇偶性是由势能(2.6.1)式对原点的对称性 $U(x) = U(-x)$ 而来的.

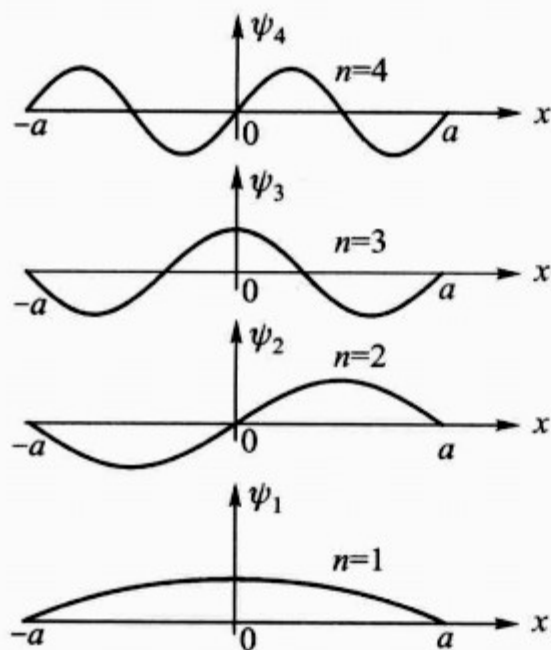


图 2.2 一维无限深方势阱的能量本征函数

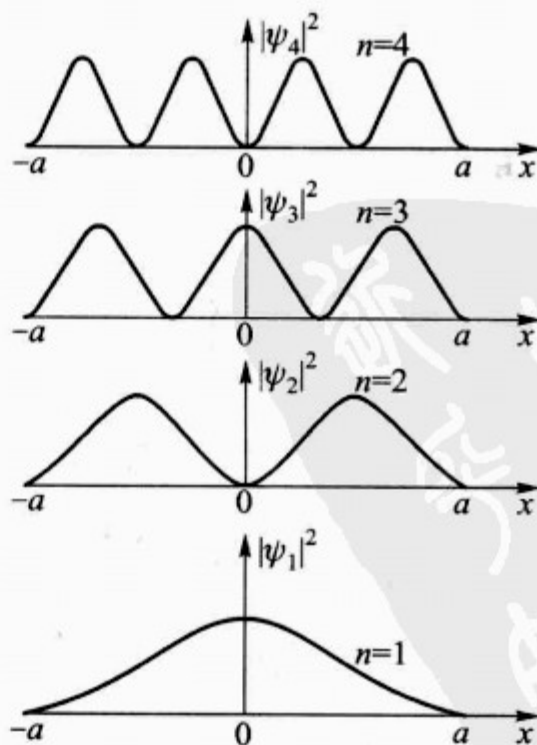


图 2.3 一维无限深方势阱中粒子概率密度分布

图 2.2 给出一维无限深方势阱中粒子的前面四个能量本征函数, 由图可以看出 ψ_n 与 x 轴相交 $n-1$ 次, 即 ψ_n 有 $n-1$ 个节点. 图 2.3 给出在这四个态中粒子位置的概率密度分布.

§ 2.7 线性谐振子

如果在一维空间内运动的粒子的势能为 $\frac{1}{2}m\omega^2 x^2$, ω 是常量, 则这种体系就

称为线性谐振子. 这个问题的重要性在于许多体系都可以近似地看做是线性谐振子. 例如, 双原子分子中两原子之间的势能 U 是两原子间距离 x 的函数, 其形状如图 2.4 所示. 在 $x=a$ 处, 势能有一极小值, 这是一个稳定平衡点. 在这点附近, U 可以展成 $(x-a)$ 的幂级数, 又因为在 $x=a$ 处, $\frac{\partial U}{\partial x} =$

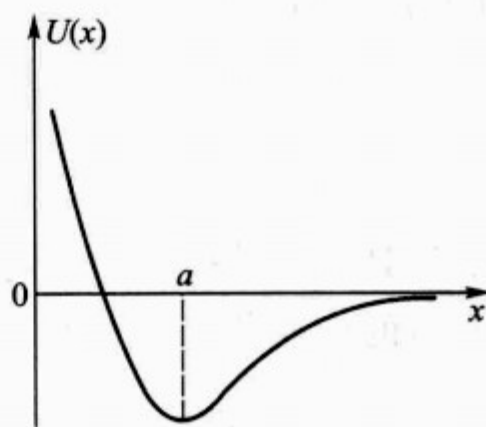


图 2.4 两原子间的势能曲线

0, 所以 U 可以近似地写成

$$U = U_0 + \frac{k}{2}(x-a)^2,$$

式中 k 和 U_0 都是常量. 这正是线性谐振子的势能. 一般说来, 任何一个体系在稳定平衡点附近都可以近似地用线性谐振子来表示.

在经典力学中, 线性谐振子的运动是简谐运动. 势能为 $\frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ 的线性谐振子, 其坐标与时间的关系是 $x = a\sin(\omega t + \delta)$, a 是振幅, δ 是初相.

现在我们来解量子力学中的线性谐振子问题, 即求该体系的能级和波函数. 选取适当的坐标系, 使粒子的势能为 $\frac{1}{2}m\omega^2 x^2$, 则体系的薛定谔方程可写为

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \left(E - \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right) \psi = 0. \quad (2.7.1)$$

为方便起见, 引入无量纲的变量 ξ 代替 x , 它们的关系是

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \equiv \alpha x, \quad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}; \quad (2.7.2)$$

并令

$$\lambda \equiv \frac{2E}{\hbar\omega}. \quad (2.7.3)$$

以 $\frac{2}{\hbar\omega}$ 乘方程(2.7.1), 由(2.7.2)式及(2.7.3)式, 薛定谔方程可改写为

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\psi = 0. \quad (2.7.4)$$

这是一个变系数二级常微分方程. 为了求这个方程的解, 我们先看看 ψ 在 $\xi \rightarrow \pm\infty$ 时的渐近行为. 当 $|\xi|$ 很大时, λ 与 ξ^2 相比可以略去, 因而在 $\xi \rightarrow \pm\infty$ 时, 方程(2.7.4)可写为

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = \xi^2\psi,$$

它的解是 $\psi \sim e^{\pm\frac{\xi^2}{2}}$, 因而这就是方程(2.7.4)的渐近解(即 $\xi \rightarrow \pm\infty$ 时的解). 因为波函数的标准条件要求当 $\xi \rightarrow \pm\infty$ 时 ψ 应为有限, 所以我们对波函数只取指数上的负号: $\psi \sim e^{-\frac{\xi^2}{2}}$.

根据上面的讨论, 我们把 ψ 写成如下形式来求方程(2.7.4)的解:

$$\psi(\xi) = e^{-\frac{\xi^2}{2}} H(\xi), \quad (2.7.5)$$

式中待求的函数 $H(\xi)$ 在 ξ 为有限时应为有限, 而当 $\xi \rightarrow \pm\infty$ 时, $H(\xi)$ 的行为也必须保证 $\psi(\xi)$ 为有限, 只有这样才能满足波函数的标准条件.

将(2.7.5)式代入方程(2.7.1)中, 先求出(2.7.5)式对 ξ 的二级微商:

$$\frac{d\psi}{d\xi} = \left(-\xi H + \frac{dH}{d\xi} \right) e^{-\frac{\xi^2}{2}},$$

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = \left(-H - 2\xi \frac{dH}{d\xi} + \xi^2 H + \frac{d^2H}{d\xi^2} \right) e^{-\frac{\xi^2}{2}}.$$

代入(2.7.4)后, 得到 $H(\xi)$ 所满足的方程

$$\frac{d^2H}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH}{d\xi} + (\lambda - 1)H = 0. \quad (2.7.6)$$

用级数解法, 把 H 展成 ξ 的幂级数, 来求这方程的解. 这个级数必须只含有限项, 才能在 $\xi \rightarrow \pm\infty$ 时使 $\psi(\xi)$ 为有限; 而级数只含有限项的条件是 λ 为奇数[见附录(II)]:

$$\lambda = 2n + 1, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.7.7)$$

代入(2.7.3)式,可求得线性谐振子的能级为

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.7.8)$$

因此,线性谐振子的能量只能取分立值(图 2.5). 两相邻能级间的间隔均为 $\hbar\omega$:

$$E_{n+1} - E_n = \hbar\omega, \quad (2.7.9)$$

这和普朗克假设一致. 振子的基态($n=0$)能量

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \quad (2.7.10)$$

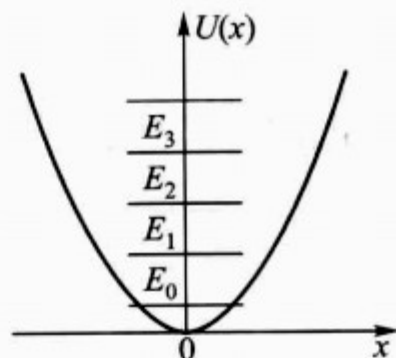


图 2.5 线性谐振子的能级

称为零点能,它是量子力学中所特有而在旧量子论中所没有的.

关于零点能的性质,将在 § 3.7 中作详细的讨论. 有关光被晶体散射的实验证明了零点能的存在. 光被晶体散射是由于晶本中原子的振动. 按照量子力学以前的理论,当温度趋向绝对零度时,原子能量趋近于零,原子趋于静止,这时就不会引起光的散射. 实验证明,温度趋向绝对零度时,散射光的强度趋向某一不为零的极限值. 这说明即使在绝对零度,原子仍有零点振动. 此外,引起表面张力、吸附作用等现象的分子间的范德瓦耳斯(van der Waals)力,也只有用零点能才能得到较好的解释^①.

对应于(2.7.7)式中不同的 n 或不同的 λ , 方程(2.7.6)有不同的解 $H_n(\xi)$. $H_n(\xi)$ 称为厄米(Hermitian)多项式,它可以用下列式子表示:

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}. \quad (2.7.11)$$

$H_n(\xi)$ 的最高次幂是 n , 它的系数是 2^n . 由(2.7.11)式可以得出 $H_n(\xi)$ 满足下列递推关系:

$$\frac{dH_n}{d\xi} = 2nH_{n-1}(\xi), \quad (2.7.12)$$

$$H_{n+1}(\xi) - 2\xi H_n(\xi) + 2nH_{n-1}(\xi) = 0. \quad (2.7.13)$$

下面列出前面几个厄米多项式:

^① 参看:Э. Б. 史包尔斯基. 周同庆, 等译. 原子物理学: 第一卷. 北京: 高等教育出版社, 1954: 494—

$$\left. \begin{aligned} H_0 &= 1, & H_1 &= 2\xi, \\ H_2 &= 4\xi^2 - 2, & H_3 &= 8\xi^3 - 12\xi, \\ H_4 &= 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12, \\ H_5 &= 32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi. \end{aligned} \right\} \quad (2.7.14)$$

由(2.7.5)式,对应于能量 E_n 的波函数是

$$\left. \begin{aligned} \psi_n(\xi) &= N_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi), \\ \psi_n(x) &= N_n e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}} H_n(\alpha x), \end{aligned} \right\} \quad (2.7.15)$$

这函数称为厄米函数. 式中 N_n 是归一化因子,它由正交归一化条件

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \psi_{n'}(x) dx = \delta_{n,n'} \quad (2.7.16)$$

定出为[见附录(II)]:

$$N_n = \left(\frac{\alpha}{\pi^{1/2} 2^n n!} \right)^{1/2}. \quad (2.7.17)$$

由(2.7.14)和(2.7.15)不难看出

$$\psi_n(-x) = (-1)^n \psi_n(x), \quad (2.7.18)$$

即 $\psi_n(x)$ 的奇偶性由 n 决定,称为 n 宇称.

由(2.7.12), (2.7.13), (2.7.15)和(2.7.17)式可得 $\psi_n(\xi)$ 两个重要的递推公式

$$\xi \psi_n(\xi) = \sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1}(\xi) + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}(\xi), \quad (2.7.19)$$

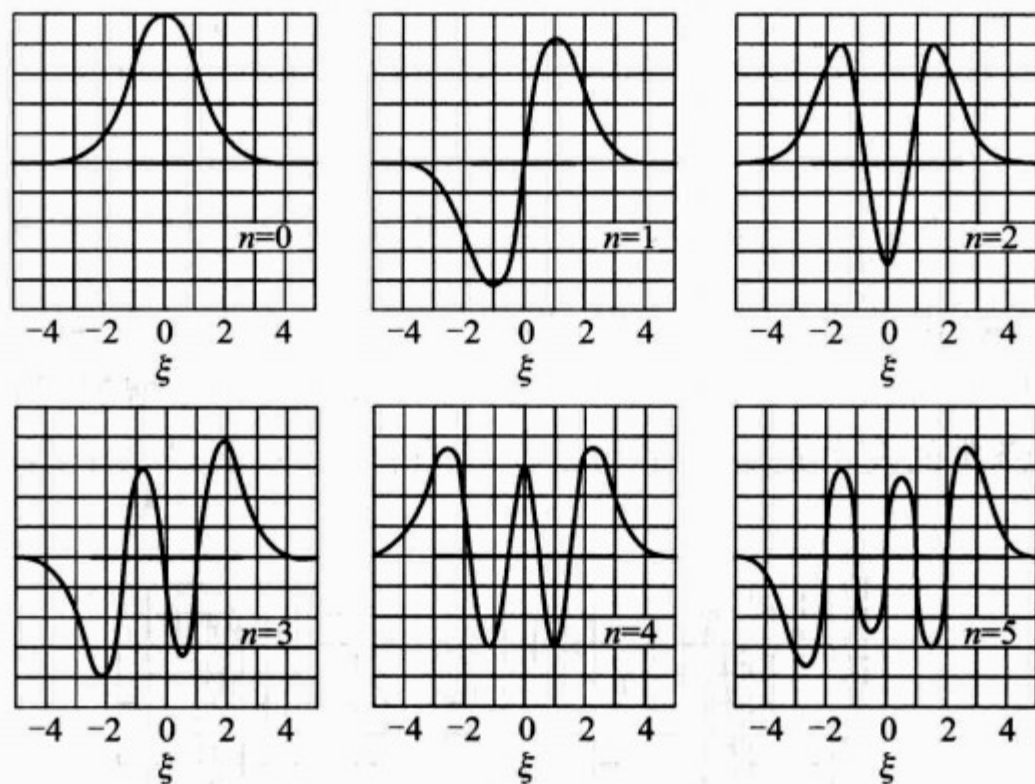
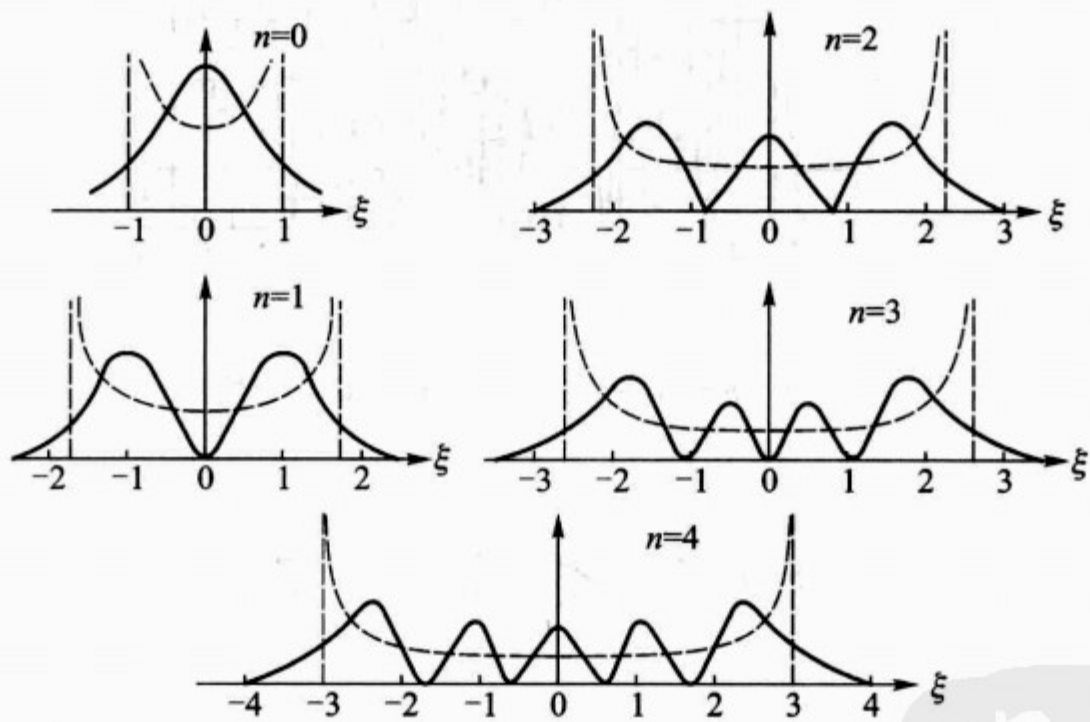
$$\frac{d}{d\xi} \psi_n(\xi) = \sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1}(\xi) - \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}(\xi). \quad (2.7.20)$$

这些递推公式在后面有关谐振子问题的计算中十分有用.

图 2.6 表示线性谐振子的前面六个波函数,图中粗横线表示具有相同能量的经典线性谐振子的振动范围.由图及(2.7.14)式都可看出, $\psi_n(\xi)$ 在有限范围内与 ξ 轴相交 n 次,即 $\psi_n(\xi) = 0$ 有 n 个根,或者说 $\psi_n(\xi)$ 有 n 个节点.

图 2.7 中的实线表示线性谐振子不同状态 ($n = 0, 1, 2, 3, 4$) 的概率密度 $|\psi_n(\xi)|^2$. 下面我们把它和经典情况作一比较.

在经典力学中,在 ξ 到 $\xi + d\xi$ 之间的区域内找到质点的概率 $w(\xi) d\xi$ 与质点在此区域内逗留的时间 dt 成比例:

图 2.6 线性谐振子的前六个本征函数 $\psi_n(\xi)$ ($n=0, 1, \dots, 5$)图 2.7 线性谐振子的概率密度 $|\psi_n(\xi)|^2$ ($n=0, 1, \dots, 4$)

$$w(\xi) d\xi = \frac{dt}{T},$$

T 是振动周期. 由此有

$$w(\xi) = \frac{1}{T \frac{d\xi}{dt}} = \frac{1}{vT},$$

即概率密度与质点的速度成反比. 对于经典的线性谐振子, $\xi = a \sin(\omega t + \delta)$, 在 ξ 点的速度为

$$v = \frac{d\xi}{dt} = a\omega \cos(\omega t + \delta) = a\omega \left(1 - \frac{\xi^2}{a^2}\right)^{\frac{1}{2}},$$

所以概率密度与 $\left(1 - \frac{\xi^2}{a^2}\right)^{-\frac{1}{2}}$ 成比例. 图 2.7 和图 2.8 中的虚线表示经典线性谐振子的概率密度. 由图 2.7 可以看出, 当线性谐振子在前几个量子态时, 概率密度与经典情况毫无相似之处; 量子数 n 增大, 相似性也随之增加. 当 $n=10$ 时 (图 2.8), 量子和经典的两种情况在平均上已相当符合, 差别只在于 $|\psi_n(\xi)|^2$ 迅速振荡而已.

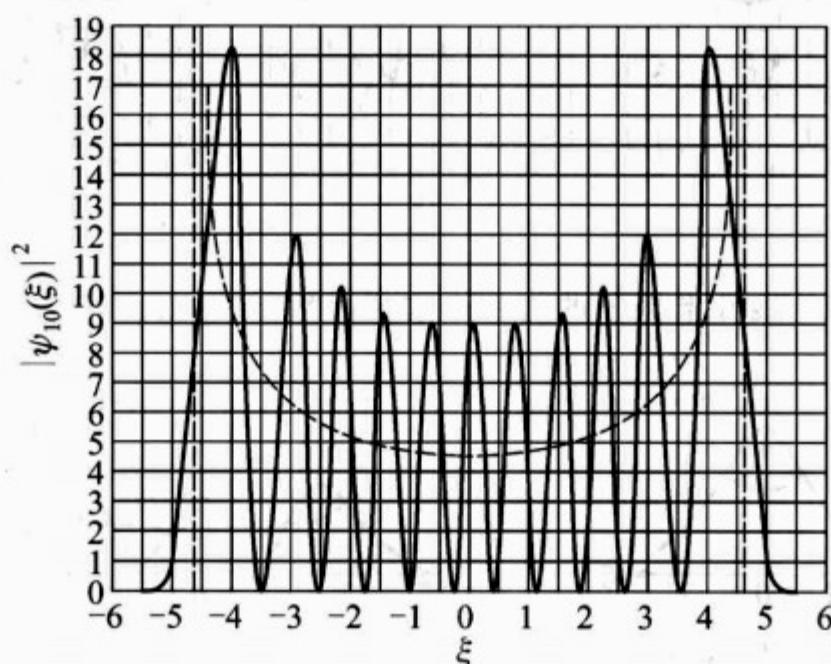


图 2.8 $n=10$ 时线性谐振子的概率密度

§ 2.8 势垒贯穿

在 § 2.6、§ 2.7 两节所讨论的问题中, 体系的势能在无限远处都是无限大, 波函数在无限远处为零, 这个条件使得体系的能级是分立的, 属于束缚态. 上两节中, 我们正是利用这个边界条件定出能级, 求得波函数的具体形式. 本节中, 我们将讨论体系势能在无限远处为有限 (下面取它为零) 的情况, 这时粒子可以在无限远处出现, 波函数在无限远处不为零. 由于没有无限远处波函数为零的约束, 体系能量可以取任意值, 即组成连续谱. 这类问题属于粒子被势场散射的问题, 粒子由无限远处来, 被势场散射后又到无限远处去. 在这类问题中, 粒子的能量是预先确定的.

考虑在一维空间运动的粒子, 它的势能在有限区域 ($0 < x < a$) 内等于常量 U_0 ($U_0 > 0$), 而在这区域外面等于零, 即

$$\begin{aligned} U(x) &= U_0, & 0 < x < a, \\ U(x) &= 0, & x < 0, x > a. \end{aligned} \quad (2.8.1)$$

我们称这种势场为方形势垒(图 2.9). 具有能量 E 的粒子由势垒左方($x < 0$)向右方运动. 在经典力学中, 只有能量 E 大于 U_0 的粒子才能越过势垒运动到 $x > a$ 的区域; 能量 E 小于 U_0 的粒子运动到势垒左方边缘($x = 0$ 处)时被反射回去, 不能透过势垒. 在量子力学中, 情况却不是这样. 下面我们将看到, 能量 E 大于 U_0 的粒子有可能越过势垒, 但也有可能被反射回来; 而能量 E 小于 U_0 的粒子有可能被势垒反射回来, 但也有可能贯穿势垒而运动到势垒右边 $x > a$ 的区域中去.

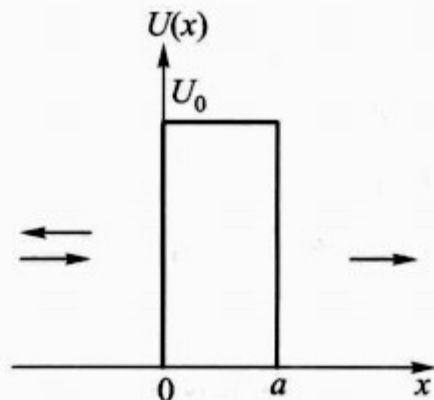


图 2.9 一维方势垒

粒子的波函数 ψ 所满足的定态薛定谔方程是

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi = 0 \quad (x < 0, x > a) \quad (2.8.2)$$

和

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)\psi = 0 \quad (0 < x < a). \quad (2.8.3)$$

先讨论 $E > U_0$ 的情形. 为简便起见, 令

$$k_1 = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad k_2 = \left[\frac{2m(E - U_0)}{\hbar^2}\right]^{\frac{1}{2}}, \quad (2.8.4)$$

则方程(2.8.2)和(2.8.3)改写为

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k_1^2\psi = 0 \quad (x < 0, x > a) \quad (2.8.5)$$

和

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k_2^2\psi = 0 \quad (0 < x < a). \quad (2.8.6)$$

此处 k_1, k_2 都是大于零的实数.

在 $x < 0$ 区域内, 波函数

$$\psi_1 = Ae^{ik_1x} + A'e^{-ik_1x} \quad (2.8.7)$$

是方程(2.8.5)的解.

在 $0 < x < a$ 区域内, 方程(2.8.6)的解是

$$\psi_2 = Be^{ik_2x} + B'e^{-ik_2x}. \quad (2.8.8)$$

在 $x > a$ 区域内, 方程(2.8.5)的解是

$$\psi_3 = Ce^{ik_1x} + C'e^{-ik_1x}. \quad (2.8.9)$$

按照公式(2.5.4), 定态波函数是 ψ_1, ψ_2, ψ_3 再分别乘上一个含时间的因子 $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$. 由此很容易看出, (2.8.7) — (2.8.9) 三式右边第一项是由左向右传播的平面波, 第二项是由右向左传播的平面波. (2.8.7) 式右边第一项是入射波, 第二项是反射波. 在 $x > a$ 区域内, 没有由右向左运动的粒子, 因而只应有向右传播的透射波, 不应有向左传播的波, 所以在(2.8.9)式中必须令

$$C' = 0. \quad (2.8.10)$$

现在利用波函数及其微商在 $x=0$ 和 $x=a$ 连续的条件来确定波函数中的其他系数. 由 $(\psi_1)_{x=0} = (\psi_2)_{x=0}$, 我们有 $[\psi'(x)]$ 的连续性是由薛定谔方程决定的, 见 §2.9 例3]

$$A + A' = B + B';$$

$$\text{由} \left(\frac{d\psi_1}{dx} \right)_{x=0} = \left(\frac{d\psi_2}{dx} \right)_{x=0}, \text{有}$$

$$k_1A - k_1A' = k_2B - k_2B';$$

$$\text{由} (\psi_2)_{x=a} = (\psi_3)_{x=a}, \text{有}$$

$$Be^{ik_2a} + B'e^{-ik_2a} = Ce^{ik_1a};$$

$$\text{由} \left(\frac{d\psi_2}{dx} \right)_{x=a} = \left(\frac{d\psi_3}{dx} \right)_{x=a}, \text{有}$$

$$k_2Be^{ik_2a} - k_2B'e^{-ik_2a} = k_1Ce^{ik_1a}.$$

解这一组方程, 可以得出 C, A' 和 A 的关系是

$$C = \frac{4k_1k_2e^{-ik_1a}}{(k_1 + k_2)^2e^{-ik_2a} - (k_1 - k_2)^2e^{ik_2a}}A, \quad (2.8.11)$$

$$A' = \frac{2i(k_1^2 - k_2^2)\sin k_2a}{(k_1 - k_2)^2e^{ik_2a} - (k_1 + k_2)^2e^{-ik_2a}}A. \quad (2.8.12)$$

(2.8.11) 和 (2.8.12) 两式给出透射波和反射波振幅与入射波振幅之间的关系. 由这两式可以求出透射波和反射波的概率流密度与入射波概率流密度之比. 将入射波 Ae^{ik_1x} , 透射波 Ce^{ik_1x} 和反射波 $A'e^{-ik_1x}$ 依次代换(2.4.4)式中的 Ψ , 得到入射波的概率流密度为

$$J = \frac{i\hbar}{2m} \left[Ae^{ik_1x} \frac{d}{dx}(A^*e^{-ik_1x}) - A^*e^{-ik_1x} \frac{d}{dx}(Ae^{ik_1x}) \right]$$

$$= \frac{\hbar k_1}{m} |A|^2,$$

透射波的概率流密度为

$$J_D = \frac{\hbar k_1}{m} |C|^2,$$

反射波的概率流密度为

$$J_R = -\frac{\hbar k_1}{m} |A'|^2.$$

透射波概率流密度与入射波概率流密度之比称为透射系数,以 D 表示. 这个比值也就是贯穿到 $x > a$ 区域的粒子在单位时间内流过垂直于 x 方向的单位面积的数目,与入射粒子(在 $x < 0$ 区域)单位时间内流过垂直于 x 方向的单位面积的数目之比. 由上面的结果,有

$$D = \frac{J_D}{J} = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{4k_1^2 k_2^2}{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2 a + 4k_1^2 k_2^2}. \quad (2.8.13)$$

反射波概率流密度与入射波概率流密度之比称为反射系数,以 R 表示. 由上面的结果,有

$$R = \left| \frac{J_R}{J} \right| = \frac{|A'|^2}{|A|^2} = \frac{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2 a}{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2 a + 4k_1^2 k_2^2} = 1 - D. \quad (2.8.14)$$

由这两式可见, D 和 R 都小于 1, D 与 R 之和等于 1. 这说明入射粒子一部分贯穿势垒到 $x > a$ 区域,另一部分被势垒反射回去(图 2.10).

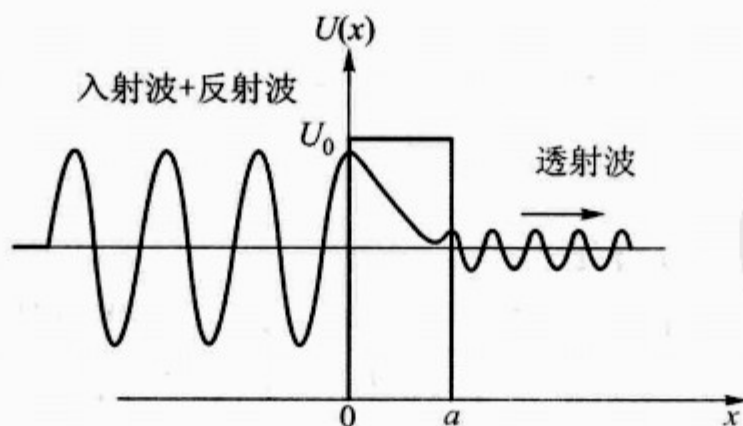


图 2.10 势垒贯穿示意图

现在再讨论 $E < U_0$ 的情形. 这时 k_2 是虚数,令

$$k_2 = ik_3,$$

则 k_3 是实数. 由(2.8.4)式,得

$$k_3 = \left[\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (2.8.15)$$

把 k_2 换为 ik_3 , 前面的计算仍然成立. 经过简单计算后, (2.8.11) 式可改写为

$$C = \frac{2ik_1 k_3 e^{-ik_1 a}}{(k_1^2 - k_3^2) \operatorname{sh} k_3 a + 2ik_1 k_3 \operatorname{ch} k_3 a} A. \quad (2.8.16)$$

式中 sh 和 ch 依次是双曲正弦函数和双曲余弦函数, 其值为

$$\operatorname{sh} x = \frac{e^x - e^{-x}}{2}, \quad \operatorname{ch} x = \frac{e^x + e^{-x}}{2};$$

透射系数 D 的公式 (2.8.13) 可改写为

$$D = \frac{4k_1^2 k_3^2}{(k_1^2 + k_3^2)^2 \operatorname{sh}^2 k_3 a + 4k_1^2 k_3^2}. \quad (2.8.17)$$

如果粒子的能量 E 很小, 以致 $k_3 a \gg 1$, 则 $e^{k_3 a} \gg e^{-k_3 a}$, $\operatorname{sh}^2 k_3 a$ 可以近似地用 $\frac{1}{4}e^{2k_3 a}$ 代替:

$$\operatorname{sh}^2 k_3 a = \left(\frac{e^{k_3 a} - e^{-k_3 a}}{2} \right)^2 \approx \frac{1}{4} e^{2k_3 a}.$$

于是, (2.8.17) 式可写为

$$D = \frac{4}{\frac{1}{4} \left(\frac{k_1}{k_3} + \frac{k_3}{k_1} \right)^2 e^{2k_3 a} + 4}.$$

因为 k_1 和 k_3 同数量级, $k_3 a \gg 1$ 时, $e^{2k_3 a} \gg 4$, 所以上式可写为

$$D = D_0 e^{-2k_3 a} = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} a}, \quad (2.8.18)$$

式中 D_0 是常数, 它的数量级接近于 1. 由此式很容易看出, 透射系数随势垒的加宽或加高而急剧减小, 因而宏观条件下一般观察不到隧道效应.

为了对透射系数的数量级有较具体的概念, 我们对电子进行计算: $m_e = 0.511 \text{ eV}/c^2$, $\hbar c = 1973 \text{ eV} \cdot \text{\AA}$, 令 $U_0 - E = 5 \text{ eV}$, 则由 (2.8.18) 式, 对不同的势垒宽度, 透射系数的数量级为:

$a/\text{\AA}$	1.0	2.0	5.0	10.0
D	0.101	1.02×10^{-2}	1.06×10^{-5}	1.12×10^{-10}

由此可以看出, 当势垒宽度 a 为 $1 \text{ \AA}$ (原子的线度) 时, 透射系数相当大; 而当 $a = 10 \text{ \AA}$ 时, 透射系数就非常微小了.

如果势垒不是方形,而是任意形状 $U(x)$,如图 2.11 所示.在这种情况下,我们可以把这个势垒看做是许多方形势垒组成的,每个方形势垒宽为 dx ,高为 $U(x)$. 能量为 E 的粒子在 $x=a$ 处射入势垒 $U(x)$,在 $x=b$ 处射出,即 $U(a) = U(b) = E$. 由 (2.8.18) 式,粒子贯穿每个方形势垒的透射系数为

$$D = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2m[U(x)-E]} dx}.$$

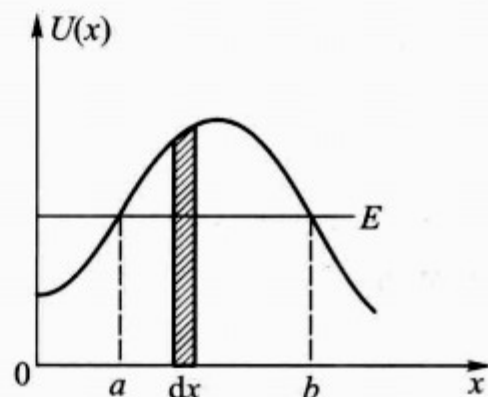


图 2.11 任意形状的势垒

贯穿势垒 $U(x)$ 的透射系数应等于贯穿所有这些方形势垒的透射系数之积,即

$$D = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2m[U(x)-E]} dx}. \quad (2.8.19)$$

这个公式的推导是不够严格的,但是它和用更严格方法得出的结果一致^①.

粒子在能量 E 小于势垒高度时仍能贯穿势垒的现象,称为隧道效应(图 2.10). 金属电子冷发射和 α 衰变等现象都是由隧道效应产生的. 隧道二极管具有隧道效应的特性. 1981 年 IBM 公司在瑞士苏黎世实验室的宾尼希 (G. Binnig) 和罗勒 (H. Rohrer) 发明了基于量子隧道效应的扫描隧穿显微镜 (scanning tunnelling microscope, 简称 STM) 极大地推动了众多领域科学研究的发展.

隧道效应用经典力学很难解释,它完全是由于微观粒子具有波动的性质而来的. 从经典力学来看,粒子能量等于动能与势能之和:

$$E = \frac{p^2}{2m} + U(x), \quad (2.8.20)$$

在 $E < U(x)$ 的区域内,粒子的动能变为负数,这是没有意义的. 但是,在量子力学中,这样的结论不能成立,这问题将留到 § 3.7 中再讨论.

§ 2.9 例 题

例 1 设一维无限深方势阱宽度为 a . 求处于基态的粒子的动量分布.
解

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi(x), & 0 < x < a. \\ \psi(0) = 0, & \psi(a) = 0. \end{cases} \quad (2.9.1)$$

^① 参看: 周世勋. 量子力学. 上海: 上海科学技术出版社, 1961, § 46.

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

解可以写为

$$\psi(x) = A \sin(kx + \delta)$$

其中 A 和 δ 为待定常数.

由边条件

$$\psi(0) = 0, \quad \psi(0) = A \sin \delta = 0,$$

可取

$$\delta = 0. \quad \psi(x) = A \sin kx.$$

$$\psi(a) = A \sin(ka) = 0, \quad ka = n\pi, \quad k_n = n\pi/a, \quad n = 1, 2, \dots. \quad (2.9.2)$$

$n=0$, 得零解, 无意义, 不取. 由于 $\sin kx$ 是奇函数, n 等于负整数的解, 与 n 等于正整数的解仅差 (-1) 因子, 为非独立解, 不取.

因此, 薛定谔方程解为(已归一化),

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), & 0 < x < a, \\ 0, & x < 0, x > a, \end{cases} \quad (2.9.3)$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left(\frac{n\pi\hbar}{a} \right)^2, \quad n = 1, 2, \dots. \quad (2.9.4)$$

基态波函数

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right),$$

可用动量本征函数展开

$$\psi_1(x) = \int C_1(p) \psi_p(x) dp, \quad \psi_p(x) = \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}, \quad (2.9.5)$$

$$\begin{aligned} C_1(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) e^{-\frac{i}{\hbar} px} dx \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sqrt{\frac{2}{a}} \frac{1}{2} \left\{ \frac{e^{i(\frac{\pi}{a} - \frac{p}{\hbar})a} - 1}{\frac{\pi}{a} - \frac{p}{\hbar}} + \frac{e^{-i(\frac{\pi}{a} + \frac{p}{\hbar})a} - 1}{\frac{\pi}{a} + \frac{p}{\hbar}} \right\}. \end{aligned} \quad (2.9.6)$$

注：初学者常犯的一个错误是以为动量只能取两个值 $p = \pm \hbar k = \pm \frac{\hbar \pi}{a}$ ，概率各 $\frac{1}{2}$ 。如果波函数是 $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)$ ， $-\infty < x < +\infty$ [显然这与(2.9.3)式很不相同]，则动量是 $p = \pm \frac{\hbar \pi}{a}$ ，概率各 $\frac{1}{2}$ 。本题中当 n 增大， $n \sim 20$ 时， $|C_{20}(p)|^2 \sim \frac{1}{2}$ ，接近经典解。

例 2 一个电子处在宽度 a 的无限深方势阱的基态上，阱的两壁突然反向运动，使阱宽变为 $2a$ ，试求电子留在基态的概率。

解

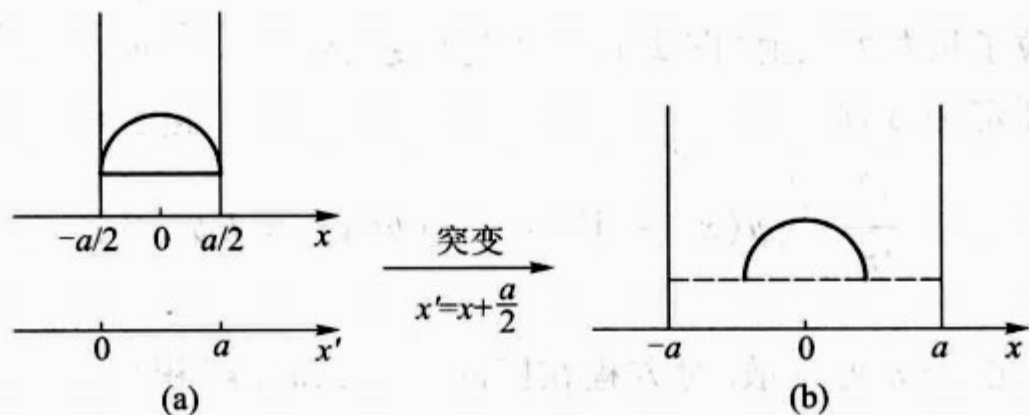


图 2.12

处在基态电子波函数如图 2.12(a)，阱两壁突然反向运动，阱宽 $a \rightarrow 2a$ ，电子波函数来不及改变，电子在宽 $2a$ 的阱中波函数形状如图 2.12(b)，它并不是 $2a$ 阱的本征态，可以由后者展开。

对于宽度 a 的阱， x 轴坐标原点取在阱中心， x' 轴原点在左壁。本征函数可写为

$$\begin{aligned} \psi_n(x') &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x'\right) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left[\frac{n\pi}{a}\left(x + \frac{a}{2}\right)\right] \\ &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a} + \frac{n\pi}{2}\right). \end{aligned}$$

同理，宽度 $2a$ 的阱的本征函数为

$$\psi'_n(x) = \sqrt{\frac{1}{a}} \sin\left[\frac{n\pi}{2a}(x+a)\right] = \sqrt{\frac{1}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{2a} + \frac{n\pi}{2}\right).$$

前者的基态波函数用后者本征函数系展开，

$$\psi_1(x) = \sum_n C_n \psi'_n(x),$$

$$\begin{aligned}
 C_1 &= \int_{-a/2}^{a/2} \psi'_1(x) \psi_1(x) dx = \frac{\sqrt{2}}{a} \int_{-a/2}^{a/2} \sin\left(\frac{\pi x}{2a} + \frac{\pi}{2}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{a} + \frac{\pi}{2}\right) dx \\
 &= \frac{\sqrt{2}}{a} \int_{-a/2}^{a/2} \cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right) \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx = \frac{8}{3\pi}.
 \end{aligned}$$

电子留在基态的概率为

$$|C_1|^2 = \frac{64}{9\pi^2}.$$

例3 一维 δ 势垒散射

设 $x = a$ 处有一维 δ 势垒

$$U(x) = A\delta(x - a) \quad (A > 0),$$

能量为 E 的粒子从左方入射(图 2.13), 求透射系数.

解 由薛定谔方程

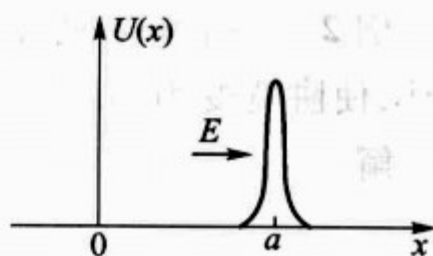


图 2.13 一维 δ 势垒

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + A\delta(x - a)\psi(x) = E\psi(x), \quad (2.9.7)$$

显然 $\frac{d^2}{dx^2} \psi(x)$ 在 $x = a$ 处发散. 对方程在区间 $[a - \epsilon, a + \epsilon]$ 积分,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} [\psi'(a + \epsilon) - \psi'(a - \epsilon)] + A\psi(a) = E \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} \psi(x) dx \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} 0,$$

得

$$\psi'(a + \epsilon) - \psi'(a - \epsilon) = \frac{2mA}{\hbar^2} \psi(a). \quad (2.9.8)$$

可见 $\psi'(a)$ 不连续, 但是这个问题中粒子概率连续, 故 $\psi(a)$ 连续. 波函数可写为

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ik(x-a)} + Re^{-ik(x-a)}, & x < a, \\ Se^{ik(x-a)}, & x > a, \end{cases} \quad (2.9.9)$$

其中波矢 $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$.

(2.9.9) 式代入连接条件(2.9.8)式,

$$ik(S - 1 + R) = \frac{2mA}{\hbar^2} S. \quad (2.9.10)$$

由 $\psi(a)$ 连续,

$$1 + R = S. \quad (2.9.11)$$

消去 R 得透射系数

$$T = |S|^2 = \left(1 + \frac{m^2 A^2}{\hbar^4 k^2}\right)^{-1} = \left(1 + \frac{mA^2}{2\hbar^2 E}\right)^{-1}. \quad (2.9.12)$$

波函数(2.9.9)代入概率流密度矢量公式(2.4.4),不难证明 $J(x)$ 在 $x=a$ 处仍然连续. 可见,由于 δ 势垒使 $\psi'(a)$ 不连续,是由薛定谔方程导致的,并非来自概率流密度矢量. ①

小 结

量子力学中用波函数描写微观体系的状态.

$\Psi^* \Psi d\tau$ 是状态用 Ψ 描写的粒子在体积元 $d\tau$ 内的概率(设 Ψ 是归一化的).

态叠加原理: 设 $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n, \dots$ 是体系的可能状态,那么,这些态的线性叠加

$$\Psi = \sum_n c_n \Psi_n$$

也是体积的一个可能状态.

波函数随时间变化的规律是薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U\Psi.$$

如果势能 U 与时间无关,则有定态波函数 $\Psi = \psi e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ 存在, ψ 满足定态薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U\psi = E\psi.$$

定态薛定谔方程是能量算符的本征值方程.

波函数应满足三个基本条件: 连续性,有限性,单值性.

概率流密度 $J = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi)$ 与概率密度 $w = \Psi^* \Psi$ 满足连续性方程

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \nabla \cdot J = 0.$$

定态薛定谔方程求解的例:

① 参看: 曾谨言. 量子力学导论. 2 版. 北京: 北京大学出版社, 1998.

(1) 一维无限深方势阱 $U = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, \\ \infty, & x < 0, x > a. \end{cases}$

本征值 $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}$, n 为正整数.

本征函数 $\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), & n \text{ 为正整数}, \quad 0 < x < a, \\ 0, & x < 0, x > a. \end{cases}$

(2) 线性谐振子 $U = \frac{m}{2}\omega^2 x^2$.

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

本征函数 $\psi_n(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi^{\frac{1}{2}} 2^n n!}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} H_n(\alpha x)$, $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$.
 $\psi_n(-x) = (-1)^n \psi_n(x)$.

(3) 势垒贯穿

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

本征值 任何正值.

当 $k_3 a \gg 1$ 时, 透射系数为

$$D = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar} \int_0^a \sqrt{2m(U_0 - E)} dx}.$$

对任意形状势垒 $U(x)$, 透射系数为

$$D = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar} \int_a^b \sqrt{2m[U(x) - E]} dx}.$$

习 题

2.1 证明在定态中, 概率流密度与时间无关.

2.2 由下列两定态波函数计算概率流密度:

$$(1) \psi_1 = \frac{1}{r} e^{ikr}, \quad (2) \psi_2 = \frac{1}{r} e^{-ikr}.$$

从所得结果说明 ψ_1 表示向外传播的球面波, ψ_2 表示向内 (即向原点) 传播的球面波.

2.3 一粒子在一维势场

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

中运动,求粒子的能级和对应的波函数.

2.4 证明(2.6.14)式中的归一化因子是 $A' = \frac{1}{\sqrt{a}}$.

2.5 求一维谐振子处在第一激发态时概率最大的位置.

2.6 在一维势场中运动的粒子,势能对原点对称: $U(-x) = U(x)$,证明粒子的定态波函数具有确定的宇称.

2.7 一粒子在一维势阱

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

中运动,求束缚态($0 < E < U_0$)的能级所满足的方程.

2.8 分子间的范德瓦耳斯力所产生的势能可以近似地表示为

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0, \\ U_0, & 0 \leq x < a, \\ -U_1, & a \leq x \leq b, \\ 0, & b < x, \end{cases}$$

求束缚态的能级所满足的方程.

量子力学
PDG

$$\psi_{j\tilde{k}}(x) = \text{常数} \cdot \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_j \left(\tilde{k} + \frac{2n\pi}{a} \right) e^{i\left(\tilde{k} + \frac{2n\pi}{a}\right)x} = u_{j\tilde{k}}(x) e^{i\tilde{k}x}, \quad (2.63)$$

其中

$$u_{j\tilde{k}}(x) = \text{常数} \cdot \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_j \left(\tilde{k} + \frac{2n\pi}{a} \right) e^{i\frac{2n\pi x}{a}} \quad (2.64)$$

为 x 的周期函数, 周期与势场的周期 a 相等. 即是

说, 在周期场中, 定态波函数受到调制, 调制的周期与场的周期相等. 这是很好理解的. 具有这样性质的波函数(2.63)称为布洛赫(Bloch)波函数.

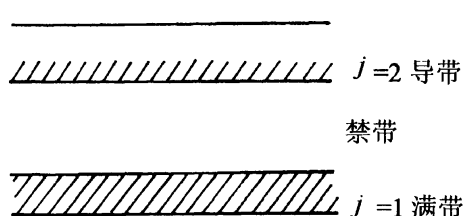


图 2.6 周期场中的能带

周期场中的能量 $E_j(\tilde{k})$ 由两个指标 j 和 $\tilde{k}$ 决定. 不同的 j 给出彼此离散的能量值. 每一离散的能量又是连续变量 $\tilde{k}$ 的函数, 因此, 周期场中粒子的能量分成带(如图 2.6), 粒子能量可取能带中的值, 并可在能带内连续改变, 但不能取能带外的值. 这种情形常被说成, 粒子可填入各能带. 固体中的能带可填入导电电子, 又称导带. 能带间的能区不能填入粒子, 又称禁带. 填满了电子的能带称为满带. 能带论是现代固体理论的基础.

§ 2.5 若干定性讨论

设 $V(x)$ 为 x 的连续函数, 最小值为 V_0 , $\lim_{x \rightarrow -\infty} V = V_1$, $\lim_{x \rightarrow \infty} V = V_2$. 由(2.5)可直接看出, 在势函数 $V(x)$ 和能量 E 上同加一常数, 定态薛定谔方程不变. 即

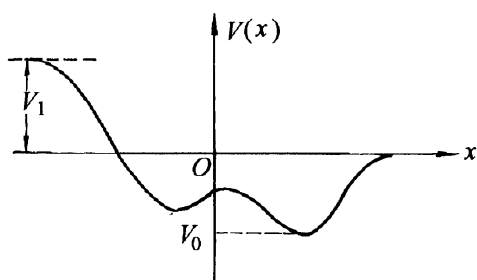


图 2.7 势函数示意图

在非相对论性量子力学中也可随意选择能量的零点. 因此, 恒可设 V_1 与 V_2 中较小的一个(例如 V_2)为零. 于是有 $V_1 \geq 0$, $V_2 = 0$ 和 $V_0 \leq 0$. 图 2.7 中示意地表示出了这样的势函数.

设 $V_2 = 0$, $E > 0$. 当 $x \rightarrow \infty$ 时, 定态薛定谔方程变为

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0, \quad (2.65)$$

$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ 为实数. 它有两个线性独立的解 e^{ikx} 和 e^{-ikx} , 都是单值、连续、光滑、有界的, 都符合波函数的条件. 将它们按定态薛定谔方程

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\psi = 0 \quad (2.66)$$

向 x 有穷处延伸. 由 e^{ikx} 延伸过来的解称为 $\psi_{右+}$, 由 e^{-ikx} 延伸过来的解称为 $\psi_{右-}$. 它们的任意线性组合

$$\psi_{\text{右}} = A\psi_{\text{右}+} + B\psi_{\text{右}-} \quad (2.67)$$

就是(2.66)的通解. 如果 $E > V_1$, 则当 $x \rightarrow -\infty$ 时定态薛定谔方程变为

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k'^2\psi = 0, \quad (2.68)$$

$k' = \sqrt{\frac{2m(E - V_1)}{\hbar^2}}$ 为实数. 它的两个线性独立的解 $e^{ik'x}$ 和 $e^{-ik'x}$ 也都符合波函数的条件. 将它们按(2.66)延伸到 x 有穷处. 由 $e^{ik'x}$ 延伸过来的解叫 $\psi_{\text{左}+}$, 由 $e^{-ik'x}$ 延伸过来的解叫 $\psi_{\text{左}-}$. 令 $\psi_{\text{左}+}$ 与 $\psi_{\text{右}}$ 在有穷远处某点 x_0 平滑相联, 得一组联立方程

$$\left. \begin{aligned} \psi_{\text{左}+}(x_0) &= A\psi_{\text{右}+}(x_0) + B\psi_{\text{右}-}(x_0), \\ \left. \frac{d\psi_{\text{左}+}}{dx} \right|_{x_0} &= A \left. \frac{d\psi_{\text{右}+}}{dx} \right|_{x_0} + B \left. \frac{d\psi_{\text{右}-}}{dx} \right|_{x_0}. \end{aligned} \right\} \quad (2.69)$$

由于朗斯基行列式

$$\begin{vmatrix} \psi_{\text{右}+}(x) & \psi_{\text{右}-}(x) \\ \frac{d\psi_{\text{右}+}}{dx} & \frac{d\psi_{\text{右}-}}{dx} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} e^{ikx} & e^{-ikx} \\ ik e^{ikx} & -ik e^{-ikx} \end{vmatrix} = -2ik \neq 0,$$

又由于 $\psi_{\text{左}+}(x_0)$ 和 $\left. \frac{d\psi_{\text{左}+}}{dx} \right|_{x_0}$ 不会同时为零 (否则 $\psi_{\text{左}+} \equiv 0$, 这是不可能的), 联立方程组(2.69)有惟一的非零解 $A = A_1, B = B_1$. 即对任一给定的 $E > V_1$, 定态薛定谔方程(2.66)均有符合波函数条件的解

$$\psi_1(x) = A_1\psi_{\text{右}+}(x) + B_1\psi_{\text{右}-}(x), \quad (2.70)$$

从而在大于 V_1 的区间, 粒子具有连续能谱. 同样可令 $\psi_{\text{左}-}$ 与 $\psi_{\text{右}}$ 平滑相联. 由此得到的联立方程组也有惟一的非零解 $A = A_2, B = B_2$. 即, 对任一给定的 $E > V_1$, 定态薛定谔方程(2.66)还有另一符合波函数条件的解

$$\psi_2(x) = A_2\psi_{\text{右}+}(x) + B_2\psi_{\text{右}-}(x). \quad (2.71)$$

由于 $x \rightarrow -\infty$ 时, $\psi_1(x) \rightarrow e^{ik'x}$, $\psi_2(x) \rightarrow e^{-ik'x}$, 它们是线性独立的. 如一个能级对应 n 个线性独立的定态, 就称这能级是 n 度简并的. 可见上面讨论的一维运动中高于 V_1 的每一能级都是二度简并的.

如果 $0 < E < V_1$, 则当 $x \rightarrow \infty$ 时情形与前相同, 而当 $x \rightarrow -\infty$ 时定态薛定谔方程变为

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \chi'^2\psi = 0, \quad (2.72)$$

$\chi' = \sqrt{\frac{2m(V_1 - E)}{\hbar^2}}$ 为实数. 它的两个线性独立的解 $e^{-\chi'x}$ 和 $e^{\chi'x}$ 中只有 $e^{\chi'x}$ 在 $x \rightarrow -\infty$ 时有界. 将它按(2.66)延伸到 x 有穷处得 $\psi_{\text{左}-}$. 现在只能令 $\psi_{\text{左}-}$ 与 $\psi_{\text{右}}$ 平滑相联, 得到(2.66)的一个解(2.71). 可见, 在区间 $(0, V_1)$ 中, 粒子能量仍具连

续谱,但每一能级只对应一个定态,因而是简并的.

如果 $E < 0$, 则当 $x \rightarrow \infty$ 时, 定态薛定谔方程变为

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \chi^2\psi = 0, \quad (2.73)$$

$\chi = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$ 为实数. 它的两个线性独立的解 $e^{-\chi x}$ 和 $e^{\chi x}$ 中只有 $e^{-\chi x}$ 在 $x \rightarrow \infty$ 时有界. 将它按(2.66)延伸到 x 有穷处得 $\psi_{右+}$. 当 $x \rightarrow -\infty$ 时, (2.72) 及其以后的讨论仍成立. 现在只能考虑将 $\psi_{左-}$ 与 $A\psi_{右+}$ 平滑相联. 这导致方程组

$$\psi_{左-}(x_0) = A\psi_{右+}(x_0), \quad \left. \frac{d\psi_{左-}}{dx} \right|_{x_0} = A \left. \frac{d\psi_{右+}}{dx} \right|_{x_0}. \quad (2.74)$$

对给定的 $E < 0$, 这两个方程中只有一个未知数 A , 因而不一定有解. 只有将 E 与 A 都当作未知数, 方程组(2.74)才可能有解. 即在小于零的能区内, 只有特殊的能量值 E 才能使定态薛定谔方程有符合波函数条件的解. 这就是能量的量子化. 或者说, 在 $E < 0$ 的区间中, 粒子具有离散能谱. 而且对这些特殊能级中的每一个, 从(2.74)只能解得一个定态: 一维的离散能级都是不简并的.

如果 $E < V_0$, 则 $E - V(x) < 0$, 由(2.66)知, $\frac{d^2\psi}{dx^2}$ 必与 ψ 同相位. 由于 $e^{-\chi x}$ 和 $e^{\chi x}$ 均为实函数, 同相即同号. 因 $e^{\chi x} > 0$, $\frac{de^{\chi x}}{dx} = \chi' e^{\chi x} > 0$, 在 $x \rightarrow -\infty$ 处, $\psi_{左-} > 0$, $\frac{d\psi_{左-}}{dx} > 0$. 由(2.66)推得 $\frac{d^2\psi_{左-}}{dx^2} > 0$, $\frac{d\psi_{左-}}{dx}$ 沿正方向随 x 增加而增加. 这转而又使 $\psi_{左-}$ 也沿正方向随 x 的增加而增加. 在 x 的整个区间 $(-\infty, \infty)$ 内均有 $\psi_{左-} > 0$, $\frac{d\psi_{左-}}{dx} > 0$. 另一方面, 因 $e^{-\chi x} > 0$, $\frac{de^{-\chi x}}{dx} = -\chi e^{-\chi x} < 0$, 在 $x \rightarrow \infty$ 处 $\psi_{右+} > 0$, $\frac{d\psi_{右+}}{dx} < 0$. 由(2.66)推得 $\frac{d^2\psi_{右+}}{dx^2} > 0$, $\frac{d\psi_{右+}}{dx}$ 随 x 的减少变得越来越负. 这转而又使 $\psi_{右+}$ 随 x 的减少变得越来越正. 在 x 的整个区间内均有 $\psi_{右+} > 0$, $\frac{d\psi_{右+}}{dx} < 0$. 为使(2.74)第一式成立, 必须 $A > 0$. 然而这使(2.74)第二式不能成立. 即对任何 $E < V_0$, 联立方程组(2.74)恒无解, 定态薛定谔方程(2.66)也因而无解. 粒子能量不能小于势能的最小值.

上述有些结论并不依赖本节初关于势函数的那些假定. 例如, 容易看出, 粒子能量不小于势能最小值的结论并不依赖于势函数在无穷远处有极限值的假定. 下面一般地证明, 一维束缚态能级恒不简并.

束缚态指无穷远处趋于零的波函数表示的定态. 设某能级 E 有两个束缚态波函数 $\psi_1(x)$ 和 $\psi_2(x)$, 它们都满足定态薛定谔方程

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\psi_1 = 0, \quad \frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\psi_2 = 0. \quad (2.75)$$

用 ψ_2 乘第一式减 ψ_1 乘第二式得

$$\psi_2 \frac{d^2\psi_1}{dx^2} - \psi_1 \frac{d^2\psi_2}{dx^2} = 0.$$

此式的第一积分为

$$\psi_2 \frac{d\psi_1}{dx} - \psi_1 \frac{d\psi_2}{dx} = \text{常数}. \quad (2.76)$$

由于无穷远处 $\psi_1 = \psi_2 = 0$, 右端积分常数为零, 从而有

$$\frac{1}{\psi_1} \frac{d\psi_1}{dx} = \frac{1}{\psi_2} \frac{d\psi_2}{dx}. \quad (2.77)$$

此式的积分为

$$\ln\psi_1 = \ln\psi_2 + \text{常数},$$

从而有

$$\psi_1 = \text{常数} \cdot \psi_2, \quad (2.78)$$

即 ψ_1 与 ψ_2 线性相关. 这就证明了, 能级 E 只对应一个定态, 没有简并.

习 题 二

1. 求粒子在相距 a 的两堵无穷高势垒间运动的能量和定态波函数, 并与两端固定的弦的振动作比较讨论.

提示波函数在无穷高势垒处为零.

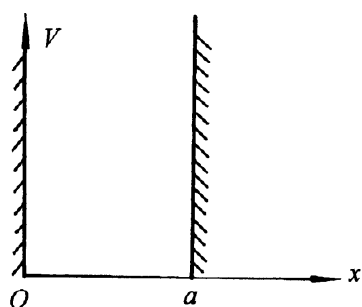


图 1 无穷高势垒

2. 求势场 $V(x) = ax + bx^2$ 中的能级和定态, 其中 $b > 0$.

3. 求势场

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & \text{如 } x \leq 0 \\ Cx, C > 0, & \text{如 } x > 0 \end{cases}$$

中的能级和定态. 设含贝塞尔函数的方程的根已由数值方法求得, 因此当作已知的. 对能量很高, 可用贝塞尔函数的渐近形式的地方求出能级的解析表达式.

4. 求势场

$$V(x) = \begin{cases} -Cx, & \text{如 } x \leq 0 \\ Cx, & \text{如 } x > 0 \end{cases} \quad C > 0$$

中的能级和定态.

5. 求势场

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

中的能级和定态.

6. 设图 2.5 中 a, b 两点分别有 $k^2 = C_a(x-a)^\mu, k^2 = C_b(x-b)^{\mu'}, \mu$ 和 μ' 为奇数, 求证, 旧量子化条件(2.57)仍真.

7. 如图 2, 设 $x \leq 0$ 处势能 $V(x) = \infty, x > 0$ 处它使拐点 b 附近有 $k^2 = C(x-b)^\mu, \mu$ 为奇数. 证明 WKB 近似下的量子化条件为

$$\oint p dx = \left(n + \frac{3}{4} \right) h,$$

其中 $p = \hbar k$ 为动量.

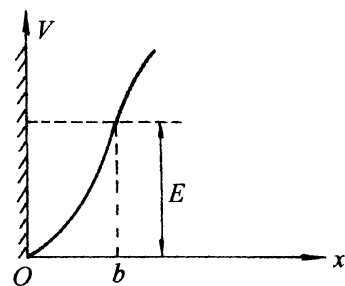


图 2

8. 设
$$V(x) = \begin{cases} \infty, & \text{如 } x \leq 0, \\ \frac{1}{2} m \omega^2 x^2, & \text{如 } x > 0. \end{cases}$$

(1) 严格解定态薛定谔方程, 求能量的可能值与定态波函数.

(2) 用上题的量子化条件计算能量的可能值, 并与(1)中的严格解比较.

9. 试证一维周期场中 $\tilde{k} \neq 0$ 且 $\tilde{k} \neq -\frac{\pi}{a}$ 的能级是二度简并的.

10. 求周期势场

$$V(x) = g \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na) \quad (\text{狄拉克梳})$$

中运动的粒子的能谱和定态波函数.