

量子力学第四讲：一维定态问题

刘宁

2026 年 10 月 11 日

本讲讨论一维定态问题。首先从一维无限深势阱出发，分别从非对称和对称势阱的情况下求解定态薛定谔方程，给出能量本征值和归一化波函数，并对比两者的异同。随后讨论一维有限深势阱，由于边界条件给出的是超越方程，一般不能解析求解，我们通过图解说明束缚态的存在与数目。接着分析一维阶梯势垒，分别讨论 $E < V_0$ 和 $E > V_0$ 两种情形下的反射与透射。最后求解一维谐振子，得到等间距的能级和厄米多项式形式的波函数。

1 束缚态和散射态

在具体求解各种势场之前，先说明定态薛定谔方程的结构，以及由它自然引出的两类解：散射态与束缚态。理解这两类态的区别，是后面讨论无限深势阱、有限深势阱、势垒和谐振子的基础。

当势能 $V(x)$ 不显含时间时，波函数可以写成

$$\psi(x, t) = \phi(x)e^{-iEt/\hbar}, \quad (1)$$

其中 $\phi(x)$ 满足定态薛定谔方程

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

为了看清方程的结构，把二阶导数项单独留在左边，其余项移到右边，得

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E] \phi. \quad (3)$$

这个形式非常有用：它表明波函数的二阶导数（即波函数的“弯曲程度”）由 $V(x) - E$ 的符号决定。记

$$Q(x) = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E], \quad (4)$$

则方程 (3) 可简写为

$$\phi''(x) = Q(x)\phi(x). \quad (5)$$

根据 $Q(x)$ 的符号，方程 (5) 在空间中被分成两类区域：

1. 当 $E > V(x)$, 此时 $Q(x) < 0$, 方程变为

$$\phi'' + |Q|\phi = 0. \quad (6)$$

波函数的二阶导数与自身符号相反, 解是振荡型的, 可以写成正弦、余弦或复指数形式。

2. 当 $E < V(x)$, 此时 $Q(x) > 0$, 方程变为

$$\phi'' - |Q|\phi = 0. \quad (7)$$

波函数的二阶导数与自身符号相同, 解是指数型的, 表现为指数增长或指数衰减。

由此可见, 方程 (3) 已经把两类截然不同的行为写在了同一个公式里: 在 $E > V$ 的区域波函数振荡, 在 $E < V$ 的区域波函数指数变化。一个具体的量子态往往同时包含这两类区域, 两个区域之间由波函数及其导数的连续性条件连接起来。

如果能量 $E > V$ 在远场处仍然成立, 那么粒子的行为总是表现出在粒子传播到空间某个区域内与势场作用, 然后又传播到无穷远, 这样的态称之为**散射态**。而如果能量 $E < V$ 在远场处仍然成立, 粒子到不了无穷远, 被束缚在有限区域内, 这样的态称之为**束缚态**。

束缚态与散射态的区别本质上来源于能量 E 与势能远场值的大小关系。同一个势场, 对于不同的能量范围, 可能同时存在束缚态和散射态。例如有限深势阱, 当 $0 < E < V_0$ 时存在束缚态, 而当 $E > V_0$ 时则只有散射态。这正是我们在后面几节中反复看到的图像。

2 一维无限深势阱

2.1 非对称无限深势阱

考虑一维无限深势阱, 势能函数为

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, \\ \infty, & \text{其他.} \end{cases} \quad (8)$$

粒子被限制在 $0 < x < a$ 区域内, 在边界外波函数必须为零。因此边界条件为

$$\psi(0) = 0, \quad \psi(a) = 0. \quad (9)$$

在势阱内部 $0 < x < a$, 势能 $V = 0$, 定态薛定谔方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi. \quad (10)$$

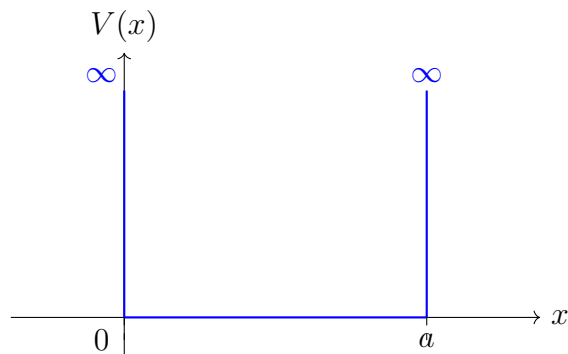


图 1: 一维无限深势阱 $0 < x < a$ 的势能图。

令

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad (11)$$

则方程化为

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0. \quad (12)$$

其通解为

$$\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx). \quad (13)$$

由边界条件 $\psi(0) = 0$, 得 $B = 0$ 。因此

$$\psi(x) = A \sin(kx). \quad (14)$$

再由 $\psi(a) = 0$, 得

$$A \sin(ka) = 0. \quad (15)$$

非平庸解要求 $A \neq 0$, 因此

$$ka = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (16)$$

于是

$$k_n = \frac{n\pi}{a}. \quad (17)$$

对应的能量本征值为

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (18)$$

归一化波函数: 由归一化条件

$$\int_0^a |A|^2 \sin^2(k_n x) dx = 1, \quad (19)$$

计算得

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}}. \quad (20)$$

因此归一化波函数为

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \quad 0 < x < a. \quad (21)$$

能量 E_n 与 n^2 成正比，能级间隔随 n 增大而增大。基态能量 $E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} > 0$ ，称为零点能。这是不确定性原理的体现：粒子被限制在宽度 a 的区域内，动量不确定度 Δp 不为零，因此能量不能为零。波函数 $\psi_n(x)$ 有 $n - 1$ 个节点（不包括边界）。随着 n 增大，波函数振荡次数增多。

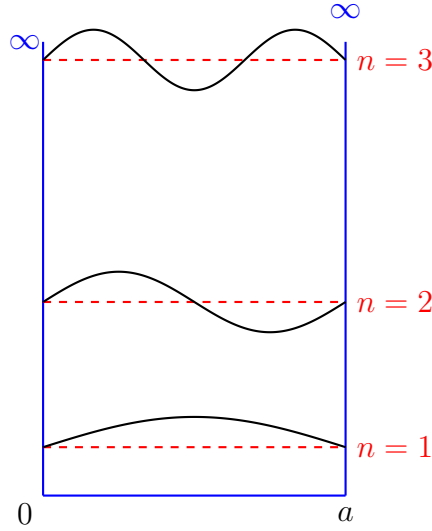


图 2: 一维无限深势阱 $0 < x < a$ 的前三个能级 (红色虚线) 及对应的波函数 (黑色实线) 示意图。

2.2 对称无限深势阱

现在考虑势阱关于原点对称的情况：

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| < a, \\ \infty, & |x| \geq a. \end{cases} \quad (22)$$

边界条件为

$$\psi(-a) = 0, \quad \psi(a) = 0. \quad (23)$$

在阱内 $|x| < a$ ，方程同样为

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (24)$$

通解为

$$\psi(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx). \quad (25)$$

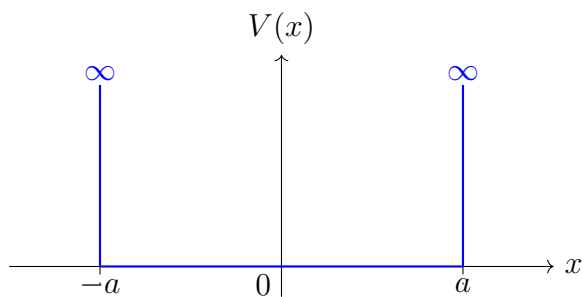


图 3: 对称一维无限深势阱 $-a < x < a$ 的势能图。

由 $\psi(a) = 0$ 和 $\psi(-a) = 0$ 得

$$A \cos(ka) + B \sin(ka) = 0, \quad (26)$$

$$A \cos(ka) - B \sin(ka) = 0. \quad (27)$$

将两式相加和相减，分别得到

$$2A \cos(ka) = 0, \quad 2B \sin(ka) = 0. \quad (28)$$

由于波函数不能恒为零， A 与 B 不能同时为零，因此上述两个方程要求下列两种情形之一成立：

- $A \neq 0, B = 0$ 。此时必须有

$$\cos(ka) = 0 \Rightarrow ka = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (29)$$

波函数为

$$\psi(x) = A \cos(kx), \quad (30)$$

它是偶函数。

- $A = 0, B \neq 0$ 。此时必须有

$$\sin(ka) = 0 \Rightarrow ka = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (31)$$

波函数为

$$\psi(x) = B \sin(kx), \quad (32)$$

它是奇函数。

由此可见，直接代入通解和边界条件后，解自然地分成两类：一类是偶宇称解，另一类是奇宇称解。对于给定的能量（即给定的 k ），只能属于其中一类，不可能同时含有奇偶成分。这正是边界条件所强加的结果，而不是事先的假设。将两类解统一编号，可以写为

$$k_n = \frac{n\pi}{2a}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (33)$$

对应的能量本征值为

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8ma^2} \quad (34)$$

归一化波函数为

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\frac{n\pi x}{2a}\right), & n \text{ 为奇数}, \\ \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{2a}\right), & n \text{ 为偶数}, \end{cases} \quad |x| < a. \quad (35)$$

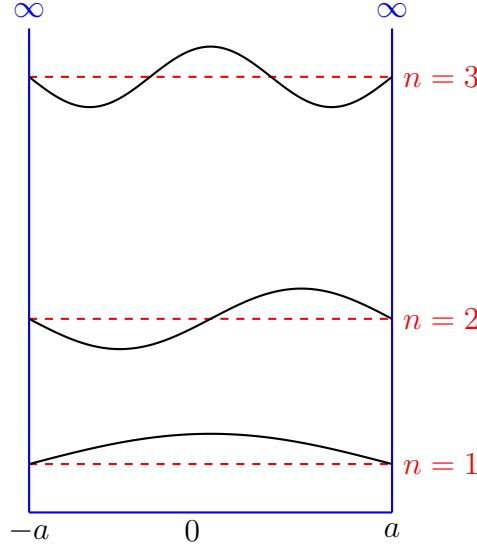


图 4: 对称一维无限深势阱的前三个能级及对应的波函数示意图。 $n=1$ 为偶宇称, $n=2$ 为奇宇称, $n=3$ 为偶宇称。

2.3 对称与非对称无限深势阱结果的讨论

非对称势阱宽度为 a , 能量为

$$E_n^{\text{asym}} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}. \quad (36)$$

对称势阱宽度为 $2a$, 能量为

$$E_n^{\text{sym}} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8ma^2} = \frac{1}{4} E_n^{\text{asym}}. \quad (37)$$

可见, 势阱宽度加倍后, 能量本征值缩小为原来的 $1/4$ 。基态能量从 $\frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$ 变为 $\frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}$ 。这是因为粒子被限制的空间越大, 动量不确定度越小, 零点能越低。

此外, $0 < x < a$ 的波函数都是正弦函数, 没有确定的宇称; 而 $-a < x < a$ 的波函数具有确定的宇称, 奇宇称解对应偶数 n , 偶宇称解对应奇数 n 。

3 一维有限深势阱

3.1 势阱模型

考虑一维有限深势阱：

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| < a, \\ V_0, & |x| \geq a, \end{cases} \quad V_0 > 0. \quad (38)$$

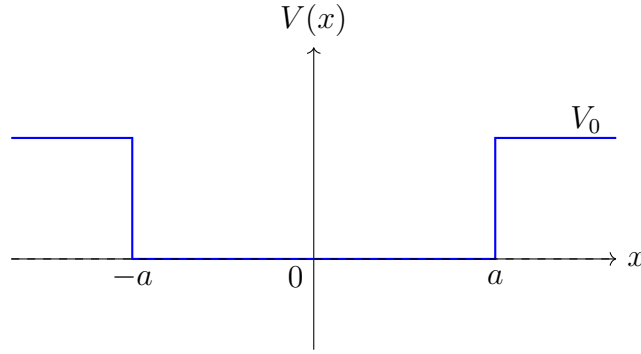


图 5: 一维有限深势阱。

我们关心束缚态，即能量满足 $0 < E < V_0$ 的态。在三个区域分别求解定态薛定谔方程：

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi. \quad (39)$$

- 区域 I: $x < -a$, $V = V_0$,

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \kappa^2\psi, \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} > 0. \quad (40)$$

注意波函数在 $x \rightarrow -\infty$ 时必须保持有限，于是解为

$$\psi_I(x) = Ce^{\kappa x}. \quad (41)$$

- 区域 II: $|x| < a$, $V = 0$,

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0. \quad (42)$$

解为

$$\psi_{II}(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx). \quad (43)$$

- 区域 III: $x > a$, $V = V_0$, 注意波函数在 $x \rightarrow +\infty$ 时必须保持有限，于是

$$\psi_{III}(x) = De^{-\kappa x}. \quad (44)$$

在 $x = \pm a$ 处，波函数及其导数必须连续。由于势能关于原点对称，解可以取为偶宇称或奇宇称。

- 偶宇称解： $\psi(-x) = \psi(x)$ ，则

$$\psi_{\text{II}}(x) = A \cos(kx), \quad (45)$$

并且 $\psi_{\text{I}}(x) = Ce^{\kappa x}$ ， $\psi_{\text{III}}(x) = Ce^{-\kappa x}$ 。在 $x = a$ 处连续性给出

$$A \cos(ka) = Ce^{-\kappa a}, \quad (46)$$

$$-Ak \sin(ka) = -C\kappa e^{-\kappa a}. \quad (47)$$

两式相除，得

$$\boxed{k \tan(ka) = \kappa.} \quad (48)$$

- 奇宇称解： $\psi(-x) = -\psi(x)$ ，则

$$\psi_{\text{II}}(x) = B \sin(kx), \quad (49)$$

并且 $\psi_{\text{I}}(x) = -Ce^{\kappa x}$ ， $\psi_{\text{III}}(x) = Ce^{-\kappa x}$ 。在 $x = a$ 处连续性给出

$$B \sin(ka) = Ce^{-\kappa a}, \quad (50)$$

$$Bk \cos(ka) = -C\kappa e^{-\kappa a}. \quad (51)$$

两式相除，得

$$\boxed{-k \cot(ka) = \kappa.} \quad (52)$$

引入无量纲变量

$$\xi = ka, \quad \eta = \kappa a, \quad (53)$$

则

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} = R^2. \quad (54)$$

超越方程变为

$$\eta = \xi \tan \xi \quad (\text{偶宇称}), \quad \eta = -\xi \cot \xi \quad (\text{奇宇称}). \quad (55)$$

由图 6 可见，有限深势阱至少有一个束缚态。随着 V_0a^2 增大，束缚态数目增多。当 R 较小时，可能只有一个偶宇称束缚态。在图 7 中展示了波函数在不同区域的示意图，注意在 $|x| > a$ 时，波函数并不为 0，说明这些区域对于一个量子粒子来说是有概率到达的，而在经典力学中并不允许出现这样的区域。

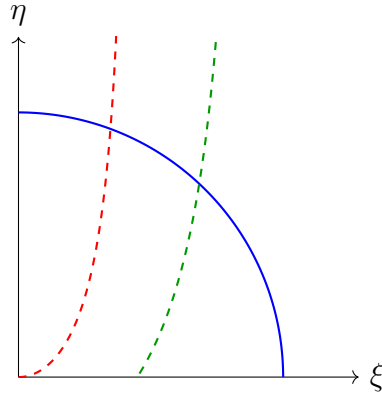


图 6: 有限深势阱超越方程的图解。红色曲线为 $\eta = \xi \tan \xi$, 绿色曲线为 $\eta = -\xi \cot \xi$, 蓝色圆弧为 $\xi^2 + \eta^2 = R^2$ 。交点给出束缚态能级。

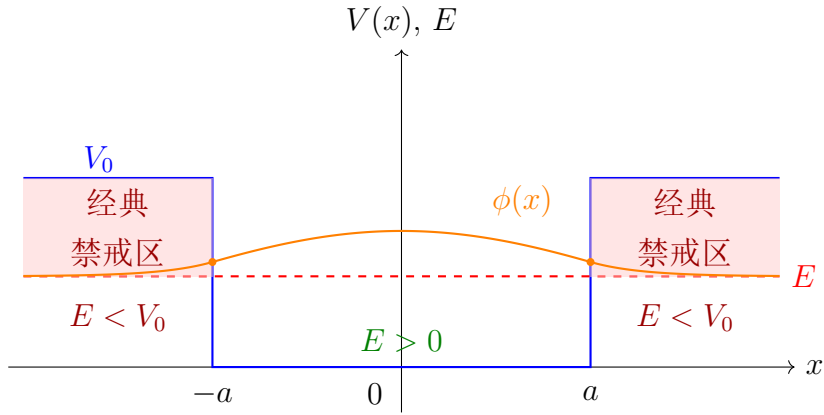


图 7: 有限深势阱中束缚态的经典允许区与经典禁戒区。 $E > V$ 为经典允许区, 波函数振荡; 红色区域为 $E < V_0$ 的经典禁戒区, 波函数指数衰减但一般不为零。边界处波函数连续。

4 一维势垒

4.1 一维阶梯势垒

考虑一维阶梯势垒:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ V_0, & x > 0, \end{cases} \quad V_0 > 0. \quad (56)$$

定态薛定谔方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi. \quad (57)$$

在 $x < 0$ 区域, $V = 0$, 方程化为

$$\frac{d^2\psi_I}{dx^2} + k^2\psi_I = 0, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0. \quad (58)$$

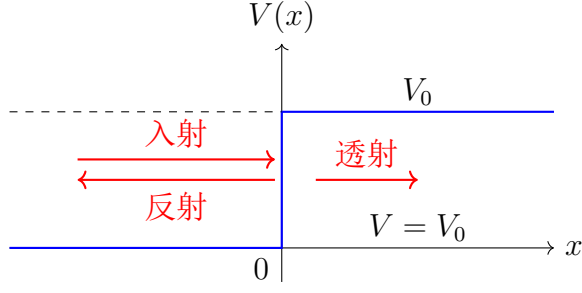


图 8: 一维阶梯势垒示意图。

其通解为

$$\psi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}. \quad (59)$$

其中 Ae^{ikx} 为向右传播的入射波, Be^{-ikx} 为向左传播的反射波。在 $x > 0$ 区域, $V = V_0$, 方程化为

$$\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}\psi_{II} = 0. \quad (60)$$

下面分 $E < V_0$ 和 $E > V_0$ 两种情形讨论。

当 $E < V_0$ 时, 令

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} > 0, \quad (61)$$

则方程 (60) 化为

$$\frac{d^2\psi_{II}}{dx^2} - \kappa^2\psi_{II} = 0. \quad (62)$$

其通解为

$$\psi_{II}(x) = Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x}. \quad (63)$$

由于波函数在 $x \rightarrow +\infty$ 时必须保持有限, 第二项发散, 故 $D = 0$ 。因此

$$\psi_{II}(x) = Ce^{-\kappa x}. \quad (64)$$

这是指数衰减的解, 表明粒子可以进入势垒区域, 但概率随深度指数衰减。

在 $x = 0$ 处, 波函数及其导数连续:

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0), \quad \psi'_I(0) = \psi'_{II}(0). \quad (65)$$

代入 (59) 和 (64), 得

$$A + B = C, \quad (66)$$

$$ik(A - B) = -\kappa C. \quad (67)$$

由 (66) 得 $C = A + B$, 代入 (67):

$$ik(A - B) = -\kappa(A + B). \quad (68)$$

整理得

$$B(k - i\kappa) = -A(k + i\kappa), \quad (69)$$

因此

$$\frac{B}{A} = \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa}, \quad \frac{C}{A} = \frac{2k}{k + i\kappa}. \quad (70)$$

反射系数为

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \frac{k^2 + \kappa^2}{k^2 + \kappa^2} = 1. \quad (71)$$

透射系数 $T = 0$ 。虽然 $x > 0$ 区域波函数不为零，但它是衰减的，不能传播到无穷远，因此透射概率流为零。这体现了量子力学与经典力学的区别：经典粒子在 $E < V_0$ 时会被完全反射，而量子粒子可以进入势垒区域，但无法穿透到无穷远。

当 $E > V_0$ 时，令

$$k' = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} > 0, \quad (72)$$

则方程 (60) 化为

$$\frac{d^2\psi_{\text{II}}}{dx^2} + k'^2\psi_{\text{II}} = 0. \quad (73)$$

其通解为

$$\psi_{\text{II}}(x) = Ce^{ik'x} + De^{-ik'x}. \quad (74)$$

由于在 $x > 0$ 区域没有向左传播的波源，故 $D = 0$ 。因此

$$\psi_{\text{II}}(x) = Ce^{ik'x}. \quad (75)$$

在 $x = 0$ 处连续性给出

$$A + B = C, \quad (76)$$

$$ik(A - B) = ik'C. \quad (77)$$

由 (76) 得 $C = A + B$ ，代入 (77)：

$$k(A - B) = k'(A + B). \quad (78)$$

整理得

$$B(k + k') = A(k - k'), \quad (79)$$

因此

$$\frac{B}{A} = \frac{k - k'}{k + k'}, \quad \frac{C}{A} = \frac{2k}{k + k'}. \quad (80)$$

反射系数和透射系数分别为

$$R = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = \left(\frac{k - k'}{k + k'} \right)^2, \quad (81)$$

$$T = 1 - R = \frac{4kk'}{(k + k')^2}. \quad (82)$$

注意这里的概率流守恒。当 $E \gg V_0$ 时， $k' \approx k$ ， $R \rightarrow 0$ ，透射系数趋于 1，回到经典极限。

4.2 一维有限高势垒

4.2.1 势垒模型与薛定谔方程

阶梯势垒是势垒问题中最简单的情形。更一般也更有实际意义的是有限宽、有限高的方形势垒：

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ V_0, & 0 < x < a, \\ 0, & x > a, \end{cases} \quad V_0 > 0. \quad (83)$$

定态薛定谔方程为

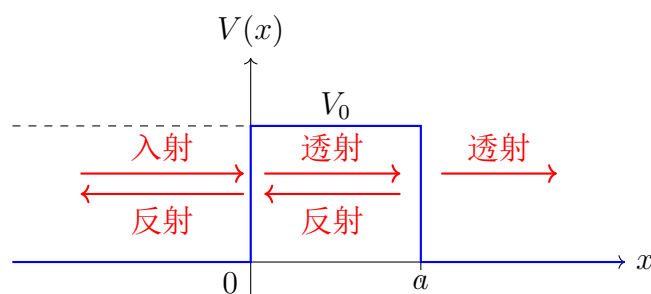


图 9: 一维有限高势垒示意图。

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi. \quad (84)$$

下面分三个区域求解。

- 区域 I ($x < 0$, $V = 0$):

$$\frac{d^2\psi_I}{dx^2} + k^2\psi_I = 0, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} > 0. \quad (85)$$

解为

$$\psi_I(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}. \quad (86)$$

- 区域 II ($0 < x < a$, $V = V_0$): 下面分 $E < V_0$ 和 $E > V_0$ 两种情形。

- 区域 III ($x > a$, $V = 0$):

$$\frac{d^2\psi_{III}}{dx^2} + k^2\psi_{III} = 0. \quad (87)$$

解为

$$\psi_{III}(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}. \quad (88)$$

由于在 $x > a$ 区域没有向左传播的波源，故 $G = 0$ 。因此

$$\psi_{III}(x) = Fe^{ikx}. \quad (89)$$

4.2.2 情形一： $E < V_0$ （量子隧穿）

当 $E < V_0$ 时，在区域 II 中令

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} > 0, \quad (90)$$

方程化为

$$\frac{d^2\psi_{\text{II}}}{dx^2} - \kappa^2\psi_{\text{II}} = 0. \quad (91)$$

通解为

$$\psi_{\text{II}}(x) = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}. \quad (92)$$

在 $x = 0$ 处，波函数及其导数连续：

$$A + B = C + D, \quad (93)$$

$$ik(A - B) = \kappa(C - D). \quad (94)$$

在 $x = a$ 处，波函数及其导数连续：

$$Ce^{\kappa a} + De^{-\kappa a} = Fe^{ika}, \quad (95)$$

$$\kappa(Ce^{\kappa a} - De^{-\kappa a}) = ikFe^{ika}. \quad (96)$$

由 (95) 和 (96) 可以解出 C 和 D 用 F 表示：

$$C = \frac{Fe^{ika}}{2} \left(1 + \frac{ik}{\kappa}\right) e^{-\kappa a}, \quad D = \frac{Fe^{ika}}{2} \left(1 - \frac{ik}{\kappa}\right) e^{\kappa a}. \quad (97)$$

代入 (93) 和 (94)，消去 C, D ，得到透射振幅

$$\frac{F}{A} = \frac{4ik\kappa e^{-ika}}{(k + i\kappa)^2 e^{-\kappa a} - (k - i\kappa)^2 e^{\kappa a}}. \quad (98)$$

透射系数为

$$T = \left| \frac{F}{A} \right|^2 = \frac{16k^2\kappa^2}{(k^2 + \kappa^2)^2 \sinh^2(\kappa a) + 4k^2\kappa^2}. \quad (99)$$

利用 $k^2 + \kappa^2 = 2mV_0/\hbar^2$ ，也可以写为

$$T = \frac{16E(V_0 - E)}{16E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2(\kappa a)}. \quad (100)$$

当 $\kappa a \gg 1$ 时， $\sinh(\kappa a) \approx e^{\kappa a}/2$ ，透射系数近似为

$$T \approx 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right) e^{-2\kappa a}. \quad (101)$$

可见透射系数随势垒宽度 a 和 κ 指数衰减。这就是**量子隧穿效应**：即使粒子能量低于势垒高度，仍有一定的概率穿透势垒。经典粒子在 $E < V_0$ 时绝对无法越过势垒，而量子粒子可以“隧穿”过去。

4.2.3 情形二： $E > V_0$

当 $E > V_0$ 时，在区域 II 中令

$$k' = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} > 0, \quad (102)$$

方程化为

$$\frac{d^2\psi_{\text{II}}}{dx^2} + k'^2\psi_{\text{II}} = 0. \quad (103)$$

通解为

$$\psi_{\text{II}}(x) = Ce^{ik'x} + De^{-ik'x}. \quad (104)$$

边界条件与前面类似，只是将 κ 替换为 ik' 。经过相同的推导，可以得到透射系数

$$T = \frac{4k^2k'^2}{(k^2 - k'^2)^2 \sin^2(k'a) + 4k^2k'^2}. \quad (105)$$

用能量表示：

$$T = \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2(k'a)}. \quad (106)$$

当 $k'a = n\pi$ ($n = 1, 2, \dots$) 时， $\sin(k'a) = 0$ ，透射系数 $T = 1$ ，出现**共振透射**。此时势垒对粒子完全透明。这一现象在经典力学中不会出现，是量子干涉的结果。当 $E \gg V_0$ 时， $k' \approx k$ ，且 $k'a$ 通常很大， $\sin^2(k'a)$ 快速振荡，其平均值约为 $1/2$ ，因此 T 在 1 附近振荡，平均趋于 1，回到经典极限。

5 一维谐振子

5.1 薛定谔方程解法

一维谐振子的势能为

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2. \quad (107)$$

定态薛定谔方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi = E\psi. \quad (108)$$

引入无量纲变量

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x, \quad \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}. \quad (109)$$

方程 (108) 化为

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\psi = 0. \quad (110)$$

当 $\xi \rightarrow \pm\infty$ 时， $\psi \sim e^{-\xi^2/2}$ 。因此设

$$\psi(\xi) = H(\xi)e^{-\xi^2/2}. \quad (111)$$

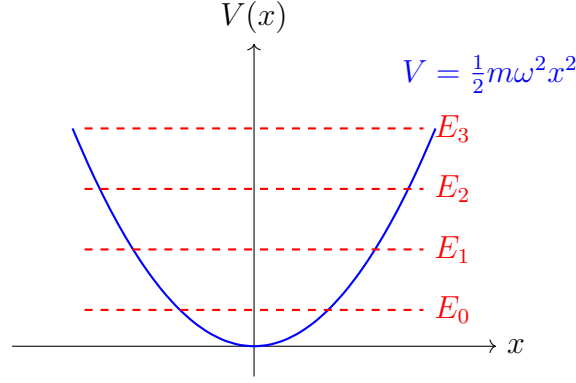


图 10: 一维谐振子的势能曲线及能级示意图。

代入 (110), 得

$$\frac{d^2 H}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH}{d\xi} + (\lambda - 1)H = 0. \quad (112)$$

这是厄米方程。为了使波函数在无穷远平方可积, $H(\xi)$ 必须为多项式。这要求

$$\lambda - 1 = 2n, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (113)$$

因此

$$\lambda = 2n + 1. \quad (114)$$

能量本征值为

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (115)$$

对应的本征函数为

$$\psi_n(x) = N_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}, \quad \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x, \quad (116)$$

其中 $H_n(\xi)$ 为厄米多项式, 归一化系数为

$$N_n = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}. \quad (117)$$

前几个能级和波函数为

$$n = 0: \quad E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega, \quad \psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-m\omega x^2/2\hbar}, \quad (118)$$

$$n = 1: \quad E_1 = \frac{3}{2} \hbar\omega, \quad \psi_1(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \sqrt{2} \xi e^{-\xi^2/2}, \quad (119)$$

$$n = 2: \quad E_2 = \frac{5}{2} \hbar\omega, \quad \psi_2(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2}} (2\xi^2 - 1) e^{-\xi^2/2}. \quad (120)$$

谐振子能级是等间距的, 间隔为 $\hbar\omega$ 。基态能量 $E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega$, 称为零点能。这是量子力学中特有的现象, 经典谐振子的最低能量为零。波函数 $\psi_n(x)$ 具有确定的宇称: n 为偶数时 $\psi_n(-x) = \psi_n(x)$, n 为奇数时 $\psi_n(-x) = -\psi_n(x)$ 。这与势能关于原点对称一致。

习题

1. 概率流密度与反射、透射系数

在一维情形下概率流密度的定义为

$$J = \frac{\hbar}{2mi} \left(\psi^* \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\psi^*}{dx} \right). \quad (121)$$

(a) 利用 (121)，分别计算下列三个波函数的概率流密度：

$$\psi_1(x) = Ae^{ikx}, \quad \psi_2(x) = Be^{i\kappa x}, \quad \psi_3(x) = Ce^{i\kappa x}, \quad (122)$$

其中 A, B, C 为复常数， k, κ 为实常数。

(b) 反射系数 R 和透射系数 T 的定义分别为，

$$R = \left| \frac{J_{\text{反射}}}{J_{\text{入射}}} \right|, \quad T = \left| \frac{J_{\text{透射}}}{J_{\text{入射}}} \right|, \quad (123)$$

请计算一维阶梯势垒在 $E > V_0$ 情形下的反射系数 R 和透射系数 T ，并验证 $R + T = 1$ 。

2. 验证谐振子基态波函数

一维谐振子的定态薛定谔方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi = E\psi. \quad (124)$$

已知谐振子基态波函数为高斯函数

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-m\omega x^2/2\hbar}. \quad (125)$$

将 (125) 代入 (124)，验证它确实是方程的解，并求出对应的能量本征值 E_0 。