

第二章B 一维定态问题

2.7 一维定态问题

一维定态的薛定谔方程可以表示为求解能量本征值方程(定态S方程)

$$\hat{H}\psi = E\psi$$
$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x)\right)\psi(x) = E\psi(x)$$
$$\frac{d^2}{dx^2}\psi + \frac{2m(E+V)}{\hbar^2}\psi = 0$$

下面我们先求解一些具体的问题来看如何计算一维定态。这有助于理解前面讲述的一些原理，也有助于进一步阐述其它性质。另外，一维定态问题许多都可以严格求解。一般情况下，我们都假定 $V(x)$ 是实数。(为什么要假定 $V(x)$ 是实数：前面习题2.2已经作过研究，如果 $V(x)$ 是复数，则几率守恒无法得到保证，这是一个非物理的结果，尽管数学上没有任何问题。实质上， $V(x)$ 取实数是为了保证Hamiltonian算符是厄米的，从而能量是可测量的，进而保证几率守恒。)

2.7.1 一维定态的一些特例

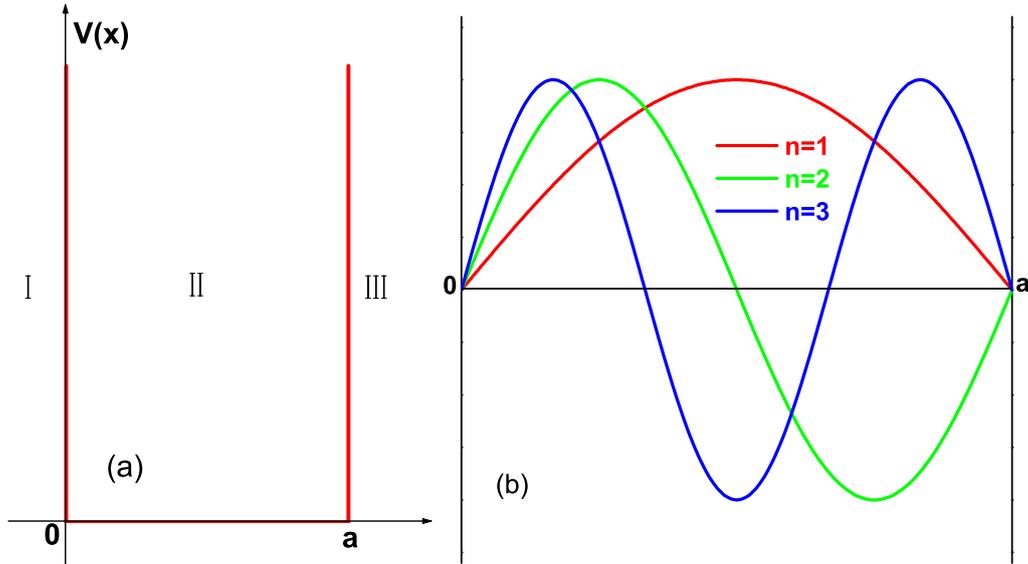
1. 方势阱问题(Square well) (重点讲述求解定态薛定谔方程一般方法，介绍束缚态)

$$V(x) = \left\{ \begin{array}{ll} 0 & 0 < x < a \quad \text{II} \\ \infty & x > a, \text{ or } x < 0 \quad \text{I, III} \end{array} \right\}$$

除了 $x = 0$ 和 $x = a$ 两端，粒子在势阱内是完全自由的。一维无限深(高)方势阱尽管形式非常简单，是个理想化的模型，但是一个非常出色的学习量子力学的切入点，对理解很多量子现象非常有帮助，而且也有着很多应用。

在 $x < 0$ 或者 $x > a$ 的区间，波函数 $\psi(x) = 0$ 。在 $0 < x < a$ 的区域内，定态S方程为

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

Figure 1: 无限深一维方势阱。(a) 势场 $V(x)$, (b) 节点情况。

首先我们证明 $E < 0$ 这样的解不存在。

If $E < 0$, defining $\lambda = \sqrt{-2mE/\hbar} > 0$, so $\psi'' - \lambda^2\psi = 0$. The general solution reads $\psi = Ae^{\lambda x} + Be^{-\lambda x}$. The boundary condition at $x = 0$ is $\psi(0) = A + B = 0$, leading $B = -A$. On the other hand, the boundary condition at $x = a$ is $\psi(a) = Ae^{\lambda a} + Be^{-\lambda a} = A(e^{\lambda a} - e^{-\lambda a}) = 0$. The only solution is $\lambda = 0$, i.e., $E = 0$, which conflicts with the previous assumption. In fact, this can be expanded as: E must exceed the minimum value of $V(x)$ for every normalizable solution to the time-independent S equation.

因为 $E \geq 0$, 所以令 $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ 得到

$$\psi'' + k^2\psi = 0$$

其通解为:

$$\psi = A'e^{ikx} + B'e^{-ikx}$$

$$\psi = A \sin kx + B \cos kx$$

另一方面, 在在 $x \leq 0$ 和 $x \geq a$ 的区域内, 由于 $V(x) = \infty$, 所以在这个区域波函数 $\psi \equiv 0$ 。由波函数的连续条件, 可以知道在边界上, 即 $x = 0$ 和 $x = a$ 处有

$$\psi(0) = \psi(a) = 0$$

取第二个通解, 代入得到

$$\psi(0) = B = 0 \implies \psi = A \sin kx$$

$$\psi(a) = A \sin ka = 0 \implies ka = n\pi \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

其中, $n = 0$, $\psi = 0$, 无物理意义, 舍去。即波函数为

$$\psi = A \sin \frac{n\pi x}{a} \quad (n = \pm 1, \pm 2, \dots)$$

相应地求得分立的本征能量(由于 n 只能取非零整数)为

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \implies E = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$

因为 n 为负整数与正整数一样, 取 $n = 1, 2, 3, \dots$ 与经典的情况不同(任意 $E \geq 0$ 的解都可以), 处在无限深方势阱中的量子粒子只能取一些允许的分立值。

又由归一化条件可以得到:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx = A^2 \int_0^a \sin^2 \frac{n\pi x}{a} dx \implies A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

原则上, 我们只是确定了 $|A|$, 简单起见取正实数, 绝对位相在这里并无实际物理意义。

最后波函数为

$$\psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} & 0 < x < a \\ 0 & x < 0, \text{ or } x > a \end{cases}$$

其中 $n = 1$ 的能量最低, 是基态, $n \neq 1$ 为激发态。其中 $n = 2$ 是第一激发态, $n = 3$ 是第二激发态,。这里要指出的是基态不是 $n = 0$, 这与经典的情况是不同的, 所谓“不动的粒子是”是无意义的, 必然存在零点能。而且也与测不准原理—位置动量无法同时测准相违背。

(问题: 如果用通解1怎样处理这个问题? 本质上, 两种通解给出同样的结果。)

一些讨论:

- (1) 节点情况: k 激发态, 就有 k 个节点(不包含0和 a); 如图1所示, $n = 1$ 基态: 无节点; $n = 2$ 第一激发态: 1个节点; $n = 3$ 第二激发态: 2个节点; ...
- (2) 连续性: 波函数 ψ 总是连续的, 但是波函数的导数 ψ' 有可能不连续; 原因是 V 出现了无限跃变, 在 $x = 0$ 和 $x = a$ 处 $V(x)$ 由0变为 ∞ ;
- (3) 波函数关于中心($x = a/2$)对称, 奇偶交替出现;(注: 习题课会单独讨论宇称问题)
- (4) 正交性: 各个态之间相互正交(orthogonal),

$$\int \psi_m^* \psi_n dx = 0 \quad n \neq m$$

$$\int \psi_m^* \psi_n dx = A^2 \int_0^a \sin \frac{m\pi x}{a} \sin \frac{n\pi x}{a} dx = \frac{1}{a} \int_0^a \left[\cos \frac{(m-n)\pi x}{a} - \cos \frac{(m+n)\pi x}{a} \right] dx = 0$$

与归一性合起来, 就是正交归一性(orthonormal)

$$\int \psi_m^* \psi_n dx = \delta_{mn}$$

(5) 完备性：任何满足该定态薛定谔方程的解都可以表示称为这些基本解的线性叠加，

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sin \frac{n\pi x}{a}.$$

其中，系数 c_m 为

$$c_m = \int \psi_m^* f(x) dx = \sum_{n=1} c_n \int \psi_m^* \psi_n dx = \sum_{n=1} c_n \delta_{mn}$$

(6) 束缚态问题与分立能级：束缚态：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，即 $x \rightarrow \pm\infty$ 时， $\psi(x) = 0$ 。一般情况下，束缚态的能量本征值是分立的能级，组成能谱。

(7) 从结果看，我们知道 $E_n \propto n^2$ ，能级是不均匀分布的，能量越高，能级越稀疏，即密度越小；另外， $\frac{\partial E_n}{\partial n} \propto n$ （相邻能级间距），故 $E_n/\Delta E_n \propto 1/n$ ，当 $n \rightarrow \infty$ 时， $\Delta E_n \ll E_n$ 。

(8) 关于能级的简并问题：所谓简并，是指有 $n(n \geq 2)$ 线性无关的本征波函数对应于同一个能量本征值，则我们说此能级是 n 度(重)简并的，否则就是无简并。显然此处每个本征能量只有一个线性无关的波函数，所以是非简并的。原则上说，一维束缚态，能量是非简并的。但是二维束缚态，则很可能是简并的，参见习题。

如果在 $0 < x < a$ 区间， $V(x) = V_0 \neq 0$ ，即

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

则在 $0 < x < a$ 区间

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = (E - V_0) \psi(x)$$

$$\psi'' + k^2 \psi = 0 \quad k^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2$$

通解为

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

其物理意义：前者代表向前传播的波，后者代表反射波。

(a) $E > V_0$ ，则 $k = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$ ，边界条件为 $\psi(0) = \psi(a) = 0$ ，所以 $B = -A$ ，整个问题与上面研究的一致，只是用 $(E - V_0)$ 代替了原来的 E 。这也告诉我们为什么用上面的通解也可以。(注：直接求解，得到的应该是 $iA \sin kx$ ，考虑到相位可调性，也可以用 $A \sin kx$ 表示)

(b) $E < V_0$, 令 $q = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$, 则通解为:

$$\psi(x) = Ae^{qx} + Be^{-qx}$$

边界条件为 $\psi(0) = \psi(a) = 0$, 可以推出 $B = -A$, 唯一解是 $q = 0$, 但与条件 $E < V_0$ 相违背。无解。

从上面的研究过程, 我们可以大致看出一维定态问题的求解过程:

(a) 按照势场 $V(x)$ 的分布情况, 在各个区间写出相应的定态薛定谔方程, 猜测一般的通解形式;

(b) 根据边界条件来求解能谱 (分立或者连续), 由归一条件定系数。

可见边界条件扮演了极其重要的角色。如拓扑绝缘体的边界态。一般情况下, 边界条件有以下可能:

(i) $V(x)$ 连续, 则 $\psi(x)$ 和 $\psi'(x)$ 均连续;

(ii) $V(x)$ 处有一有限突变 $\psi(x)$ 和 $\psi'(x)$ 仍连续;

(iii) $V(x)$ 在某处有无限大突变, $\psi(x)$ 连续, 但 $\psi'(x)$ 一般不再连续, 有可能产生有限突变。

对于一维无限深方势阱, 粒子束缚于有限空间范围, 在无限远处, $\psi = 0$, 是束缚态。一维有限运动能量本征值是分立能级, 组成分立谱。

例: 有限深势阱

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & 0 < x < a & \text{II} \\ 0 & x > a, \text{ or } x < 0 & \text{I, III} \end{cases}$$

因此各区域的本征值方程为

$$\begin{cases} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}\psi = 0 & \text{I} \\ \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0 & \text{II, III} \end{cases}$$

同样可以证明 $E < -V_0 < 0$ 方程无解。

(1): $-V_0 < E < 0$, 令 $\lambda = \sqrt{2m|E|}/\hbar = \sqrt{-2mE}/\hbar$, $k = \sqrt{2m(E+V_0)}/\hbar$, 由此得到各区域的解为(Why舍去两项, 发散)

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\lambda x} + A'e^{-\lambda x} & \text{I} \\ Be^{ikx} + Ce^{-ikx} & \text{II} \\ De^{-\lambda x} + D'e^{\lambda x} & \text{III} \end{cases}$$

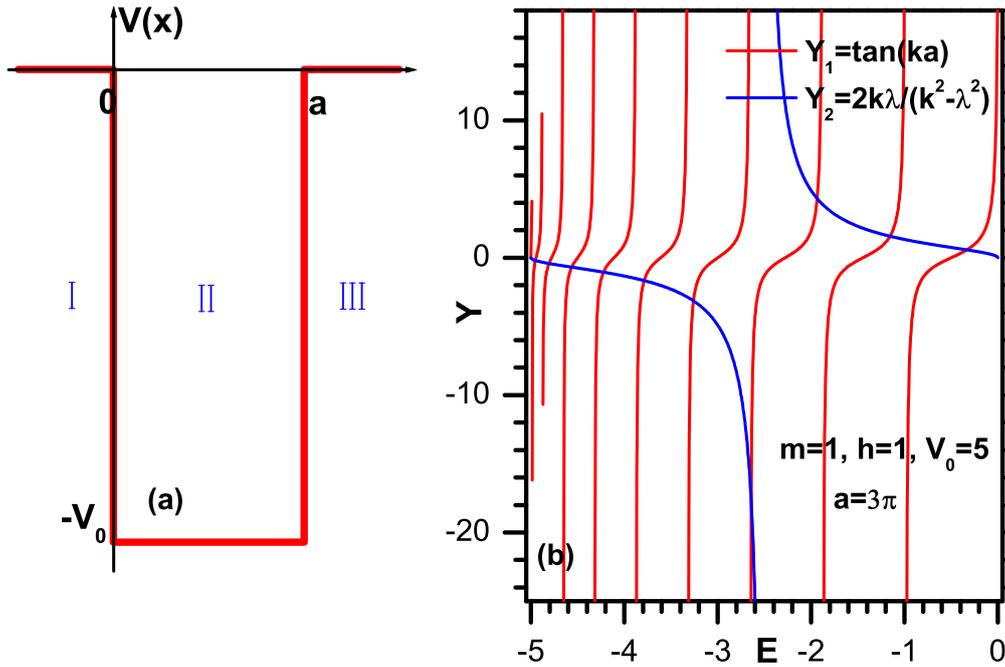


Figure 2: 一维有限深势阱。(a) 势场, (b) 图解确定本征能谱

$x = 0$ 处边界（连续）条件要求：

$$\psi \text{连续} : \quad \psi_{\text{I}}(0) = \psi_{\text{II}}(0) \implies A = B + C$$

$$\psi' \text{连续} : \quad \psi'_{\text{I}}(0) = \psi'_{\text{II}}(0) \implies \lambda A = ik(B - C)$$

在 $x = a$ 处边界条件要求：

$$\psi \text{连续} : \quad \psi_{\text{III}}(a) = \psi_{\text{II}}(a) \implies De^{-\lambda a} = Be^{ika} + Ce^{-ika}$$

$$\psi' \text{连续} : \quad \psi'_{\text{III}}(a) = \psi'_{\text{II}}(a) \implies -\lambda D Ae^{-\lambda a} = ik(Be^{ika} - Ce^{-ika})$$

用行列式表示即

$$\begin{vmatrix} 1 & -1 & -1 & 0 \\ \lambda & -ik & ik & 0 \\ 0 & e^{ika} & e^{-ika} & -e^{-\lambda a} \\ 0 & ike^{ika} & -ike^{-ika} & \lambda e^{-\lambda a} \end{vmatrix} = 0$$

4个未知数，4个方程，可以解出所有的系数。实际上，加上归一化条件，有5个方程，但是另一方面，本征能量 E 也是未知的，因此从这个角度讲有5个未知数，5个方程，可解，并且同时得到确定能谱的超越方程—能谱方程

$$(k^2 - \lambda^2) \tan ka = 2k\lambda$$

从上式可以看出能谱是分立的(Why? $\tan(ka)$ 是分段函数)，可以用图解来完成,如图 2(b)所示。

讨论: 关于束缚态: $x \rightarrow \pm\infty$ 时, $\psi(x) = 0$, 所以是束缚态, 能量本征值同样是分立的。

(2) $E > 0$, 令 $k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$, $k_2 = \sqrt{2m(E + V_0)}/\hbar$, 则波函数为

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ik_1x} + A'e^{-ik_1x} & \text{I} \\ Be^{ik_2x} + B'e^{-ik_2x} & \text{II} \\ Ce^{ik_1x} + C'e^{-ik_1x} & \text{III} \end{cases}$$

因 $x \rightarrow \pm\infty$ 时, $\psi(x)$ 并不趋于零, 所以不是束缚态。所以这实际上是一个类似于波的传播问题(但与时间无关), 假定是从左向右传播, 则 $C' = 0$ 。即区域III没有反射。由边界(连续)条件得到

$$\psi_{\text{I}}(0) = \psi_{\text{II}}(0): A + A' = B + B'$$

$$\psi'_{\text{I}}(0) = \psi'_{\text{II}}(0): k_1(A - A') = k_2(B - B')$$

$$\psi_{\text{III}}(a) = \psi_{\text{II}}(a): Ce^{ik_1a} = Be^{ik_2a} + B'e^{-ik_2a}$$

$$\psi'_{\text{III}}(a) = \psi'_{\text{II}}(a): k_1Ce^{ik_1a} = k_2(Be^{ik_2a} - B'e^{-ik_2a})$$

5个未知数, 4个方程, (或者说, 加上 E 有6个未知数, 5个方程), 这表明各个 E 都是方程的解, 即能谱应该是连续的。从中可以得到系数之间的比例关系。

求解方程组得:

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

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

讨论:

1) 由于 $x \rightarrow \pm\infty$ 时, $\psi(x) \neq 0$, 所以不是束缚态, 能量本征值也不是分立的。

2) 透射和反射

由于流密度定义为

$$\vec{J} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi)$$

如令 $\psi = Ae^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$, 则有

$$\vec{J} = \frac{\hbar\vec{k}}{m} |A|^2 = \vec{v} |A|^2$$

与经典电流定义相比较:

$$\vec{j} = -ne\vec{v}$$

可见

$$n \implies |A|^2$$

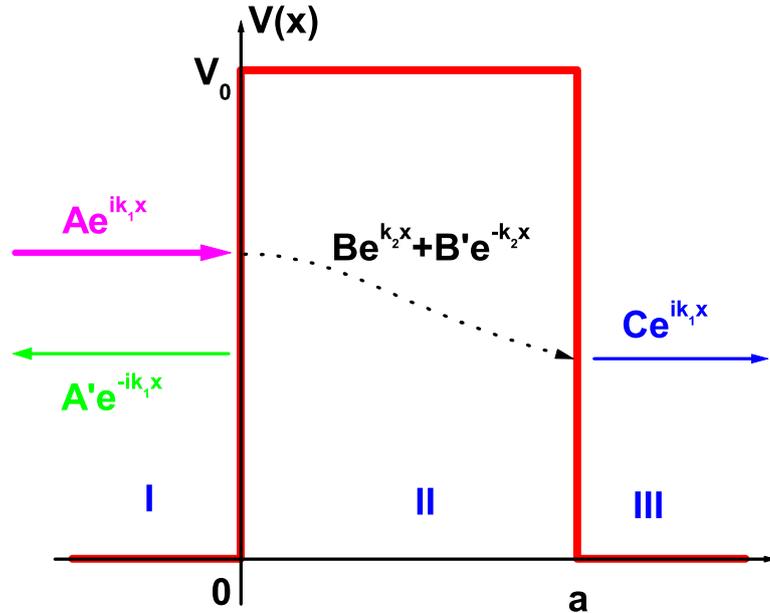


Figure 3: 方势垒。

其中, n 是单位体积内的电子数, $|A|^2$ 是找到电子的几率, 因此两者是同一个东西。

对于入射波、透射波和反射波, 它们的几率流密度分别为

$$\begin{aligned} \text{入射波: } J &= \frac{\hbar k_1}{m} |A|^2 \\ \text{透射波: } J_D &= \frac{\hbar k_1}{m} |C|^2 \\ \text{反射波: } J_R &= \frac{\hbar k_1}{m} |A'|^2 \end{aligned}$$

定义反射系数, 及透射系数为

$$\begin{aligned} R &= \frac{J_R}{J} = \left| \frac{A'}{A} \right|^2 = \frac{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2 a}{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2 a + 4k_1^2 k_2^2} \\ D &= \frac{J_D}{J} = \left| \frac{C}{A} \right|^2 = \frac{4k_1^2 k_2^2}{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2 a + 4k_1^2 k_2^2} \end{aligned}$$

显然: $D + R = 1$, 其物理意义是表现了粒子数守恒关系, 或者说定域几率守恒。特别是需要注意到透射和反射系数的定义是从几率流密度的比值来定义的, 而不是仅仅定义系数的比值, 如果反射方和透射方的动量 k 不同, 两种定义就会出现差值。因此, 比较合适的方法是先计算反射系数 R , 后计算透射系数 $D = 1 - R$ 。具体例子可以看作业题

2. 势垒问题

如上题, 假定 $k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$, $k_2 = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$, 因为 $E < V_0$, 所以令 $k_2 = ik_3$, 则 $k_3 = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ 。我们完全可以套用上面得到的结果, 只要作 $k_2 \rightarrow ik_3$ 的代换,

得到

$$C = \frac{4ik_1k_3e^{-ik_1a}}{(k_1 + ik_3)^2 e^{k_3a} - (k_1 - ik_3)^2 e^{-k_3a}} A = \frac{2ik_1k_3e^{-ik_1a}}{(k_1^2 - k_3^2) \sinh(k_3a) + 2ik_1k_3 \cosh(k_3a)} A$$

其中 $\sinh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{2}$, $\cosh(x) = \frac{e^x + e^{-x}}{2}$, 所以透射系数为

$$D = \frac{4k_1^2k_3^2}{(k_1^2 + k_3^2)^2 \sinh^2(k_3a) + 4k_1^2k_3^2}$$

如果 $k_3a \gg 1$ 成立, 则 $e^{k_3a} \gg 1 \gg e^{-k_3a}$, $\sinh^2(k_3a) = e^{2k_3a}/4$, 从而得到

$$\begin{aligned} D &= \frac{4k_1^2k_3^2}{\frac{1}{4}(k_1^2 + k_3^2)^2 e^{2k_3a} + 4k_1^2k_3^2} = \frac{16}{\left(\frac{k_1}{k_3} + \frac{k_3}{k_1}\right)^2 e^{2k_3a} + 16} \\ &\sim \frac{16}{\left(\frac{k_1}{k_3} + \frac{k_3}{k_1}\right)^2 e^{2k_3a}} = D_0 e^{-2k_3a} = D_0 e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}a} \end{aligned}$$

其中 $D_0 = 16E(V_0 - E)/V_0^2$ 。结果的物理意义: 1) a 越大, 势垒越宽, D 越小, 并且是指数衰减; 2) V_0 越大, 势垒越高, D 越小。即势垒越宽、越高, 遂穿几率越小。这正好与我们前面讨论测不准原理时候的两种解释相对应。

遂穿的应用: STM (Scanning tunneling microscope) 即扫描隧道显微镜。STM 的简单介绍, 参见附件(STM.ppt)

3. δ 势(阱)问题

假定势场 $V(x) = -V_0\delta(x)$ 。 δ 势只是一个理想的模型, 但确实在实际问题中经常用到。我们先讨论束缚态问题。本征值方程为

$$\hat{H}\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - V_0\delta(x) \right] \psi = E\psi \implies \psi'' + \frac{2m[E + V_0\delta(x)]}{\hbar^2} \psi = 0$$

当 $x \neq 0$ 时,

$$\psi'' + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi = 0$$

当 $E < 0$ 时, 令 $k = \sqrt{-2mE}/\hbar$, $\psi \sim e^{kx}$, 因此, 波函数为

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{kx} & x < 0 \\ Be^{-kx} & x > 0 \end{cases}$$

$x = 0$ 处连续, 得到 $A = B$ 。在 $x = 0$ 附近 $[-\varepsilon, \varepsilon]$ 区域对本征方程 $\psi'' = -\frac{2m[E + V_0\delta(x)]}{\hbar^2} \psi$ 积分得

$$\psi'(\varepsilon) - \psi'(-\varepsilon) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} [E + V_0\delta(x)] \psi(x) dx = -\frac{2mV_0}{\hbar^2} \psi(0) - \frac{2mE}{\hbar^2} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \psi dx$$

上式右边第二项在 $\varepsilon \rightarrow 0$ 时为 0。

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2} \psi(0)$$

可见波函数的一阶导数不连续，这就是我们前面提到的。上式就是跃变条件，代入得到

$$k = \frac{mV_0}{\hbar^2}$$

由归一化条件可得到

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \psi(x) dx = A^2 \left[\int_{-\infty}^0 e^{2kx} dx + \int_0^{\infty} e^{-2kx} dx \right]$$

故 $A = \sqrt{mV_0}/\hbar$ 。

$$E = -\frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}$$

即束缚能为

$$E_b = 0 - E = \frac{mV_0^2}{2\hbar^2}$$

当 $E > 0$ ，取 $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ ，通解为

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & x < 0 \\ Ce^{ikx} + De^{-ikx} & x > 0 \end{cases}$$

由波函数在 $x = 0$ 连续条件得到 $A + B = C + D$ ，由(波函数的导数)跃变条件得到

$$C - D = (1 + 2i\beta)A - (1 - 2i\beta)B,$$

其中 $\beta = \frac{mV_0}{\hbar^2 k}$ 。两个方程，5个未知数(包括k)，不可解。注意无归一化条件可用，因为不是束缚态。这是一个传播问题，实际上和时间有关。取波从左向右传播，则 $D = 0$ ，得到

$$B = \frac{i\beta}{1 - i\beta}A \quad C = \frac{1}{1 - i\beta}A。$$

因此反射和透射系数分别为

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{\beta^2}{1 + \beta^2} \quad R = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1 + \beta^2}。$$

4. 一维谐振子

一维谐振子问题是量子力学中的基本问题，它不仅是微观粒子在势场稳定平衡位置附近作小振动一类常见问题的普遍概括，而且更是将来场量子化的基础。众所周知，当粒子在势场的平衡位置附近作小振动时，势场 $V(x)$ 总可作泰勒展开并只取到最低阶不为零的项。设平衡位置 $x_0 = 0$ ，并选取能量尺度的原点使 $V(0) = 0$ ，则

$$V(x) \cong \frac{1}{2}V''(0)x^2$$

这里，含 $V(0)$ 的一次项由于平衡位置 $V'(0) = 0$ 而消失，也由于是稳定振动而有 $V''(0) > 0$ 。除非振动的幅度较大，否则不必考虑展开式中非简谐的高阶项。这类问题的物理例子比如，原子核内核子（质子或中子）的简谐振动、原子和分子的简谐振动、固体晶格上原子的简谐振动、甚至一个多自由度系统在其平衡态附近的小涨落小振动，在通过引入简正坐标后也可以化为一系列退耦的一维振子之和。

一维量子简谐振子的位势为

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

Schrödinger方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi = E\psi$$

为方便，引入自变数变换

$$\xi = \alpha x \quad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

这里我们直接给出方程解的结果，推导将放在下一章算符里进行。书上提供的解法自己看。主要关注如何从渐近形式推出波函数的可能表达式，也就是如何猜测试探波函数，这个其实是一个很重要的内容，因为以后许多问题我们实际无法严格求解，或者说是解析地给出结果，用试探波函数是个很好的办法。

$$\begin{aligned} E_n &= \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \\ \psi_n(\xi) &= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} (2^n n!)^{-1/2} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) \\ \psi_n(x) &= \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} (2^n n!)^{-1/2} e^{-\alpha^2 x^2/2} H_n(\alpha x) \end{aligned}$$

其中 $H_n(\xi)$ 是厄米多项式，

$$H_1(\xi) = 2\xi \quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2 \quad H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi$$

其波函数和几率在坐标空间的分布见图 4

5. 自由粒子

作为最简单的一种情况，假定势场 $V(x)$ 处处为 $= 0$ ，即自由粒子的情况。这是一个看起来简单，实际上非常微妙的一种情况。定态薛定谔方程可以表示为 $\psi'' + k^2\psi = 0$ ，其中 $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ 。这和无限深势阱内的情况是完全一样的，因此波函数可以写为

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}.$$

与一维无限深势阱不同的是，现在没有边界条件来约束(量子化) $k(E)$ ，因此，自由粒子的能量可以是任意大于零的值， $E > 0$ 。如果把时间也考虑进去，则波函数表示为

$$\Psi(x, t) = Ae^{ik(x - \frac{\hbar k}{2m}t)} + Be^{-ik(x + \frac{\hbar k}{2m}t)}.$$

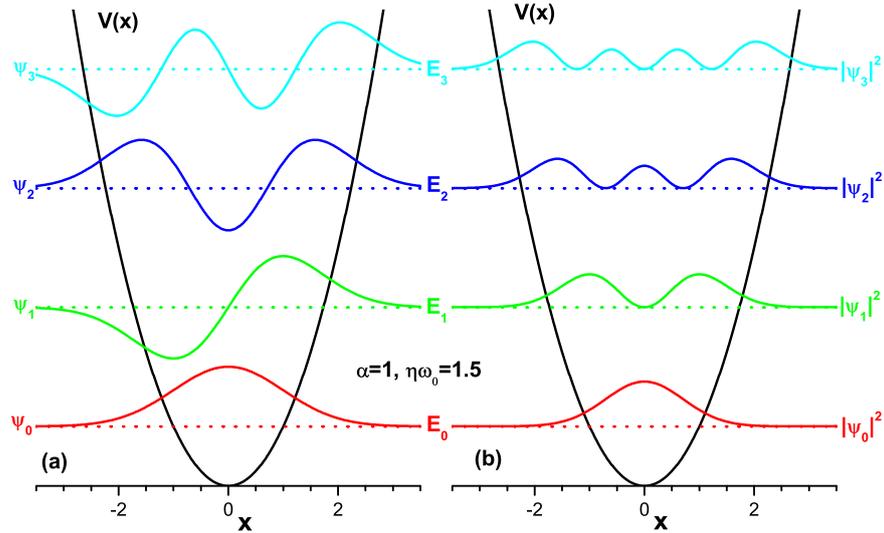


Figure 4: 一维谐振子。(a) 波函数 $\psi(x)$ 的坐标空间分布, (b) 几率 $|\psi(x)|^2$ 的坐标空间分布。

一方面,这样的波函数我们发现它是无法归一化的,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \Psi \rightarrow \infty$$

对于一个自由粒子, 这样的解显然也是不可思议的, 或者说这样的解是非物理的。更进一步可以说一个给定能量的自由粒子是不存在的。当然, 这些并不意味着这种解无用, 它们有着数学意义上的作用: 含时薛定谔方程的通解仍然是这些解的线性叠加, 但是连续的 k , 而不是分立的 n , 即

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi(k) e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t)} dk$$

其中线性叠加的系数是 $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \Phi(k) dk$ 。如果选择合适的 $\Phi(k)$, 上面的波函数是可以归一的,

但必须包含一定的动量范围, 也就是有一定的能量范围或者速度范围。我们称之为波包。

量子力学薛定谔方程是根据 $\Psi(x, 0)$ 求 $\Psi(x, t)$, 对于自由粒子, 实际上只要计算 $\Phi(k)$ 使之满足

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi(k) e^{ikx} dk.$$

这可以通过一个Fourier变换得到

$$\Phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, 0) e^{-ikx} dx.$$

另一方面, 自由粒子波函数 $\Psi(x, t) = Ae^{ik(x - \frac{\hbar k}{2m} t)} + Be^{-ik(x + \frac{\hbar k}{2m} t)}$ 表明以一定速度 v 沿着 $\mp x$ 方向传播, 前半部分表示向 $-x$ 方向, 后半部分表示向 $+x$ 方向传播。波的传播速度则为

$$v_{\text{quantum}} = \frac{\hbar|k|}{2m} = \sqrt{\frac{E}{2m}}.$$

而我们知道对于一个经典的自由粒子，给定能量为 E ，则速度为

$$v_{classical} = \sqrt{\frac{2E}{m}} = 2v_{quantum},$$

这意味着量子力学波函数的传播速度是经典粒子速度的一半。实际上我们知道，波函数并不是一个物理的状态，波的速度是相速(*Phase velocity*)，而真实的粒子速度应该是群速(*Group velocity*)，两者是不一样的。群速为

$$v_{group} = \frac{d\omega}{dk},$$

而相速是

$$v_{phase} = \frac{\omega}{k},$$

其中， $\omega = E/\hbar = \hbar k^2/2m$ ，所以 $v_{group} = \hbar k/m$ ， $v_{phase} = \hbar k/2m$ ，即

$$v_{classical} = v_{group} = 2v_{phase}.$$

2.7.2 一维定态的一般性质

通过上面一些特例的分析，我们给出一定态的一些普遍性质或者一些定理，但不作详细阐述和证明。

1. 如果 $\psi(x)$ 是定态薛定谔方程的解，对应的能量本征值是 E ，则 $\psi^*(x)$ 也是定态薛定谔方程的解，对应能量也是 E 。

推论：假定能级 E 不简并，则相应的能量本征函数总可以取为实函数。

2. 对应于某个能量本征值，总可以找到满足定态薛定谔方程的一组完备的实解，即凡是属于 E 的任何解均可以表示为一组实解的线性叠加。

3. 对称性：设 $V(x)$ 具有空间反射不变性，即 $V(-x) = V(x)$ ，

1)如 $\psi(x)$ 为定态薛定谔方程的一个属于 E 的解，则 $\psi(-x)$ 也是定态薛定谔方程的一个属于 E 的解。 2)对应于任何一个能量本征值，总可以找到定态薛定谔方程的一组完备的解，它们中的每一个具有确定的宇称(奇偶性，奇宇称： $\psi(-x) = -\psi(x)$ ；偶宇称： $\psi(-x) = \psi(x)$) 3)如 E 是非简并的，则该能量本征态必有确定的宇称。

4. 一维运动，假定 $\psi_1(x)$ 与 $\psi_2(x)$ 均为定态薛定谔方程的属于能量本征值 E 的解，则有如下关系成立。

$$\psi_1\psi_2' - \psi_2\psi_1' = constant$$

推论：假定 $V(x)$ 为规则势场，如存在束缚态，则必为非简并的。对应到一维定态中，我们有：若一维势 $V(x)$ 在有限 x 处无奇点，则对应的全部束缚定态都是不简并的。也就是说，此一维问题的分立能级均无简并存在。

5. 节点定理

如将一维问题的分立谱波函数 $\psi_n(x)$ 按其本征值递增顺序编号，则属于第 $n + 1$ 个能级 E_{n+1} 的本征函数 $\psi_{n+1}(x)$ ，在其定义域内有限 x 值处共有 n 个节点。