

第三章 运动方程、守恒律、全同性原理

在前面两章里，我们分别讨论了**微观粒子**：

状态用波函数描述

状态满足态的叠加原理

力学量用线性厄米算符描述

下面，我们首先将讨论微观粒子的状态随时间的演化问题，建立起微观粒子（或量子力学）的：

运动方程——薛定谔方程。

在建立了量子力学的运动方程后，其次再讨论各种**守恒律**，并分析**守恒律与对称性**的关系。



§ 3.1 薛定谔方程

1. 薛定谔方程的引入

我们现在已知道：一个微观粒子的量子态用波函数 $\psi(\vec{r}, t)$ 来描述。

当 $\psi(\vec{r}, t)$ 确定后，粒子的任何一个力学量的平均值及其测量值几率的分布都完全确定。

因此，量子力学中最核心的问题就是要解决：波函数 $\psi(\vec{r}, t)$ 如何随时间演化及在各种具体情况下找出描述体系的各种可能的波函数？

这个问题由薛定谔于 1926 年提出的波动方程得以圆满解决。

下面用一个简单的办法来引进这个方程。应强调的是：
薛定谔方程是量子力学最基本的方程，其地位与牛顿方程在经典力学中的地位相当。

实际上应该认为它是量子力学的一个基本假定，并不能从什么更根本的假定来证明它。它的正确性，归根结底，只能靠实验来检验。

下面，首先讨论自由粒子（即 $U(\vec{r})=0$ ），其能量与动量的关系是

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad (1)$$

m 是粒子质量，按照德布罗意关系，与粒子运动相联系的

波的角频率 ω 和波矢 \vec{k} ($|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$)，由下式给出

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad \vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar} \quad (2)$$

或者说，与具有一定能量 E 和动量 \vec{p} 的粒子相联系的是 平面单色波。

$$\psi(\vec{r}, t) \sim e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} = e^{i(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et) / \hbar} \quad (3)$$

由(3)式可得

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = E \psi$$

$$-i\hbar \nabla \psi = \vec{p} \psi$$

$$-\hbar^2 \nabla^2 \psi = \vec{p}^2 \psi$$

利用(1)式, 可以得出

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2) \psi = (E - \frac{p^2}{2m}) \psi$$

即:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) \quad (4)$$

注意: 方程(4)中 $\psi(\vec{r}, t)$ 是一个单色平面波。

而描述自由粒子的一般状态的波函数，具有波包的形式，即为许多单色平面波的叠加。

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \varphi(\vec{p}) e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r} - Et)/\hbar} d^3\vec{p}$$

(5)

式中： $E = \frac{p^2}{2m}$ ，不难证明

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \varphi(\vec{p}) E e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r} - Et)/\hbar} d^3\vec{p}$$

$$-\hbar^2 \nabla^2 \psi = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \varphi(\vec{p}) \vec{p}^2 e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r} - Et)/\hbar} d^3\vec{p}$$

上面两式相加，可得：

$$\begin{aligned}
& (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2) \psi \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \varphi(\vec{p})(E - p^2 / 2m) e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r} - Et) / \hbar} d^3 \vec{p} \\
&= 0
\end{aligned}$$

可见，如果 $\psi(\vec{r}, t)$ 是波包，仍满足方程(4)，所以方程(4)是自由粒子波函数满足的方程。

值得注意的是：如果在经典的能量动量关系(1)中，作如下替换：

$$\boxed{E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}}, \quad \boxed{\vec{p} \rightarrow \hat{p} = -i\hbar \vec{\nabla}} \quad (6)$$

然后作用于波函数上，就可得到方程(4)。

其次，我们进一步考虑微观粒子在势场 $U(\vec{r})$ 中运动，按照经典粒子的能量关系式

$$E = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}) \quad (7)$$

对于上式作替换 (6)，然后作用于波函数上，即得：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}, t) \quad (8)$$

这就是薛定谔波动方程。它揭示了微观世界中物质运动的基本规律，是量子力学的基本假设之四。



Erwin Schrödinger (1887-1961, 奥地利)



奥地利1000先令钞票上的薛定谔肖像



The Nobel Prize in Physics 1933

"for the discovery of new productive forms of atomic theory"



Erwin Rudolf Josef Alexander Schrödinger
1887-1961, Austria



Paul Adrien Maurice Dirac
1902-1984, UK

2. 薛定谔方程的讨论

(1). 定域的几率守恒

薛定谔方程是非相对论量子力学的基本方程。在非相对论（低能）情况下，实物粒子（ $m \neq 0$ ）没有产生和湮灭的现象，所以在随时间演化的过程中，粒子数目保持不变（即粒子数守恒）。

对于一个粒子来说，在全空间中找到它的几率之总和应不随时间改变，即

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r} = 0 \quad (9)$$

下面我们就利用薛定谔方程来证明这个结论。

对(8)式取复共轭, (注意到 $U^* = U$) 得

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^* = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U \right) \psi^* \quad (10)$$

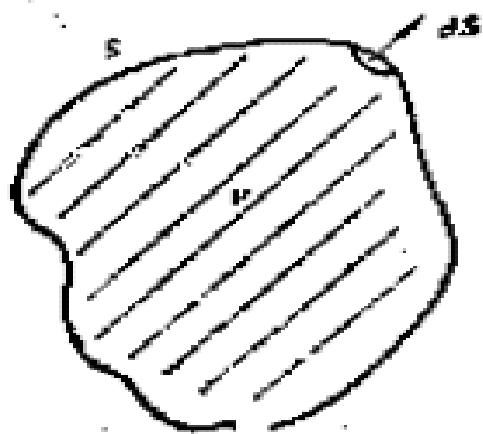
由 $\psi^* \times$ (8)式 $-\psi \times$ (10)式, 得:

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) &= -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \end{aligned} \quad (11)$$

在空间闭区域 τ 中将上式积分，按高斯定理，等式右边积分可化为面积分

$$\begin{aligned} & -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \int_{\tau} \psi^* \psi d\tau \\ & = -\frac{\hbar^2}{2m} \oint_{\bar{S}} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) ds \end{aligned} \quad (12)$$

其中 \bar{S} 是 τ 的表面，如图



令：

$$\rho(\vec{r}, t) = \psi^*(\vec{r}, t)\psi(\vec{r}, t) \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \vec{j}(\vec{r}, t) &= -\frac{i\hbar}{2m}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) \\ &= \frac{1}{2m}(\psi^*\hat{p}\psi - \psi\hat{p}\psi^*) \end{aligned} \quad (14)$$

ρ 表示**几率密度**， \vec{j} 的**物理意义**见下，于是，(12)式可写为

$$\boxed{\frac{d}{dt} \int_{\tau} \rho d\tau = -\oint_s \vec{j} \cdot d\vec{s}} \quad (15)$$

上式左边代表：在闭区域 τ 中找到粒子的总几率（或粒子数）在单位时间内的增量。

而右边（注意负号）表示：单位时间内通过 τ 的封闭表面 S 而流入 τ 内的几率（粒子数）。

所以： \vec{j} 具有几率流（粒子流）密度的意义，是一个矢量。

公式(12)或(15)是几率（粒子数）守恒的积分表示式。而由(11)式可得其微分表达式：

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} \rho + \bar{\nabla} \cdot \vec{j} = 0} \quad (16)$$

这种形式与流体力学中的连续性方程相同。

应该强调：这里的**几率守恒具有定域的性质**。当粒子在空间某地的几率减小了，必然在另外一些地方的几率增加了（使总几率不变），并且伴随着有什么东西在流动来实现这种变化。**连续性就意味着某种流的存在。**

(2). 初值问题

由于薛定谔方程只含时间的一次微商，只要在初始时刻 ($\mathbf{t}=\mathbf{0}$) 体系的状态 $\psi(\vec{r}, \mathbf{0})$ 给定，则以后任何时刻 \mathbf{t} 的状态 $\psi(\vec{r}, t)$ 原则上就完全确定了。

换言之，薛定谔方程给出了波函数（量子态）随时间演化的因果关系。

在一般情况下，这个初值问题的求解是不容易的，往往要采用近似方法。

但对于自由粒子，可以严格求解：

自由粒子状态 $\psi(\vec{r}, t)$ 可以用平面单色波 $\varphi(\vec{p})$ 展开, 而 $\varphi(\vec{p})$ 可由初态 $\psi(\vec{r}, 0)$ 确定:

$$\psi(\vec{r}, 0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \varphi(\vec{p}) e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} d^3\vec{p} \quad (17)$$

其中 $\varphi(\vec{p})$ 正是 $\psi(\vec{r}, 0)$ 的 **Fourier** 展开的波幅, 上式的逆变换为

$$\varphi(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \psi(\vec{r}, 0) e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} d^3\vec{r} \quad (18)$$

将(18)式代入(5)式得:

$$\begin{aligned} & \psi(\vec{r}, t) \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3r' \int d^3\vec{p} e^{i\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')/\hbar - iEt/\hbar} \cdot \psi(\vec{r}, 0) \end{aligned} \quad (19)$$

式中 $E = \frac{p^2}{2m}$ (自由粒子)

这样，体系的初始状态 $\psi(\vec{r}, 0)$ 完全决定了以后任何时刻 t 的状态 $\psi(\vec{r}, t)$ 。



(3). 不含时间的薛定谔方程

一般情况下，从初态 $\psi(\vec{r}, 0)$ 去求解末态 $\psi(\vec{r}, t)$ 是不容易的。

以下讨论一个极为重要的特殊情况：

假设势能 U 不显含时间 t （经典力学中，在这种势场中的粒子的机械能是守恒量）

此时，薛定谔方程(8)可以用分离变量法求其特解。

令特解为

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) f(t) \quad (20)$$

代入薛定谔方程中，可得：

$$\frac{i\hbar}{f(t)} \frac{df}{dt} = \frac{1}{\psi(\vec{r})} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E \quad (21)$$

上式右边 \mathbf{E} 是即不依赖于 \mathbf{t} , 也不依赖于 \vec{r} 的常数, 于是

$$\frac{d}{dt} \ln f(t) = -\frac{iE}{\hbar} \quad (22)$$

$$\therefore f(t) \sim e^{-iEt/\hbar} \quad (23)$$

因此, 特解 $\psi(\vec{r}, t)$ 可表为

$$\boxed{\psi(\vec{r}, t) = \psi_E(\vec{r}) e^{-iEt/\hbar}} \quad (24)$$

其中 $\psi_E(\vec{r})$ 满足下列方程

$$\boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right] \psi_E(\vec{r}) = E \psi_E(\vec{r})} \quad (25)$$

形式如(24)式的波函数所描述的态，称为**定态**。方程(25)称为不含时间的薛定谔方程或**定态薛定谔方程**。 $\psi_E(\vec{r})$ 为**能量本征函数**。

处于定态下的粒子具有如下特征：

- (a). 粒子的几率密度 ρ 及几率流 \vec{j} ，显然不随时间改变。
- (b). 任何力学量（不显含 t ）的平均值，不随时间变化。
- (c). 任何力学量（不显含 t ）取各种可能测量值（本征值）的几率分别也不随时间改变。

薛定谔方程更普遍的表达式为

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi} \quad (26)$$

其中 \hat{H} 是体系的哈密顿算符。当不显含 t 时，方程(26)可以分离变量，此时，不含时间的薛定谔方程为

$$\boxed{\hat{H} \psi_E = E \psi_E} \quad (27)$$

对于一个粒子在势场 $U(\vec{r})$ 中运动的特殊情况

$$\boxed{\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r})} \quad (28)$$

此时方程(26), (27)变为

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}, t)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right] \psi_E(\vec{r}) = E \psi_E(\vec{r})$$

这就是前面的结论。

从数学上讲，对于任何 E 值，定态薛定谔方程都有解。
但并非对于一切 E 值得出的解 $\psi_E(\vec{r})$ 都满足物理上的要求。

这些物理上的要求包括：

满足波函数的统计诠释；

满足具体物理条件（如束缚态边界条件，散射态边界条件等）

例如，在**束缚态边界条件**下，只有某些 \mathbf{E} 值所对应的解 $\psi_E(\vec{r})$ 才是具有物理意义的。我们通常称这些 \mathbf{E} 值为体系的**能量本征值**，而相应的解波函数 $\psi_E(\vec{r})$ 称为**能量本征函数**。所以，定态方程(25)实际上就是势场中粒子的能量本征方程。

讨论粒子在保守场中的运动，求系统的**定态波函数**和**能谱**，是常见的实际问题。而求解这类问题可以归结为求解定态薛定谔方程，下面我们通过几个例子，来看看如何具体求解薛定谔方程。



3. 薛定谔方程的求解及应用

例 1: 平面转子问题

限定在平面上作圆周运动的刚性转子称为**平面转子**。设其转动惯量为 I ，和固定坐标轴的夹角为 φ ，若在 $t = 0$ 时，平面转子的状态用波函数 $\psi = A \sin^2 \varphi$ 描写，问它的状态如何随时间变化。

解：该题归结为求满足初始条件的薛定谔方程的解。

首先求方程的一般解，在利用初始条件求定解。

考虑绕 Z 轴旋转的平面转子，其哈密顿量表示为

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}_z^2}{2I} = -\frac{\hbar^2}{2I} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (1)$$

于是薛定谔方程为

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\varphi, t) = \hat{H} \psi(\varphi, t) \quad (2)$$

分离变量，令

$$\psi(\varphi, t) = \phi(\varphi) e^{-iEt/\hbar} \quad (3)$$

将(3)式代入(2)式可得定态薛定谔方程

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2I} \frac{d^2}{d\varphi^2} \phi(\varphi) = E \phi(\varphi)} \quad (4)$$

令

$$m^2 = \frac{2IE}{\hbar^2} \quad (5)$$

于是方程(4)变为

$$\phi''(\varphi) + m^2 \phi(\varphi) = 0 \quad (6)$$

方程(6)是大家在数理方法中较熟悉的方程，考虑到波函数 $\phi(\varphi)$ 的**单值条件**（**周期条件**）

$$\phi(\varphi) = \phi(\varphi + 2\pi) \quad (7)$$

不难得出方程(6)在区间 $(0, 2\pi)$ 中归一化的解（**本征函数**）：

$$\boxed{\phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}} \quad , \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (8)$$

于是由(5)式, 可得相应的定态能量为

$$E = \frac{m^2 \hbar^2}{2I}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (9)$$

∴ 方程(2)的一般解为:

$$\begin{aligned} \psi(\varphi, t) &= \sum_m C_m \psi_m(\varphi, t) \\ &= \sum_m C_m \phi_m(\varphi) e^{-iE_m t / \hbar} \end{aligned} \quad (10)$$

其中展开系数 C_m 由初始条件来决定:

$$\psi(\varphi, 0) = \sum_m C_m \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} = A \sin^2 \varphi \quad (11)$$

注意到

$$\begin{aligned}
 A \sin^2 \varphi &= A(1 - \cos 2\varphi) / 2 \\
 &= \frac{A}{2} - \frac{A}{4}(e^{i2\varphi} + e^{-i2\varphi}) \quad (12)
 \end{aligned}$$

将(11)与(12)左边比较, 不难看出

$$m = 0, \pm 2$$

于是由(11)和(12)得:

$$\begin{aligned}
 C_{-2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i2\varphi} + C_0 \frac{1}{\sqrt{2\pi}} + C_2 \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i2\varphi} \\
 = \frac{A}{2} - \frac{A}{4} e^{i2\varphi} - \frac{A}{4} e^{-i2\varphi}
 \end{aligned}$$

比较两边系数可得

$$C_0 = \frac{\sqrt{2\pi}}{2} A$$

$$C_{\pm 2} = -\frac{\sqrt{2\pi}}{4} A$$

将以上系数代入(10)式得满足初始条件的任意时刻的波函数

$$\begin{aligned}\psi(\varphi, t) &= \frac{A}{2} - \frac{A}{4}(e^{i2\varphi} + e^{-i2\varphi})e^{-iE_2 t/\hbar} \\ &= \frac{A}{2}(1 - \cos 2\varphi e^{-i2\hbar t/I})\end{aligned}$$

其中常数 A 可由归一化条件:

$$\int_0^{2\pi} |\psi(\varphi, t)|^2 d\varphi = 1$$

求得:

$$A = \frac{2}{\sqrt{3\pi}}$$

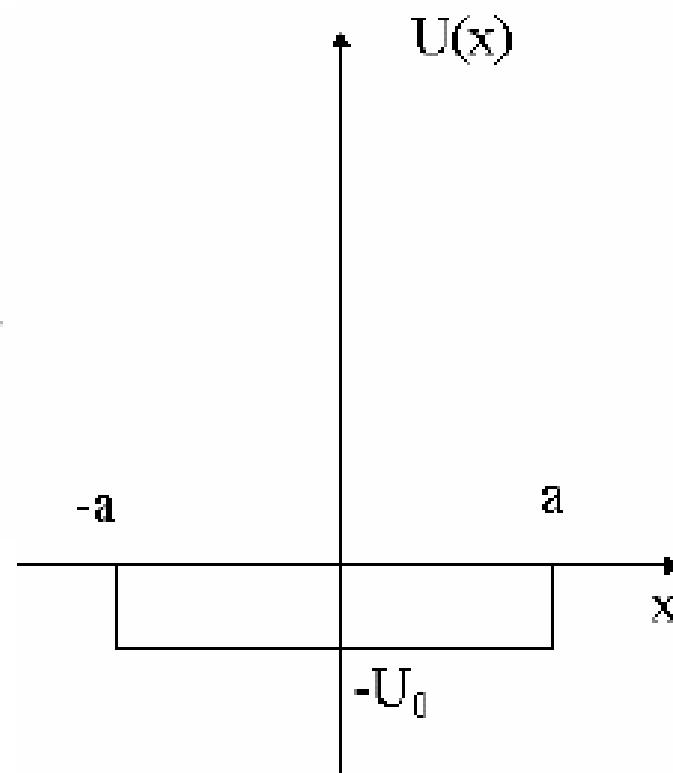
例 2. 一维对称方形势阱问题

设势能

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

如图所示:

试分析粒子在这一势能场中的运动情况。



解：由于势能 $U(x)$ 不显含时间 t ，于是可得系统的定态薛定谔方程：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + U(x)\psi = E\psi \quad (1)$$

该方程在势能场中的每个区域里分别变为

$$\left. \begin{aligned} \psi_I'' + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_I &= 0, \quad x < -a \\ \psi_{II}'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E + U_0)\psi_{II} &= 0, \quad |x| < a \\ \psi_{III}'' + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_{III} &= 0, \quad x > a \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

下面需要分两种情况来讨论方程(2)的解

(a). 当 $E < 0$ 时

方程(2)的解可写为:

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi_I = Ae^{\alpha x} + A'e^{-\alpha x} \quad (3) \\ \psi_{II} = B\cos(kx) + B'\sin(kx) \quad (4) \\ \psi_{III} = Ce^{\alpha x} + C'e^{-\alpha x} \quad (5) \end{array} \right.$$

其中:

$$\left. \begin{array}{l} \alpha = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} \\ k = \sqrt{\frac{2m(E+U_0)}{\hbar^2}} \end{array} \right\} \quad (6)$$

根据波函数的**标准条件**：**单值、连续、有限**。

为了保证 $x \rightarrow +\infty$ 时， ψ_{III} 有限，要求： $C = 0$ ；

为了保证 $x \rightarrow -\infty$ 时， ψ_I 有限，要求： $A' = 0$ ；

于是(3)-(5)变为

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi_I = A e^{\alpha x} \quad (7) \\ \psi_{II} = B \cos(kx) + B' \sin(kx) \quad (8) \\ \psi_{III} = C' e^{-\alpha x} \quad (9) \end{array} \right.$$

由上(7)-(9)式可看到：当 $x \rightarrow \pm\infty$ 时，波函数 $\psi \rightarrow 0$ ，

这表明：**粒子被束缚在有限空间内运动**，这种解被称为**束缚态解**。

另外，根据波函数的连续性，在 $x = \pm a$ 处，波函数及其一阶导数（ ψ 及 ψ' ）应满足连续性条件：

$$\psi_I = \psi_{II} : Ae^{-\alpha a} = B \cos ka - B' \sin ka \quad (10)$$

$$\psi'_I = \psi'_{II} : \alpha A e^{-\alpha a} = k B \cos ka + k' B' \sin ka \quad (11)$$

在 $x = a$ 处：

$$\psi_{II} = \psi_{III} : C' e^{-\alpha a} = B \cos ka + B' \sin ka \quad (12)$$

$$\psi'_{II} = \psi'_{III} : -\alpha C' e^{-\alpha a} = -k B \sin ka + k' B' \cos ka \quad (13)$$

方程(10)-(13)是待定系数 A 、 B 、 B' 、 C' 的线性齐次方程组，它有非零解的条件是方程组的系数行列式为零，即

$$\begin{vmatrix} e^{-\alpha a} & -\cos ka & \sin ka & 0 \\ \alpha e^{-\alpha a} & -k \sin ka & -k \cos ka & 0 \\ 0 & \cos ka & \sin ka & -e^{-\alpha a} \\ 0 & -k \sin ka & k \cos ka & \alpha e^{-\alpha a} \end{vmatrix} = 0 \quad (14)$$

应用行列式的展开原理，(14)式变为

$$\begin{vmatrix} e^{-\alpha a} & -\cos ka \\ \alpha e^{-\alpha a} & -k \sin ka \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \sin ka & -e^{-\alpha a} \\ k \cos ka & \alpha e^{-\alpha a} \end{vmatrix} = 0 \quad (15)$$

欲使(15)式成立，则必须有

$$\boxed{k \operatorname{tg}(ka) = \alpha} \quad \text{或} \quad \boxed{k \operatorname{ctg}(ka) = -\alpha} \quad (16)$$

这就是方程(10)-(13)有非零解的条件，同时，它也决定了形势阱中的束缚态能量只能取一些分立值：这是因为能量 \mathbf{E} 与 α 、 k 通过(16)式联系在一起。当只能取某些特定值，以满足(16)式时，能量 \mathbf{E} 也只能取某些特定值。

微观粒子处于束缚态时，能量只能取分立值，称为能量量子化。

从上面讨论中，可以看到，在量子力学中，能量的量子化是通过标准化的波函数满足外部约束条件而自然得到的，而不需要人为地作某种假设。

由(16)式决定的能量所能取的分立值，可以用图解法求出：

$$\text{令 } \xi = k\alpha \quad , \quad \eta = \alpha\alpha$$

则能量关系式（(16)式变为）

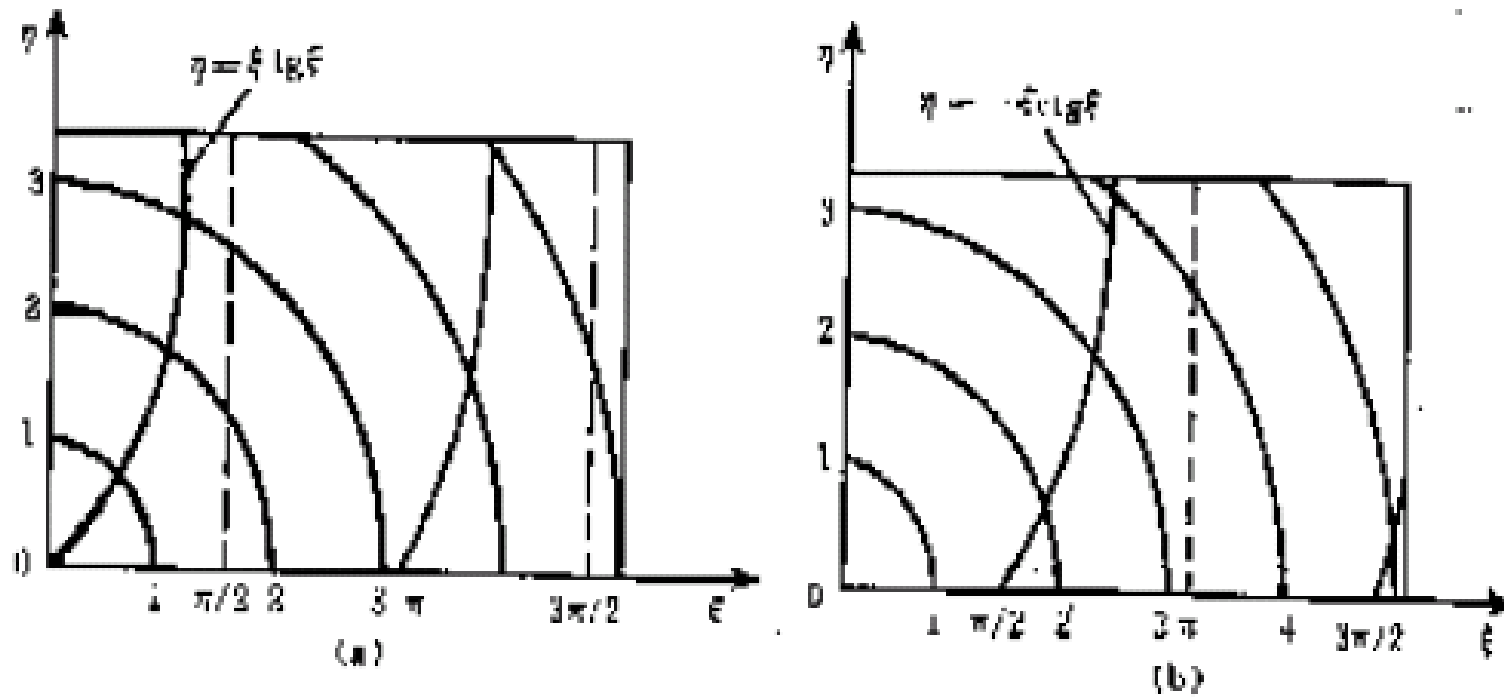
$$\eta = \xi \operatorname{tg} \xi \quad \text{或} \quad \eta = -\xi \operatorname{ctg} \xi \quad (17)$$

而按(6)式又有：

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2m}{\hbar^2} U_0 a^2 \quad (18)$$

由(17)和(18)两式可确定参数 ξ 和 η ，从而确定能量本征值。

下面通过作图法来确定能量本征值：



每一个交点的坐标值，确定了粒子的一个能量值，交点的数目就是能级的个数，可以清楚地看到，能量取值（**能量本征值**）是不连续的。

将有解条件(16)式代回方程(10)-(13)，得到相应的解为：

当 $ktgka = \alpha$ 时：

$$C' = A = Be^{\alpha a} \cos ka, \quad B' = 0 \quad (19)$$

当 $kctgka = -\alpha$ 时：

$$C' = -A = B'e^{\alpha a} \sin ka, \quad B = 0 \quad (20)$$

从而可求出相应的束缚态波函数为：

$$\psi = \begin{cases} Ae^{\alpha x}, & x < -a \\ (Ae^{-\alpha a} \operatorname{seck}a) \cos kx, & -a \leq x \leq a \\ Ae^{-\alpha x}, & x > a \end{cases} \quad (21)$$

或

$$\psi = \begin{cases} Ae^{\alpha x}, & x < -a \\ -(Ae^{-\alpha a} \operatorname{seck}a) \cos kx, & -a \leq x \leq a \\ -Ae^{-\alpha x}, & x > a \end{cases} \quad (22)$$

(b). 当 $E > 0$ 时

此时，方程(2)的解(3)-(5)形式上仍然适用，但其中 α 变为虚数，即(6)式变为

$$\alpha = ik' = i\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad k = \sqrt{\frac{2m(E+U_0)}{\hbar^2}} \quad (23)$$

于是，三个区域的解(3)-(5)式都成为振荡函数，无论系数取什么值，都能满足 $x \rightarrow \pm\infty$ ， ψ 有限的标准条件。

在这样的函数所描述的状态中，在无限远处 ($x \rightarrow \pm\infty$) 找到粒子的几率保持有限，而不趋于零，即：

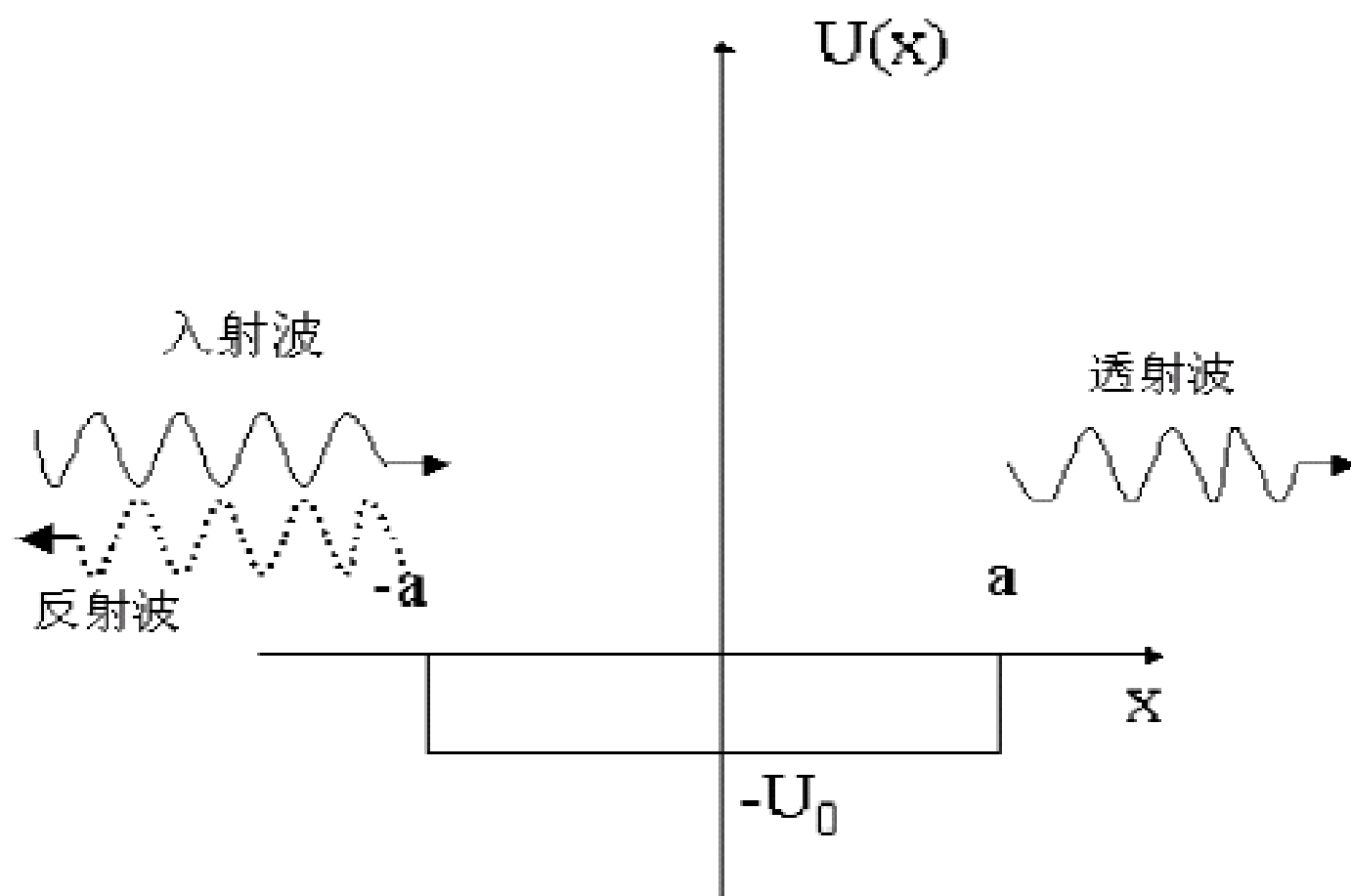
粒子在无限空间中运动。

另一方面，由于(3)-(5)式中的六个系数都不为零，所以 $x \rightarrow \pm a$ 处的连续性条件成为 6 个变量的 4 个方程，这样的联立方程一定有解，因而 k 和 k' 不受任何限制。换言之，满足 $E > 0$ 的任何实数值 E 都是哈密顿算符的本征值，都是可能的定态能量。这表明，在 $E > 0$ 时，能谱是连续的。

在这种情况下，粒子作无限运动，在物理上相当于粒子没有被势阱束缚而形成束缚态，而是在被势能场散射。

散射问题的一般提法是：给定入射粒子流，求粒子被散射到不同方向的几率。

现在，我们所考虑的一维问题中，**散射波只能有两个方向**，一个和入射波方向相同，称为**透射波**，另一个和入射波方向相反，称为**反射波**。如图所示：



利用(23)式，将波函数(3)-(5)改写为：

$$\psi_I = Ae^{ik'x} + A'e^{-ik'x} \quad (24)$$

$$\psi_{II} = Be^{ikx} + B'e^{-ikx} \quad (25)$$

$$\psi_{III} = Ce^{ik'x} + C'e^{-ik'x} \quad (26)$$

在(24)-(26)式中，右边的第一项表示以动量 $p = \hbar k'$ 和 $\hbar k$ 向右行进的波，第二项表示以动量 $p = -\hbar k'$ 和 $-\hbar k$ 向左行进的波。

当入射粒子从左边飞来，经过势阱后，一部分被反射，另一部分穿透过去，飞向 $x = +\infty$ 。于是，在 $x > a$ 的区

域里，只有向右行进的波，而没有向左行进的波，即

$$\boxed{x \rightarrow +\infty \text{ 时, } \psi(x) \sim e^{ik'x}} \quad (27)$$

这就是一维“散射”问题的边界条件。

有边界条件(27)，可知(26)式中的 $C' = 0$ 。于是

$$\psi_{III} = Ce^{ik'x} \quad (28)$$

它代表透射波，其几率密度是：

$$\boxed{j_{\text{透}} = |\psi_{III}|^2 v = |\psi_{III}|^2 \frac{p}{m} = |C|^2 \frac{\hbar k'}{m}} \quad (29)$$

而 ψ_I 中的两项分别代表入射波和反射波，几率流密度分别是：

$$\boxed{j_{\lambda} = |A|^2 \frac{\hbar k'}{m}}, \quad \boxed{j_{\text{反}} = |A'|^2 \frac{\hbar k'}{m}} \quad (30)$$

于是，**穿透系数 D** 和**反射系数 R** 分别为

$$\boxed{D = \frac{j_{\text{透}}}{j_{\lambda}} = \frac{|C|^2}{|A|^2}} \quad (31)$$

$$\boxed{R = \frac{|j_{\text{反}}|}{j_{\lambda}} = \frac{|A'|^2}{|A|^2}} \quad (32)$$

因此，问题归结为，利用 $x = \pm a$ 处的**连续性条件**，求系数 A 、 C 、 A' 。

当将 A 作为已知时，则未知数变为 A' 、 B 、 B' 、 C 四个，此时利用连续性的四个方程(10)-(13)可求出未知数 A' 、 B 、 B' 、 C 。最后按(31)、(32)式决定出**穿透系数 D** 和**反射系数 R** 。

上述例题，虽然简单，却很典型，从中可以得到一带有普遍意义的结论：

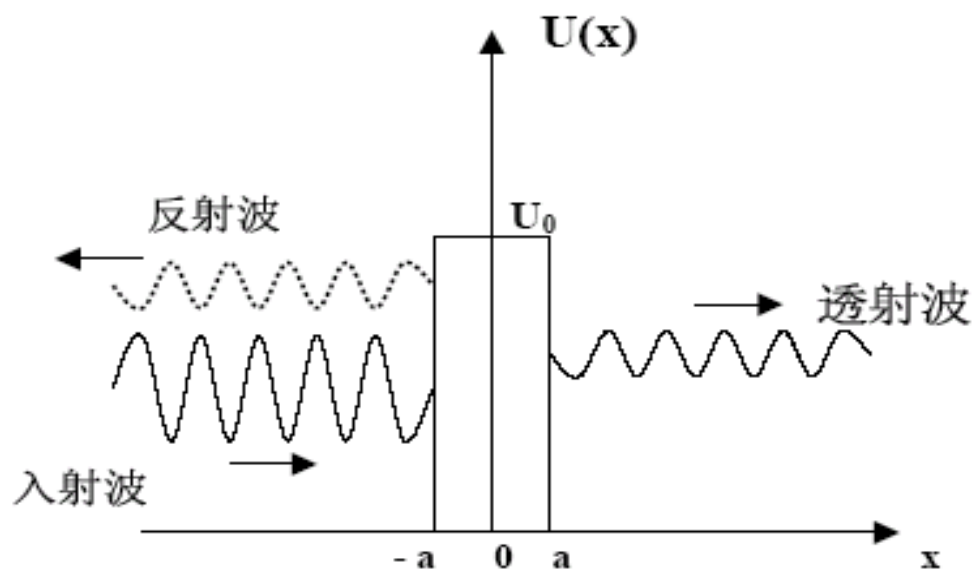
- (1) 当粒子被势能场约束在有限空间中运动，形成束缚态时，能谱分离；当粒子在无限空间中运动时，能谱连续。
- (2) 如果取势能的最低点为计算能量的起点，则分离谱的最低能量态（称为基态）的能量不为零，这称为零点能，零点能 > 0 波粒二象性的结果。
- (3) 在上例中，当 $E < 0$ 时，在 $|x| > a$ 的区域 **I** 和 **III**，总能量 E 小于势能，这样的区域是经典粒子不能进入的区域，但是，微观粒子却能有一定的几率进入到 $E < U$ 的区域，进入后指数衰减，这也是微观粒子具有波动性的表现。

例 3. 势垒的穿透问题

设有一维方形势垒为

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

如图所示，试分析一微观粒子在这一势能场中的运动。




解：定态薛定谔方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + U(x)\psi = E\psi \quad (1)$$

在图中所示的三个区域里分别为

$$\left. \begin{aligned} \psi_I'' + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_I &= 0, & x < -a \\ \psi_{II}'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)\psi_{II} &= 0, & |x| < a \\ \psi_{III}'' + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_{III} &= 0, & x > a \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

我们分两种情况讨论：



(a). 当 $E > U_0$ 的情况

这种情况和例题 2 中 $E > 0$ 的情况完全一样，只是将上例中的 U_0 改成 $-U_0$ 。因此，这是一维散射问题。入射粒子以几率 **D** 穿过势能区，而以几率 **R** 被反射。

值得注意：这一结果和例 2 中 $E > 0$ 的结果一样，是典型的量子力学结果。

如果是经典粒子，由于总能 E 在全空间中都大于势能，所以粒子不会被挡住，而会以 100% 的几率穿过势能区。

但是，在以上两个例子中，我们看到，对于**微观粒子**，
尽管 $E > U_0$ ，微观粒子仍会有一定的几率被反射，只有
部分几率穿过势能区。

(b). 当 $0 < E < U_0$ 的情况

这时，势垒高度超过总能 ($U_0 > E$)，区域 II 是 $E < U_0$
的区域。

对于经典粒子，是不能进入到这种区域，因而从左边射
来的粒子，会全部被势垒挡住，不能达到势垒的右边。对于
微观粒子，情况却不同了。下面我们来分析这一问题。

在方程(2)中，令：（注意到 $0 < E < U_0$ ）

$$\left. \begin{aligned} k' &= \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \\ k &= i\lambda = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}} \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

此时， k' 和 λ 均为实数。于是方程(2)的解为：

$$\left. \begin{aligned} \psi_I &= Ae^{ik'x} + A'e^{-ik'x} \\ \psi_{II} &= Be^{-\lambda x} + B'e^{\lambda x} \\ \psi_{III} &= Ce^{ik'x} + C'e^{-ik'x} \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

由散射问题的边界条件（见上例题(27)式）

$$\text{可得 } C' = 0$$

于是(4)式变为:

$$\left. \begin{aligned} \psi_I &= Ae^{ik'x} + A'e^{-ik'x} \\ \psi_{II} &= Be^{-\lambda x} + B'e^{\lambda x} \\ \psi_{III} &= Ce^{ik'x} \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

在利用波函数在 $x = \pm a$ 处的连续性条件:

$$\psi_I(-a) = \psi_{II}(-a), \quad \psi_I'(-a) = \psi_{II}'(-a)$$

$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a), \quad \psi_{II}'(a) = \psi_{III}'(a)$$

可得:

$$Ae^{ik'a} + A'e^{-ik'a} = Be^{-\lambda a} + B'e^{\lambda a} \quad (6)$$

$$ik'(Ae^{-ik'a} - A'e^{ik'a}) = -\lambda(Be^{-\lambda a} - B'e^{\lambda a}) \quad (7)$$

$$Be^{-\lambda a} + B'e^{\lambda a} = Ce^{ik'a} \quad (8)$$

$$-\lambda(Be^{-\lambda a} - B'e^{\lambda a}) = ik'Ce^{ik'a} \quad (9)$$

由(6)、(7)可得:

$$A = \frac{1}{2}e^{ik'a} \left[\left(1 + \frac{i\lambda}{k'}\right)Be^{\lambda a} + \left(1 - \frac{i\lambda}{k'}\right)B'e^{-\lambda a} \right]$$

$$A' = \frac{1}{2}e^{-ik'a} \left[\left(1 - \frac{i\lambda}{k'}\right)Be^{\lambda a} + \left(1 + \frac{i\lambda}{k'}\right)B'e^{-\lambda a} \right]$$

合写成矩阵

$$\begin{pmatrix} A \\ A' \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left(1 + \frac{i\lambda}{k'}\right)e^{(\lambda + ik')a} & \left(1 - \frac{i\lambda}{k'}\right)e^{(ik' - \lambda)a} \\ \left(1 - \frac{i\lambda}{k'}\right)e^{(\lambda - ik')a} & \left(1 + \frac{i\lambda}{k'}\right)e^{-(\lambda - ik')a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B \\ B' \end{pmatrix}$$

(10)

类似地，由(8)、(9)式可得

$$\begin{pmatrix} B \\ B' \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} (1 + \frac{k'}{i\lambda}) e^{(ik' + \lambda)a} \\ (1 - \frac{k'}{i\lambda}) e^{(ik' - \lambda)a} \end{pmatrix} C \quad (11)$$

将(11)式代入(10)式，简化后得：

$$\begin{pmatrix} A \\ A' \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} (ch2\lambda a + \frac{is}{2} sh2\lambda a) e^{2ik'a} \\ -\frac{i\eta}{2} sh2\lambda a \end{pmatrix} C \quad (12)$$

其中

$$s = \frac{\lambda}{k'} - \frac{k'}{\lambda}, \quad \eta = \frac{\lambda}{k'} + \frac{k'}{\lambda} \quad (13)$$

由(12)式可得

$$\frac{C}{A} = \frac{e^{-2ik'a}}{ch2\lambda a + i\frac{s}{2}sh2\lambda a} \quad (14)$$

$$\frac{A'}{A} = \frac{A' C}{C A} = \frac{-i\frac{\eta}{2}sh2\lambda a \cdot e^{-2ik'a}}{ch2\lambda a + i\frac{s}{2}sh2\lambda a} \quad (15)$$

由透射系数 **D** 和反射系数 **R** 的定义可得

$$D = \left| \frac{C}{A} \right|^2 = \frac{1}{ch^2 2\lambda a + \frac{s^2}{4} sh^2 2\lambda a} \quad (16)$$

$$R = \left| \frac{A'}{A} \right|^2 = \frac{\frac{\eta^2}{4} sh^2 2\lambda a}{ch^2 2\lambda a + \frac{s^2}{4} sh^2 2\lambda a} \quad (17)$$

不难证明：

$$\boxed{D + R = 1} \quad (18)$$

(18)式正是**几率守恒**所要求的。

说明：

在**总能量比势垒高度低** ($E < U_0$) 的情况下，经典粒子全被势垒挡住。而**微观粒子却有一定的几率穿透势垒**。这是微观粒子波动性的体现。这种现象被形象化地说成是从势垒里打穿了一个“**隧道**”，因而称之为**隧道效应**。隧道效应在原子核物理核固体物理中有十分广泛的应用。



例 4. δ 势阱（或 δ 势垒）问题

设有一个 δ 势阱为

$$V(x) = -V_0 \delta(x)$$

试分析一个微观粒子在这一势能场中的运动。

解：考虑能量本征值 $E < 0$ 情况，系统的定态薛定谔方程为

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi = 0, \quad (1)$$

令

$$k = \sqrt{2m|E|/\hbar^2} \quad (2)$$

$$U(x) = \frac{2mV(x)}{\hbar^2} = -U_0\delta(x), \quad U_0 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$$

于是定态薛定谔方程 (1) 变为

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi = 0, \quad (3)$$

上式两边同时积分 $\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} dx$ (ε 是任意小正数), 于是有

$$\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \frac{d^2 \psi}{dx^2} dx = \psi'(\varepsilon) - \psi'(-\varepsilon)$$

$$\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \psi dx = \psi(0) 2\varepsilon$$

$$\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \delta(x) \psi(x) dx = \psi(0)$$

利用以上结果, 方程 (3) 变为

$$\psi'(\varepsilon) - \psi'(-\varepsilon) - k^2 \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \psi dx + U_0 \psi(0) = 0 \quad (4)$$

方程 (4) 中, 当 $\varepsilon \rightarrow 0^+$ (即保持 $\varepsilon > 0$, 而又趋于 0), 得

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -U_0 \psi(0) \quad (5)$$

这就是在 $x = 0$ （存在 δ 势阱处）两侧 ψ' 的跃变公式，它对于系统能级的确定起关键作用。

在奇点 $x = 0$ 处， ψ' 连续，试令

$$\psi(x) \sim e^{-k|x|}$$

利用 $|x|' = |x|/x$ ，可得

$$\psi'(x) = -k \frac{|x|}{x} e^{-k|x|} = \begin{cases} -ke^{-kx}, & x > 0 \\ ke^{kx}, & x < 0 \end{cases} \quad (6)$$

将 (6) 代入 (5) 式：

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -2k\psi(0) = -U_0\psi(0)$$

所以：

$$k = \frac{U_0}{2} \quad (7)$$

$$\psi(x) \sim e^{-U_0|x|/2} \quad (8)$$

将 (7) 代入 (2) 式，得粒子的能量本征值：

$$E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -\frac{mU_0^2}{2\hbar^2}$$

(8) 式归一化，得本征函数

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{U_0}{2}} e^{-U_0|x|/2}$$

上述结果表明： δ 势阱中的粒子，总有一个束缚态（波函数的宇称为偶）。

值得注意，这个波函数的波幅全在 δ 势阱之外，这是微观粒子波动性的表现！