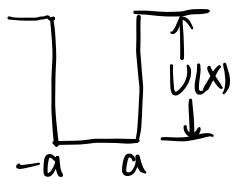


第三章 波动力学 I —— 一维定态问题

(量子物理应用 I)

§ 3.1 一维无穷深势阱

(1) 物理体系



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

求解薛定谔方程，得到粒子状态波函数 ψ

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi$$

$$\hat{H} \psi = E \psi \text{ 定态薛定谔方程}$$

(2) 求解过程

第一步 分区域 写下定态薛定谔方程

$$\hat{H} \psi = E \psi \quad \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + U(x) \right] \psi = E \psi$$

$$\left\langle -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} = E \psi \quad \text{阱内} \right.$$

$$\left. \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \infty \cdot \psi = E \psi \quad \text{阱外} \right] \right.$$

第二步 求出该方程通解

$$\text{阱内 } \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi = 0 \quad \Leftrightarrow k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (k \geq 0) \quad \text{阱外 } \psi = 0$$

$$\text{其通解 } \psi = A \cos kx + B \sin kx$$

第三步 根据边界条件定未知常数

波函数在 $[-a, a]$ 连续

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi(x=-a) = 0 \quad A \cos ka - B \sin ka = 0 \\ \psi(x=a) = 0 \quad A \cos ka + B \sin ka = 0 \end{array} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} A \cos ka = 0 \\ B \sin ka = 0 \end{array} \right.$$

$$\text{当 } B=0 \text{ 时} \quad \cos ka = 0 \quad k = \frac{(n+\frac{1}{2})\pi}{a} \quad n \in 0, 1, 2, \dots$$

$$\text{此时} \quad E = \frac{k^2 \hbar^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{(n+\frac{1}{2})^2 \pi^2}{a^2} = \frac{\hbar^2 (n+\frac{1}{2})^2 \pi^2}{2ma^2} \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$\psi = A \cos kx = A \cos \frac{(n+\frac{1}{2})\pi}{a} x$$

$$\text{当 } A=0 \text{ 时} \quad \sin ka = 0 \quad k = \frac{n\pi}{a} \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$\text{此时 } E = \frac{k^2 \hbar^2}{2m} = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \quad n=0, 1, 2, \dots$$

$$\psi = B \sin kx = B \sin \frac{n\pi}{a} x$$

当 $A \neq 0$ 且 $B \neq 0$ 时 $\cos ka$ 与 $\sin ka$ 不可能同时为零 ∵ 不存在其它情况

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad \begin{matrix} \uparrow \text{能量算符} & \uparrow \text{函数} & \uparrow \text{函数} \\ & \uparrow \text{能量本征值} & \end{matrix}$$

$$\begin{matrix} \text{统一在一起来表示} & \text{能量本征值} & E = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{8ma^2} \\ & \text{能量本征函数} & \psi(x) = C \sin \left[\frac{n\pi(x+a)}{2a} \right] \end{matrix}$$

$$|\psi\text{-化条件} \quad \int_{-a}^a |\psi(x)|^2 dx = 1$$

$$\int_{-a}^a \left| C \sin \left(\frac{n\pi x}{2a} + \frac{n\pi}{2} \right) \right|^2 dx = 1 \quad C = \sqrt{\frac{1}{a}}$$

例：已知一个电子束缚在一维盒子中，其基态能量为 34eV 求第一激发态能量

$$\text{解： 能量 } E \sim n^2 \quad E = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{8ma^2}$$

$$\text{基态 } E_1 = 34\text{eV} \quad (n=1)$$

$$\text{第一激发态 } E_2 = 136\text{eV} \quad (n=2)$$

Example：一个质量为 m 的电子被束缚在一维盒子中 ($0 \leq x \leq a$) 已知在初始时

刻，该电子的波函数为 $\psi(x, t=0) = \sqrt{\frac{8}{\pi a}} \left(1 + \cos \frac{\pi x}{a} \right) \sin \frac{\pi x}{a}$ 试问

(1) 后来某个时刻 t 波函数是多少

(2) t 时刻 该电子的能量可能是多少

(3) 在 t 时刻 在盒子左半部找到该电子的概率

$$\text{已知 能量本征值 } E = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{8ma^2} \quad \text{能量本征函数 } \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \left(\frac{n\pi x}{a} \right)$$

$$\text{解： } \psi(x, t) = \psi(x) e^{iEt/\hbar}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = H \Psi$$

能量本征值

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8ma^2}$$

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

能量本征函数 $\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$

(1) 初始时刻 $\Psi(x, t=0) = \sqrt{\frac{8}{5a}} (1 + \cos\frac{\pi x}{a}) \sin\frac{\pi x}{a}$

$$= \sqrt{\frac{4}{5}} \cdot \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\frac{\pi x}{a} + \sqrt{\frac{1}{5}} \cdot \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\frac{2\pi x}{a}$$

$$= \sqrt{\frac{4}{5}} \phi_1(x) + \sqrt{\frac{1}{5}} \phi_2(x)$$

t 时刻 $\Psi(x, t) = \sqrt{\frac{4}{5}} e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} \phi_1(x) + \sqrt{\frac{1}{5}} e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}} \phi_2(x)$

(2) 可能处在第一波函数 ϕ_1 能量为 E_1

可能处在第二波函数 ϕ_2 能量为 E_2

(3) $P = \int_0^{\frac{a}{2}} |\Psi(x, t)|^2 dx = \int_0^{\frac{a}{2}} \left| \sqrt{\frac{4}{5}} e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} \phi_1(x) + \sqrt{\frac{1}{5}} e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}} \phi_2(x) \right|^2 dx$

$$= \frac{1}{2} + \frac{16}{15\pi} \cos\left(\frac{3\pi^2 \hbar}{2ma^2} t\right)$$

小结 (1) 牛顿力学

量子物理

典型例子



解题思路 第1步 受力分析

第1步 分区域写下定态薛定谔方程 $\hat{H}\Psi = E\Psi$

第2步 分方向 写 $F = ma$

第2步 写下通解

第3步 求出 a 代入初始条件

第3步 根据边界条件定未知常数

\rightarrow 求出其他物理量

$\rightarrow \phi_n$ 本征函数 \rightarrow 波函数 $\Psi = \sum_n C_n \phi_n \cdot f_n$

\rightarrow 其他物理量

(2) 求解 $\hat{H}\Psi = E\Psi$ 能量本征方程

结果 E_n

能量本征值 $E_n = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{8ma^2}$

ϕ_n

能量本征函数

$\Gamma \dots \Gamma^n \pi(x+a)$

n

能量量子数

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{a}} \sin\left[\frac{n\pi}{2a}x\right]$$

Dirac记号 $|n\rangle$ 代表能量本征函数/本征态

(3) 能量本征值 $E_n = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{8ma^2} \propto n^2, (n=1, 2, \dots)$

经典



E 可取任意连续值

量子



E 只能取分立值 $E_n, E_n \propto \frac{1}{a^2}$

当 $a \rightarrow \infty$ $E \rightarrow$ 连续值 回到经典情况

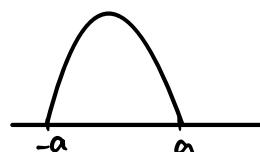
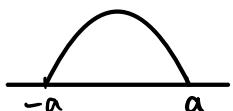
(4) 能量本征函数

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

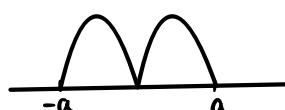
$\phi(x)$

$|\phi(x)|^2$

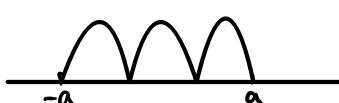
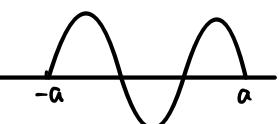
$n=1$



$n=2$



$n=3$



经典



来回往复运动

在阱内每一点、出现几率相同

量子



几率有 n 个峰

在这些峰处出现几率大，在其他处出现几率小

当 $n \rightarrow \infty$ 时 峰密集，峰在各处都一样且连续 回到经典情况

(5)薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi$$

↓

定态薛定谔方程

$$\hat{H} \psi = E \psi$$

(能量本征方程)

$$\begin{aligned}\psi &= f \cdot \phi \\ &= e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \phi\end{aligned}$$

由叠加原理可得：任意波函数 $\psi = \sum_n C_n \phi_n f_n$

任意时间波函数 $\psi = \sum_n C_n e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \phi_n$

(6) 实际体系



第1步 分区域 $\hat{H}\phi = E\phi$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi = E\phi \quad \text{阱内} \quad U=0$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U \right] \phi = E\phi \quad \text{阱外} \quad U=\infty$$

第2步 写出通解（简单三角函数）

第3步 根据边界条件定系数

§ 3.2 量子隧穿问题

(1) 牛顿力学 量子物理

斜面 势阱 束缚态问题

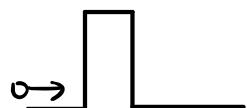
碰撞 势垒 散射态问题

将粒子束缚在一个区域内 势阱

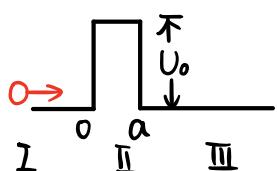


粒子如何通过一个区域 势垒

被一个势垒散射



(2)



情况1. $E > U_0$ 情况

情况2. $E < U_0$ 情况

Condition 1

$E > U_0$

Step 1 分区域写下定态薛定谔方程

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi = E \phi & x < 0 \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U_0 \right) \phi = E \phi & 0 < x < a \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi = E \phi & x > a \end{cases} \quad \cdots <1> \quad \cdots <2> \quad \cdots <3>$$

方程 <1> $\frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \phi = 0 \quad \frac{d^2\phi}{dx^2} + k_1 \phi = 0$

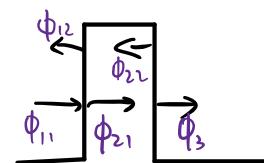
方程 <2> $\frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2} \phi = 0 \quad \frac{d^2\phi}{dx^2} + k_2 \phi = 0 \quad (= \text{阶常微分方程})$

方程 <3> $\frac{d^2\phi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \phi = 0 \quad \frac{d^2\phi}{dx^2} + k_1 \phi = 0$

$$\therefore k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}}$$

Step 2 写下方程通用解

区域 I $\phi_I(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x}$



区域 II $\phi_{II}(x) = B e^{ik_2 x} + B' e^{-ik_2 x}$

区域 III $\phi_{III}(x) = C e^{ik_1 x} + C' e^{-ik_1 x}$

Step 3 根据边界条件确定未知常数

$$\begin{cases} \phi_I(0) = \phi_{II}(0) \\ \phi_I'(0) = \phi_{II}'(0) \end{cases} \quad \text{且} \quad \begin{cases} \phi_{II}(a) = \phi_{III}(a) \\ \phi_{II}'(a) = \phi_{III}'(a) \end{cases}$$

$$\begin{cases} A + A' = B + B' \\ ik_1 A - ik_1 A' = B ik_2 - B' ik_2 \end{cases} \quad \begin{cases} B e^{ik_2 a} + B' e^{-ik_2 a} = C e^{ik_1 a} \\ ik_2 B e^{ik_2 a} - ik_2 B' e^{-ik_2 a} = i k_1 C e^{ik_1 a} \end{cases}$$

解得：

$$C = \frac{4k_1 k_2 e^{-ik_1 a}}{(k_1 + k_2)^2 e^{-ik_2 a} - (k_1 - k_2)^2 e^{ik_2 a}} A$$

$$A' = \frac{2i(k_1^2 - k_2^2) \sin k_2 a}{(k_1 - k_2)^2 e^{ik_2 a} - (k_1 + k_2)^2 e^{-ik_2 a}} A$$

几率守恒 $\frac{\partial P}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} = 0$ $\vec{J} = \frac{i\hbar^2}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi)$

入射波 $A e^{ik_1 x}$

$$\begin{aligned} \vec{J}_{\text{入射}} &= \frac{i\hbar}{2m} (\psi \frac{d}{dx} \psi^* - \psi^* \frac{d}{dx} \psi) \\ &= \frac{i\hbar}{2m} (A e^{ik_1 x} \frac{d}{dx} (A^* e^{-ik_1 x}) - A^* e^{-ik_1 x} \frac{d}{dx} (A e^{ik_1 x})) \end{aligned}$$

$$= \frac{i\hbar}{2m} AA^* (-ik_1 e^{ik_1 x} \cdot e^{-ik_1 x} - ik_1 e^{-ik_1 x} e^{ik_1 x})$$

$$= \frac{i\hbar}{2m} |A|^2 (-2ik_1) = \frac{k_1 \hbar}{m} |A|^2$$

入射几率流与入射振幅有关

同理：对于反射波 $A' e^{-ik_1 x}$ $\vec{J}_{\text{反射}} = \frac{-k_1 \hbar}{m} |A'|^2$

对于透射波 $C e^{ik_1 x}$ $\vec{J}_{\text{透射}} = \frac{k_1 \hbar}{m} |C|^2$

反射几率流与反射振幅有关

定义 反射系数 $R = \frac{J_{\text{反射}}}{J_{\text{入射}}} = \frac{|A'|^2}{|A|^2}$ 透射系数 $T = \frac{J_{\text{透射}}}{J_{\text{入射}}} = \frac{\frac{k_1 \hbar}{m} |C|^2}{\frac{k_1 \hbar}{m} |A|^2} = \frac{|C|^2}{|A|^2}$

验证： $R + T = 1$ (证： $|A|^2 = |A'|^2 + |C|^2$)

代入 $C(A)$ 与 $A'(A)$ 表达式 可得 $|A|^2 = |A'|^2 + |C|^2 \therefore 1 = R + T$

Condition 2 $E < U_0$

Step 1 分区域写出定态薛定方程 $k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ $k_3 = \sqrt{\frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}}$ ($k_1 < k_2$)

区域I $x < 0$ $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi = E \phi$ $\frac{d^2 \phi}{dx^2} + k_1^2 \phi = 0$

区域II $0 \leq x < a$ $[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U_0] \phi = E \phi$ $\frac{d^2 \phi}{dx^2} - k_3^2 \phi = 0$

区域III $x > a$ $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi = E \phi$ $\frac{d^2 \phi}{dx^2} + k_1^2 \phi = 0$

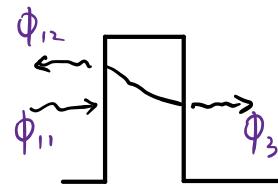
Step 2 写下方程通解

$$\phi_I(x) = A e^{ik_1 x} + A' e^{-ik_1 x}$$

入射波 逆射波

$$\phi_{II}(x) = B e^{k_3 x} + B' e^{-k_3 x}$$

能量衰减



$$\phi_{III}(x) = C e^{ik_1 x}$$

透射波

Step3 根据边界条件定未知常数

$$\begin{cases} \phi_I(0) = \phi_{II}(0) \\ \phi_I'(0) = \phi_{II}'(0) \end{cases} \quad \text{且} \quad \begin{cases} \phi_{II}(a) = \phi_{III}(a) \\ \phi_{II}'(a) = \phi_{III}'(a) \end{cases}$$

$$\begin{cases} A + A' = B + B' \\ ik_1 A - ik_1 A' = k_3 B - k_3 B' \end{cases} \quad \begin{cases} B e^{k_3 a} + B' e^{-k_3 a} = C e^{ik_1 a} \\ k_3 B e^{k_3 a} - k_3 B' e^{-k_3 a} = i k_1 C e^{ik_1 a} \end{cases}$$

联立解得：

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

入射系数 $R = 1 - T$

$$\text{因此关注 透射系数 } T = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{4 k_1^2 k_3^2}{(k_1^2 + k_3^2) \operatorname{sh}^2(k_3 a) + 4 k_1^2 k_3^2} = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{1}{k_1^2} + \frac{1}{k_3^2} \right) \operatorname{sh}^2(k_3 a)}$$

$$\operatorname{sh}(k_3 a) = \frac{e^{k_3 a} - e^{-k_3 a}}{2} \quad k_3 = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar}}$$

当 $E \ll U_0$ 时 $k_3 a \gg 1 \Rightarrow e^{k_3 a} \gg e^{-k_3 a}$

$$\therefore T \approx \frac{1}{e^{2k_3 a}} = \exp \left\{ -2 \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar}} a \right\}$$

Example：如图所示，一个半无限长势垒 高度为 U_0 ，当粒子能量为 E ，从左向右入射，试求其反射系数和透射系数 (MIT)

$$\hat{H}\phi = E\phi$$

$$\text{其中 } k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}}$$

$$\text{当 } E > U_0 \text{ 时} \quad \Phi_I(x) = A e^{ik_1 x} + A' e^{-ik_1 x} \quad (x < 0)$$

$$\Phi_{II}(x) = B e^{ik_2 x} \quad (x \geq 0)$$

$$\begin{cases} A + A' = B \\ ik_1 A - ik_1 A' = ik_2 B \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} B = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A \\ A' = \frac{i(k_1 - k_2)A}{i(k_1 + k_2)} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A \end{cases}$$

$$\therefore R = \frac{|A'|^2}{|A|^2} = \left| \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right|^2 = \frac{U_0^2}{(\sqrt{E} + \sqrt{E - U_0})^4}$$

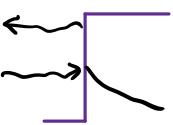
$$T = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left| \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \right|^2 = 1 - R$$

$$\text{当 } E < U_0 \text{ 时} \quad \Phi_I(x) = A e^{ik_1 x} + A' e^{-ik_1 x} \quad (x < 0)$$

$$\Phi_{II} = B e^{k_3 x} + B' e^{-k_3 x} \quad (x \geq 0) \quad \text{其中 } k_3 = \sqrt{\frac{2m(E - U_0)}{\hbar}}$$

对于透射波 $x \rightarrow \infty$ $B e^{k_3 x} \rightarrow \infty$ $B = 0$

$$\begin{cases} A + A' = B' \\ ik_1 A - ik_1 A' = -k_3 B' \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A' = \frac{k_3 + ik_1}{-k_3 + ik_1} A \\ B' = \frac{2ik_1}{-k_3 + ik_1} A \end{cases}$$



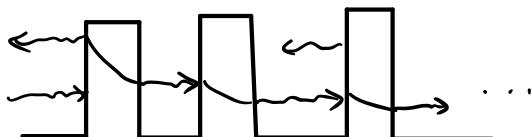
$$\text{法1: } R = \frac{|A'|^2}{|A|^2} = \left| \frac{ik_1 + k_3}{ik_1 - k_3} \right|^2 = \left| \frac{(k_3 + ik_1)^2}{k_3^2 + k_1^2} \right|^2 = 1 \quad T = 1 - R = 0$$

$$\text{法2: } J_{\text{透}} = \frac{i\hbar}{2m} \left[\Psi \frac{d\Psi^*}{dx} - \Psi^* \frac{d\Psi}{dx} \right] = \frac{i\hbar}{2m} \left[B e^{-k_3 x} (-k_3) B^* e^{k_3 x} - B^* e^{k_3 x} (-k_3) e^{-k_3 x} \cdot B' \right]$$

$$= \frac{i\hbar}{2m} [|B'|^2 - |B'|^2] \cdot e^{-k_3 x} (-k_3) e^{-k_3 x} = 0$$

$$\therefore T = 0 \quad R = 1 - T = 1$$

法3:



$$T_1 \propto e^{-a} \quad T_2 \propto e^{-a} \quad \dots$$

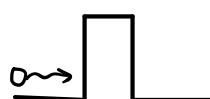
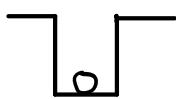
$$\therefore T \propto \prod_{k=1}^n T_k \quad \text{当 } n \rightarrow \infty \text{ 时 } T \rightarrow 0$$

小结:

束缚态问题

散射态问题

图象



步骤

(1) 分区域写下定态薛定谔方程

$$\hat{H}\phi = E\phi$$

(2) 写下通解

(3) 根据边界条件定未知数



结果

能量本征函数 ϕ_n

反射系数 R

能量本征值 E_n

透射系数 T



求解各种物理量

求解各种物理量

§3.3 谐振子问题

(1) 物理体系

经典力学

量子物理

定义



弹簧振子

粒子在一个抛物势中运动

$$F = kx$$

$$U = \frac{1}{2}kx^2$$

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

图象



第1步

写下定态薛定谔方程

$$\hat{H}\phi = E\phi$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right] \phi = E\phi$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \right] \phi = E\phi$$

第2步

写下方程通解

- 变量代换 令 $\xi = \omega x$

$$\omega = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

代入原方程： $\frac{d^2\phi}{dx^2} + (\lambda - \xi^2)\phi = 0$

当 ξ 很大时 $\frac{d^2\phi}{dx^2} - \xi^2\phi = 0 \quad \phi(\xi) = e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$

当 ξ 很小时 $\phi(\xi) = H(\xi)$

待定系数法： $\phi = e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H(\xi)$
 通解 $\begin{cases} \xi \text{很大} \\ \xi \text{很小} \end{cases}$

将通解代入原方程： $\frac{d^2H}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH}{d\xi} + (\lambda - 1)H = 0$ 原米方程
 2阶 1阶 0阶

级数展开方法求解(特殊方程)

第3步 根据边界条件求未知常数

上述原米方程在全空间有解的充要条件： $\lambda = 2n+1$

其解为 $H_n = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}$ (原米函数、特殊函数)

因此 $\hat{H}\phi = E\phi$ 在 $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ 条件下有解

能量本征值 $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$

能量本征函数 $\phi_n = e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_n(\xi) = (-1)^n e^{\frac{1}{2}\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}$

Example：一个一维谐振子，已知其处在基态，相应的波函数为
 $\psi_0 = (\frac{2}{\pi})^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\omega x^2}$ $\omega = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$, $m\omega$ 是谐振子的粒子质量和特函数参数，求该粒子在经典区域以外出现的几率大小

解：基态能量 $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$

基态波函数 ψ_0

经典状态

$$\left\{ \begin{array}{l} E = E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \\ \frac{1}{2}m\omega^2 x_m^2 = \frac{1}{2}\hbar\omega \end{array} \right.$$

$$P = \int_{x_m}^{+\infty} |\psi_0|^2 dx + \int_{-\infty}^{-x_m} |\psi_0|^2 dx$$

$$= 2 \int_{x_m}^{+\infty} |\psi_0|^2 dx$$

$$\Rightarrow x_m = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

$$\begin{aligned}
 &= 2 \cdot \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{x_m}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx \\
 &= 1 - \int_{-\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}}^{\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}} \left| \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2} \right|^2 dx \approx 0.16
 \end{aligned}$$

小结：(1) 思路：第1步 写下定态薛定谔方程 $\hat{H}\phi = E\phi$

第2步 写下通解

第3步 边界条件确定常数 \rightarrow 波函数 ϕ

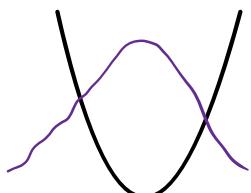
(2) 能量本征值 $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$



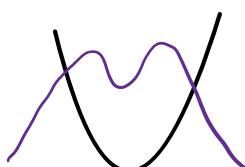
(3) 能量本征函数 $\Phi_n = e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_n(\xi)$

能量量子数： n

$n=0$



$n=1$



$n=2$

