

一. 一般讨论.

定态 Schrodinger 方程

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

一维, $\vec{r} = x$.

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

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

边界条件.

- 连续性边界条件 (边界上连续) $\left\{ \begin{array}{l} \text{① 波函数及其一阶导数连续.} \\ \text{② 势无限深势阱, 波函数连续, 一阶导数不连续.} \end{array} \right.$
- 自然边界条件: 波函数不发散.
- 周期性边界条件: $\sin(\varphi) = \sin(\varphi + 2\pi)$

另: 一维问题.

1) 一维束缚态解无简并

2) 波函数可以取为实数

3) 解的图像.

$\left\{ \begin{array}{l} \text{振荡} \\ \text{衰减} \end{array} \right.$ 取决于 E 和 $V(x)$ 相对大小.

二. 方势阱.

1. 无限势阱.

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq a \\ \infty, & \text{其他} \end{cases}$$

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

$$\psi(x) = A \cdot \sin\left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} x + \phi\right)$$

$$\psi(0) = 0. \quad \phi = 0, \pi, \dots, n\pi? \quad \text{波函数差个结对其无影响}$$

不妨取 $\phi = 0$

$$\psi(a) = 0. \quad \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} a + \phi = n'\pi$$

$\hookrightarrow n\pi$

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

$$\int_0^a |\psi|^2 dx = 1. \quad \Rightarrow \quad A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x \quad 0 \leq x \leq a.$$

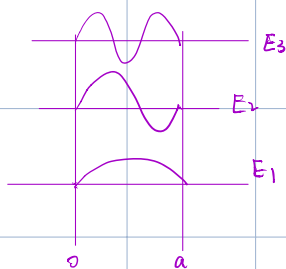
$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

1) 基态. $E = E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$

2). $E_n \propto n^2$ 能级间隔越来越大.

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} \sim \frac{1}{n}$$

3). 解的图像



选(边界外函数值为0的点)

对称, $\psi(x) = \psi(-x)$ 偶对称

$\psi(x) = -\psi(-x)$ 奇对称

坐标轴位置可以决定对称