第十七章 量子力学应用

结构框图：

量子力学应用
- 势阱和势垒
- 原子结构
- 固体能带

学时：6

第一节 势阱和势垒

一、一维无限深势阱

二、势垒 隧道效应

求解问题的思路：

1.写出具体问题中势函数$U(r)$的形式，代入相应的薛定谔方程。

2.用分离变量法求解。

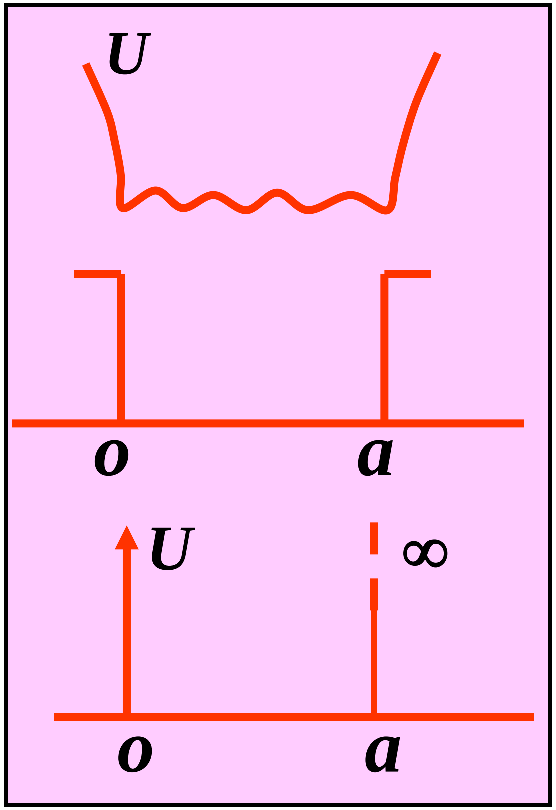
3.用归一化条件和标准条件确定积分常数。

只有E取某些特定值时才有解

本征值　　　　本征函数

4.求概率密度$|\Psi|^2$，讨论解的物理意义。

一、一维无限深势阱



例： 金属中自由电子的自由运动。

简化

- 受规则排列的晶格点阵作用相互碰撞 (简化：交换动量)
- 只考虑边界上突然升高的势能墙的阻碍 —— 势阱
- 认为金属中自由电子不能逸出表面 ——无限深势阱

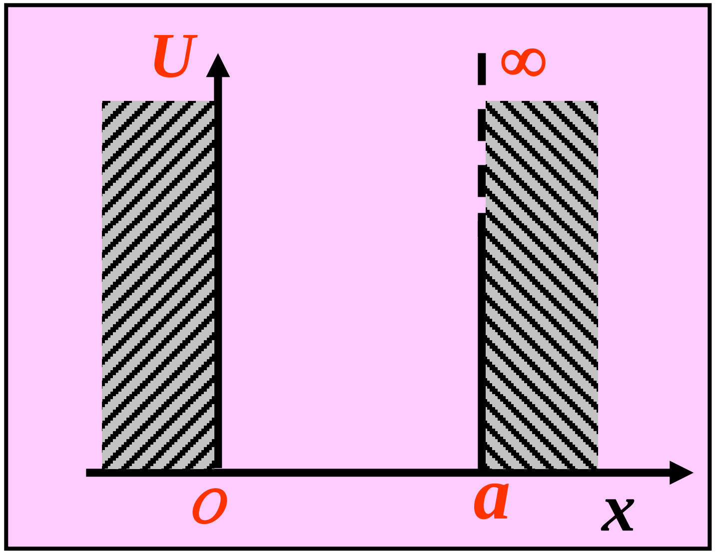
无限深势阱模型：微观粒子被局限于某区域中，并在该区域内可以自由运动的问题的简化模型。

其它： 原子核中质子的自由运动；电子在两栅极之间的自由运动。

求解问题的步骤：

1.写出具体问题中势函数$U(r)$的形式，代入一维定态薛定谔方程的一般形式，得本问题中的薛定谔方程。

设粒子在一维无限深势阱运动



势函数

$$U(x)=\begin{cases}0 & (0<x<a)\\ \infty & (x\le 0,\ x\ge a)\end{cases}$$

代入一维定态薛定谔方程的一般形式：

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi=0$$

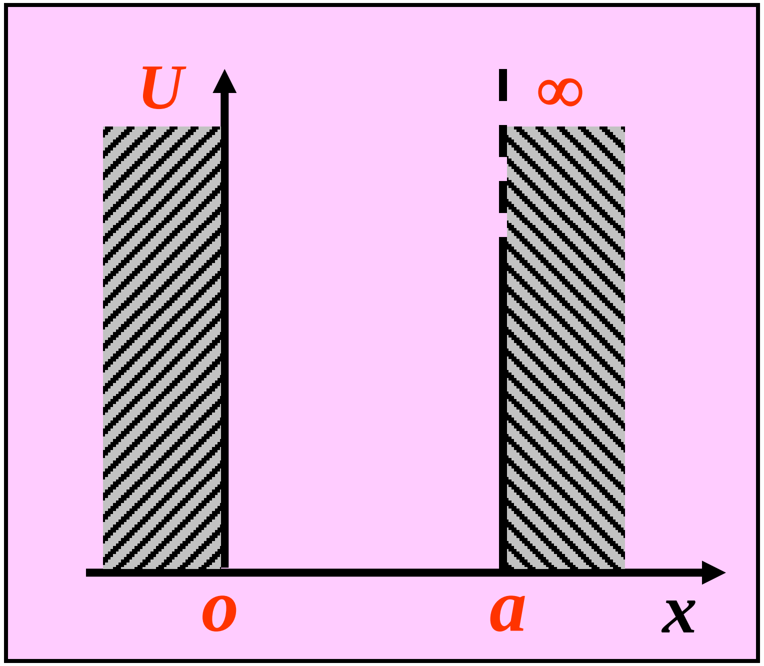
得本问题中的薛定谔方程:

$0 < x < a$

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi=0$$

$x \le 0, x \ge a$

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-\infty)\psi=0$$



2.求解方程

势阱外： $\psi = 0$ （粒子不能逸出势阱）

势阱内：

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0 \quad (0 < x < a)$$

令 $$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

得 $$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + k^2\psi = 0$$

解方程得： $\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx$

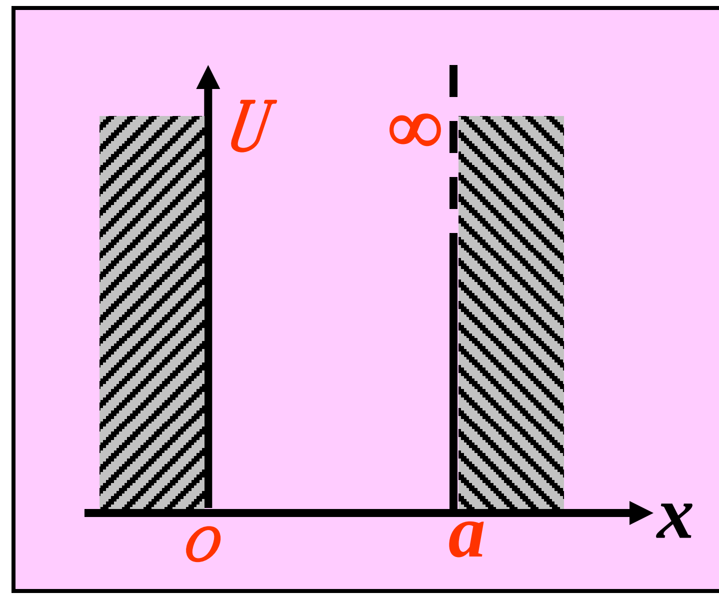
积分常数

3.用归一化条件和标准条件确定积分常数*A*、*B*

通解:$\psi(x)=A\sin kx+B\cos kx$

由波函数标准条件（单值、有限、连续）得边界条件:

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



由$\psi(0)=0$ 得 $B=0$

$$\psi(x)=A\sin kx$$

由$\psi(a)=0$ 得 $A\sin ka=0$

$$k=\frac{n\pi}{a}\quad(n=1,2,3\cdots)$$

思考：*n*为什么不取零和负数？

$$\psi(x)=A\sin\frac{n\pi}{a}x\quad(n=1,2,3,\ldots)$$

由归一化条件 $\int_{-\infty}^{\infty}|\Psi|^2\mathrm{d}x=1$

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2\,\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{\infty}\psi\cdot\psi^*\,\mathrm{d}x=\int_0^a A^2\sin^2\frac{n\pi x}{a}\,\mathrm{d}x=1\longrightarrow A=\sqrt{\frac{2}{a}}$$

于是：
$$\psi(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}\quad(n=1,2,3,\ldots)$$

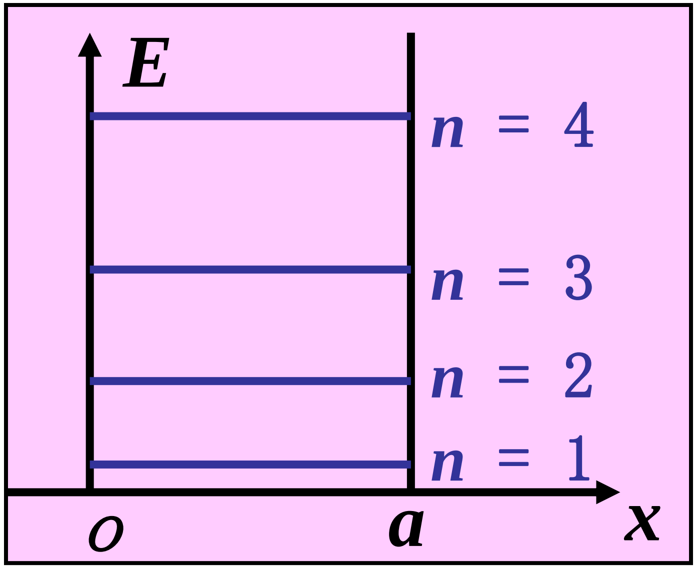
记住！

$$\Psi(x,t)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\qquad(n=1,2,3\cdots)$$

4.讨论解的物理意义

(1)无限深势阱中粒子的能量量子化

由 $k^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2}$　　$k = \dfrac{n\pi}{a}$



得 $\boxed{E = \dfrac{k^2\hbar^2}{2m} = \dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = n^2 E_1}$

$$(n = 1,2,3,\ldots)$$

上式中: $E_1 = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ ……零点能

E只能取一系列分离值$n^2 E_1$,能量量子化。

由 $E=\dfrac{k^2\hbar^2}{2m}=\dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}=n^2E_1\ (n=1,2,3,\ldots)$ 得

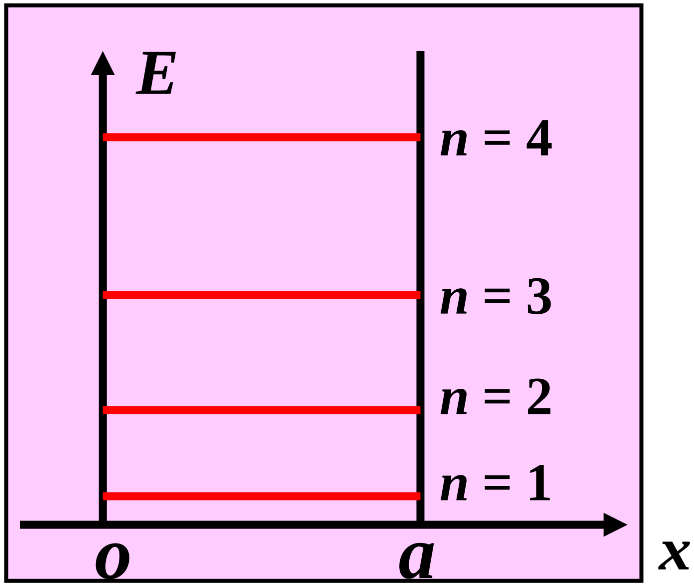
两相邻能级的**能量差：**

$$\Delta E=E_{n+1}-E_n=(2n+1)\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

$$n\uparrow\Rightarrow\Delta E\uparrow$$

$$a\uparrow\Rightarrow\Delta E\downarrow$$

$$ma^2>>\hbar^2\Rightarrow\Delta E\to 0$$



回到经典情况，能量连续。
请举实例！

实例：

比较	$m(\mathrm{kg})$	$a(\mathrm{m})$	$\Delta E \sim \dfrac{\pi^2\hbar^2}{ma^2}(\mathrm{J})$	
原子中的电子	9.1×10^{-31}	$\sim10^{-13}$	$\sim10^{-11}$	能量不连续
教室中的人	50	10	$\sim10^{-70}$	能量连续

(2)无限深势阱中粒子的波函数为驻波

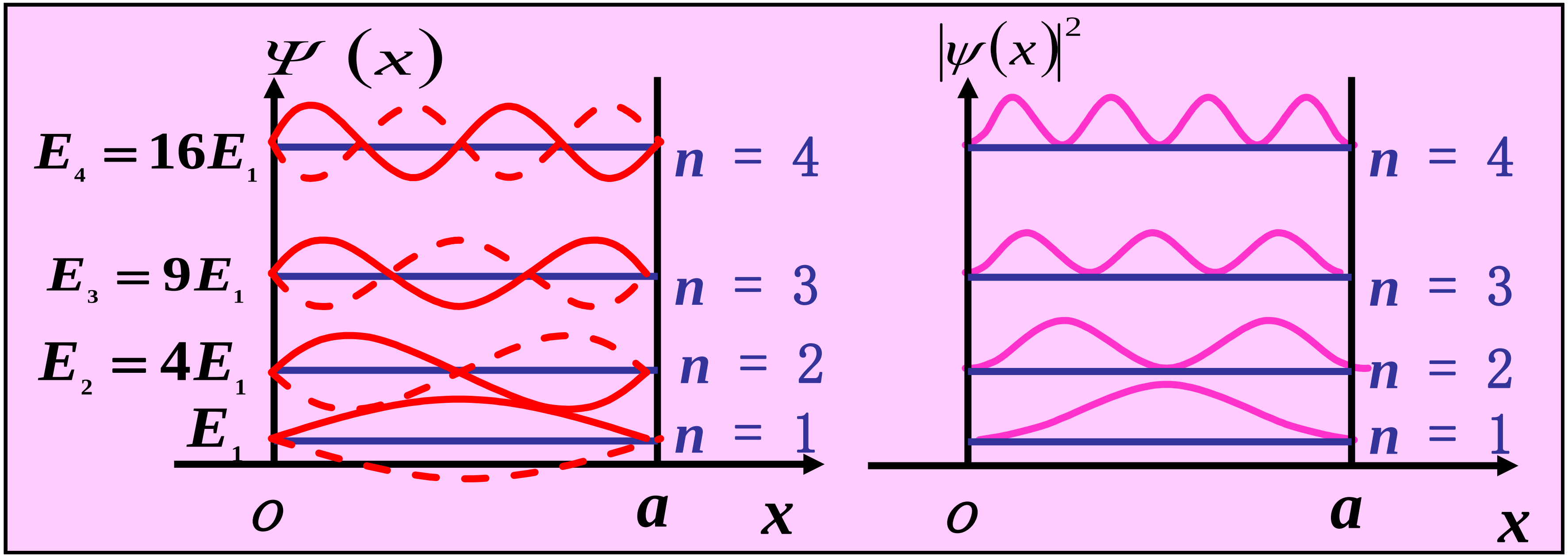
$$\Psi(x,t)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\quad(0<x<a)\ (n=1,2,3\cdots)$$

(3)粒子在势阱中的概率分布为 $|\Psi(x,t)|^2$

概率密度 $|\Psi(x,t)|^2=|\psi(x)|^2=\dfrac{2}{a}\sin^2\dfrac{n\pi x}{a}\quad(n=1,2,3,\ldots)$

$$\Psi(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}$$

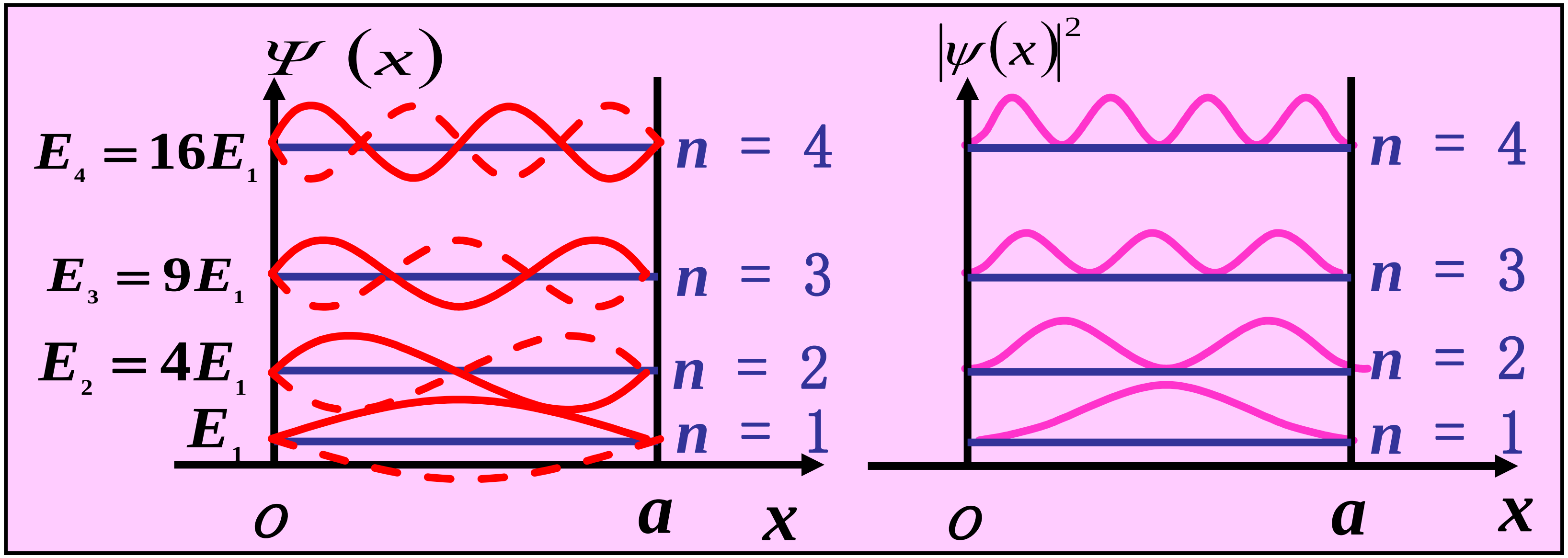
$$|\Psi(x,t)|^2=|\psi(x)|^2=\frac{2}{a}\sin^2\frac{n\pi x}{a}$$



结论: a 两端为驻波波节, $|\psi(x)|^2=0$, 粒子不能逸出势阱。

$$\Psi(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}$$

$$|\Psi(x,t)|^2=|\psi(x)|^2=\frac{2}{a}\sin^2\frac{n\pi x}{a}$$



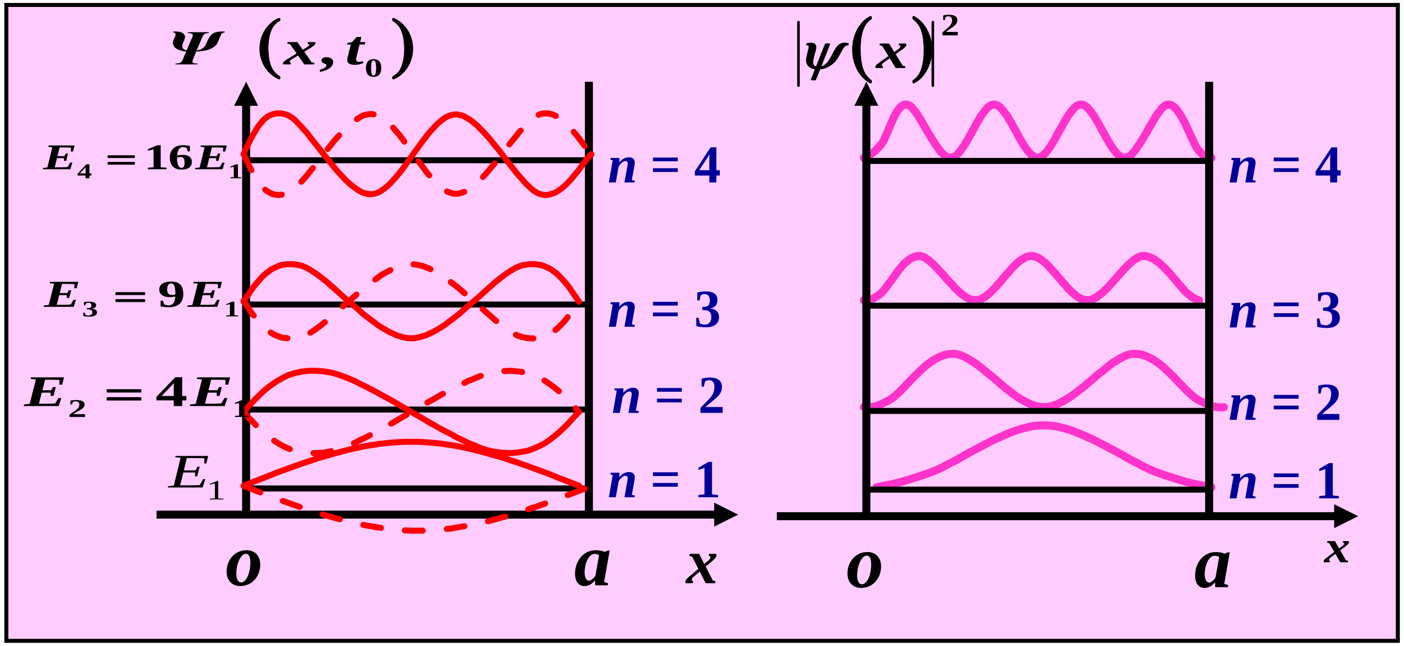
b 势阱中不同位置强度不等，粒子出现的概率不相同，$|\psi(x)|^2$ 的峰值处概率较大。

c n越大，驻波波长越短，峰值数越多，n趋于无穷大，粒子在各处出现的概率相同，由量子回到经典。

d 由归一化条件知：各概率密度曲线下面积相等。

例题1

一维无限深势阱中粒子波函数驻波波长与该粒子物质波波长是否一致？



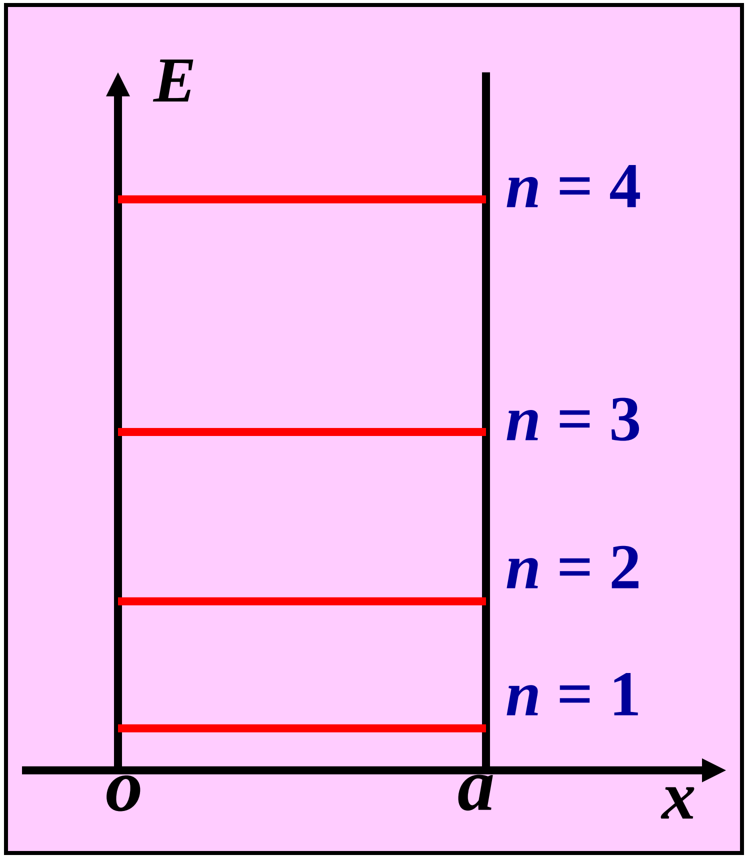
驻波波长： $\lambda_n = 2a/n, \quad n = 1,2,3,\ldots\ldots$

由 $$\boxed{E=\frac{k^2\hbar^2}{2m}=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}=n^2E_1}\qquad (n=1,2,3,\ldots)$$

$$E=\frac{p^2}{2m}$$

$$p=\sqrt{2mE}=\frac{n\pi\hbar}{a}=\frac{nh}{2a}$$

$$\lambda=\frac{h}{p}=\frac{2a}{n}\qquad (n=1,2,3,\ldots)$$



二者是一致的。

例题2 P_{182}例1：粒子质量为m，在宽度为L的一维无限深势阱中运动，试求(1)粒子在$0 \le x \le L/4$区间出现的概率。并求粒子处于n=1和n=∞状态的概率。(2)在哪些量子态上，$L/4$处的概率密度最大？

解:(1) 由题得：概率密度 $|\psi|^2 = \frac{2}{L}\sin^2\frac{n\pi x}{L}$

$$\therefore W = \int_0^{L/4}|\psi|^2 \mathrm{d}x = \int_0^{L/4}\frac{2}{L}\sin^2\frac{n\pi x}{L}\mathrm{d}x$$

$$= \int_0^{L/4}\frac{2}{L}\frac{L}{n\pi}\sin^2\frac{n\pi x}{L}\mathrm{d}\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = \frac{1}{4} - \frac{1}{2n\pi}\sin\frac{n\pi}{2}$$

当n=1时：$W = \frac{1}{4} - \frac{1}{2\pi} = 9\%$ 当n=∞时：W＝1/4

(2) 在$L/4$处，概率密度为：

$$|\psi(L/4)|^2=\frac{2}{L}\sin^2\frac{n\pi}{L}\left(\frac{L}{4}\right)=\frac{2}{L}\sin^2\frac{n\pi}{4}$$

$|\psi(L/4)|^2$为最大值时： $\sin\frac{n\pi}{4}=\pm1$

$$\therefore \frac{n\pi}{4}=(2k+1)\frac{\pi}{2} \quad (k=0,1,2\ldots\ldots)$$

$$\therefore n=2(2k+1) \quad (k=0,1,2\ldots\ldots)$$

$\therefore n=2,6,10\ldots\ldots$时概率密度最大

例题3 P_{203} 17.6

设粒子沿 x 方向运动，其波函数为 $\psi(x)=\dfrac{A}{1+ix}$

1. 将此波函数归一化；

2. 求出粒子按坐标的概率分布函数；

3. 在何处找到粒子的概率最大？

解： 1. 由归一化条件 得：

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left|\frac{A}{1+ix}\right|^2 \mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{A^2}{1+x^2}\mathrm{d}x = A^2 \operatorname{arctg} x\Big]_{-\infty}^{\infty} = A^2\pi = 1$$

$$\therefore A=\sqrt{\frac{1}{\pi}} \qquad \psi(x)=\frac{1}{\sqrt{\pi}(1+ix)}$$

2.概率密度为：

$$|\psi(x)|^2 = \left|\frac{1}{\sqrt{\pi}(1+ix)}\right|^2 = \frac{1}{\pi(1+x^2)}$$

3. 令：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}|\psi(x)|^2 = 0$$

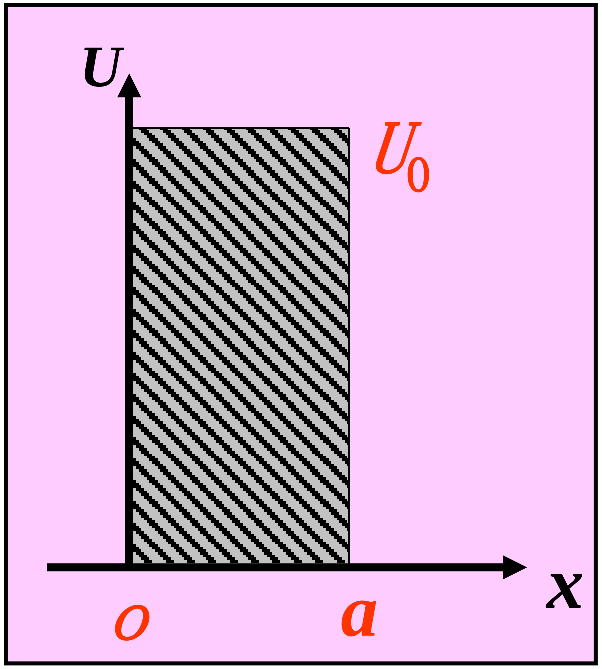
得：

$$x = 0$$

即在 $x = 0$ 处粒子的概率密度最大。

二、势垒 隧道效应

势垒模型：某区域边界的势能墙不是无限高，而是有限值。



势阱与势垒的区别:势阱势能“凹”下去,无限深，粒子在其中自由运动，势垒势能“凸”起来，有限高，粒子在其中不能自由运动。

1.求势函数，代入一维定态薛定谔方程

势函数: $U(x)=\begin{cases} U_0 & 0\le x\le a \\ 0 & x<0,\quad x>a \end{cases}$

代入 $$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi=0$$

得
$$\begin{cases} \dfrac{d^2\psi}{dx^2}+\dfrac{2mE}{\hbar^2}\psi=0 & (x<0 \quad x>a) \\ \dfrac{d^2\psi}{dx^2}+\dfrac{2m}{\hbar^2}(E-U_0)\psi=0 & (0\le x\le a) \end{cases}$$

2.求解方程

令 $k_1^2=\dfrac{2mE}{\hbar^2} \qquad k_2^2=\dfrac{2m}{\hbar^2}(E-U_0)$

$$\begin{cases} \dfrac{d^2\psi}{dx^2}+k_1^2\psi=0 & (x<0\,,\,x>a) \\ \dfrac{d^2\psi}{dx^2}+k_2^2\psi=0 & (0\le x\le a) \end{cases}$$

通解
$$\begin{cases} \psi_1 = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x} & (x<0) \\ \psi_2 = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x} & (0 \le x \le a) \\ \psi_3 = A_3 e^{ik_1 x} + B_3 e^{-ik_1 x} & (x>a) \end{cases}$$

3.由归一化条件和标准条件确定积分常数

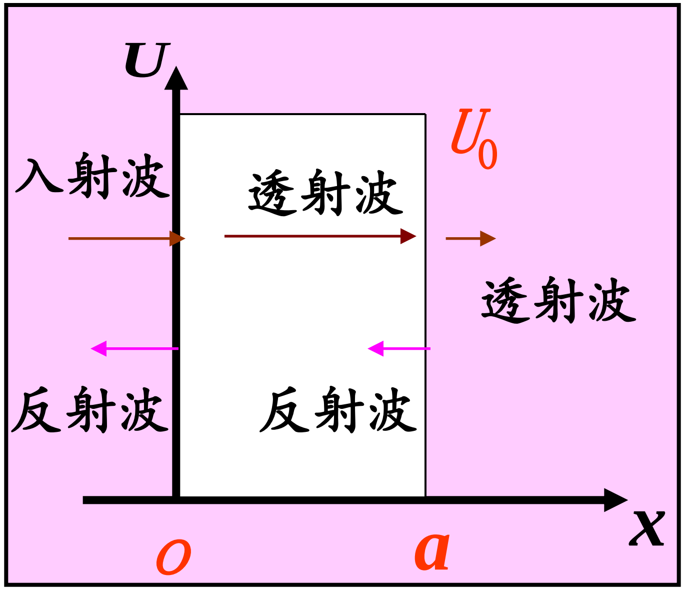
通解乘 $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ 得：

波函数：
$$\begin{cases} \psi_1(x,t) = A_1 e^{i(k_1 x - \frac{1}{\hbar}Et)} + B_1 e^{-i(k_1 x + \frac{1}{\hbar}Et)} & (x<0) \\ \psi_2(x,t) = A_2 e^{i(k_2 x - \frac{1}{\hbar}Et)} + B_2 e^{-i(k_2 x + \frac{1}{\hbar}Et)} & (0 \le x \le a) \\ \psi_3(x,t) = A_3 e^{i(k_1 x - \frac{1}{\hbar}Et)} + B_3 e^{-i(k_1 x + \frac{1}{\hbar}Et)} & (x>a) \end{cases}$$

方程右边第一项:沿+x方向传播的平面波 [例$A_1 e^{i(k_1 x - \frac{E}{\hbar}t)}$]

方程右边第二项:沿-x方向传播的平面波 [例 $B_1 e^{-i(k_1 x + \frac{E}{\hbar}t)}$]

通解
$$\begin{cases}\psi_1 = A_1 e^{ik_1x} + B_1 e^{-ik_1x} \\ \psi_2 = A_2 e^{ik_2x} + B_2 e^{-ik_2x} \\ \psi_3 = A_3 e^{ik_1x} + B_3 e^{-ik_1x}\end{cases}$$



由 $x>a$ 处无反射波： $B_3 = 0$

令 $A_1 = 1$（以入射波强度为标准）

由波函数的标准条件得

$$\left.\begin{aligned}\psi_1(0) &= \psi_2(0) \\ \frac{\mathrm{d}\psi_1}{\mathrm{d}x}(0) &= \frac{\mathrm{d}\psi_2}{\mathrm{d}x}(0) \\ \psi_2(a) &= \psi_3(a) \\ \frac{\mathrm{d}\psi_2}{\mathrm{d}x}(a) &= \frac{\mathrm{d}\psi_3}{\mathrm{d}x}(a)\end{aligned}\right\}$$

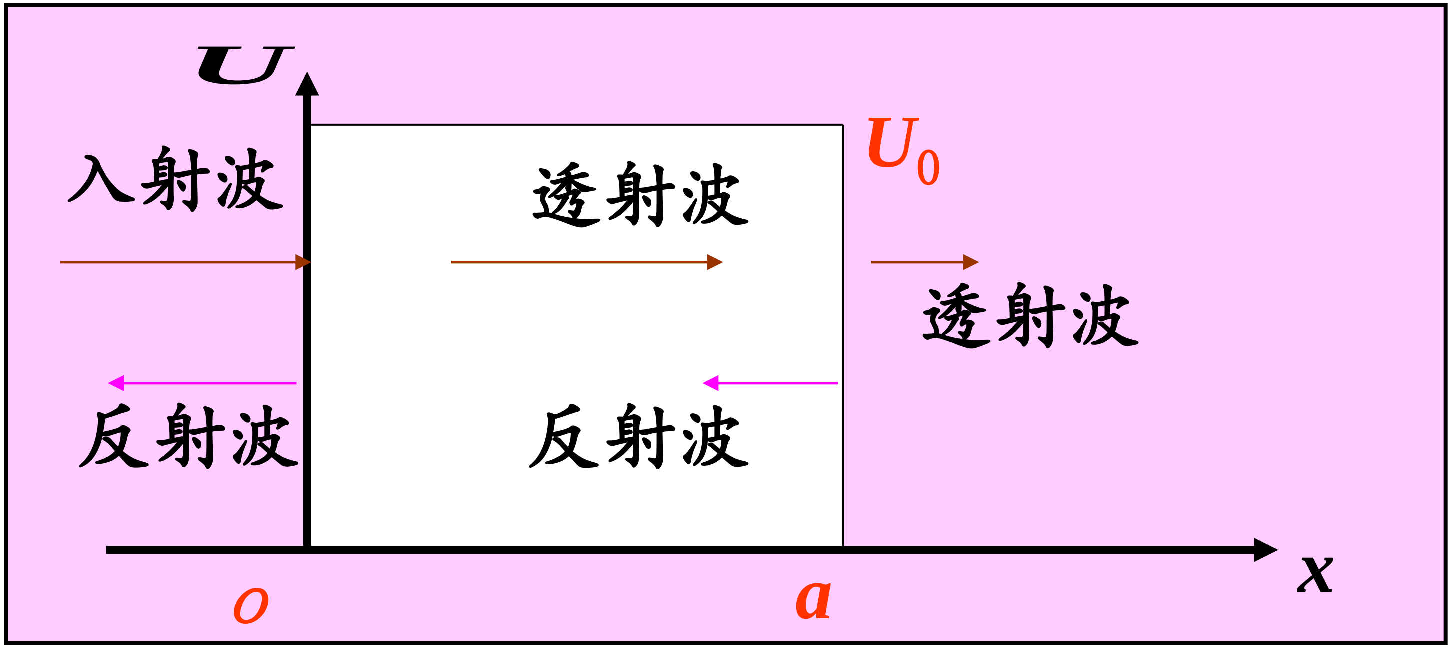
可解得

A_2, A_3

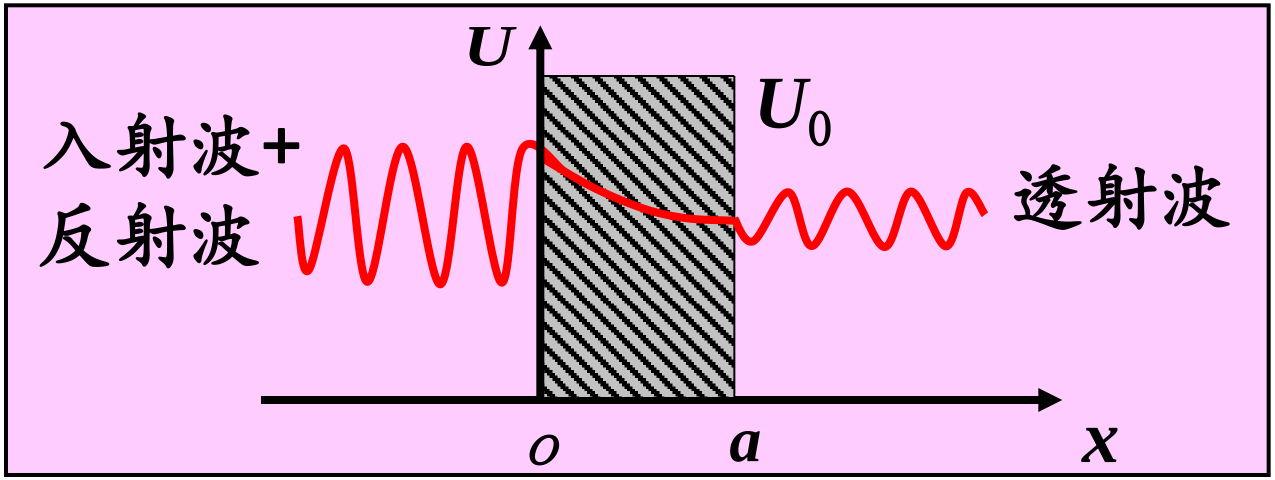
B_1, B_2

4.解的物理意义

(1)粒子能量 $E > U_0$ 时也可能反射。



(2)粒子能量 $E < U_0$ 时粒子仍有可能穿过势垒。



隧道效应：总能量E小于势垒高度U_0的粒子也有可能贯穿势垒，到达势垒另侧的现象。

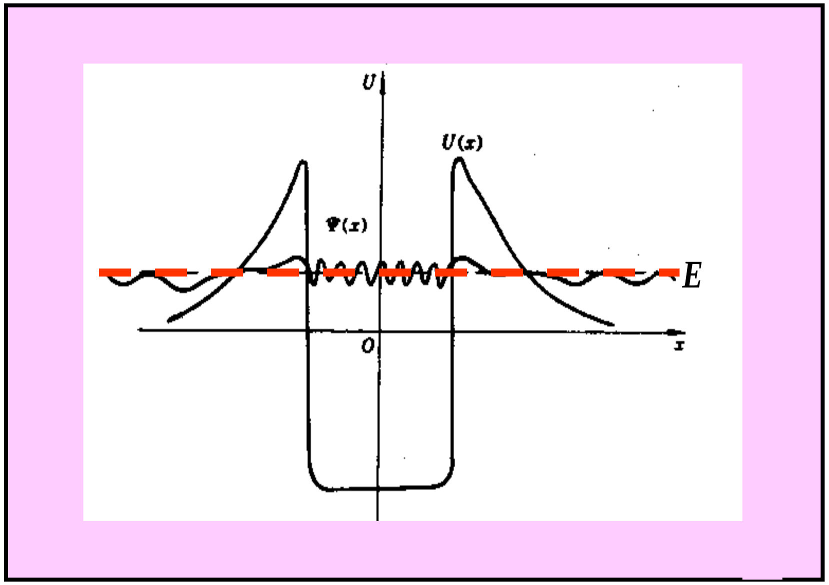
贯穿系数:$x=a$处透射波概率密度与$x=0$处入射波概率密度之比。

$$T=\frac{|\psi_3|^2_{x=a}}{|\psi_1|^2_{x=0}}=\frac{|\psi_2|^2_{x=a}}{|\psi_2|^2_{x=0}}=e^{\frac{-2a\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar}}$$

结论：$a\downarrow,U_0\downarrow$ 则 $T\uparrow$

应用举例

1.解释放射性α衰变

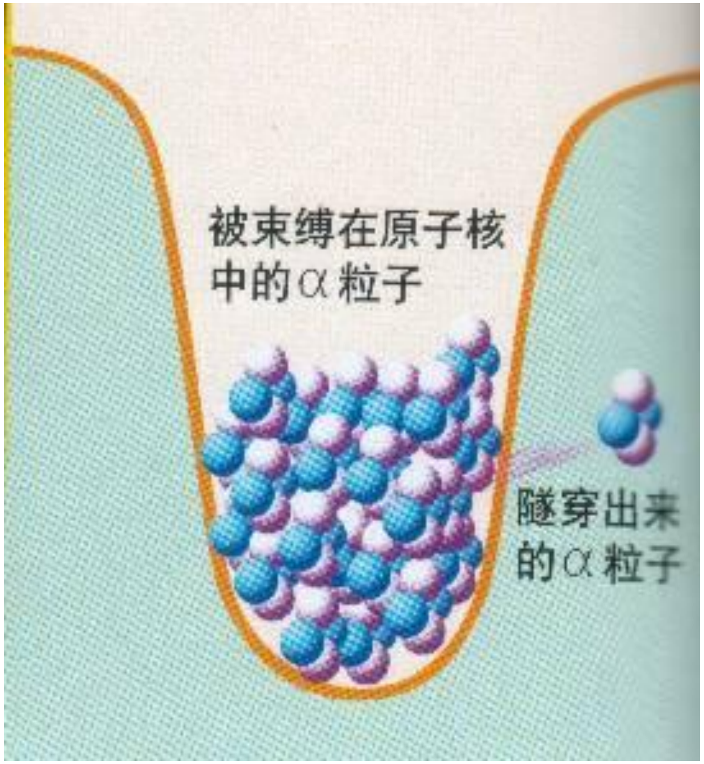


^{4}He的结合能比较大，核内两个质子和两个中子结合成小单位α粒子。

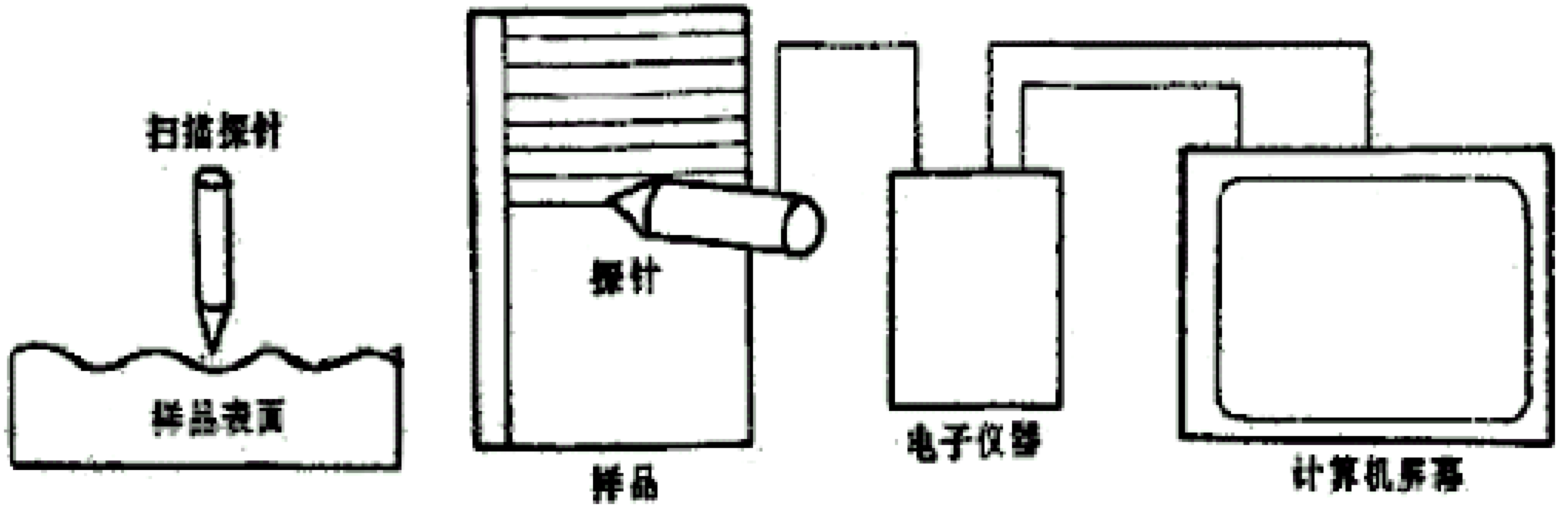
α粒子 $\begin{cases} \text{电量：} 2e \\ \text{质量：近似 } 4m_{\text{质子}} \end{cases}$

α衰变：α粒子穿过α粒子和子核间的库仑垒。

解释放射性α衰变



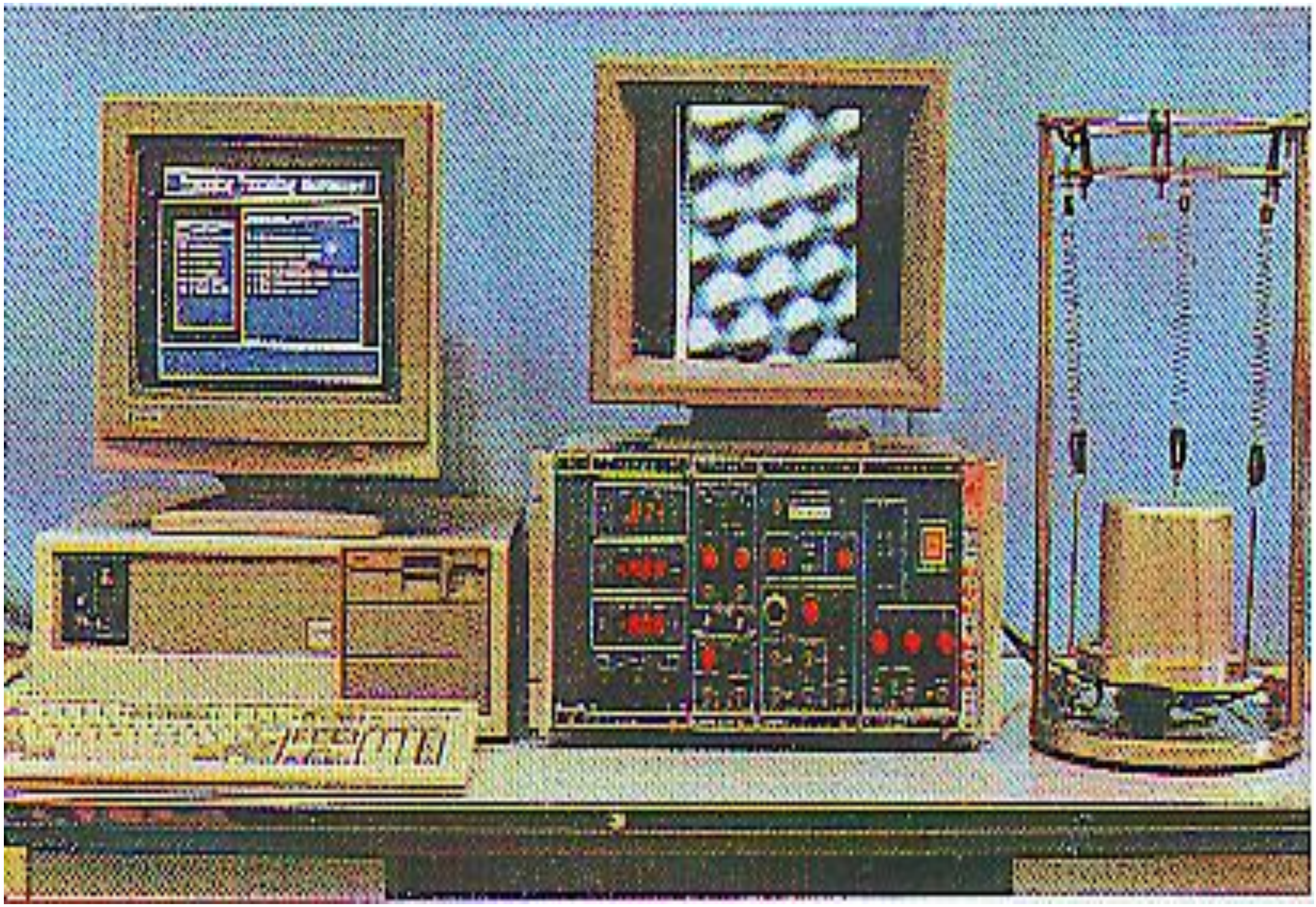
2.扫描隧穿显微镜（STM)



扫描隧穿显微镜示意图

加压后样品表面与探针表面形成势垒，电子通过隧道效应穿过势垒形成隧穿电流。

隧穿电流的变化表征了样品表面的变化情况，可以通过探测物质表面的隧道电流来分辨其表面特征（粗糙度等）。



CSTM——9000型扫描隧道显微镜

扫描隧穿显微镜获1986年诺贝尔物理奖

作业

1:No.8。

2:补充题:粒子被限制在宽度为l的两壁之间,其波函数

为：$(1)\psi = A(l - ix)$; $(2)\psi = \dfrac{A}{(l - ix)}$; $(3)\psi = \dfrac{A(l + ix)}{(l - ix)}$,

求各种情况下的A及粒子的概率密度(必做)。

3:自学本章各例题并完成书上的习题(对照书后的参考答案自己订正)。

第十三周星期三交作业