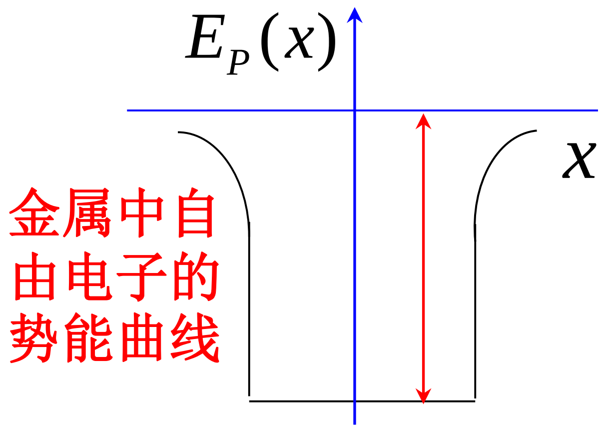
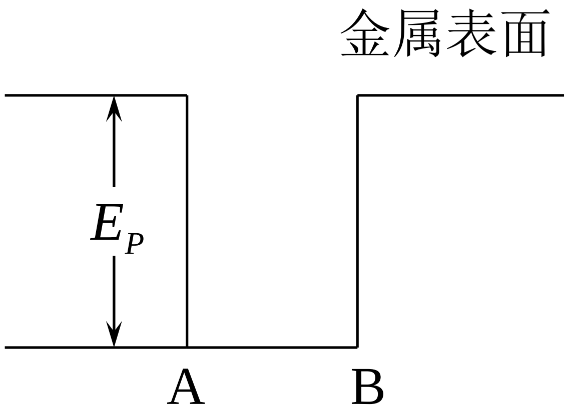
五、一维无限深势阱 The infinite potential well

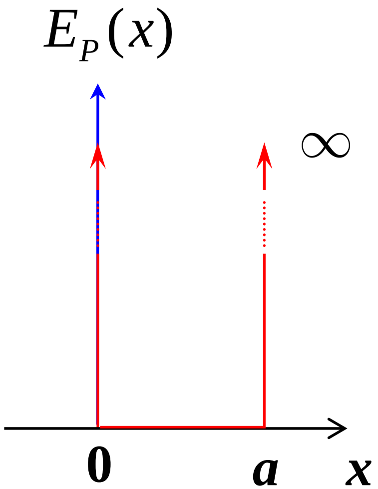
势阱





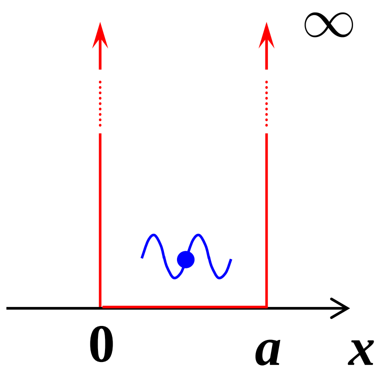
一维无限深势阱

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



五、一维无限深势阱 The infinite potential well

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

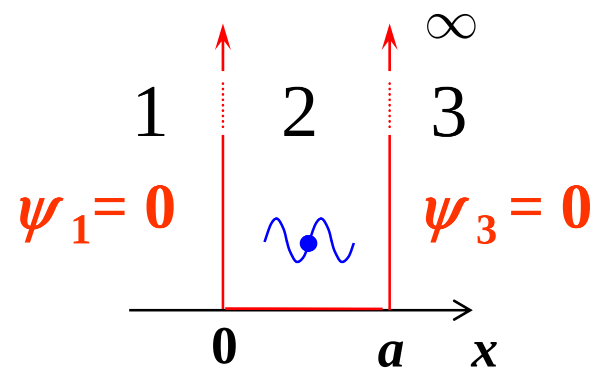


E_P 与 t 无关，写出定态薛定谔方程

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

五、一维无限深势阱 The infinite potential well

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



1、势阱外 $(x\le 0, x\ge a)$

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

***E* 为有限值，所以：** $\psi(x)=0, \qquad (x\le 0, x\ge a)$

2、势阱内 $(0<x<a)$

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

1）解方程

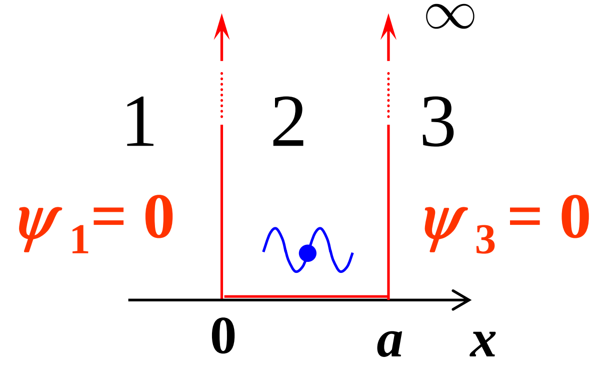
令： $\frac{2mE}{\hbar^2}=k^2$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+k^2\psi(x)=0 \longrightarrow \psi(x)=A\sin(kx)+B\cos(kx)$$

$$(0<x<a)$$

2）确定常数 *A*、*B*

$$\begin{cases} \psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx) \\ \qquad\qquad\qquad (0 < x < a) \\ \psi(x) = 0, \text{（} x \le 0 \quad x \ge a \text{）} \end{cases}$$



由波函数连续性，$\psi(0) = 0$ ，$\psi(a) = 0$

$\psi(0) = A\sin 0 + B\cos 0 = 0$ ➡ $B = 0$

$\psi(a) = A\sin(ka) = 0$ ➡ $\sin(ka) = 0$ ➡ $ka = n\pi$

$n = 1，\ 2，\ 3，\ \ldots$ $\qquad n \cancel{=} 0$ ？

$$\boxed{E = E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = n^2\frac{h^2}{8ma^2},}$$

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

←—称之为能量的本征值

量子数：$n = 1，\ 2，\ 3，\ \ldots\ldots$

由归一化条件确定系数 ***A***

$$\begin{cases} \psi_n(x) = A\sin(\dfrac{n\pi}{a}x), & (0 < x < a) \\ \psi(x) = 0, & (x \le 0 \quad x \ge a) \end{cases}$$

归一化条件为：

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1,$$

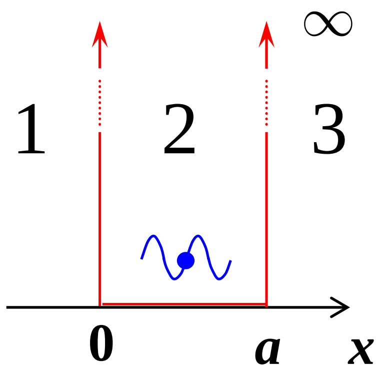
$$\int_{-\infty}^{0} |\psi(x)|^2 dx + \int_{0}^{a} |\psi(x)|^2 dx + \int_{a}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$$

$$\int_{0}^{a} \left| A\sin(\frac{n\pi}{a}x) \right|^2 dx = 1 \Rightarrow |A|^2 \frac{a}{2} = 1 \Rightarrow$$ 取正实数：$A = \sqrt{\dfrac{2}{a}}$

$$\boxed{\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(\frac{n\pi}{a}x), \quad (0 < x < a)}$$

一维无限深势阱

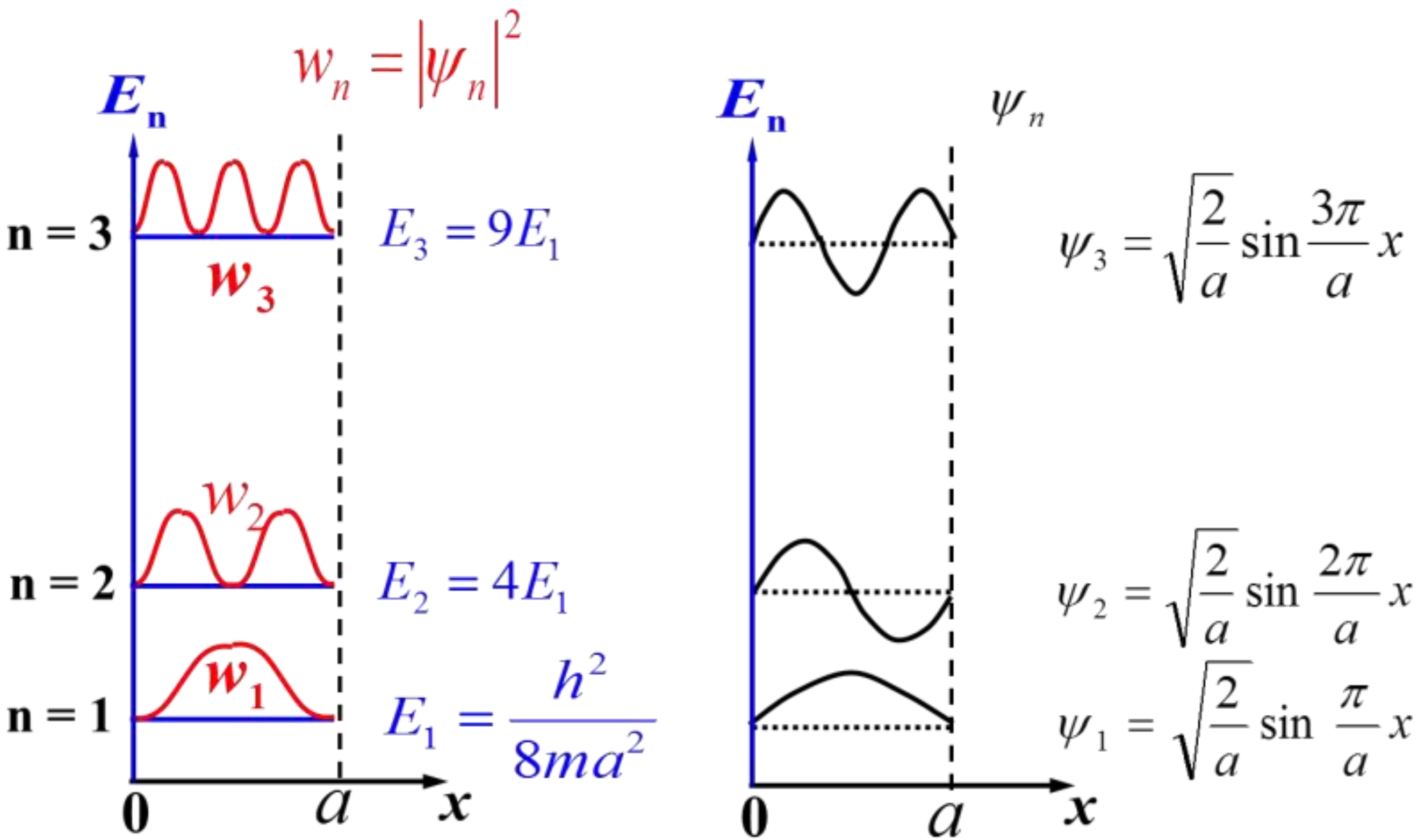
$$\psi(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin(\dfrac{n\pi}{a}x), & (0<x<a)\\ 0, & (x\le 0, x\ge a)\end{cases}$$



$$E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}=n^2\frac{h^2}{8ma^2},$$ 量子数：$n = 1，2，\ldots,$ 能量是量子化的

概率密度: $$w(x)=|\psi(x)|^2=\begin{cases}\dfrac{2}{a}\sin^2(\dfrac{n\pi}{a}x), & (0<x<a)\\ 0, & (x\le 0, x\ge a)\end{cases}$$

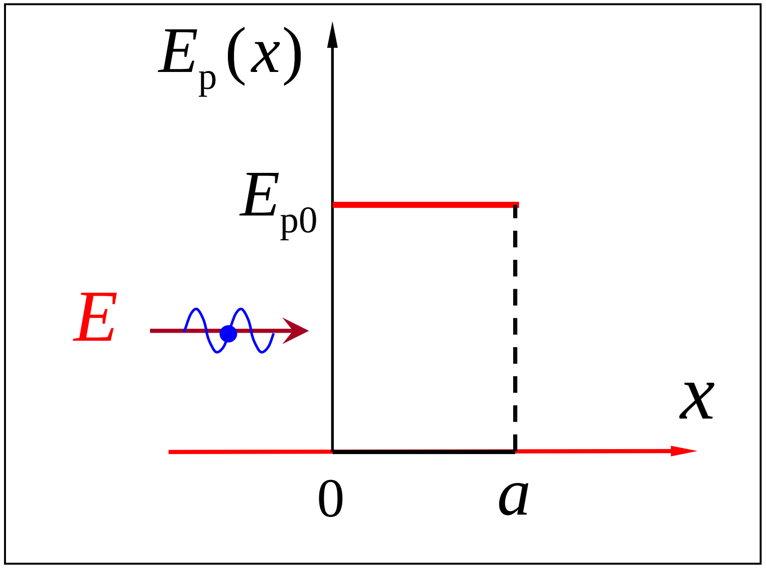
一维无限深势阱中粒子的能级、波函数和概率密度



六、一维方势垒、隧道效应 Tunnel Effect (了解)

一维方势垒

$$E_p(x)=\begin{cases}0, & (x\le 0,\ x\ge a)\\ E_{p0}, & (0<x<a)\end{cases}$$



粒子的能量 $E<E_{p0}$

经典物理： 当粒子能量 $E<E_{p0}$ 时，从经典理论来看，粒子不可能穿过势垒进入 $x>a$ 的区域;

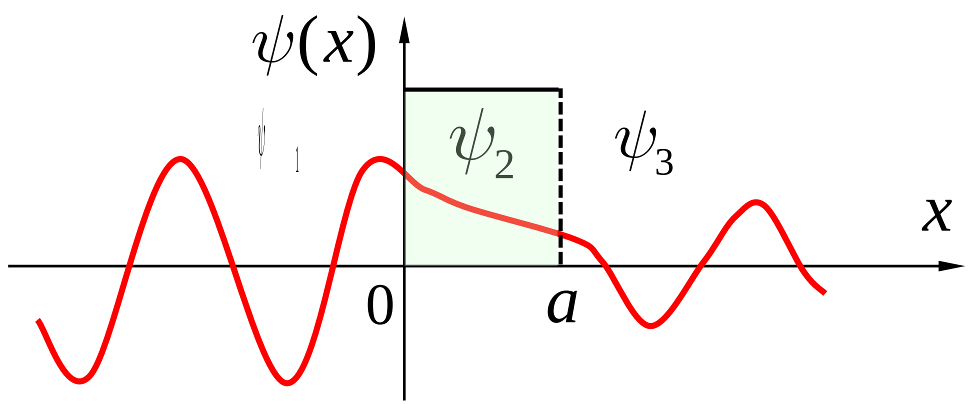
量子物理： 应求解定态薛定谔方程，才能下结论。

六、一维方势垒、隧道效应 Tunnel Effect

粒子能穿过比其能量更高的势垒，这种现象称为势垒贯穿，亦称 隧道效应。

这是微观粒子波动性的表现。

从左方射入的粒子，在各区域内的波函数



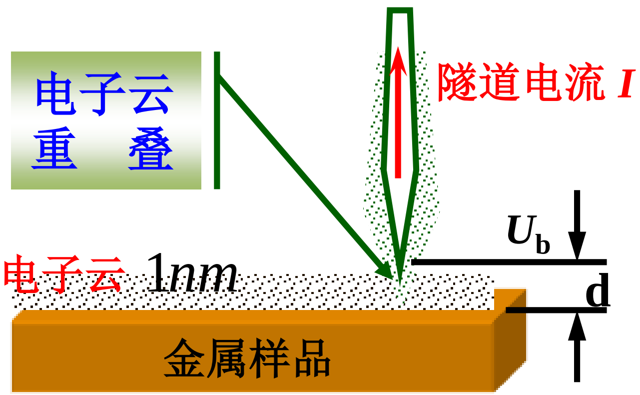
经量子力学分析，粒子有一定概率穿透势垒。

隧道效应已被许多实验所证实，并在半导体器件、超导器件、物质表面探测等现代科技领域中有着重要的应用。

扫描隧道显微镜(STM)

Scanning Tunneling Microscopy

1982年，IBM公司苏黎世实验室的Binning和Rohrer及其同事们共同研制成功。



由于电子的隧道效应，金属中的电子并不完全局限于金属表面之内，电子云密度并不是在表面边界处突变为零。在金属表面以外，电子云密度呈指数衰减，衰减长度约为1nm。用一个极细的、只有原子线度的金属针尖作为探针，将它与被研究物质的表面作为两个电极，当样品表面与针尖非常靠近(距离＜ 1nm)时，两者的电子云略有重叠，在两极间加上电压U_b，在电场作用下电子就会穿过两个电极之间的势垒，通过电子云的狭窄通道流动，从一极流向另一极，形成隧道电流I。隧道电流 I 对针尖与样品表面之间的距离极为敏感，当针尖在样品表面上方扫描时，即使其表面只有原子尺度的起伏，也将通过其隧道电流显示出来。借助于电子仪器和计算机，在屏幕上即显示出样品的表面形貌。

例 26: 一粒子在一维无限深势阱中运动，其波函数为：

$$\psi_n=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{n\pi x}{a}),\quad (0\le x\le a)$$

求：1) 当 $n=2$ 时，粒子出现概率最大的位置和粒子出现概率最小的位置；

2) 当 $n=1$ 时，在区间(0～a/4)发现粒子的概率是多少？

解： 1）$n=2$时，波函数为：

$$\psi_2=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{2\pi x}{a}),\quad (0\le x\le a)$$

概率密度函数：

$$w(x)=|\psi_2|^2=\frac{2}{a}\sin^2(\frac{2\pi x}{a}),\quad (0\le x\le a)$$

$$\therefore 当\quad \frac{2\pi x}{a}=(2k+1)\frac{\pi}{2}\quad 有极大值,\ \Rightarrow x=(2k+1)\frac{a}{4},\qquad 0\le x\le a$$

粒子出现概率最大的位置：

$$x=\frac{a}{4},\quad \frac{3a}{4}$$

例 26: 一粒子在一维无限深势阱中运动，其波函数为：

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{n\pi x}{a}), \quad (0 \le x \le a)$$

求：1) 当 n=2 时，粒子出现概率最大的位置和粒子出现概率最小的位置；

2) 当 n=1 时，在区间(0～a/4)发现粒子的概率是多少？

解： 1）n=2时，波函数为：$\psi_2 = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{2\pi x}{a}), \quad (0 \le x \le a)$

概率密度函数：$w(x) = |\psi_2|^2 = \frac{2}{a}\sin^2(\frac{2\pi x}{a}), \quad (0 \le x \le a)$

$\therefore$ 当 $\frac{2\pi x}{a} = k\pi$ 有极小值, $\Rightarrow x = k\frac{a}{2}, \quad 0 \le x \le a$

粒子出现概率最小的位置：$x = 0, \quad \frac{a}{2}, \quad a$

例 26: 一粒子在一维无限深势阱中运动，其波函数为：

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{n\pi x}{a}), \quad (0 \le x \le a)$$

求：1) 当 $n=2$ 时，粒子出现概率最大的位置和粒子出现概率最小的位置；

2) 当 $n=1$ 时，在区间 $(0 \sim a/4)$ 发现粒子的概率是多少？

解： 2）

$n=1$时，波函数为： $\psi_1 = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{\pi x}{a}), \quad (0 \le x \le a)$

概率密度函数： $w(x) = |\psi_1|^2 = \frac{2}{a}\sin^2(\frac{\pi x}{a}), \quad (0 \le x \le a)$

$$\Rightarrow W = \int_0^{\frac{a}{4}} |\psi_1|^2 dx = \int_0^{\frac{a}{4}} \frac{2}{a}\sin^2(\frac{\pi x}{a})dx = \int_0^{\frac{a}{4}} \frac{2}{a}\cdot\frac{1}{2}(1-\cos\frac{2\pi x}{a})dx$$

$$\Rightarrow W = \frac{1}{a}(x - \frac{a}{2\pi}\sin\frac{2\pi x}{a})\Big|_0^{\frac{a}{4}} = \frac{1}{4} - \frac{1}{2\pi} = 9.1\%$$

例 27: 一粒子在宽度为a的一维无限深势阱中运动，其波函数为：

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{n\pi x}{a}), \quad (0 \le x \le a)$$

求：1)在区间(0～a/4)粒子出现的概率，并对$n=1$和 $n \to \infty$ ，的情况算出概率值；

2)在哪些量子态上（n），$a/4$处的概率密度最大？

解： 1）波函数为: $\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{n\pi x}{a}), \quad (0 \le x \le a)$

概率密度函数： $w_n(x) = |\psi_n|^2 = \frac{2}{a}\sin^2(\frac{n\pi x}{a}), \quad (0 \le x \le a)$

$$\Rightarrow W = \int_0^{\frac{a}{4}} |\psi_n|^2 dx = \int_0^{\frac{a}{4}} \frac{2}{a}\sin^2(\frac{n\pi x}{a})dx = \int_0^{\frac{a}{4}} \frac{2}{a}\cdot\frac{1}{2}(1-\cos\frac{2n\pi x}{a})dx$$

$$\Rightarrow W = \frac{1}{a}(x - \frac{a}{2n\pi}\sin\frac{2n\pi x}{a})\Big|_0^{\frac{a}{4}} = \frac{1}{4} - \frac{1}{2n\pi}\sin\frac{n\pi}{2} \Rightarrow \begin{cases} n=1, & W = \frac{1}{4} - \frac{1}{2\pi} = 9.1\% \\ n \to \infty, & W = \frac{1}{4} = 25\% \end{cases}$$

例 27: 一粒子在宽度为*a*的一维无限深势阱中运动，其波函数为：

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{n\pi x}{a}), \quad (0 \le x \le a)$$

求：1)在区间(0～a/4)粒子出现的概率，并对n=1和 $n \to \infty$ ，的情况算出概率值；

2)在哪些量子态上（n），a/4处的概率密度最大？

解： 2） 概率密度函数： $w_n(x) = |\psi_n|^2 = \frac{2}{a}\sin^2(\frac{n\pi x}{a}), \quad (0 \le x \le a)$

$x = \frac{a}{4}$处， $w_n(\frac{a}{4}) = \frac{2}{a}\sin^2(\frac{n\pi}{4})$

最大值有： $\sin^2(\frac{n\pi}{4}) = 1, \quad w_n(\frac{a}{4})_{\max} = \frac{2}{a}$

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

$$\Rightarrow n = 4k + 2 \qquad n = 2, \quad 6, \quad 10, \quad \cdots,$$

第十五章 量子物理

15- 9 氢原子的量子理论简介

知识点：

三条量子化条件及其对应的三个量子数

一、氢原子的薛定谔方程 Schrödinger Equation of Hydrogen

氢原子是自然界中最简单的原子系统，用薛定谔方程求解氢原子中电子的能级和本征波函数，是量子力学创立初期最令人信服的成就。

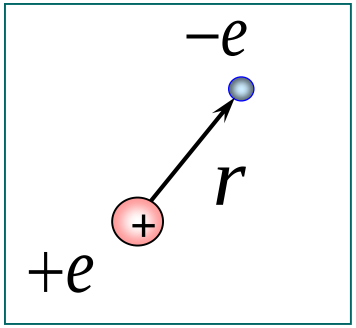
由于求解过程比较复杂，下面只介绍求解的思路和步骤，列出结果并讨论物理意义。

在氢原子中可近似认为质子静止而电子运动，因此电子的能量就代表整个氢原子的能量。

电子受质子的库仑力作用，势能函数为:

（取无限远处为势能零点）

$$E_p = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$



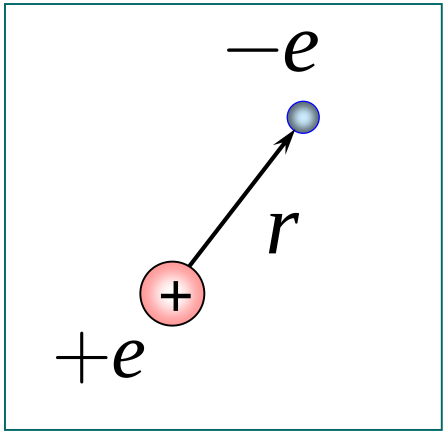
一、氢原子的薛定谔方程 Schrödinger Equation of Hydrogen

一般定态薛定谔方程:

$$\boxed{\nabla^2\psi(x,y,z)+\frac{2m}{\hbar^2}(E-E_P)\psi(x,y,z)=0}$$

电子的势能函数:

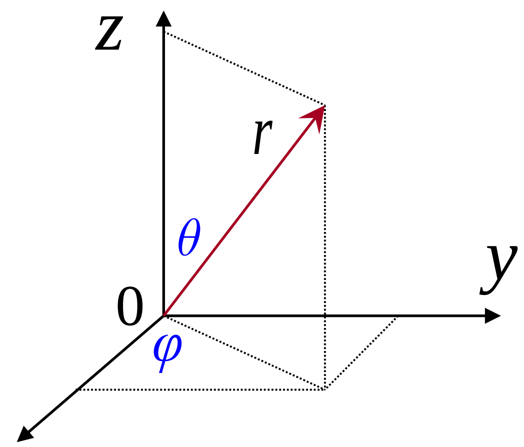
$$E_p=-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$



定态薛定谔方程: $\nabla^2\psi+\frac{2m}{\hbar^2}(E+\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r})\psi=0$

采用球极坐标:

$$\begin{cases} x = r\sin\theta\cos\varphi \\ y = r\sin\theta\sin\varphi \\ z = r\cos\theta \end{cases}$$



$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r}) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

定态薛定谔方程:

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\frac{\partial\psi}{\partial\theta}) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r})\psi = 0$$

分离变量法求解, 设： $\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$

一、氢原子的薛定谔方程 Schrödinger Equation of Hydrogen

$$\begin{cases}\dfrac{1}{R}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\dfrac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\right)+\dfrac{2mr^2}{\hbar}\left(E+\dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)=l(l+1)\\ \dfrac{m_l{}^2}{\sin^2\theta}-\dfrac{1}{\Theta\sin\theta}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\dfrac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\theta}\right)=l(l+1)\\ \dfrac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}\varphi^2}+m_l{}^2\Phi=0\end{cases}$$

式中：m_l 和 l 为引入的常数，解此三个方程，并考虑到波函数应满足的条件，即可得到波函数 $\psi(r,\theta,\varphi)=R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ 。

（不深究繁琐的求解过程，着重讨论所得出的几点重要结论）

二、量子化条件和量子数（以下重点）

（量子力学中的氢原子问题的严格解）

（不深究繁琐的求解过程，着重讨论所得出的几点重要结论）

1、能量量子化和主量子数 Principal Quantum Number

$$\boxed{E_n = -\left(\frac{me^4}{8\varepsilon_0{}^2h^2}\right)\cdot\frac{1}{n^2},\quad n=1,2,3,\quad\cdots,}$$

n： 主量子数

$$E_1 = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2h^2} = -13.6\mathrm{eV}$$

$$E_n = \frac{1}{n^2}E_1 = -\frac{1}{n^2}\cdot 13.6\mathrm{eV},\quad n=1,2,3,\cdots,$$

（与玻尔理论的结果一致，但这里是量子力学的求解结果，不是人为的假设）

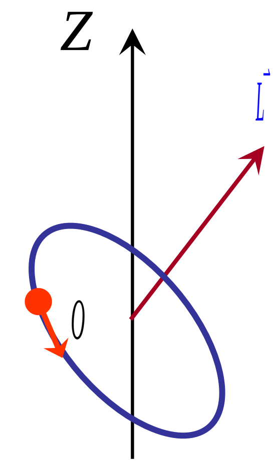
二、量子化条件和量子数（以下重点）

（量子力学中的氢原子问题的严格解）

（不深究繁琐的求解过程，着重讨论所得出的几点重要结论）

2、角动量量子化和角量子数 Angular Quantum Number

电子绕核运动的(轨道)角动量大小可能值：



$$L = \sqrt{l(l+1)}\,\frac{h}{2\pi} = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar$$

$$l = 0, 1, 2, 3, \cdots, n-1$$

l：(轨道)角（副）量子数

(与玻尔的假设 $L = n\dfrac{h}{2\pi}$ 有所区别，

实验证明 ，量子力学的结果更为准确。）

二、量子化条件和量子数（以下重点）

（量子力学中的氢原子问题的严格解）

（不深究繁琐的求解过程，着重讨论所得出的几点重要结论）

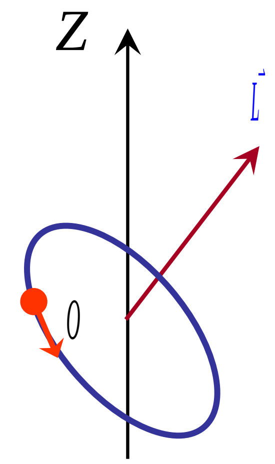
2、角动量量子化和角量子数 Angular Quantum Number

电子绕核运动的(轨道)角动量大小可能值：

$$L=\sqrt{l(l+1)}\,\frac{h}{2\pi}=\sqrt{l(l+1)}\,\hbar$$

$$l=0,1,2,3,\cdots,n-1$$

l：(轨道)角（副）量子数



例如，$n=3$ 时，$l=0，1，2$

$$l=0,\quad L=0$$

$$l=1,\quad L=\sqrt{2}\,\hbar$$

$$l=2,\quad L=\sqrt{6}\,\hbar$$

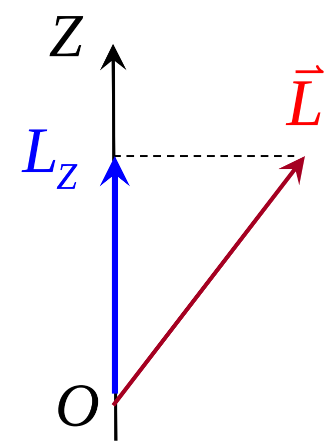
二、量子化条件和量子数（以下重点）

（量子力学中的氢原子问题的严格解）

（不深究繁琐的求解过程，着重讨论所得出的几点重要结论）

3、角动量空间量子化和磁量子数 Magnetic Quantum Number

当置于外磁场中，角动量 L 在空间取向只能取一些特定的方向，L 在外磁场方向（Z 轴）的投影 L_z 也满足量子化条件，其可能取值：



$$L_z = m_l \hbar, \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots, \pm l$$

m_l：(轨道) 磁量子数　（表征轨道角动量的空间取向）

共有 $(2l+1)$ 个可能取值

3、角动量空间量子化和磁量子数 Magnetic Quantum Number

角动量 L 在外磁场方向（Z 轴）的投影：

$$\boxed{L_z = m_l \hbar, \quad m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots, \pm l}$$

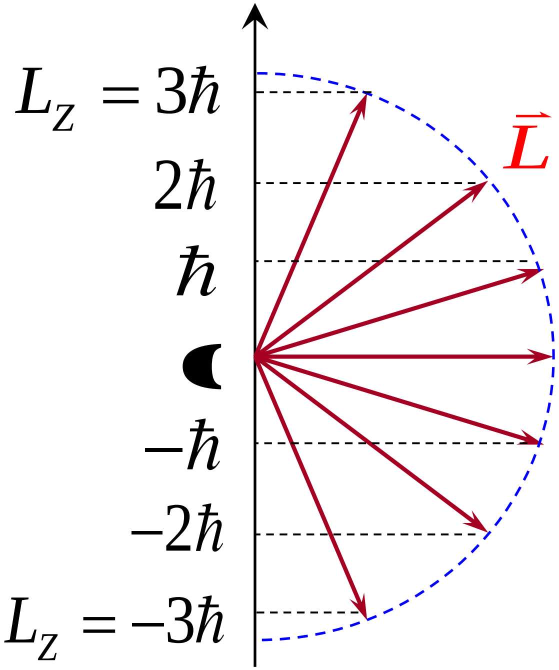
m_l：(轨道) 磁量子数

例如，$l=3$ 时，

$$l = 3, \quad L = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar = \sqrt{12}\,\hbar$$

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$$

$$L_Z = 0, \pm\hbar, \pm 2\hbar, \pm 3\hbar$$



例 28: 在描述氢原子中电子状态的量子数中，

1）当 n=5 时，l 的可能值是多少？

2）当 l =5 是，m_l 的可能值为多少？

3）当 l =4 时，n 的最小可能值是多少？

4）当 n =4、l =3 时，角动量与z轴的夹角的可能值为多少？

解： 1） $l = 0, 1, 2, 3, \cdots, n-1 \Rightarrow l = 0, 1, 2, 3, 4$

2） $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots, \pm l \Rightarrow m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \pm 4, \pm 5$

3） 因为：$l = 0, 1, 2, 3, \cdots, n-1 \Rightarrow l \leq (n-1) \Rightarrow n \geq l+1 \Rightarrow n \geq 5$

4） n=4、l =3 时，

$$l = 3, \quad L = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar = \sqrt{12}\,\hbar$$

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \quad L_Z = 0, \pm \hbar, \pm 2\hbar, \pm 3\hbar$$

$$\cos\theta = \frac{L_z}{L} = 0, \pm\frac{1}{\sqrt{12}}, \pm\frac{2}{\sqrt{12}}, \pm\frac{3}{\sqrt{12}}$$

$$\theta = 30^0, 55^0, 73^0, 90^0, 107^0, 125^0, 150^0$$