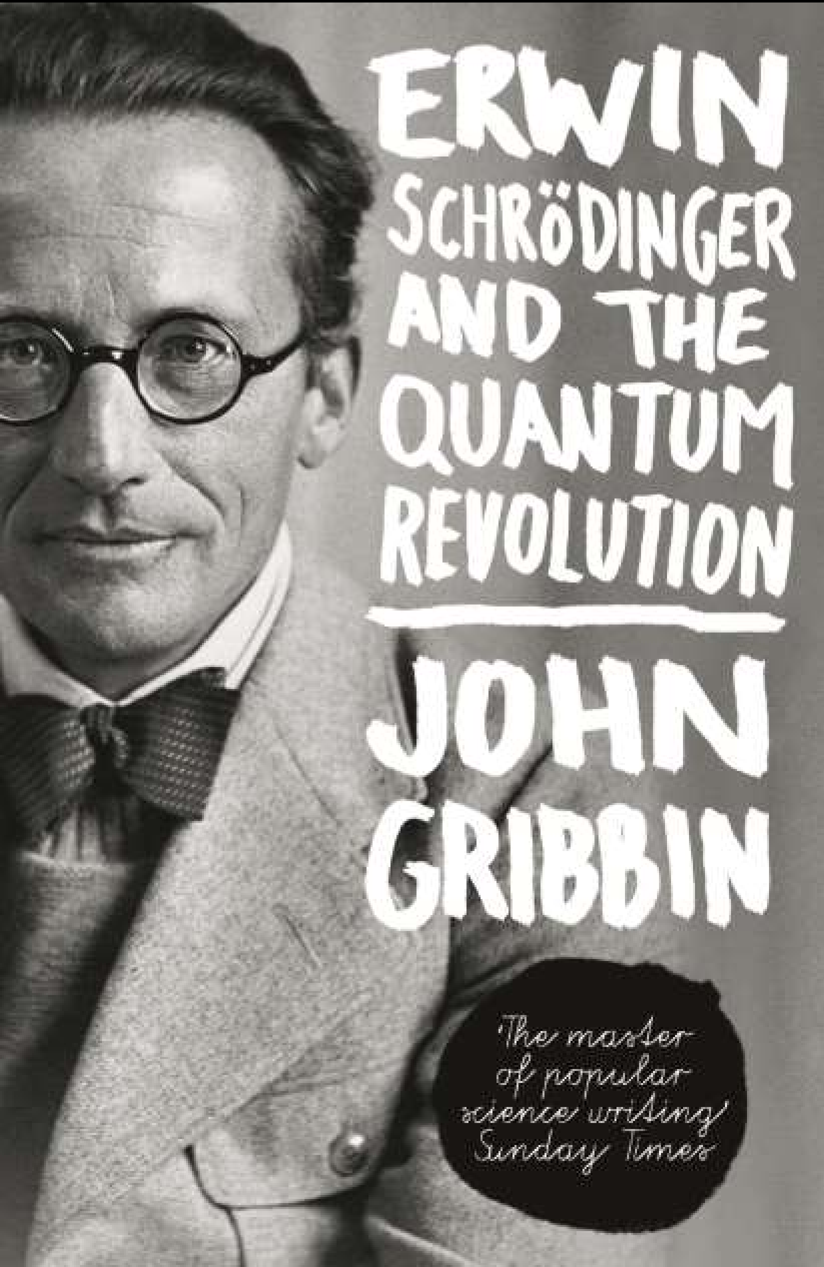
23.3 薛定谔方程应用举例

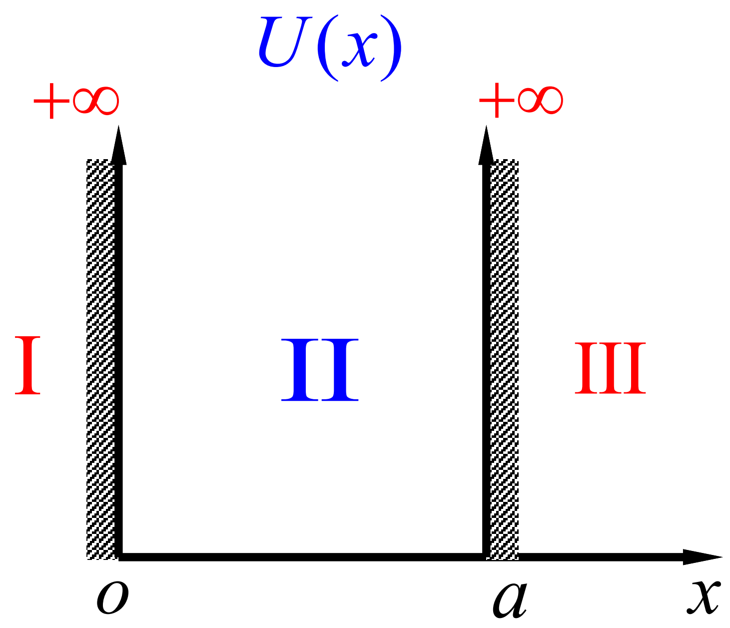


- ➢一维定态问题
  - □一维无限深势阱
  - □一维方势垒
  - □一维简谐振
- ➢粒子在中心力场的运动
  - □氢原子
  - □多电子原子

一维无限深势阱

设粒子的质量为***m***, 势能函数:

$$U(x)\begin{cases} 0 & 0<x<a \quad (\text{II区}) \\ \infty & (x\le 0, x\ge a) \quad (\text{I、III区}) \end{cases}$$



固体物理金属中自由电子的简化模型

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

I、III区， $\mathrm{U}(x)=\infty$， $F_{x=0,a}=-dU/dx=\infty$， $\psi(\mathrm{x})\equiv 0$

II区 $\mathrm{U}(x)=0$ $\quad \frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi=0$

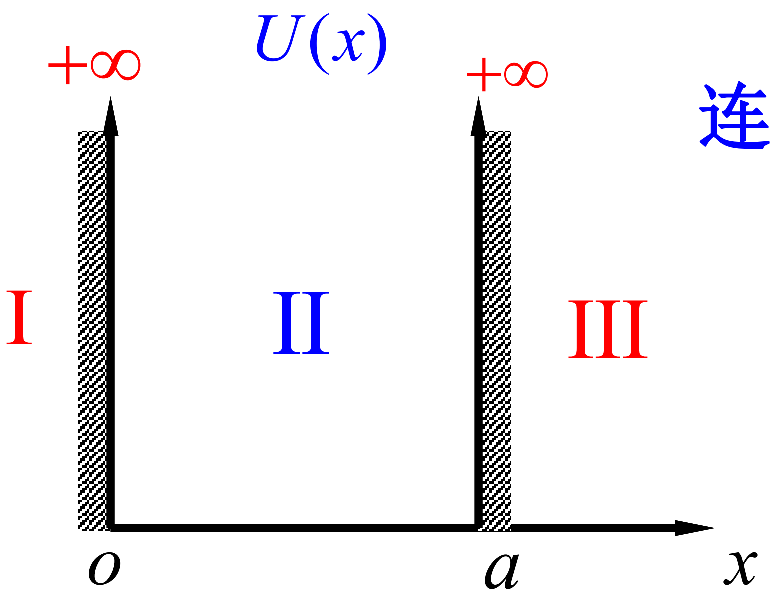
$$k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+k^2\psi=0$$

能级

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

如何确定φ？



连续性 $\begin{cases}\psi(0)=A\sin\varphi=0 \Rightarrow \varphi=0\\ \psi(a)=A\sin(ka)=0\end{cases}$

$\Rightarrow \quad ka=n\pi \quad n=1,2,3\ldots$

为什么n不从0开始？

$$k=\frac{n\pi}{a}$$

$$\psi_n(x)=A\sin(\frac{n\pi}{a}x)$$

$$k^2=\frac{2mE}{\hbar^2} \qquad \frac{n^2\pi^2}{a^2}=\frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\boxed{E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2} \qquad n=1,2,3\ldots$$

波函数

由归一化条件　　**如何确定常数A?** $\psi_n(x)=A\sin(\frac{n\pi}{a}x)$

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_n(x)|^2\,dx=\int_{-\infty}^{0}0dx+\int_0^a|\psi_n(x)|^2\,dx+\int_a^{\infty}0dx$$

$$=\int_0^a A^2\sin^2(\frac{n\pi}{a}x)dx=1 \Rightarrow A=\sqrt{\frac{2}{a}}$$

$$\psi_n(x)=\begin{cases}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{n\pi}{a}x) & 0<x<a \quad n=1,2,3\ldots\\ 0 & x\le 0, x\ge a\end{cases}$$

概率密度 $$P(x)=|\psi_n(x)|^2\begin{cases}\frac{2}{a}\sin^2(\frac{n\pi}{a}x) & 0<x<a \quad n=1,2,3\ldots\\ 0 & x\le 0, x\ge a\end{cases}$$

零点能

能级 $E_n = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2$ ➡ 基态n=0，E=0？

波函数 $\psi_n(x) = \sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin(\dfrac{n\pi}{a}x)$ ➡ n=0，ψ=0

基态 $E_1 = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$

零点能

零点能不等于零是量子力学中特有的，是微观粒子波粒二相性的表现，能量为零的“静止的”波是没有意义的，零点能是量子效应。

当m>>0，或a>>0，零点能→0，能级近似连续，回到经典物理情况。

能级 $E_n = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2$　　**波函数** $\psi_n(x) = \sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin(\dfrac{n\pi}{a}x)$

基态　$\mathrm{n}=1$　　$\mathrm{E}_1 = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$　　$\psi_1(x) = \sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{\pi x}{a}$

激发态　$\mathrm{n}=2$　　$\mathrm{E}_2 = 4\mathrm{E}_1$　　$\psi_2(x) = \sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{2\pi x}{a}$

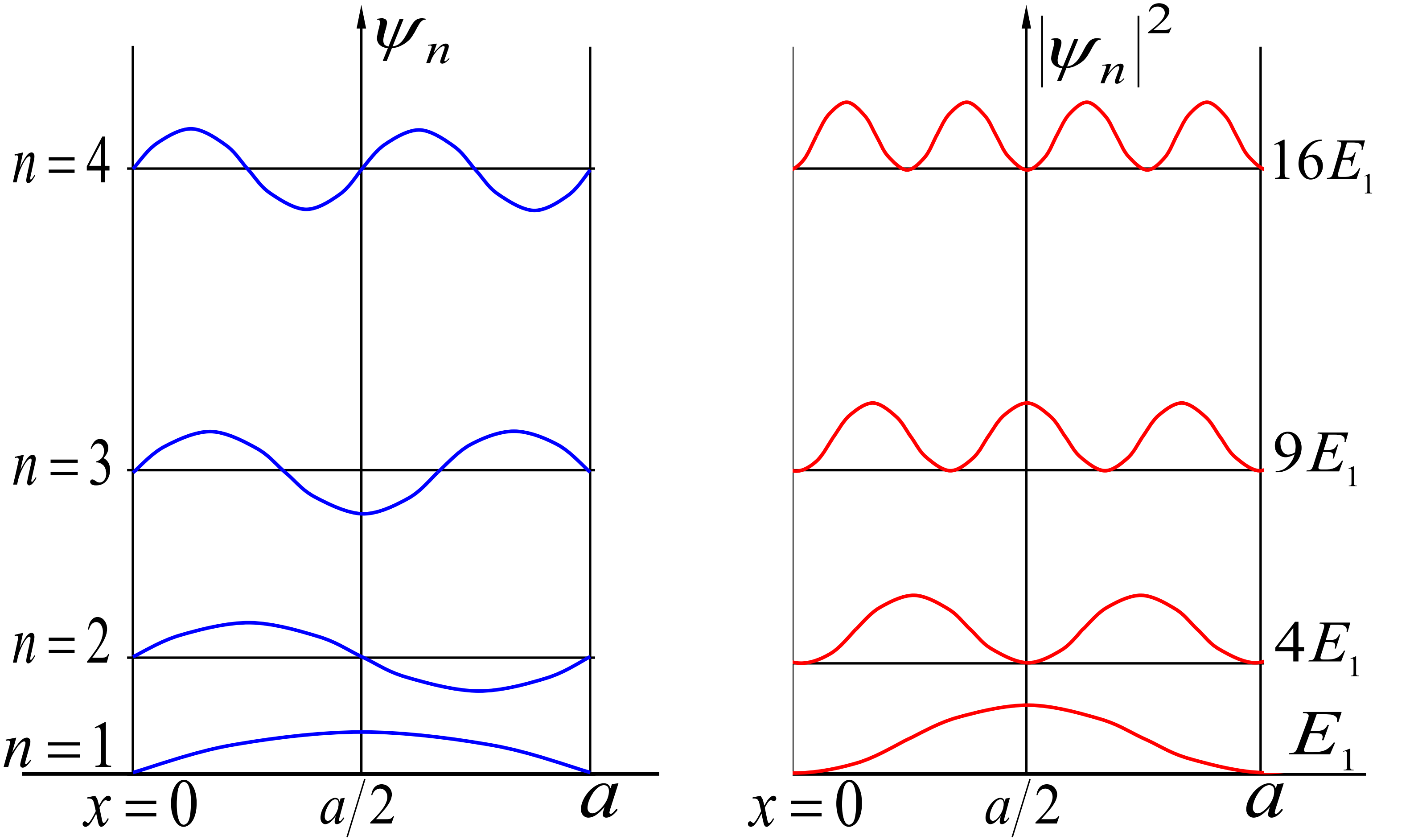
$\mathrm{n}=3$　　$\mathrm{E}_3 = 9\mathrm{E}_1$　　$\psi_3(x) = \sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{3\pi x}{a}$

$\vdots$　　$\vdots$　　$\vdots$

当量子数*n*很大时， 量子概率分布就接近经典分布

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

$$\left|\psi(x)\right|^2=\frac{2}{a}\sin^2\frac{n\pi}{a}x$$



例2

粒子在一维无限深势阱中运动，其波函数为

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

若粒子处于$n=1$状态，求在$0\sim\frac{1}{4}a$区间发现粒子的概率。

解：$\psi_1(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x}{a}$ 　概率密度 $|\psi_1(x)|^2=\frac{2}{a}\sin^2(\frac{\pi x}{a})$

在dx区间发现粒子概率 $dP=|\psi(x)|^2\,dx=\frac{2}{a}\sin^2(\frac{\pi x}{a})dx$

$0\sim\frac{1}{4}a$中的概率 $P=\int_0^{\frac{a}{4}}\frac{2}{a}\sin^2(\frac{\pi x}{a})dx=\frac{2}{\pi}[\frac{\frac{\pi}{2}x}{a}-\frac{1}{4}\sin\frac{2\pi x}{a}]_0^{\frac{a}{4}}$

$=0.091$

例3

试求在一维无限深势阱中n=1粒子概率密度的最大值的位置。

解：一维无限深势阱中n=1粒子的概率密度为

$$|\psi_1(x)|^2 = \tfrac{2}{a}\sin^2\tfrac{\pi}{a}x \qquad \psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}$$

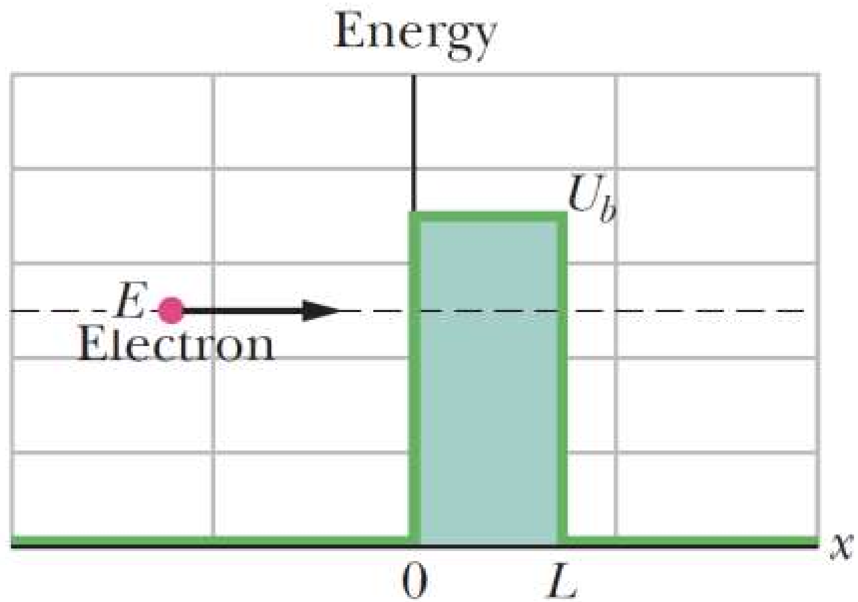
$$\frac{d|\psi_1(x)|^2}{dx} = \frac{4\pi}{a^2}\sin\frac{\pi}{a}x\cos\frac{\pi}{a}x = 0$$

因为粒子在阱内，则 $\sin\frac{\pi}{a}x \neq 0$ $\cos\frac{\pi}{a}x = 0$

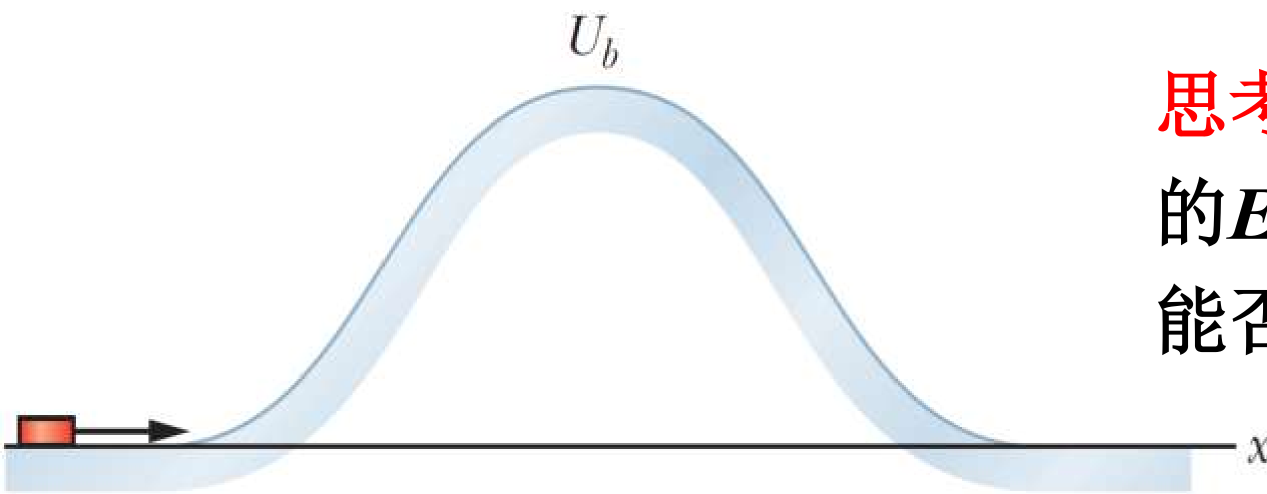
$\frac{\pi}{a}x = \frac{\pi}{2}$ 最大值得位置为 $x=\frac{a}{2}$

一维方势垒

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

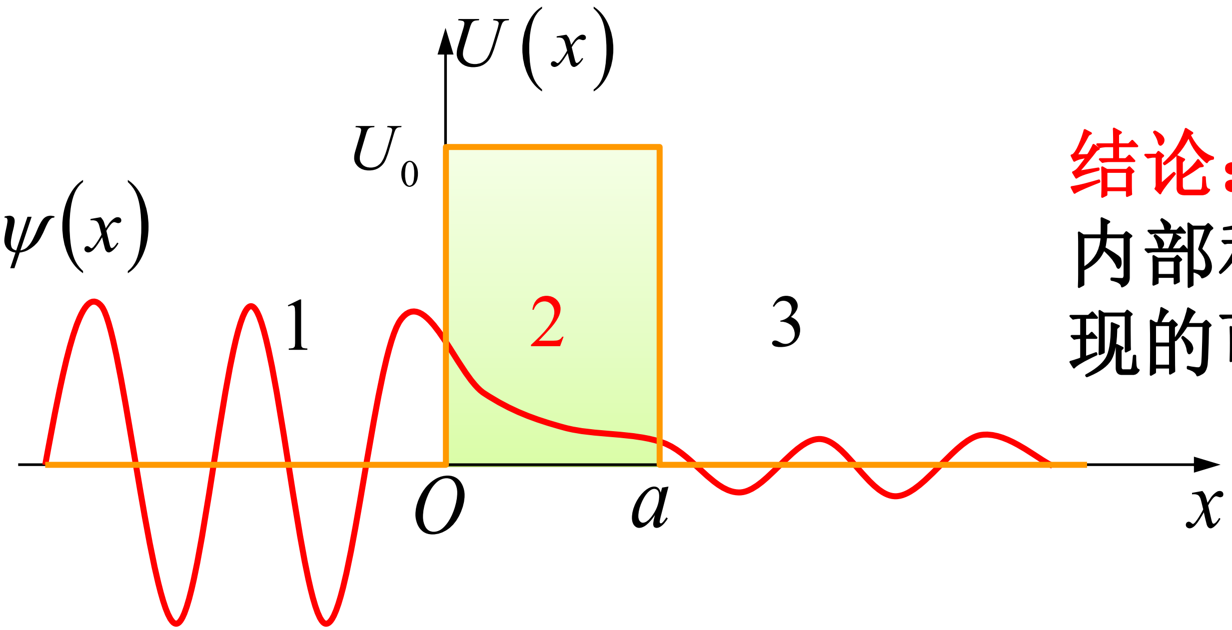


粒子的能量 $E<U_b$



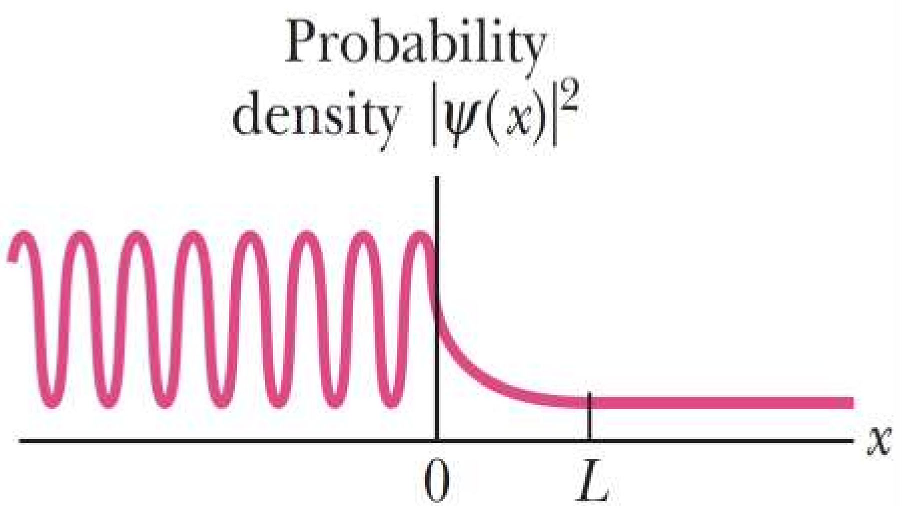
思考：若小车的$E<U_b$, 小车能否越过山坡？

隧道效应



结论：粒子在势垒内部和外部都有出现的可能。

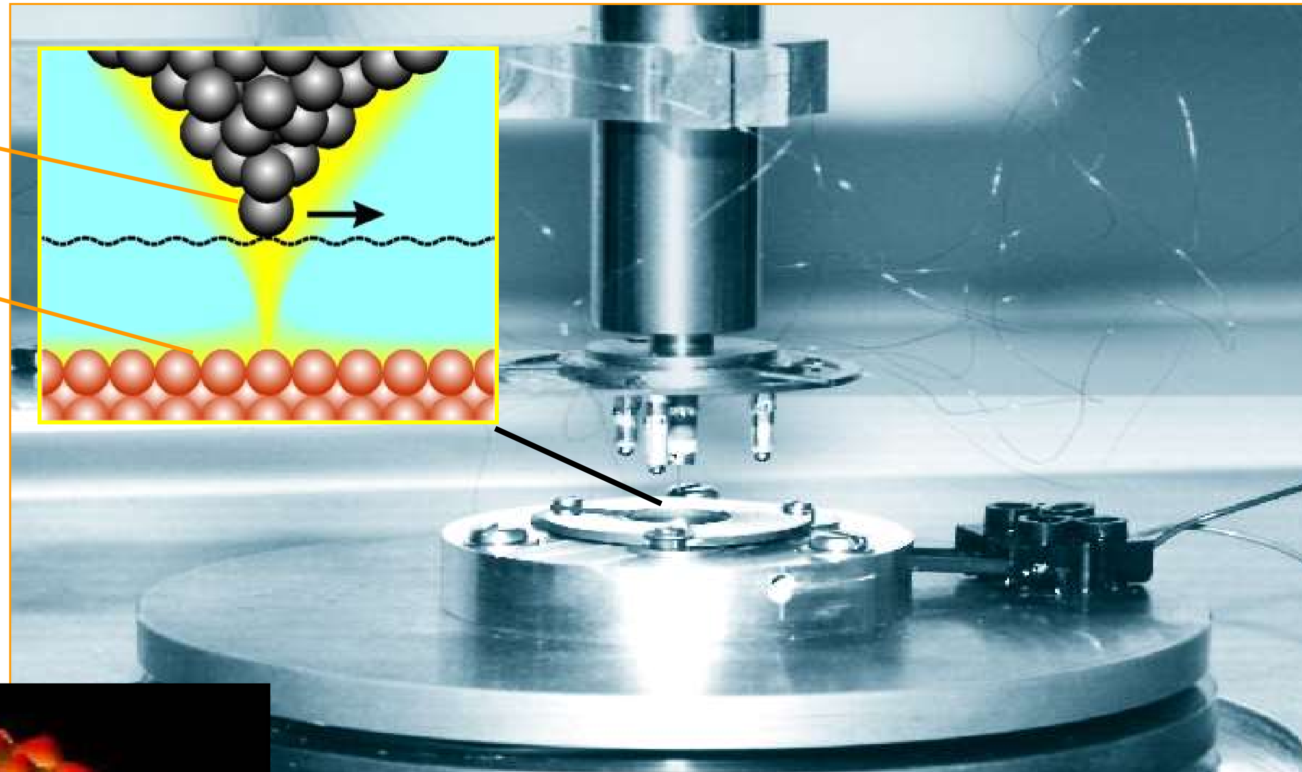
粒子的能量虽不足以超越势垒，但在势垒中似乎有一个隧道，能使少量粒子穿过而进入 $x>a$ 的区域，所以称为隧道效应 。

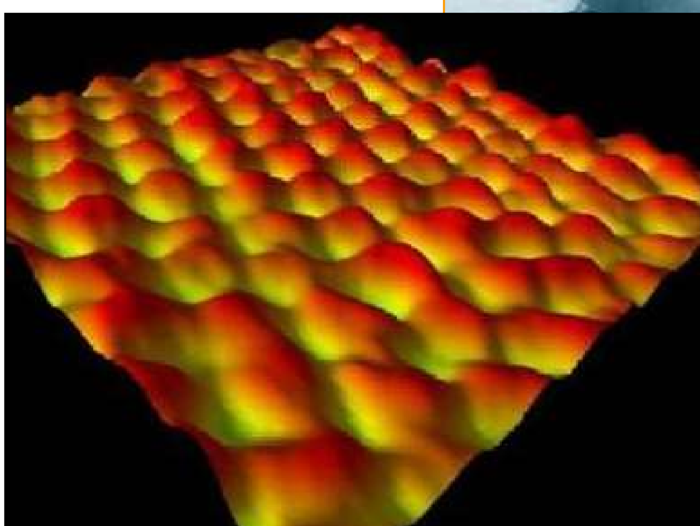


扫描隧道显微镜(STM)

探针

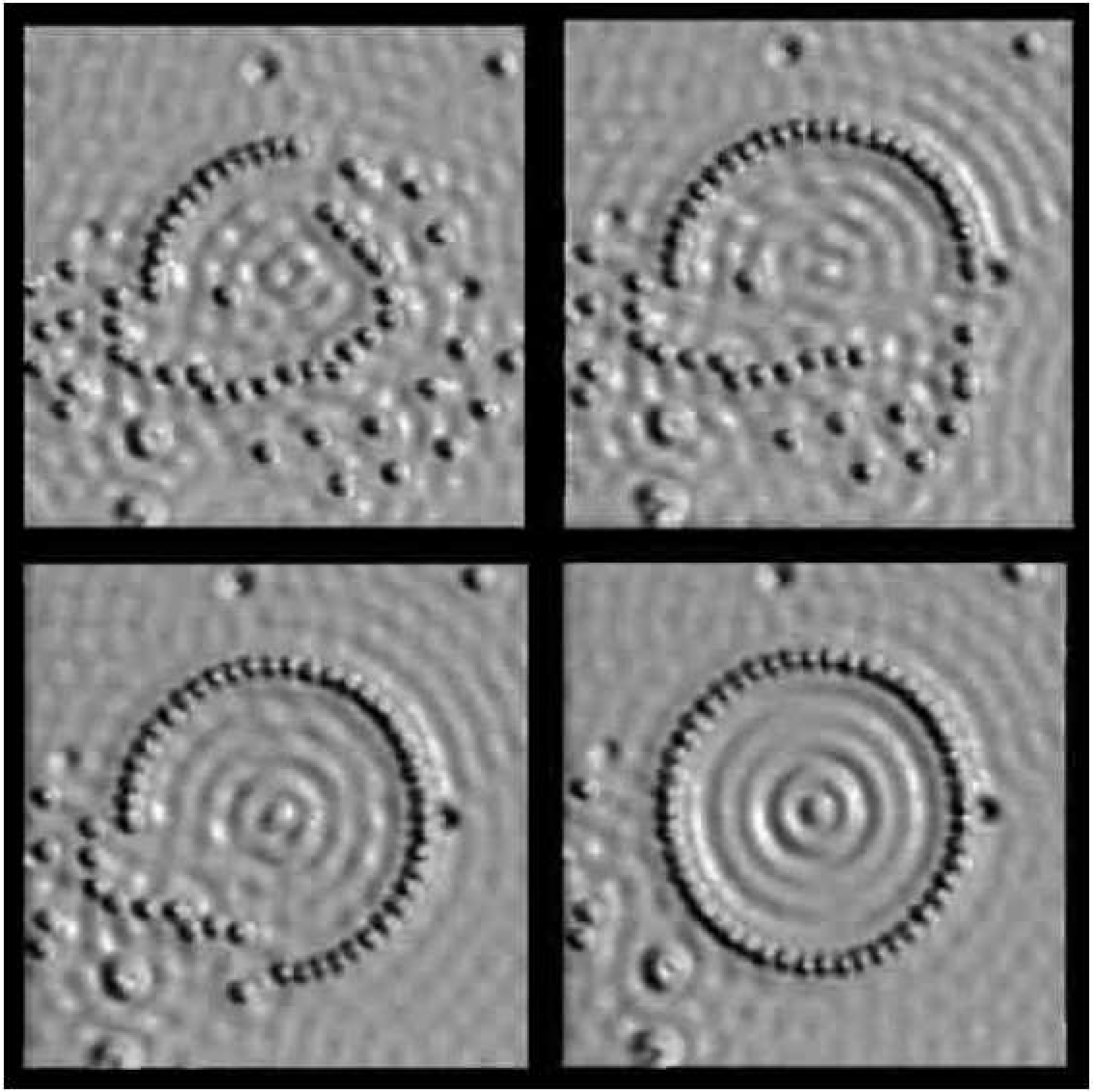
样品表面





样品与探针间空隙形成势垒，在针尖与样品间加上电压，由于隧道效应，样品表面电子会穿透势垒到达针尖，从而形成隧道电流。而隧道电流与空隙宽度有关（动画）。

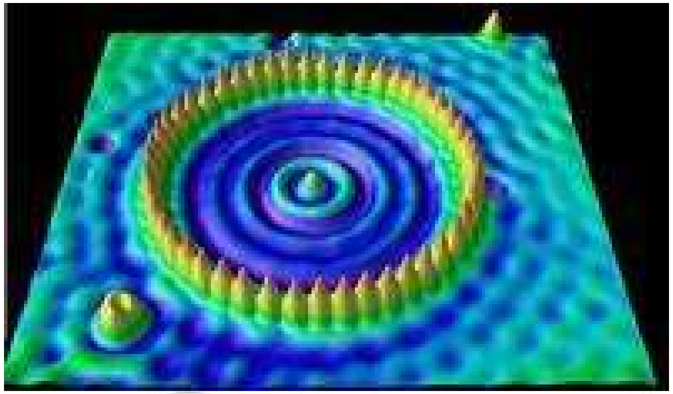
操作原子:量子围栏



(a)

(c)

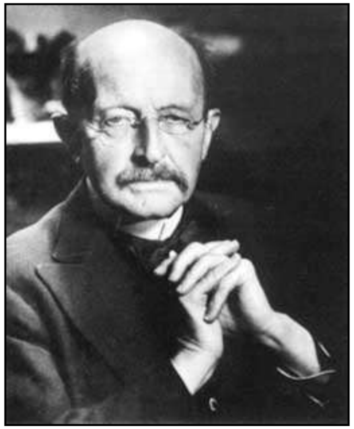
1993年5月, IBM研究中心的M.F.Crommie等人 用STM操纵铁原子,将它们在Cu(111)表面排成一个由48个原子组成的圆圈（视频）。



(d)

一维简谐振子

黑体辐射:普朗克“能量的量子化”假设:

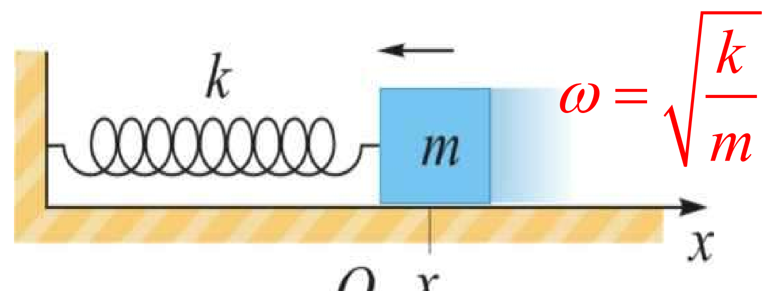


黑体中电子的振动可视为一维谐振子，它吸收或者发射电磁辐射能量时，其辐射能量是不连续的，只能取某一最小能量的整数倍。

能量子 $\varepsilon = h\nu$

□一维简谐振子的势函数

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



一维简谐振子的经典模型

相应的定态薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi=E\psi$$

➢满足方程的简谐振子能量

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

$$n = 0, 1, 2, \cdots$$

□基态能量

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \qquad n = 0$$

——零点能不为零

□相邻能级的间距

$$\boxed{\Delta E = \hbar\omega = h\upsilon}$$