大学物理

University Physics

华 中 科 技 大 学 物 理 学 院

王宁

ningwang@hust.edu.cn

上节回顾：量子力学基础

第一节 微观粒子的波粒二象性

所有的实物粒子都具有波粒二象性

$$\boxed{E = h\nu \quad p = \frac{h}{\lambda}}$$

→ 德布罗意关系

电子的波粒二象性：电子衍射实验、电子的双缝干涉实验

第二节 微观粒子的状态描述 波函数

$$\boxed{\Psi(\vec{r},t) = \psi_0 e^{-i\frac{2\pi}{h}(Et-\vec{p}\cdot\vec{r})}}$$

——自由粒子德布罗意波的波函数

某时刻，在空间某地点，粒子出现的几率，正比于该时刻，该地点的波函数的模的平方。

$$\boxed{W \propto |\Psi|^2 = \Psi\Psi^*}$$

——物质波是几率波

量子力学的基本假设：

假设一：一个系统的状态可以用一个波函数完全描述。该波函数包含了该系统处于该状态时的所有物理信息。

假设二：量子态叠加原理

如果ψ_1和ψ_2是系统的两个可能的状态，那么它们的线性叠加$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$也是系统的一个可能状态。$c_1$和$c_2$是任意复数。

第三节 不确定原理

$$\boxed{\Delta x \cdot \Delta p_x \geq h} \qquad \boxed{\Delta E \cdot \Delta t \geq h}$$

不确定关系是自然界的客观规律，不是测量技术和主观能力的问题。是微观粒子的波粒二象性的必然表现。

例1：对速度为$v=10^5 m/s$的电子射线束（β射线），若测量速度的精确度为0.1%，求：电子位置的不确定量。

解： 由题意可知

$$\frac{\Delta v}{v}=0.1\% \Rightarrow \Delta v=0.1\% v=100m/s$$

根据不确定关系

$$\Delta x\Delta p=\Delta x m\Delta v\geq h$$

$$\Delta x\geq\frac{h}{m\Delta v}=\frac{6.63\times10^{-34}}{9.1\times10^{-31}\times100}=7.3\mu m$$

例2：原子的线度是$10^{-10}m$，用不确定关系讨论原子中电子速度的不确定量。

解： 原子中电子位置的不确定量为 $\Delta x = 10^{-10}m$

根据不确定关系，动量的不确定量为 $\Delta p = m\Delta v \geq \dfrac{h}{\Delta x}$

$$\Delta v \geq \frac{h}{m\Delta x} = 7.3 \times 10^{6}m/s$$

根据经典电磁理论

$$m\frac{v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} \Rightarrow v = \frac{e}{\sqrt{4\pi\varepsilon_0 mr}} \approx 1.6 \times 10^{6}m/s$$

经典理论中的核外电子速度与其不确定量在同一数量级上，确定性的速度概念已经失去了意义。同样的，也不能认为核外电子的轨道是一个确定的椭圆。

例3：设子弹的质量为$0.01kg$，枪口的直径为$0.5cm$，试用测不准关系计算子弹射出枪口的横向速度。

解： 子弹位置的不确定量为 $\Delta x = 0.005m$

根据不确定关系，子弹横向速度的不确定量为

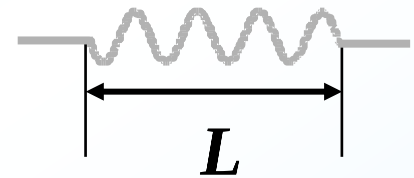
$$\Delta v \geq \frac{h}{m\Delta x} = 1.3 \times 10^{-29} m/s$$

微观粒子的波粒二象性不会影响宏观物体。处于宏观尺寸的物体，其相对的不确定度非常小。

例4. 用不确定关系，证明光波列长度 $L=\dfrac{\lambda^2}{4\pi\Delta\lambda}$

证明： **光波列长度即为光子坐标的不确定量：** $\Delta x = L$

$$\Delta p_x \Delta x = \Delta p_x L \geq \frac{\hbar}{2} = \frac{h}{4\pi}$$

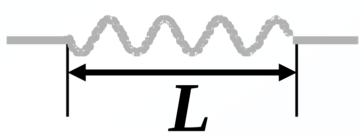


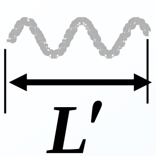
$$\because\ p_x = \frac{h}{\lambda} \longrightarrow \Delta p_x = -\frac{h}{\lambda^2}\Delta\lambda$$

相干长度

$$L \geq \frac{h}{4\pi\Delta p_x} = \frac{\lambda^2}{4\pi\Delta\lambda} \qquad \therefore L = \frac{\lambda^2}{4\pi\Delta\lambda} \approx \frac{\lambda^2}{\Delta\lambda}$$

讨论：





哪个图中光子的动量准确度高?

上图!

例5. 关于不确定关系： $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar/2$

A、粒子的动量不可能确定； B、粒子的坐标不可能确定；

C、粒子的动量和坐标不可能同时确定；

D、不确定关系不仅适用于电子和光子，也适用于其它粒子。

例6. 波长$\lambda = 500\ nm$的光沿x轴正向传播，若光的波长的不确定量 $\Delta\lambda = 10^{-4}\ nm$，利用不确定关系式$\Delta x \Delta p \geq h$, 可得光子的x坐标的不确定量至少为：

A、25 cm B、50 cm

C、250 cm D、500 cm

Werner Heisenberg
1901-1976
1932 Nobel Prize
矩阵力学

Erwin Schrödinger
1887-1961
1933 Nobel Prize
波动力学

Paul A. M. Dirac
1887-1961
1933 Nobel Prize
相对论量子力学

量子力学
两个等价的理论
(1923-1927)

描述高速运动的粒子的波动方程
(1928)

第四节 薛定谔方程

Schrödinger Equation

在量子力学中，微观粒子的运动状态由**波函数**来描写；状态随时间的变化遵循着一定的规律。

1926年由薛定谔提出：**薛定谔方程**

薛定谔方程是量子力学的基本动力学方程，作用和牛顿运动方程在经典力学中的作用是一样的。

同牛顿运动方程一样，薛定谔方程也不能由其它的基本原理推导得到，而只能是一个基本的假设，其正确性也只能靠实验来检验。

第四节 薛定谔方程

一 自由粒子的薛定谔方程

考虑自由粒子沿x轴运动 $p = mv_x \quad E = \dfrac{p^2}{2m} \qquad (v_x \ll c)$

粒子的波函数为： $\Psi(x,t) = \psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)}$

$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) &= -\frac{p^2}{\hbar^2}\Psi(x,t) \\ \frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) &= -i\frac{E}{\hbar}\Psi(x,t) \end{aligned}\right\} \quad \boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t)}$$

一维自由粒子的薛定谔方程

注意与一维波动方程的差别 $\dfrac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \dfrac{1}{u^2}\dfrac{\partial^2 y}{\partial t^2}$

一维自由粒子的薛定谔方程

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t)}$$

根据粒子波函数的形式：

$$\Psi(x,t)=\psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)}$$

算符(operator)——对波函数的运算、变换或操作

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)=\boldsymbol{E}\Psi(x,t) \qquad E=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

能量算符

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,t)=\boldsymbol{p}\Psi(x,t) \qquad p_x=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

***x*方向动量算符**

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t)=\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2\Psi(x,t)=\frac{p_x^2}{2m}\Psi(x,t)$$

$$E_k=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

动能算符

对于自由粒子：$E=E_k$

考虑在三维空间中运动的自由粒子

其波函数为： $\Psi(\vec{\boldsymbol{r}},t)=\psi_0 e^{-i\frac{2\pi}{h}(Et-\vec{\boldsymbol{p}}\cdot\vec{\boldsymbol{r}})}$

通过类似的变换

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Rightarrow \nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{\boldsymbol{r}},t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\vec{\boldsymbol{r}},t)}$$

三维空间自由粒子的薛定谔方程

同样可以从能量的角度去理解三维空间自由粒子的薛定谔方程。

$$E=E_k$$

$\vec{\boldsymbol{p}}=-i\hbar\nabla$ 动量算符

能量从数值变成了算符

二 在势场中粒子的薛定谔方程

若粒子处在势场中而非自由粒子 $U(\vec{r},t)$

例如：库仑势场，万有引力场，范德瓦尔斯势场，……

粒子的波函数会变得比较复杂，但波函数适用的方程满足：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t)=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\vec{r},t)\right]\Psi(\vec{r},t)$$

---薛定谔方程

将动能替换成了粒子的总能量，即动能加上势能。

$$E=E_k+E_p$$

1). 薛定谔方程不是来自理论推导，它的正确性来自于实践；

2). 薛定谔方程只对非相对论的粒子成立。

三 定态薛定谔方程

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{\boldsymbol{r}},t)=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\vec{\boldsymbol{r}},t)\right]\Psi(\vec{\boldsymbol{r}},t)}$$

若粒子所处的势场不随时间变化 $U(\vec{\boldsymbol{r}},t)\to U(\vec{\boldsymbol{r}})$

根据分离变量法，波函数可写成 $\Psi(\vec{\boldsymbol{r}},t)=\psi(\vec{\boldsymbol{r}})\varphi(t)$

$$i\hbar\frac{\partial\varphi(t)}{\partial t}\psi(\vec{\boldsymbol{r}})=\varphi(t)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\vec{\boldsymbol{r}})\right]\psi(\vec{\boldsymbol{r}})$$

$$i\hbar\frac{1}{\varphi(t)}\frac{\partial\varphi(t)}{\partial t}=\frac{1}{\psi(\vec{\boldsymbol{r}})}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\vec{\boldsymbol{r}})\right]\psi(\vec{\boldsymbol{r}})=\boldsymbol{E}$$

***E*为待定常数**

$$i\hbar\frac{\partial\varphi(t)}{\partial t}=E\varphi(t)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\vec{\boldsymbol{r}})\right]\psi(\vec{\boldsymbol{r}})=E\psi(\vec{\boldsymbol{r}})$$ ----定态薛定谔方程

此方程的解为：

$$\varphi(t)=Ce^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$ E具有能量的量纲，数值确定

$$\Psi(\vec{\boldsymbol{r}},t)=\psi(\vec{\boldsymbol{r}})e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$ $\psi(\vec{\boldsymbol{r}})$称为定态波函数

粒子的位置概率密度：

$$\rho(\vec{\boldsymbol{r}},t)=|\Psi(\vec{\boldsymbol{r}},t)|^2=|\psi(\vec{\boldsymbol{r}})|^2$$

空间概率密度和能量与时间无关，这样的态被称为定态。

$$\boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{\boldsymbol{r}})\right]\psi(\vec{\boldsymbol{r}}) = E\psi(\vec{\boldsymbol{r}})} \longrightarrow \Psi(\vec{\boldsymbol{r}},t) = \psi(\vec{\boldsymbol{r}})e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

验证三维空间中自由粒子的波函数 $U(\vec{\boldsymbol{r}}) = 0$

可在三维空间中利用分离变量求解此方程

$$\psi(\vec{\boldsymbol{r}}) = \psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\boldsymbol{p}}\cdot\vec{\boldsymbol{r}}} \qquad \vec{\boldsymbol{p}}\cdot\vec{\boldsymbol{r}} = p_x x + p_y y + p_z z$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(\vec{\boldsymbol{r}}) = \left(i\frac{p_x}{\hbar}\right)^2\psi(\vec{\boldsymbol{r}}) = -\frac{p_x^2}{\hbar^2}\psi(\vec{\boldsymbol{r}})$$

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2}\psi(\vec{\boldsymbol{r}}) = -\frac{p_y^2}{\hbar^2}\psi(\vec{\boldsymbol{r}}) \qquad \frac{\partial^2}{\partial z^2}\psi(\vec{\boldsymbol{r}}) = -\frac{p_z^2}{\hbar^2}\psi(\vec{\boldsymbol{r}})$$

$$\nabla^2\psi(\vec{\boldsymbol{r}}) = -\left(\frac{p_x^2}{\hbar^2} + \frac{p_y^2}{\hbar^2} + \frac{p_z^2}{\hbar^2}\right)\psi(\vec{\boldsymbol{r}}) = -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi(\vec{\boldsymbol{r}})$$

$$\boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{\boldsymbol{r}})\right]\psi(\vec{\boldsymbol{r}}) = E\psi(\vec{\boldsymbol{r}})} \Longrightarrow \Psi(\vec{\boldsymbol{r}},t) = \psi(\vec{\boldsymbol{r}})e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{\boldsymbol{r}}) = \frac{p^2}{2m}\psi(\vec{\boldsymbol{r}}) = E_k\psi(\vec{\boldsymbol{r}})$$

$$E_k = \frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$$ 表征粒子的动能（动能算符）

自由粒子的波函数

$$\Psi(\vec{\boldsymbol{r}},t) = \psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-\vec{\boldsymbol{p}}\cdot\vec{\boldsymbol{r}})}$$

波函数对时间的变化率

能量算符

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}E\Psi \Longrightarrow \frac{\partial}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}E \Longrightarrow E = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

通常情况下，粒子处在外力场中

$$E = E_k + E_p = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{\boldsymbol{r}}) \qquad E_k = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$$

$$E\psi(\vec{\boldsymbol{r}}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{\boldsymbol{r}})\right]\psi(\vec{\boldsymbol{r}}) \qquad E = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

定态薛定谔方程所求的，是在一定外势场中的粒子，可能取到能量本征定态。**这些能量本征定态具有确定的能量值**。就是所得到的本征值 $\boldsymbol{E}\left(\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_k + \boldsymbol{E}_p\right)$。

通常情况下，粒子在外势场中的波函数，可以表现为这些定态波函数的线性叠加。

定态薛定谔方程的意义

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

1). 定态薛定谔方程描述的是质量为m的粒子(不考虑相对论效应)在外势场中的运动。

2). 这个方程的每一个解$\psi(\vec{r})$表示粒子运动的某一个**稳定状态**。与这个解相对应的常数E，就是这个**稳定状态**的**能量**。

只有能量为一些特定的值时，方程才有解。这些E值叫做本征值。与这些E值对应的波函数$\psi(\vec{r})$叫做本征波函数。

求解定态薛定谔方程的目标

1). 波函数$\psi(\vec{r})$(表示粒子可能处于的稳定状态)；

2). 与这些状态相对应的能量E。

四 力学量算符的引入

量子力学假设：力学量用算符表达

1. **坐标算符** $\hat{x}\psi(x) = x\psi(x)$ **ψ为任意波函数**

坐标算符假定为 $\hat{\vec{r}} = \vec{r}$

2. **动量算符**

动量算符假定为： $\hat{P} = -i\hbar\nabla$

3. **哈密顿量**

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + V(r,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r,t)$$

用哈密顿量，薛定谔方程可写成：

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

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

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{r},t)$$

讨论：

①哈密顿量决定了微观粒子波函数随时间的演化，外界对粒子的作用，包括不能用力表达的微观相互作用，一般都可用哈密顿量中的势函数$V(r,t)$来概括。

②而在经典力学中，改变宏观粒子运动状态的原因是作用在粒子上的力。

③势函数V不显含时间的情况很重要。这时，**薛定谔方程可分离变量**。只讨论势函数V与时间无关的情况。

若V不显含时间，则$\hat{H}$称为能量算符。

五 力学量算符的本征方程

算符只是抽象的数学记号，其本身并不象经典力学中力学量那样代表物理量的取值。

算符和相应力学量的取值之间，是通过本征方程联系起来的。

力学量算符$\hat{F}$的本征方程，指下述类型方程：

$$\hat{F}\Psi_\lambda = \lambda\Psi_\lambda$$

如果粒子处于本征态Ψ_λ，则粒子与$\hat{F}$对应的力学量的取值，一定等于本征值λ。

本征值的集合$\{\lambda\}$ —— 本征值谱；

本征波函数的集合$\{\Psi_\lambda\}$ —— 本征函数系。

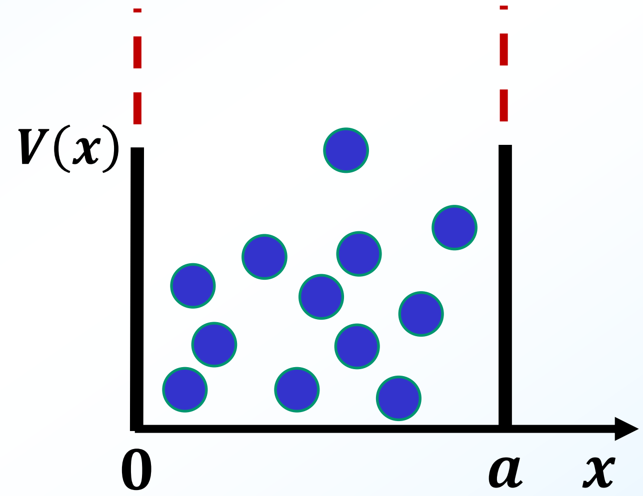
定态薛定谔方程就是能量的本征方程

第五节 一维定态薛定谔方程的应用

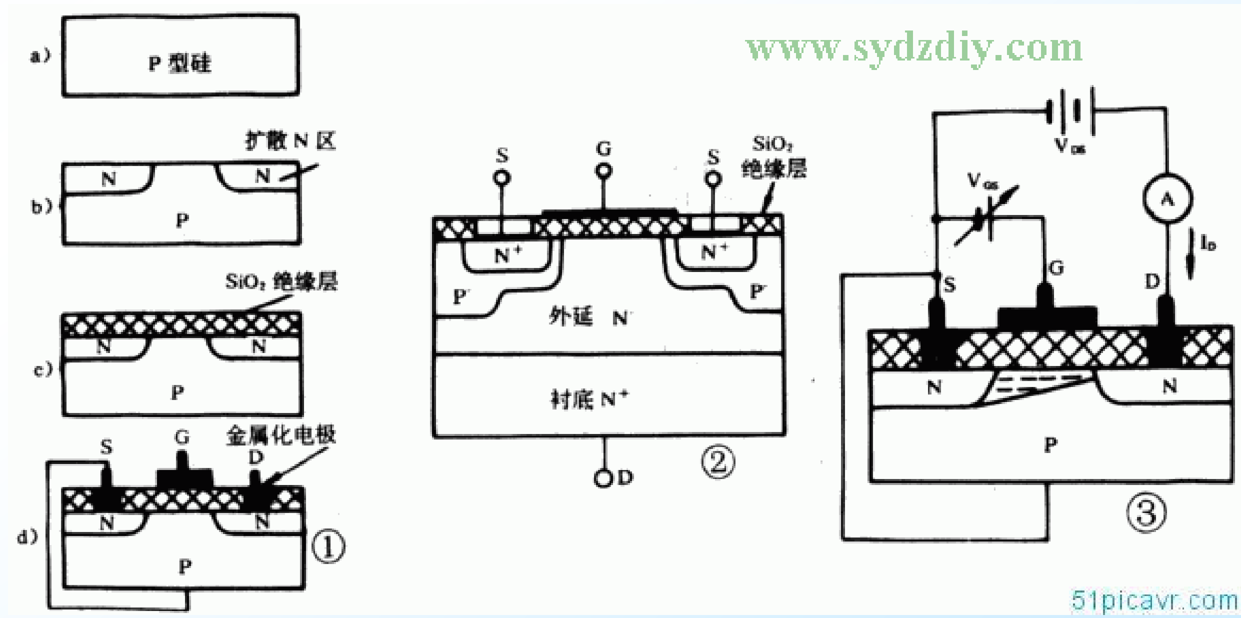
一 一维无限深方势阱

电子处在方势阱$V(x)$中

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

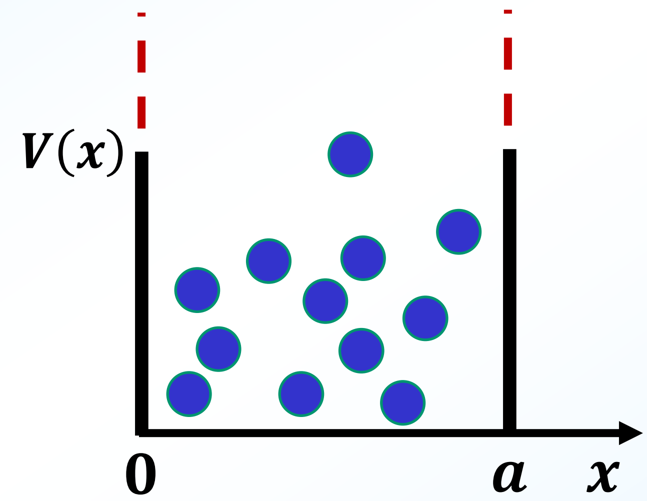


物理对应：半导体器件中的CMOS和MOSFET：金属氧化物场效应管



显然，在$x \le 0$和$x \ge a$的区域内，

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



而在$0 < x < a$的区域内，粒子的定态薛定谔方程为

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

令 $k^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2}$ $\qquad \dfrac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0$

方程的通解为： $\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx$

式中A，B，k都是待定常数，可由边界条件和归一化条件确定。

方程的通解为：$\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx$

$$\text{边界条件}\begin{cases}\psi(0) = A\sin 0 + B\cos 0 = 0 & \cdots\cdots\cdots① \\ \psi(a) = A\sin ka + B\cos ka = 0 & \cdots\cdots\cdots②\end{cases}$$

由①可得，$B = 0$ $\quad\therefore\quad \psi(x) = A\sin kx$

由②可得，$A\sin ka = 0$ **只能取** $\sin ka = 0$

$$ka = n\pi \Rightarrow k = \frac{n\pi}{a} \quad (n = 1, 2, \cdots)$$ **注意：$n \neq 0$！**

$$\left.\begin{aligned} k^2 &= \frac{2mE}{\hbar^2} \\ k &= \frac{n\pi}{a}\end{aligned}\right\} E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} n^2 \quad (n = 1, 2, \cdots)$$

——能量本征值

方程的解为：

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

其中待定常数A由归一化条件决定。 $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2\, dx = 1$

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

薛定谔方程的解：

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

势阱中粒子的本征波函数：

$$\Psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \qquad E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2$$

一维无限深势阱中粒子的特点

1. 能量是量子化的

$$E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2\quad(n=1,2,\cdots)$$

量子数

这是解薛定谔方程得到的必然结果，并非玻尔理论中的人为假设。

每一个能量值对应着一个能级

相邻两能级的间隔：$\Delta E_n=E_{n+1}-E_n=(2n+1)\dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\begin{cases}n\uparrow & \Delta E_n\uparrow\\ a\uparrow & \Delta E_n\downarrow\end{cases}$

当势阱宽度a小到原子尺度，ΔE_n很大，能量的量子化显著；

当势阱宽度a大到宏观尺度，ΔE_n很小，能量近似连续变化。

例：原子中的电子，处在$a=10^{-10}m$的势阱中。

其能量为：$E_n=38n^2(eV)$ $\Delta E_n=76n\,(eV)$ ----量子化显著

若电子处在$a=10^{-2}m$的宏观势阱中。

$\Delta E_n=0.76n\times10^{-14}(eV)$----不可分辨，量子化消失

2. 势阱中粒子的最低能量不可能为零

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2 \ (n = 1, 2, \cdots) \quad E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \neq \mathbf{0}$$

动能，因为$E_p = 0$

完全取决于势阱的宽度a

经典理论中粒子的能量可以为零。量子理论认为势阱中粒子的能量不可能为零。

这是由不确定关系决定的！

当粒子在宽度为a的势阱中运动时，有

$$\Delta x = a \quad \Delta p_x = 2p$$

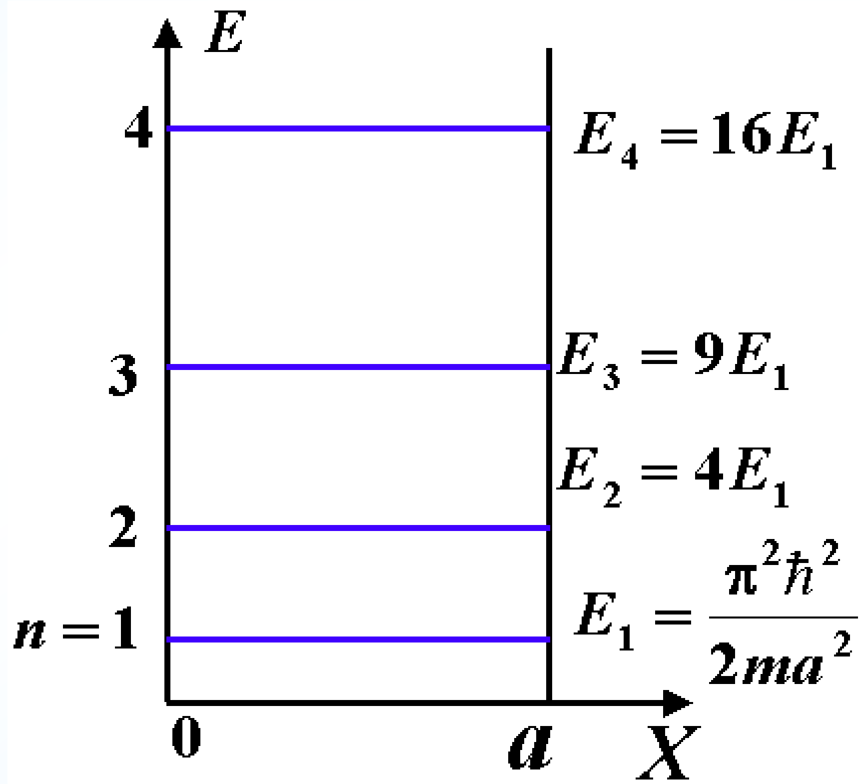
$$\because \ \Delta x \Delta p_x \geq h \Rightarrow 2ap \geq h \Rightarrow p \geq \frac{h}{2a} \Rightarrow p^2 \geq \frac{h^2}{4a^2}$$

$$E = E_k = \frac{p^2}{2m} \geq \frac{h^2}{8ma^2} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = E_1$$

——零点能

3. 粒子的能级图

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 \quad (n = 1, 2, \cdots)$$



能级间隔：

$$\Delta E_n = (2n+1)\frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad n\uparrow \quad \Delta E_n \uparrow$$

当 $n \to \infty$ **时：** $\Delta E_n \to \infty$

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{2n+1}{n^2} \to 0$$ ---量子化消失

在高能级上可看成能级连续分布

量子 ⟷ 经典

等价

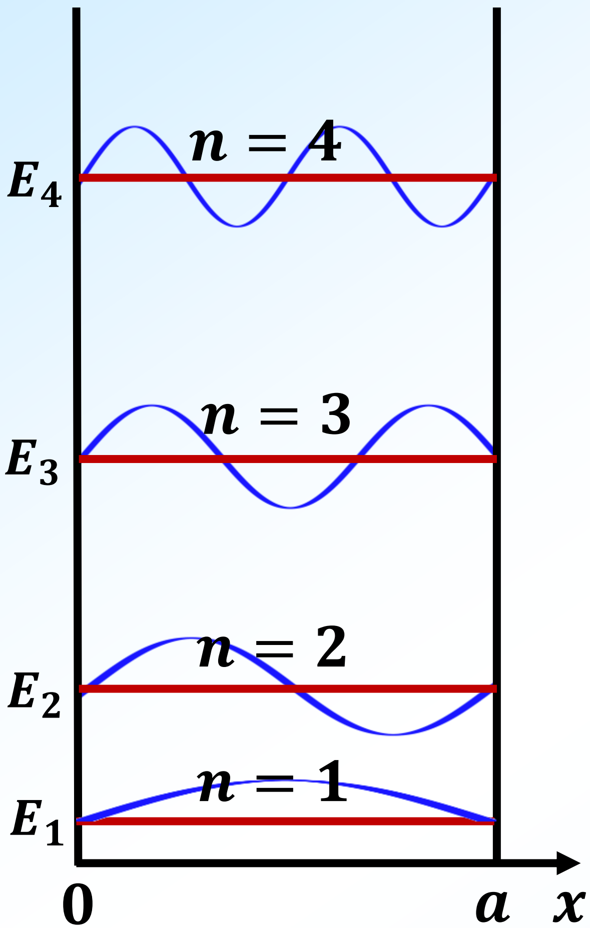
经典力学是量子力学的极限！

4. 粒子在势阱中不同位置出现的概率

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

$n+1$个节点，稳定的驻波能级

$\psi_n(x)$



$$\psi_4(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{4\pi}{a}x\right)$$

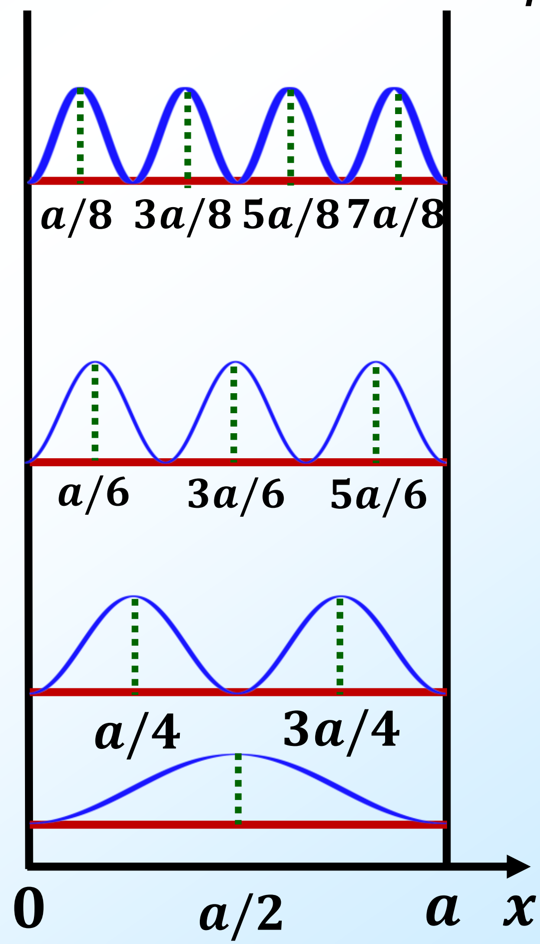
$$\psi_3(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{3\pi}{a}x\right)$$

$$\psi_2(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right)$$

$$\psi_1(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)$$

$|\psi_n(x)|^2$

$$\lambda=\frac{2a}{n}$$



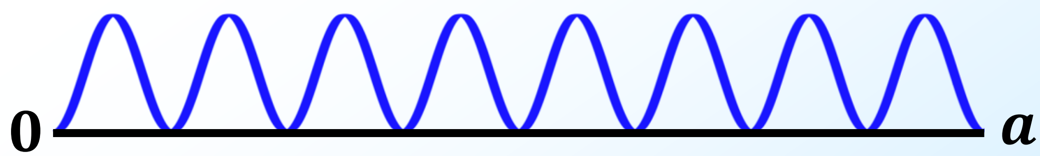
说明

1). 粒子被限制在势阱中，它的状态被称为束缚态。从物理意义上理解束缚定态方程的解，是一些驻波。这些驻波波形形象的表示出，处在某个能量状态的粒子在$0 < x < a$范围内哪些地方出现的几率最大，最小。

2). 束缚定态能级的高低，由驻波的半波数来定，半波数越多（驻波波长越短），对应粒子的能级越高。

3). 第n个能级，波函数在总区间内有个$n+1$节点，节点处出现粒子的几率为零。

例：$n = 8$



4). 当$n \to \infty$时，粒子在各处出现的几率相同。

---量子化消失（$\Delta E_n \ll E_n$能级连成一片）

例1：在宽度为$2a$的一维无限深势阱中运动的电子

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

求(1)系数A；(2)基态能量；(3)基态德布罗意波长。

解：(1)根据归一化条件

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

(2)将波函数代入到定态薛定谔方程

$$E\psi(x)=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\cancel{V}(x)\right]\psi(x)=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{n^2\pi^2}{4a^2}\psi(x) \Rightarrow E_1=\frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2}$$

(3) $$\lambda=\frac{h}{p}=\frac{h}{\sqrt{2mE_1}}=4a$$

基态对应着半波解，相应的德布罗意波波长为$4a$。

例1：在宽度为2a的一维无限深势阱中运动的电子

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

求(4) $n=2$时，几率密度最大的位置，(5)处在基态的粒子在$a/2$~$3a/2$范围内的几率。

解：(4) 几率密度 $\rho_2(x)=|\psi_2(x)|^2=\dfrac{1}{a}\sin^2\left(\dfrac{\pi}{a}x\right)$

$$\frac{d\rho_2}{dx}=0 \Rightarrow \frac{\pi}{a^2}\sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right)=0 \Rightarrow \frac{2\pi}{a}x=0,\pi,2\pi,3\pi,4\pi,\cdots$$

$$x=\cancel{0},\frac{a}{2},\cancel{a},\frac{3a}{2},\cancel{2a}\qquad x=\frac{a}{2},\frac{3a}{2}$$

(5) 处在基态的粒子在$a/2$~$3a/2$范围内的几率

$$W=\int_{a/2}^{3a/2}\frac{1}{a}\sin^2\left(\frac{\pi}{2a}x\right)dx=\frac{1}{2}+\frac{1}{\pi}=0.818$$

作业： **Chap.15 —T7、T8、T9、T10、 T11**

1. 独立完成作业。
2. 图和公式要有必要的标注或文字说明。
3. 通过学习通提交作业。
4. 作业缺交三分之一及以上者按规定不能参加考试。