大学物理•量子力学基础

主讲教师：郭袁俊

第 17 章　量子力学基础

17.4 一维无限深势阱

本节以一维矩形无限深势阱中粒子的运动问题为例，求解定态薛定谔方程。

本节的研究内容

- 求解问题的步骤
- 讨论解的物理意义

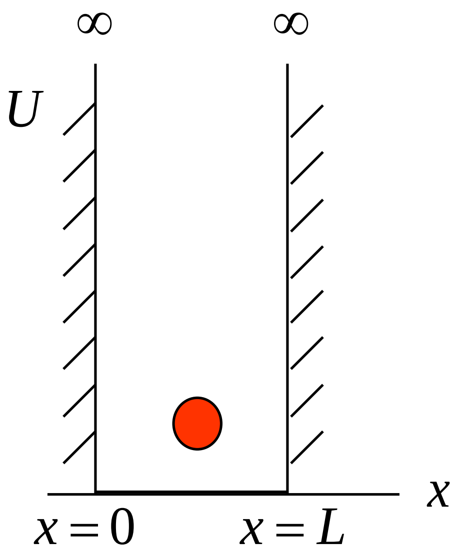
17.4.1 模型的建立

一维无限深势阱是微观粒子在保守力场的作用下被局限于某区域中，并在该区域内可以自由运动的问题的简化模型。

例如：金属中自由电子、原子核中的质子就处在这样的“势阱”之中。

17.4.2 求解问题的步骤

1) 写出具体问题中势能函数$U(x)$的形式，代入一维定态薛定谔方程的一般形式，得出本问题中的薛定谔方程。



设质量为m的粒子， 只能在$0<x<a$的区域内自由运动，粒子在这种保守力场中的势能函数为

$$U(x)=\begin{cases}0 & 0<x<a\\ \infty & x\le 0, x\ge a\end{cases} \qquad (1)$$

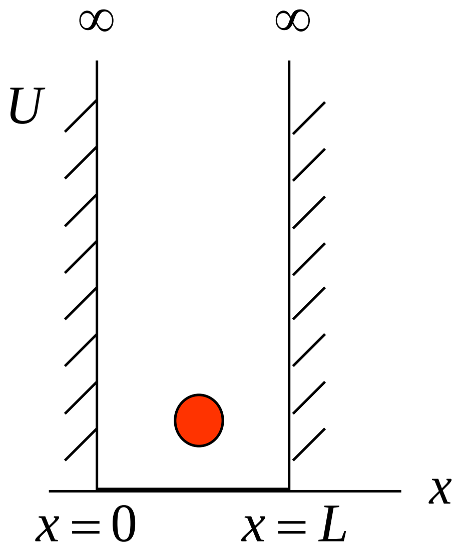
代入一维定态薛定谔方程的一般形式：

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

在阱外，粒子出现的概率为零，故 $\psi(x)=0 \qquad (x\le 0, x\ge a)$

在阱内，定态薛定谔方程为

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi=0 \quad (0<x<a) \qquad (3)$$



2) 求解定态波函数(0<x<a)

方程的通解为：$\psi(x)=A\cos kx+B\sin kx \qquad (4)$

式中 $k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$

3) 用归一化条件和标准条件确定积分常数

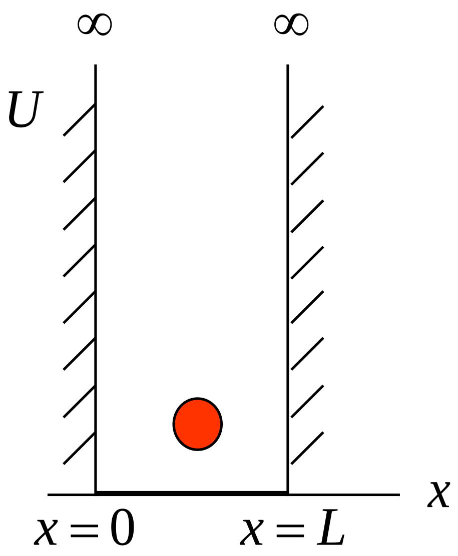
由波函数**标准条件**(单值、有限、连续)得边界条件：$\psi(0)=\psi(a)=0$

由 $\psi(0)=0$ 得 $A=0$

由 $\psi(a)=0$ 得 $B\sin ka=0$ $\quad\therefore\quad k=\frac{n\pi}{a} \quad (n=1,2,3\cdots)$

(B=0或n=0, ψ(x)=0, 无物理意义；而n为负数与正数表达**同样**的概率)

$$\therefore \quad \psi(x) = B\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \tag{5}$$



由归一化条件定B

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 \mathrm{d}x = \int_0^a B^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\mathrm{d}x = 1 \tag{6}$$

$$\therefore B = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

于是得到阱内定态波函数：

$$\boxed{\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \quad (n = 1, 2, 3, \cdots)} \tag{7}$$

17.4.3 讨论解的物理意义

1) 能量是量子化的

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \qquad k = \frac{n\pi}{a} \quad (n = 1, 2, \cdots\cdots)$$

可见，粒子的能量只能取不连续的值——能量量子化。整数n叫做量子数。

于是 $$E_n = n^2\left(\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\right) \quad (n = 1, 2, \cdots\cdots) \tag{8}$$

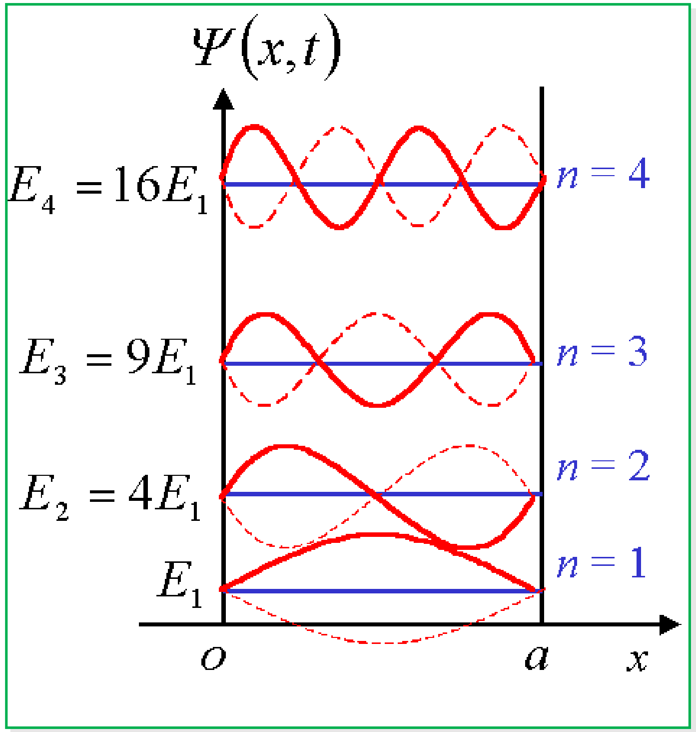
当$n = 1$ $$E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$$

2) 粒子的物质波在阱内形成驻波

$$\psi(x,t)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(kx)\,e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\qquad\left(k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}=\frac{p}{\hbar}\right)$$

$$=\frac{1}{2i}\sqrt{\frac{2}{a}}\left(e^{ikx}-e^{-ikx}\right)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

$$=\frac{1}{2i}\sqrt{\frac{2}{a}}\left[e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)}-e^{-\frac{i}{\hbar}(Et+px)}\right]\qquad(9)$$



可见波函数是沿x正向传播的单色平面波和沿x负向传播的单色平面波的叠加。

由: $k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}=\frac{p}{\hbar}=\frac{2\pi}{\lambda}=\frac{n\pi}{a}$

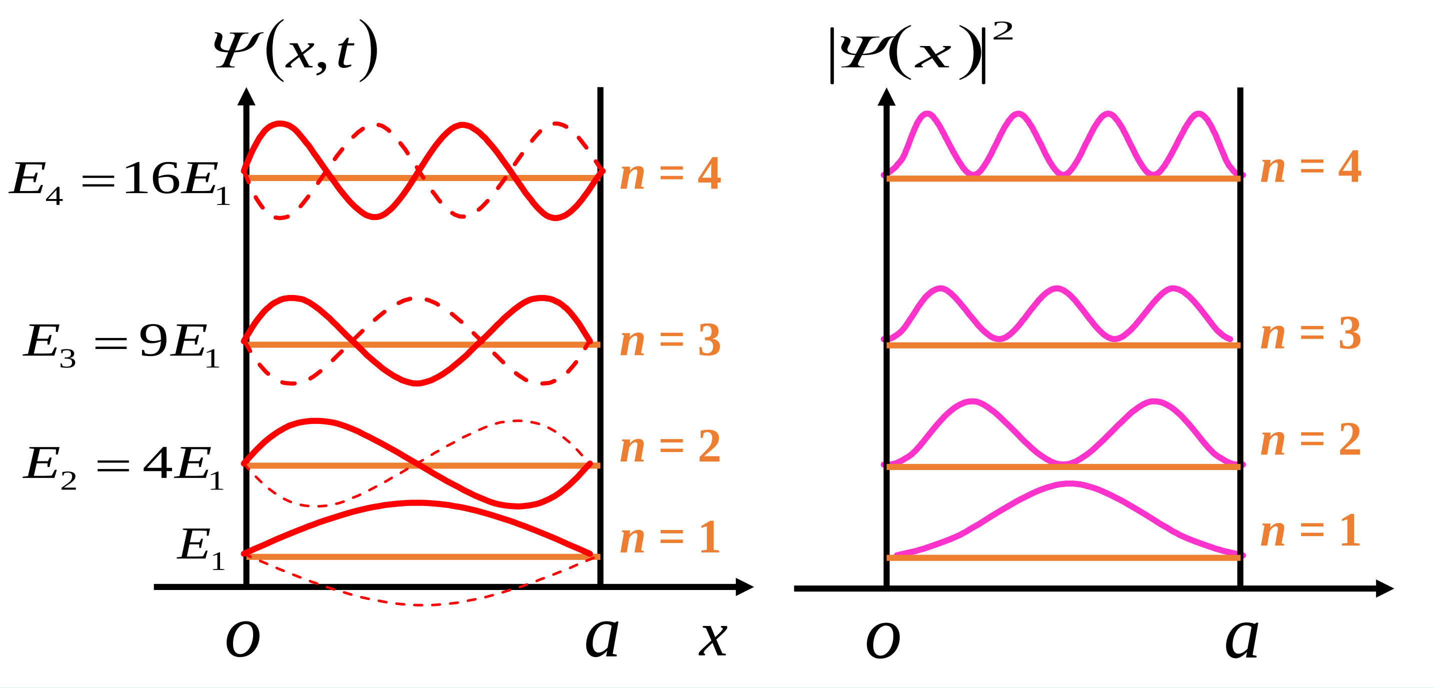
得 $a=n\frac{\lambda}{2}$, $n=1,2,3,\cdots$

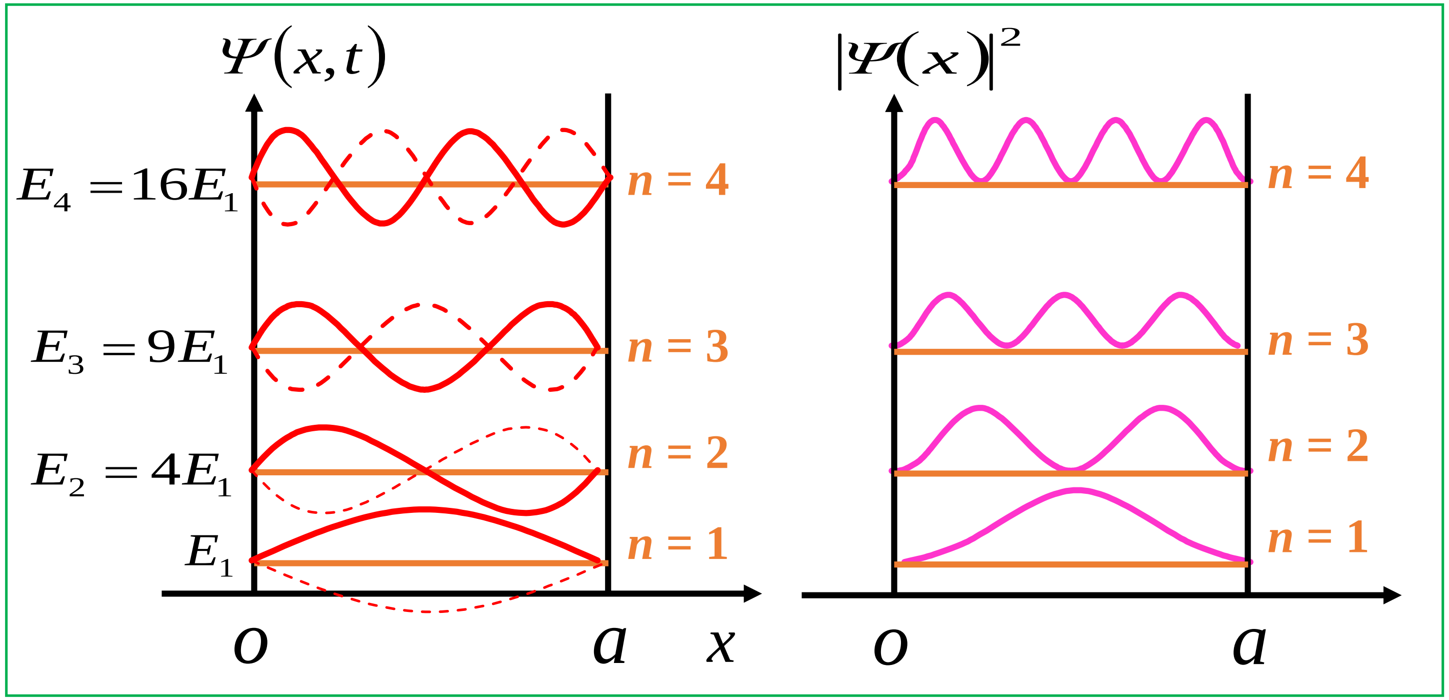
思考 能否根据驻波条件推导出阱内粒子的量子化能量?

3) 粒子在势阱内的概率分布

按经典理论， 在势阱内各处， 粒子出现的概率是相同的。量子力学给出粒子出现在势阱内各点的概率密度为

$$|\psi_n(x)|^2 = \frac{2}{a}\sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \quad (n=1,2,\cdots\cdots) \tag{10}$$





可见1) 两端为波节，$|\Psi|^2=0$，粒子不能逸出势阱

2) 阱内各位置粒子出现概率不同，$|\Psi|^2$ 峰值处较大

3) 能级越高，驻波波长越短，峰值数增多　$n\to\infty$，$|\Psi|^2$相同，量子→经典

4) 归一化条件，曲线下面积相等

例1 设质量m的微观粒子在宽度为a的一维无限深方势阱中运动，其波函数为

$$\psi(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}sin\left(\frac{3\pi}{a}x\right) \qquad (11)$$

求：(1)粒子的能量和动量；(2)概率密度最大的位置。

解： (1)

$$E_n=n^2\left(\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\right) \qquad (12)$$

由波函数表达式可知量子数$n=3$，粒子的能量:

$$E_3=3^2\left(\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\right) \qquad (13)$$

又：

$$E_3=3^2\left(\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\right)=\frac{p^2}{2m} \qquad \therefore\ p=\pm\frac{3\hbar\pi}{a} \qquad (14)$$

概率密度最大的位置

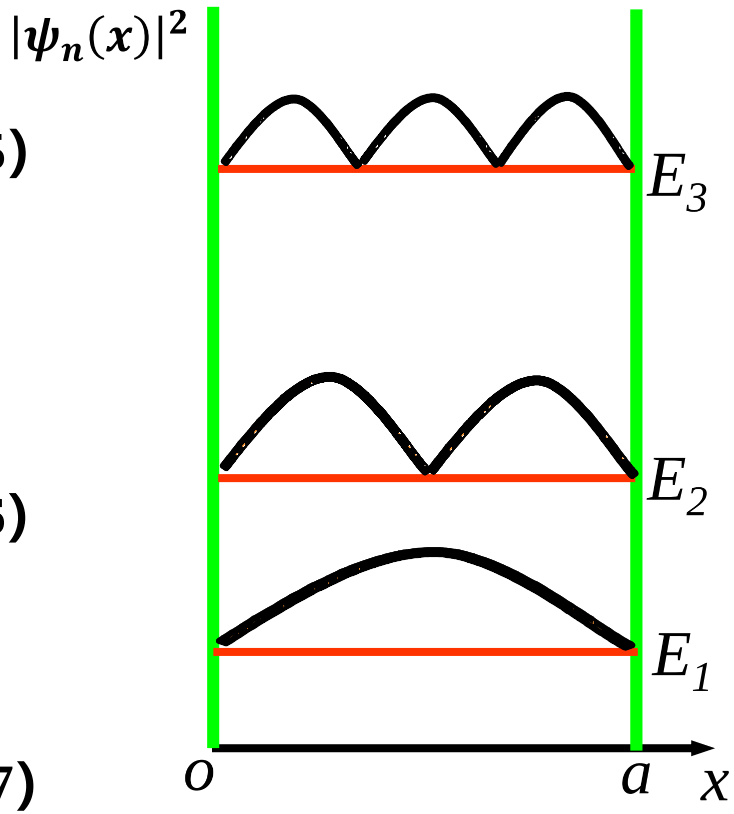
$$|\psi_3(x)|^2 = \frac{2}{a}\sin^2\left(\frac{3\pi}{a}x\right) \qquad (15)$$

$|\psi_3(x)|^2$ 有极大值的充要条件是

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{2}{a}\sin^2\left(\frac{3\pi}{a}x\right)\right) = 0 \qquad (16)$$

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\left(\frac{2}{a}\sin^2\left(\frac{3\pi}{a}x\right)\right) < 0 \qquad (17)$$

解得 $x = \dfrac{a}{6}, \dfrac{a}{2}, \dfrac{5a}{6}$



谢谢大家！