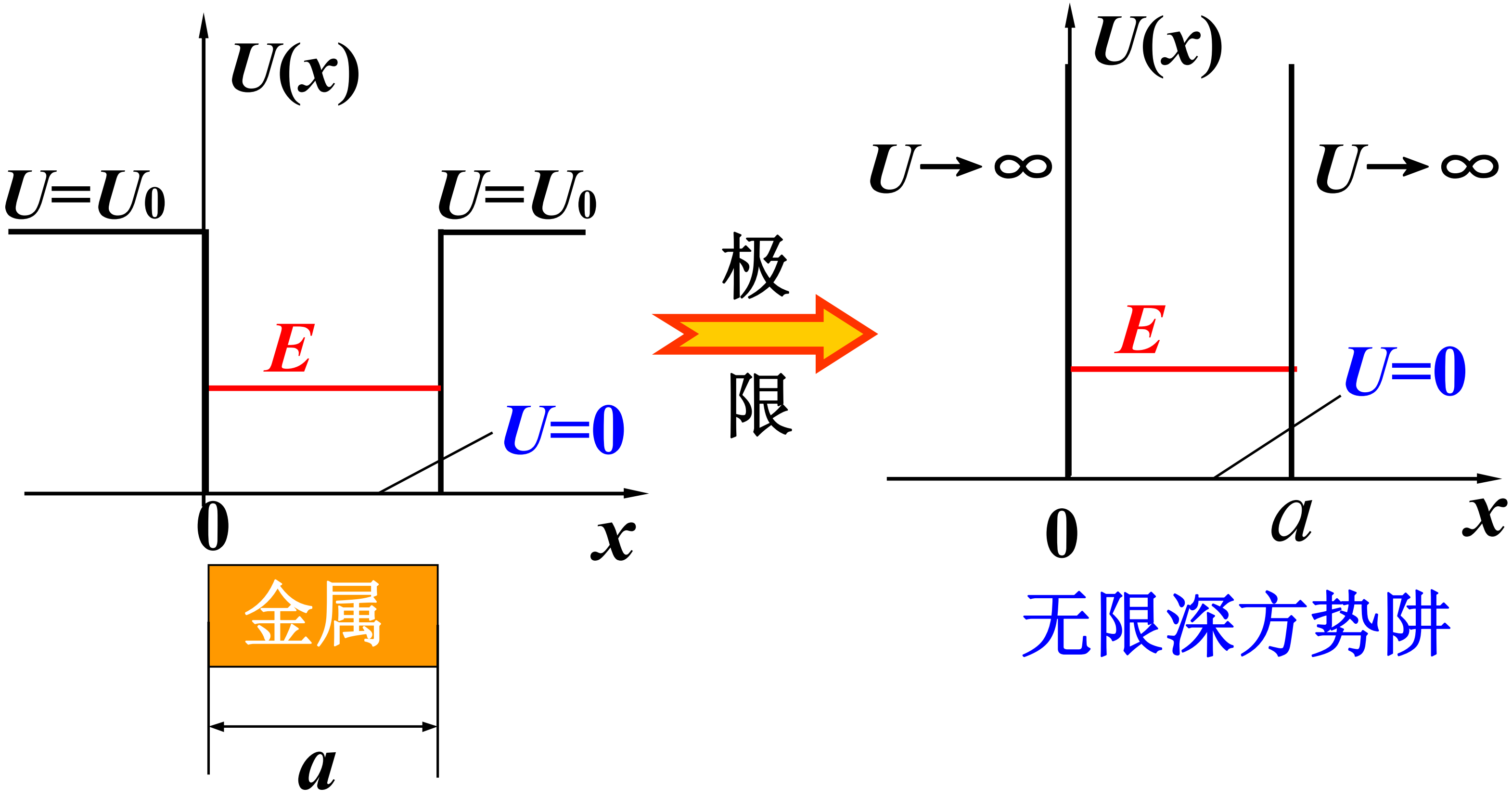
§ 2 无限深一维方势阱中的粒子 ☆

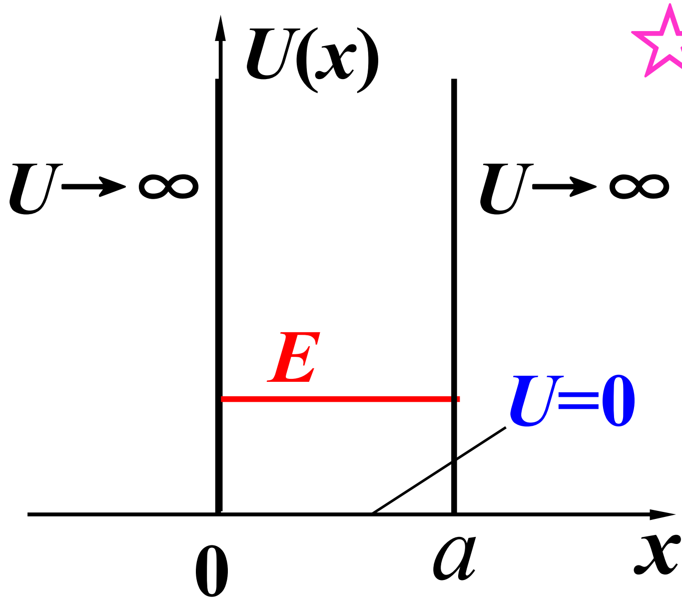


金属中的自由电子
近似为处在
无限深势阱中

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

☆

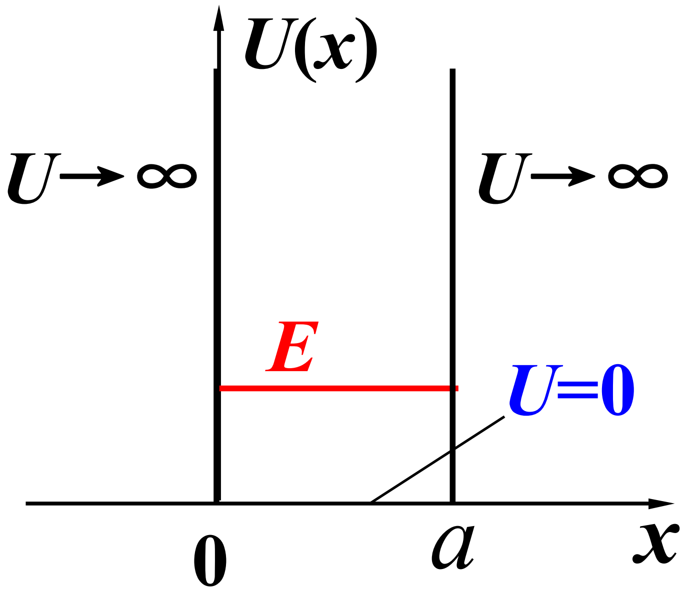
在阱内，由于势能是常量，
所以粒子不受力而做自由运动，
在边界 $x=0$ 和 $x=a$ 处，
势能突然增至无限大。
粒子会受到无限大的
指向阱内的力。
粒子的位置就被限制在阱内，
粒子这时的状态称为束缚态。



无限深方势阱

为研究粒子的运动，利用薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Phi(x)+U(x)\Phi(x)=E\Phi(x)$$



无限深方势阱

☆

在势阱外，

$x<0$ 和 $x>a$ 的区域，

由于 $U\to\infty$ ，

所以必须有 $\Phi=0$

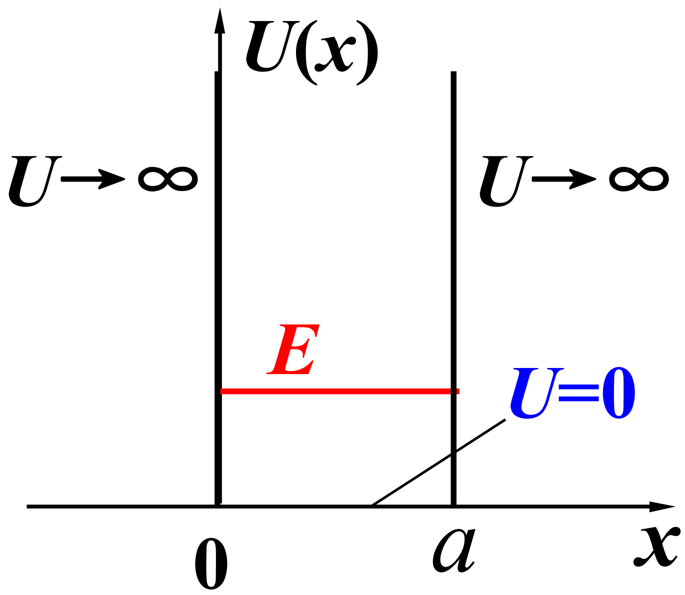
否则，薛定谔方程将给不出任何有意义的解。

$$\Phi=0 \qquad (\ x<0 \text{ 和 } x>a\ )$$

说明粒子不可能到达这一区域

在势阱内 $0 < x < a$ $\boxed{U = 0}$ $\boxed{k = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Phi(x) = E\Phi(x)$$



无限深方势阱

薛定谔方程化为

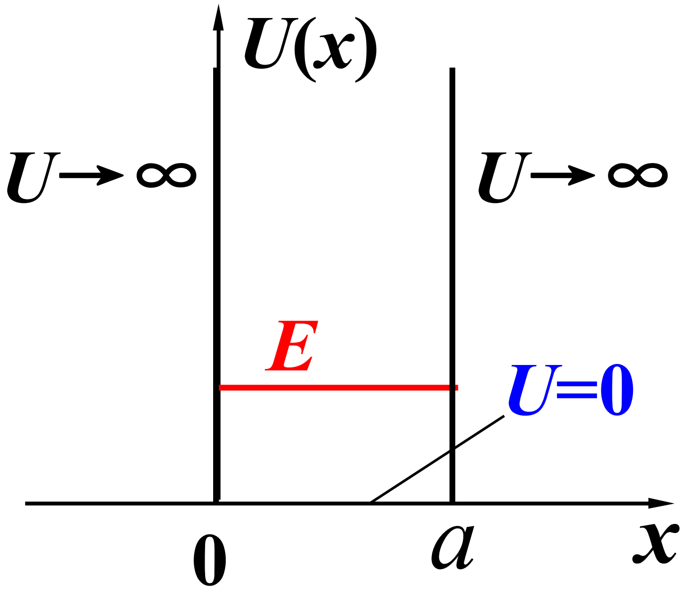
$$\frac{d^2}{dx^2}\Phi(x) + k^2\Phi(x) = 0$$

这个常见的微分方程的解为

$$\Phi(x) = A\sin kx + B\cos kx$$

A, B 常数

☆



无限深方势阱

薛定谔方程的解： ☆

$$x<0 \text{ 和 } x>a$$
$$\Phi=0$$

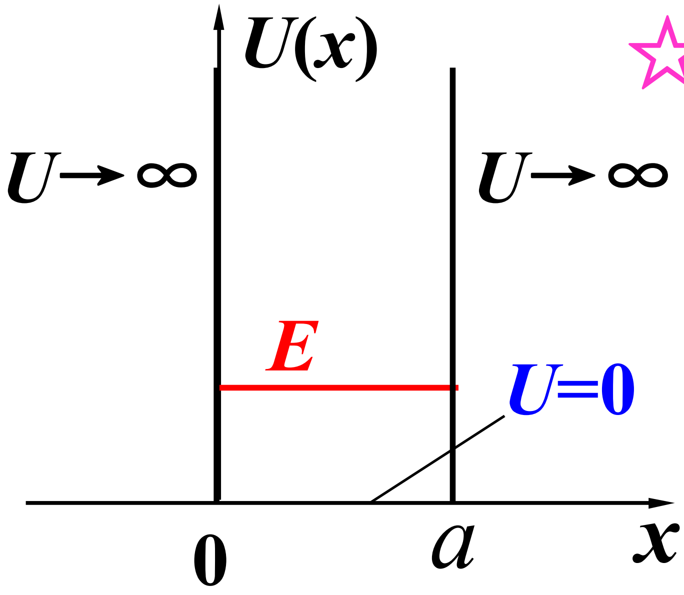
$$0<x<a$$
$$\Phi(x)=A\sin kx+B\cos kx$$

薛定谔方程的解

在各区域内显然是单值、有限、连续的。

但还需要整个区域连续

$$\boxed{\begin{aligned}&\Phi(0)=\Phi(a)=0\\&\Phi(x)=A\sin kx+B\cos kx\end{aligned}}$$



无限深方势阱

整个波函数还要在边界处连续

$$x=0 \;\Rightarrow\; \Phi(0)=B=0$$

$$x=a \;\Rightarrow\; \Phi(a)=A\sin ka=0$$

$$\Rightarrow\; \boxed{ka=n\pi,\quad n=1,2,3,\cdots}$$

$$\boxed{\Phi(x)=A\sin\frac{n\pi}{a}x,\quad n=1,2,3,\cdots\quad(0<x<a)}$$

讨论：　1. 能量 E ☆

从能量的意义看，应有$E \geq 0$，但能否$E = 0$呢？

在限定粒子的位置范围的情况下（在势阱中），

粒子位置不确定量是有限的 $\Delta x = a$

由不确定关系知，动量的不确定量不为零，

所以动量$P > 0$，$\rightarrow E > 0$ $\rightarrow k = \sqrt{2mE}/\hbar > 0$。

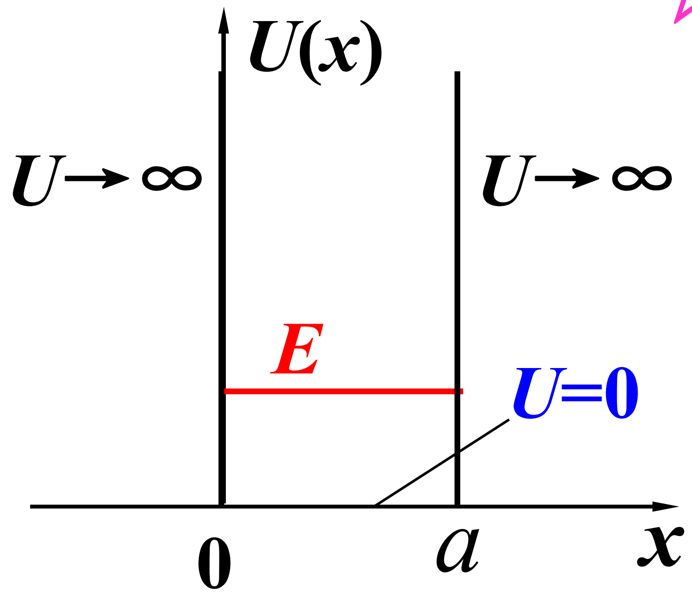
能量 E 能连续吗？

☆

势阱中粒子的能量:

$$ka = n\pi \ ,$$

$$n = 1,2,3,4,5,\cdots$$



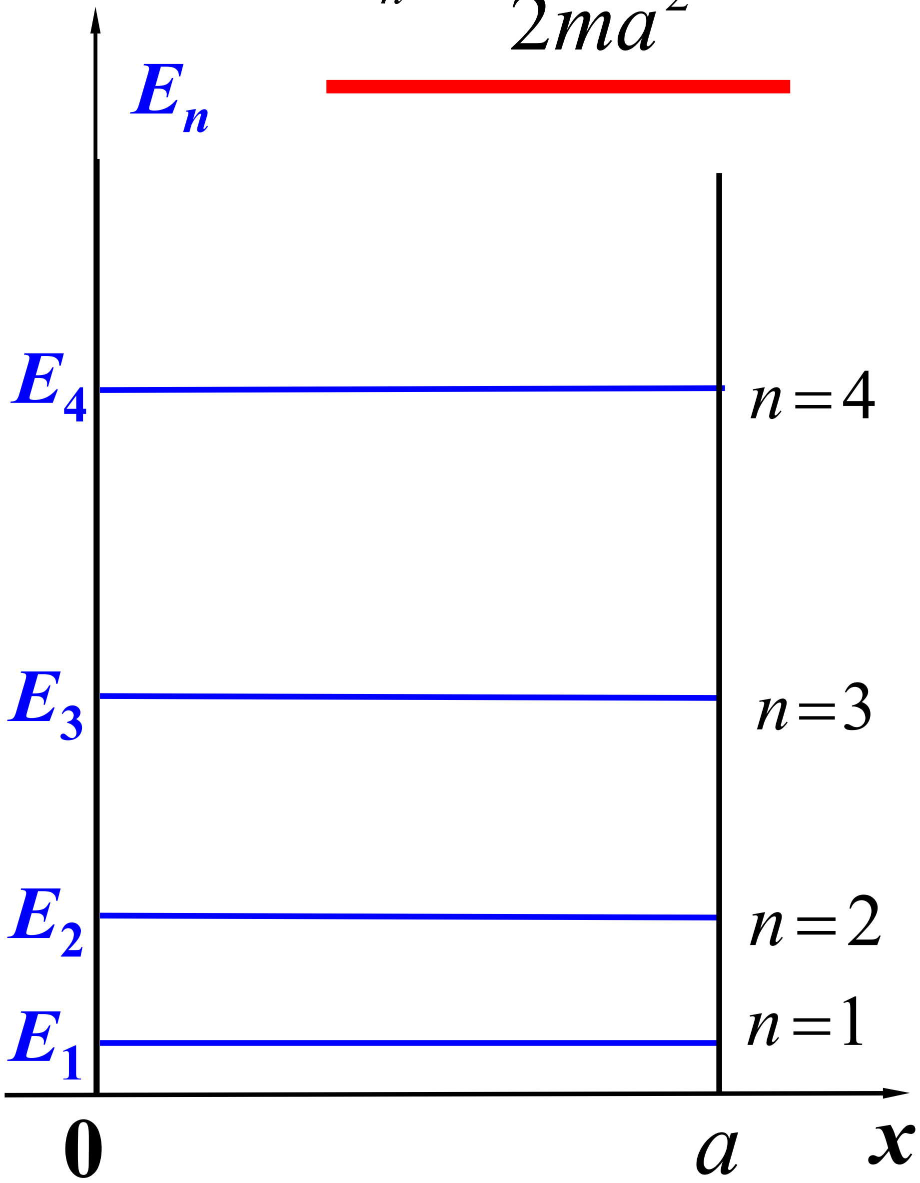
无限深方势阱

由 $$\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2 = \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2$$

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

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

☆



束缚在势阱内的粒子的能量只能取离散值

——能量量子化，

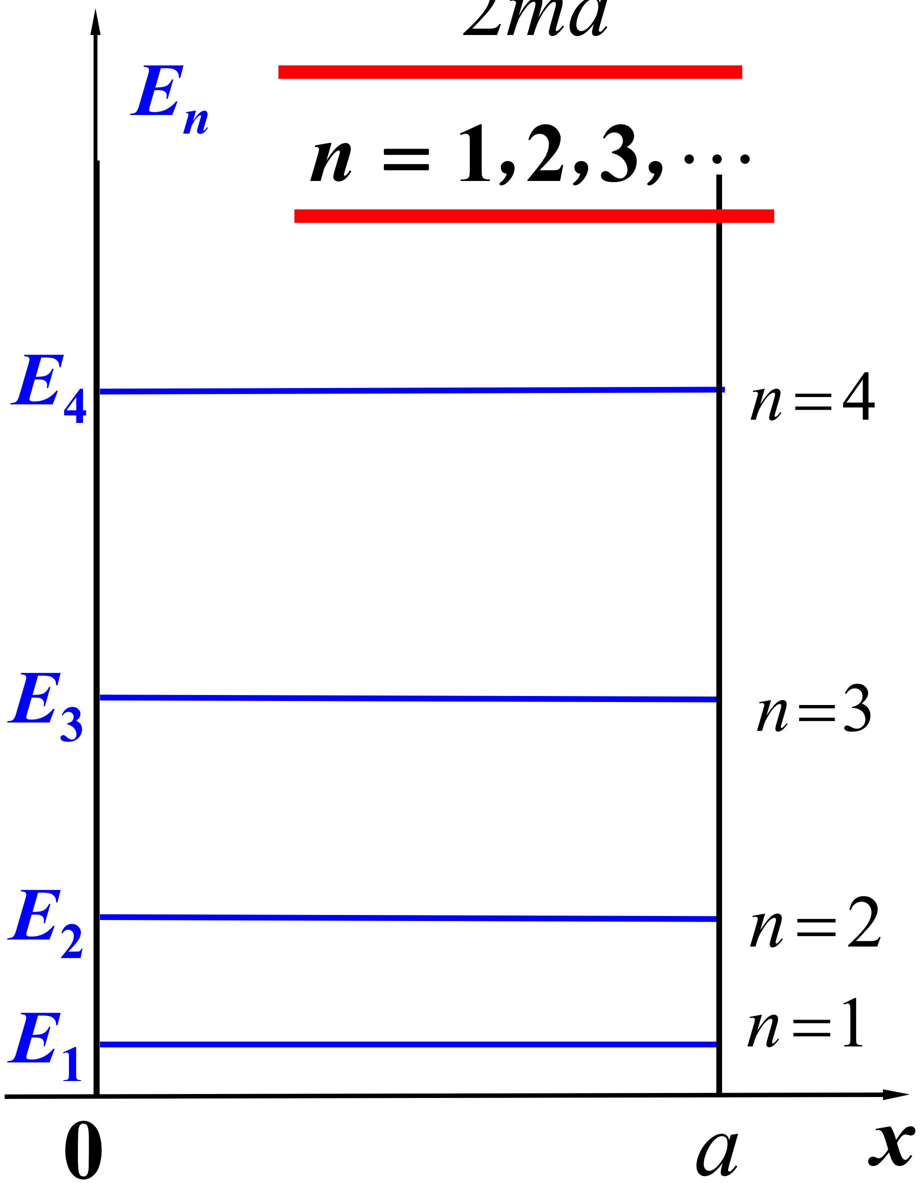
每一能量值 E_n 对应一个能级，

E_n 称为能量本征值，

n 称为量子数。

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} n^2$$

$$n = 1, 2, 3, \cdots$$



最低能量：零点能

$$\boxed{E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} > 0}$$

量子粒子的最小能量不等于零。这是符合不确定关系的，因为量子粒子在有限空间内运动，其速度不可能为零，而经典粒子可能处于静止的能量为零的最低能态。

☆

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

☆

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

$$\left.\begin{matrix} a\uparrow \\ m\uparrow \end{matrix}\right\} \to \Delta E_n \downarrow,$$

宏观情况，可认为

粒子能量连续。

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{2n+1}{n^2} \xrightarrow[n>>1]{} \frac{2}{n} \propto \frac{1}{n}$$

$$n\uparrow \to \frac{\Delta E_n}{E_n}\downarrow$$

可认为：

高能级

能量连续。

2 波函数Ψ ☆

归一化条件：粒子在空间各处的概率的总和应该等于1

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\Phi(x)|^2 dx = \int_0^a \left|A\sin\frac{n\pi}{a}x\right|^2 dx = \frac{a}{2}A^2 = 1 \qquad A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

$$\boxed{\Phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x, \quad n = 1, 2, 3, \cdots \quad (0 < x < a)}$$

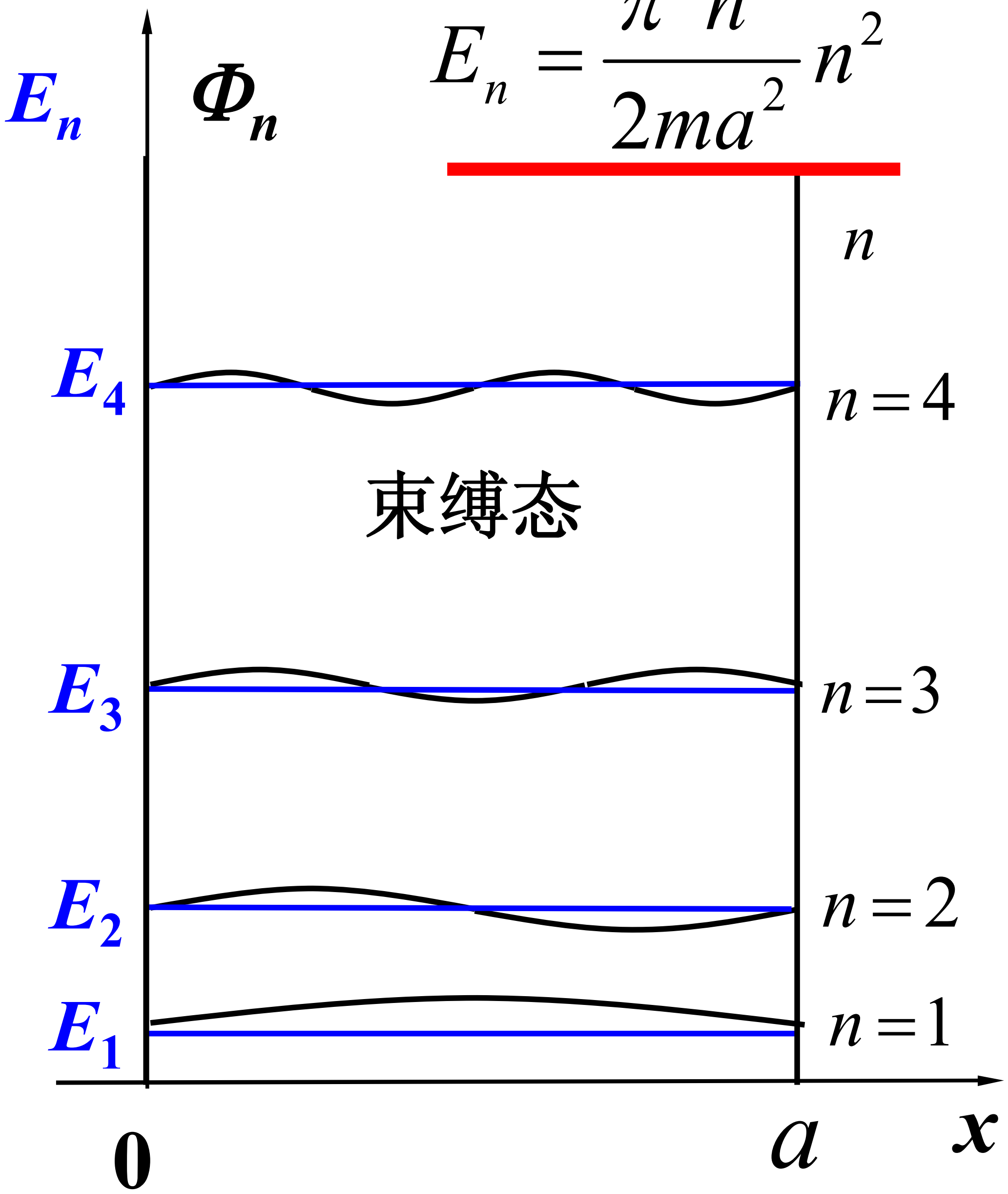
波函数Φ_n叫做能量本征波函数。

由每个本征波函数所描述的粒子的状态称为粒子的能量本征态，

其中能量最低的态称为基态，

能量较大的态称为激发态。

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2$$



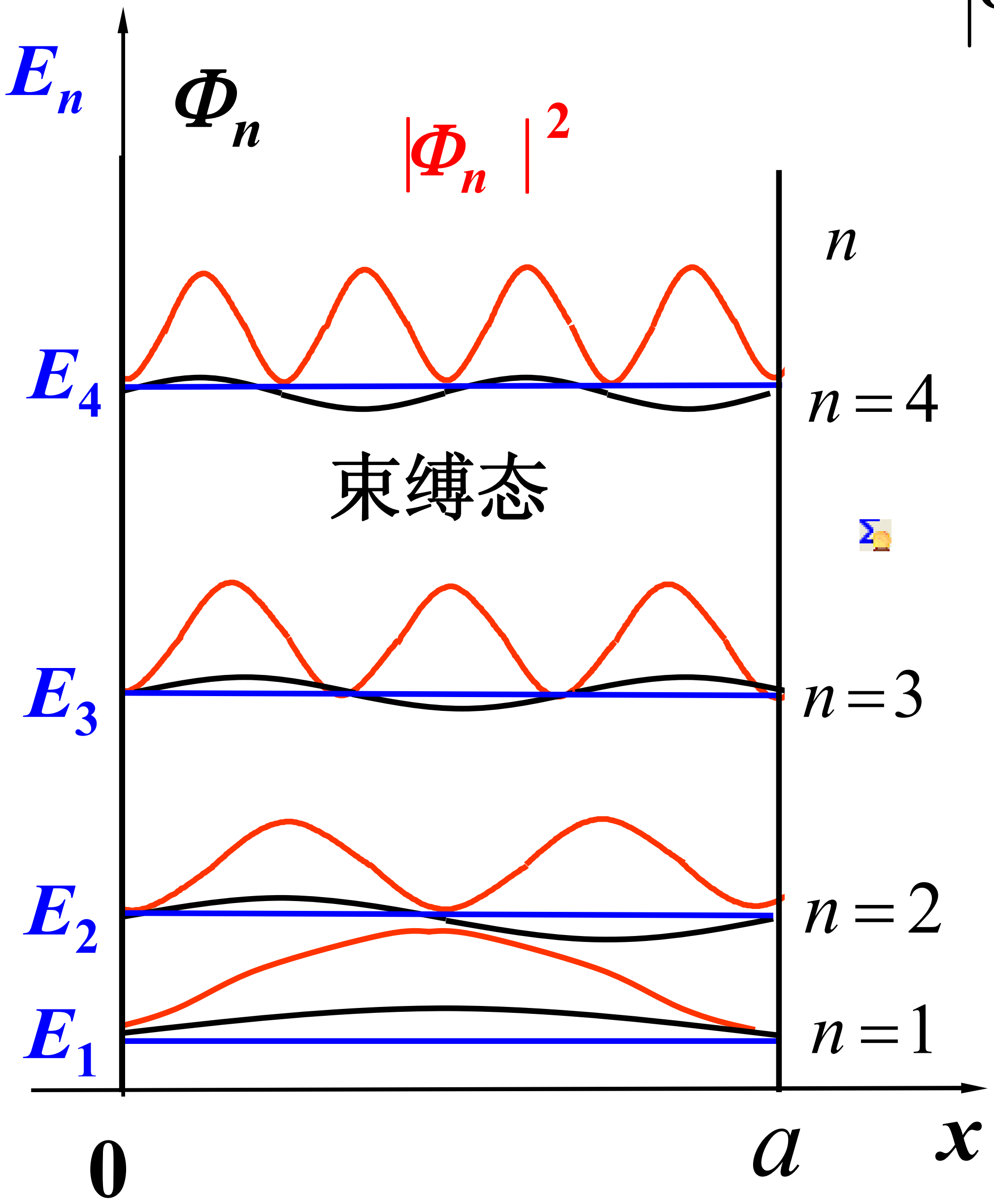
☆

$$0 < x < a$$

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

$$n = 1, 2, 3, \cdots$$

3 概率密度



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

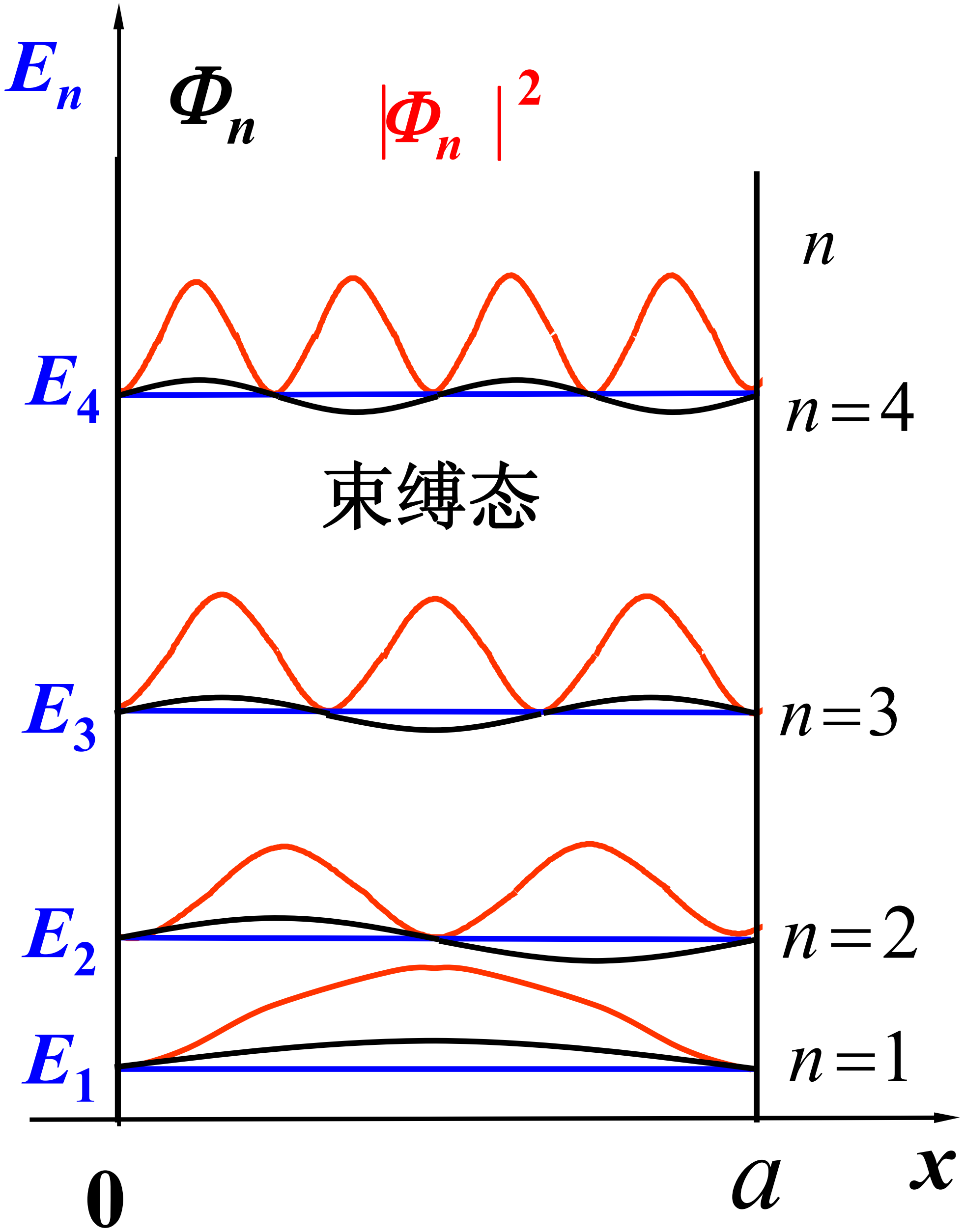
$$n = 1, 2, 3, \cdots$$

$$0 < x < a$$ ☆

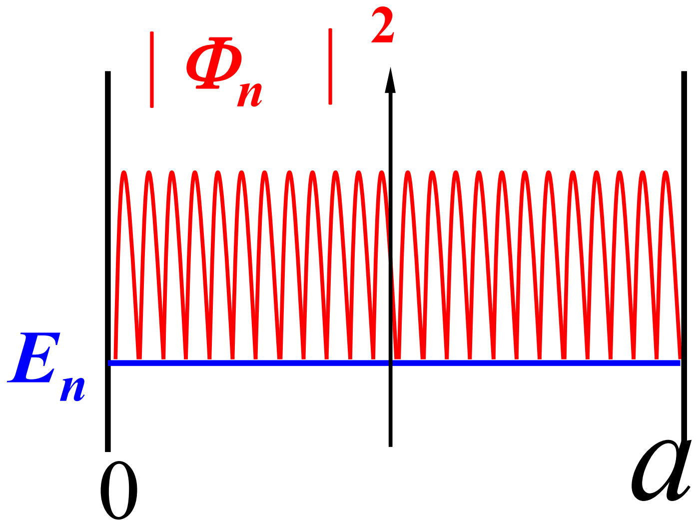
粒子的波动性给出的概率密度的周期性分布与经典粒子的完全不同

按经典理论，
粒子在阱内自由运动，
在各处的概率密度
应该是相等的，
而且与粒子的能量无关。

☆



n很大时，
势阱内粒子
概率分布趋于均匀。



量子 → 经典

4 波长λ

$$\boxed{E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2}$$

粒子在势阱中运动的动量

$$P_n = \sqrt{2mE_n} = \frac{\pi\hbar}{a}n, \quad n = 1, 2, 3, \cdots$$

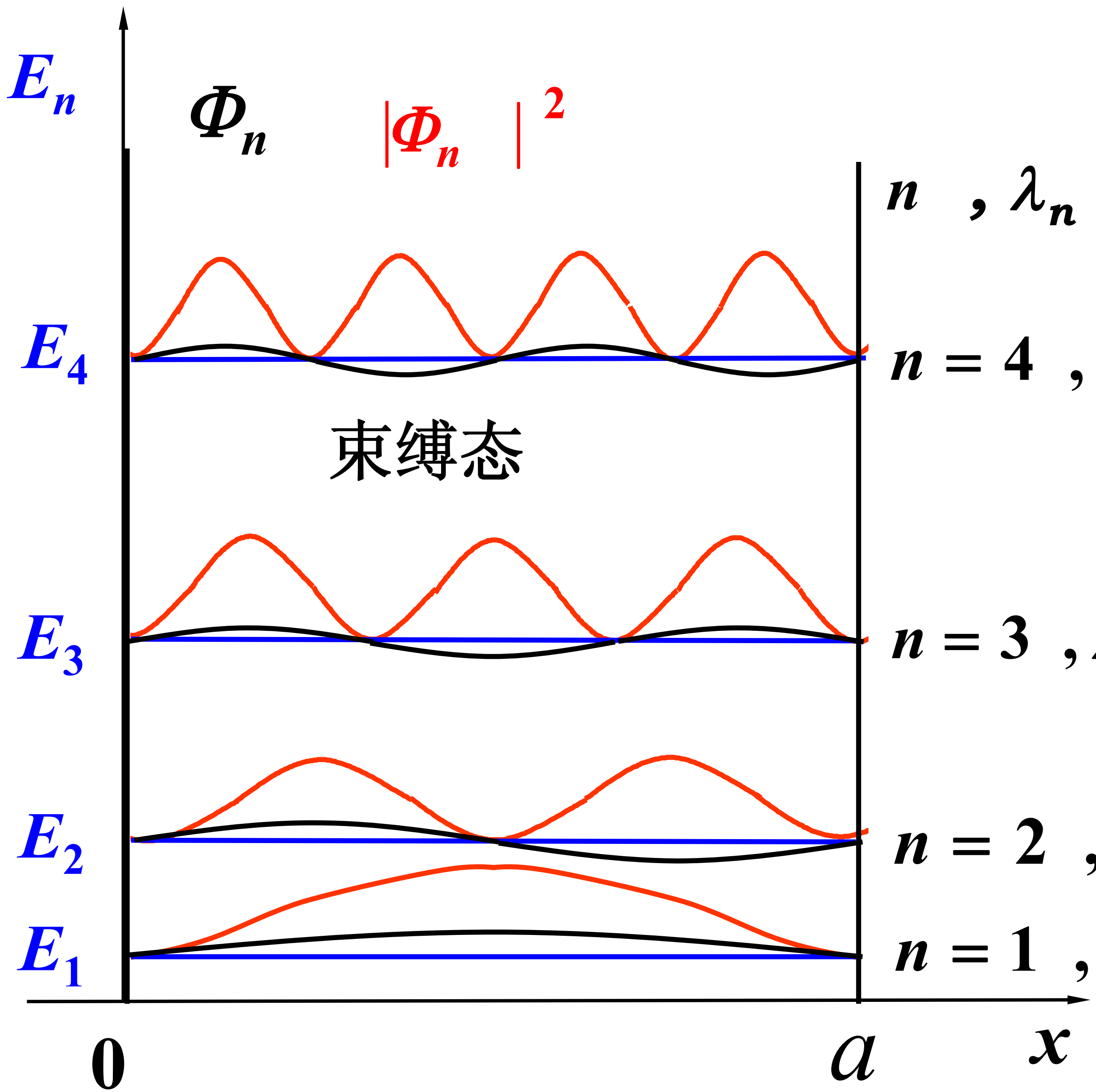
粒子的动量是量子化的

粒子德布罗意波波长

$$\lambda_n = \frac{h}{P_n} = \frac{2a}{n}, \quad n = 1, 2, 3, \cdots$$

此波长也量子化了

☆



$$n\ ,\ \lambda_n = \frac{2a}{n}$$

$$n = 4\ ,\ \lambda_4 = \frac{a}{2}$$

$$n = 3\ ,\ \lambda_3 = \frac{2a}{3}$$

$$n = 2\ ,\ \lambda_2 = a$$

$$n = 1\ ,\ \lambda_1 = 2a$$

这一结果与驻波情况比较，可以说，☆

无限深方势阱中粒子的德布罗意波具有驻波的形式

（势阱边界为波节），

每一个能量本征态对应于德布罗意波的一个

特定波长的驻波。

由于势阱中德布罗意波只有形成驻波才能稳定，

所以也可以反过来说，

势阱中的能量量子化是德布罗意波形成驻波的必然结果。

$$a = n \cdot \frac{\lambda_n}{2} \Rightarrow p_n = \frac{h}{\lambda_n} = \frac{\pi\hbar}{a} \cdot n \Rightarrow E_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \cdot n^2$$