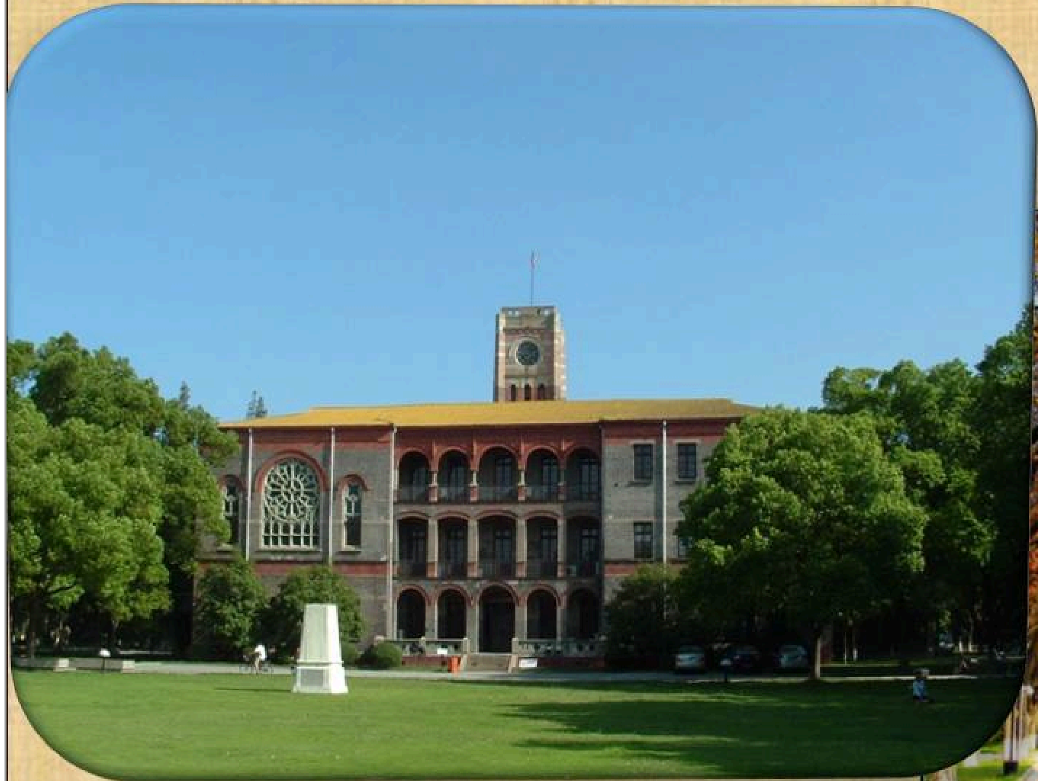
结构化学习题参考答案



2025/3/19

结构化学

17、试求在长度l=200pm的一维势箱中运动的电子，
（1）n=2跃迁到n=1时发射光子的能量，波长和波数，
（2）n=3时，电子的$\langle x^2 \rangle$, $\langle x \rangle$, $\langle p_x \rangle$与$\langle p^2 \rangle$。

解析：一维势箱粒子运动波函数和能量公式

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\frac{n\pi x}{l}; \quad E = \frac{n^2 h^2}{8ml^2}$$

（1） $\varepsilon = hv = \Delta E = \dfrac{3h^2}{8ml^2} = 4.5\times 10^{-18} J$

$$\boxed{\lambda = \frac{hc}{\varepsilon} = \frac{8ml^2 c}{3h} = 4.42\times 10^{-8} m}$$

$$\boxed{\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{3h}{8ml^2 c} = 2.26\times 10^{7} m^{-1}}$$

粒子在箱中的位置，有平均值：

$$< x >=\int_0^l \psi^*(x)\hat{x}\psi(x)dx=\frac{2}{l}\int_0^1 x\sin^2\frac{n\pi x}{l}dx=\frac{l}{2}$$

粒子位置的平方：

$$< x^2 >=\int_0^l \psi^*(x)\widehat{x^2}\psi(x)dx=\frac{2}{l}\int_0^1 x^2\sin^2\frac{n\pi x}{l}dx$$

$$=\frac{l^2}{3}-\frac{l^2}{2n^2\pi^2} \quad = 1.31\times10^{-20}\text{m}^2 = 1.31\times10^{4}\text{pm}^2$$

粒子的动量在x方向上的分量：

$$<p_x>=\int_0^l \psi^*(x)\widehat{p_x}\psi(x)dx$$

$$=\frac{2}{l}\int_0^1 \sin\frac{n\pi x}{l}(-i\hbar\frac{d}{dx})\sin\frac{n\pi x}{l}dx=0$$

粒子的动量的平方：

$$<p^2>=2mE=\frac{n^2h^2}{4l^2}=2.47\times 10^{-47}\mathrm{J^2s^2/m^2}$$

18、三维势箱中运动的电子，其薛定谔方程的解为：

$$\psi_{n_x n_y n_z} = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin\frac{n_x \pi x}{a} \sin\frac{n_y \pi y}{b} \sin\frac{n_z \pi z}{c}$$

（1）试给出在立方势箱中$E \leq 3h^2/2ma^2$的能量范围内的所有能量值，并指出每个能级的简并度。

（2）分别指出ψ_{111}、ψ_{121}和ψ_{113}状态下的节面位置和粒子出现的最可几位置。

n_x	n_y	n_z	$E=\frac{h^2}{8ma^2}(n_x^2+n_y^2+n_z^2)$	简并度
1	1	1	$E_{111}=\frac{3h^2}{8ma^2}$	1
1	1	2	$E_{112}=E_{121}=E_{211}=\frac{3h^2}{4ma^2}$	3
1	2	1		
2	1	1		
1	2	2	$E_{122}=E_{221}=E_{212}=\frac{9h^2}{8ma^2}$	3
2	2	1		
2	1	2		
1	1	3	$E_{113}=E_{131}=E_{311}=\frac{11h^2}{8ma^2}$	3
1	3	1		
3	1	1		
2	2	2	$E_{222}=\frac{12h^2}{8ma^2}=\frac{3h^2}{2ma^2}$	1

单选题 2分

对于边长为a的立方势箱中的自由粒子，$E \leq 12h^2/8ma^2$的能量范围内的能级数和状态数分别为

A 5, 11

B 4, 8

C 5, 5

D 4, 4

2025/3/19 7

结构化学

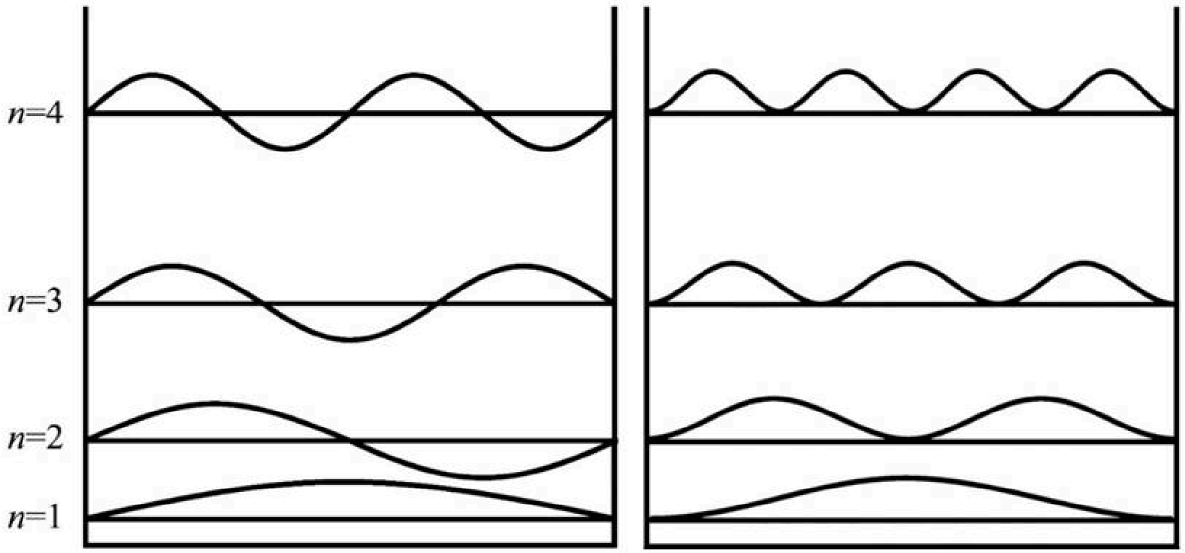
容易出错的地方：

（1）“5个能量值”和“5个状态”混淆；

（2）漏掉了 E_{113}能级

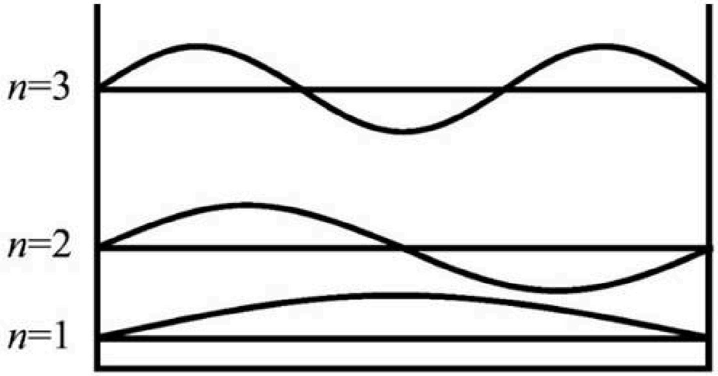
（2）分别指出ψ_{111}、ψ_{121}和ψ_{113}状态下的节面位置和粒子出现的最可几位置。

解析：节面位置即波函数$\psi=0$的位置；最可几位置即$|\psi|^2$最大的位置。对一维势箱中运动的粒子波函数：有n个极大值，n-1个节面（或节点）。

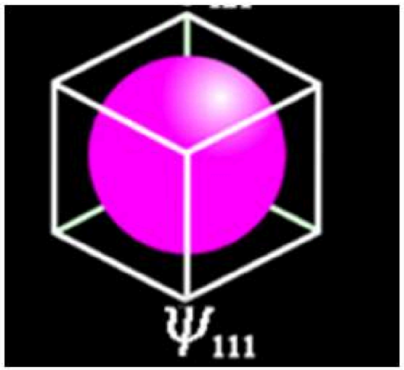


(a)波函数　　(b)概率密度（电子云）

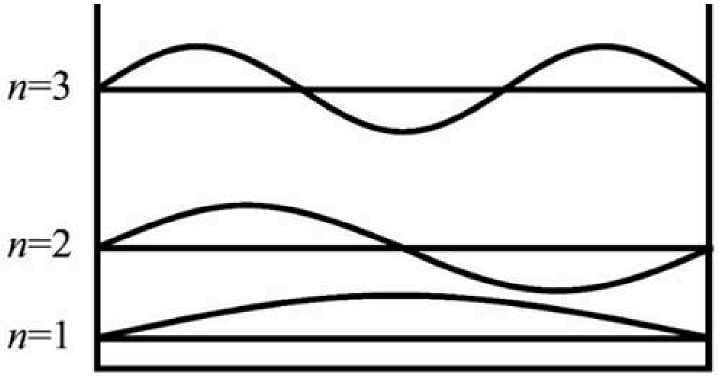
状态		量子数	节面位置	最可几位置	结论
ψ_{111}	x方向	$n_x=1$	无节面	$x = a/2$	无节面 最可几位置： （$a/2$，$b/2$，$c/2$）
	y方向	$n_y=1$	无节面	$y = b/2$	
	z方向	$n_z=1$	无节面	$z = c/2$	



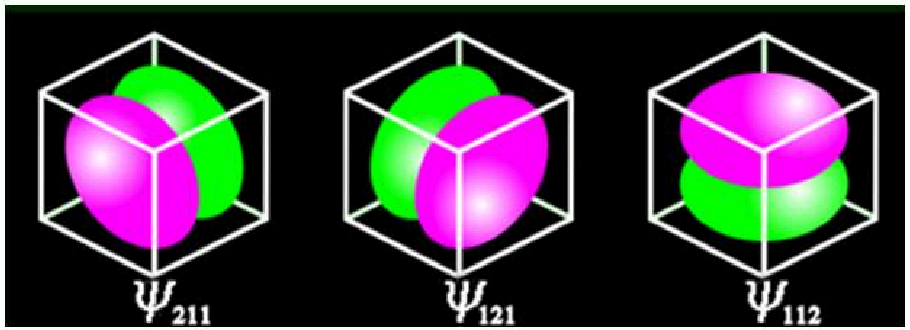
(a)波函数



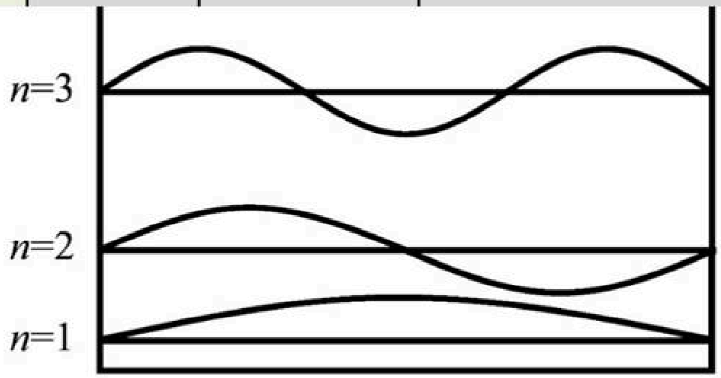
状态		量子数	节面位置	最可几位置	结论
ψ_{121}	x方向	$n_x=1$	无节面	$x=a/2$	**一个节面：$y=b/2$** **两个最可几位置：（$a/2$，$b/4$，$c/2$）（$a/2$，$3b/4$，$c/2$）**
	y方向	$n_y=2$	$y=a/2$	$y_1=b/4$ $y_2=3b/4$	
	z方向	$n_z=1$	无节面	$z=c/2$	



(a)波函数



状态		量子数	节面位置	最可几位置	结论
ψ_{113}	x方向	$n_x=1$	无节面	$x=a/2$	两个节面： $z_1=c/3$ $z_2=2c/3$ 三个最可几位置： （$a/2$，$b/2$，$c/6$） （$a/2$，$b/2$，$c/2$） （$a/2$，$b/2$，$5c/6$）
	y方向	$n_y=1$	无节面	$y=a/2$	
	z方向	$n_z=3$	$z_1=a/3$ $z_2=2a/3$	$z_1=a/6$ $z_2=a/2$ $z_3=5a/6$	



(a)波函数