原子物理学

第三章 习题课

陶军全

邮箱：taojq@mail.ihep.ac.cn

原子物理学第三章 量子力学导论

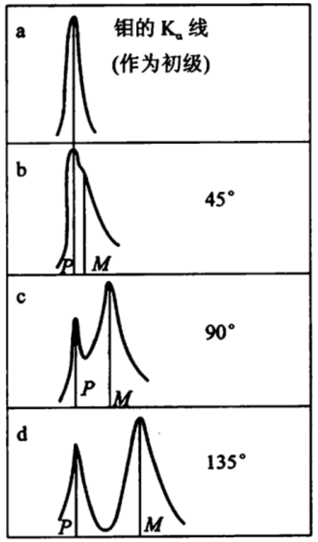
- **康普顿散射**
- **物质的波粒二象性**
- 海森堡不确定关系
- 波函数及其统计解释
- 薛定谔方程
- 平均值与算符
- 氢原子的薛定谔方程解

- 1922–23年康普顿研究了***X*** **射线在石墨上的散射**：散射的X射线 相同波长的成分 + **波长增长的部分**；**增长的数量随散射角的不同而不同**

- 新散射波长λ >入射波长λ_0，波长的偏移 $\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0$ 只与**散射角*θ***有关，和散射物质无关

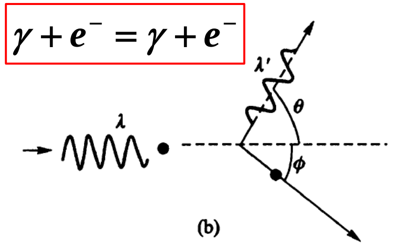
$$\boxed{\Delta\lambda = \lambda_c(1-\cos\theta) = 2\lambda_c\sin^2\frac{\theta}{2}}$$

λ_c 称为电子的康普顿波长



康普顿散射意义：支持了“**光量子**”概念，证实$E=h\nu$；实验证实了爱因斯坦提出的“**光量子具有动量**”的假设$p = E/c = h\nu/c = h/\lambda$；证实了在微观领域的单个碰撞事件中，**动量和能量守恒定律**仍然是成立的

$$\boxed{\gamma + e^- = \gamma + e^-}$$



- **高能光子+低能电子：光子能量给电子，损失能量，波长变长，频率变低**

康普顿散射公式

$$\lambda' - \lambda = \Delta\lambda = \frac{h}{m_0c}(1-\cos\theta)$$

散射光子的能量：是入射光子能量的函数 $h\nu' = \dfrac{h\nu}{1+\gamma(1-\cos\theta)}, \gamma \equiv \dfrac{h\nu}{m_0c^2}$

反冲电子的动能 $E_k = h\nu - h\nu' = h\nu\dfrac{\gamma(1-\cos\theta)}{1+\gamma(1-\cos\theta)}$ **最大能量（θ=π）** $E_{k,max} = h\nu\dfrac{2\gamma}{1+2\gamma}$ **相应光子的最小能量** $(h\nu')_{min} = \dfrac{h\nu}{1+2\gamma}$

电子的康普顿波长 $\lambda = \dfrac{hc}{m_0c^2} = \dfrac{1.240\ \text{nm}\cdot\text{keV}}{511.0\ \text{keV}} = 0.002\ 426\ \text{nm}$

杨福家，第四版，第六章 X-射线，P280

康普顿散射引起的最大位移(θ=180°)：入射波的波长增长的最大数值 $\Delta\lambda = 2\dfrac{h}{m_0c} = 0.004\ 9\ \text{nm}$

原子物理学第三章 量子力学导论

- ➢ 康普顿散射
- ➢ 物质的**波粒二象性**
- ➢ 海森堡**不确定关系**
- ➢ 波函数及其统计解释
- ➢ 薛定谔方程
- ➢ 平均值与算符
- ➢ 氢原子的薛定谔方程解

✓ **波动性**：光的干涉和衍射

✓ **粒子性**：黑体辐射，光电效应，康普顿散射等

✓ **德布罗意公式**

$$\boldsymbol{\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}} \qquad \boldsymbol{\nu = \frac{E}{h} = \frac{mc^2}{h}}$$

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE_k}}$$

✓ 电子**德布罗意**波长 $\lambda = \frac{1240eV\cdot nm}{\sqrt{2\times 0.511\times 10^6 eV\cdot E_k(eV)}} = \frac{1.226}{\sqrt{E_k(eV)}}nm$

✓ 光子波长 $\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{hc}{E} = \frac{1.24nm\cdot keV}{E} = \frac{1.24}{E_k(keV)}nm$

✓ 1927年海森堡 **位置–动量**、**能量–时间**的不确定关系 $\Delta x\Delta p_x \geqslant h$ $\Delta t\Delta E \geqslant h$

✓ 严格的不确定性关系

$$\Delta\phi\cdot\Delta p_\phi \geq \hbar/2$$

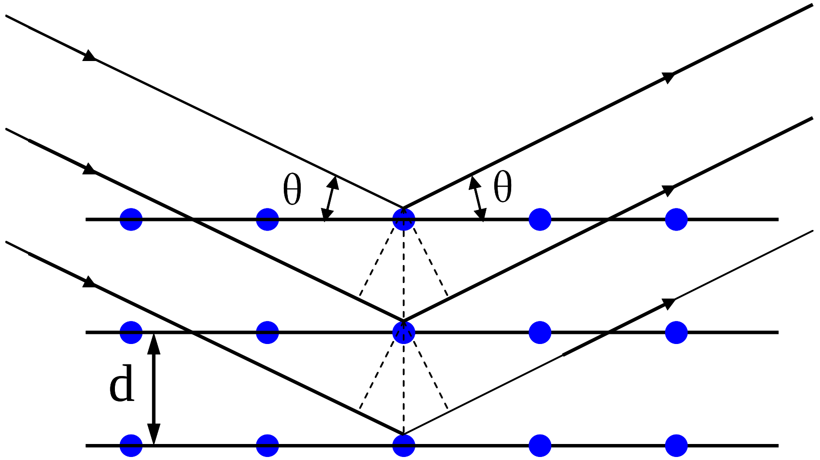
$$\Delta E\cdot\Delta t \geq \hbar/2$$

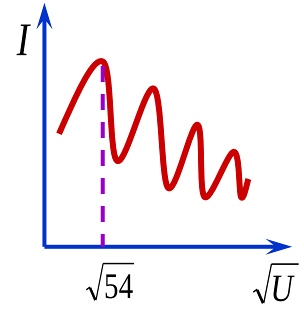
$$\begin{cases}\Delta x\cdot\Delta p_x \geq \hbar/2\\ \Delta y\cdot\Delta p_y \geq \hbar/2\\ \Delta z\cdot\Delta p_z \geq \hbar/2\end{cases}$$

✓ 不确定性与测量没有关系，是微观粒子波—粒二象性的体现：物理根源是**粒子的波动性**

✓ **戴维孙—革末实验**：电子与晶体衍射

• **波程差** $2d\sin\theta = n\lambda$ **时衍射加强----布拉格公式**





当θ、λ满足布拉格公式时，测得电流的极大值

原子物理学第三章 量子力学导论

✓概率波的**物理图像**：单缝、双缝干涉实验

✓**态的叠加原理**

事件发生概率$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{\psi}^{*}\boldsymbol{\psi} = |\boldsymbol{\psi}|^2$

狄拉克符号：$< \boldsymbol{A}| = \boldsymbol{\psi}^{*}$；$|\boldsymbol{B}> = \boldsymbol{\psi}$

Dirac符号表示事件发生概率$\boldsymbol{P} = |\langle \boldsymbol{A}|\boldsymbol{B}\rangle|^2$

态叠加（概率幅）需要服从一定的规则

双缝衍射的态叠加解释

薛定谔的猫

✓粒子具有**波动性**，应该有描述波动性的函数——**波函数**

✓1925年薛定谔提出用**波函数$\boldsymbol{\Psi(r, t)}$**描述粒子运动状态

ω角频率

✓自由粒子平面波函数(x方向运动)

$$\Psi(x,t) = \psi_0 e^{-i(\omega t-kx)} \qquad \Psi(x,t) = \psi_0 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{2\pi}{h}(Et-px)}$$

$E = \hbar\omega,\quad p = \hbar k \quad \boldsymbol{k = 2\pi/\lambda,}$

$\nu = \frac{E}{h} \quad \lambda = \frac{h}{p} \quad \boldsymbol{\omega = 2\pi/T}$

✓三维自由运动 $\boldsymbol{\Psi(\vec{r},t) = \psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)}}$

✓玻恩: 波函数的统计解释 $\Psi(\vec{\boldsymbol{r}},t)$的物理意义在于：**波函数的模的平方**（波的强度）代表时刻 t、在空间$\vec{\boldsymbol{r}}$点处，单位体积元中微观粒子出现的**概率**。

✓**概率**分布密度

- 单个粒子，$|\Psi|^2$； N个粒子，$N|\Psi|^2$
- 时刻 t、空间$\vec{\boldsymbol{r}}$点处，**体积元 dV**中发现微观粒子的概率为：

$$\rho(\vec{r},t)\mathrm{d}V = \boldsymbol{\Psi(\vec{r},t)^{*}\Psi(\vec{r},t)\mathrm{d}V}$$

- 对***N*粒子系**，在体积元 dV 中发现的粒子数为

$$\mathrm{d}N = \boldsymbol{N}\Psi(\vec{r},t)^{*}\Psi(\vec{r},t)\mathrm{d}V$$

✓波函数应满足的条件：**连续性、单值性、有限性**

✓由于粒子在空间总要出现（不考虑粒子产生和湮灭情况），所以在全空间找到粒子的几率应为1，即**归一化条件** $\int_{\Omega} \Psi^{*}(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t)\mathrm{d}V = 1$

原子物理学第三章 量子力学导论

- 康普顿散射
- 物质的波粒二象性
- 海森堡不确定关系
- 波函数及其统计解释
- **薛定谔方程**
- 平均值与算符
- 氢原子的薛定谔方程解

一维定态薛定谔方程

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

- 一维无限深方势井
- 一维有限深方势井
- 一维散射
- 一维谐振子

✓**自由粒子的薛定谔方程：自由粒子波函数微分**

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

能量算符 和 **动量算符**

$$\hat{E}\equiv i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \qquad \hat{p}_x\equiv -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

✓**非自由粒子的薛定谔方程**：含时薛定谔方程

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t)=\hat{H}\Psi(\vec{r},t)}$$

哈密顿算符 $\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+U(x,t)$

✓**三维势场中的薛定谔方程：** 薛定谔方程形式不变

哈密顿算符 $\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\vec{r},t)$

✓**定态薛定谔方程**： 微观粒子处在稳定的势场 →**势能函数U（V）与时间无关**→**定态问题**

- 哈密顿算符与时间无关，薛定谔方程可用**分离变量法**求解

$$\hat{H}\phi(r)=E\phi(r)$$

定态薛定谔方程，又称能量算符的本征方程

■一维无限深势阱

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

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

$$\rightarrow \quad \psi(x,t)=\phi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \quad \rightarrow \quad \psi(x)=A\sin kx$$

$$k^2=\frac{2mE}{\hbar^2} \qquad k=\frac{n\pi}{a},\ n=1,2,3,\cdots \qquad \rightarrow \quad E=n^2\frac{h^2}{8ma^2}$$

- 一维无限深方势阱中粒子的能量是量子化的！

归一化条件 $$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2\mathrm{d}x=\int_0^a\psi\psi^*\mathrm{d}x=1$$

$$\rightarrow \quad A=\sqrt{\frac{2}{a}}$$

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

■一维有限深势阱

$$U(x)=\begin{cases}U_0 & x<0\\ 0 & 0<x<L\\ U_0 & x>L\end{cases}$$

✓在势阱内

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

$$\rightarrow \quad \psi(x)=A\sin(kx+\varphi_0)$$

✓在势阱外

① 如果电子的能量小于阱深 U_0

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}-\frac{8\pi^2m}{h^2}[U_0-E]\psi(x)=0 \qquad \frac{d^2\psi(x)}{dx^2}-k'^2\psi(x)=0 \quad \rightarrow \quad \psi(x)\sim e^{\pm k'x}$$

描述实物粒子的波函数必须有限 $\rightarrow$ $\psi(x)=\begin{cases}A_+e^{k'x} & x<0\\ A_-e^{-k'x} & x>L\end{cases}$ $\rightarrow$ $|\psi(x)|^2\neq$ 常数

阱外电子出现的概率成衰减关系

② 电子的能量大于阱深 U_0

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{8\pi^2m}{h^2}[E-U_0]\psi(x)=0 \qquad \frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+k''^2\psi(x)=0 \quad \rightarrow \quad \psi(x)\sim e^{\pm ik''x}$$

$\psi(x)=\begin{cases}A_+e^{ik''x} & x<0\\ A_-e^{-ik''x} & x>L\end{cases}$ $\rightarrow$ $|\psi(x)|^2=$ 常数

阱外的电子类似于自由粒子而不受束缚

利用波函数在势阱边界连续（值和一阶导数值相等）的条件，并考虑粒子能量小于阱深，从而形成分立的能谱

$$\frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar}L=n\pi-2\sin^{-1}\sqrt{\frac{E_n}{U_0}}, \quad n=1,2,3,\cdots$$

无限深势阱 $U_0\rightarrow\infty \quad \rightarrow \quad E_n=\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2, \quad n=1,2,3,\cdots$

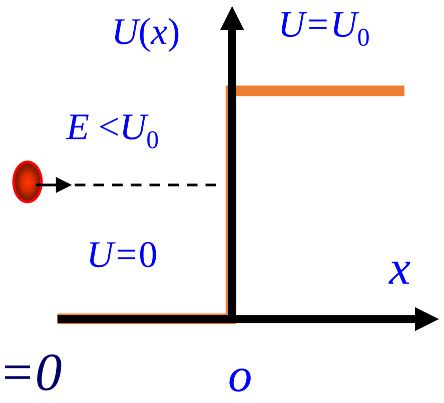
■一维散射问题

- 薛定谔方程

$x<0$: $\dfrac{d^2\Phi}{dx^2}+k_1^2\Phi=0$ $\qquad k_1^2=\dfrac{2mE}{\hbar^2}$

$x>0$: $\dfrac{d^2\Phi}{dx^2}-k_2^2\Phi=0$ $\qquad k_2^2=\dfrac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}$

$$U(x)=\begin{cases}0, & x<0\\ U_0, & x>0\end{cases}$$



- 波函数的通解

$$\Phi_1(x)=Ae^{+ik_1x}+Be^{-ik_1x}$$
$$\Phi_2(x)=Ce^{-k_2x}+De^{+k_2x}$$

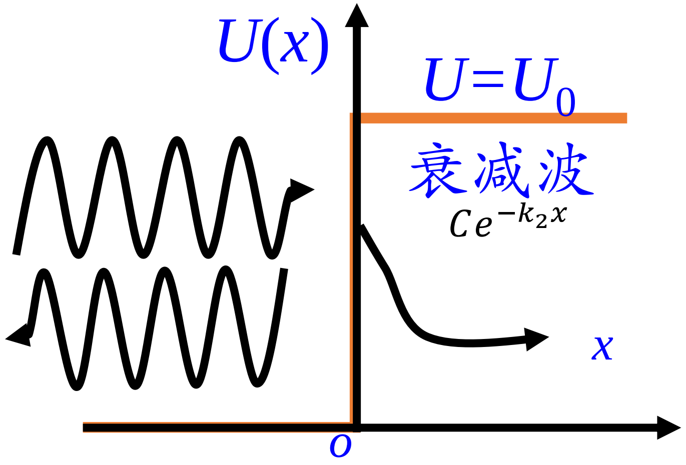
- 当$x\to\infty$，由波函数Φ_2有限 → $D=0$

$$\Phi_1(x)=Ae^{+ik_1x}+Be^{-ik_1x}$$
$$\Phi_2(x)=Ce^{-k_2x}$$

- 波函数各部分的含义

Ae^{+ik_1x} 入射波

Be^{-ik_1x} 反射波



一维散射(量子隧道效应)

$$U(x)=\begin{cases}U_0, & 0<x<a\\ 0, & x<0, x>a\end{cases}$$

- 利用薛定谔方程可以求得波函数

$\Phi_1(x)=Ae^{+ikx}+Be^{-ikx}$ 入射波+反射波

$\Phi_2(x)=De^{-k'x}+Fe^{+k'x}$ 指数衰减波

$\Phi_3(x)=Ce^{+ikx}$ 透射波（只有向右传播的波）

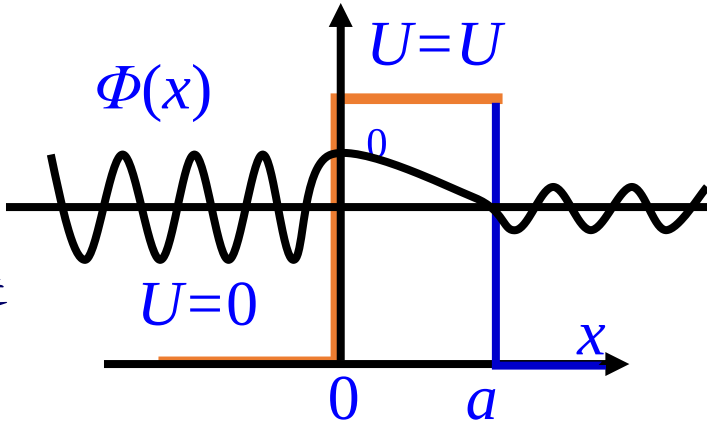
其中 $k=\sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$ $\qquad k'=\sqrt{\dfrac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}}$

透射系数$\boldsymbol{T}=\dfrac{|C|^2}{|A|^2}$：粒子穿透势垒的概率

$$T\approx e^{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}}$$

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 → 隧道效应

隧道效应的本质：微观粒子的波粒二象性。



量子隧道效应的应用:隧道二极管、扫描隧穿显微镜（STM）

■一维谐振子 (抛物线势阱)

✓ 晶体中原子围绕平衡位置作小振动时可近似认为是谐振动 $U(x) = \frac{1}{2}kx^2$

✓哈密顿量 $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2$

✓定态薛定谔方程 $dx^2 \frac{1}{2}^2$

✓简谐振动：$\boldsymbol{k = m\omega^2}$，则：$\frac{d^2\Phi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - \frac{1}{2}m\omega^2x^2)\Phi = 0$

✓利用级数展开法解该微分方程

- 能量E是量子化的

  $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ $n = 0,1,2,\cdots$

- 能量间隔均匀

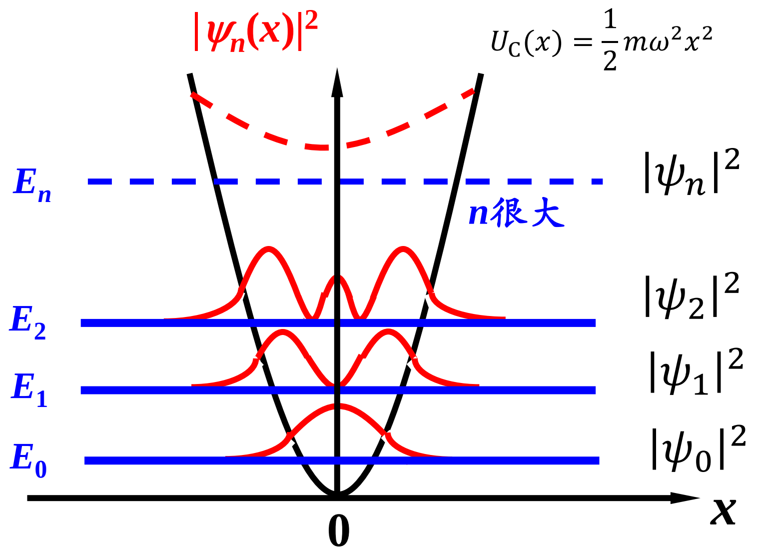
  $\hbar\omega = h\nu$

- 最低能量(零点能)不为零

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

✓ 波函数

$\psi_n(x) = (\frac{\alpha}{2n\sqrt{\pi}n!})^{1/2}H_n(\alpha x)e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$, $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$



原子物理学第三章 量子力学导论

- 康普顿散射
- 物质的波粒二象性
- 海森堡不确定关系
- 波函数及其统计解释
- 薛定谔方程
- 平均值与算符
- 氢原子的薛定谔方程解

✓ 算符的**本征值**：算符$\hat{A}$的本征方程 $\hat{A}\psi_A = A\psi_A$

- **算符$\hat{A}$**的一套**本征函数ψ_A**和相应的一套**本征值A**
- $\hat{A}$的本征函数 ψ_n是 A 取定值A_n的本征态

✓ **本征函数的性质（以一维为例）** $\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*(x)\psi_n(x)\mathrm{d}x=1$

- 本征函数总可以归一化
- 本征函数有正交性（可严格证明）

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_m^*(x)\psi_n(x)\mathrm{d}x=\delta_{mn}=\begin{cases}1, & m=n\\ 0, & m\neq n\end{cases}$$

- 本征函数具有完备性

$$\Psi(x)=\sum_{n=1}^{\infty}C_n\psi_n(x),\quad \sum_{n=1}^{\infty}|C_n|^2=1$$

✓波函数在时空(坐标表象)和动量表象中的表示

* 时空坐标空间：$\Psi(\vec{r},t)$
* 动量坐标空间：$\Phi(\vec{p},E)$

✓在动量表象中，**动量的平均值**

$$\bar{p}=\int_{-\infty}^{+\infty}\Phi^*(k)p\Phi(k)dk \quad 其中：p=\hbar k,$$

$$\Phi(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi(x)e^{-ikx}dx \qquad \Psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\Phi(k)e^{ikx}dk$$

$$\bar{p}=\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi(x)dx \qquad \hat{p}_x=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

算符的引入

$$\bar{p}=\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x)\hat{p}_x\Psi(x)dx$$

✓推广到**不同力学量A的平均值**

$$\bar{A}=\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(\vec{r})\hat{A}\Psi(\vec{r})d\vec{r}$$

量子力学的又一基本假设：系统的任何**力学量均对应一个算符**，力学量所能取的**值**是其相应算符的**本征值**

- **坐标算符**： $\vec{r}\rightarrow\hat{\vec{r}}=\vec{r}$ $\quad\hat{x}=x$
- **动能算符** $\hat{\vec{p}}^2\rightarrow\hat{\vec{p}}\cdot\hat{\vec{p}}=(-i\hbar\nabla)\cdot(-i\hbar\nabla)=-\hbar^2\nabla^2$ $\quad T=\frac{p^2}{2m}\quad\rightarrow\quad\hat{T}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$
- **能量算符**（哈密顿算符） $E=\frac{\vec{p}^2}{2m}+U(\vec{r})\quad\rightarrow\quad\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\vec{r})$
- **薛定谔方程**：$\hat{H}\psi(\vec{r})=E\psi(\vec{r})$ 求解**哈密度算符的本征方程**

能量→本征值 波函数→本征函数

原子物理学第三章　量子力学导论

- ➢ 康普顿散射
- ➢ 物质的波粒二象性
- ➢ 海森堡不确定关系
- ➢ 波函数及其统计解释
- ➢ **薛定谔方程**
- ➢ 平均值与算符
- ➢ 氢原子的薛定谔方程解

✓ 氢原子光谱的量子力学解释：**用薛定谔方程唯一可以严格求解的原子结构问题**

波函数形式　$\psi(r,\theta,\phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$

得到三个微分方程，　分别与 E　$\hat{L}^2$　$\hat{L}_z$　**有关**

$$\left\{\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2m}{\hbar^2}[E-U(r)]-\frac{l(l+1)}{r^2}\right\}[rR(r)]=0$$

$$\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}(\sin\theta\frac{d}{d\theta})+[l(l+1)-\frac{m_l^2}{\sin^2\theta}]\right\}\Theta(\theta)=0$$

$$\left\{\frac{d^2}{d\varphi^2}+m_l^2\right\}\Phi(\varphi)=0$$

三个物理量都自然得出量子化的结果

E 能量　$E_n=-\frac{m_e e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 2\hbar^2}\frac{Z^2}{n^2}$

$L=\sqrt{l(l+1)}\hbar$　**系统总角动量**

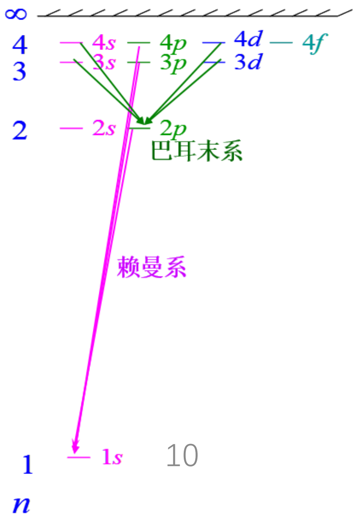
$L_z=m_l\hbar$　**角动量在在z轴投影**

- **主量子数n=1,2,3,⋯**:决定电子的**能量**，具有相应能量的电子依次称为K，L，M，N，O，P，⋯**主壳层的电子**；
- **角量子数l=0, 1, 2,⋯n-1**:决定电子的**角动量**，l=0,1,2,3,4,5,⋯的态依次称为*s,p,d,f,g,h*，⋯态，处于这些态上的电子依次称为*s,p,d,f,g,h*,⋯电子，也叫**次壳层电子**；
- **磁量子数m=0,±1，±2，⋯±l**: 决定核外电子**角动量在z方向上分量的大小**，磁量子数m与**电子的磁矩**有关，m可表示为m_l，m_l可取$2l+1$个值
- 氢原子能级是n^2度简并的：$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)=n^2$

✓**氢原子的波函数与量子数**

$$\psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi)=R_{n,l}(r)\Theta_{l,m}(\theta)\Phi_m(\varphi)\quad \begin{matrix} n=1,2,3\cdots\cdots \\ l=0,1,2\cdots\cdots n-1 \\ m=0,\pm1,\pm2,\pm3\cdots\cdots\pm l \end{matrix}$$

✓ **跃迁的选择定则**　$\begin{cases} \Delta l=\pm1 \\ \Delta m_l=0,\pm1 \end{cases}$



杨福家《原子物理》第四版148-150页

作业： 习题3-2,4,6,7,8,9,11,13,15

1. 注意**单位**书写

2. **过程** > 结果

3. **不要留白** （特别是考试）

3-6 $\lambda_e = \frac{h}{mc}$ $E^2 = E_0^2 + p^2c^2$

$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{hc}{\sqrt{E^2-E_0^2}} = \frac{hc}{\sqrt{E^2-m_0^2c^4}} = \frac{hc}{m_0c^2\sqrt{(E/E_0)^2-1}} = \frac{\lambda_e}{\sqrt{(E/E_0)^2-1}}$

$\frac{\lambda_e}{\lambda} = \sqrt{(\frac{E}{E_0})^2-1}$

当 $\lambda=\lambda_e$ 时，有 $(\frac{E}{E_0})^2-1=1$ $E=\sqrt{2}E_0$

$\boxed{E_k = E - E_0 = (\sqrt{2}-1)m_0c^2 = 0.21}$

3-13. $\bar{U} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a_1}$

3-15 (1) $k\cot(ka) = -\kappa$

$k = \sqrt{2mE}/\hbar$ $\kappa = \sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar$

(2) $V_0 a^2 \geq \frac{h^2}{32m}$

缺乏具体解题过程

3-11

3-13 $\bar{U} = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^* U \psi d\tau = \int_0^\infty |\psi|^2 (-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}) 4\pi r^2 dr$

$= -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a_1}$

3-15 $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V(x)\psi_1(x) = E\psi_1(x)$

常用公式

康普顿散射：$\Delta\lambda = \frac{h}{m_0c}(1-\cos\varphi)$ ，反冲电子能量：$E_{k,max} = h\nu\frac{2\gamma}{1+2\gamma}, \gamma = \frac{h\nu}{m_0c^2}$

动量算符：$\widehat{p_x} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$

动量平均值：$\bar{p} = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)\widehat{p_x}\psi(x)dx$

维恩位移定律：$T\lambda_m = b, b \sim 2.9\times10^{-3}$ m K

斯特潘-玻尔兹曼公式：$E = \sigma T^4, \sigma \sim 5.7\times10^{-8}$ W/(m²K⁴)

阿伏伽德罗常数：$N_A = 6.02\times10^{23}$

真空中光速：$c = 3\times10^8$ m/s

普朗克常数：$h = 6.62\times10^{-34}$ J·s

3-2 设光子和电子的波长均为0.4 nm,试问:(1)光子的动量与电子的动量之比是多少?(2)光子的动能与电子的动能之比是多少?

（1）德布罗意公式 （粒子动量与其伴随的波长的关系）

$$P=\frac{h}{\lambda} \qquad \lambda_e=\lambda_\gamma=0.4nm \qquad P_e/P_\gamma=\frac{\lambda_\gamma}{\lambda_e}=1$$

（2）相对论下的能动量关系，$E^2=E_0^2+\vec{P}^2c^2$ ，其中静止能量 $E_0^2=m_0^2c^4$ ➡ $E^2=m_0^2c^4+\vec{P}^2c^2$

$$E^2-\vec{P}^2c^2=m_0^2c^4$$

光子的静质量为0

$$E_\gamma=|\vec{P}_\gamma|c=\frac{h}{\lambda_\gamma}c=\frac{6.6260\times10^{-34}J\cdot s}{0.4\times10^{-9}m}\cdot3\times10^8m/s=4.9695\times10^{-16}J$$

$$1eV=1.6\times10^{-19}J$$

$$E_\gamma=\frac{4.9695\times10^{-16}J}{1.602\times10^{-19}J/eV}=3.102\times10^3eV$$

$$E=h\nu=\frac{hc}{\lambda}=\frac{1.24\ \text{nm}\cdot\text{keV}}{0.4\ \text{nm}}=3.1\times10^3\ \text{eV}$$

电子静质量不为零

$$m_e=9.1093\times10^{-31}kg$$
$$m_ec^2=0.511MeV$$

$$E_e=\frac{1}{2}m_ev^2=\frac{p_e^2}{2m_e}=\frac{1}{2m_e}\left(\frac{h}{\lambda_e}\right)^2=\frac{1}{2\times9.1093\times10^{-31}kg}\left(\frac{6.6260\times10^{-34}J\cdot s}{0.4\times10^{-9}m}\right)^2=1.5061\times10^{-18}J$$

$$E_e=\frac{1.5061\times10^{-18}J}{1.602\times10^{-19}J/eV}=9.413eV$$

电子德布罗意波长 $\lambda=\frac{h}{p}=\frac{h}{\sqrt{2mE_k}}$

$$E_k=\frac{p^2}{2m_e}=\frac{h^2}{2m_e\lambda^2}=\frac{(hc)^2}{2m_ec^2\lambda^2}=\frac{(1.24\ \text{nm}\cdot\text{keV})^2}{2\times0.511\ \text{MeV}\times(0.4\ \text{nm})^2}=9.4\ \text{eV}$$

$$\frac{E}{E_k}=\frac{3.1\times10^3\ \text{eV}}{9.4\ \text{eV}}=3.3\times10^2$$

3－4　把热中子窄束射到晶体上，由布拉格衍射图样可以求得热中子的能量．若晶体的两相邻布拉格面间距为0.18 nm，一级布拉格掠射角（入射束与布拉格面之间的夹角）为30°，试求这些热中子的能量．

由布拉格散射公式　$2d\sin\alpha = n\lambda$ ➡ $\lambda = \dfrac{2d\sin\alpha}{n}$

对于一级散射，**n=1**

$$\lambda = \frac{2d\sin\alpha}{n} = 2\times 0.18\times\sin 30^{o} = 0.18nm$$

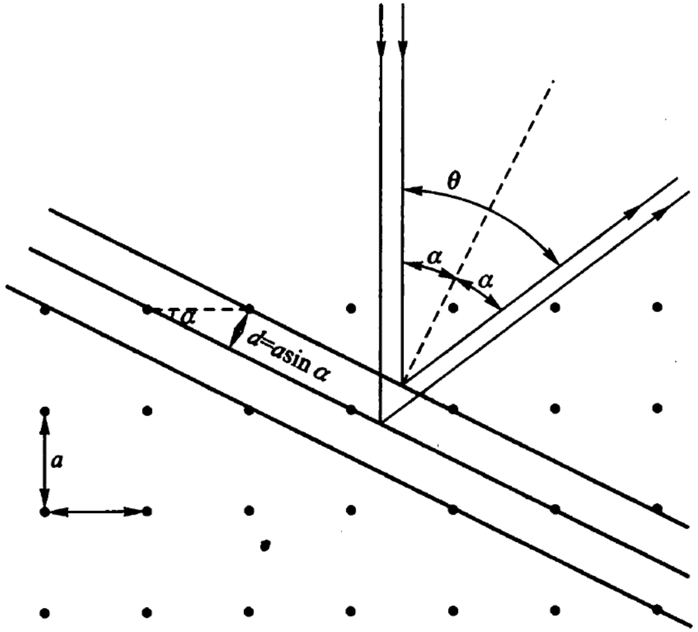


图 12.6　强“散射”是从间隔为 *d* 的布拉格平面族上的“反射”引起的

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE_k}}$$

$$E = \frac{p^2}{2m_n} = \frac{h^2}{2m_n\lambda^2} = \frac{(hc)^2}{2m_nc^2\lambda^2}$$

中子静止质量

$m_nc^2 = 940MeV$

$$\boldsymbol{E} = \frac{1}{2m_nc^2}\left(\frac{hc}{\lambda}\right)^2 = \frac{1}{2\times 940\times 10^6 eV}\left(\frac{1.2423\times 10^3 eV\cdot nm}{0.18nm}\right)^2$$

$$= \frac{1}{2\times 940eV}\left(\frac{1.2423eV}{0.18}\right)^2 = \mathbf{0.025eV}$$

3－6 （1）试证明：一个粒子的康普顿波长与其德布罗意波长之比等于

$$\sqrt{\left(\frac{E}{E_0}\right)^2-1}$$

式中 E_0 和 E 分别是粒子的静止能量和运动粒子的总能量.（康普顿波长 $\lambda_c=\frac{h}{mc}$，m 为粒子静止质量，其意义在第六章中讨论）

（2）当电子的动能为何值时，它的德布罗意波长等于它的康普顿波长？

（1）粒子的德布罗意波长 $\lambda=\frac{h}{P}$

对于相对论粒子，相对论下的**能动量关系**

$E^2=E_0^2+\vec{P}^2c^2$　　静能 $E_0^2=m_0^2c^4$

$$\lambda=\frac{hc}{\sqrt{E^2-{E_0}^2}}=\frac{hc}{E_0\sqrt{(E/E_0)^2-1}}=\frac{hc}{m_0c^2\sqrt{(E/E_0)^2-1}}$$

康普顿波长为 $\lambda_c=\frac{h}{m_0c}$

$$\lambda_c/\lambda=\frac{1}{\sqrt{(E/E_0)^2-1}}$$

（2）当**德布罗意波长等于康普顿波长**为 $\lambda_c/\lambda=1$

$\sqrt{(E/E_0)^2-1}=1$ ➡ $(E/E_0)^2-1=1$

$(E/E_0)^2=2$ ➡ $(E/E_0)=\sqrt{2}$ ➡ $E=\sqrt{2}E_0$

总能量=静能+动能 → 动能 =总能量E-静能E_0

$$E_k=E-E_0=\left(\sqrt{2}-1\right)E_0=\left(\sqrt{2}-1\right)m_0c$$

$$=\left(\sqrt{2}-1\right)*0.511MeV=0.21MeV$$

3－7　一原子的激发态发射波长为600 nm的光谱线，测得波长的精度为 $\Delta\lambda/\lambda=10^{-7}$，试问该原子态的寿命为多长？

已知光子波长的精度或者不确定度为 $\frac{\Delta\lambda}{\lambda}=10^{-7}$

$$E=h\nu=\frac{hc}{\lambda}$$

$$\Delta E=\left|h\Delta\left(\frac{c}{\lambda}\right)\right|=\left|h\frac{c\Delta\lambda}{\lambda^2}\right|=\frac{ch}{\lambda}\frac{\Delta\lambda}{\lambda}$$

$$hc=1.24nm\cdot keV$$

$$\Delta E=\frac{ch}{\lambda}\frac{\Delta\lambda}{\lambda}=\frac{1.24nm\cdot keV}{600nm}\cdot 10^{-7}$$

$$=2.07\times10^{-7}eV$$

根据海森堡不确定关系

$$\Delta E\cdot\Delta t\geq\frac{\hbar}{2}\quad\rightarrow\quad\Delta t\geq\frac{\hbar}{2\Delta E}$$

$$\Delta t\geq\frac{\hbar c}{2\Delta Ec}\qquad\qquad\Delta t\geq\frac{\frac{hc}{2\pi}}{2\Delta Ec}$$

$$\Delta t\geq\frac{\frac{1.24nm\cdot kev}{2\times3.14}}{2\times2.07\times10^{-7}\times3\times10^{8}}$$

$$\boldsymbol{\Delta t\geq1.6\times10^{-9}s}$$

所以该原子态的寿命 τ 应该大于 1.6×10^{-9} s.

3－8　一个电子被禁闭在线度为10 fm的区域中，这正是原子核线度的数量级，试计算它的最小动能.

海森堡不确定关系 $\Delta p \cdot \Delta r \geq \frac{\hbar}{2}$

位置不确定性 $\Delta r \leq 10fm$

最大尺度为$\Delta r = 10fm$，此时对应的动量最小

$$\Delta p \geq \frac{\hbar}{2\Delta r}, \qquad \Delta p \geq \frac{\hbar c}{2\Delta r c}$$

$$\hbar c = 197nm \cdot eV$$

$$\Delta p \geq \frac{197nm \cdot eV}{2 \times 10fm \times 3 \times 10^8 m/s}$$

$$\Rightarrow \Delta p \geq \frac{9.85MeV}{c}$$

$$p_{\min} = \frac{9.85MeV}{c}$$

若用非相对论动量计算　$p = mv$

$$v_e = \frac{p}{m_e} = \frac{9.85MeV \cdot c}{m_e c^2} \qquad m_e c^2 = 0.511MeV$$

$$v_e = \frac{p}{m_e} = \frac{9.85MeV \cdot c}{0.511MeV} > c \qquad (\text{X})$$

因此计算动能是需要利用**相对论下的能动量关系式**（质壳方程）$E^2 = E_0^2 + \vec{P}^2 c^2$

$$E = \sqrt{E_0^2 + \vec{P}^2 c^2} = \sqrt{(m_e c^2)^2 + \vec{P}^2 c^2}$$

$$E = \sqrt{(m_e c^2)^2 + \frac{9.85^2 MeV}{c^2} c^2} = \sqrt{(m_e c^2)^2 + 9.85^2 MeV}$$

$$= \sqrt{(0.511MeV)^2 + 9.85^2 MeV} \approx 9.85MeV$$

则电子的**动能=总能量E-静能量**$E_0$$= 9.85 - 0.511 = $ $\boldsymbol{9.34MeV}$

3-9 已知粒子波函数 $\psi = N\exp\left\{-\frac{|x|}{2a}-\frac{|y|}{2b}-\frac{|z|}{2c}\right\}$，试求：(1)归一化常数 N；(2)粒子的 x 坐标在 0 到 a 之间的概率；(3)粒子的 y 坐标和 z 坐标分别在 $-b$ 到 $+b$ 和 $-c$ 到 $+c$ 之间的概率.

（1）根据波函数归一化条件 $1=\int \psi^* \psi dxdydz$

没有虚部，所以 $\psi^* = \psi = Ne^{\left\{-\frac{|x|}{2a}-\frac{|y|}{2b}-\frac{|z|}{2c}\right\}}$

$$1 = N^2 \iiint e^{\left\{-\frac{|x|}{a}-\frac{|y|}{b}-\frac{|z|}{c}\right\}}dxdydz$$

因为波函数是对称的，所以从负无穷积分到正无穷，可以看做每个方向从0到正无穷积分的2倍

$$1 = N^2\int_0^\infty 2e^{-\frac{x}{a}}dx\int_0^\infty 2e^{-\frac{y}{b}}dy\int_0^\infty 2e^{-\frac{z}{c}}dz$$

$$= 8N^2\int_0^\infty e^{-\frac{x}{a}}dx\int_0^\infty e^{-\frac{y}{b}}dy\int_0^\infty e^{-\frac{z}{c}}dz$$

$\int_0^\infty e^{-\frac{x}{a}}dx = \left[-ae^{-\frac{x}{a}}\right]_0^\infty = a$

$$1 = 8N^2abc \Rightarrow N = \frac{1}{\sqrt{8abc}}$$

（2）x积分范围为0到a

$$p = \int \psi * \psi dxdydz$$

$$= \iiint N^2 e^{2\left\{-\frac{|x|}{2a}-\frac{|y|}{2b}-\frac{|z|}{2c}\right\}}dxdydz$$

$$= \frac{1}{8abc}\int_0^a e^{-\frac{x}{a}}dx\int_0^\infty 2e^{-\frac{y}{b}}dy\int_0^\infty 2e^{-\frac{z}{c}}dz$$

$$= 4\frac{1}{8abc}bc\int_0^a e^{-\frac{x}{a}}dx$$

$$= \frac{1}{2a}\int_0^a e^{-\frac{x}{a}}dx = \frac{1}{2a}a\left(1-\frac{1}{e}\right)$$

$$= \frac{1}{2}\left(1-\frac{1}{e}\right)$$

3－9　已知粒子波函数 $\psi = N\exp\left\{-\frac{|x|}{2a}-\frac{|y|}{2b}-\frac{|z|}{2c}\right\}$，试求：(1)归一化常数 N；(2)粒子的 x 坐标在 0 到 a 之间的概率；(3)粒子的 y 坐标和 z 坐标分别在 $-b$ 到 $+b$ 和 $-c$ 到 $+c$ 之间的概率.

（3）y积分范围为-b到b (0到b积分的2倍)，z积分范围为-c到c (0到c积分的2倍)

$$p=\int\psi*\psi dxdydz=\iiint N^2e^{2\left\{-\frac{|x|}{2a}-\frac{|y|}{2b}-\frac{|z|}{2c}\right\}}dxdydz$$

$$=\frac{1}{8abc}\int_0^{\infty}2e^{-\frac{x}{a}}dx\int_0^{b}2e^{-\frac{y}{b}}dy\int_0^{c}2e^{-\frac{z}{c}}dz$$

$$=8\frac{1}{8bc}\int_0^{b}e^{-\frac{y}{b}}dy\int_0^{c}e^{-\frac{z}{c}}dz$$

$$=\frac{1}{bc}b\left(1-\frac{1}{e}\right)c\left(1-\frac{1}{e}\right)$$

$$=\left(1-\frac{1}{e}\right)^2$$

3－11 对于在阱宽为 a 的一维无限深阱中运动的粒子，计算在任意本征态 ψ_n 中的平均值 $\bar{x}$ 及 $\overline{(x-\bar{x})^2}$，并证明：当 $n\to\infty$ 时，上述结果与经典结果相一致.

一维无限深势阱的波函数为

$$\psi_n(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\left(\dfrac{n\pi x}{a}\right) & n=0,1,2\ldots;\ 0<x<a\\ 0 & x<0,x>a\end{cases}$$

$$\bar{x}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)x\psi(x)dx=\frac{2}{a}\int_0^a\sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)xdx$$

$$\sin^2 x=\frac{1-\cos 2x}{2}\qquad \bar{x}=\frac{2}{a}\int_0^a\left(\frac{x}{2}-\frac{x\cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)}{2}\right)dx$$

$$\int_0^a x\cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)dx=\frac{1}{\left(\frac{2n\pi}{a}\right)^2}\cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)-\frac{1}{\left(\frac{2n\pi}{a}\right)}x\sin\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)\Bigg|_0^a$$

$$=\frac{1}{\left(\frac{2n\pi}{a}\right)^2}\cos\left(\frac{2n\pi a}{a}\right)-\frac{1}{\left(\frac{2n\pi}{a}\right)}a\sin\left(\frac{2n\pi a}{a}\right)-\frac{1}{\left(\frac{2n\pi}{a}\right)^2}\cos(0)+\frac{1}{\left(\frac{2n\pi}{a}\right)}0\sin(0)$$

$$=\frac{1}{\left(\frac{2n\pi}{a}\right)^2}-\frac{1}{\left(\frac{2n\pi}{a}\right)^2}=0$$

$$\bar{x}=\frac{2}{a}\int_0^a\frac{x}{2}dx=\frac{a}{2}$$

$$\overline{(x-\bar{x})^2}=\overline{x^2-2x\bar{x}+\bar{x}^2}$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)(x^2-2x\bar{x}+\bar{x}^2)\psi(x)dx$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)x^2\psi(x)dx-\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)2x\bar{x}\psi(x)dx+\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\bar{x}^2\psi(x)dx$$

$\bar{x}$ 是具体的数，因此可以提到积分外面

$$\overline{(x-\bar{x})^2}$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)x^2\psi(x)dx-2\bar{x}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)x\psi(x)dx+\bar{x}^2\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\psi(x)dx$$

$$=\overline{x^2}-2\bar{x}\bar{x}+\bar{x}^2$$

$$=\overline{x^2}-\bar{x}^2$$

3－11 对于在阱宽为 a 的一维无限深阱中运动的粒子，计算在任意本征态 ψ_n 中的平均值 $\bar{x}$ 及 $\overline{(x-\bar{x})^2}$，并证明：当 $n\to\infty$ 时，上述结果与经典结果相一致.

$$\overline{x^2}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)x^2\psi(x)dx=\frac{2}{a}\int_0^a\sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)x^2dx$$

$$=\frac{2}{a}\int_0^a\left(\frac{x^2}{2}-\frac{x^2\cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)}{2}\right)dx$$

$$\overline{x^2}==\frac{2}{a}\int_0^a\frac{x^2}{2}dx-\frac{1}{a}\frac{a^3}{2n^2\pi^2}=\frac{1}{a}\int_0^a x^2dx-\frac{a^2}{2n^2\pi^2}$$

$$=\frac{a^2}{3}-\frac{a^2}{2n^2\pi^2}$$

$$\int_0^a x^2\cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)dx=\frac{1}{\left(\frac{2n\pi}{a}\right)}x^2\sin\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)+\frac{2}{\left(\frac{2n\pi}{a}\right)^2}x\cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)-\frac{2}{\left(\frac{2n\pi}{a}\right)^3}\sin\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)\Bigg|_0^a$$

$$=\frac{1}{\left(\frac{2n\pi}{a}\right)}a^2\sin\left(\frac{2n\pi a}{a}\right)+\frac{2}{\left(\frac{2n\pi}{a}\right)^2}a\cos\left(\frac{2n\pi a}{a}\right)-\frac{2}{\left(\frac{2n\pi}{a}\right)^3}\sin\left(\frac{2n\pi a}{a}\right)$$
$$-\left(\frac{1}{\left(\frac{2n\pi}{a}\right)}0\sin\left(\frac{2n\pi 0}{a}\right)+\frac{2}{\left(\frac{2n\pi}{a}\right)^2}0\cos\left(\frac{2n\pi 0}{a}\right)-\frac{2}{\left(\frac{2n\pi}{a}\right)^3}\sin\left(\frac{2n\pi 0}{a}\right)\right)$$

$$=0+\frac{2}{\left(\frac{2n\pi}{a}\right)^2}a-0-(0)=\frac{2}{\left(\frac{2n\pi}{a}\right)^2}a=\frac{2a^3}{4n^2\pi^2}=\frac{a^3}{2n^2\pi^2}$$

$$\overline{(x-\bar{x})^2}=\overline{x^2}-\bar{x}^2$$
$$=\frac{a^2}{3}-\frac{a^2}{2n^2\pi^2}-\frac{a^2}{4}$$
$$=\frac{a^2}{12}-\frac{a^2}{2n^2\pi^2}$$

所以当 $n\to\infty$

量子与经典结果相一致

对于经典物理，粒子在势井中位置的概率都一样。
粒子处于dx区间内的概率$\frac{dx}{a}$

$$\bar{x}=\int_0^a x\frac{dx}{a}=\frac{1}{a}\int_0^a xdx=\frac{a}{2}\qquad \overline{x^2}=\frac{1}{a}\int_0^a x^2dx=\frac{a^2}{3}$$

$$\overline{(x-\bar{x})^2}=\overline{x^2}-\bar{x}^2=\frac{a^2}{3}-\frac{a^2}{4}=\frac{a^2}{12}$$

3－13 设氢原子处在波函数为 $\psi(r,\theta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{\pi a_1^3}}e^{-r/a_1}$ 的基态，a_1 为玻尔第一半径，试求势能 $U(r)=-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}$ 的平均值.

$$\bar{U}=\int_0^\infty\int_0^\pi\int_0^{2\pi}\psi(r,\theta,\varphi)^*U\psi(r,\theta,\varphi)r^2\sin\theta\,drd\theta d\varphi$$

因为波函数与势场与角度无关，并且波函数为实函数，
所以共轭为其本身

$$\bar{U}=\int_0^\infty\psi(r,\theta,\varphi)^*U\psi(r,\theta,\varphi)r^2dr\int_0^\pi\sin\theta\,d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi$$

$$=4\pi\int_0^\infty\psi(r,\theta,\varphi)^*U\psi(r,\theta,\varphi)r^2dr$$

$$=4\pi\int_0^\infty|\psi(r,\theta,\varphi)|^2Ur^2dr$$

$$=-4\pi\int_0^\infty\frac{1}{\pi a_1^3}e^{-\frac{2r}{a_1}}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}r^2dr$$

$$=-\frac{e^2}{\varepsilon_0}\frac{1}{\pi a_1^3}\int_0^\infty e^{-\frac{2r}{a_1}}rdr$$

$$a=-\frac{2}{a_1}$$

$$\int re^{-ar}dr=\frac{1}{a^2}\int are^{-ar}dar$$

$$=\frac{1}{a^2}\int(-ar)e^{-ar}d(-ar)$$

$$=\frac{1}{a^2}(-ar-1)e^{-ar}$$

$$=-\frac{1}{a^2}(ar+1)e^{-ar}$$

$$\bar{U}=-\frac{e^2}{\varepsilon_0}\frac{1}{\pi a_1^3}\int_0^\infty e^{-\frac{2r}{a_1}}rdr$$

$$=-\frac{e^2}{\varepsilon_0}\frac{1}{\pi a_1^3}\left(-\frac{1}{\left(-\frac{2}{a_1}\right)^2}\left(-\frac{2r}{a_1}+1\right)e^{-\frac{2r}{a_1}}\right)_0^\infty$$

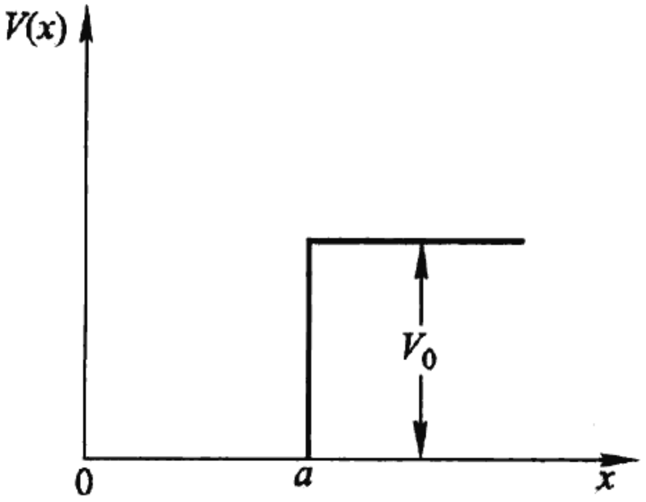
$$=-\frac{e^2}{\varepsilon_0}\frac{1}{\pi a_1^3}\left(-\left(-\frac{1}{\left(-\frac{2}{a_1}\right)^2}\left(-\frac{2\times0}{a_1}+1\right)e^{-\frac{2\times0}{a_1}}\right)\right)$$

$$=-\frac{e^2}{\varepsilon_0}\frac{1}{\pi a_1^3}\left(\frac{a_1^2}{4}\right)$$

$$=-\frac{e^2}{4\pi a_1\varepsilon_0}$$

3－15 设质量为 m 的粒子在半壁无限高的一维方阱中运动，此方阱的表达式为：

$$V(x)=\begin{cases}\infty & x<0\\ 0 & 0\leqslant x\leqslant a\\ V_0 & x>a\end{cases}$$



试求在 $E<V_0$ 的束缚态情况下：

（1）粒子能级的表达式；

（2）证明在此阱内至少存在一个束缚态的条件是，阱深 V_0 和阱宽 a 之间满足关系式：

$$V_0a^2\geqslant\frac{\hbar^2}{32m}$$

由于势场是不含时的，所以**定态薛定谔方程**可以写成

$$\begin{cases}-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\psi_1(x)}{dx^2}+V(x)\psi_1(x)=E\psi_1(x),\text{区域I，}\ x<0\\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\psi_1(x)}{dx^2}+V(x)\psi_2(x)=E\psi_2(x),\ \text{区域II}0<x<a\\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\psi_1(x)}{dx^2}+V(x)\psi_3(x)=E\psi_3(x)\text{区域III},x>a\end{cases}$$

代入**势场表达式**，由于在**区域I势场是无限大**，因此粒子出现在**区域一的几率为0**，也就是波函数在区域I应该为

$$\boldsymbol{\psi_1(x)=0}$$

解**区域II**的薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2}+V(x)\psi_2(x)=E\psi_2(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2}=E\psi_2(x)$$

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi_2(x)=0$$

$$k_1{}^2=\frac{2mE}{\hbar^2}\qquad \frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2}+k_1{}^2\psi_2(x)=0$$

这个微分方程的通解为

$$\boldsymbol{\psi_2(x)=A\sin k_1x+B\cos k_1x}$$

同理 解**区域III**的薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_3(x)}{dx^2}+V_0\psi_3(x)=E\psi_3(x)$$

$$\frac{d^2\psi_3(x)}{dx^2}+\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\psi_3(x)=0$$

$$k_2^2=\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}\qquad \frac{d^2\psi_3(x)}{dx^2}-k_2{}^2\psi_3(x)=0$$

通解为 $\psi_3(x)=Ce^{k_2x}+De^{-k_2x}$

由于物理上当 x→∞，波函数有限，所以C=0

$$\boldsymbol{\psi_3(x)=De^{-k_2x}}$$

3－15 设质量为 m 的粒子在半壁无限高的一维方阱中运动，此方阱的表达式为：

$$V(x)=\begin{cases}\infty & x<0\\ 0 & 0\leqslant x\leqslant a\\ V_0 & x>a\end{cases}$$

试求在 $E<V_0$ 的束缚态情况下：

（1）粒子能级的表达式；

（2）证明在此阱内至少存在一个束缚态的条件是，阱深 V_0 和阱宽 a 之间满足关系式：

$$V_0a^2\geqslant\frac{h^2}{32m}$$

根据波函数在边界上需要连续得出

$$\psi_2(0)=\psi_1(0)=0$$

所以B=0 $\quad \psi_2(x)=A\sin k_1x$

$$\psi_2(a)=\psi_3(a)\qquad A\sin k_1a=De^{-k_2a}$$

根据波函数的一阶导数在边界上需要连续得出

$$\left.\frac{d\psi_2(x)}{dx}\right|_a=\left.\frac{d\psi_3(x)}{dx}\right|_a\qquad \left.\frac{dA\sin k_1x}{dx}\right|_a=\left.\frac{dDe^{-k_2x}}{dx}\right|_a$$

$$\left.Ak_1\cos k_1x\right|_a=\left.-k_2De^{-k_2x}\right|_a$$

$$Ak_1\cos k_1a=-k_2De^{-k_2a}$$

$$\frac{A\sin k_1a}{Ak_1\cos k_1a}=\frac{De^{-k_2a}}{-k_2De^{-k_2a}}$$

$$\frac{\sin k_1a}{k_1\cos k_1a}=\frac{1}{-k_2}$$

$$\tan k_1a=\frac{k_1}{-k_2}$$

$$\tan a\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}=-\sqrt{\frac{E}{V_0-E}}$$

此即为粒子能级的表达式

（2）通过能级表达式可以看出，当E等于0时也成立，所以

$$k_1=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\geq 0$$

$$k_2^2=\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}\qquad V_0>E\quad 所以\quad k_2>0$$

$$\tan k_1a=\frac{k_1}{-k_2}\leq 0\qquad k_1a\geq\frac{\pi}{2}$$

又因为 $\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}>k_1=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

$$a\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}>a\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}=k_1a\geq\frac{\pi}{2}\ \Rightarrow\ \frac{2mV_0}{\hbar^2}\geq\frac{\pi^2}{4a^2}$$

$$\Rightarrow\ a^2V_0\geq\frac{\pi^2\hbar^2}{8m}=\frac{h^2}{32m}\qquad \hbar=\frac{h}{2\pi}$$