一维运动问题

一维自由粒子（$U=0$）的定态方程

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

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x)+\frac{p^2}{\hbar^2}\psi(x)=0, \quad p\equiv\sqrt{2mE}$$

单选题 1分

设置

一维自由粒子波函数有简并吗？

A 有简并，因为对应同一个能级E有两个线性无关解。

B 无简并，因为自由粒子处于非束缚态。

C 不确定。

提交

一维自由粒子（U=0）的定态方程

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

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x)+\frac{p^2}{\hbar^2}\psi(x)=0,\quad p\equiv\sqrt{2mE}$$

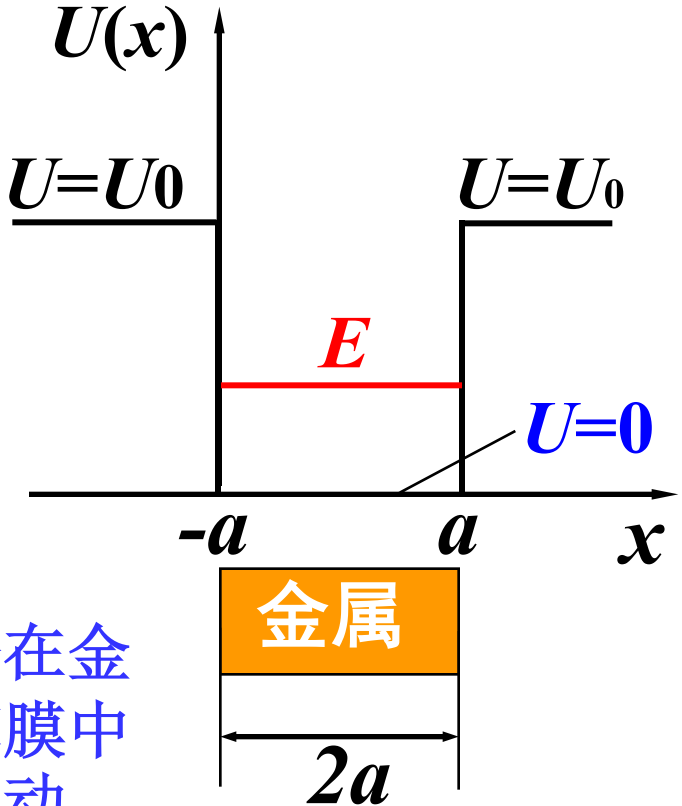
通解：$\psi(x)=c_1e^{\frac{i}{\hbar}px}+c_2e^{-\frac{i}{\hbar}px}$

$\Rightarrow$ 通解：$\Psi(x,t)=c_1e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}+c_2e^{-\frac{i}{\hbar}(px+Et)}$

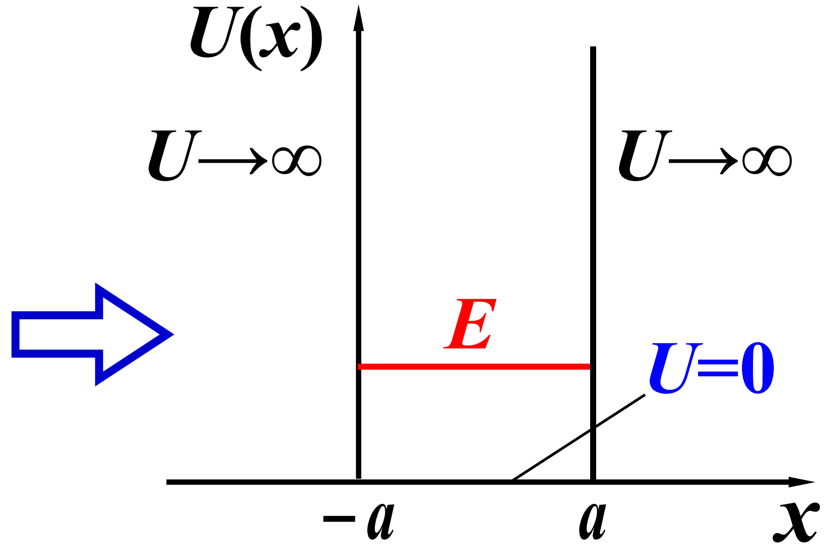
$$\begin{array}{cc} \rightarrow & \leftarrow \\ \longrightarrow x & \longrightarrow x \end{array}$$

自由粒子的能量是连续的(非束缚态)

一维无限深方势阱



电子在金属薄膜中的运动



无限深方势阱

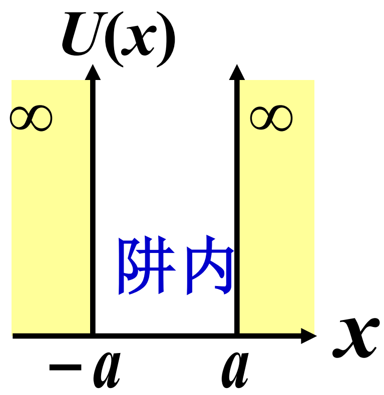
如果$E<<U_0$,则可近似认为U_0无限大-无限深势阱

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

定态薛定谔方程的形式：

势阱内 $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2\psi_1}{\mathrm{d}x^2} = E\psi_1, \quad |x| < a$

势阱外 $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2\psi_2}{\mathrm{d}x^2} + U_0\psi_2 = E\psi_2, \quad |x| > a$



1、阱外 $|x| \geq a \rightarrow U(x) = \infty, \ \psi_2 = 0$

粒子被束缚在势阱内（束缚态 $\lim\limits_{x\to\pm\infty}\psi_2(x) = 0$）

2、阱内 $|x| < a \rightarrow U = 0$

方程的形式类似于一维自由粒子

势阱内解的一般形式：

$$\psi(x)=c_1e^{\frac{i}{\hbar}px}+c_2e^{-\frac{i}{\hbar}px}, \quad p\equiv\sqrt{2mE}$$

c_1，c_2 为待定常数，由波函数应满足的“单值、有限、连续”条件决定。“单值、有限”已经满足，下面看连续条件：

$$\begin{cases}\psi(-a)=0 \;\Rightarrow\; c_1e^{-\frac{i}{\hbar}pa}+c_2e^{\frac{i}{\hbar}pa}=0\\ \psi(a)=0 \;\Rightarrow\; c_1e^{\frac{i}{\hbar}pa}+c_2e^{-\frac{i}{\hbar}pa}=0\end{cases}$$

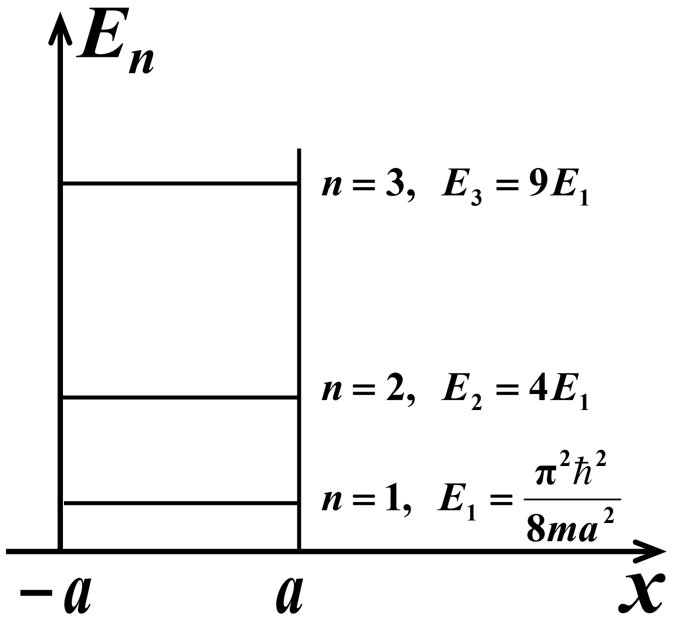
$$\begin{cases} c_1 e^{-\frac{i}{\hbar}pa} + c_2 e^{\frac{i}{\hbar}pa} = 0 \\ c_1 e^{\frac{i}{\hbar}pa} + c_2 e^{-\frac{i}{\hbar}pa} = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} c_1 / c_2 = -e^{\frac{2i}{\hbar}pa} \\ c_1 / c_2 = -e^{-\frac{2i}{\hbar}pa} \end{cases}$$

$$\Rightarrow e^{\frac{4i}{\hbar}pa} = 1 \text{ or } \frac{4i}{\hbar}pa = 2in\pi,\ n = 1,2,3..$$

$$\Rightarrow E_n = \frac{p^2}{2m} = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{8ma^2},\ n = 1,2,3..$$

一维无限深势阱能量本征值：

$$\boxed{E_n = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{8ma^2},\ n = 1,2,3..}$$



其中n称为量子数，n=1代表基态，取其它值代表激发态。这表明，一维无限深方势阱中运动粒子的能量是量子化的

势阱内的波函数：

$$\psi_n(x) = c_1 e^{\frac{i}{\hbar}p_n x} + c_2 e^{-\frac{i}{\hbar}p_n x},\quad \text{其中}\ \ p_n = \frac{\pi\hbar n}{2a}$$

$$= c_2\left(-e^{\frac{i}{\hbar}p_n x + \frac{2i}{\hbar}p_n a} + e^{-\frac{i}{\hbar}p_n x}\right),\ \text{用到了}\ \frac{c_1}{c_2} = -e^{\frac{2i}{\hbar}p_n a}$$

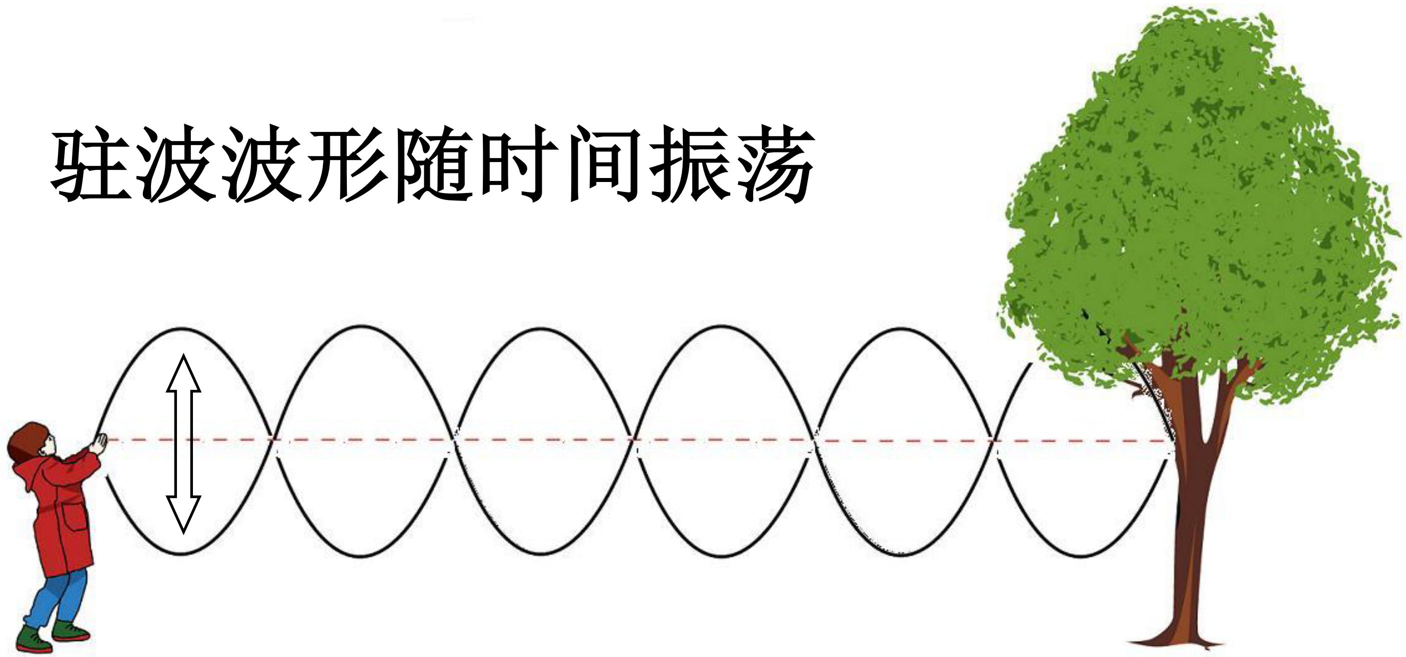
$$= c_2'\left(-e^{\frac{i}{\hbar}p_n x + \frac{i}{\hbar}p_n a} + e^{-\frac{i}{\hbar}p_n x - \frac{i}{\hbar}p_n a}\right),\qquad e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$$

$$= c\sin\left[\frac{p_n(x+a)}{\hbar}\right] = c\sin\left[\frac{n\pi}{2a}(x+a)\right]$$ ⇨ 驻波形式

待定系数c通过波函数归一化的要求得到：

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_n(x)|^2 dx = \int_{-a}^{a}|\psi_n(x)|^2 dx = 1$$ ⇨ $$c = \frac{1}{\sqrt{a}}$$

驻波波形随时间振荡



经典 ⇅ 量子

$$\Psi_n(x,t)=\frac{1}{\sqrt{a}}\sin\frac{n\pi}{2a}(x+a)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

振荡频率随能量增大而增加

多选题 1分

设置

一维无限深势阱能级$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{8ma^2}$中的n=1, 2, 3⋯， n能否取0, −1, −2, −3⋯这些值？

A 可以取0，但不可以取−1, −2, −3⋯。

B 取0时，波函数不存在。

C 取−1, −2, −3⋯时，波函数不代表新的状态。

提交

单选题 1分

设置

一维无限深势阱的波函数解$\frac{1}{\sqrt{a}}\sin\left[\frac{n\pi}{2a}(x+a)\right]$有确定宇称吗？

A 有确定宇称，宇称为偶。

B 有确定宇称，宇称为奇。

C 有确定宇称，宇称奇、偶都有。

D 没有确定宇称。

提交

●能级间隔 $\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2}(2n+1) \propto \dfrac{1}{ma^2}$

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

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

宏观情况(能级变化>>ΔE_n)或量子数很大时(n>>1)，可认为能量连续

● 最低能量（基态能量）$E_1 = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2} > 0$ —— 零点能

（真空不空！）

与经典粒子不同, 体现了粒子的波动性

从不确定关系也可以给出粗略的说明:

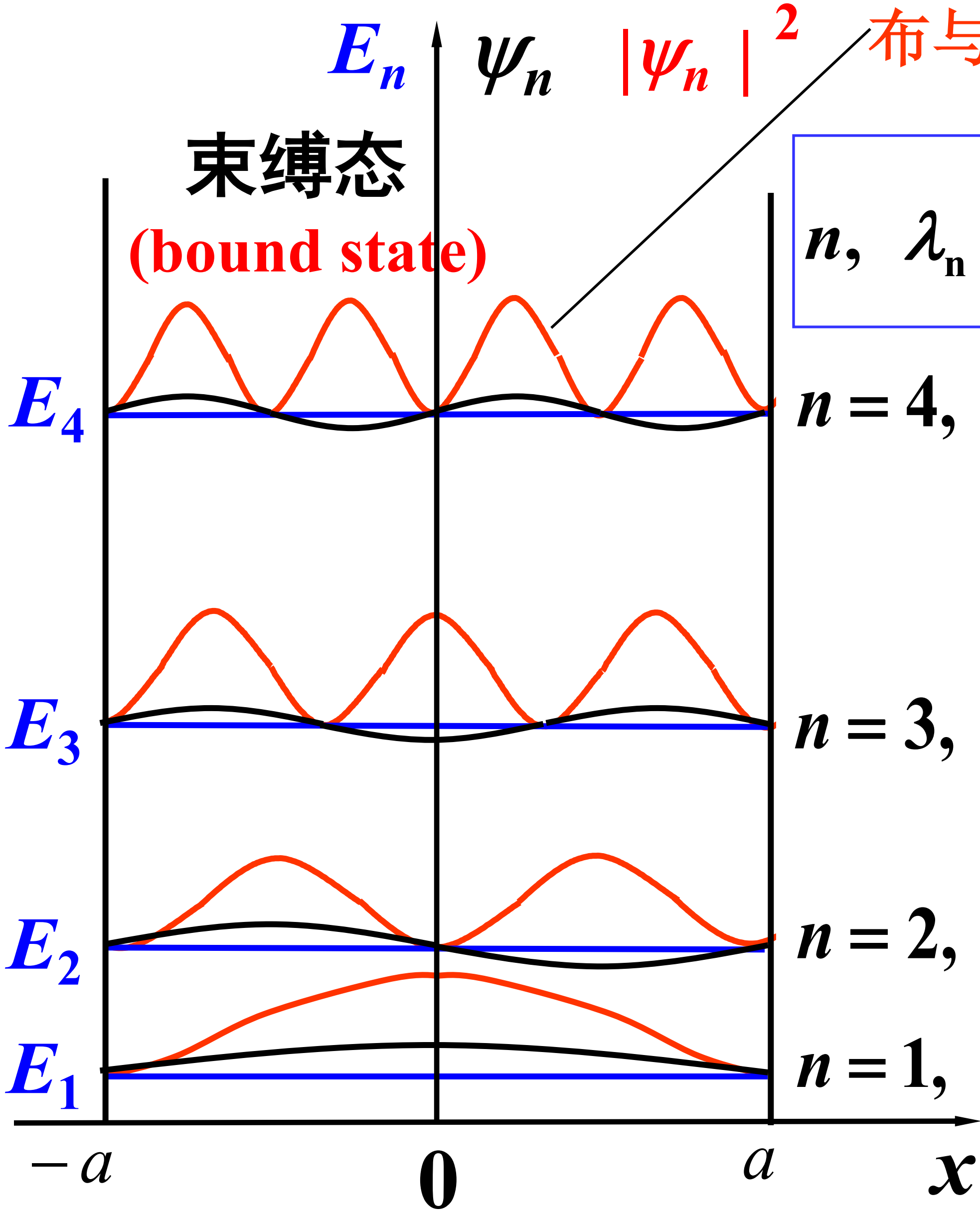
位置的不确定度: $\Delta x \approx a$,动量不确定度: $\Delta p = \sqrt{2mE} = \dfrac{\pi\hbar}{2a}$

检查不确定关系: $\Delta x \cdot \Delta p = \dfrac{\pi}{2}\hbar$

● 态的宇称是偶奇相间，基态为偶宇称

● 波函数的节点数为 $n-1$

势阱内粒子概率分布与经典情况不同



$$n,\quad \lambda_n = \frac{4a}{n},\quad E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$$

$$n = 4,\quad \lambda_4 = a,\quad E_4 = \frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2}$$

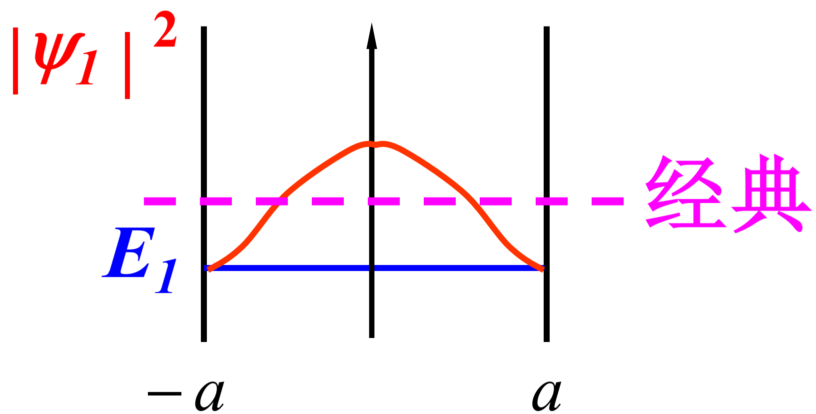
$$n = 3,\quad \lambda_3 = \frac{4a}{3},\quad E_3 = \frac{9\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$$

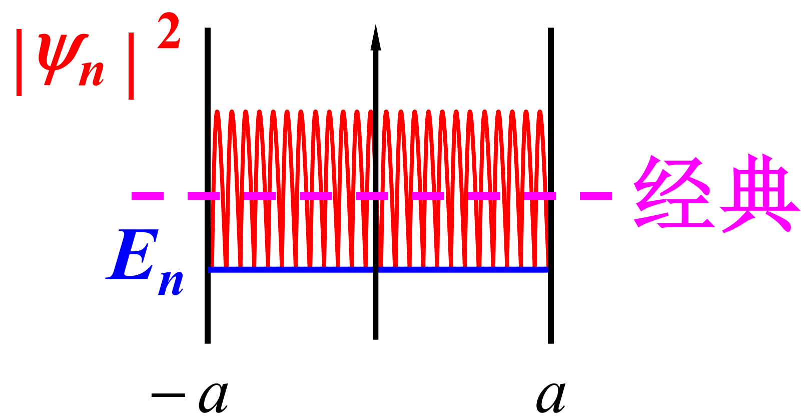
$$n = 2,\quad \lambda_2 = 2a,\quad E_2 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

$$n = 1,\quad \lambda_1 = 4a,\quad E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$$

n 小时，势阱内粒子概率分布集中于原点附近

n 很大时，势阱内粒子概率分布趋于均匀





n 小时，量子效应最强

量子 → 经典

玻尔对应原理

由驻波的波长反推量子化的能量:

$$\lambda_n = \frac{4a}{n}$$

$$\Rightarrow \quad \underbrace{p_n = \frac{h}{\lambda_n}}_{\text{德布罗意关系}} = \frac{hn}{4a} = \frac{\pi\hbar n}{2a}$$

$$\Rightarrow \quad E_n = \frac{p^2}{2m} = \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{8ma^2}$$

与薛定谔方程解出的能量一致

●波函数正交

$$\int \psi^*{}_m(x)\psi_n(x)dx = 0 \quad (\text{当} m \neq n \text{时})$$

波函数正交归一：

$$\int \psi_m(x)^* \psi_n(x)\, dx = \delta_{mn},$$

Kronecker delta

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 0, & \text{if } m \neq n; \\ 1, & \text{if } m = n. \end{cases}$$

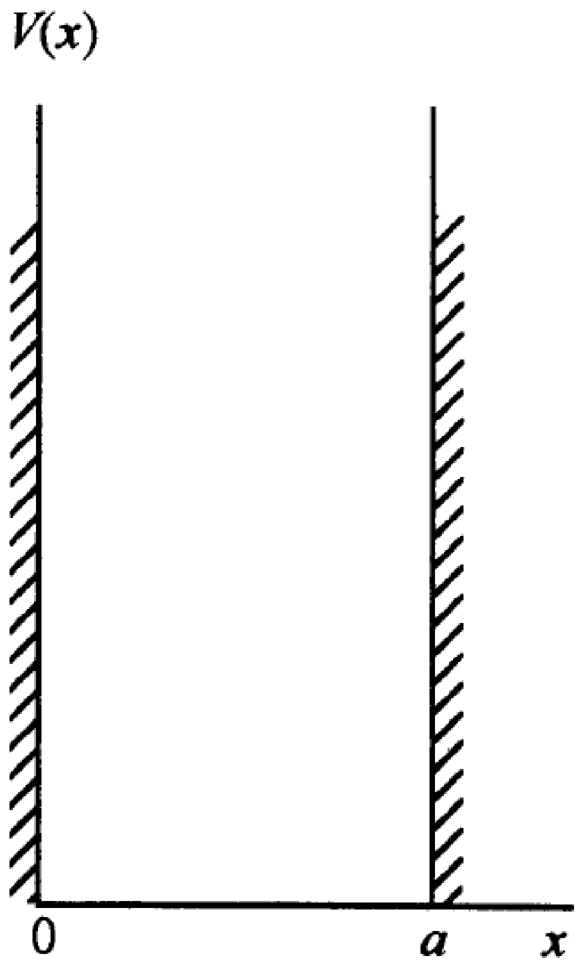
●完备性

$$\Psi(x)=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n(x)=\frac{1}{\sqrt{a}}\sum_{n=1}^{\infty}c_n\sin\left[\frac{n\pi}{2a}(x+a)\right]$$

Fourier series

$$c_m=\int_{-a}^{a}\psi_m(x)^*\Psi(x)dx$$

补充：



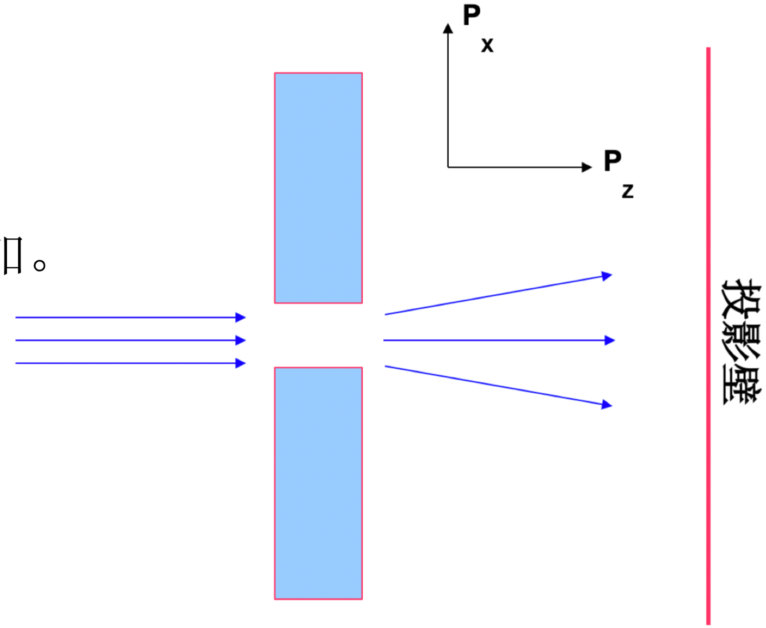
$$V(x)=\begin{cases}0, & 0<x<a\\ \infty, & x<0,\quad x>a\end{cases}$$

求解更加简单（练习）

多选题 1分

设置

一维无限深势阱可以看作电子单缝衍射时x方向的势能（如图），定态薛定谔方程的解代表电子在x方向的波函数，怎么解释电子的衍射呢？



A 如果狭缝所在墙壁足够厚则没有衍射。

B 一维无限深势阱的解不是两平面波叠加。

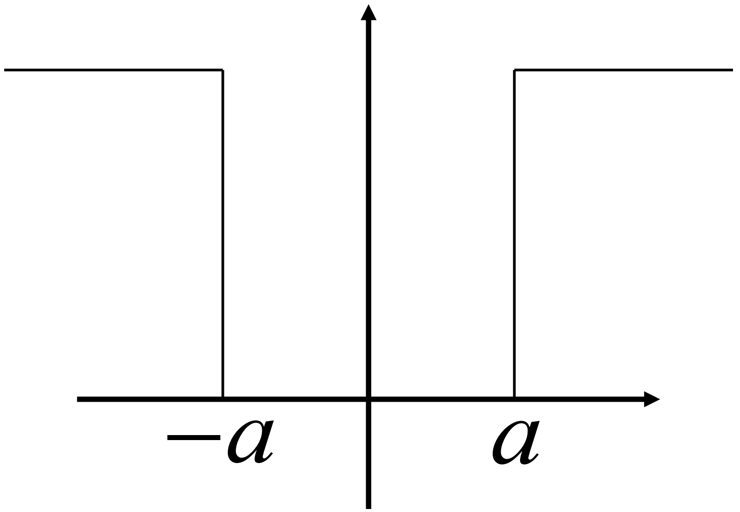
C 电子在x方向的动量不是单一的。

D 电子在x方向的动量是两个δ函数。

提交

对称有限深方势阱

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



对于束缚态， $0<E<U_0$,

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+k^2\psi(x)=0, \qquad (k=\sqrt{2\mu E}/\hbar,\ -a<x<a)$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}-\alpha^2\psi(x)=0.(\alpha=\sqrt{2\mu(U_0-E)}/\hbar,\ x<-a \text{ 或 } x>a)$$

第二个方程的通解是： $\psi(x)=C\mathrm{e}^{\alpha x}+D\mathrm{e}^{-\alpha x}.$

对$x<-a$, x可以$\to$ -∞,而此时$e^{-\alpha x}\to\infty$,应该舍弃.

同理对于$x>a$应该舍弃$e^{\alpha x}$.

$$\psi(x)=\begin{cases} C\,\mathrm{e}^{\alpha x}, & (x<-a) \\ A\cos kx+B\sin kx, & (-a<x<a) \\ D\,\mathrm{e}^{-\alpha x}. & (a<x) \end{cases}$$

(1) 偶宇称解 $\psi(x)=\psi(-x)$

$$B=0,\ C=D.$$

在$x=a$处ψ和$d\psi/dx$连续

$$\begin{cases} A\cos ka=D\,\mathrm{e}^{-\alpha a} \\ -kA\sin ka=-\alpha D\,\mathrm{e}^{-\alpha a} \end{cases}$$

$$k\tan ka=\alpha. \qquad \left(k=\frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar},\ \alpha=\frac{\sqrt{2\mu(U_0-E)}}{\hbar}\right)$$

(2) 奇宇称解 $\psi(x) = -\psi(-x)$

$$A = 0, C = -D.$$

$$\begin{cases} B\sin ka = D\,\mathrm{e}^{-\alpha a} \\ kB\cos ka = -\alpha D\,\mathrm{e}^{-\alpha a} \end{cases}$$

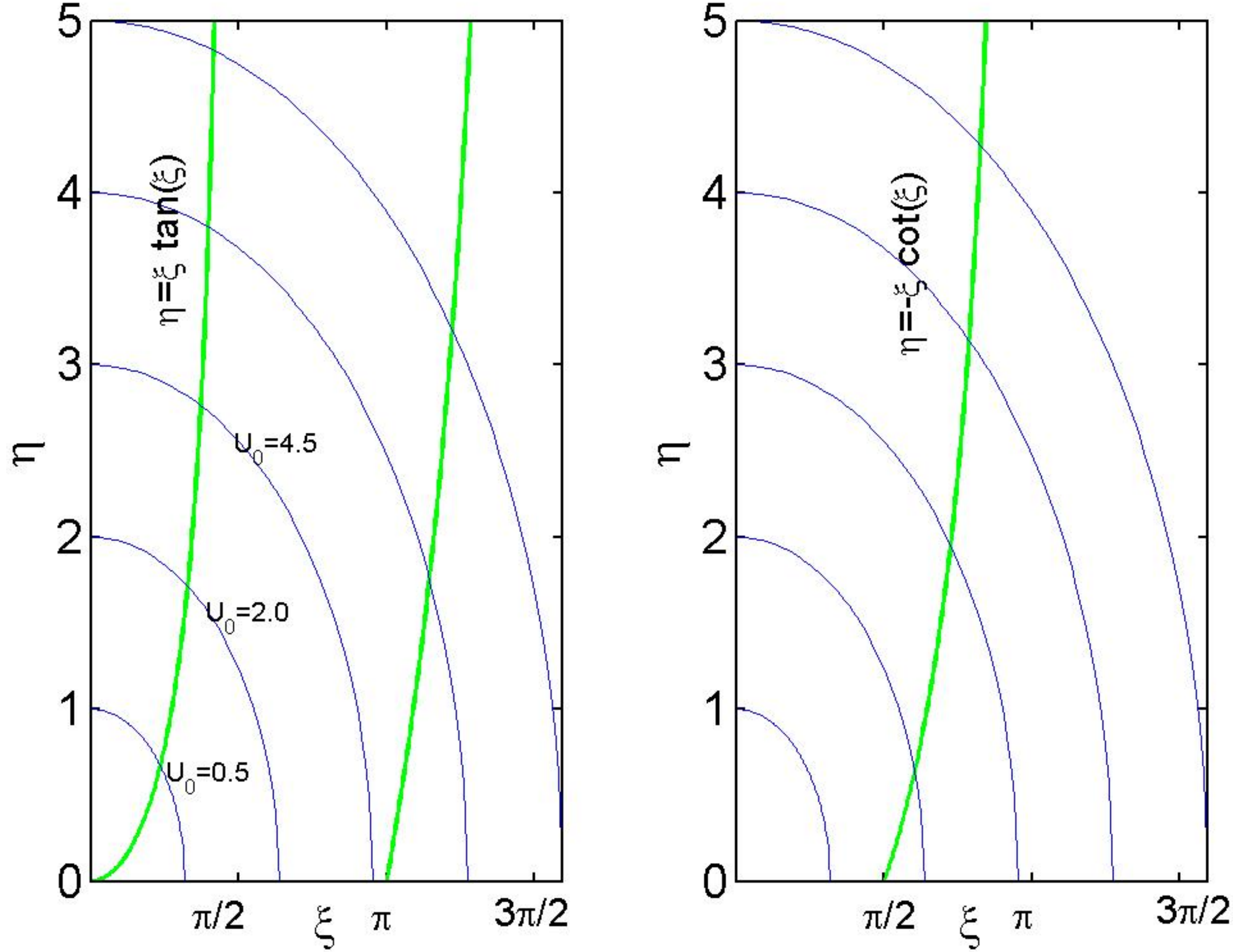
$$k\cot ka = -\alpha. \qquad \left(k = \frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar}, \alpha = \frac{\sqrt{2\mu(U_0 - E)}}{\hbar} \right)$$

采用图解法, 令

$$\xi = ka, \quad \eta = \alpha a. \qquad (\xi, \eta > 0),$$

则方程成为:

$$\begin{cases} \eta = \xi\tan\xi \text{ (even) 或 } \eta = -\xi\cot\xi \text{ (odd)}, \\ \xi^2 + \eta^2 = \dfrac{2\mu U_0 a^2}{\hbar^2}. \end{cases}$$



图解法

找出这两族曲线的交点，记交点的 ξ 值为$\xi_1, \xi_{2,}\cdots$,则能级就是：

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2\mu a^2}\xi_n^2.$$

讨论:

(1）能级的宇称是偶奇相间，最低的能级是偶宇称

(2) $0 < \xi_1 < \frac{\pi}{2} < \xi_2 < \pi < \cdots$

所以每个能级都比无限深势阱的相应能级低一些

$U_0 \to \infty, \xi_n \to$ 无限深方势阱的能级

在 $|x| \geqslant a$处，由于$e^{\pm\alpha x}$的指数趋于±∞，所以波函数趋于0

(3) 不论势阱多浅或多窄，至少存在一个束缚态，并且宇称为偶

（4）对于偶宇称，当

$$\xi^2+\eta^2=\frac{2\mu U_0a^2}{\hbar^2}\geq\pi^2$$

才能出现第一个偶宇称的激发态

（5）对于奇宇称，只有当

$$\xi^2+\eta^2=\frac{2\mu U_0a^2}{\hbar^2}\geq\frac{\pi^2}{4}$$

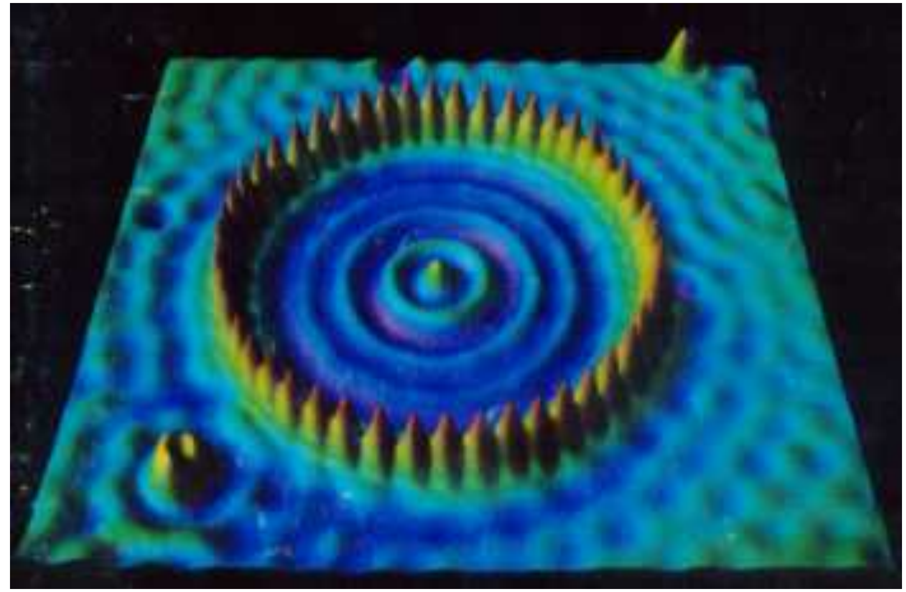
才能出现第一个奇宇称态

(6) 在给定的势阱中，能级的个数是(练习)

$$\left[\sqrt{8\mu U_0a^2/\hbar^2\pi^2}\right]$$

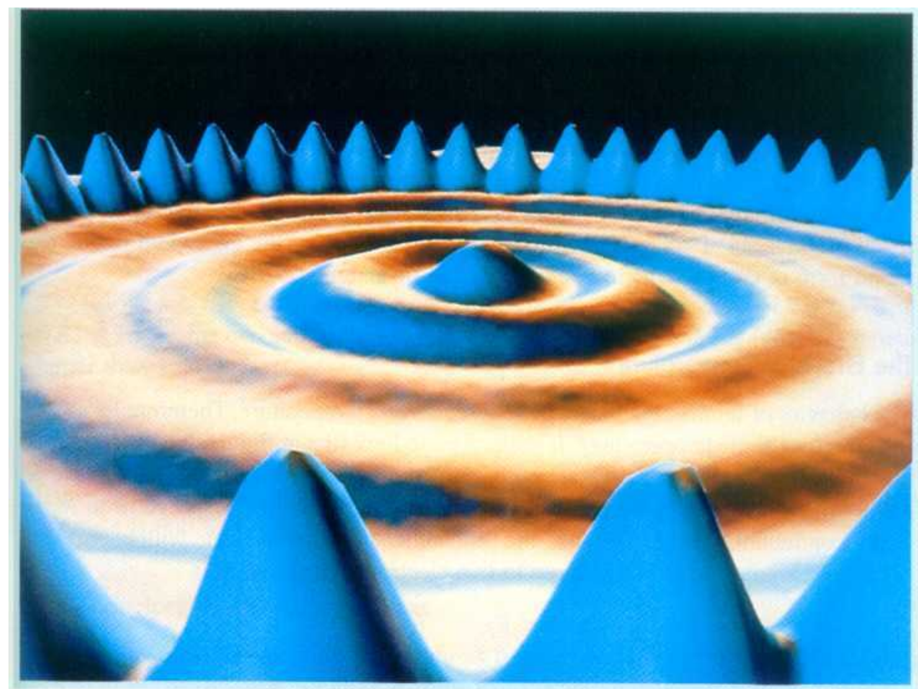
$[x]$代表$\geq x$ 而最接近x 的正整数。

1993年美国科学家移动铁原子，铁原子距离0.9纳米



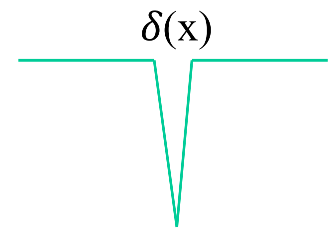
“量子围栏”

48个铁原子排列在铜表面 – 证明电子的波动性



δ势阱

考虑δ势阱的势能：$V(x) = -\gamma\delta(x)$，其中$\gamma>0$。



定态薛定谔方程：

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi + \frac{2m}{\hbar^2}[E + \gamma\delta(x)]\psi = 0,\ \ (E<0)$$

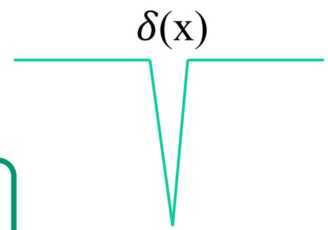
在$x\neq0$处：
$$\frac{d^2}{dx^2}\psi - \frac{2m|E|}{\hbar^2}\psi = 0,$$

方程一般解的形式为：$\psi = c_1e^{\beta x} + c_2e^{-\beta x}$，其中 $\beta = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar} > 0$

一维束缚态要求$\psi(\pm\infty) = 0$，所以 $\psi = \begin{cases} c_1e^{\beta x}, (x < 0) \\ c_2e^{-\beta x}, (x > 0) \end{cases}$

波函数在点x=0连续，所以$c_1=c_2=c$， $\psi = \begin{cases} ce^{\beta x}, (x < 0) \\ ce^{-\beta x}, (x > 0) \end{cases}$

δ势阱



归一化条件：

特征长度

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad \Longrightarrow \quad c = \sqrt{\beta} \equiv \frac{1}{\sqrt{L}}, \qquad L = \frac{\hbar}{\sqrt{2m|E|}}$$

于是：

$$\psi = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{L}} e^{\frac{x}{L}}, (x < 0) \\ \frac{1}{\sqrt{L}} e^{-\frac{x}{L}}, (x > 0) \end{cases} = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{-\frac{|x|}{L}}$$

束缚态的能量本征值因该是离散的，怎么得出离散的能级E？

单选题 1分

设置

关于δ势阱中处于束缚态的粒子，下面说法正确的是

A 能级为负且是连续的，波函数宇称为偶。

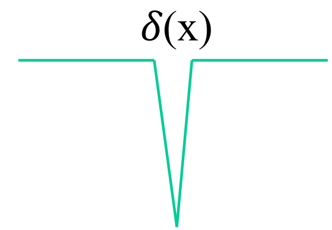
B 能级为负且是不连续的，波函数宇称为偶。

C 能级为负且是不连续的，波函数宇称为奇。

D 能级为负且是不连续的，波函数没有确定宇称。

提交

δ势阱



定态薛定谔方程： $\dfrac{d}{dx}\psi' = -\dfrac{2m}{\hbar^2}[E+\gamma\delta(x)]\psi$

$$\int_{0^-}^{0^+} d\psi' = -\frac{2m}{\hbar^2}\int_{0^-}^{0^+}[E+\gamma\delta(x)]\psi(x)\,dx \quad \text{（跃变条件）}$$

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -\frac{2m\gamma}{\hbar^2}\psi(0)$$

$$-2\beta\sqrt{\beta} = -\frac{2m\gamma}{\hbar^2}\sqrt{\beta}$$

$$\beta = \frac{m\gamma}{\hbar^2} = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar} \quad \Longrightarrow \quad E = -\frac{m\gamma^2}{2\hbar^2}$$

束缚态能级只有一个！

单选题 1分

设置

为什么在一维无限深势阱中，没有用到波函数导数在边界的跃变条件？

A 波函数导数在边界无跃变。

B 波函数导数在边界有跃变，但跃变条件给出的限制和连续性条件给出的限制相同。

C 波函数导数在边界有跃变，但跃变条件给不出确定限制。

提交