2.6 一维定态问题的几个简例

一、一维定态方程

一质量为m的微观粒子沿x轴运动，势能为V(x),其微观状态

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{x},t)=\hat{H}\Psi(\boldsymbol{x},t) \qquad \hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\boldsymbol{x})$$ 定态问题

具有解形式 $$\Psi(\boldsymbol{x},t)=\psi(\boldsymbol{x})e^{-iEt/\hbar}$$

求解 Hamiltonian方程 $$\hat{H}\psi(\boldsymbol{x})=E\psi(\boldsymbol{x})$$ 定态S方程

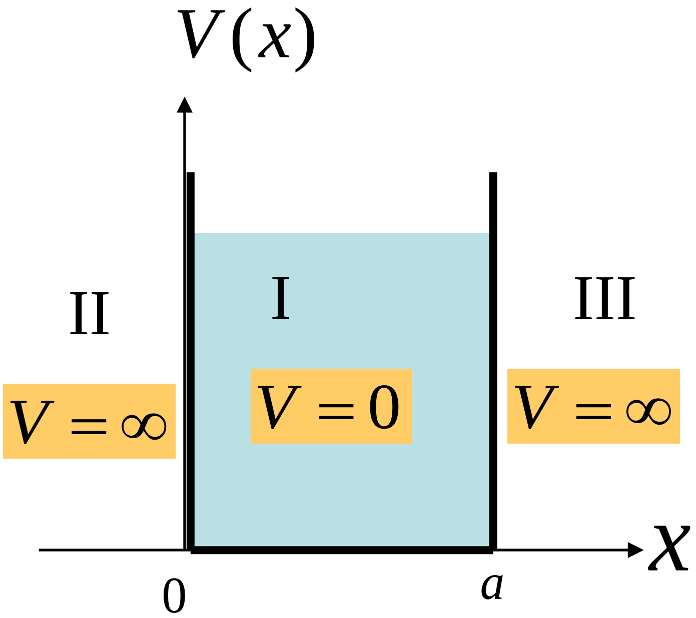
在一维条件下 $$[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)]\psi(x)=E\psi(x)$$

求解微分方程，得到波函数 ψ 的表达式和 E 的数值

求解需要利用一定的**边界条件**

二、 一维无限深势阱

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



Hamiltonian方程

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

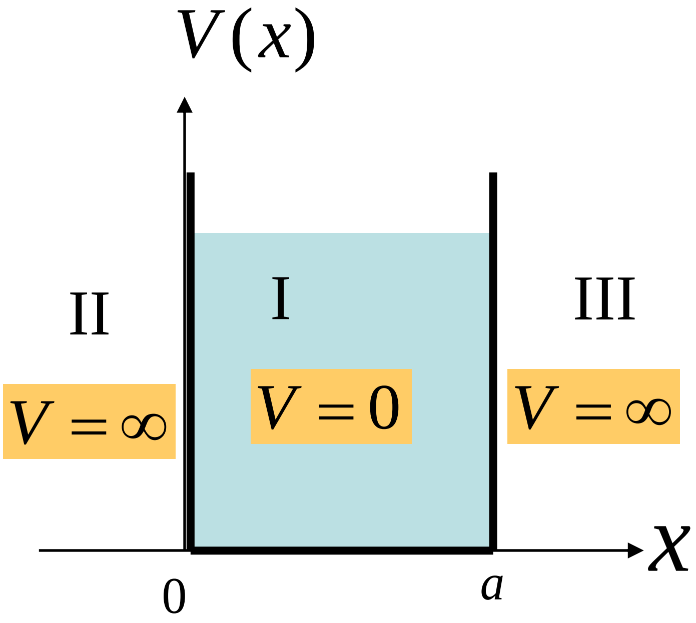
$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}\psi(x)=0$$

如图，按势函数的分段形式，分区求解S方程.

I中，势能为0;

II、III中，势能为∞

Hamiltonian方程



$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}\psi(x)=0$$

I 区（阱内）： $V=0$

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi=0$$

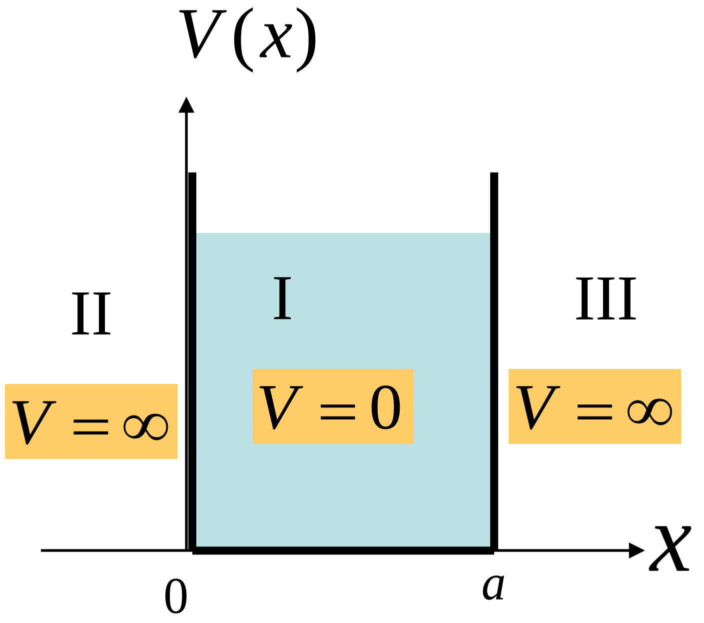
$E>0$ 令 $k^2=\dfrac{2mE}{\hbar^2}$

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2}+k^2\psi(x)=0$$

方程通解形式：

$$\psi(x)=A\sin(kx+\delta)$$

II、III区（阱外）：

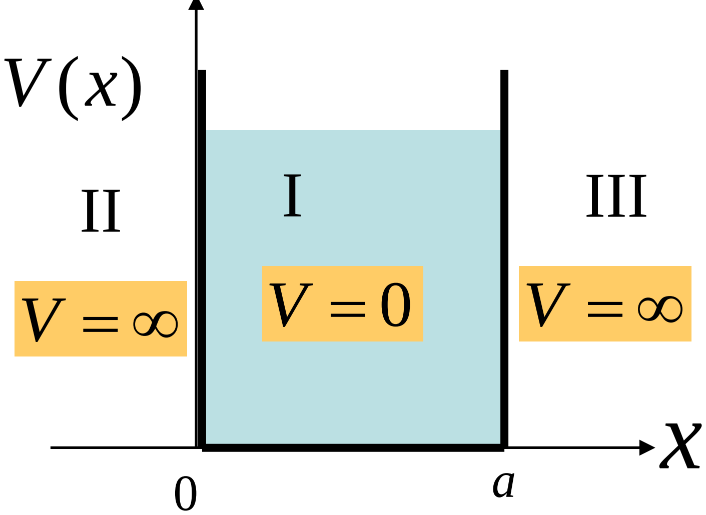


$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2m(E-\infty)}{\hbar^2}\psi(x)=0$$

因$V\to\infty$

$$\psi(x)=0$$

边界条件



波函数连续条件

$$\psi(0)=\psi(a)=0$$

$$\psi(x)=A\sin(kx+\delta)$$

$$\begin{cases} \psi(0)=0 \Rightarrow A\sin(k0+\delta)=0 \quad \text{得} \quad \delta=0 \\ \psi(a)=0 \Rightarrow A\sin(ka)=0 \therefore ka=n\pi, n=1,2,3\ldots \end{cases}$$

$$k=\frac{n\pi}{a} \qquad k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$$

思考：n=0和负数？

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

分立的能级

能量量子化

利用归一化条件确定A

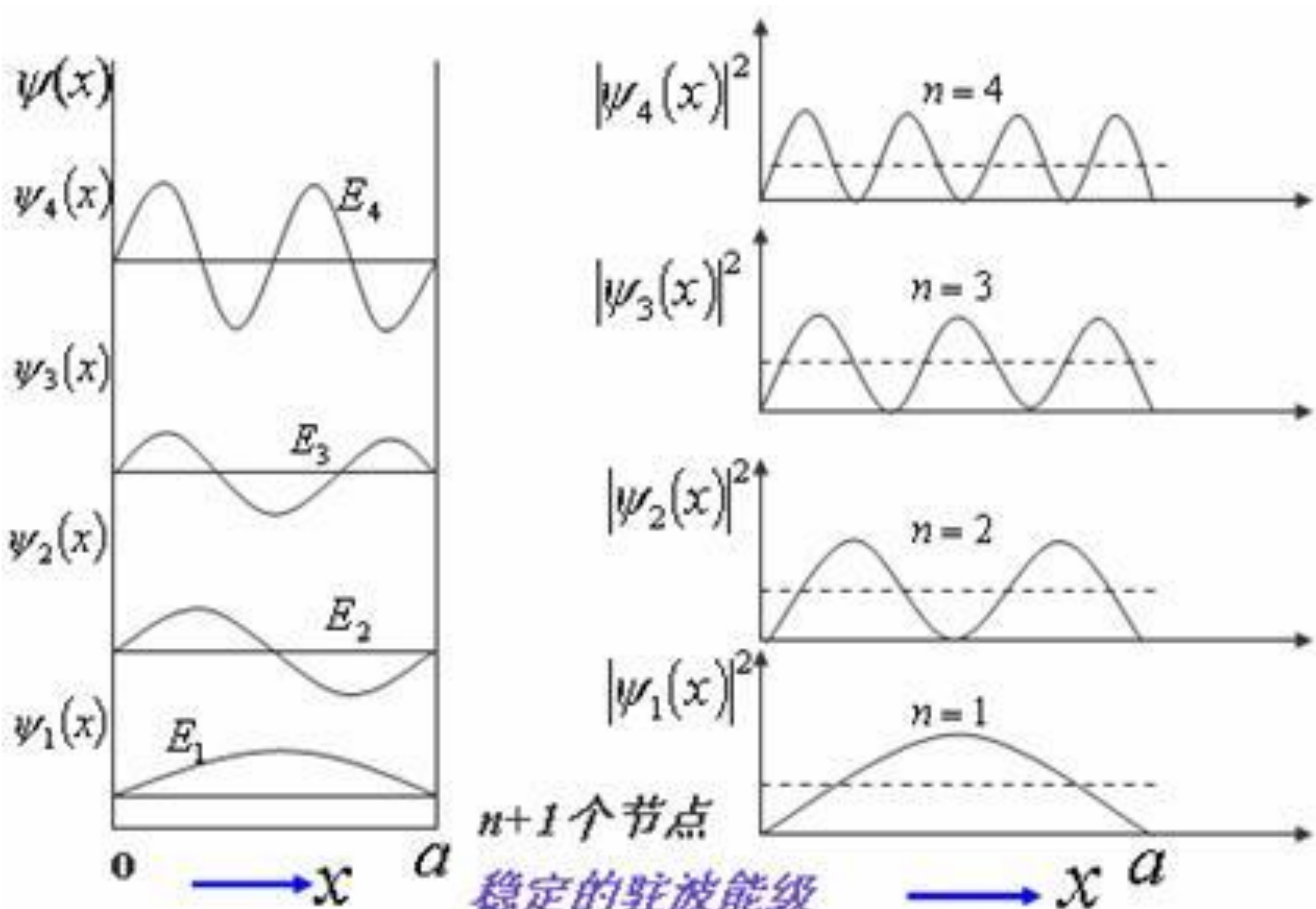
$$\psi_n(x) = A\sin(\frac{n\pi}{a}x) \qquad 0 \le x \le a$$

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

得 $$A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

于是

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


ψ(x)
ψ4(x)
E4
ψ3(x)
E3
ψ2(x)
E2
ψ1(x)
E1
0
x
a
|ψ4(x)|2
n = 4
|ψ3(x)|2
n = 3
|ψ2(x)|2
n = 2
|ψ1(x)|2
n = 1
n+1 个节点
稳定的驻波能级
x
a

讨论：

1）能量公式中给出分立的能谱，

即体系的能量是**量子化**的；

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

$m, a \gg \hbar$时，能量趋于连续，经典

2）最小能量（零点能）

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

不确定关系估算零点能：

$$\Delta x \sim a, \Delta p \sim \frac{\hbar}{\Delta x} \sim \frac{\hbar}{a}$$

$$E \sim \frac{p^2}{2m} \sim \frac{\Delta p^2}{2m} \sim \frac{\hbar^2}{2ma^2} > 0$$

微观粒子永远是运动的。

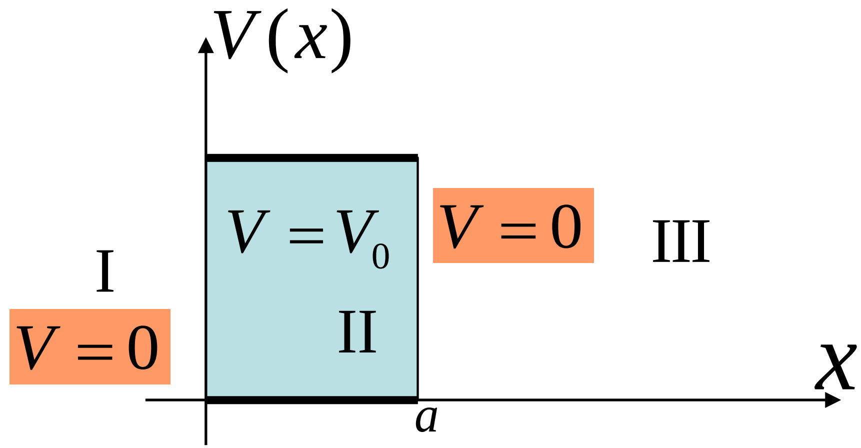
这是微观粒子的波动性导致的！

三、一维方势垒

$$V(x)=\begin{cases} V_0, 0\le x\le a \\ 0, x<0, or, x>a \end{cases}$$

1. $E<V_0$

方势垒如图所示,分区



$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}\psi(x)=0$$

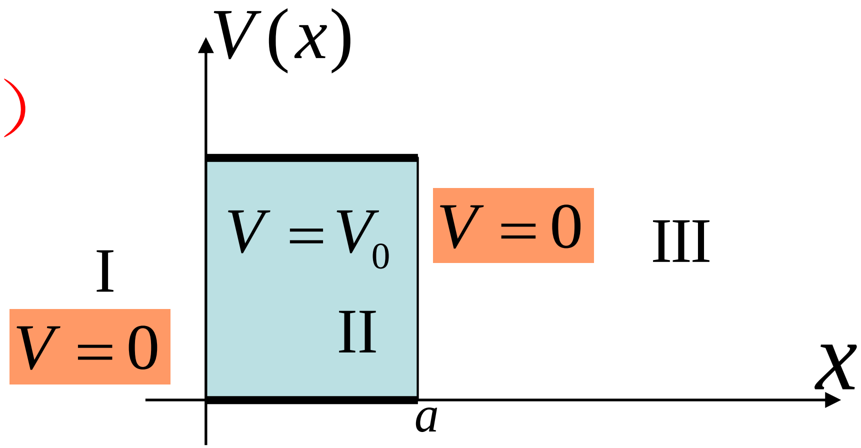
I, III区 $(V=0)$ （经典区）

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+k_1^2\psi=0 \quad k_1^2=\frac{2mE}{\hbar^2} \quad \psi(x)\sim \mathrm{e}^{\pm ik_1x}$$ （振荡解）

通解 $$\psi(x)=\begin{cases} e^{ik_1x}+Re^{-ik_1x}=\psi_I & x<0 \\ \mathrm{S}e^{ik_1x}=\psi_{III} & x>a \end{cases}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}\psi(x)=0$$

II 区 $V_0 > E$ （经典禁区）



$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2}-k_2^2\psi(x)=0$$

$$k_2^2=\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}$$ $$\psi(x)\sim \mathrm{e}^{\pm k_2 x}$$ （衰减解）

通解 $$\psi_{II}(x)=A\mathrm{e}^{k_2 x}+B\mathrm{e}^{-k_2 x}$$

边界条件一：

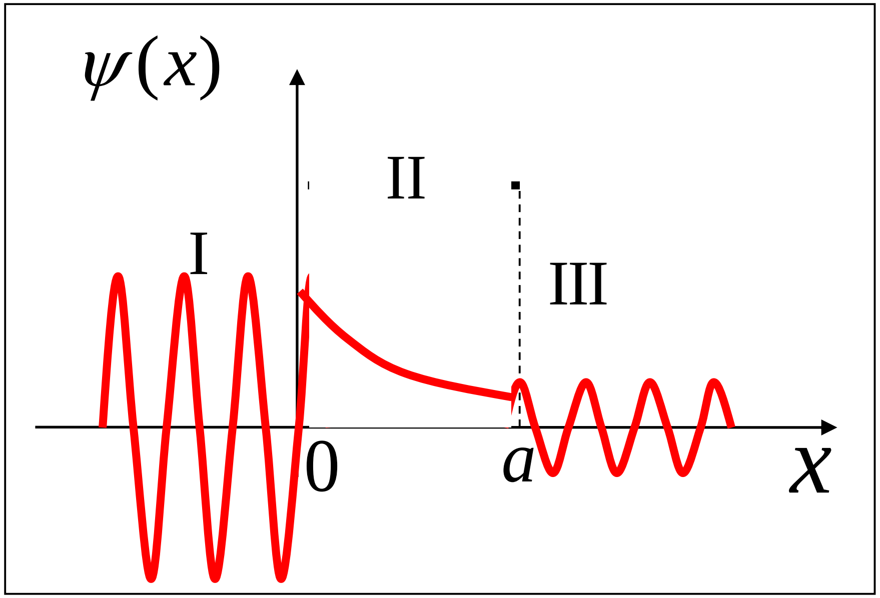
x=0处

波函数及其一阶导数连续

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}\psi(x)=0$$

$$\psi_I(0)=\psi_{II}(0)$$

$$\psi_I'(0)=\psi_{II}'(0)$$



$$\begin{cases} 1+R=A+B \\ \dfrac{ik_1}{k_2}(1-R)=A-B \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} A=\dfrac{1}{2}[(1+\dfrac{ik_1}{k_2})+R(1-\dfrac{ik_1}{k_2})] \\ B=\dfrac{1}{2}[(1-\dfrac{ik_1}{k_2})+R(1+\dfrac{ik_1}{k_2})] \end{cases} \quad (1)$$

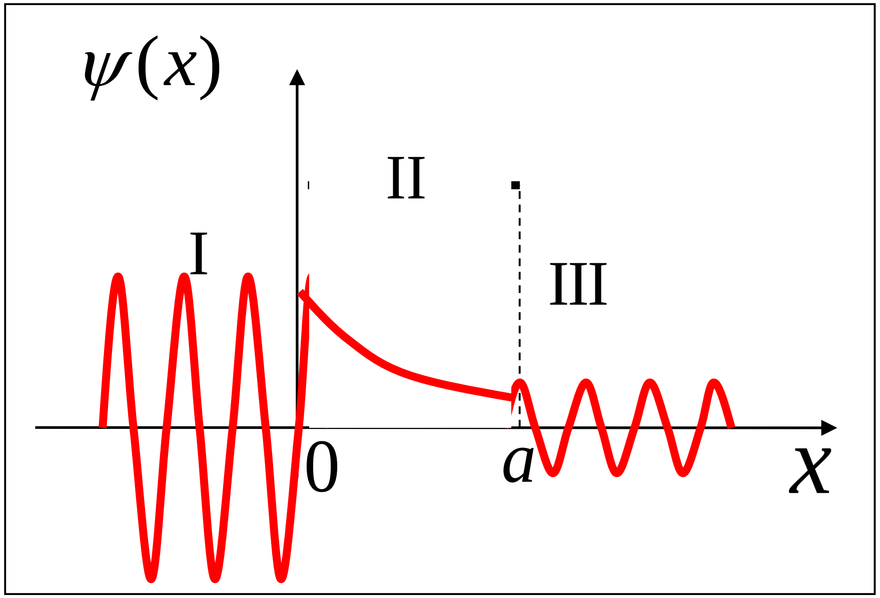
边界条件二：

$x = a$ 处

波函数其一阶导数连续

$$\psi_{II}(a) = \psi_{III}(a)$$

$$\psi'_{II}(a) = \psi'_{III}(a)$$



$$\begin{cases} Ae^{k_2 a} + Be^{-k_2 a} = Se^{ik_1 a} \\ Ae^{k_2 a} - Be^{-k_2 a} = \dfrac{ik_1}{k_2} Se^{ik_1 a} \end{cases}$$

$$\begin{cases} A = \dfrac{S}{2}[1 + \dfrac{ik_1}{k_2}]e^{ik_1 a - k_2 a} \\ B = \dfrac{S}{2}[1 - \dfrac{ik_1}{k_2}]e^{ik_1 a + k_2 a} \end{cases} \quad (2)$$

联立(1)（2）得

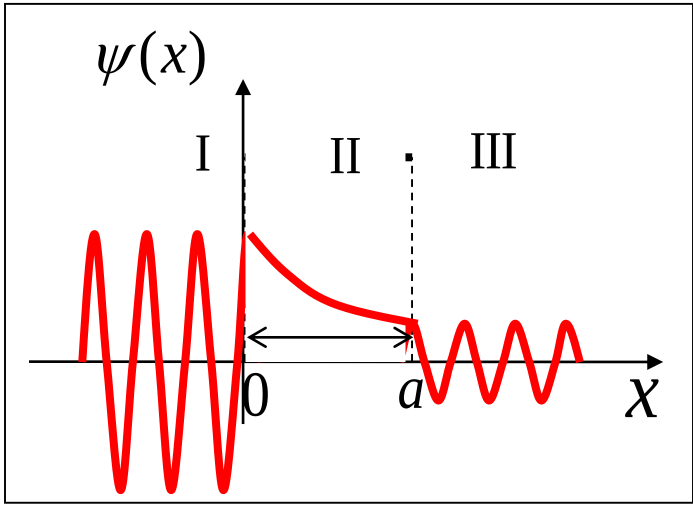
$$Se^{ik_1 a} = \frac{-2ik_1 / k_2}{[1 - (k_1 / k_2)^2]shk_2 a - 2i(k_1 / k_2)chk_2 a}$$

透射系数:

$$T=|S|^2=\left[1+\frac{1}{(E/V_0)(1-E/V_0)}sh^2(k_2a)\right]^{-1}$$

反射系数:

$$|R|^2=\frac{(k_1^2+k_2^2)^2sh^2(k_2a)}{(k_1^2+k_2^2)^2sh^2(k_2a)+4k_1^2k_2^2}$$



$$|R|^2+|S|^2=1$$

讨论：

1） $E < V_0$，但$T \neq 0$　粒子从I区经过势垒进入III区

即粒子穿越比其能量高的势垒的几率不为零。

隧道效应

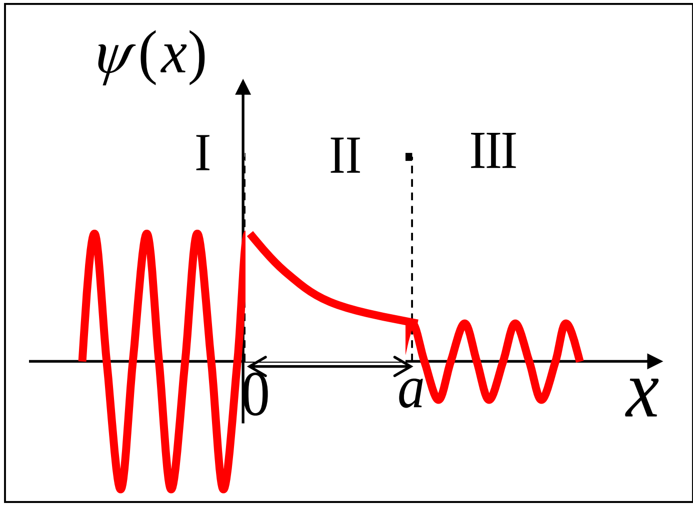
$$k_2^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$$

2） 设$k_2 a \gg 1$，则$shk_2 a \sim \frac{1}{2} e^{k_2 a} \gg 1$

$(E \ll V_0$，入射粒子能量低或a很大$)$

$$T \approx \frac{16E(V_0 - E)\mathrm{e}^{-\frac{2a\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}}}{V_0^2}$$

$$\left\{\begin{array}{l} a \to \infty, T \to 0 \\ V_0 - E \to \infty, T \to 0 \\ m \to \infty, T \to 0 \end{array}\right.$$

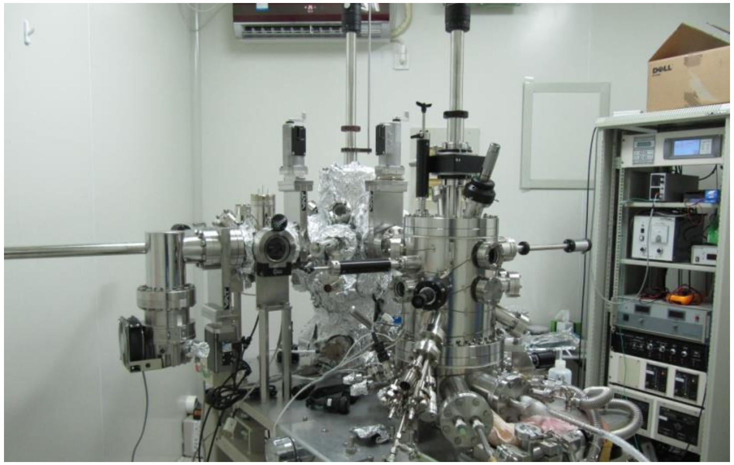


2.　$E > V_0$

$$k_2 \to ik_2 \qquad k_2^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}$$

《聊斋志异》中有一则名为“崂山道士”的寓言故事。故事里虚构了一个书生学会了“穿墙术”。

隧道效应的应用-STM

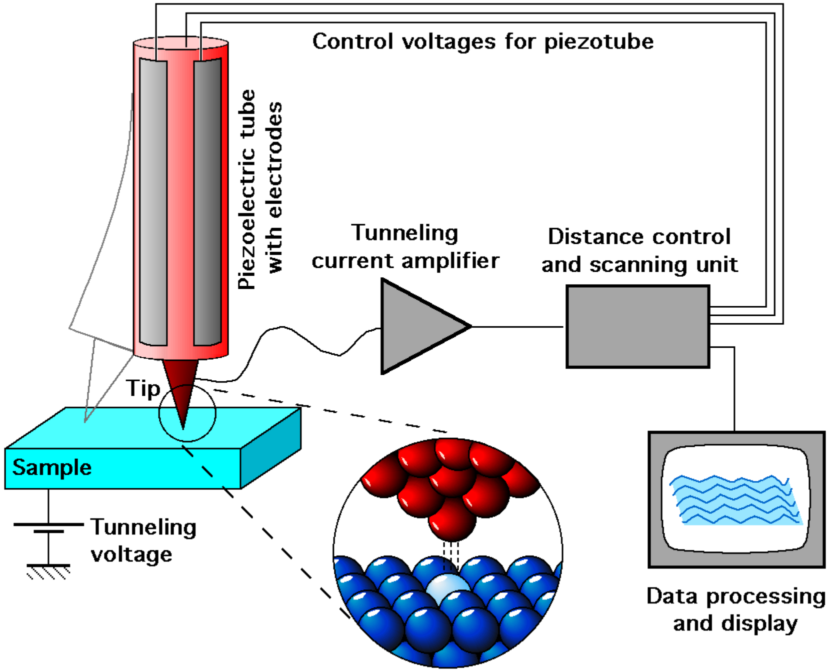


- 扫描隧道显微镜
- 隧道效应

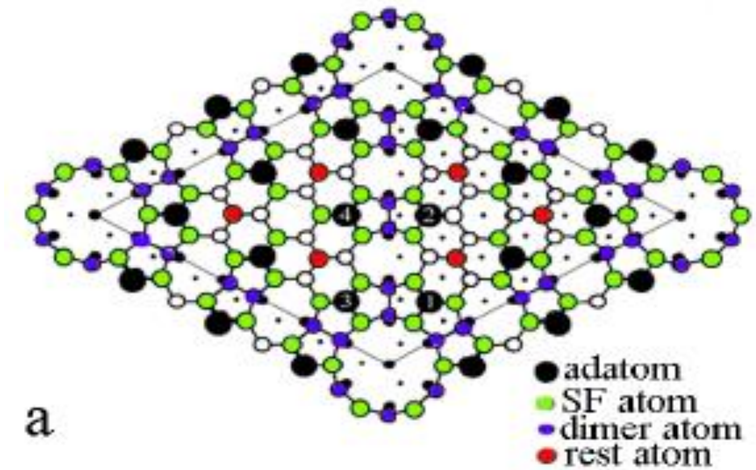
隧穿电流：

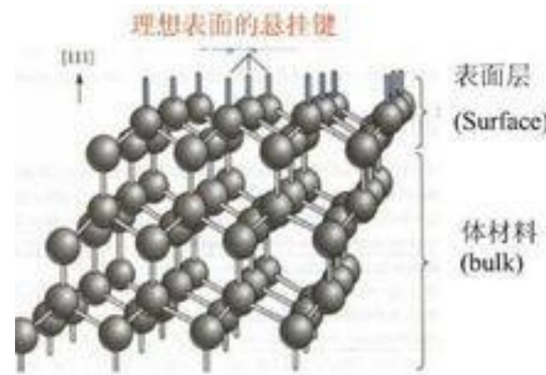
1） 与tip~sample间距有关；

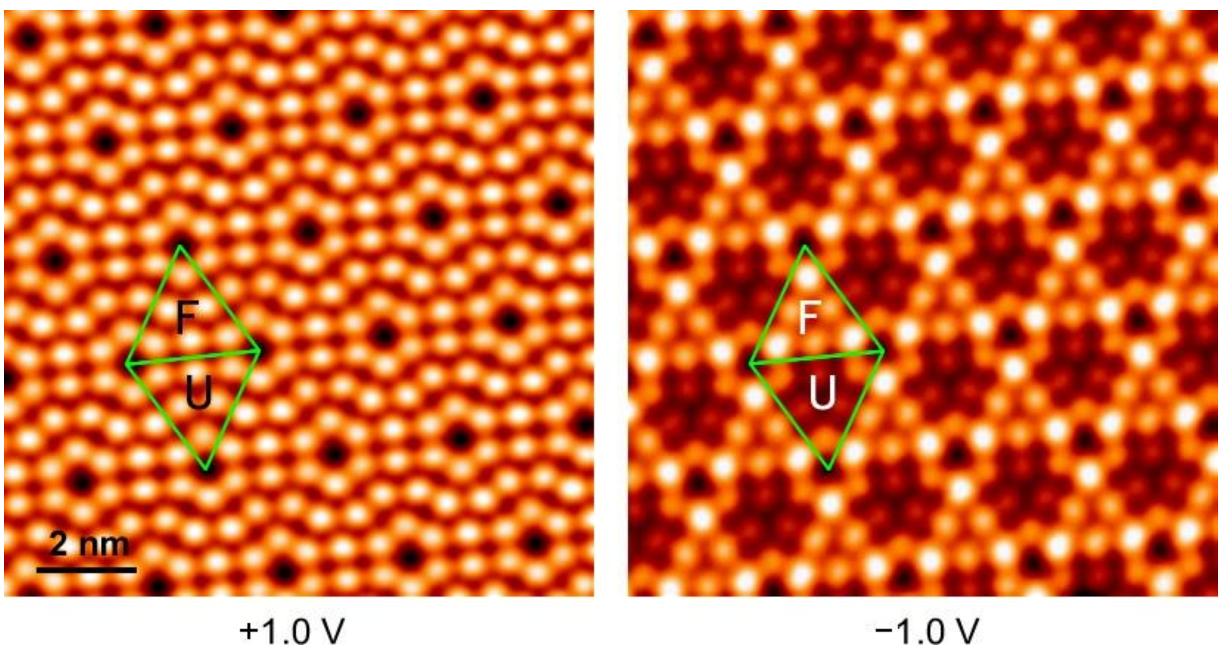
2） 与sample的表面电子状态有关。



Schematic view of an STM







STM实验获得的Si(111)(7x7)表面的图像。

本章小结

1.物质的波粒二象性

$$\begin{cases} \nu = E / h \\ \lambda = h / p \end{cases}$$

$\begin{cases} \text{粒子性：完整性，不可分割性} \\ \text{波动性：态叠加原理} \end{cases}$

2.重要实验

黑体辐射、光电效应、康普顿散射、电子的晶体衍射、单缝衍射、双缝干涉

3.波粒二象性是量子物理的基础

4.波函数的统计解释 ——几率波

波函数（单值、连续、有界）

$\psi \rightarrow$ 几率幅　　$|\psi|^2 \rightarrow$ 几率密度

5.态叠加原理

$$\psi = c_1\psi_1 + c_1\psi_1$$

6.不确定关系（会估算基态能量）

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \qquad \Delta t \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}$$

7.Schrödinger方程（量子力学的最基本方程）

一般S方程，定态S方程，一维定态S方程（会求解）

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\boldsymbol{x},t)}{\partial t} = [-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{x},t)]\psi(\boldsymbol{x},t)$$

$$\hat{H}\psi_n(\boldsymbol{x}) = E_n\psi_n(\boldsymbol{x})$$

$$\psi(\boldsymbol{x},t) = \psi(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-iEt/\hbar}$$

8. 力学量算符及其平均值

$$\overline{A} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \hat{A}\psi \, d\tau = (\psi, \hat{A}\psi)$$

9. 本征函数(本征态)与本征值(力学量可能的取值)

$$\hat{F}\psi_n(\boldsymbol{x}) = f_n\psi_n(\boldsymbol{x})$$