§ 2.1 实物粒子的波动性–波粒二象性

波粒二象性 (wave–particle duality)

并协(互补)性原理 (complementarity principle)

An experiment can show the particle-like properties of matter, or the wave-like properties; in some experiments both of these complementary viewpoints must be invoked to explain the results.

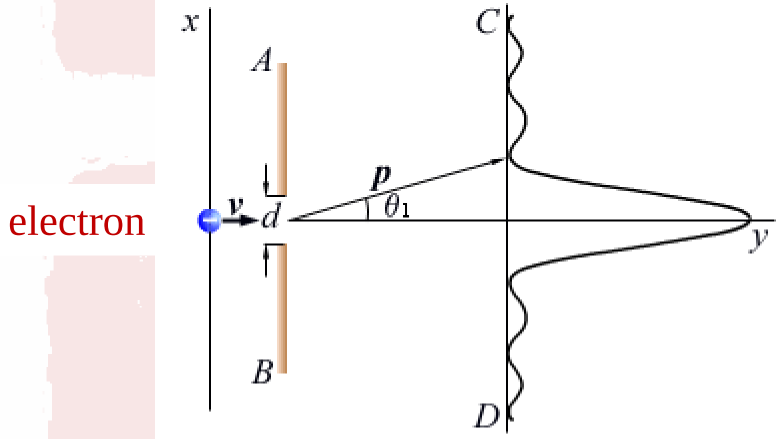
Bohr自己设计的盾徽

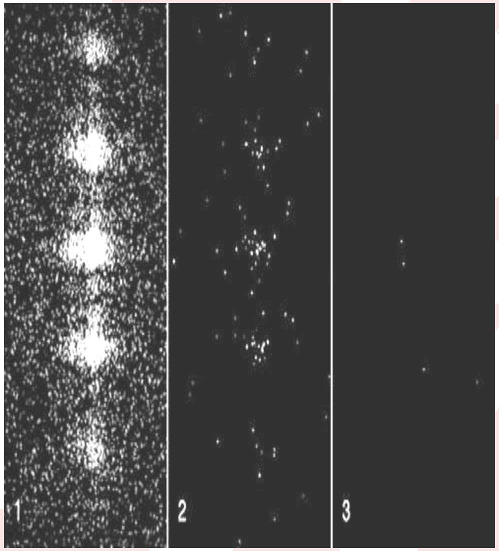
“opposites are complementary”

对立互补

Niels Bohr
(1885-1962)

§ 2.1 实物粒子的波动性–不确定关系





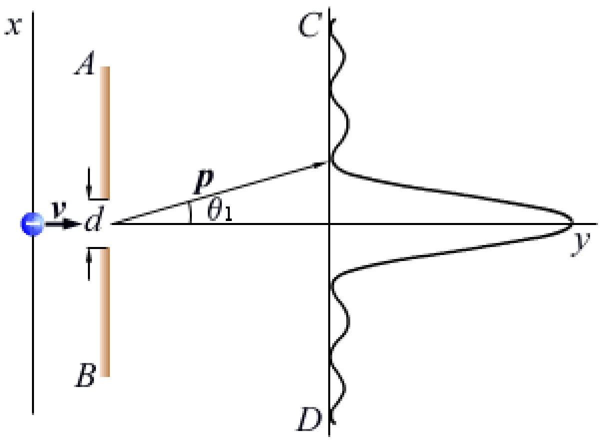
用宽度为d的狭缝确定电子的位置 x;

为了更精确地确定电子的轨迹， d 越小越好，但由于波动性，主极大变宽。

Werner Heisenberg
(1901-1976)

§ 2.1 实物粒子的波动性–不确定关系

electron



电子在x方向上的位置不确定度 $\Delta x \sim d$

极小值点： $d\sin\theta = k\lambda, \quad k = \pm1, \pm2, \ldots$

电子德布罗意波长：$\lambda = \dfrac{h}{p}$

电子经过狭缝后，主要打在 $k = \pm1$之间的主极大： $\sin\theta_1 = \lambda / d$

电子x方向的动量 p_x在 $0 \sim p\sin\theta_1$之间。

p_x的不确定性：$\Delta p_x \sim p\sin\theta_1 = p\dfrac{\lambda}{d} = p\dfrac{1}{d}\dfrac{h}{p} = \dfrac{h}{d} \sim \dfrac{h}{\Delta x}$

所以：$\boxed{\Delta p_x \Delta x \sim h}$

实物粒子的波粒二象性决定了粒子的动量和位置不能同时具有确定的取值。

§ 2.1 实物粒子的波动性–不确定关系

1927年，海森堡提出不确定关系

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

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

Werner Heisenberg
(1901-1976)

It is not possible to know the value of all the properties of the system at the same time; those properties that are not known with precision must be described by probabilities.

§ 2.1 实物粒子的波动性–不确定关系

【例2.2】利用不确定关系估算H原子基态的能量。

[解]　电子在质子库仑场中的总能量是动能与势能之和

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

位置的不确定度 $\Delta r \sim r$　　动量的不确定度 $\Delta p \sim p$

按照不确定关系 $r \cdot p \sim \hbar$

代入 E 的表达式　$E = \dfrac{p^2}{2m} - \dfrac{e^2 p}{4\pi\varepsilon_0 \hbar}$

氢原子具有稳定状态的条件是E取极小值，即　$\dfrac{dE}{dp} = \dfrac{p}{m} - \dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar} = 0$

$$\Rightarrow \quad p_{\min} = \frac{me^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar}$$

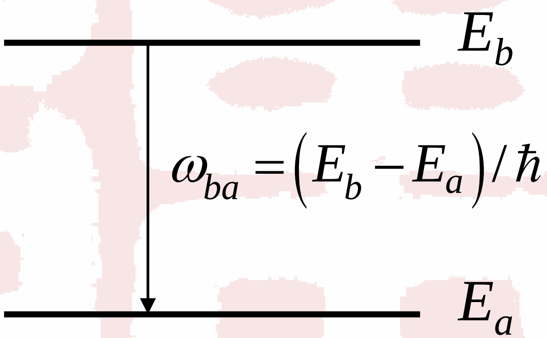
所以，稳定状态下电子的运动半径和总能量分别为

$$r_{\min} = \frac{\hbar}{p_{\min}} = \frac{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2}{e^2 m} = a_0 \qquad E_{\min} = -\frac{e^4 m}{(4\pi\varepsilon_0)^2 \hbar^2} = -13.6eV$$

§ 2.1 实物粒子的波动性–不确定关系

能量和时间的不确定关系

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$



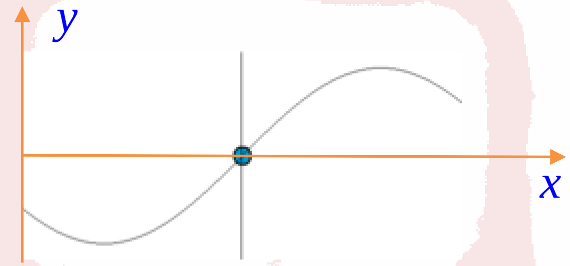
激发态b有一定的寿命 τ　　$\Delta t \sim \tau$

能量 E_b不确定度 Γ　　$\Delta E \sim \Gamma$

不确定关系　$\Gamma \tau \sim h$

原子低激发态的能级寿命一般在$10^{-8} \sim 10^{-9}$ s，相应的能级宽度为$\Gamma = 10^{-8} \sim 10^{-7}$ eV。

§ 2.2 波函数及其统计解释–波函数的引入



经典波

弦振动 $\dfrac{\partial^2 y}{\partial x^2}=\dfrac{1}{v^2}\dfrac{\partial^2 y}{\partial t^2}$ 其中相速度 $v=\sqrt{T/\rho_l}$

$y(x,t)$ 波函数

谐波解 $y(x,t)=y_0\cos(kx-\omega t)$ 其中 $k=2\pi/\lambda$

$\omega=2\pi f$

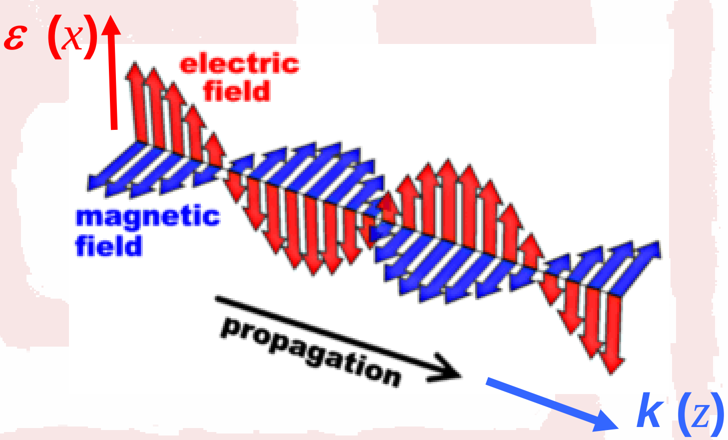
或 $y(x,t)=y_0\sin(kx-\omega t)$

或 $y(x,t)=y_0 e^{i(kx-\omega t)}$

$y(x,t)$ 是位移

电磁波

电场 $\dfrac{\partial^2 E}{\partial x^2}=\dfrac{1}{c^2}\dfrac{\partial^2 E}{\partial t^2}$



谐波解(平面单色波)

$E(x,t)=E_0\cos(kx-\omega t)$

或 $E(x,t)=E_0 e^{i(kx-\omega t)}$

波函数：实际的物理量

实物粒子的德布罗意波

不受外力作用时，其动能和动量保持不变 $E = h\nu = \hbar\omega, \boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}$

自由粒子的德布罗意波的波长和频率也是不变的，是一个平面单色波。

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = \psi_0 e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}$$

或 $$\psi(\boldsymbol{r},t) = \psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et)}$$

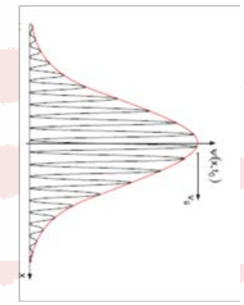
如果粒子在势场V(**r**) 中运动，其动量和动能不再是常数，这时，粒子就不能再用平面波来描述了，必须用更复杂的波来描写。

$$\psi(\boldsymbol{r},t)$$

波函数的物理意义?

§ 2.2 波函数及其统计解释–波函数的引入

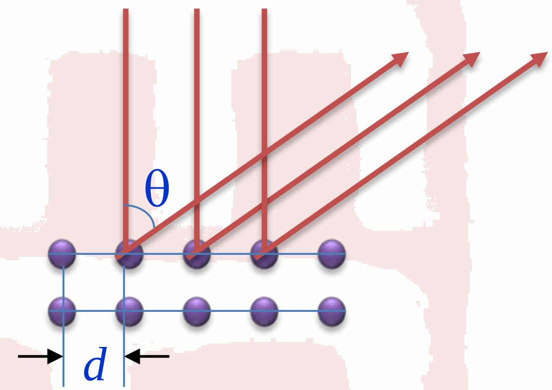
➢电子本身看作是波包结构：



波包的大小即电子大小、波包的群速度即电子的速度。

$$\psi(\mathbf{r},t)=\sum_j \psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_j\cdot\mathbf{r}-E_j t)}$$

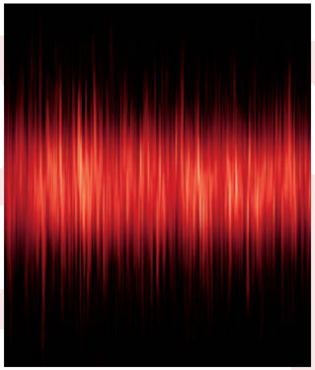
晶体衍射中，不同的分波成分将衍射到不同方向上，不同方向看到电子的一部分。



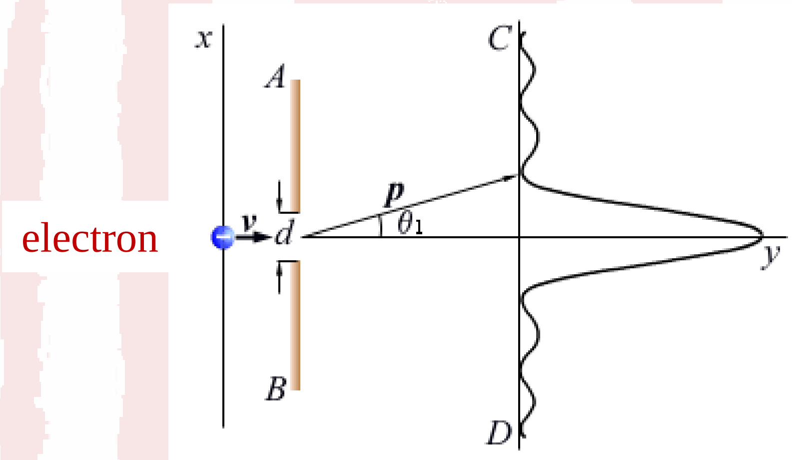
总是探测到完整的电子(粒子性)

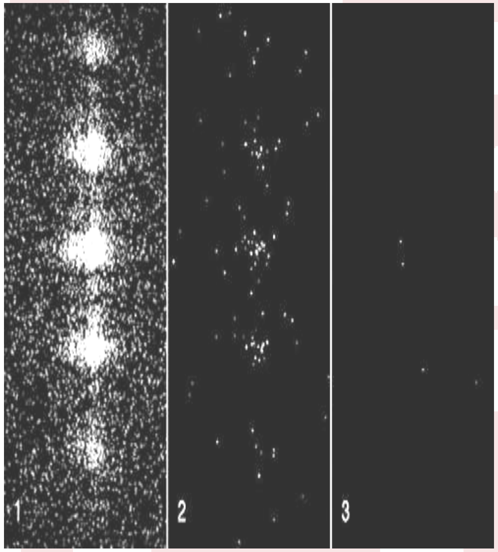
➢大量电子空间分布形成的疏密波：

单个电子就有波动性



§ 2.2 波函数及其统计解释–波函数的统计解释





Max Born
(1882–1970)

屏上 x 点衍射花纹强度 $\propto$ 打在屏上 x 点的电子数 $\propto$ 单个电子在 x 点的概率分布

设电子到达屏的波函数为 ψ(x)，类比于光的衍射，衍射花纹强度分布：

$$|\psi(x)|^2$$

单个电子在 x 点的概率分布

不对应实际的物理量

波函数的统计解释

$$|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2 \, d\tau$$

在空间 $\boldsymbol{r}$ 处dτ 体积元内粒子出现的概率

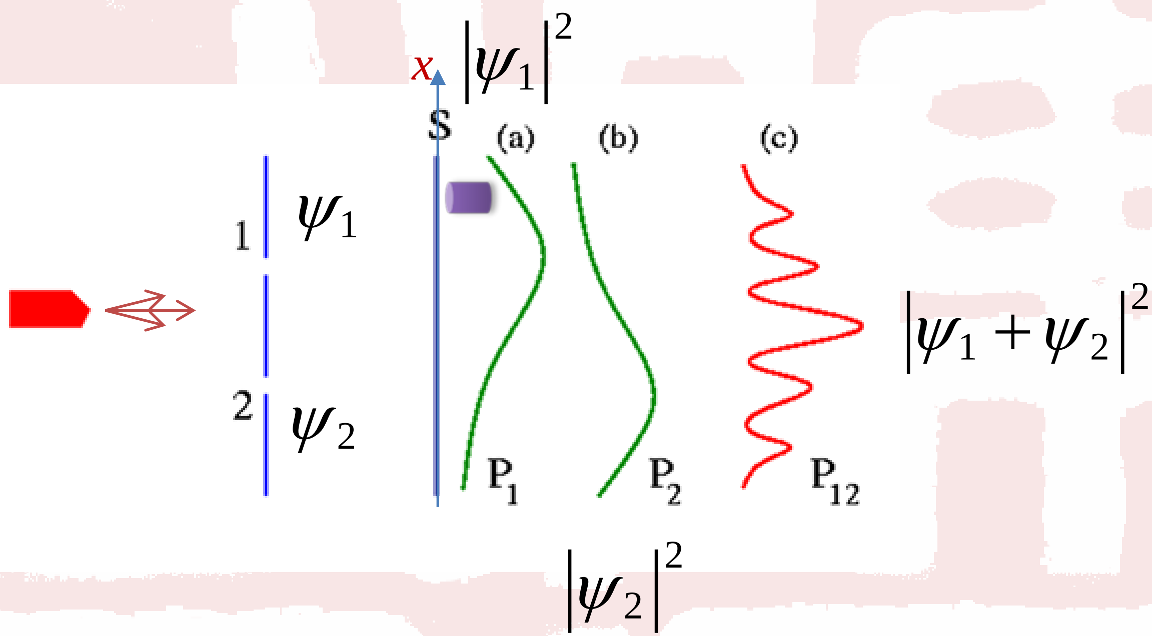
$$|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2$$

在空间 $\boldsymbol{r}$ 处单位体积内粒子出现的概率，即概率密度。

实物粒子的德布罗意波是一种概率波!

$\psi(\boldsymbol{r},t)$ 是概率幅

§ 2.2 波函数及其统计解释–态叠加原理



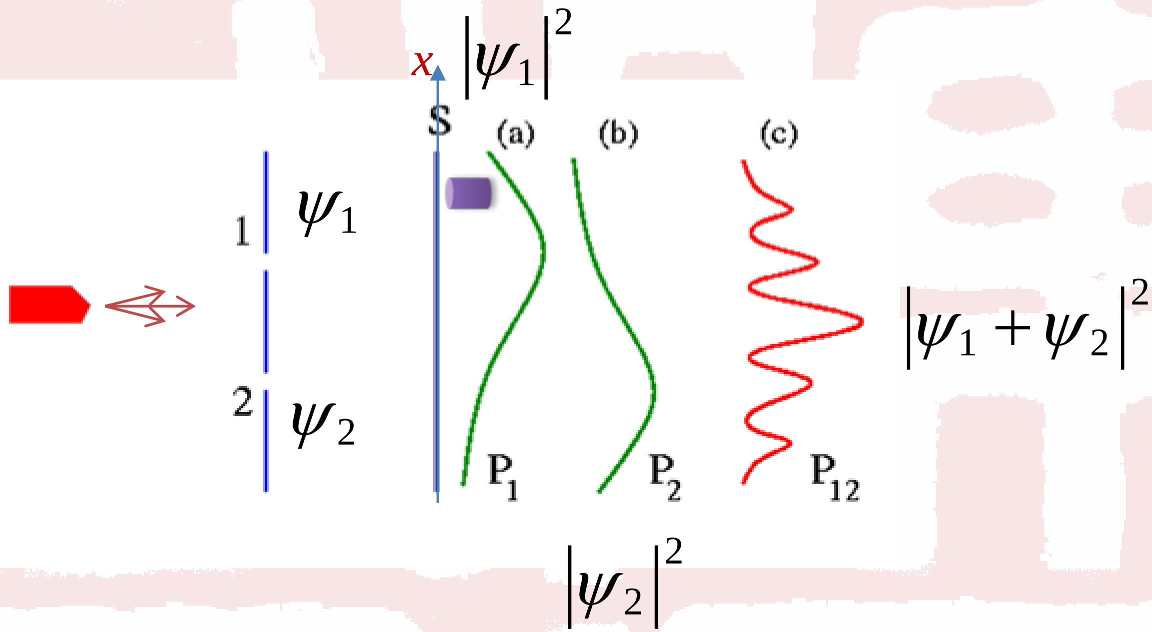
遮上缝2，电子穿过缝1，处在波函数 $\psi_1(x)$ 描述的态，

在屏上 x点出现的概率为 $P_1=|\psi_1(x)|^2$

遮上缝1，电子穿过缝2，处在波函数 $\psi_2(x)$ 描述的态，

在屏上 x点出现的概率为 $P_2=|\psi_2(x)|^2$

§ 2.2 波函数及其统计解释–态叠加原理



双缝打开，电子可能穿过1，也可能穿过2

即：电子既可能处在$\psi_1(x)$态，也可能处在$\psi_2(x)$态

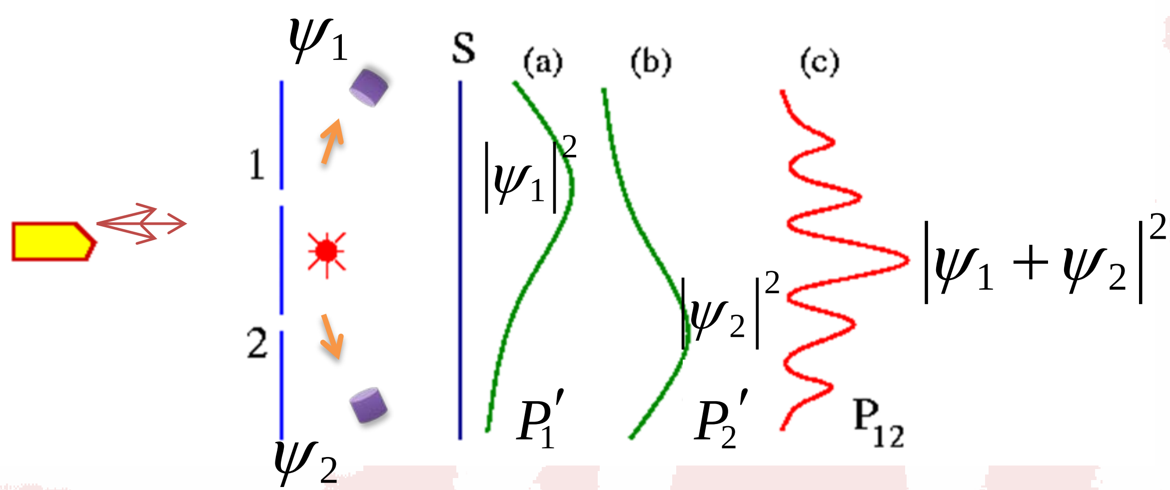
电子处在$\psi_1(x)$和$\psi_2(x)$态的叠加态　$\psi=\psi_1+\psi_2$

50%的概率处在$\psi_1(x)$；50%的概率处在$\psi_2(x)$

电子在屏上出现的概率：$P_{12}=|\psi_1+\psi_2|^2$

§ 2.2 波函数及其统计解释–态叠加原理

Knowing which way (测量)



电子被1看到，表明测量到电子处在 $\psi_1(x)$ 态，

测量使处在叠加态的电子塌缩到 $\psi_1(x)$ 态。

此时电子出现在 x 点的概率为 $P_1 = |\psi_1(x)|^2$

电子被2看到，表明测量到电子处在 $\psi_2(x)$ 态，

测量使处在叠加态的电子塌缩到 $\psi_2(x)$ 态。

此时电子出现在 x 点的概率为 $P_2 = |\psi_2(x)|^2$

电子没有被看到，电子仍处在 $\psi_1(x)+\psi_2(x)$ 的叠加态，

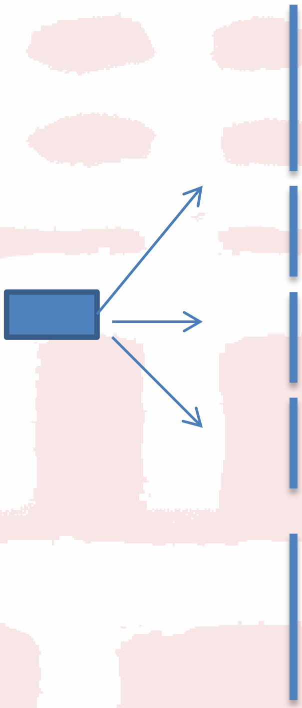
此时电子出现在 x 点的概率为 $P_{12} = |\psi_1+\psi_2|^2$

§ 2.2 波函数及其统计解释–态叠加原理

多缝实验：

电子可能穿过1，也可能穿过2，或3，…

电子可能处在$\psi_1(x)$、$\psi_2(x)$、$\psi_3(x)\ldots$态



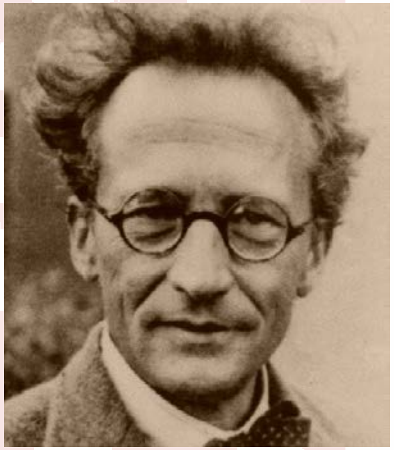
则 $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + c_3\psi_3 + \ldots$ 也是电子的可能状态

态叠加原理

§ 2.3 薛定谔方程–方程的建立

前提假设：

(1) 假设不发生实物粒子的产生和湮灭；
(但可以吸收和发射光子)
(2) 假设所涉及的实物粒子运动速率都比较低，不用考虑相对论。



Erwin Schrödinger
(1887-1961)

先考虑自由粒子：

质量为m的自由粒子的波函数为平面单色波

$$\psi(\mathbf{r},t)=\psi_0\exp\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-\mathrm{E}t)$$

对时间求导：

$$\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{i}{\hbar}E\psi \quad\Rightarrow\quad i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=E\psi$$

§ 2.3 薛定谔方程–方程的建立

另：

$$\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}=(p_x\hat{\mathrm{i}}+p_y\hat{\mathrm{j}}+p_z\hat{\mathrm{k}})\cdot(x\hat{\mathrm{i}}+y\hat{\mathrm{j}}+z\hat{\mathrm{k}})=xp_x+yp_y+zp_z$$

有：

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{i}{\hbar}p_x\psi_0\exp\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-Et)\right]=\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{ip_x}{\hbar}\psi\right]=\left(\frac{ip_x}{\hbar}\right)^2\psi=-\frac{p_x^2}{\hbar^2}\psi$$

同理，有：

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}=-\frac{p_y^2}{\hbar^2}\psi \qquad \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}=-\frac{p_z^2}{\hbar^2}\psi$$

于是：

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}=-\frac{p_x^2+p_y^2+p_z^2}{\hbar^2}\psi=-\frac{p^2}{\hbar^2}\psi$$

即：

$$\nabla^2\psi=-\frac{p^2}{\hbar^2}\psi$$

§ 2.3 薛定谔方程–方程的建立

对于非相对论的自由粒子

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

于是

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = E\psi = \frac{p^2}{2m}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi$$

$$\nabla^2\psi = -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi$$

得

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi}$$

这是自由粒子满足的微分方程

§ 2.3 薛定谔方程–方程的建立

一般情形下，粒子在外场 $V(\mathbf{r}, t)$ 中运动，则在非相对论的情况下

$$E=\frac{p^2}{2m}+V(\mathbf{r},t)$$

两边同乘 ψ：

$$E\psi=\left[\frac{p^2}{2m}+V(\mathbf{r},t)\right]\psi$$

类比：

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=E\psi \qquad \nabla^2\psi=-\frac{p^2}{\hbar^2}\psi$$

则有：

薛定谔方程

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\mathbf{r},t)\right]\psi}$$

§ 2.3 薛定谔方程–概率流密度和概率守恒

设粒子的波函数为：$\psi(\mathbf{r}, t)$，则粒子在空间 **r** 处的概率密度为

$$\rho(\mathbf{r},t) = \left|\psi(\mathbf{r},t)\right|^2 = \psi^*(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)$$

对时间求导

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \frac{\partial \psi^*}{\partial t}\psi + \psi^*\frac{\partial \psi}{\partial t}$$

由薛定谔方程得

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r},t)\right]\psi$$

$$\frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r},t)\right]\psi^*$$

$$\Rightarrow \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla\cdot\left[\frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right)\right]$$

§ 2.3 薛定谔方程–概率流密度和概率守恒

记 $$\boldsymbol{j}(\mathbf{r},t)=\frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^{*}\nabla\psi-\psi\nabla\psi^{*}\right)$$

概率密度　　概率流密度

$$\frac{\partial\rho(\mathbf{r},t)}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{j}(\mathbf{r},t)=0$$

描述粒子概率密度随时间变化的方程。

类比

电流连续性方程 (电荷守恒定律)

电荷密度　　电流密度

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0$$

粒子概率守恒

粒子在空间某处出现的概率的改变，是通过概率流的方式与空间其它处进行概率传递的。

§ 2.3 薛定谔方程–波函数的标准条件

(1) 平方可积：

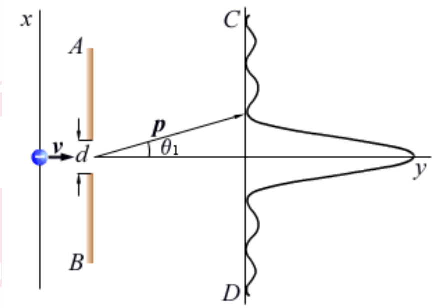
在没有实物粒子湮灭和产生的情况下，粒子在空间各点出现概率的总和为1。

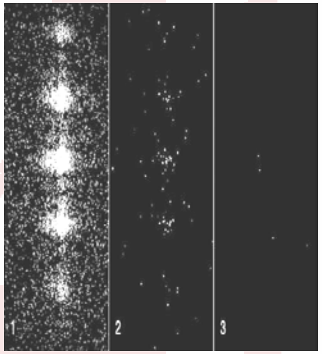
$$\int_V \rho d\tau = \int_V \psi^* \psi d\tau = 1$$

波函数的归一化条件。

要求波函数平方可积。

electron





$$\left.\begin{matrix} \psi(\mathbf{r},t) \\ \\ C\psi(\mathbf{r},t) \end{matrix}\right\}$$ 描述同一种状态。

常数

有意义的是相对概率分布： $|\psi(\mathbf{r},t)|^2$

$$C^2|\psi(\mathbf{r},t)|^2$$

相同的相对概率分布。

§ 2.3 薛定谔方程–波函数的标准条件

(2) 有限、单值和连续：

物理上要求粒子的概率密度$\rho(\mathbf{r}, t)$和概率流密度$\boldsymbol{j}(\mathbf{r}, t)$ 在任一时刻、在空间任一点的值为有限、单值和连续的。

因此，波函数应当在全空间内满足有限性、单值性和连续性。

如果$V(\mathbf{r}, t)$是$\mathbf{r}$的连续函数(或在某些间断点上为有限的突变)，则 Schrödinger 方程要求波函数对空间坐标的一阶导数也连续。

(3) 态叠加原理：

设$\psi_1(\mathbf{r}, t)$ 、$\psi_2(\mathbf{r}, t)$ 、$\psi_3(\mathbf{r}, t)\ldots$满足粒子Schrödinger 方程，则其线性组合

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + c_3\psi_3 + \ldots$$

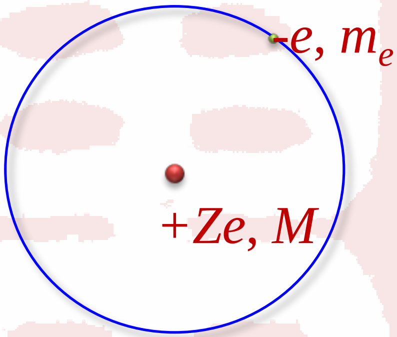
也满足Schrödinger 方程，是描述粒子状态的波函数。

§ 2.3 薛定谔方程–定态薛定谔方程

假设粒子所处的外场 $V(\mathbf{r})$不随时间改变。

例如：在(类)氢原子中，电子所在的库仑场

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$



$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right]\psi$$

分离变量 $\psi(\mathbf{r},t) = u(\mathbf{r})f(t)$

两边同除以$\psi(\mathbf{r}, t)$，得

$$\frac{i\hbar}{f(t)}\frac{df}{dt} = \frac{1}{u(\mathbf{r})}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right)u(\mathbf{r}) \equiv cons. \qquad \text{设为}E$$

则有

$$\begin{cases} \dfrac{i\hbar}{f(t)}\dfrac{df}{dt} = E \\ \dfrac{1}{u(\mathbf{r})}\left(-\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right)u(\mathbf{r}) = E \end{cases}$$

§ 2.3 薛定谔方程–定态薛定谔方程

- 时间部分的函数满足微分方程

$$\frac{df(t)}{dt}=\frac{E}{i\hbar}f(t)$$

解为 $f(t)=C\exp(-\frac{i}{\hbar}Et)$ C为常数。

- 空间部分的函数满足微分方程

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\mathbf{r})\right)u(\mathbf{r})=Eu(\mathbf{r})$$

总波函数 $\psi(\mathbf{r},t)=u(\mathbf{r})\exp(-\frac{i}{\hbar}Et)$

粒子的能量

$E=T+V$

已经把常数C并入空间波函数$u(\mathbf{r})$。

比较：自由粒子的平面单色波 (特殊情况：V = 0)

$$\psi(\mathbf{r},t)=\psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}e^{-\frac{i}{\hbar}Et}=u(\mathbf{r})\exp(-\frac{i}{\hbar}Et)$$

$E=T$

§ 2.3 薛定谔方程–定态薛定谔方程

定态：

(1) 体系的能量 $E=T+V$ 不随时间变化；

(2) 粒子的概率分布不随时间变化。

$$\rho(\mathbf{r},t)=|\psi(\mathbf{r},t)|^2=\left|u(\mathbf{r})\exp(-\frac{i}{\hbar}Et)\right|^2=|u(\mathbf{r})|^2$$

比较： Bohr的定态

(1) 假设存在一系列能量确定的定态；
(2) 假设处在定态的电子不辐射。

定态薛定谔方程：

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\mathbf{r})\right)u(\mathbf{r})=Eu(\mathbf{r})$$

§ 2.4 一维定态问题–无限深方势阱

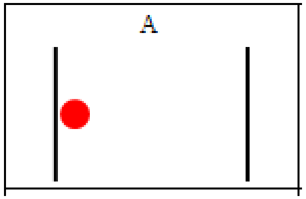
一维定态问题

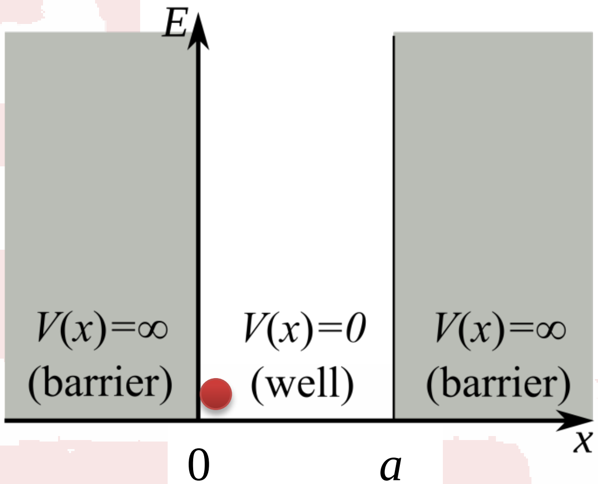
设质量为m，能量为E的粒子沿x轴运动，势能是不含时的$V(x)$，则这是一个一维的定态问题，其Schrödinger 方程：

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right)u(x)=Eu(x)$$

一维无限深方势阱

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





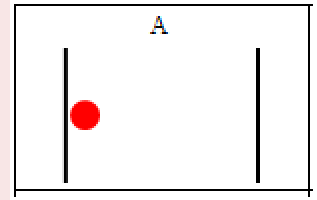
一维无限深方势阱

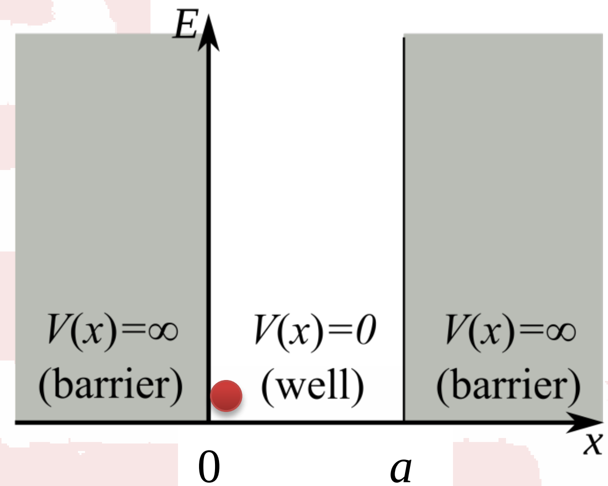
§ 2.4 一维定态问题–无限深方势阱

(1) 在 $x<0$ 或 $x>a$ 区域，$V(x)=\infty$

只有 $u(x)=0$，Schrödinger 方程才能成立。

物理上，粒子不可能进入这样的区域，
而是完全束缚在势阱中。





一维无限深方势阱

(2) 在势阱内，即$0\le x\le a$ 区域，$V(x)=0$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dx^2}=Eu$$

设 $k=\dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ $(E>0)$

则 $\dfrac{d^2u}{dx^2}=-k^2u$ 二阶齐次微分方程

其通解为 $u(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}$

计入时间部分的波函数 $\psi(x,t)=u(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}=Ae^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}+Be^{-\frac{i}{\hbar}(px-Et)}$

x方向平面波 -x方向平面波

§ 2.4 一维定态问题–无限深方势阱

综合而言

$$u(x)=\begin{cases} Ae^{ikx}+Be^{-ikx}\ , & 0\le x\le a \\ 0\ , & x<0, or, x>a \end{cases}$$

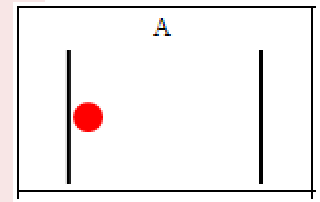
A, B是待定系数。

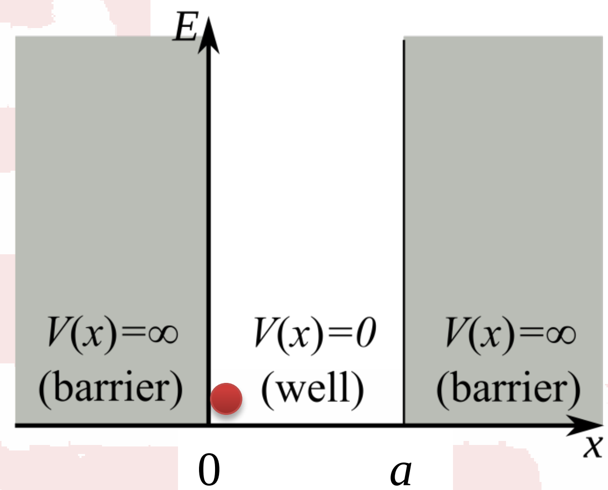
按照波函数的标准条件

(1) 在 x=0 处连续

$$u(x)\big|_{x=0}=A+B=0 \quad \Rightarrow \quad A=-B$$

则 $$u(x)=A(e^{ikx}-e^{-ikx})$$
$$=A\left[\cos kx+i\sin kx-\left(\cos kx-i\sin kx\right)\right]$$
$$=2iA\sin kx \xrightarrow{2iA\to A} u(x)=A\sin kx$$





一维无限深方势阱

§ 2.4 一维定态问题–无限深方势阱

(2) 在 $x=a$ 处连续

$$u(x)\big|_{x=a} = A\sin ka = 0$$

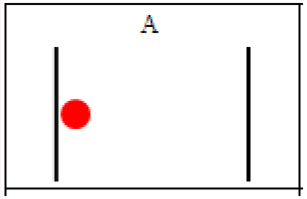
则 $ka = n\pi, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$

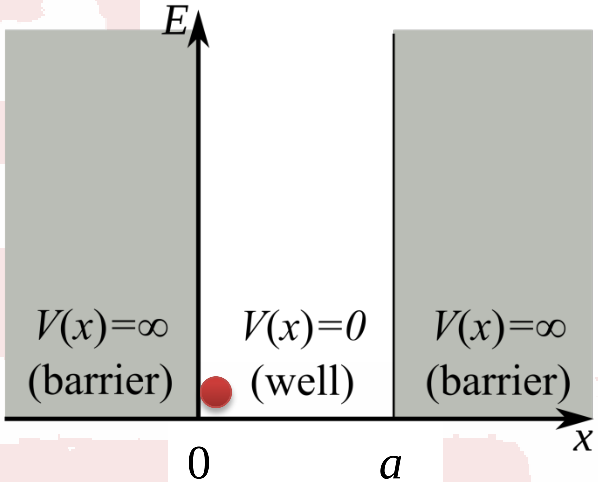
(注：若 $n = 0$，则$u(x)\equiv 0$，无意义；

若 n 取负整数，

$$u(x) = A\sin(-nx) = -A\sin nx = A'\sin nx$$

得不到新的波函数。)





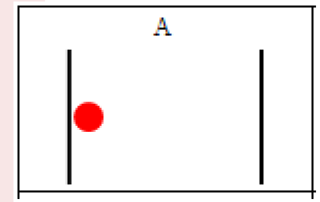
一维无限深方势阱

即 $$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a = n\pi, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

$$\Rightarrow \quad E = E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

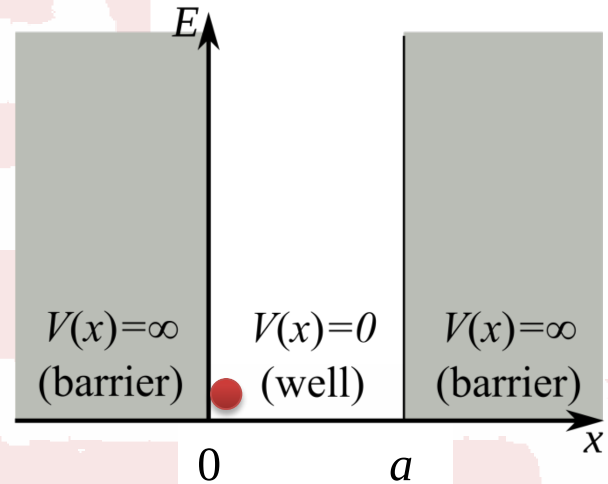
能量量子化！

§ 2.4 一维定态问题–无限深方势阱



相应的波函数为

$$u(x)=\begin{cases} A\sin\dfrac{n\pi}{a}x\,, & 0\le x\le a \\ 0\quad , & x<0,or,x>a \end{cases}$$



一维无限深方势阱

(3) 波函数归一化

$$\int_{-\infty}^{+\infty}u^*(x)u(x)dx=A^2\int_0^a\sin^2\frac{n\pi}{a}xdx=1$$

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

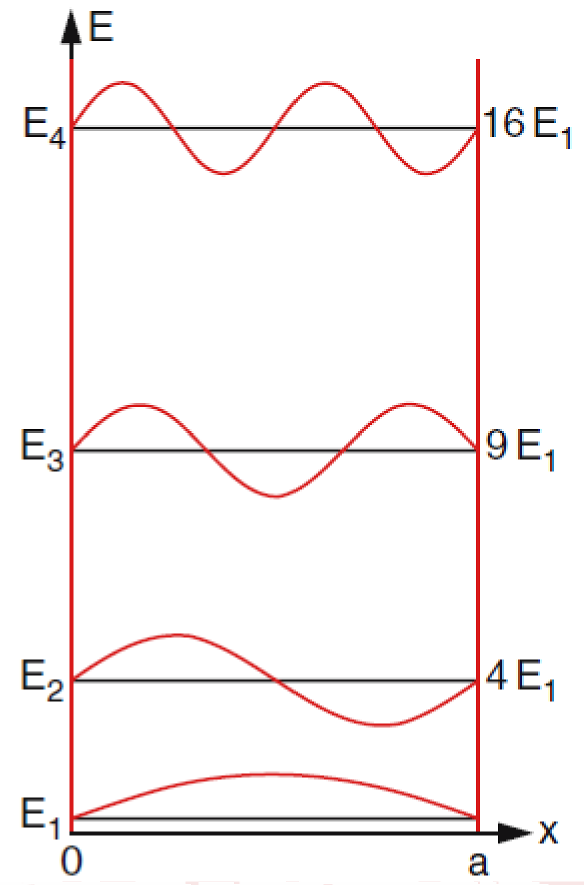
§ 2.4 一维定态问题–无限深方势阱

结论：

(1) 处在一维无限深势阱中粒子，其定态波函数为

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

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



§ 2.4 一维定态问题–无限深方势阱

结论：

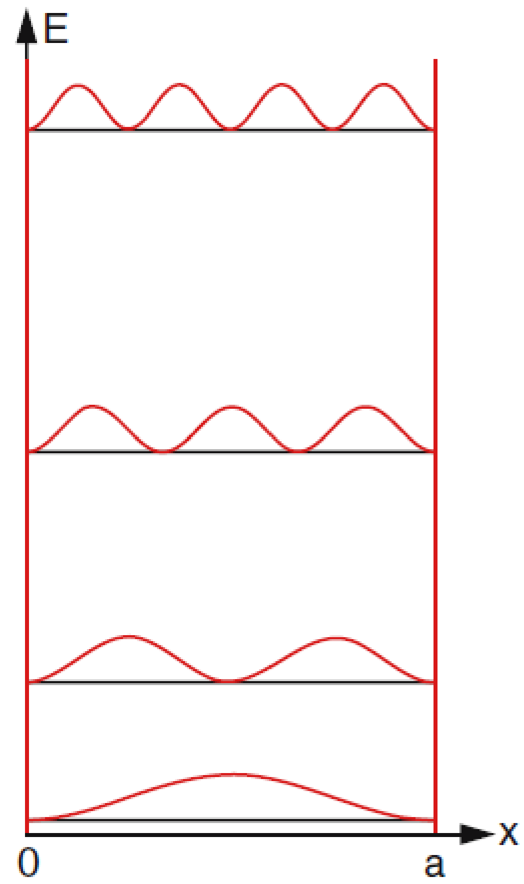
(2) 粒子在一维无限深势阱中的概率(密度)分布

$$|u(x)|^2 = \begin{cases} \dfrac{2}{a}\sin^2\dfrac{n\pi}{a}x, & 0 \le x \le a \\ 0, & x < 0, or, x > a \end{cases}$$

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

概率分布不均匀，存在概率为零的节点。

但：概率分布不随时间变化！



§ 2.4 一维定态问题–无限深方势阱

结论：

(3) 束缚在势阱中的粒子的能量是量子化的

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

(4) 束缚在势阱中的粒子存在零点能

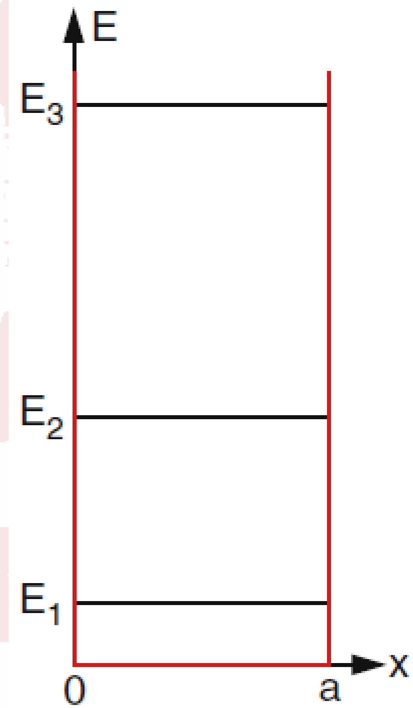
基态 (n =1)能量： $E_1 = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$

在阱内， $V(x)$ =0, E = 动能 T

表明在阱内粒子的动能不可能为零!

与经典物理学中的概念是矛盾的

这是粒子波粒二象性的结果



能级图

§ 2.4 一维定态问题–无限深方势阱

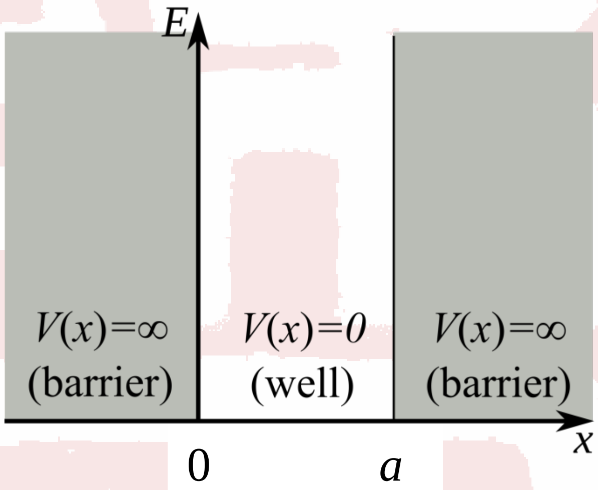
按照不确定关系：

$$\Delta p_x \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$$

因　$\Delta x \sim a$

有　$\Delta p_x \sim \frac{\hbar}{2a} \neq 0$

$$E = \frac{p_x^2}{2m} \sim \frac{\Delta p_x^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{8ma^2} \neq 0$$



§ 2.4 一维定态问题–无限深方势阱

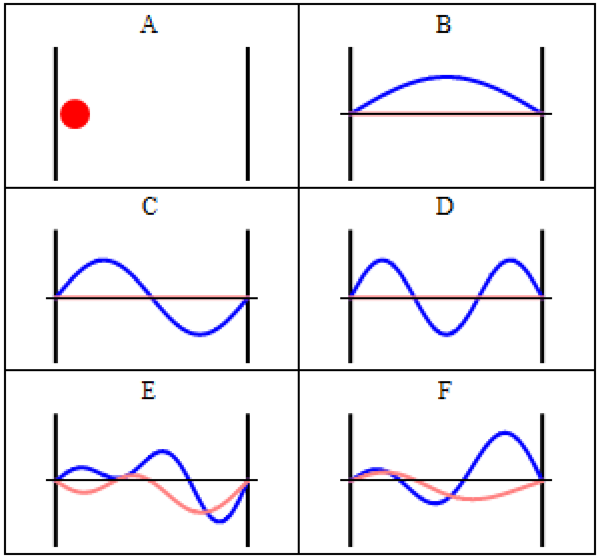
驻波解：

$$a = n\frac{\lambda}{2} = n\frac{h}{2p}$$

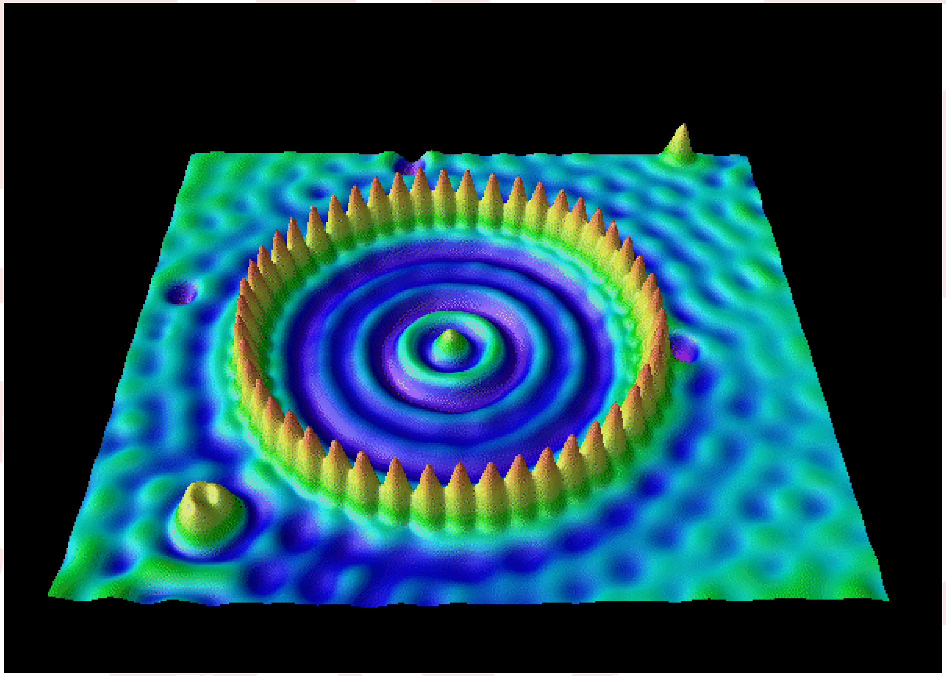
$$\Rightarrow p = \frac{h}{2a}n$$

$$\Rightarrow E = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{8ma^2}n^2$$

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



利用STM操纵48个Fe原子在Cu（111）表面构成的量子围栏 (7.13nm)



$$V(r)=\begin{cases}0, & r\le a\\ \infty, & r>a\end{cases}$$