§ 薛丁格方程的習作

Ex01

考慮一個質量為 m 的粒子，被限制在寬度為 L 的一維無限深位能井中（位能井範圍為$0 \le x \le L$）。根據時間無關薛丁格方程，該粒子的第 n 個能階(n=1，2，3，⋯)的能量E_n表示式為何？

1. 寫出時間無關的薛丁格方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V(x)\psi(x)=E\psi(x)\text{，}\hbar=h/(2\pi)$$

2. 給定勢能函數

$$V(x)=\begin{cases}0, 0<x<L\\ \infty, x\le 0, x\ge L\end{cases}$$

3. 阱內的薛丁格方程

在區域 0<x<L 內，V=0，方程簡化為$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}=E\psi(x)$

$\frac{d^2\psi}{dx^2}=-\frac{2mE}{\hbar^2}\psi$ 令$k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$ 則$\frac{d^2\psi}{dx^2}+k^2\psi=0$ 其一般解為

$\psi(x)=A\sin(kx)+B\cos(kx)$

4. 邊界條件

由於勢阱無限深，波函數在邊界處必須連續，且因為勢能無限大，波函數必須在 x=0 和 x=L 處為零：$\psi(0)=0,\psi(L)=0$

解出$k=\frac{n\pi}{L}, n=1,2,3,...$

5. 能量量化

由$k^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$與$k=\frac{n\pi}{L}$，$\hbar=\frac{h}{2\pi}$ 解得$E_n=\frac{n^2h^2}{8mL^2}$

Ex02

一粒子處於寬度為 L 的一維無限深位能井的基態，其波函數為

ψ(x)=$\sqrt{\frac{2}{L}}\sin(\frac{n\pi}{L})$ （在$0\le x\le L$區間內）。請問在 0 到$\frac{L}{4}$ 的區域內找到該粒子的機率是多少？

在區域內$0\le x\le\frac{L}{4}$找到粒子的機率 p 為概率密度$|\psi(x)|^2$在此區間的積分：

$$p=\int_0^{\frac{L}{4}}|\psi(x)|^2\,dx=\int_0^{\frac{L}{4}}\frac{2}{L}\sin^2(\frac{\pi x}{L})dx$$

最後結果為$p=\frac{1}{4}-\frac{1}{2\pi}$

Ex03

一個質量為 m 的粒子處於能量 E=0 的定態，其波函數給定為$\psi(x) = Ae^{-ax^4}$，其中 A 和 a 為正常數。請問描述此系統的時間無關薛丁格方程中，位能函數 V(x) 的形式為何？

$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$，給定 E=0，方程化簡為$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = 0$

移項得$V(x)\psi = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}$，因此$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{1}{\psi}\frac{d^2\psi}{dx^2}$

歸一化常數 A 會在計算中消去取$\psi(x) = e^{-ax^4}$，計算$\frac{d^2\psi}{dx^2}$得

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \ldots = (16a^2x^6 - 12ax^2)\psi(x)$$

代回$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{1}{\psi}\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2\hbar^2 a}{m}x^2(4ax^4 - 3)$