

一维无限深势阱定态波函数动量展开讨论

单 斌 李浩博 杜 纯 文艳伟

(华中科技大学材料科学与工程学院 湖北 武汉 430074)

(收稿日期:2021-08-19)

摘要:一维无限深势阱定态的动量概率分布存在两种“互相矛盾”的结论.为帮助学生理解两种结论的异同,锻炼严谨的科学作风和解决复杂问题的能力,笔者在量子力学理论教学中指导学生利用Python等现代科学计算工具,将一维无限深势阱定态波函数动量展开的讨论进行数值求解与可视化,绘制了不同观点以及不同情形下粒子的动量概率分布图.以此为基础讨论了不同计算结果的物理含义,揭示了两种结论的内在联系.此创新性的举措不仅有效加深了学生对于该重要问题的理解,还促进了学生专业知识、科学能力和综合素质的全面培养.

关键词:一维无限深势阱 动量概率分布 傅里叶变换 可视化

一维无限深势阱求解是量子力学初学者的入门问题,也是课程中必不可少的经典问题,其薛定谔方程的求解步骤,以及相关定态的空间概率分布解释等,在各类教材中的阐述已经十分成熟和明确.但是,一维无限深势阱定态动量概率分布却在教学中较少涉及,相关教材和习题也巧妙避开了这个具有争议的部分,导致学生学习过程中对于定态的动量展开存在困难以及理解的偏差.实际上,朗道^[1]和泡利^[2]等物理学家就对一维无限深势阱中粒子波函数定义域的理解存在分歧,导致了该问题两种迥异的结论.笔者在授课过程中,通过引导学生对于这个历史问题进行了溯源和讨论,并在现代的Python等数值分析工具辅助下将一维无限深势阱定态波函数动量展开进行可视化,直观地绘制出不同情况不同解法下粒子的动量概率分布图,从而有效促进学生知识、能力和素质的综合培养,在量子力学理论教学中锻炼学生严谨的科学作风和解决复杂难题的实践能力.

1 一维无限深势阱定态动量展开问题

1.1 问题引入

一维无限深势阱是理想化的数学模型,实际的量子点等材料体系在特定条件下也可抽象成一维无限深势阱问题进行近似处理^[3,4].该模型的势阱可表示为

$$V(x) = \begin{cases} 0, & -\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2} \\ \infty, & \text{其他位置} \end{cases}$$

根据波函数的连续性、有界性条件,可解得粒子能量本征值及其归一化定态波函数

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (n=1, 2, 3, \dots)$$

$$\Psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), & -\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2} \\ 0, & \text{其他位置} \end{cases}$$

现有的教材和习题充分讨论了自由粒子不同形态的空间波函数及其动量分布概率^[5,6].然而,针对一维无限深势阱中的粒子的动量展开却缺乏类似的讨论.课堂教学过程中,笔者引入了开放教材网站LibreTexts上关于一维无限深势阱的习题^[7].

【例题】现有一个处于如下一维无限深势阱中基态的粒子,求其动量分布概率.

$$V(x) = \begin{cases} 0, & -\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2} \\ \infty, & \text{其他位置} \end{cases}$$

课堂上,笔者组织学生针对展开的计算过程和结果进行分组讨论.在教师的引导和学生们自发的讨论氛围下,很快形成了两种“针锋相对”的观点.

一方认为,为求得波函数的动量分布概率,需要将波函数在频域中展开为

$$\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x) e^{-i\frac{p}{\hbar}x} dx$$

由于波函数在空域中的定义是完整和明确的,在除 $-\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2}$ 的范围外均为零,因此只要对波函数在该范围上进行积分.

另一方认为,一维无限深势阱基态粒子处于定态、有两个确定的动量值,取两个值的概率相等,不必进行繁琐的积分.

1.2 动量展开的两种结论

事实上,历史上量子力学的权威专家学者对该粒子动量分布概率及其求法亦存在分歧^[8,9].朗道的观点与学生中一方的观点一致,即一维无限深势阱基态粒子动量概率连续分布,势阱中基态粒子的动量分布,从归一化定态波函数出发可得

$$\begin{aligned} \varphi(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x) e^{-i\frac{p}{\hbar}x} dx = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} \left[\sqrt{\frac{L}{2}} \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) \right] e^{-i\frac{p}{\hbar}x} dx \end{aligned}$$

经变换及简化,可得

$$\varphi(p) = \frac{\sqrt{L\pi}}{2} \left(\frac{\cos \alpha}{\frac{\pi^2}{4} - \alpha^2} \right) \quad \alpha \equiv \frac{pL}{2\hbar}$$

泡利则与学生中另一方观点一致,认为该粒子动量概率是离散分布的,他们认为定态下动量 $|p|$ 的值已给定,且 $k = \frac{n\pi}{L} = \frac{|p|}{\hbar}$.因此,动量分布概率

$$\Phi(p) = \Phi(-p) = \frac{1}{2}$$

可以看出,一维无限深势阱基态粒子动量的泡利解是分立的两个值、两个取值的概率相等,而朗道解是连续的、不同取值的概率是连续分布.以上两种

推导结果完全不同,有意思的是,当粒子处于激发态时,两种结论将表现出一定的共性,经过解析推导, $n \geq 2$ 时朗道解可表示为^[10,11]

$$\varphi_n(p) = \frac{n\hbar^{\frac{3}{2}}(\pi L)^{\frac{1}{2}} [(-1)^n e^{\frac{i p L}{\hbar}} - 1]}{p^2 L^2 - n^2 \pi^2 \hbar^2} \quad (n \geq 2)$$

则相应的概率密度为

$$\begin{aligned} |\varphi_n(p)|^2 &= \\ \frac{2\pi L n^2}{\hbar} \frac{\left[1 + (-1)^{n+1} \cos\left(\frac{pL}{\hbar}\right) \right]}{\left(\frac{p^2 L^2}{\hbar^2} - n^2 \pi^2 \right)^2} \quad (n \geq 2) \end{aligned}$$

或可近似由下式给出

$$\begin{aligned} |\varphi_n(p)|^2 &\approx \\ \frac{L}{4\pi\hbar} \left[F^2\left(p - \frac{n\pi\hbar}{L}\right) + F^2\left(p + \frac{n\pi\hbar}{L}\right) \right] \quad (n \geq 2) \end{aligned}$$

式中

$$F(p) = \frac{\sin \frac{pL}{2\hbar}}{\frac{pL}{2\hbar}}$$

2 动量概率分布的可视化

课堂上关于一维无限深势阱动量概率分布的两种理解讨论颇为激烈,由于公式的复杂性,学生们没有对两种不同解法的差异有一个定量和直观的理解.为了弥补这方面的不足,锻炼学生独立解决问题的能力,笔者布置了课后的学习任务,引导学生查阅国内外文献以及调研一维无限深势阱粒子动量概率分布的研究现状.同时,通过 JupyterLab 平台编写了 Python 程序框架,引导学生们探究不同能级 n 及势阱宽 L 下一维无限深势阱粒子动量概率分布并进行结果的可视化,以深入理解 $n=1$ 时泡利解与朗道解的差异,认识 $n \geq 2$ 时二者展示出的共性.

由于物理常数的改变一般不影响理论的形式,为方便求解,设定程序中的 $\hbar=1$,得到的结果如下.

通过 Python 的数值求解,学生们结合可视化的图 1 和表 1 得到,概率密度 $|\varphi_n(p)|^2$ 的最大值出现在 $p = \pm \frac{n\pi\hbar}{L}$ 处,存在两个以最大值 p 为中心的峰,能取得可观值的区域为最高峰,其宽度

$$\Delta p = \pm \frac{4\pi\hbar}{L}$$

不随 n 变化. L 一定时, 随着 n 增大

$$\frac{\Delta p}{|p|} = \frac{4}{n}$$

不断减小, 此时测得

$$p = \pm \frac{n\pi\hbar}{L}$$

的概率亦增大; 当 $n \rightarrow \infty$ 时, 可理解当且仅当

$$p = \pm \frac{n\pi\hbar}{L}$$

时, 动量分布概率不为零. 故可视化结果与理论吻合良好, 随着 n 增大, 泡利解逐渐趋于朗道解. 所以实际上, 这两种不同的物理图像并不是完全相互矛盾的, 而是在渐进的条件下取得了一致的收敛.

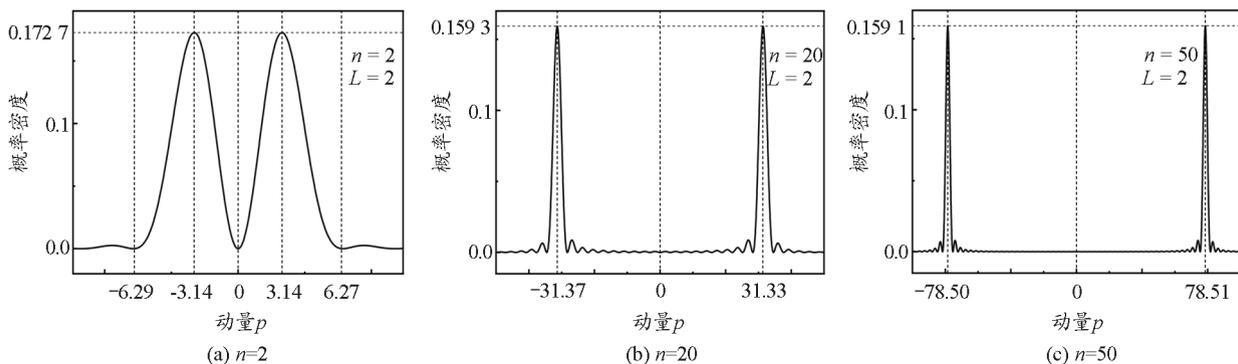


图1 设 $L=2, \hbar=1$ 时粒子动量分布(横轴、纵轴取任意单位)

表1 $L=2, \hbar=1$ 时粒子动量分布概率相关信息

n	最大值点		最大值点间距	最大值	最高峰宽		最高峰积分值之和	$[-100, 100]$ 积分值
2	-3.142	3.142	6.284	0.159 2	6.284	6.284	0.934 6	0.996 8
20	-31.424	31.408	62.832	0.159 2	6.272	6.288	0.903 1	0.996 5
50	-78.528	78.480	157.008	0.159 2	6.288	6.288	0.902 9	0.991 9

课堂教学中, 有了数值工具和可视化图像后, 笔者进一步引导学生展开更多的探索. 例如让学生们固定 n , 增大 L , 研究一维无限深势阱的物理图像是否会趋向于自由粒子. 结合图2、图3、表2及上式同样可知, $|\varphi_n(p)|^2$ 的最大值不断增大, 趋向于 δ 函数; Δp 也越来越小, p 的取值同样趋向于零. 以上

结果说明 L 越大, 所受的束缚越小, 量子效应愈不明显, 最终趋向于经典物理. 通过类似的调整不同参数的探究, 学生们对于这个看似简单的问题, 有了完全不一样的认识, 对于量子力学中经典问题的理解程度有了质的提高.

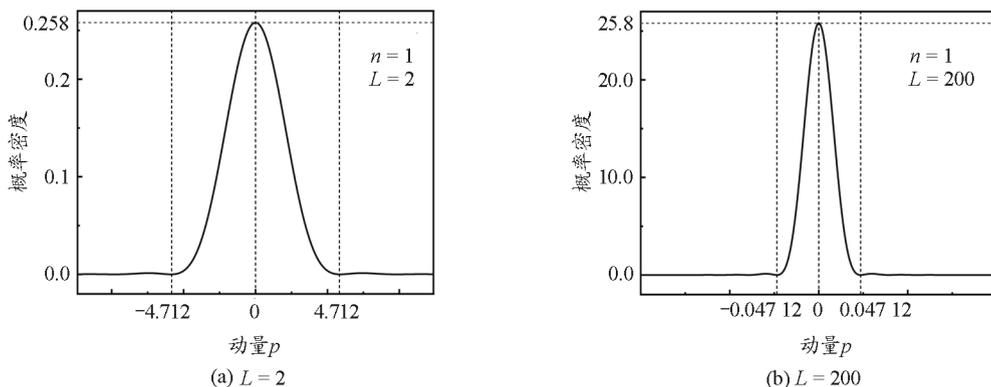
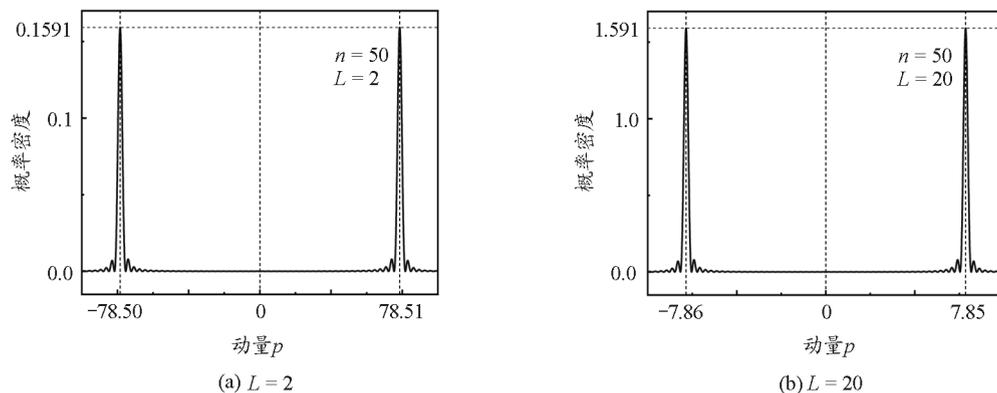


图2 设 $n=1$ 时粒子动量分布(横轴、纵轴取任意单位)

图3 设 $n = 50$ 时粒子动量分布(横轴、纵轴取任意单位)表2 $n = 1$ 及 $n = 50$ 时粒子动量分布概率相关信息

n	L	最大值点		最大值点间距	最大值	最高峰宽		最高峰积分值之和	$[-100, 100]$ 积分值
1	2	0	—	—	0.257 5	9.424	—	0.934 6	0.999 9
1	200	0	—	—	24.600	0.094 24	—	0.994 9	0.999 9
50	2	-78.528	78.480	157.008	0.159 2	6.288	6.288	0.902 9	0.991 9
50	20	-7.853	7.848	15.701	1.591 0	0.627 0	0.629 0	0.902 9	0.999 6

参考文献

3 结束语

笔者以“一维无限深势阱定态波函数动量展开”问题为例,引导学生利用 Python 等现代信息技术工具和中英文在线教学资源,揭示了 $n=1$ 时该问题泡利解与朗道解的差异,以及 $n \geq 2$ 时二者展示出的上述共性.教学过程中,丰富的教学手段充分激发学生的学习热情,鼓励勇于探索、勇于质疑的科学精神,通过辨析两种解的异同学会辩证思考科学理论,成功将科学精神、团队意识、协作精神等融入课堂,做到了“润物细无声”.整个课程教学中,笔者结合线下的知识传授、分组讨论以及线上的自主学习方法进行混合式教学,激发学生自主学习意愿,培养学生创新意识.同时,引入中文和英文双语资料、介绍与课程知识相关的拓展讨论,注重学生综合能力的培养.此外,鼓励学生自主学习和合理使用 Python 等现代信息技术工具,将学习的主动权移交给学生,通过查阅资料、自主模拟深入理解课堂内容,生动实践了“翻转课堂”的理念.正是这种创新的教学理念,让课程组负责的量子力学课堂多次获得校教学质量一等奖、学生最满意课堂等荣誉,学生对课堂好评如潮.

- 朗道,栗弗席茨.量子力学(非相对论性理论)(上)[M].北京:高等教育出版社,1983.79~81
- 泡利.泡利物理学讲义(第五卷:波动力学)[M].北京:人民教育出版社,1982.20~21
- 夏吾吉,张林.量子力学中无限深势阱问题的教学研究[J].大学物理,2015,34(2):35~40
- PhysicsOpenLab. Quantum Dots: a True "Particle in a Box" System[EB/OL]. (2015-11-20) [2021-08-15]. <https://physicsopenlab.org/2015/11/20/quantum-dots-a-true-particle-in-a-box-system>
- 曾谨言.量子力学教程(第3版)[M].北京:科学出版社,2014.9~10
- Griffiths, David J. Introduction to Quantum Mechanics (2nd Edition)[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2016. 59~64
- Weideman, Tom. Infinite Square Well[EB/OL]. (2020-09-12) [2021-06-21]. <https://phys.libretexts.org/@go/page/17172>
- Markley, F. Landis. Probability Distribution of Momenta in an Infinite Square-Well Potential[J]. American Journal of Physics, 1972, 40(10): 1545~1546
- Fulling, S. A. Comment on "Probability Distribution of

(下转第27页)

些客观存在的现实问题,首先是教师们思想认识不足,重视程度不够,大多数教师认为教物理就是讲明白知识点即可,课程思政就是搞噱头,没有多大必要.其次是不知如何在课堂上进行课程思政,也就是缺乏实际操作方法及实施方案.还有部分教师确实进行了课程思政元素的融入,但动作生硬,为了融入而融入,思政元素和大学物理知识点契合度低,犯了“两张皮”的毛病.最后,学校及教育主管部门也缺乏对课程思政建设的激励措施,实施与否和实施程度深浅也缺乏量化评测、监督与考核.

针对以上问题,笔者认为,增强大学物理教师队伍对上级课程思政有关文件的学习很有必要,首先在思想上予以重视,党员教师要起到模范带头作用.教师队伍要多外出学习国内同行实施课程思政的先进做法,另外,还要加强全体教师对物理学史、马克思主义哲学理论的学习和运用,定期实施以课程思政为主题的观摩课.这样才能更好地做好大学物理课程思政建设,为国家培养红专并举的社会主义建

设者和接班人^[8].

参考文献

- 1 习近平.把思想政治工作贯穿教育教学全过程开创我国高等教育事业发展新局面[N].人民日报,2016-12-09(1)
- 2 焦菁,陈之腾,李立基.上海高校积极试点探索“课程思政”教育教学改革[J].上海教育,2017(12)
- 3 夏雄平,曹雪丽,卓亚琦,等.“大学物理”课程教学中的思政教育探究[J].科教导刊,2018,12(34):112~113
- 4 陆颖墨.海军往事·长波[J].政工学刊,2015(3):92~93
- 5 任娜,王加祥,李安康,等.强激光场中真空极化效应[J].强激光与粒子束,2011
- 6 陈敬全.受哲学思想的启发导致的重要科学发现[J].世界科学,2020(11)
- 7 肖前.马克思主义哲学原理[M].北京:中国人民大学出版社,1994.1
- 8 梅中磊,刘敏,牛调明,等.理工科教学中的思想政治教育[J].电气电子教学学报,2018(2):5~32

(上接第22页)

Momenta in an Infinite Square - Well Potential”[J]. American Journal of Physics,1973,41(112): 1 374 ~ 1 375

10 韩锋,赖德洁.一维无限深势阱中粒子动量分布的一个

佯谬[J].河池学院学报(自然科学版),2004,24(4):7~11

- 11 Infinite Wells [EB/OL]. (2021-6-3) [2021-06-21]. <http://electron6.phys.utk.edu/PhysicsProblems/QM/2-one-dimensional/eigenvalue/infinite.html>

Discussion on the Momentum of One - Dimensional Infinite Potential Well Stationary Wave Function

Shan Bin Li Haobo Du Chun Wen Yanwei

(School of Materials Science and Engineering, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan, Hubei 430074)

Abstract: There exist two different approaches about the probability distribution of momentum for a particle in a one dimensional infinite well. To illustrate the differences and connections between these two approaches, modern teaching techniques including Python was introduced to the course Quantum Mechanics. Students were guided to visualize solutions for different approaches under various conditions. Using this method, the meaning of the results was discussed, and the underlying connections were clarified to the students. This initiative not only effectively deepens students' understanding of this important issue, but also promotes the comprehensive cultivation of students' professional knowledge, scientific ability and comprehensive quality.

Key words: one - dimensional infinite well; momentum probability distribution; Fourier transform; visualization