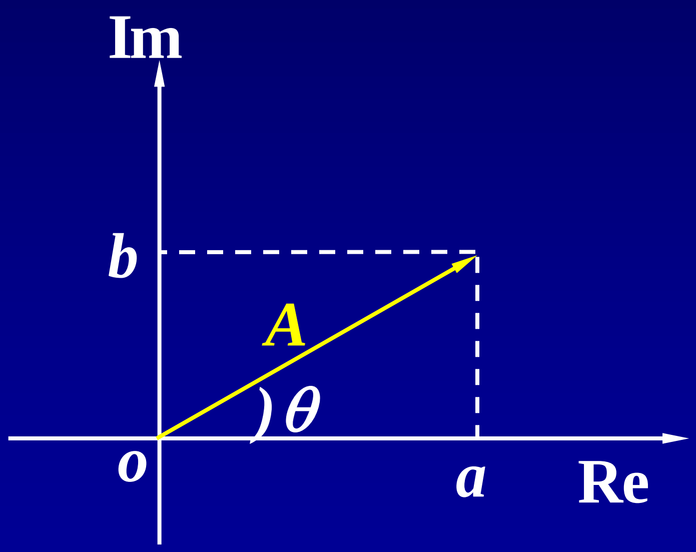
§15.8 量子力学简介

背景 二十世纪20~30年代，经过德布罗意、薛定谔、海森堡、玻恩、狄拉克等科学家的努力，建立了描述微观粒子运动规律的量子力学。

一、物质波波函数

微观领域常用实物粒子在空间出现的概率分布来描述其运动状态，该概率分布函数称为物质波的波函数。

波函数记作$\Psi(x, y, z, t)$，常用复数形式来表示!



$$\Psi(x,y,z,t) = A\cos\theta + iA\sin\theta$$

$$\Psi(x,y,z,t) = Ae^{i\theta}$$

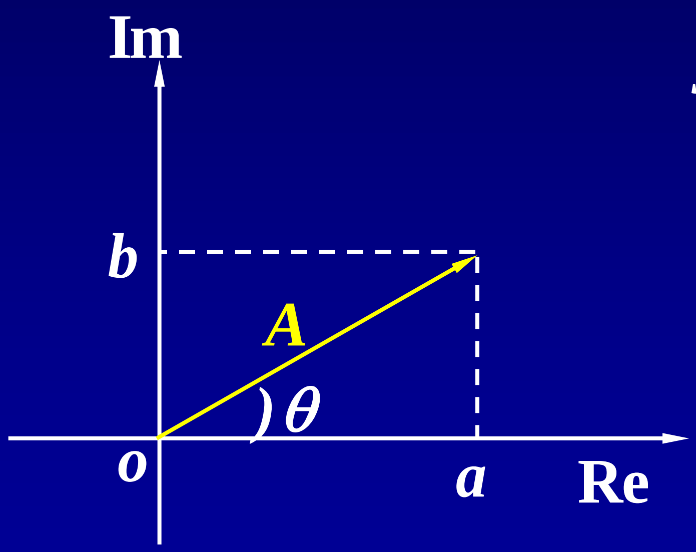
A: 称为该复数的模

θ: 称为该复数的幅角

例如，沿$+x$方向传播的平面简谐波的波动方程：

$$y(x,t)=A\cos\left(\frac{2\pi}{\lambda}x-\omega t-\varphi_0\right)$$

也可用复数形式来表示：



$$y(x,t)=Ae^{-i\left(\omega t-\frac{2\pi}{\lambda}x+\varphi_0\right)}=\psi(x)e^{-i2\pi\nu t}$$

$$\psi(x)=e^{i\left(\frac{2\pi}{\lambda}x-\varphi_0\right)}$$

$\Psi(x)$：该波动方程的定态波函数，不含时间变量。

如何构造物质波波函数$\Psi(x, y, z, t)$?

① 用复数形式表示。则其振幅为$|\Psi(x, y, z, t)|$。

② 机械波强度：$I \propto A^2$ （A为其在该处的振幅）。

仿此关系，物质波的强度$\propto|\Psi(x, y, z, t)|^2$，物质波的强度称作粒子在空间某点 (x, y, z) 处出现的概率密度，记作$w(x, y, z, t)$。 概率密度函数常写成：

$$\boxed{\text{概率密度}\ w = |\Psi(x, y, z, t)|^2}$$

粒子在 dv 空间出现的概率： $\underline{dG = |\Psi(x, y, z, t)|^2 dv}$

若粒子只出现在一维空间，则其在 $x \sim x+dx$ 空间出现的概率为：

$$dG = wdx = |\Psi(x, t)|^2 dx$$

玻恩(M.Born，1882-1970)德国物理学家，1926年首次提出波函数的统计意义，为此与博特(W.W.G Bothe，1891-1957)共享1954年诺贝尔物理学奖。

③ 粒子在全空间出现的概率为1，即：

$$\int \left|\Psi(x,y,z,t)\right|^2 dv = 1$$ （归一化条件）

对于一维：$\int_{-\infty}^{+\infty} \left|\Psi(x,y,z,t)\right|^2 dx = 1$

④ $\Psi(x,y,z,t)$ 必须满足单值、连续、有限条件（标准条件）。

例 构造一维自由粒子的物质波波函数$\Psi(x,t)$。

一维自由粒子：不受任何外力作用、沿+x方向运动的实物粒子。

设：一平面简谐波沿+x方向传播，其波函数：

$$y(x,t)=A\cos(\omega t-\frac{2\pi}{\lambda}x)$$

复数形式：

$$y(x,t)=Ae^{-i(2\pi\nu t-\frac{2\pi}{\lambda}x)}$$

仿照上式，缔合在一维自由粒子上的物质波波函数:

$$\psi(x,t)=Ae^{-i(2\pi\nu t-\frac{2\pi}{\lambda}x)}$$

而 $E=h\nu$ ， $p=\dfrac{h}{\lambda}$ ， 上式可写成:

$$\psi(x,t)=Ae^{-i\frac{2\pi}{h}(Et-px)}=\psi(x)e^{-i\frac{2\pi}{h}Et}$$

其中: $\psi(x)=Ae^{i\frac{2\pi}{h}px}$

称为一维自由粒子的定态波函数。

二、薛定谔方程 (v << c)

对自由粒子：其定态波函数为 $\psi(x)=Ae^{i\frac{2\pi}{h}px}$，则：

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}=(\frac{i2\pi}{h}p)^2\psi \longrightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2}+(\frac{2\pi}{h}p)^2\psi=0$$

上式可应用到非自由粒子情形。

对非自由粒子
$$\begin{cases}\text{能量：} E=\dfrac{1}{2}m\mathrm{v}^2+E_p \quad (E_p\text{为势能}) \\ \text{动量：} p^2=2mE_k=2m(E-E_p)\end{cases}$$

即：对非自由粒子

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{8\pi^2 m}{h^2}(E-E_p)\psi=0$$

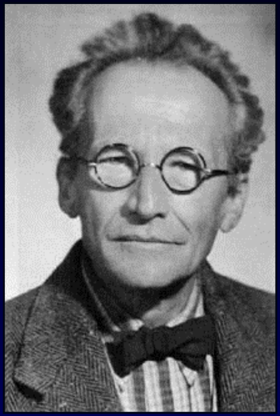
称为**一维定态薛定谔方程**。

三维定态薛定谔方程：

$$\nabla^2\psi+\frac{8\pi^2 m}{h^2}(E-E_p)\psi=0$$

其中，$\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$

称为**拉普拉斯算符**。



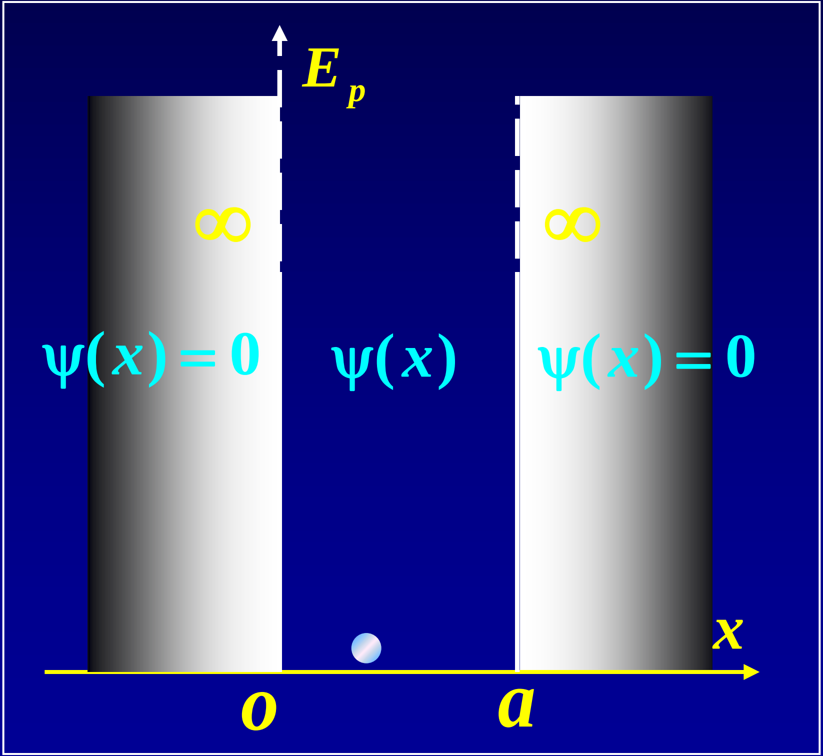
薛定谔（*Erwin Schrödinger*，1887-1961）奥地利物著名理论物理学家，量子力学的重要奠基人之一，同时在固体的比热、统计热力学、原子光谱及镭的放射性等方面的研究都有很大成就。1933年和狄拉克共同荣获诺贝尔物理学奖。薛定谔还是现代分子生物学的奠基人。

三、一维无限深势阱

设：一粒子被约束在 (o, a) 一维空间，其势能函数为

$$E_p = \begin{cases} 0 & (0 < x < a) \\ \infty & (x \le 0 \text{或} x \ge a) \end{cases}$$

$$\psi = \begin{cases} \psi(x) & (0 < x < a) \\ 0 & (x \le 0 \text{或} x \ge a) \end{cases}$$



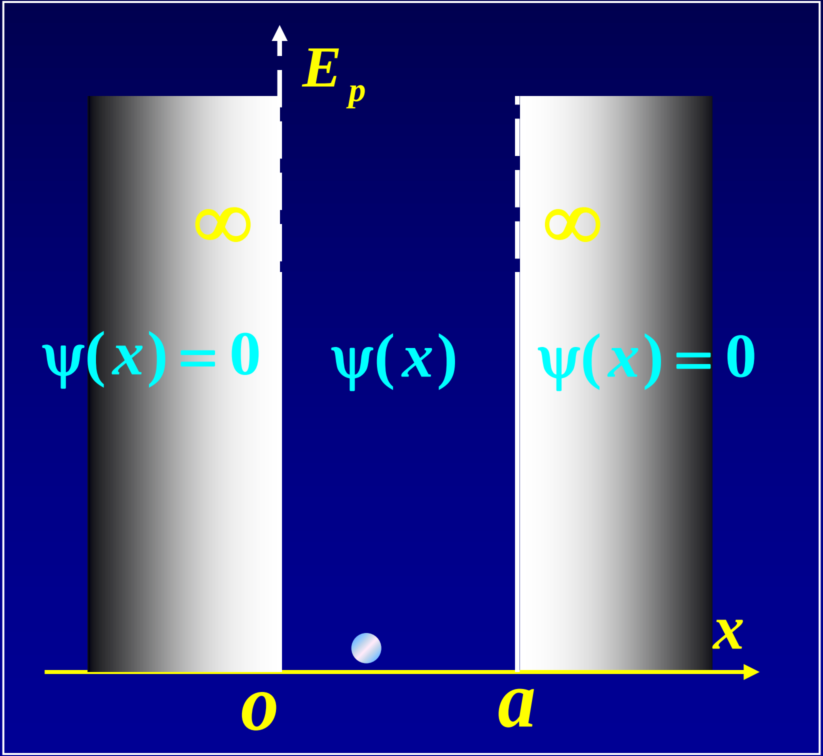
根据定态薛定谔方程，势阱中粒子的概率波满足

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{8\pi^2 mE}{h^2}\psi(x)=o$$

令 $k^2=\dfrac{8\pi^2 mE}{h^2}$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+k^2\psi(x)=o$$

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



根据边界条件：

$$\psi(0)=0 \longrightarrow B=0$$

$$\psi(a)=0 \longrightarrow A\sin ka=0$$

由于粒子肯定出现在*(o, a)*之间，*A*、*B*不能同时为零：

$$\therefore \quad \sin ka=0 \longrightarrow ka=n\pi$$

$$k=\sqrt{\frac{8\pi^2 mE}{h^2}}=\frac{n\pi}{a} \longrightarrow E=\frac{h^2n^2}{8ma^2}$$

$$E_n = n^2 \frac{h^2}{8ma^2} \qquad (\, n = 1, 2, 3, \ldots \text{称为量子数}\,)$$

上式表明：势阱中的粒子的能量是量子化的，只能取一组分立值。能量量子化是物质波粒二象性的自然结果。

粒子波函数为：$\psi(x) = A\sin\frac{n\pi}{a}x$

由归一化条件 $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2\, dx = 1$

$$0 + \int_o^a A^2 \sin^2 \frac{n\pi}{a} x dx + 0 = 1$$

得：$A=\sqrt{\frac{2}{a}}$ $\longrightarrow$ $\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x$

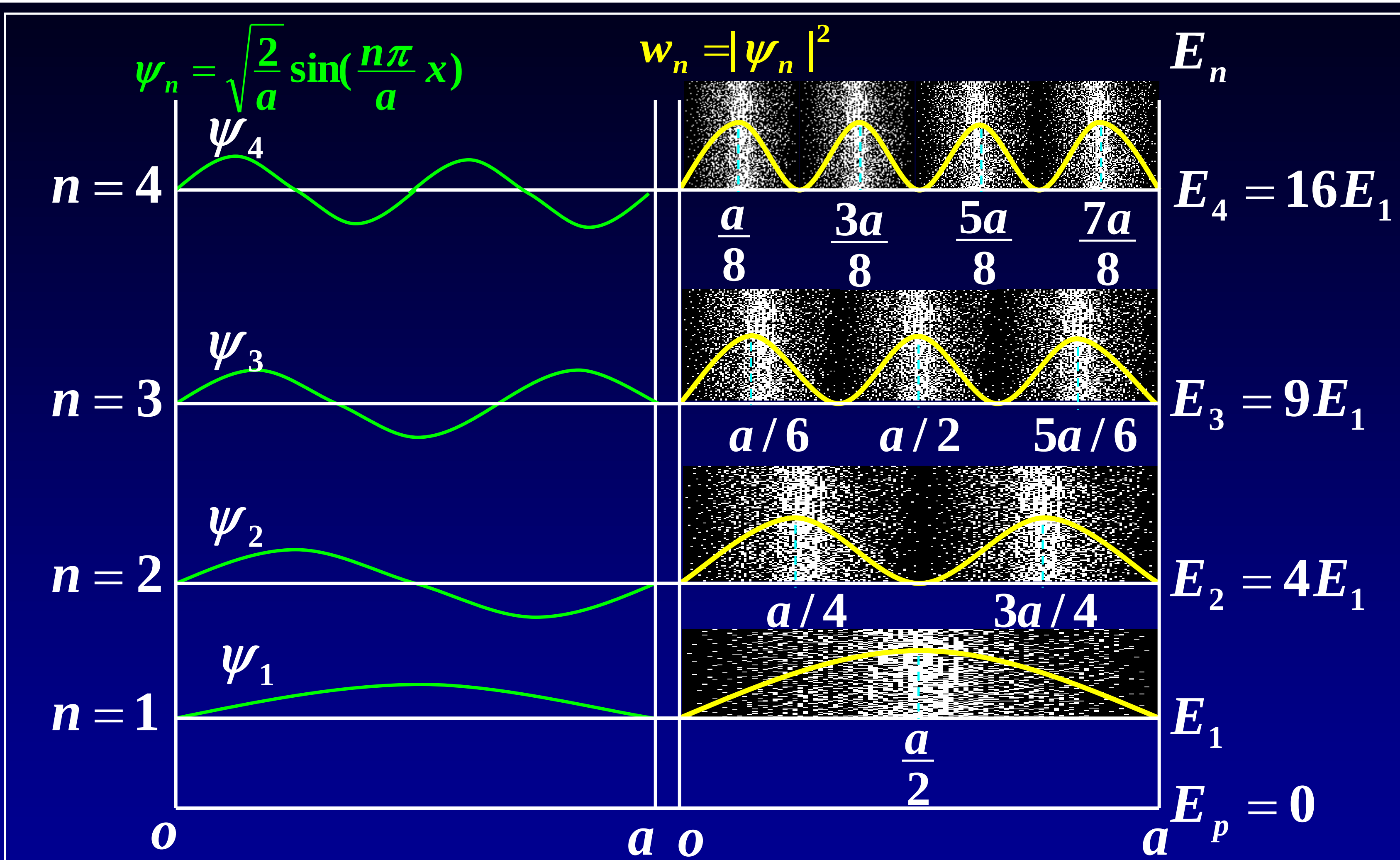
粒子在势阱中的概率密度 w_n 为:

$$w_n(x)=|\psi_n(x)|^2=\frac{2}{a}\sin^2\frac{n\pi}{a}x$$

归纳:

粒子处于量子数为n的状态:

$$\begin{cases} E_n=n^2\dfrac{h^2}{8ma^2} \quad (n=1,2,\dots) \\ \psi_n(x)=\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi}{a}x \\ w_n(x)=|\psi_n(x)|^2=\dfrac{2}{a}\sin^2\dfrac{n\pi}{a}x \end{cases}$$



$$w_n(x) = \frac{2}{a} \sin^2(\frac{n\pi}{a} x) \longrightarrow \text{极大值:} \frac{dw_n(x)}{dx} = 0 \;, \quad \frac{d^2 w_n(x)}{dx^2} < 0$$

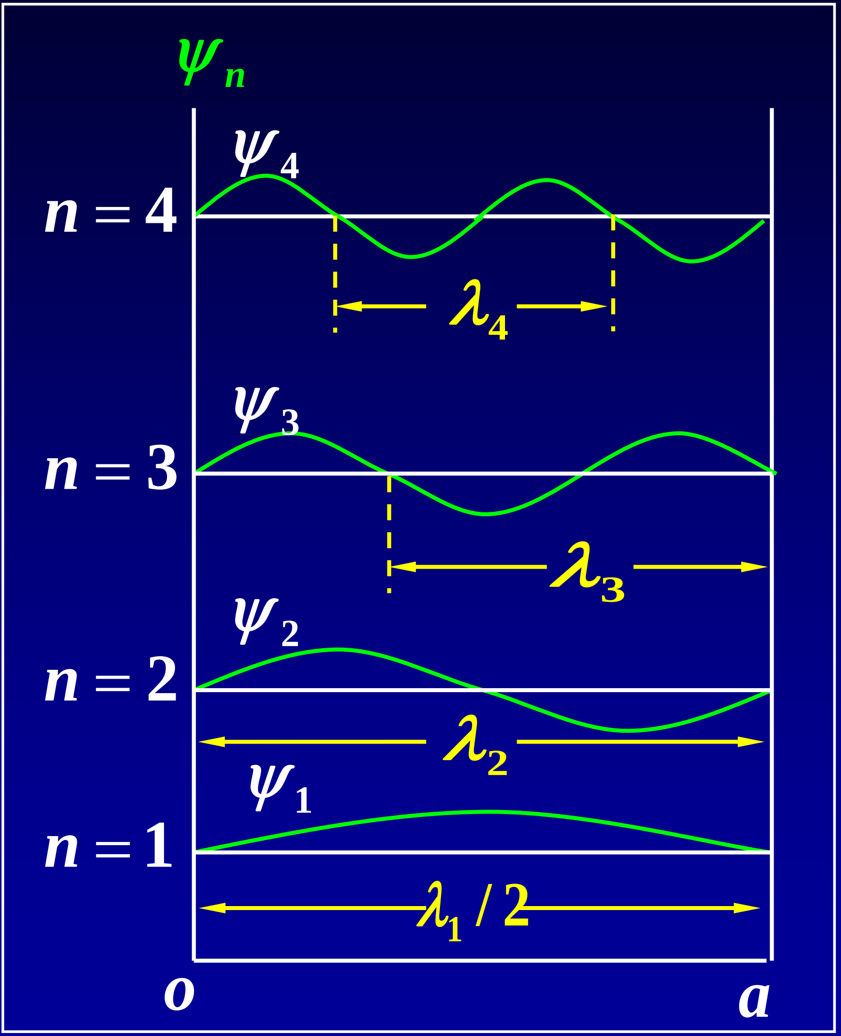
波函数的驻波特点

$x=0$ 和 $x=a$ 处，波函数的值皆为零。波函数以驻波形式存在势阱中：

$$a = n\frac{\lambda}{2} \quad (n = 1, 2, \dots)$$

$$\lambda_n = \frac{2a}{n}$$

$$p_n = \frac{h}{\lambda_n} = \frac{nh}{2a}$$



波函数的驻波特点

$x=0$ 和 $x=a$ 处，波函数的值皆为零。波函数以驻波形式存在势阱中：

$$a = n\frac{\lambda}{2} \quad (n = 1, 2, \ldots)$$

$$\lambda_n = \frac{2a}{n}$$

$$p_n = \frac{h}{\lambda_n} = \frac{nh}{2a}$$

$$p_n = \frac{nh}{2a}$$

$$E_n = E_k + E_p = \frac{p_n^2}{2m} + 0$$

$$E_n = n^2\frac{h^2}{8ma^2}$$

势阱中粒子能量的量子化从其驻波特点中也可自然地得出。

*四、对应原理

经典物理的规律与量子物理的规律似乎无共同之处，但在忽略量子效应时，两者应该趋于一致。

例如，在一维势阱中的粒子，两相邻能级的差为

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = (2n+1)\frac{h^2}{8ma^2}$$

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{2n+1}{n^2} \xrightarrow{n\to\infty} \frac{\Delta E_n}{E_n} \to 0$$

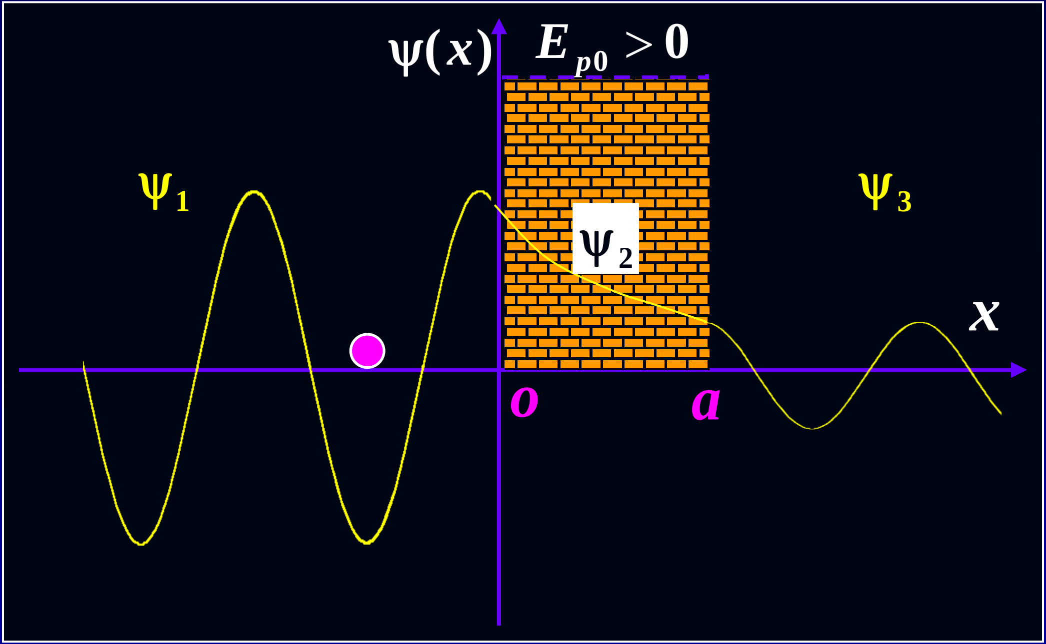
能量可认为是连续的。经典物理可以看成是量子物理在量子数$n\to\infty$时的极限。

*五、一维方势垒 隧道效应

设想一维方势垒如图。一粒子处于 $x < 0$ 的区域内，其能量小于势垒高度E_{p0}。

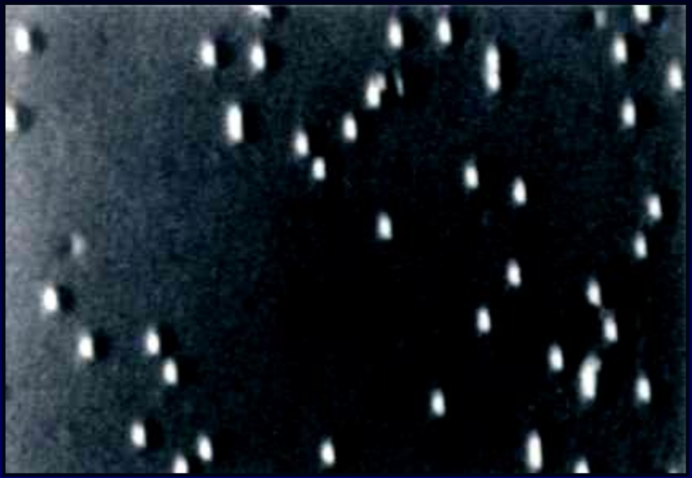
经典物理：粒子不可能越过势垒进入 $x>0$ 的区域。

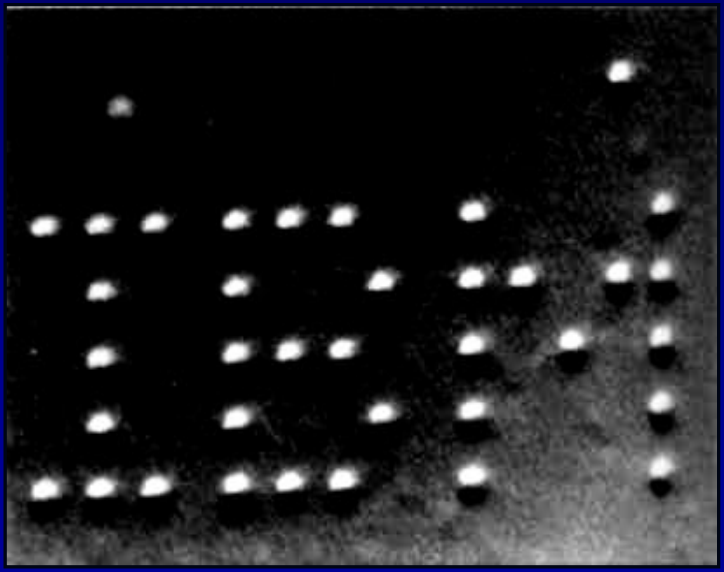
量子物理：粒子波函数分布如图，粒子能越过势垒到达 $x>0$ 的区域。



称作隧道效应

1981年，宾尼希和罗雷尔利用电子的隧道效应，制成了世界第一台扫描隧穿显微镜（*STM*）。1986年，宾尼希又在*STM*基础上研制成原子力显微镜（*AFM*）。





利用*STM*能够得到原子表面的三维图像，可以观察到单个原子在材料表面的排列，这对材料科、生命科学的研究有着重要意义。

The end