第三节 波函数 薛定谔方程

一、物质波的波函数及其统计解释

二、薛定谔方程

一、物质波的波函数及其统计解释

1.波函数 (概率幅):

定义：描述微观客体的运动状态，是概率波的数学表达形式。

$\Psi(\vec{r},t)=\Psi(x,y,z,t)$一般表示为复函数形式

(1)一维自由粒子的波函数

设自由粒子沿x轴作匀速直线运动，则其速度v、动量$P(=mv)$、能量E不变，则波长λ、频率ν不变。

类比： 单色平面波

ν、λ一定　沿直线传播

结论：与一维自由粒子相联系的物质波为单色平面波。

以坐标原点为参考点，设 $\varphi=0$，波以速率u沿$+x$方向传播，则波函数：

$$\Psi=\Psi_0\cos\omega\left(t-\frac{x}{u}\right)=\Psi_0\cos 2\pi\left(\nu t-\frac{x}{\lambda}\right)$$

$$=\Psi_0\cos 2\pi\left(\frac{E}{h}t-\frac{x}{h/p_x}\right)=\Psi_0\cos\frac{1}{\hbar}(Et-p_x\cdot x)$$

复函数形式：$\boxed{\Psi(x,t)=\Psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-p_x\cdot x)}}$

取实部，得：$\Psi=\Psi_0\cos\frac{1}{\hbar}(Et-p_x\cdot x)$

一维自由粒子：$|\Psi(x,t)|^2=\Psi\cdot\Psi^*=\Psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-p_x\cdot x)}\cdot\Psi_0 e^{+\frac{i}{h}(Et-p_x\cdot x)}=\Psi_0^2$

波的强度 $|\Psi|^2=\Psi\cdot\Psi^*$

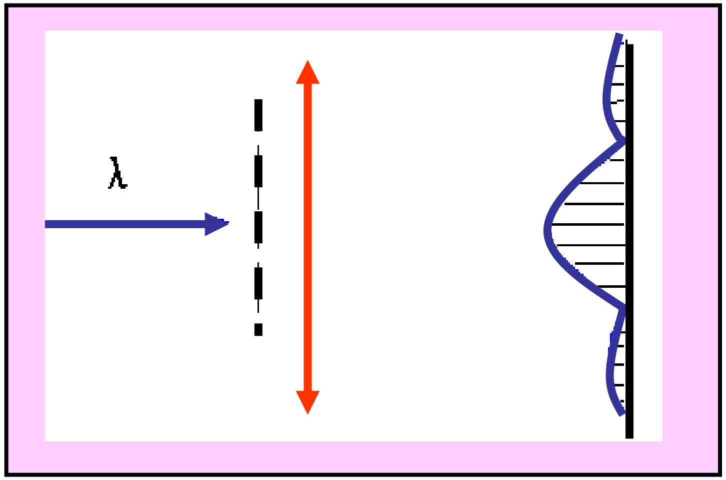
(2)三维自由粒子的波函数

波函数 $$\Psi(\vec{r},t)=\Psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-\vec{p}\cdot\vec{r})}$$

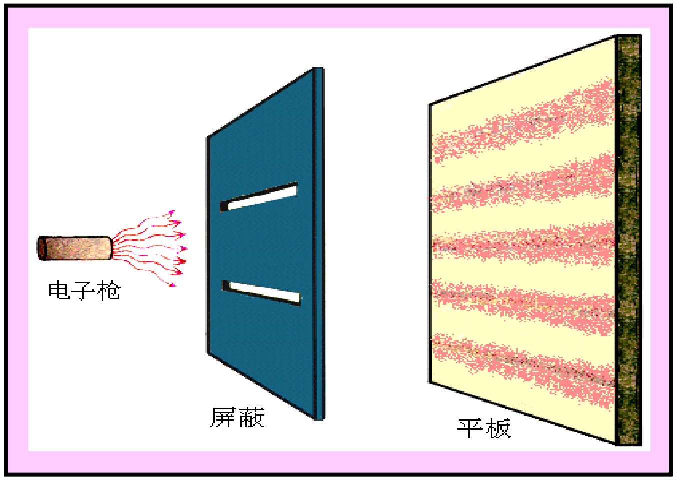
2.波函数的统计解释

概率密度：t 时刻、粒子在某点附近单位体积内出现的概率。

类比



光栅衍射



电子衍射

光栅衍射	电子衍射
$I=E_0^2$	$I=\|\Psi\|^2$
$I=Nh\nu\ \mu N$	$I=N$
I大处 到达光子数多 I小处 到达光子数少 $I=0$ 无光子到达	电子到达该处概率大 电子到达该处概率小 电子到达该处概率为零
各光子起点、终点、路径均不确定	各电子起点、终点、路径均不确定
用 I 对屏上光子数分布作概率性描述	用 $\|\Psi\|^2$对屏上电子数分布作概率性描述

设 t 时刻,到达空间 r（x,y,z）处某体积 $\mathrm{d}V$ 内的粒子数为 $\mathrm{d}N$，则：

$$\mathrm{d}N \propto N\cdot|\Psi|^2\cdot\mathrm{d}V$$ (N为空间总粒子数)

上式变形得：

$$|\Psi(x,y,z,t)|^2 \propto \frac{\mathrm{d}N}{N\cdot\mathrm{d}V}$$ —— 概率密度

$|\Psi(x,y,z,t)|^2$的物理意义：

- t 时刻，出现在空间（x,y,z）点附近单位体积内的粒子数与总粒子数之比。
- t 时刻，粒子出现在空间（x,y,z）点附近单位体积内的概率——概率密度。
- t 时刻，粒子在空间的概率密度分布

注意：

(1)物质波的波函数不表示任何实在物理量的波动,不描述介质中运动状态（相位）传播的过程。

波的相速度 $u = \lambda \cdot \nu$ 对物质波而言没有物理意义

(2)有意义的不是 Ψ本身，而是 $|\Psi|^2$。

$|\Psi|^2$：概率密度，描述粒子在空间的统计分布

Ψ：概率幅

(3)重要的不是 $|\Psi|^2$的绝对大小，而是$|\Psi|^2$在空间各点的相对大小(比值)，$c\Psi$和 Ψ描述同一概率波。

(4) Ψ遵从叠加原理，即：$\Psi=\Psi_1+\Psi_2$

$$|\Psi|^2=|\Psi_1+\Psi_2|^2=\Psi_1\cdot\Psi_1^*+\Psi_2\cdot\Psi_2^*+\underbrace{\Psi_1\cdot\Psi_2^*+\Psi_1^*\cdot\Psi_2}_{\text{干涉项}}$$

$$\neq|\Psi_1|^2+|\Psi_2|^2$$

$|\Psi|^2$ 不遵从叠加原理

练习: P_{176} 16.1(4)

将波函数在空间各点的振幅同时增大D倍，则粒子在空间的分布概率将

1）增大D^2倍，

2）增大2D倍，

3）增大D倍，

4）不变。

3.波函数的归一化条件和标准条件

(1) 归一化条件

$$\int_V |\Psi|^2 \mathrm{d}V = \int_V \frac{\mathrm{d}N}{N\mathrm{d}V}\mathrm{d}V = \int_V \frac{\mathrm{d}N}{N} = \frac{N}{N} = 1$$

物理意义：任意时刻粒子在整个空间出现的概率为1。

(2) 标准条件

Ψ是单值、有限、连续的.

二、薛定谔方程

薛定谔(E. Schrodinger)

奥地利.1887—1961

薛定谔的波动力学，是在德布罗意提出的物质波的基础上建立起来的。他把物质波表示成数学形式，建立了称为薛定谔方程的量子力学波动方程。薛定谔方程是量子力学中描述微观粒子(如电子等)运动状态的基本定律,与经典力学中的牛顿运动定律地位相当。

薛定谔同时在固体的比热、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。

1943年发表《生命是什么？》引导许多物理学家参与生物学的研究工作，使物理学和生物学相结合，开创了现代分子生物学，被誉为分子生物学的“汤姆叔叔的小屋”。

由于对量子力学的贡献，于1933年同英国物理学家狄拉克共获诺贝尔物理奖。

1.一维自由粒子的薛定谔方程

对于一维自由粒子，势能U=0，则：

$$E = E_k = \frac{1}{2}mv_x^2 = \frac{p_x^2}{2m}$$

$$\therefore p_x^2 = 2mE$$

分别将波函数$\Psi(x,t)$对x作二阶微分，对t作一阶微分，将其代入上式，得：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} = i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}$$

………一维自由粒子的薛定谔方程

又：$\Psi(x,t)=\Psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-p_x\cdot x)}=\Psi_0 e^{+\frac{i}{\hbar}p_x\cdot x}\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$

令 $\Psi(x)=\psi_0\cdot e^{\frac{i}{\hbar}p_x x}$ —— 振幅函数

则：$\Psi(x,t)=\psi(x)\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$

$$|\Psi(x,t)|^2=\Psi\cdot\Psi^*=\psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\cdot\psi^*(x)e^{\frac{i}{\hbar}Et}$$

$$=\psi(x)\cdot\psi^*(x)=|\psi(x)|^2$$

要求波函数$\Psi(x,t)$的模方，只需求振幅函数$\psi(x)$的模方。

建立关于振幅函数$\psi(x)$的方程 —— 振幅方程

振幅函数 $\psi(x)=\Psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}p_x\cdot x}$

$$\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x}=\frac{i}{\hbar}p_x\Psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}p_x x}=\frac{i}{\hbar}p_x\psi(x)$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2}=\frac{-p_x^{\ 2}}{\hbar^2}\psi(x)$$

将$p_x^2=2mE$代入上方程，得：

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

……一维自由粒子的振幅方程

2.一维定态薛定谔方程

设定态粒子在力场中作一维运动，其势能$E_p=U$为定值，

则：$$E=E_k+E_p=\frac{p_x^2}{2m}+U$$

$$\therefore p_x^2=2m(E-U)$$

代入 $$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}=\frac{-p_x^2}{\hbar^2}\psi(x)$$

得 $$\boxed{\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi(x)=0}$$

………一维定态薛定谔方程

3.三维定态薛定谔方程

振幅函数 $\psi = \psi(x, y, z)$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi = 0$$

引入拉普拉斯算符 $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

$$\boxed{\nabla^2\psi(x,y,z) + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi(x,y,z) = 0}$$

…….三维定态薛定谔方程

4.一般形式薛定谔方程

设作用在粒子上的势场随时间变化，U 就不为定值，且粒子作三维运动，则：$\Psi=\Psi(x,y,z,t)$

引入哈密顿算符 $\hat{\mathrm{H}}=-\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U$

$$\boxed{\hat{\mathrm{H}}\Psi=i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}}$$ ……一般形式薛定谔方程

本课程只要求定态问题：

一维：$\dfrac{d^2\psi}{dx^2}+\dfrac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi=0$　　三维：$\nabla^2\psi+\dfrac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi=0$