第十五章 量子物理

15- 8 量子力学简介

1、波函数
2、薛定谔方程
3、一维无限深势阱
(了解) 4、一维方势垒、
隧道效应、扫描隧道显微镜

要确定一个宏观物体(质点)的运动状态，可以同时指出它在某一时刻的位置和速度(或动量)，牛顿运动方程($\vec{F}=m\vec{a}$)就是描述宏观物体运动的普遍方程。

对微观粒子而言，由于微观粒子具有波粒二象性，经典力学描述质点运动的方法已不再适用，那么微观粒子的运动状态如何描述呢？微观粒子的运动方程又怎样的呢？

1925年，薛定谔首先在德布罗意假设的基础上提出，用物质波的波函数来描述微观粒子运动状态，就像用电磁波描述光子的运动一样。

微观粒子的运动状态	描述微观粒子运动基本方程
波函数	薛定谔方程

一、波函数

一、波函数 Wave Function

用某种函数表达式来表述与微观粒子相联系的物质波，该函数表达式称为物质波的波函数。

一维自由粒子的波函数（了解） 类比经典物理的机械波

一个沿 x 轴正向传播的频率为 ν 的平面（机械）简谐波：

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

$$\boxed{\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{u^2}\frac{\partial^2 y}{\partial t^2}}$$

其解为指数形式表示（复函数）：

$$y = Ae^{-i2\pi(\nu t - \frac{x}{\lambda})} \longrightarrow \text{取实部}$$

波的强度： $I \propto A^2 = |y|^2 = y^* \cdot y$

一、波函数 Wave Function

自由粒子：不受外力场的作用，其动量和能量都不变的粒子。

对于动量为 P、能量为 E 的一维自由微观粒子，根据德布罗意假设，其物质波的波函数相当于单色平面波，类比可写成：

$$\Psi(x,t)=\psi_0 e^{-i2\pi(\nu t-\frac{x}{\lambda})}$$

$$\begin{cases} E=h\nu \\ p=\dfrac{h}{\lambda} \end{cases}$$

$$\Psi(x,t)=\psi_0 e^{-i\frac{2\pi}{h}(Et-px)}$$

$$\Psi(x,t)=\psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)}, \qquad \hbar=\frac{h}{2\pi}$$

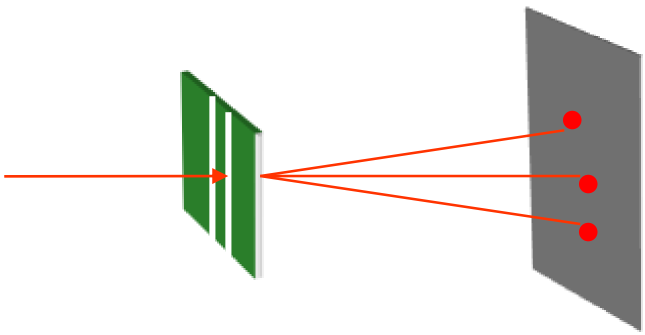
量子力学中，一维自由粒子波函数的一般表达式

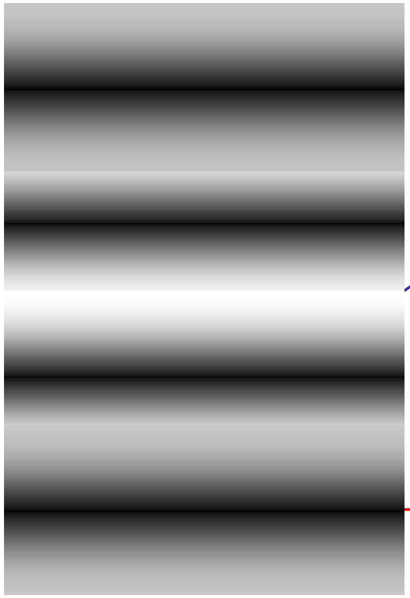
这里的 Ψ 和 ψ_0 一般都为复数。

二、波函数的统计意义

电子双缝衍射

波的强度----正比于-----振幅的平方





亮→波强→电子到达多

暗→波弱→电子到达少

	粒子的观点	波动的观点
极大值	较多电子到达	波强度大， $\vert\Psi\vert^2$ 大
极小值	较少电子到达	波强度小， $\vert\Psi\vert^2$ 小

粒子出现的概率正比于 $|\Psi|^2$ →波函数模的平方

玻恩（M.Born)的波函数统计解释：

t 时刻，粒子出现在空间某点 r 附近体积元 dV 中的概率，与波函数模的平方及 dV 成正比。

出现在 dV 内概率： $dW = |\Psi(r,t)|^2 dV$

概率密度： $\boxed{w = \dfrac{dW}{dV} = |\Psi(r,t)|^2 = \Psi\Psi^*}$

单位体积内粒子出现的概率

波函数模的平方 $|\Psi|^2$ 代表单位体积内发现一个粒子的概率，这就是物质波波函数的物理意义。

波函数本身无直观物理意义，只有模的平方反映粒子出现的概率，在这一点上不同于经典的机械波、电磁波。

对于一维空间（x轴方向）：

1、粒子出现概率问题

1）概率密度： $w=|\Psi(x,t)|^2=\Psi(x,t)\Psi^*(x,t)$

2）粒子出现在 $x \sim x+dx$ 区间内概率： $dW=|\Psi(x,t)|^2 dx$

3）粒子出现在 $x_1 \sim x_2$ 区间内概率： $W=\int_{x_1}^{x_2}|\Psi(x,t)|^2 dx$

2、粒子出现概率极大、极小的位置

概率密度： $w=|\Psi(x,t)|^2=\Psi(x,t)\Psi^*(x,t)$

令 $\dfrac{dw}{dx}=\dfrac{d|\Psi|^2}{dx}=0$ ，解出极值点： $x=x_m$

$$\left.\frac{d^2|\Psi|^2}{dx^2}\right|_{x=x_m}\begin{cases}>0 & \text{极小点}\\ <0 & \text{极大点}\\ =0 & \text{拐点}\end{cases}$$

三、波函数满足的条件

一粒子在整个空间出现的总概率等于 1，即：

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}|\Psi|^2\,dV=1$$ 波函数归一化条件

一维情况（x轴）： $$\int_{-\infty}^{+\infty}|\Psi(x)|^2 dx=1$$

1、单值：在一个地方出现只有一种可能性，故波函数一定是单值的；

2、连续：因概率不会在某处发生突变，故波函数必须处处连续；

3、有限：因概率不可能为无限大，故波函数必须是有限的；

波函数满足的条件：单值、连续、有限、归一

其中，波函数满足的标准化条件：单值、连续、有限

本部分（波函数）

知识点

微观粒子的**状态**可以用**波函数**来描写，而波函数随时间的演化，遵从**薛定谔方程**.

1、波函数统计解释

t 时刻粒子出现在空间某点 r 附近体积元 dV 中的概率，与波函数模的平方及 dV 成正比。

概率密度：

$$w = \frac{dW}{dV} = \left|\Psi(\vec{r},t)\right|^2 = \Psi(\vec{r},t)\Psi^*(\vec{r},t)$$

单位体积内粒子出现的概率

$$w = \frac{dW}{dx} = \left|\Psi(x,t)\right|^2 = \Psi(x,t)\Psi^*(x,t)$$

微观粒子的状态可以用波函数来描写，而波函数随时间的演化，遵从薛定谔方程.

2、波函数满足的条件

一粒子在整个空间出现的总概率等于 1，即：

$$\iiint |\Psi(\vec{r},t)|^2 dV = 1$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x)|^2 dx = 1$$

波函数归一化条件

波函数满足的条件：单值、连续、有限、归一

其中，波函数满足的标准化条件：单值、连续、有限

对于一维空间（x轴）：

概率密度： $$w=\left|\Psi(x,t)\right|^2=\Psi(x,t)\Psi^*(x,t)$$

波函数归一化条件 $$\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\Psi(x)\right|^2dx=1$$

粒子出现在 $x\sim x+dx$ 区间内概率： $$dW=\left|\Psi(x,t)\right|^2dx$$

粒子出现在 $x_1\sim x_2$ 区间内概率： $$W=\int_{x_1}^{x_2}\left|\Psi(x,t)\right|^2dx$$

粒子出现概率极大、极小的位置：

令 $\dfrac{dw}{dx}=\dfrac{d\left|\Psi\right|^2}{dx}=0$，解出极值点： $x=x_m$

例 24: 设一粒子在一维空间运动，其波函数为:
$$\psi(x)=\begin{cases}Axe^{-\lambda x}, & x\geq 0\\ 0\quad, & x\leq 0\end{cases}\quad(\lambda>0)$$

求: 1) 归一化的波函数； 2) 粒子的概率密度函数；
3) 在何处发现粒子的概率最大？

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

$$\int_{-\infty}^{0}|\psi(x)|^2\,dx+\int_{0}^{\infty}|\psi(x)|^2\,dx=1\Rightarrow|A|^2\int_0^{\infty}x^2e^{-2\lambda x}dx=1\Rightarrow A=2\sqrt{\lambda^3}$$

归一化的波函数: $$\psi(x)=\begin{cases}2\sqrt{\lambda^3}xe^{-\lambda x}, & x\geq 0\\ 0\quad, & x\leq 0\end{cases}$$

2) 粒子的概率密度函数:
$$w(x)=|\psi(x)|^2=\begin{cases}4\lambda^3x^2e^{-2\lambda x}, & x\geq 0\\ 0\quad, & x\leq 0\end{cases}$$

例 24: 设一粒子在一维空间运动，其波函数为:
$$\psi(x)=\begin{cases} Axe^{-\lambda x}, & x\geq 0 \\ 0, & x\leq 0 \end{cases} \quad (\lambda>0)$$

求: **1)** 归一化的波函数； **2)** 粒子的概率密度函数；

3) 在何处发现粒子的概率最大？

解:

3）
$$w(x)=|\psi(x)|^2=\begin{cases} 4\lambda^3x^2e^{-2\lambda x}, & x\geq 0 \\ 0, & x\leq 0 \end{cases}$$

$$\frac{dw(x)}{dx}=\frac{d|\psi(x)|^2}{dx}=0\Rightarrow\frac{d}{dx}(4\lambda^3x^2e^{-2\lambda x})=0$$

$$\Rightarrow 4\lambda^3[2xe^{-2\lambda x}-2\lambda x^2e^{-2\lambda x}]=0\Rightarrow xe^{-2\lambda x}(1-\lambda x)=0$$

$$\Rightarrow x=0,\quad x\to\infty,\quad x=\frac{1}{\lambda}$$

$x=0, x\to\infty$时， $w=0$

概率最小

粒子出现的概率最大的位置: $x=\dfrac{1}{\lambda}$

二、薛定谔方程

（定性）

四、薛定谔方程的建立

1、一维自由粒子薛定谔方程

薛定谔方程是量子力学基本假设之一，不能理论推导证明。

(适用条件 $v << c$，非相对论条件下，低速微观粒子)

以一维自由粒子为例

$$\Psi(x,t)=\psi_o e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-Px)}$$

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{i}{\hbar}E\psi_o e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-Px)}=-\frac{i}{\hbar}E\Psi$$

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}=-\frac{P^2}{\hbar^2}\psi_o e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-Px)}=-\frac{P^2}{\hbar^2}\Psi$$

自由粒子： $E=E_k=\dfrac{P^2}{2m}$

m：粒子的质量

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}=i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

一维自由粒子的
含时薛定谔方程

四、薛定谔方程的建立

2、一维势场 $E_P(x,t)$ 中运动粒子薛定谔方程

$$E = E_k + E_P = \frac{P^2}{2m} + E_P$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E\Psi$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = [\frac{P^2}{2m} + E_P(x,t)]\Psi$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{P^2}{\hbar^2}\Psi \qquad \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{P^2}{2m}\Psi$$

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

一维运动粒子含时薛定谔方程

四、薛定谔方程的建立

3、一维定态薛定谔方程

若势能 $E_P(x)$ 与时间 t 无关，仅是坐标的函数

分离变量： $\Psi(x,t)=\psi(x)\Phi(t)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+E_P(x,t)\Psi=i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}\quad\Rightarrow-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+E_P(x)\Psi=i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

$$\Phi(t)[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+E_P(x)\psi(x)]=\psi(x)i\hbar\frac{d\Phi(t)}{dt}$$

$$\frac{1}{\psi(x)}[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+E_P(x)\psi(x)]=\frac{1}{\Phi(t)}i\hbar\frac{d\Phi(t)}{dt}=E$$

$\downarrow$

粒子的本征能量

四、薛定谔方程的建立

3、一维定态薛定谔方程

若势能 $E_P(x)$ 与 t 无关，仅是坐标的函数

分离变量：$\Psi(x,t)=\psi(x)\Phi(t)=\psi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$

$$\begin{cases}\dfrac{1}{\Phi(t)}\dfrac{d\Phi(t)}{dt}=\dfrac{E}{i\hbar} \quad \Rightarrow \Phi(t)=e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\psi(x)}{dx^2}+E_P(x)\psi(x)=E\psi(x)\end{cases}$$

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

$\psi(x)$

$\downarrow$

一维定态薛定谔方程

定态波函数

3、一维定态薛定谔方程

若势能 $E_P(x)$ 与 t 无关，仅是坐标的函数

分离变量： $\Psi(x,t)=\psi(x)\Phi(t)=\psi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$

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

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

$$w=|\Psi(x,t)|^2=\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)=|\psi(x)|^2$$

粒子在空间各处出现的概率不随时间变化的。

定态：微观粒子在各处出现的概率与时间无关

一维定态薛定谔方程

若势能 $E_P(x)$ 与时间 t 无关，仅是坐标的函数

$$\Psi(x,t)=\psi(x)\Phi(t)=\psi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

一维定态薛定谔方程

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-E_P)\psi(x)=0,\qquad \hbar=\frac{h}{2\pi}$$

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

四、薛定谔方程的建立

4、薛定谔方程的意义

薛定谔方程在量子力学中的地位与牛顿方程在经典物理中的地位相当。

薛定谔方程本身并不是实验规律的总结，也没有什么更基本的原理可以证明它的正确性。

从薛定谔方程得到的结论正确与否，需要用实验事实去验证。

薛定谔方程是量子力学的一条基本假设

例 25: 一粒子在一维无限深势阱中运动，其波函数为：

$$\psi(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{2\pi x}{a}),\quad (0\le x\le a)$$

求： 1)概率密度最大值位置和概率密度最大值；

2)在区间(0～*a*/3)找到粒子的概率是多少？

解：1） 波函数：

$$\psi=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{2\pi x}{a}),\quad (0\le x\le a)$$

概率密度函数：

$$w(x)=|\psi|^2=\frac{2}{a}\sin^2(\frac{2\pi x}{a}),\quad (0\le x\le a)$$

$\therefore$ 当 $\frac{2\pi x}{a}=(2k+1)\frac{\pi}{2}$ 有极大值，$\Rightarrow x=(2k+1)\frac{a}{4},\quad k=0,1,\cdots,$

$0\le x\le a$

粒子出现概率最大的位置： $x=\frac{a}{4},\quad \frac{3a}{4}$

概率密度最大值： $w_{max}=\frac{2}{a}$

例 25: 一粒子在一维无限深势阱中运动，其波函数为：

$$\psi(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{2\pi x}{a}),\quad (0\le x\le a)$$

求： 1)概率密度最大值位置和概率密度最大值；

2)在区间(0～*a*/3)找到粒子的概率是多少？

解：1）波函数:

$$\psi=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{2\pi x}{a}),\quad (0\le x\le a)$$

概率密度函数：

$$w(x)=|\psi|^2=\frac{2}{a}\sin^2(\frac{2\pi x}{a}),\quad (0\le x\le a)$$

$$\therefore \text{当}\quad \frac{2\pi x}{a}=k\pi \quad \text{有极小值,}\qquad \Rightarrow x=k\frac{a}{2},\qquad 0\le x\le a$$

粒子出现概率最小的位置： $x=0,\quad \dfrac{a}{2},\quad a$

例 25: 一粒子在一维无限深势阱中运动，其波函数为：

$$\psi(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{2\pi x}{a}),\quad (0\le x\le a)$$

求： 1)概率密度最大值位置和概率密度最大值；

2)在区间(0～*a*/3)找到粒子的概率是多少？

解：2）波函数:

$$\psi=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{2\pi x}{a}),\quad (0\le x\le a)$$

概率密度函数：

$$w(x)=|\psi|^2=\frac{2}{a}\sin^2(\frac{2\pi x}{a}),\quad (0\le x\le a)$$

$$\Rightarrow W=\int_0^{\frac{a}{3}}|\psi|^2dx=\int_0^{\frac{a}{3}}\frac{2}{a}\sin^2(\frac{2\pi x}{a})dx=\int_0^{\frac{a}{3}}\frac{2}{a}\cdot\frac{1}{2}(1-\cos\frac{4\pi x}{a})dx$$

$$\Rightarrow W=\frac{1}{a}(x-\frac{a}{4\pi}\sin\frac{4\pi x}{a})\Big|_0^{\frac{a}{3}}=\frac{1}{3}-\frac{1}{4\pi}\sin\frac{4\pi}{3}=40.2\%$$