第20章　薛定谔方程

波函数及几率解释

一．波函数

经典的平面波为：

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

描述微观一维自由粒子运动状态用波函数　$\psi(t,x)$

利用 $E = h\nu = \hbar\omega$　　$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$　|　$\hbar = h/2\pi$　$k = \frac{2\pi}{\lambda}$

$$\Psi(t,x) = \Psi_0 e^{-i\frac{2\pi}{h}(Et-px)} = \Psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)}$$

即为沿　x 轴正向运动的．具有确定动量 P 和能量 E 的自由粒子的波函数。

三维空间运动的微观粒子，用 $\psi(t,\vec{r})$ 表示其波函数。

经典物理中的机械波函数表示振移，而波强度表示波的能流密度的时间平均值。对电磁波来说，波函数表示或是电场强度或是磁场强度，而波的强度就是坡印亭失量，这些都是可测量的量。

微观粒子的波函数表示什么？

二. 波函数和概率波

德布罗意波的物理意义是什么？

1. 玻恩假定（1926）

玻恩：物质波是概率波　$\Psi(\vec{r},t)$　概率振幅

$$\left|\Psi(\vec{r},t)\right|^2=\Psi^*(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t)$$　概率密度

2. 波函数满足的条件

（1）自然条件：单值、有限和连续

（2）归一化条件 $\int_\Omega\left|\Psi(\vec{r},t)\right|^2dV=1$　（Ω – 全空间）

3. 状态叠加原理

若体系具有一系列的可能状态 $\{\Psi_1,\ \Psi_2,\cdots\}$

则　$\Psi=C_1\Psi_1+C_2\Psi_2+\cdots$　也是可能的状态

在电子衍射实验中，衍射图象上亮条纹处出现的电子数目多。

亮条纹处，即波强度大的地方，电子出现的概率就大；

暗条纹处，即波强度小的地方，电子出现的概率就小。

电子作为一个整体，只能在某处出现，决不会一半出现在某处，而另一半出现在另外，这就是它的粒子性的表现。但是，电子在某处出现的概率，却由波的强度来决定，这就是它的波动性的表现。

实物粒子也具有波粒二象性

§20.1　薛定谔方程

有了波，就应该有一个描述波的方程，德拜说。

方程应有下面的性质：

1、方程应是线性的。即 φ_1 与 φ_2 是方程的解，那么

$\psi = c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2$ 是方程的解，其中 c_1, c_2 是复数

2、能量—动量关系一致。

与 $E^2 = E_0^2 + p^2c^2$ 或 $E = \dfrac{p^2}{2m} + U$ 没有矛盾

3、能量守恒。自由粒子 $E = \dfrac{p^2}{2m} = con.$ 或 $E = \dfrac{p^2}{2m} + U = con.$

4、可以描述平面波。　$\Psi(t,x) = \Psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)}$

5、一定条件下，与波动方程一致。

6、粒子数守恒。

7、应含有 h

描述粒子运动的波函数和粒子所处条件的关系首先由薛定谔得出，称为薛定谔方程。

一．动量为P．能量为E的自由粒子的薛定谔方程的 建立

一维自由粒子物质波的波函数

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

求导

$$\begin{cases} \dfrac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}=-\dfrac{i}{\hbar}E\Psi(x,t); \\ \dfrac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}=-\dfrac{p_x^2}{\hbar^2}\Psi(x,t) \end{cases}$$

算符：作用于一个函数上得出另外一个函数的符号。

$\hat{F}u = v$　　如：$\frac{dx}{dt} = v, \frac{d}{dt}$ 就是算符

如果算符 $\hat{F}$ 作用于一个函数 φ ，　等于 φ 乘一个常数 λ ，

即 $\hat{F}\varphi = \lambda\varphi$　　则：λ 为本征值，φ 为本征函数，

方程为本征方程

量子力学中用算符表示力学量。如果用 $\hat{F}$ 表示力学量 F

当体系处于 $\hat{F}$ 的本征态 φ 时，$E=\frac{p_x^2}{2m}$ 力学量 F 有确定值，这个值是 $\hat{F}$ 在 φ 态的本征值。

上面式中得：

$$p_x^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \qquad E = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \qquad \text{由} \quad E = \frac{p_x^2}{2m}$$

可得自由粒子的薛定谔方程

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

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

⇒ 一维自由粒子的薛定谔方程

三维自由粒子的薛定谔方程:

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

式中: $\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$

称为拉普拉斯算符

二. 薛定谔一般方程

当粒子处在势场中时，粒子的能量

$$E=\frac{p^2}{2m}+U(t,\vec{r})$$

与上同样方法：

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi+U\Psi}$$

非自由粒子的薛定谔方程

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

薛定谔一般方程：

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\hat{H}\Psi}$$

三. 定态薛定谔方程

一般地 $U = U(t,\vec{r})$

当势场仅仅是空间坐标的函数时 $U = U(\vec{r})$

波函数可分解为:

$$\Psi(t,\vec{r}) = f(t)\psi(\vec{r})$$

此时微观粒子所处的状态称为定态;
波函数称为定态波函数。

$\psi(\vec{r})$ 满足的方程即是定态薛定谔方程。

$$\left.\begin{aligned}\nabla^2\Psi(t,\vec{r}) &= f(t)\nabla^2\psi(\vec{r}) \\ \frac{\partial\Psi(t,\vec{r})}{\partial t} &= \psi(\vec{r})\frac{\partial f(t)}{\partial t}\end{aligned}\right\}$$

代入薛定锷方程

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + U\Psi}$$

$$i\hbar\psi(\vec{r})\frac{\partial f(t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}f(t)\nabla^2\psi(\vec{r}) + Uf(t)\psi(\vec{r})$$

两边同除 $\psi(\vec{r})f(t)$

$$i\hbar\frac{1}{f(t)}\frac{\partial f(t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) + U\psi(\vec{r})\right]\frac{1}{\psi(\vec{r})} = E$$

得

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) + U\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})} \qquad \boxed{i\hbar\frac{\partial f(t)}{\partial t} = E f(t)}$$

—— （1） —— （2）

由（2）式可得： $f(t)=e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$

由（1）式可得： $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+U\psi=E\psi$ ⟹ 定态薛定谔方程

有解 $\psi(\vec{r})$

定态波函数 $\Psi(t,\vec{r})=f(t)\psi(\vec{r})=\psi(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$

$$\boxed{\omega=\left|\Psi(t,\vec{r})\right|^2=\left|\psi(\vec{r})\right|^2}$$

⟹ 在整个空间粒子的概率分布是不随时间变化的，这就是定态（稳定的态）的含义。

波函数必须是时间．坐标的单值．有限．连续函数，这称为波函数的标准条件（自然条件）。

一维 $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial^2 x}+U\psi=E\psi$ ⟹ 一唯定态薛定谔方程

量子力学处理问题的方法

1、分析、找到粒子在势场中的势能函数U，写出薛定谔方程。

2、求解 ψ，并根据初始条件、边界条件和归一化条件确定常数。

3、由 $|\psi|^2$ 得出粒子在不同时刻、不同区域出现的概率或具有不同动量、不同能量的概率。