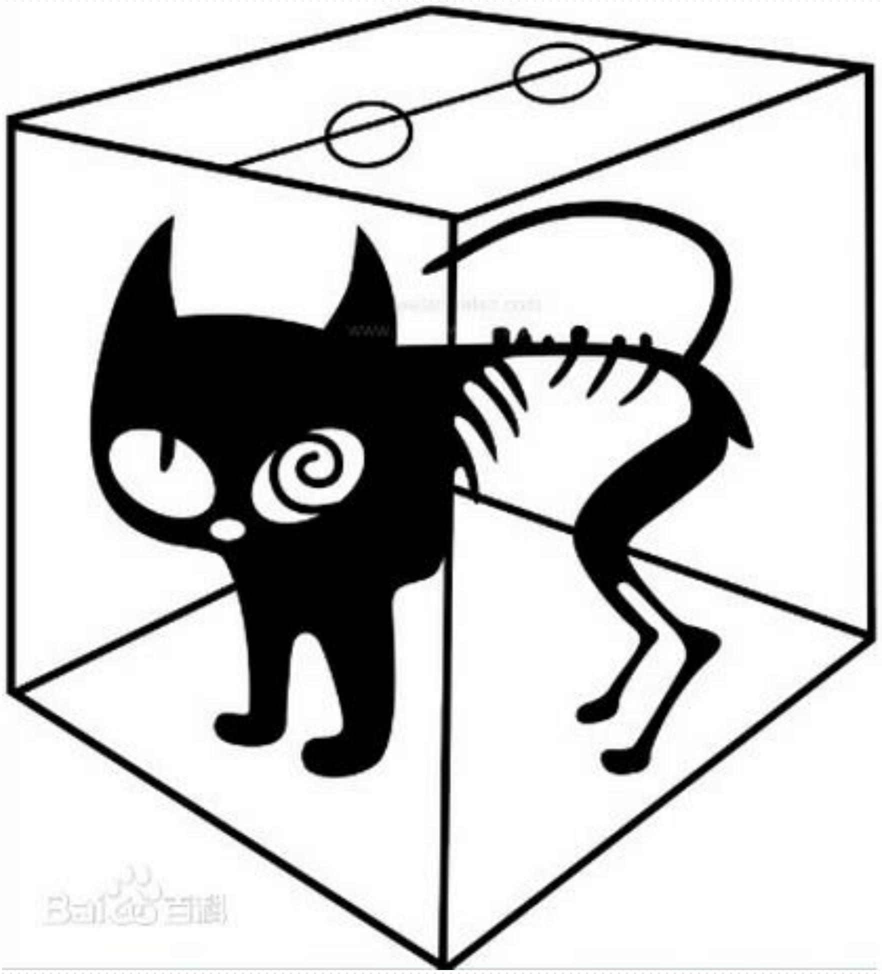
# 第27章 薛定谔方程

# 提纲

§1 、薛定谔得出的波动方程

§2、薛定谔方程的简单应用



# §1 薛定谔得出的波动方程

## 一、自由粒子的波函数

一个做一维运动的微观粒子，若一个粒子的能量为E，动量为P，则其波长和频率应为

$$\nu=\frac{E}{h},\quad \lambda=\frac{h}{P}$$

与此相联系的应是一个单色平面波(简谐波)。

在经典物理中，沿X方向传播的单色平面波波函数为

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

单色平面波波函数 $y(x,t)=A\cos 2\pi(\nu t-\frac{x}{\lambda})$

也可写成复数式 $y(x,t)=Ae^{-i2\pi(\nu t-\frac{x}{\lambda})}$ 波函数取其实部

在量子力学中，常用波函数 $\Psi(x,t)=\Psi_0 e^{-i2\pi(\nu t-\frac{x}{\lambda})}$

将 $\nu=\frac{E}{h}$，$\lambda=\frac{h}{P}$ 代入上式，得 $\Psi(x,t)=\Psi_0 e^{-i\frac{2\pi}{h}(Et-Px)}$

$\because \hbar=\frac{h}{2\pi}$ 一维自由运动粒子的波函数 $\boxed{\Psi(x,t)=\Psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-Px)}}$

## 二、一维自由粒子的运动方程

前面已得到一维自由粒子的波函数 $\Psi(x,t)=\Psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-Px)}$

将$\Psi(x,t)$对$t$求一阶偏导

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

因而有： $i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t}=E\Psi=\frac{p^2}{2m}\Psi$ m粒子的质量

将$\Psi(x,t)$对$x$求二阶偏导

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x}=\frac{i}{\hbar}p\Psi$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}=-\frac{p^2}{\hbar^2}\Psi$$

即： $-\hbar^2\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}=p^2\Psi$

相比较得到：

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

# 三、势场中运动粒子的方程

物质波的波动方程

若粒子在势场中运动，$E$ 应包括 $E=\frac{p^2}{2m}+U(x,t)$

推导可得 $\boxed{i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+U(x,t)\Psi}$ ——一维含时薛定谔方程

三维情况 $\boxed{i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\vec{r},t)]\Psi}$ ——三维含时薛定谔方程

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

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

上述方程简写 $\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi=\hat{H}\Psi}$

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

—— 一维含时薛定谔方程

恒定势场 $U(x,t)=U(x)$

分离变量法 $\psi(x,t)=\varphi(x)f(t)$　$\varphi(x)$ ——定态波函数　$f(t)=e^{-iEt/\hbar}$

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+U(x)]\varphi(x)=E\varphi(x)$$

——定态薛定谔方程

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U$$

$$\hat{H}\psi(x)=E\psi(x)$$

——本征方程

## 说明

1）是非相对论量子力学的基本方程，适用于低速运动粒子的情况，其地位类似于经典力学中的牛顿定律

2）薛定谔方程是作为假设提出来的它的正确性被无数事实所证实

3）薛定谔方程是线性方程，满足薛定谔方程的波函数服从叠加原理（量子力学第一原理）

设：下列波函数均满足薛定谔方程： $\Psi_1 \quad \Psi_2 \quad \Psi_3 \quad \cdots$

则： $\Psi = C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2 + C_3\Psi_3 + \cdots$ ——也是薛定谔方程的解

# 奥地利物理学家 薛定谔

（Schrodinger 1887-1961）


1926年提出量子力学中最基本的薛定谔方程。

1933年薛定谔获诺贝尔物理奖。

量子力学找微观粒子在不同条件下的波函数，
就是：求不同条件下薛定谔方程的解。

# §2 薛定谔方程的简单应用

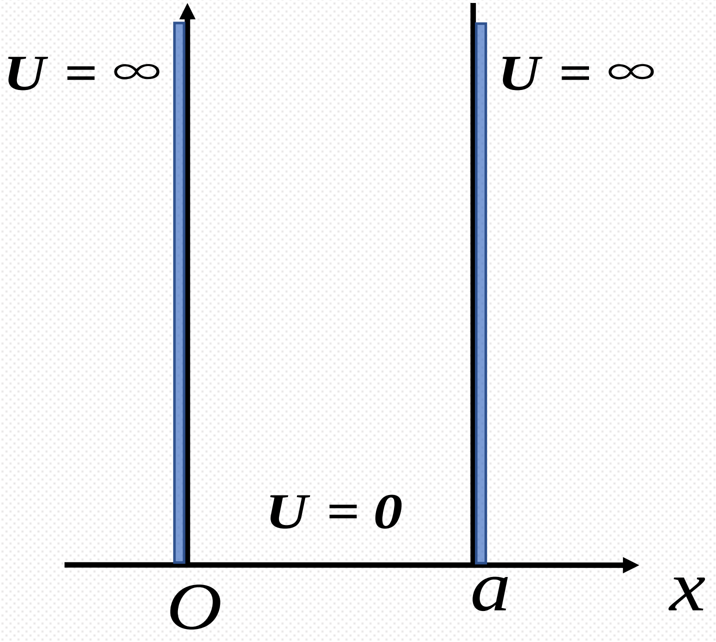
对于处于定态的粒子，只要知道$m$、$U(x)$，就可写出定态薛定谔方程，结合标准条件、归一化条件，可求解此方程，从而得到粒子的波函数。下面举几个简单例子。

## 一、一维无限深方势阱

金属中的自由电子，在金属内部的运动可视为在势阱中的运动。

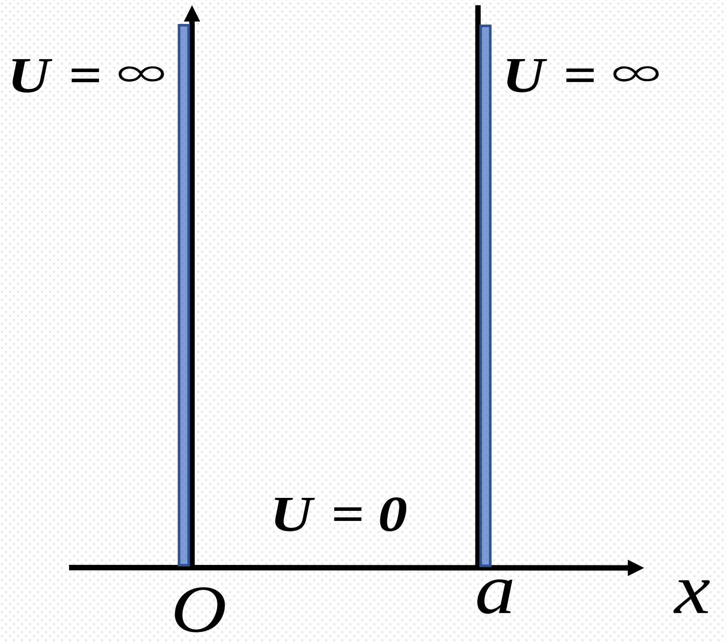
设某一粒子在外力场中作一维运动，其势函数

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



# 由于势能与时间无关，所以只需解一维定态薛定谔方程

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+U(x)]\varphi(x)=E\varphi(x)$$




**□势阱外：** $(x \le 0$ 或 $x \ge a)$

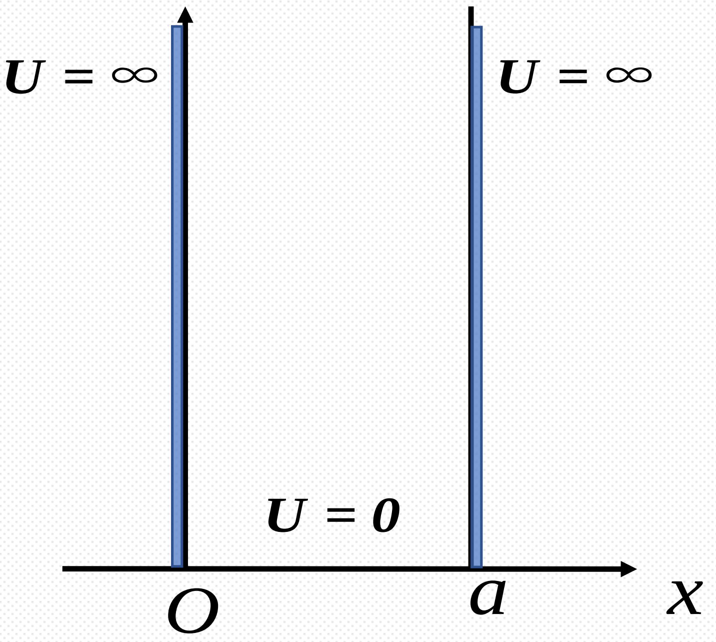
$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}+\infty\psi(x)=E\psi(x)$$

**对于$E$为有限值的粒子，要使上述方程成立，唯有** $\psi(x)=0$

## □ 势阱内：  $(0 < x < a)$

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

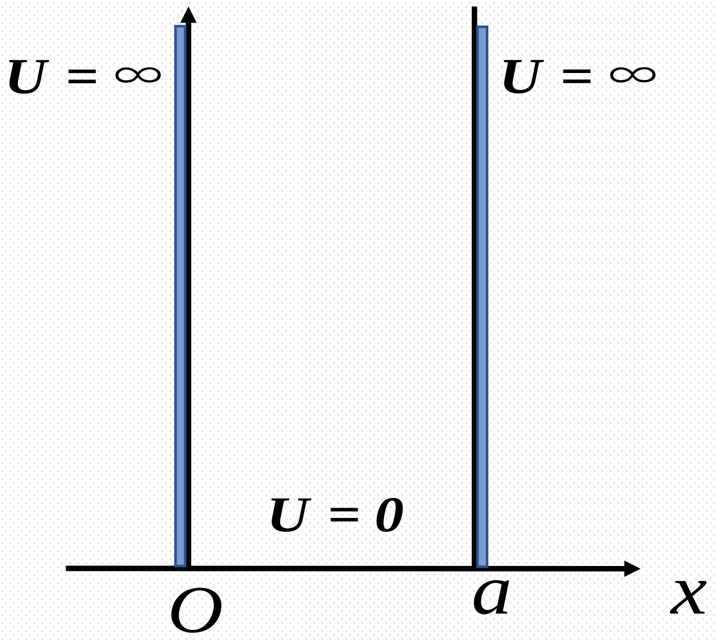
令 $k^2=\dfrac{2mE}{\hbar^2}$  $\boxed{\dfrac{d^2\psi(x)}{dx^2}+k^2\psi(x)=0}$




其解为：$\psi(x)=A\sin(kx+\varphi)$

➢ **边界条件：在阱壁上波函数必须单值、连续**

➢**边界条件：在阱壁上波函数必须单值、连续**




**波函数** $\psi(x) = A\sin(kx+\varphi)$

$$\psi(0) = \psi(a) = 0 \quad \begin{cases} A\sin\varphi = 0 \\ A\sin(ka+\varphi) = 0 \end{cases}$$

$$\Rightarrow \quad \varphi = 0; \quad k = \frac{n\pi}{a}$$

**得：** $\boxed{\psi(x) = A\sin\frac{n\pi}{a}x = \psi_n(x)}$ $\quad n = 1,2,3,\cdots$ **称为量子数**

$$\psi_n(x) = A\sin\frac{n\pi}{a}x \qquad n = 1,2,3,\cdots$$ 称为量子数

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

**即：** $\int_0^a A^2\sin^2\frac{n\pi}{a}xdx = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}}$

$$\boxed{\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x}$$

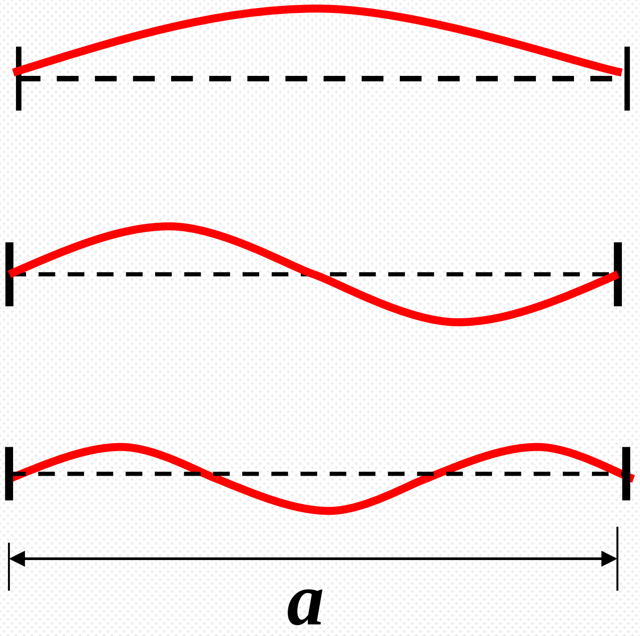
**综上：** $\psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x & (0 < x < a) \\ 0 & (x \le 0 \text{ 或 } x \ge a) \end{cases} \qquad n = 1,2,3,\cdots$

**波函数** $\psi(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi}{a}x & (0<x<a) \\ 0 & (x\leq 0 \text{ 或 } x\geq a)\end{cases}$ $\quad n=1,2,3,\cdots$

$n=1$

$n=2$

$n=3$



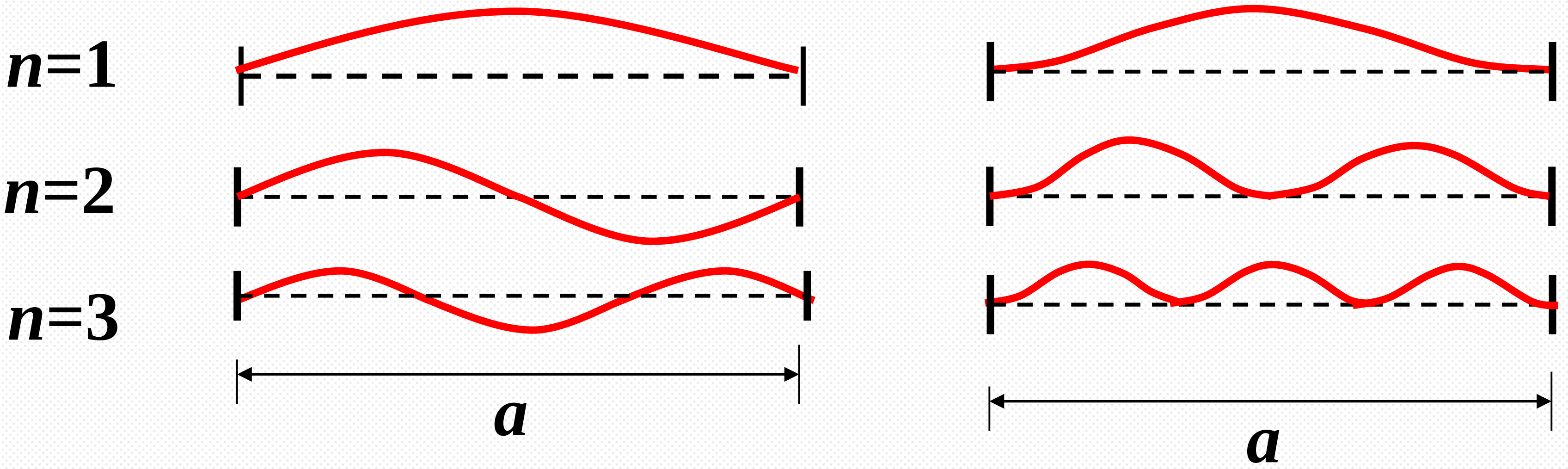

**势阱中的粒子在各处的概率密度**

**在$0<x<a$的区域：**

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

**波函数类似于弦上的驻波**

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x \qquad \left|\psi_n(x)\right|^2=\frac{2}{a}\sin^2\frac{n\pi}{a}x$$




**当$n$=1时，在 $x=a/2$ 处粒子出现的概率最大**

**当$n$=2时，在$x=a/4$和$x=3a/4$处粒子出现的概率最大**

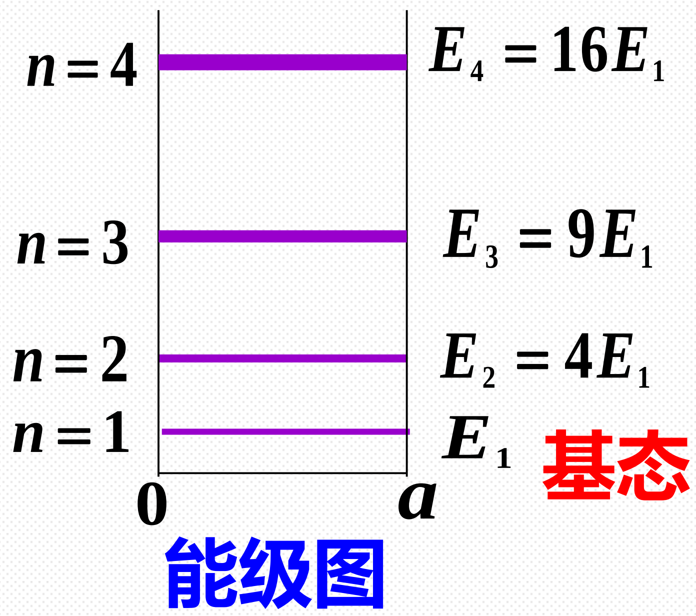
**$n\rightarrow\infty$时，粒子在势阱内的概率趋于均匀 $\Rightarrow$ 与经典结论一致**

# 势阱中粒子的能量

由：$k=\sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}=\dfrac{n\pi}{a}\quad\Rightarrow E=\dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2=\dfrac{h^2}{8ma^2}n^2$

说明势阱中粒子的能量是量子化的，整数$n$ 称为能量量子数。

$$\boxed{E_n=\frac{h^2}{8ma^2}n^2}\qquad n=1,2,3,\cdots$$




- 粒子的能量不能连续取值，只能取分立值
- 粒子的最小能量不能等于零

# 在一定条件下，量子力学解可趋近于经典力学的情况

a. 当量子数$n$足够大时： $n>>1$

$$E_n=\frac{h^2}{8ma^2}n^2 \qquad n=1,2,3,\cdots$$

粒子能量趋于连续分布

$$\frac{E_{n+1}-E_n}{E_n}=\frac{(n+1)^2-n^2}{n^2}=\frac{2n+1}{n^2}\to 0$$

当n→∞ 能量的量子化效应就不显著，可认为能量是连续，

所以经典物理可以看作是量子物理中量子数$n\to\infty$ 时的极限情况

当$n\to\infty$时，能量连续，量子 ⇒ 经典

# 在一定条件下，量子力学解可趋近于经典力学的情况

## b. 当$m$或$a$足够大时，同样得到上述结论

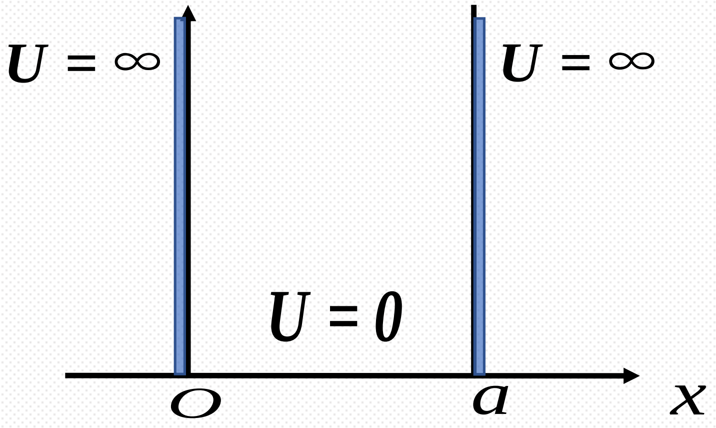
$$E_n = \frac{h^2}{8ma^2} n^2 \qquad n = 1,2,3,\cdots$$

$m \to \infty$或$a \to \infty$

$$E_{n+1} - E_n = \frac{h^2}{8ma^2}(2n-1) \to 0$$

当$m \to \infty$或$a \to \infty$时，能量连续，量子 $\Rightarrow$ 经典

# 利用粒子的德布罗意波长求解




由于粒子的波动性，这相当于一列波在势阱中传播，在势阱中形成驻波。则有：

$$a = n\frac{\lambda}{2} \quad (n=1,2,3\ldots)$$

即 $\lambda = \dfrac{2a}{n}$ 德布罗意波长量子化

由德布罗意公式 $\lambda = \dfrac{h}{p}$ 代入上式，得

$$p = \frac{nh}{2a} \quad (n=1,2,3\ldots)$$

动量也是量子化

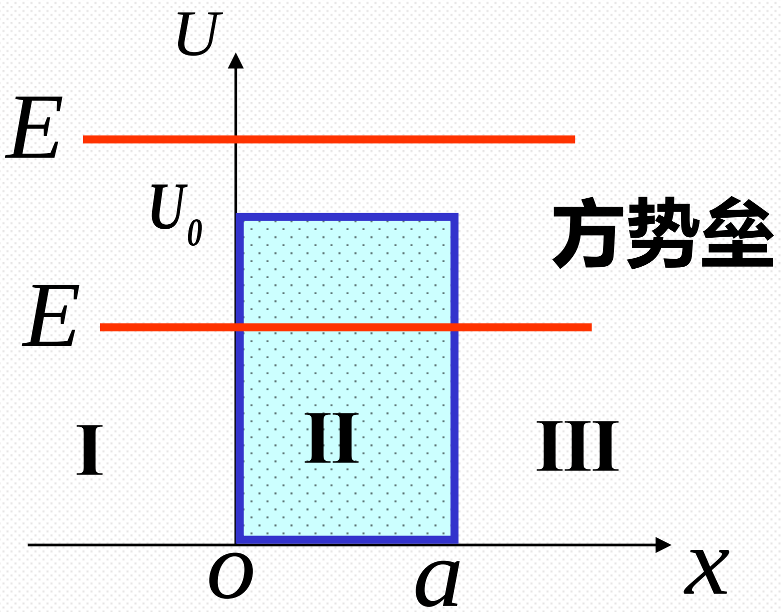
$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{P^2}{2m}$$

$$\boxed{E = n^2\frac{h^2}{8ma^2}} \quad (n=1,2,3\ldots)$$

能量也是量子化

## 二、势垒穿透

**势函数** $U(x)=\begin{cases} U_0 & (0 \le x \le a) \\ 0 & (x<0,\ x>a) \end{cases}$

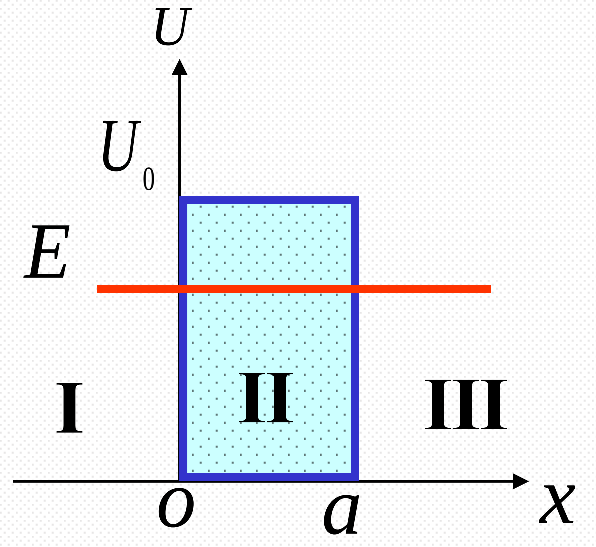



$E > U_0$： 经典理论或量子力学，粒子都可以从区域I穿过区域II进入区域III。

$E < U_0$： 从经典理论看，由于粒子动能必须为正值，所以不可能从区域I穿入区域II进入区域III。

**但从量子力学分析，粒子仍可以穿过区域II进入区域III。**

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




**在区域I:** $(x<0)$

**设波函数为** $\psi_1(x)$ **薛定谔方程** $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_1}{dx^2}=E\psi_1$

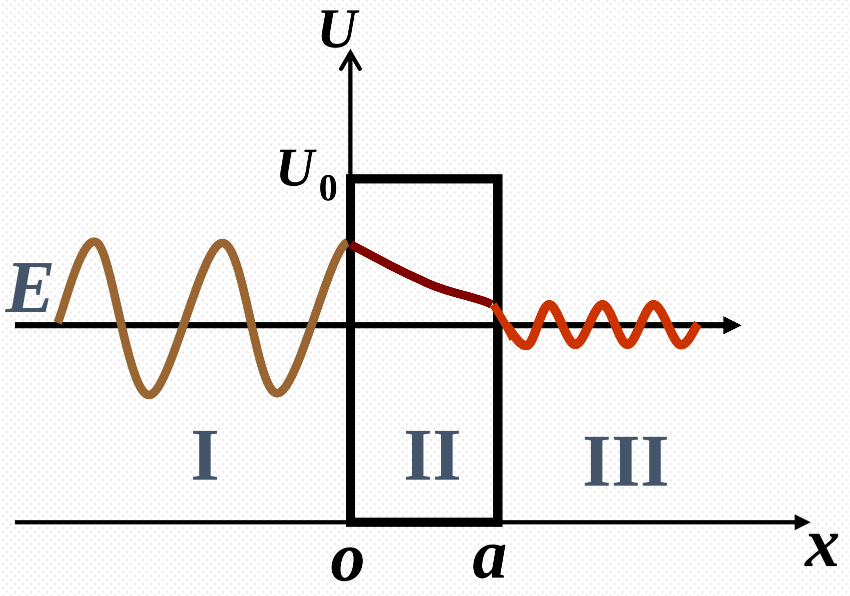
**在区域II:** $(0\le x\le a)$ **设** $\psi_2(x)$ $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_2}{dx^2}+U_0\psi_2=E\psi_2$

**在区域III:** $(x>a)$ **设** $\psi_3(x)$ $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_3}{dx^2}=E\psi_3$

**根据波函数要求是单值、有限、连续条件解得**

波函数为

$$\begin{cases} \psi_1 = Ae^{ik_1x} + A'e^{-ik_1x} & \text{I} \\ \psi_2 = B'e^{-k_2x} & \text{II} \\ \psi_3 = Ce^{ik_1x} & \text{III} \end{cases}$$



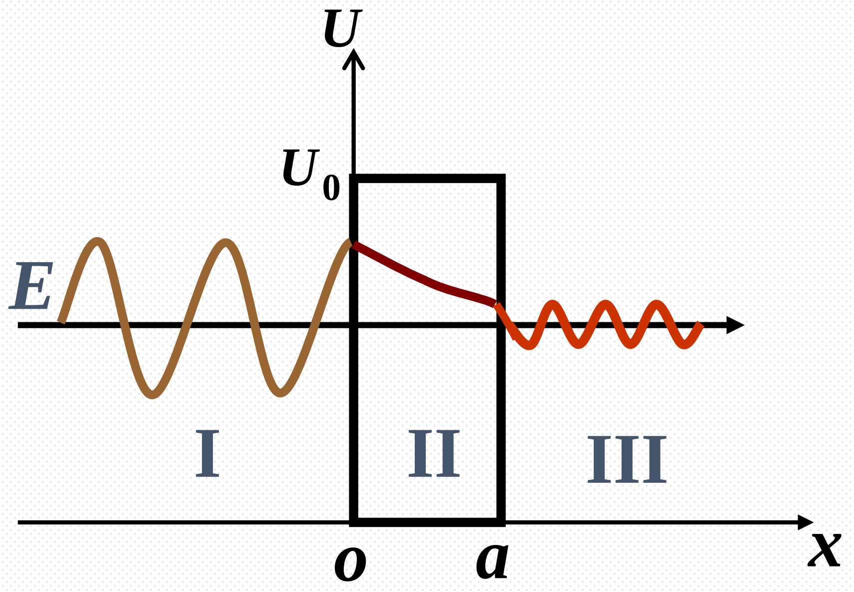

“隧道效应”

**在粒子总能量低于势垒壁高 ($E<U_0$) 的情况下粒子有一定的概率穿透势垒。**

**粒子能穿透比其动能更高的势垒的现象，称为隧道效应**

## 透射率：粒子穿过势垒的几率

$$T=\frac{|C|^2}{|A|^2}\propto e^{-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U_0-E)}a}$$




**粒子容易穿透薄的势垒，质量小的粒子穿透势垒的几率大。**

若：电子 $m=m_e=0.91\times10^{-30}$kg　　$U_0$-E=5ev

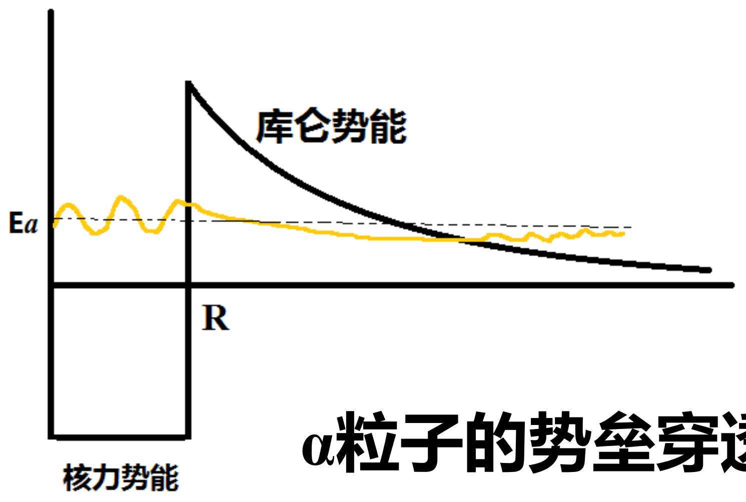
$T\sim e^{-2.3\times10^{10}a}$

当$a=10^{-10}$m，$T\sim e^{-2.3}\approx0.1$

当$a=10^{-9}$m，$T\sim e^{-23}\approx10^{-10}$

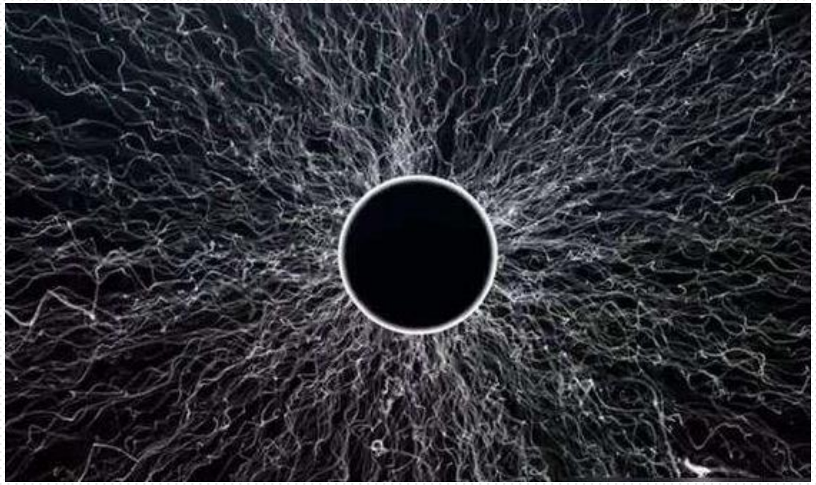
# 势垒穿透实例

1、α粒子从放射性核中能够释放出来，证明了这一结论。




α粒子的势垒穿透示意图

2、黑洞并不像想象的那么黑，事物可以从黑洞逃逸——黑洞不是黑的

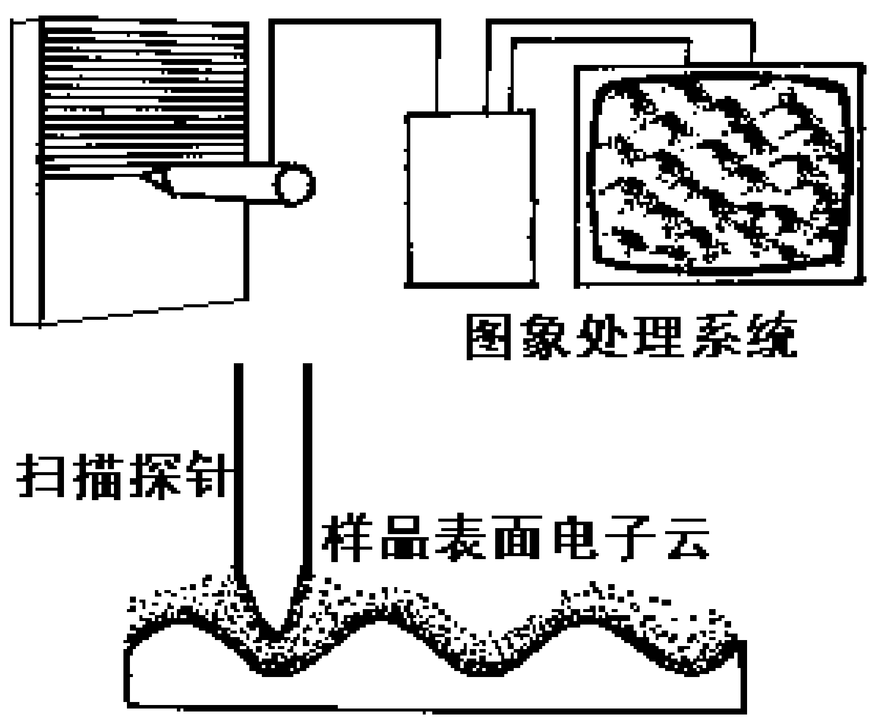


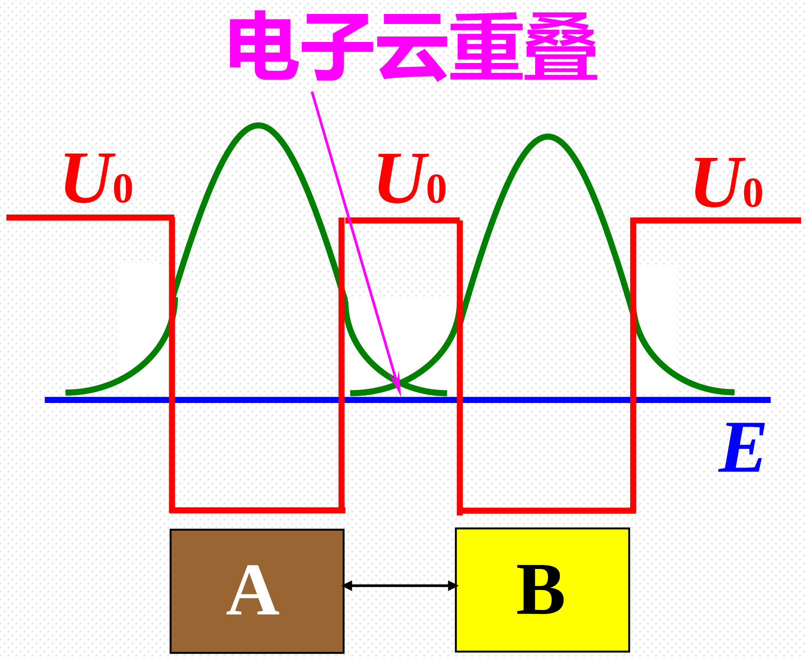
3、热核反应需要极高温度

崂山道士穿墙术

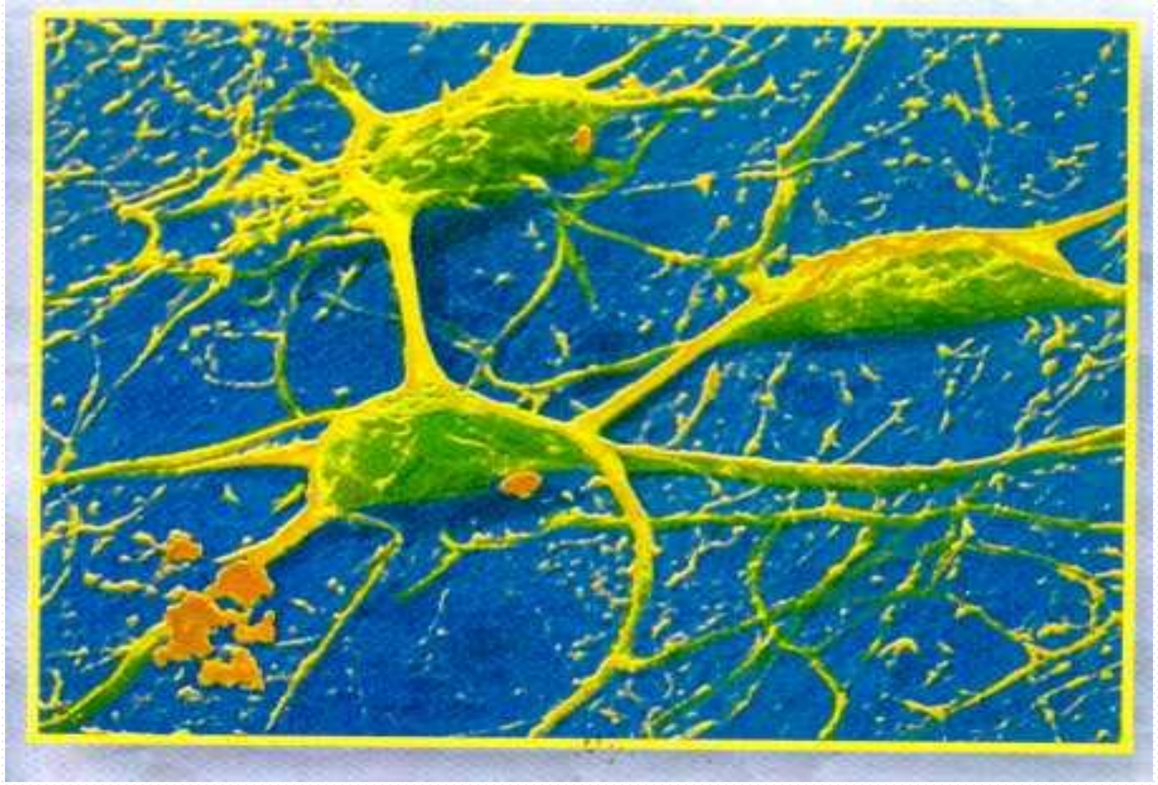
《物理世界奇遇记》

# 扫描隧道显微镜STM

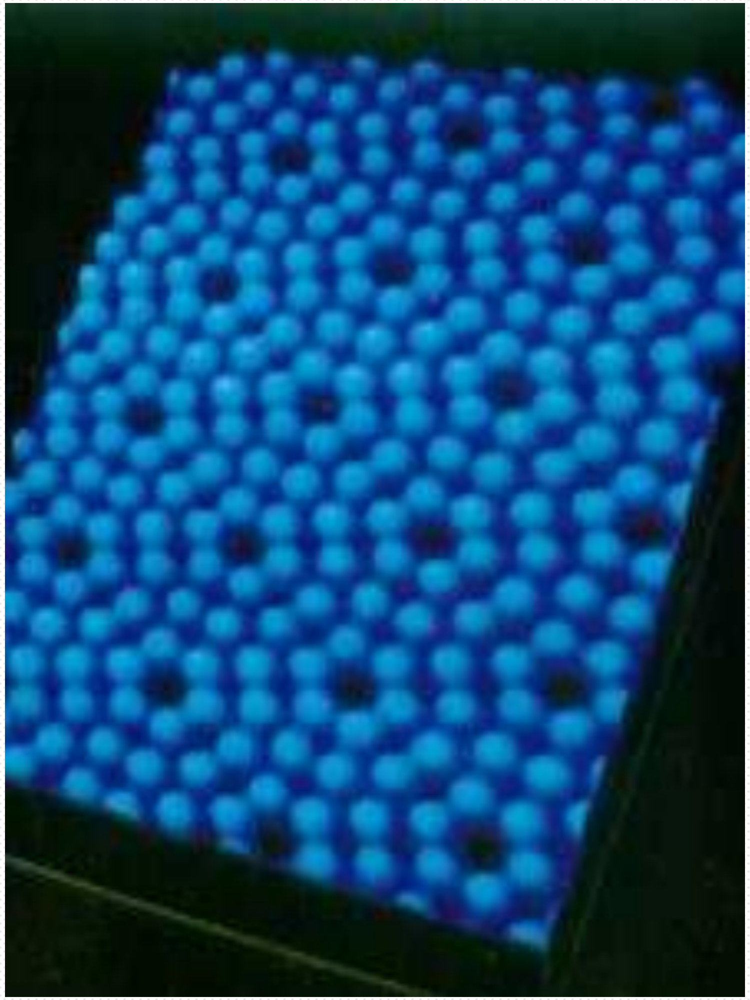



用一个极细的尖针（针尖头部为单个原子）去接近样品表面，当针尖和样品表面靠得很近，即小于1纳米时，针尖头部的原子和样品表面原子的电子云发生重叠。此时若在针尖和样品之间加上一个偏压，电子便会穿过针尖和样品之间的势垒而形成纳安级（$10^{-9}$ A）的隧道电流。通过控制针尖与样品表面间距的恒定，并使针尖沿表面进行精确的三维移动，就可将表面形貌和表面电子态等有关表面信息记录下来。



**用STM得到的神经细胞象**



**硅表面STM扫描图象**

**习题1** **已知粒子在一维无限深势阱中运动,其波函数为:**

$$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{a}}\cos\frac{3\pi x}{2a} \qquad (-a\leqslant x\leqslant a)$$

**那么粒子在$x=5a/6$处出现的几率密度为:**

(A) $1/2a$ (B) $1/a$ (C) $1/\sqrt{2a}$ (D) $1/\sqrt{a}$

**习题2** 粒子在一维矩形无限深势阱中运动,其波函数为:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(\frac{n\pi x}{a}) \qquad (0 < x < a)$$

若粒子处于$n$=1的状态,在0—$a$/4区间发现该粒子的几率为?