# § 15.6 波函数 一维定态薛定谔方程

微观粒子具有波动性 —— $(\vec{\nu}, \vec{\lambda})$ 1925年薛定谔 → 用物质波波函数描述微观粒子状态

## 一. 波函数及其统计解释

自由粒子的波函数 其物质波是单色平面波

$$y(x,t) = A\cos\left(2\pi(\nu t - \frac{x}{\lambda})\right) \longrightarrow y(x,t) = Ae^{-i2\pi(\nu t - \frac{x}{\lambda})}$$

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

$$\Psi(x,t) = \Psi_0 e^{-i2\pi(\nu t - \frac{x}{\lambda})} = \Psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)}$$

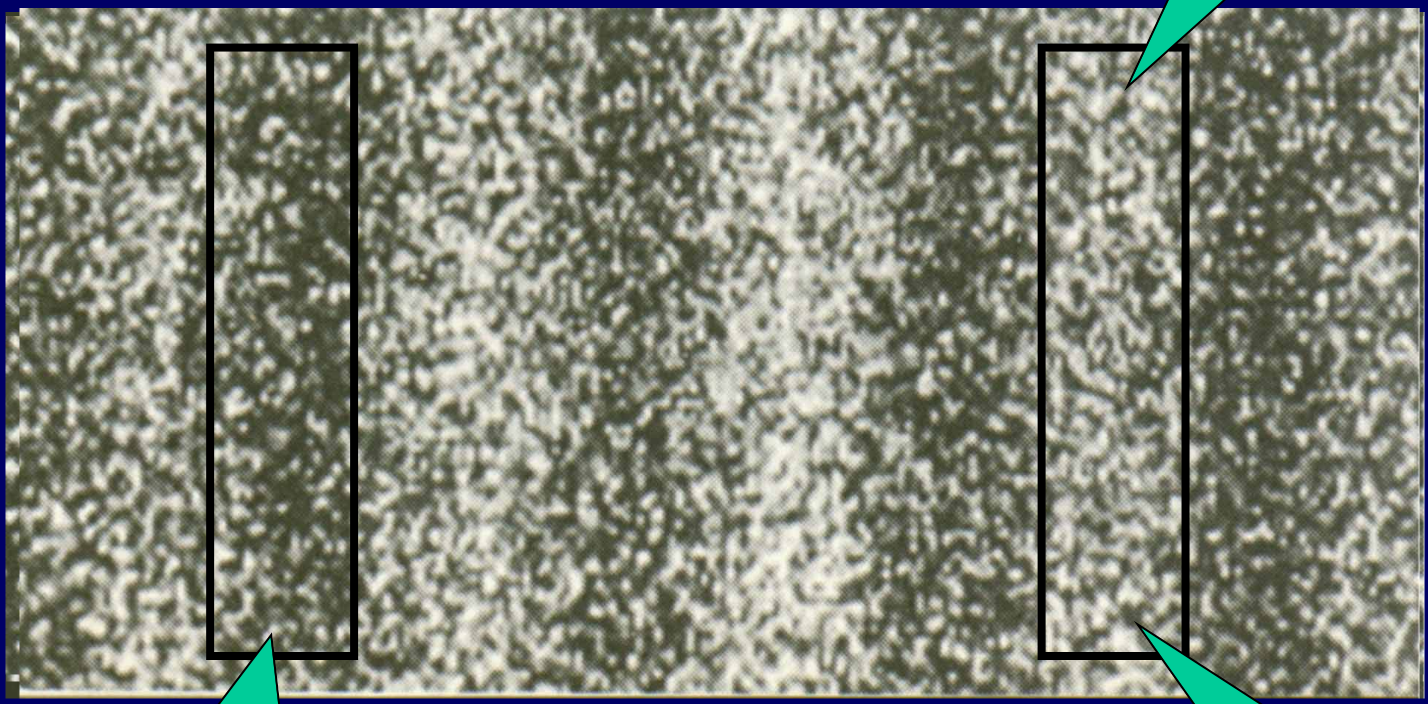
$$p = \frac{h}{\lambda}$$

$$E = h\nu$$

**单个粒子在哪一处出现是偶然事件；**

**大量粒子的分布有确定的统计规律。**

$$I \propto |\Psi|^2$$




电子双缝干涉图样

电子数 N=70000

单个电子就具有波动性！

## 波函数的物理意义：

$|\Psi(\vec{r},t)|^2$ —— $t$ 时刻，粒子在空间 $\vec{r}$ 处的单位体积中出现的概率，又称为概率密度

**1. 时刻 $t$， 粒子在空间 $\vec{r}$ 处 $\mathrm{d}V$ 体积内出现的概率**

$$\mathrm{d}W = |\Psi(\vec{r},t)|^2\,\mathrm{d}V = \Psi(\vec{r},t)\Psi^*(\vec{r},t)\mathrm{d}V$$

$$\Psi(\vec{r},t) \Longleftrightarrow C\Psi(\vec{r},t), C\text{复常数}$$

**2. 归一化条件**

**(粒子在整个空间出现的概率为1)**

$$\iiint |\Psi(\vec{r},t)|^2 \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z = 1$$

**3. 波函数必须单值、有限、连续。**

# 二. 薛定谔方程 (1926年)

$$\Psi = \Psi_0 \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)}$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \Psi_0 \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)} \cdot \left(\frac{ip}{\hbar}\right)^2$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \Psi_0 \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)} \cdot \left(-\frac{iE}{\hbar}\right)$$

$$\left.\begin{aligned} E &= p^2/2m \\ -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} &= p^2 \Psi \\ i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= E\Psi \end{aligned}\right\}$$

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

$$V \neq 0 \qquad E = p^2/2m + V$$

质量 $m$ 的粒子在外力场中运动，势能函数 $V(\vec{r},t)$，薛定谔方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial}{\partial z^2}\right)+V(\vec{r},t)\right]\Psi(\vec{r},t)=i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{r},t)\right]\Psi(\vec{r},t)=i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t}$$

$$\hat{H}\Psi(\vec{r},t)=i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{r},t)=\hat{H}$$ 哈密顿算符

# 定态 薛定谔方程

粒子在稳定力场中运动，势能函数 $V(\vec{r})$、能量 $E$ 不随时间变化，粒子处于定态—— 概率密度 $|\Psi(\vec{r},t)|^2$ 恒定

定态波函数写为 $$\Psi(\vec{r},t)=\Psi(\vec{r})e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

$$\hat{H}\Psi(\vec{r},t)=i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t}=E\Psi(\vec{r})e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{r})=\hat{H}(\vec{r})$$ 哈密顿算符

定态薛定谔方程

粒子能量

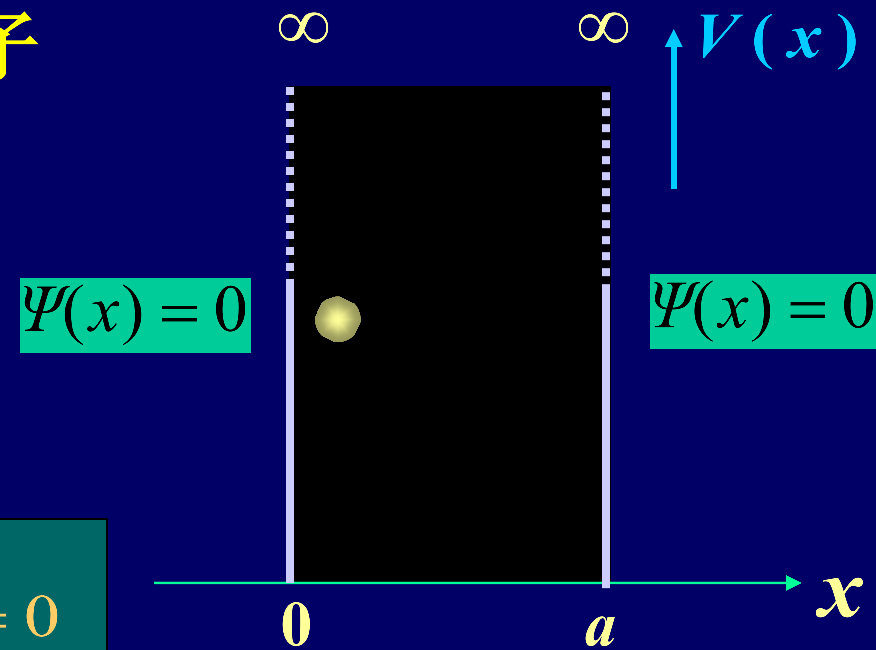
$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{r})\right)\Psi(\vec{r})=E\Psi(\vec{r})$$

描述外力场的势能函数

一维定态薛定谔方程 **(粒子在一维空间运动)**

$$\frac{\mathrm{d}^2\Psi(x)}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\Psi(x)=0$$

# 三. 一维无限深势阱中的粒子




势能函数

$$\begin{cases} V(x)=0 & 0<x<a \\ V(x)=\infty & 0>x \text{ 或 } x>a \end{cases}$$

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}^2\Psi(x)}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\Psi(x)=0}$$

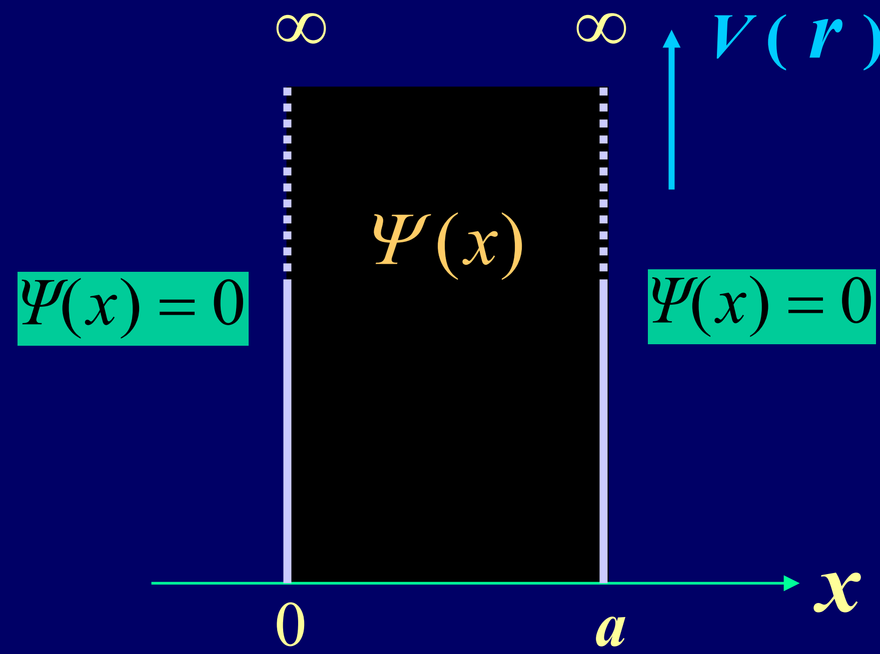
$0>x$ 或 $x<a$ 区域　　$\Psi(x)=0$

$0<x<a$ 区域，

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

令 $k^2=\dfrac{2mE}{\hbar^2}$

$$\frac{\mathrm{d}^2\Psi(x)}{\mathrm{d}x^2}+k^2\Psi(x)=0$$




解为

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

波函数在 $x=0$ 处连续，有

$$\Psi(0)=A\sin k\cdot 0+B\cos k\cdot 0=0$$

$$\therefore\quad B=0$$

因此 $\Psi(x)=A\sin kx$

在 $x=a$ 处连续，有

$$\Psi(a)=A\sin ka=0$$

所以 $k=\dfrac{n\pi}{a}$

$$n=1,\ 2,\ 3\cdots$$

其中 $k^2=\dfrac{2mE}{\hbar^2}$

量子数为 $n$ 的定态波函数为

$$\Psi_n(x) = A_n \sin\frac{n\pi}{a}x$$

由归一化条件

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi_n(x)|^2 \mathrm{d}x = 1$$

可得 $A_n = \pm\sqrt{a/2}$

## 波函数

$$\Psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi}{a}x & 0 < x < \mathrm{a} \\ 0 & x < 0, x > a \end{cases}$$

## 能量是量子化的

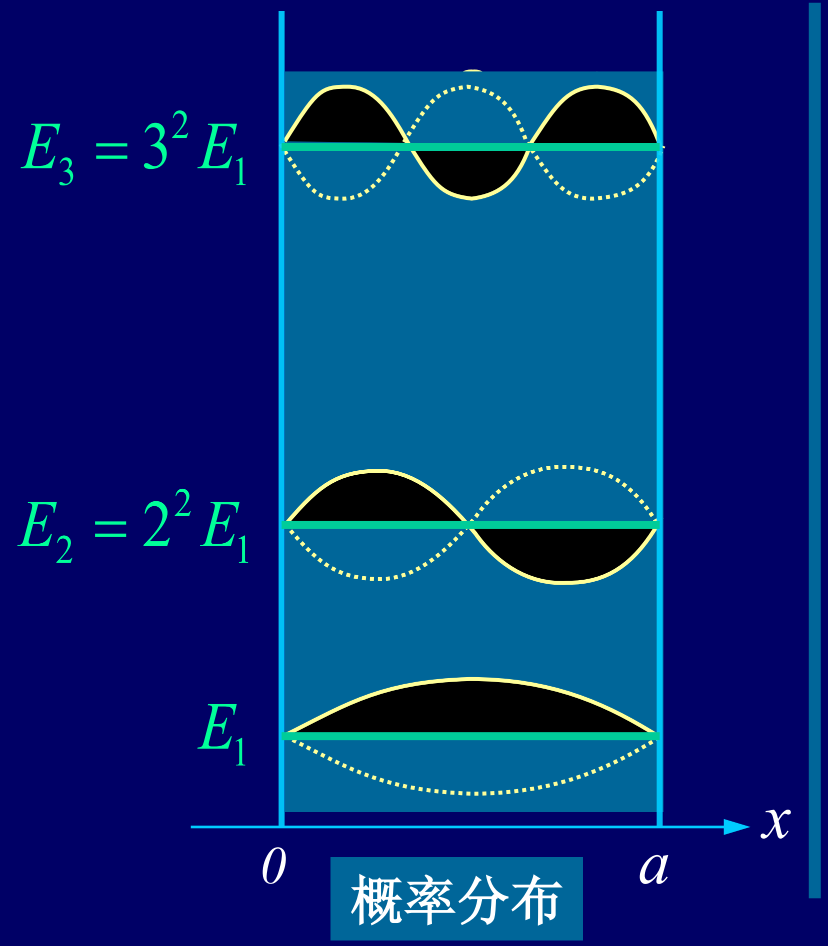
$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2$$

粒子能量

$$E_n = n^2\frac{h^2}{8ma^2} = n^2 E_1$$

$$E_n = n^2 \frac{h^2}{8ma^2} = n^2 E_1$$

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




**驻波条件**

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

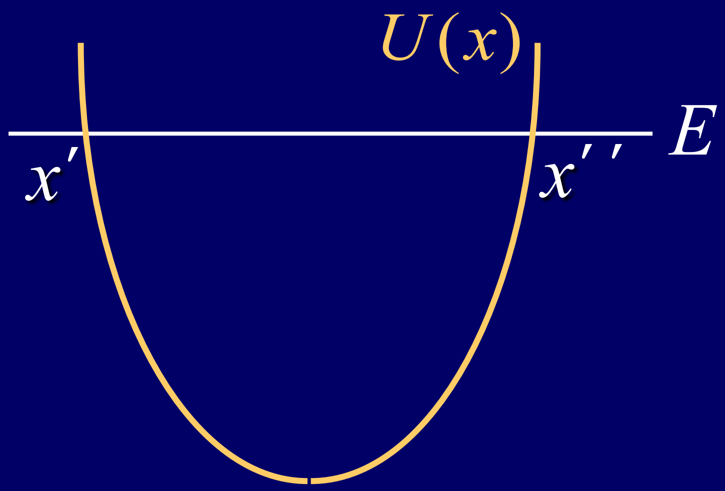
$$p_n = \frac{nh}{2a} = \frac{h}{\lambda_n} \Rightarrow a = n\frac{\lambda}{2}$$

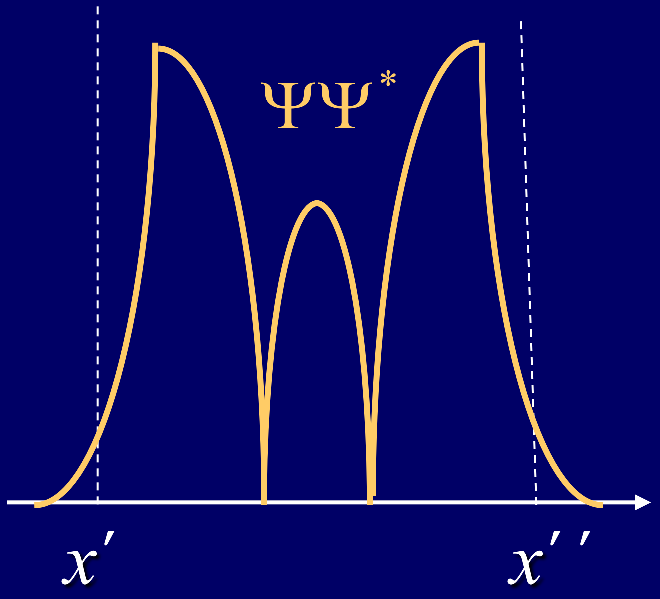
# 四. 一维谐振子

1. 势能函数 $$U(x)=\frac{1}{2}kx^2=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

$m$ — 振子质量，$\omega$ — 固有频率，$x$ — 位移

2. 定态薛定谔方程 $$\Phi''(x)+\frac{2m}{\hbar^2}(E-\frac{1}{2}m\omega^2x^2)\Phi(x)=0$$



## 3. 能量量子化

$$E_n = (n + \frac{1}{2})h\nu \qquad (n = 0, 1, 2, \cdots\cdots)$$

### 说明

**普朗克量子化假设** $E_n = nh\nu$ $E_0 = 0$

**量子力学结果** $E_n = (n+1/2)h\nu$ $E_0 = h\nu/2$

**零点能**