*讨论：定态薛定谔方程

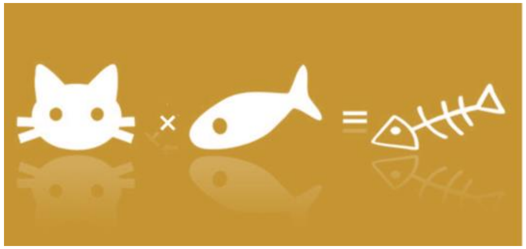
$$\nabla^2\psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E - E_p)\psi = 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\nabla^2\psi + E_p\psi = E\psi \qquad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

现在我们定义一个算符： $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\nabla^2 + E_p$

那么定态薛定谔方程将简写为：

$$\hat{H}\psi = E\psi$$



这里我们将算符 **H** 称为哈密顿算符，**E** 称为本征能量值——这是一个量子系统最基本的特征——粒子所具有能量。

➢ 波函数的标准条件：单值、有限和连续

(1) $\int_{-\infty<x,y,z<\infty} |\psi|^2 \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z = 1$ 可归一化

(2) ψ 和 $\frac{\partial \psi}{\partial x}, \frac{\partial \psi}{\partial y}, \frac{\partial \psi}{\partial z}$ 连续

(3) $\psi(x, y, z)$ 为有限的、单值函数

**更多讨论: 薛定谔方程

$$\left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\nabla^2 + E_{\mathrm{p}}\right)\Psi = \mathrm{i}\frac{h}{2\pi}\frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

➢ 薛定谔方程是量子力学中的一项基本假设；
地位与经典力学的牛顿定律相当。

$$\left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\nabla^2+E_{\mathrm{p}}\right)\Psi=\mathrm{i}\frac{h}{2\pi}\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

- 薛定谔方程的解满足态叠加原理

  若 Ψ_1 和 Ψ_2 是薛定谔方程的解，

  则 $c_1\Psi_1+c_2\Psi_2$ 也是薛定谔方程的解。

  这是因为薛定谔方程是线性偏微分方程。

- 薛定谔方程是关于时间的一阶偏微分方程

  知道初始时刻波函数，就可以确定以后任何时刻的波函数.

- 薛定谔方程中含有虚数 i

  所以它的解 Ψ 必然是复数，只有 Ψ 的模方才有直接的物理意义。

**再多一点讨论: 量子力学的哥本哈根诠释

量子力学的哥本哈根诠释主要是由玻尔和海森堡于1927年在哥本哈根合作研究时共同提出的，哥本哈根学派其他成员还包括玻恩、泡利以及狄拉克等。

1. 一个量子系统的量子态可以用波函数来完全地表述：波函数代表一个观察者对于量子系统所知道的全部信息。波函数可以由无数个量子态叠加而成。

$$\Psi = a_1\varphi_1 + a_2\varphi_2 + \ldots\ldots \qquad E = E_1 + E_2 + \ldots$$

2. 量子系统的描述是概率性的：一个事件的概率是波函数的模方，波函数可归一化，
3. 不确定性原理：在量子系统里，一个粒子的位置和动量无法同时被确定。
4. 物质具有的波粒二象性可以用量子力学的理论完整地描述。然而，一个实验可以展示出物质的粒子行为，或波动行为，却不能同时展示出两种行为。

5. 测量仪器是经典仪器，只能测量经典性质，像位置，动量等等——而且“测量”这个行为会导致波函数的坍缩：

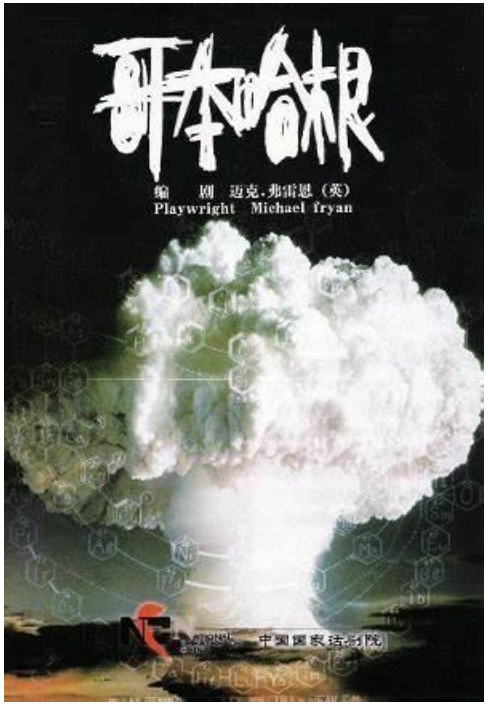
$$\Psi = a_1\varphi_1 + a_2\varphi_2 + \ldots\ldots$$

$$\Big\downarrow \text{测量}$$

$$\Psi = a_1\varphi_1$$

*哥本哈根

1941年，海森堡前往已被纳粹德国占领的丹麦首都哥本哈根，与他的导师玻尔进行了一次会面——这成为物理学史上一个著名的故事。没有人知道他们当时谈论了什么，人们仅仅知道，海森堡与玻尔的友谊停止在了1941年，且纳粹德国在二战期间没有研制出原子弹。1943年，玻尔前往美国与奥本海默等人一起参与了著名的“曼哈顿计划”。1945年，世界上第一颗原子弹爆炸。



薛定谔方程：

虽然薛定谔方程正确地诠释了微观粒子的量子行为，但薛定谔本人并不喜欢量子理论的意涵，他与爱因斯坦观点相同，都不赞同这种统计或概率方法，以及它所伴随的波函数坍缩的概念。对于量子力学的概率诠释，他说：“我不喜欢它，对于我得引入它我感到抱歉。

From left, Heisenberg’s mother, Schrodinger’s wife, Dirac’s mother, Dirac, Heisenberg, and Schrodinger at the Stockholm Railway Station (1933). Photo from the E. Segre Visual Archives of AIP.

在薛定谔有生的最后一年，写给玻恩的一封信中，他清楚地表示他依然不接受玻恩的哥本哈根诠释

薛定谔的猫

为了讨论量子力学中的这些怪异特征，薛定谔于1935年提出了一个著名
的思想实验，即

……实验者甚至可　封闭的铁容器
里面，并且装置以　接干扰）：在
一台盖革计数器内　性物质至少有
一个原子衰变的概　50%；假若衰变
事件发生了，则盖　头会打破装有
氰化氢的烧瓶。经　旧存活；否则
发生衰变，这套机　描述整个事件
的波函数竟然表达

——埃尔温·薛定谔，*Die gegenwärtige Situation in der Quantenmechanik (The present situation in quantum mechanics)*

*量子力学解题的一般思路

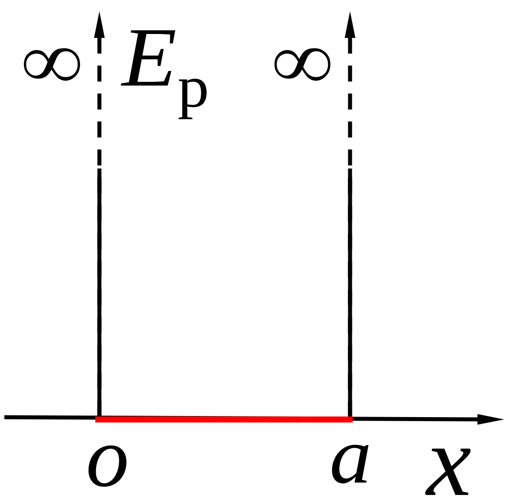
1. 由粒子运动的实际情况，正确地写出势函数$E_p(x)$

2. 代入定态薛定谔方程

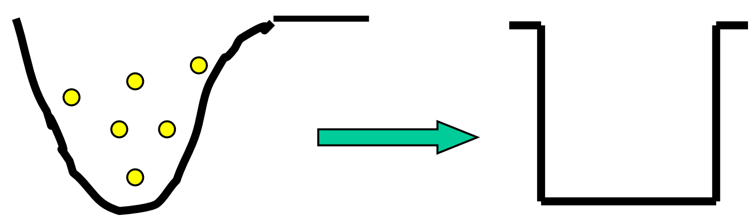
3. 解方程，得到波函数(考虑波函数的性质)

4. 求出概率密度分布及其他力学量

方势阱

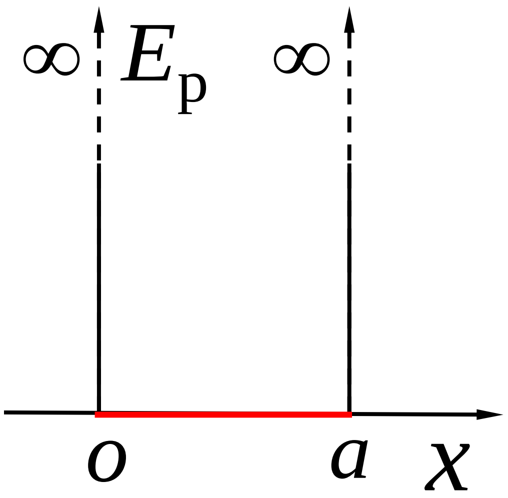


是实际情况的极端化和简化



金属中的电子

三　一维势阱问题



粒子势能 E_p满足边界条件

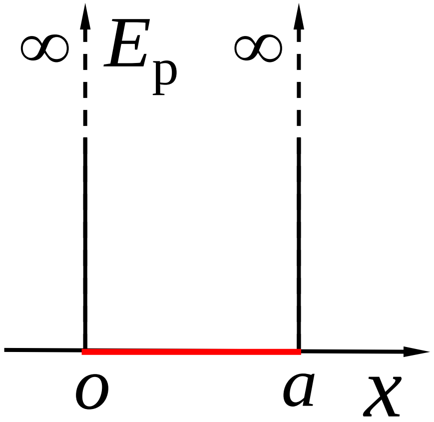
$$E_p = \begin{cases} 0, & 0 < x < a \\ E_p \to \infty, & x \le 0, x \ge a \end{cases}$$

(1) 是固体物理金属中自由电子的简化模型；

(2) 数学运算简单，量子力学的基本概念、原理在其中以简洁的形式表示出来 .

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

$$E_{\mathrm{p}}=\begin{cases}0, & 0<x<a\\ E_{\mathrm{p}}\to\infty, & x\le 0, x\ge a\end{cases}$$



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

势阱外

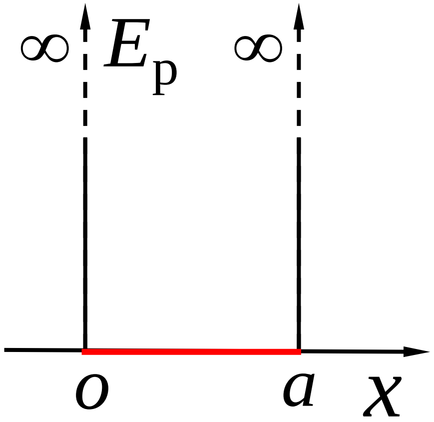
$$\because E_{\mathrm{p}}\to\infty,\quad x\le 0,\quad x\ge a \qquad \therefore \psi=0,\quad (x\le 0, x\ge a)$$

势阱内 $\quad E_{\mathrm{p}}=0,\quad 0<x<a$

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+\frac{8\pi^2 mE}{h^2}\psi=0 \qquad k=\sqrt{\frac{8\pi^2 mE}{h^2}}$$

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+k^2\psi=0}$$

势阱内 $E_{\mathrm{p}}=0, \quad 0<x<a$



$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+\frac{8\pi^2 mE}{h^2}\psi=0 \qquad k=\sqrt{\frac{8\pi^2 mE}{h^2}}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+k^2\psi=0$$

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

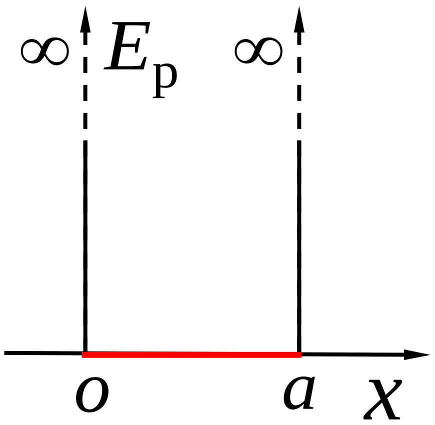
波函数的标准条件：单值、有限和连续.

$$\because x=0,\ \psi=0,\ \therefore B=0$$

$$\psi(x)=A\sin kx$$

$$x=a,\psi=A\sin ka=0$$

$$x = a, \psi = A\sin ka = 0$$



$$\therefore \sin ka = 0$$

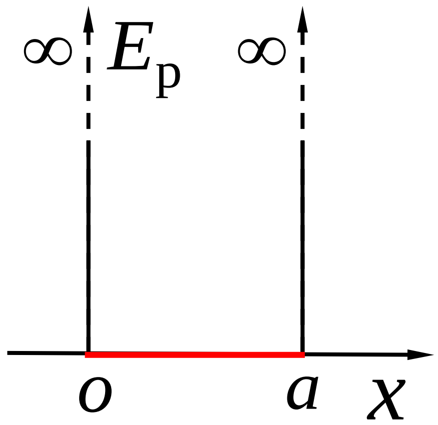
$$\because \sin ka = 0, \quad \therefore ka = n\pi$$

$$k = \frac{n\pi}{a}, \quad n = 1,2,3,\cdots$$ 量子数

$$k = \sqrt{\frac{8\pi^2 mE}{h^2}} \qquad E = n^2 \frac{h^2}{8ma^2}$$

$$\psi(x) = A\sin kx = A\sin\frac{n\pi}{a}x \qquad n = 1,2,3,\cdots$$

$$\psi(x) = A\sin\frac{n\pi}{a}x \qquad n = 1,2,3,\cdots$$



归一化条件 $\int_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2 \mathrm{d}x = \int_0^a \psi\psi^* \mathrm{d}x = 1$

$$A^2\int_0^a \sin^2\frac{n\pi}{a}x\mathrm{d}x = 1 \qquad A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

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

➢ 波函数 $\psi(x) = \begin{cases} 0, & (x \le 0, x \ge a) \\ \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x, & (0 < x < a) \end{cases}$

- **概率密度** $$|\psi(x)|^2 = \frac{2}{a}\sin^2\frac{n\pi}{a}x$$

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

讨论： **1** 粒子能量**量子化**

能量 $$E_n = n^2\frac{h^2}{8ma^2}$$

基态能量 $$E_1 = \frac{h^2}{8ma^2}, \quad (n=1)$$

激发态能量 $$E_n = n^2\frac{h^2}{8ma^2} = n^2E_1, (n = 2,3,\cdots)$$

一维无限深方势阱中粒子的**能量**是**量子化**的，且能级分布不均匀，量子数越大，能级**间隔**越大 .

2 粒子在势阱中各处出现的概率密度不同

波函数

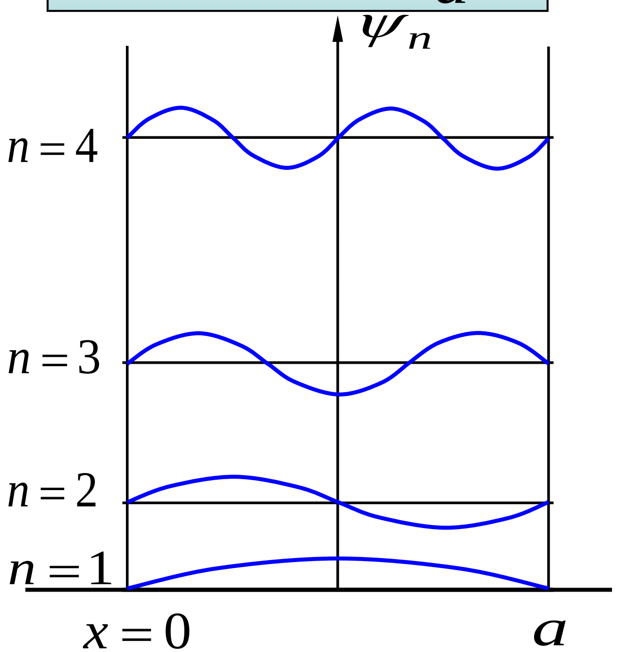
$$\psi(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x$$

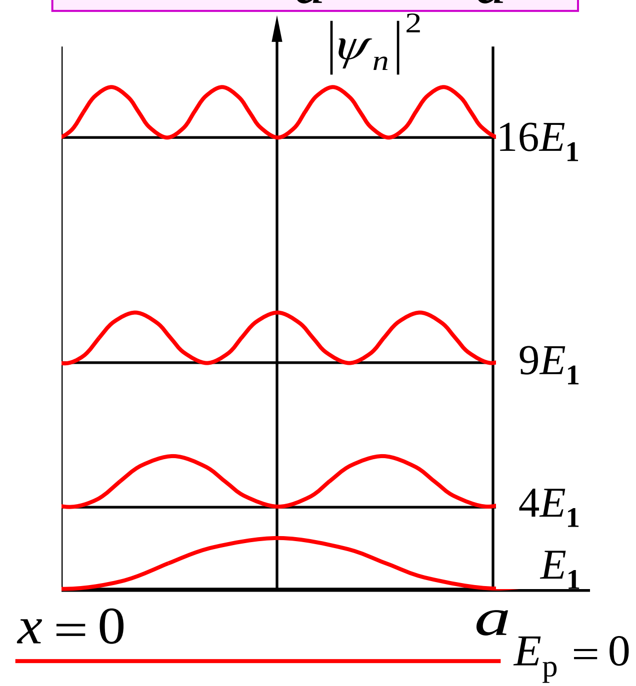
概率密度

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

$$\psi(x)=A\sin\frac{n\pi}{a}x$$

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

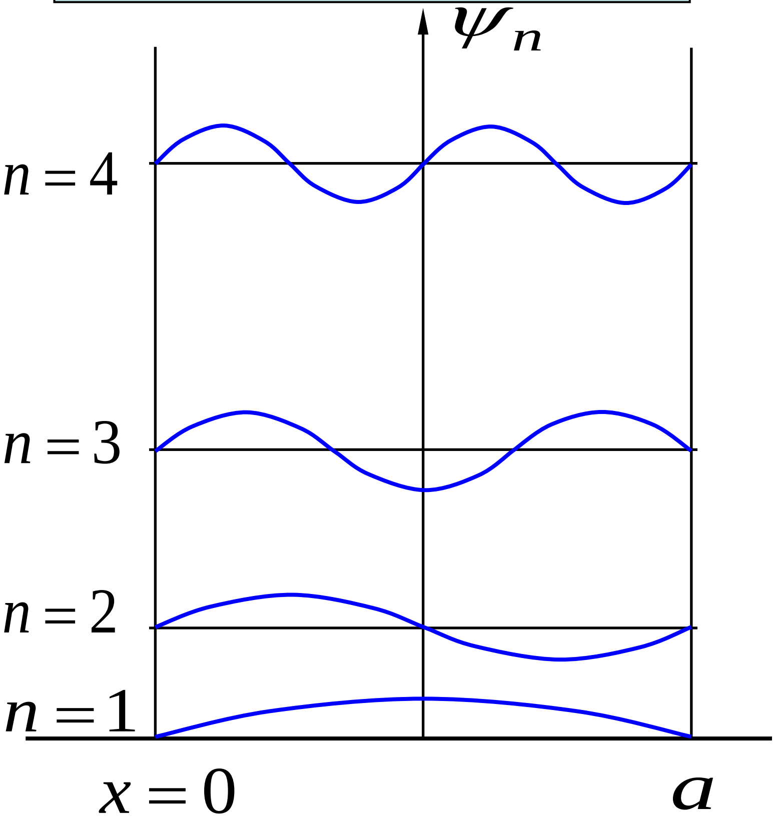


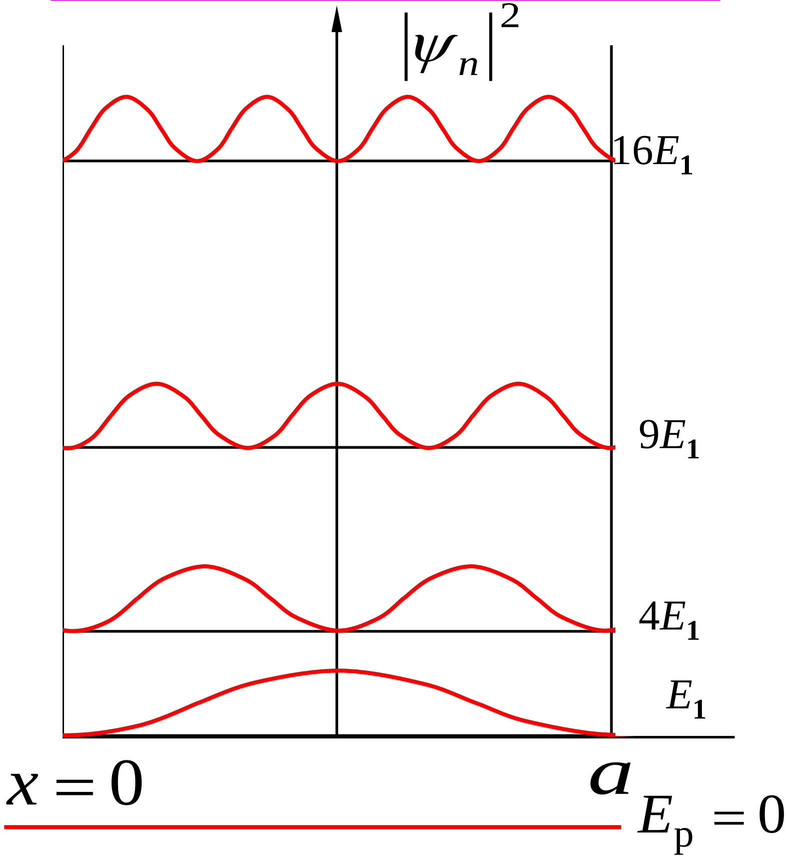


3 波函数为**驻波形式**，阱壁处为波节，波腹的个数与量子数 n 相等

$$\psi(x) = A\sin\frac{n\pi}{a}x$$

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





4 一维无限深势阱中粒子波函数是正交归一的

设不同能级的波函数ψ_m和ψ_n，则有

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_m^*\psi_n dx=\int_0^a\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{m\pi}{a}x\cdot\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}xdx$$

利用 $\sin\alpha\sin\beta=-\frac{1}{2}[\cos(\alpha+\beta)-\cos(\alpha-\beta)]$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_m^*\psi_n dx=-\frac{1}{a}\int_0^a[\cos\frac{m+n}{a}\pi x-\cos\frac{m-n}{a}\pi x]dx=0(m\neq n)$$

ψ_m和ψ_n互相正交

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_m^*\psi_m dx=\int_0^a\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{m\pi}{a}x\cdot\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{m\pi}{a}xdx=1$$

归一

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_m^*\psi_n dx=\delta_{mn}\quad\begin{cases}1 & m=n\ \text{归一}\\ 0 & m\neq n\ \text{正交}\end{cases}$$

*对应原理

在某些极限条件下，量子规律可以转化为经典规律

——— 量子物理的对应原理

例 $$E=E_n=\frac{\hbar^2\pi^2n^2}{2ma^2}=n^2\frac{h^2}{8ma^2}$$

相邻能级间隔 $$\Delta E=E_{n+1}-E_n=(2n+1)\frac{h^2}{8ma^2}$$

能级的相对间隔 $$\frac{\Delta E_n}{E_n}\approx\frac{2n\frac{h^2}{8ma^2}}{n^2\frac{h^2}{8ma^2}}=\frac{2}{n}$$

当$n\to\infty$时 $\dfrac{\Delta E_n}{E_n}\to 0$ 能量连续

量子规律转化为经典规律

例1: 设一粒子沿x方向运动，其波函数为: $\psi_{(x)} = \dfrac{C}{1+ix}$

（1）由归一化条件定出常数C。

（2）求出此粒子按坐标的概率分布函数;

（3）在何处找到粒子的概率最大?

解 （1）由归一化条件求C $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi \, dx = 1$

由 $\psi(x) = C\dfrac{1}{1+ix} = C\dfrac{1-ix}{1+x^2}$ 得 $\psi^* = C\dfrac{1+ix}{1+x^2}$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi \, dx = C^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1+x^2}{(1+x^2)^2} dx = C^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{1+x^2} dx = C^2 \arctan x \Big|_{-\infty}^{\infty} = C^2 \pi$$

由 $C^2 \pi = 1$ 得到 $C = \dfrac{1}{\sqrt{\pi}}$

（2） 粒子按坐标的概率分布函数

$$\omega(x)=\psi^{*}\psi=\frac{1}{\pi(1+x^{2})}$$

（3）由上式可知，当 $x = 0$ 时 $\omega(x)$ **最大,其值为**

$$\omega(x)=1/\pi$$

例2：在一维无限深势阱中运动的粒子，由于边界条件的限制，势阱宽度*a*必须等于德布罗意波半波长的整数倍。试用这一条件导出能量量子化公式。

$$E_n = n^2 \cdot h^2 / (8ma^2),\ n = 1, 2, 3 \cdots$$

解　依题意　$n \cdot \dfrac{\lambda}{2} = a \quad \therefore \lambda = \dfrac{2a}{n} \quad (n = 1, 2, \cdots)$

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{nh}{2a}$$

由于　$E = \dfrac{p^2}{2m}$

故

$$E = \left(\frac{nh}{2a}\right)^2 / 2m = \frac{n^2 h^2}{8ma^2} \qquad (n = 1, 2, \cdots)$$

例3：设有一个电子在宽为0.20nm一维无限深的方势阱中，（1）计算电子在最低能级的能量；（2）当电子处于第一激发态时，在势阱何处出现的概率最小，其值为多少？

解：（1）一维无限深方势阱中粒子的可能能量 $E_n = n^2 \dfrac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$

式中a为势阱宽度，当量子数n=1时，粒子处于基态，能量最低。因此，电子在最低能级的能量为

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} = 1.51 \times 10^{-18} J = 9.43 eV$$

（2）当电子处于第一激发态时，在势阱何处出现的概率最小，其值为多少？

粒子在一维无限深方势阱中的波函数为

$$\Psi(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x \quad (n=1,2,\cdots\cdots) \quad (0\le x\le a)$$

当它处于第一激发态时，波函数为 $\Psi(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{2\pi}{a}x$

相应的概率密度函数为

$$|\Psi(x)|^2=\frac{2}{a}\sin^2\frac{2\pi}{a}x \qquad (0\le x\le a)$$

令 $\dfrac{d|\Psi(x)|^2}{dx}=0$ 得 $\dfrac{8\pi}{a^2}\sin\dfrac{2\pi x}{a}\cos\dfrac{2\pi x}{a}=0$

$$\left|\Psi\left(x\right)\right|^{2}=\frac{2}{a}\sin^{2}\frac{2\pi}{a}x$$

在 $(0\leq x\leq a)$ 的范围内讨论，当x**=0，a/4，a/2，3a/4和a时，**

函数 $\left|\Psi\left(x\right)\right|^{2}$取得极值。

由 $\frac{d^{2}\left|\Psi\left(x\right)\right|^{2}}{dx^{2}}>0$ 可知，函数在x**=0，a/2，和x=a（即x=0，**

0.1nm，0.2nm）处概率最小，其值均为0。