



一 波函数及其统计解释

1 波函数

由于微观粒子具有波粒二象性，其位置与动量不能同时确定。所以已无法用经典物理方法去描述其运动状态。

用波函数来描述微观粒子的运动。



(1) 经典的波与波函数

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

◆ 电磁波 $\left\{ \begin{array}{l} E(x, t) = E_0 \cos 2\pi(\nu t - \frac{x}{\lambda}) \\ H(x, t) = H_0 \cos 2\pi(\nu t - \frac{x}{\lambda}) \end{array} \right.$

◆ 经典波为**实**函数

$$y(x, t) = \text{Re}[A e^{-i 2\pi(\nu t - \frac{x}{\lambda})}]$$



(2) 量子力学波函数(复函数)

描述微观粒子运动的波函数 $\Psi(x, y, z, t)$

微观粒子的波粒二象性 $\nu = \frac{E}{h}$ $\lambda = \frac{h}{p}$

自由粒子的能量和动量是确定的，其德布罗意频率和波长不变，可认为是一平面单色波。波列无限长，根据不确定原理，粒子在 x 方向上的位置完全不确定。



◆ 自由粒子平面波函数

$$\Psi(x, t) = \psi_0 e^{-i\frac{2\pi}{\hbar}(vt - \frac{x}{\lambda})}$$

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



2 概率密度

某一时刻出现在某点附近在体积元 dV 中的粒子的**概率**与 $|\Psi|^2 dV$ 成**正比**.

$$|\Psi|^2 dV = \Psi \Psi^* dV$$

可见，德布罗意波（或物质波）与机械波、与电磁波不同，是一种概率波.



概率密度 表示在某处**单位**体积内粒子出现的概率

$$|\Psi|^2 = \psi\psi^*$$

正实数

- ◆ 某一时刻整个空间内发现粒子的**概率为**

归一化条件 $\int |\Psi|^2 dV = 1$ (束缚态)

标准条件

波函数必须是单值、连续、有限的函数.



薛定谔 (Erwin Schrodinger, 1887—1961) 奥地利物理学家.

1926年建立了以薛定谔方程为基础的**波动力学**，并建立了量子力学的近似方法 .

1933年与狄拉克获诺贝尔物理学奖.



二 薛定谔方程

1 自由粒子薛定谔方程的建立

自由粒子平面波函数

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

取 x 的二阶偏导数和 t 的一阶偏导数



取 x 的二阶偏导数和 t 的一阶偏导数得

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{4\pi^2 p^2}{h^2} \Psi \quad \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i2\pi}{h} E \Psi$$

自由粒子 ($v \ll c$) $E = E_k$ $p^2 = 2mE_k$

一维运动自由粒子的含时薛定谔方程

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = i \frac{h}{2\pi} \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$



2 粒子在势能为 E_p 的势场中运动

$$E = E_k + E_p$$

◆ 一维运动粒子的含时薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + E_p(x, t) \Psi = i \frac{\hbar}{2\pi} \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

3 粒子在恒定势场中的运动

$$E = \frac{p^2}{2m} + E_p \quad E_p(x) \text{与时间无关}$$



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

$$= \psi_0 e^{i 2\pi p x / \hbar} e^{-i 2\pi E t / \hbar}$$

$$= \psi(x) \phi(t)$$

$$\psi(x) = \psi_0 e^{i 2\pi p x / \hbar}, \quad \phi(t) = e^{-i 2\pi E t / \hbar}$$

◆ 在势场中一维运动粒子的定态薛定谔方程

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



◆ 三维势场中运动粒子的定态薛定谔方程

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

拉普拉斯算子

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

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



定态薛定谔方程：波函数、系统的能量、概率密度和粒子在势场中的势能均只是坐标^的函数，与时间无关。

定态波函数性质

- (1) 能量 E 不随时间变化.
- (2) 概率密度 $|\psi|^2$ 不随时间变化.



◆ 波函数的**标准条件**: 单值、有限和连续

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

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

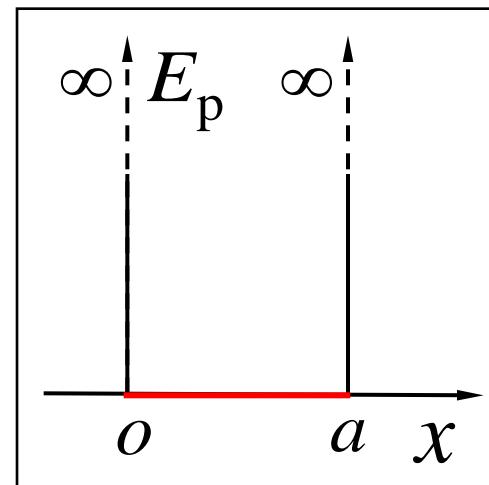
(3) $\psi(x, y, z)$ 为有限的、单值函数



三 一维势阱问题

粒子势能 E_p 满足边界条件

$$E_p = \begin{cases} 0, & 0 < x < a \\ E_p \rightarrow \infty, & x \leq 0, x \geq a \end{cases}$$



(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。

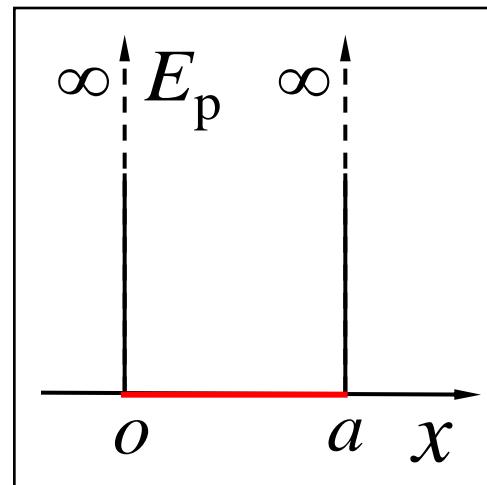


15-8 量子力学简介

$$\because E_p \rightarrow \infty, \quad x \leq 0, \quad x \geq a$$

$$\therefore \psi = 0, \quad (x \leq 0, x \geq a)$$

$$E_p = 0, \quad 0 < x < a$$



$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m E}{h^2} \psi = 0$$

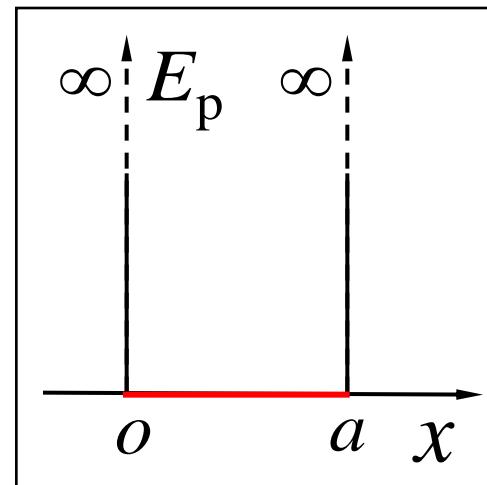
$$k = \sqrt{\frac{8\pi^2 m E}{h^2}}$$

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



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

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



波函数的**标准条件**：单值、有限和连续。

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

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

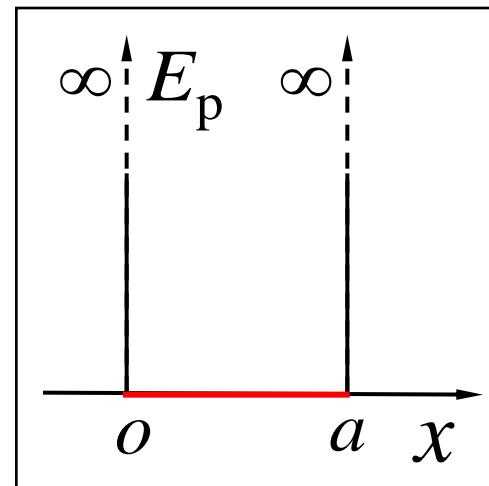


15-8 量子力学简介

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

$$\therefore \sin ka = 0$$

$$\therefore ka = n\pi$$



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

$$k = \sqrt{\frac{8\pi^2 m E}{h^2}}$$

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

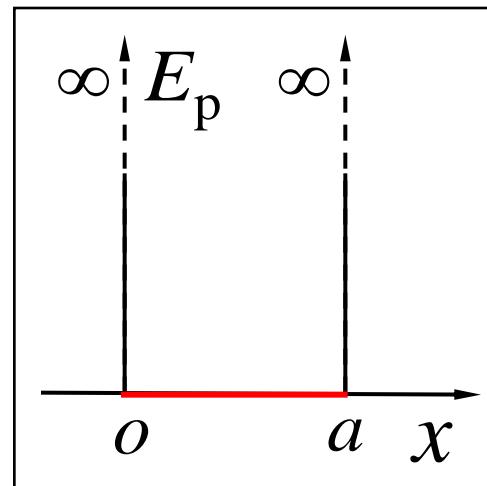


15-8 量子力学简介

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

$$k = \frac{n\pi}{a}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

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



归一化条件

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = \int_0^a \psi \psi^* dx = 1$$

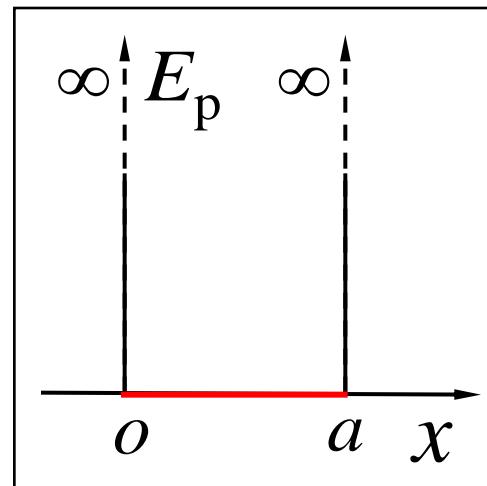
$$A^2 \int_0^a \sin^2 \frac{n\pi}{a} x dx = 1$$

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$



得 $k = \frac{n\pi}{a}$ $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$

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



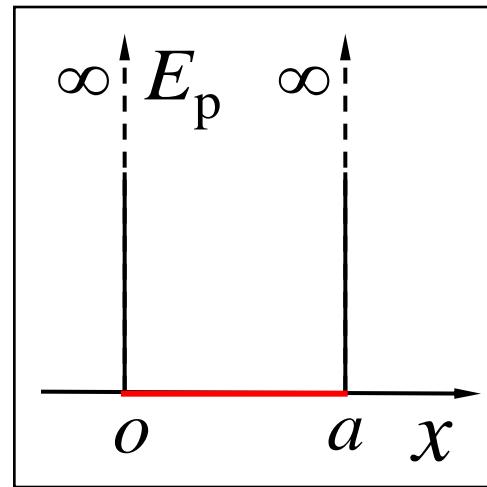
$$\therefore \psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x, \quad (0 \leq x \leq a)$$

◆ 波动方程 $\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m E}{h^2} \psi = 0$



◆ 波函数

$$\psi(x) = \begin{cases} 0, & (x \leq 0, x \geq a) \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi}{a} x, & (0 < x < a) \end{cases}$$



◆ 概率密度

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

◆ 能量

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



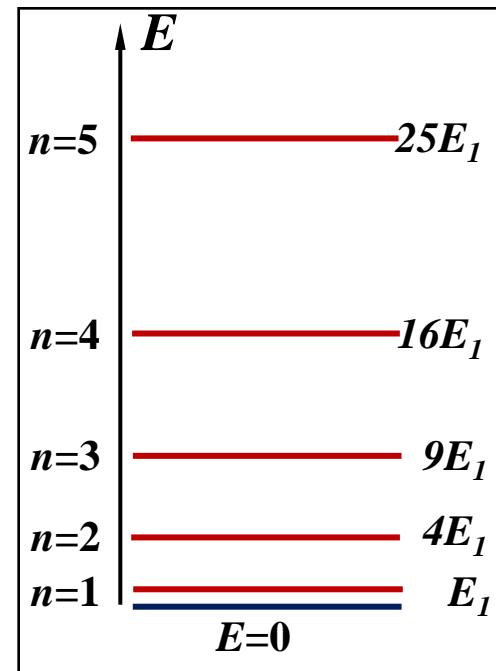
讨论：

1 粒子能量量子化

能 量 $E_n = n^2 \frac{h^2}{8ma^2}$

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

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



一维无限深方势阱中粒子的能量是量子化的。



2 粒子在势阱中各处出现的概率密度不同

波 函 数

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

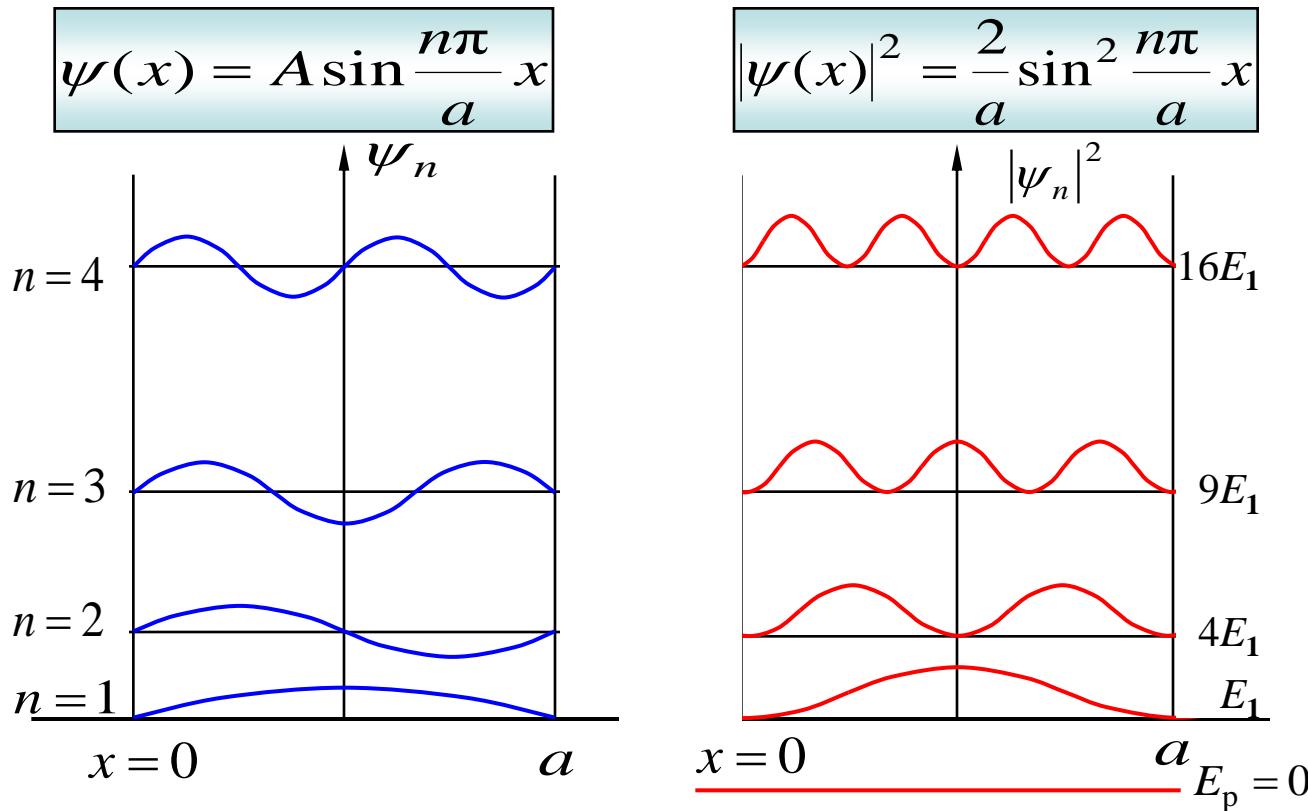
概率密度

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

例如，当 $n=1$ 时，粒子在 $x=a/2$ 处出现的概率最大



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

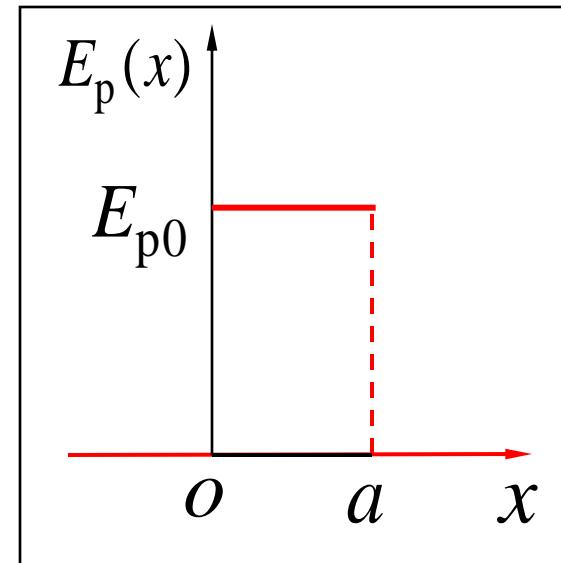




四 一维方势垒 隧道效应

一维方势垒

$$E_p(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, x > a \\ E_{p0}, & 0 \leq x \leq a \end{cases}$$

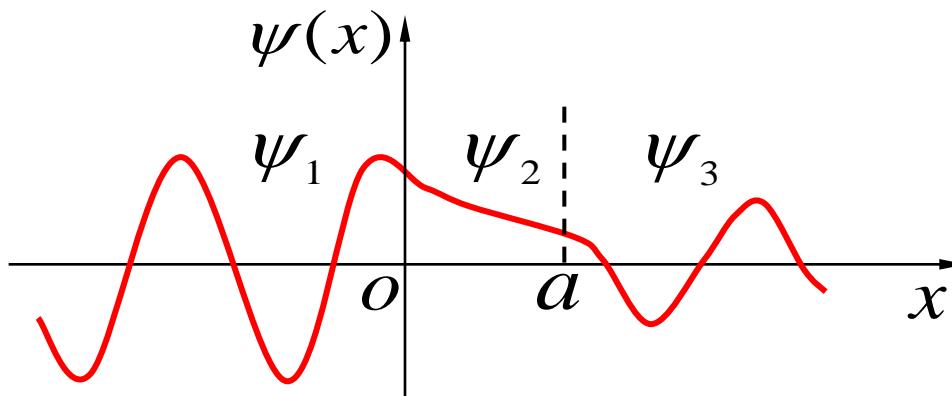


若粒子的能量 $E < E_{p0}$



隧道效应

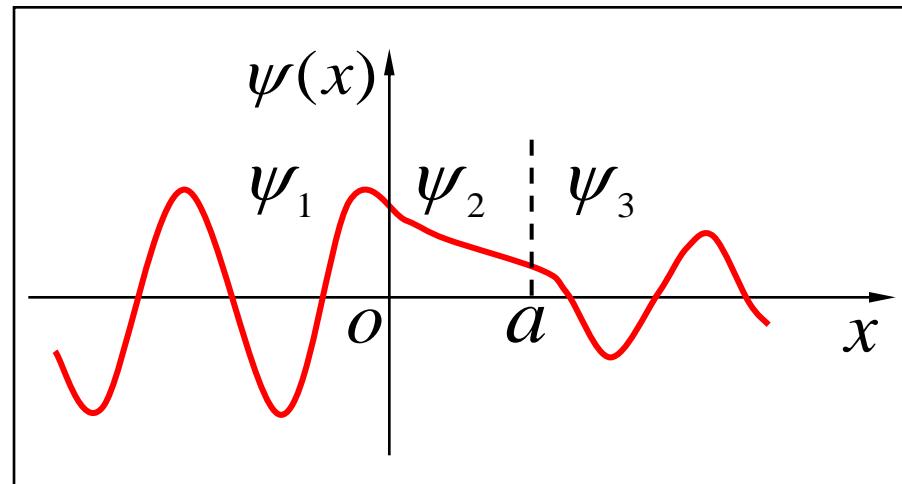
从左方射入的粒子，在各区域内的波函数



当粒子能量 $E < E_{p0}$ 时，从经典理论来看，粒子不可能穿过进入 $x > a$ 的区域。但用量子力学分析，粒子有一定概率穿透势垒，事实表明，量子力学是正确的。



粒子的能量虽不足以超越势垒，但在势垒中似乎有一个隧道，能使少量粒子穿过而进入 $x > a$ 的区域，此现象人们形象地称为隧道效应。



隧道效应的本质：来源于微观粒子的波粒二象性。



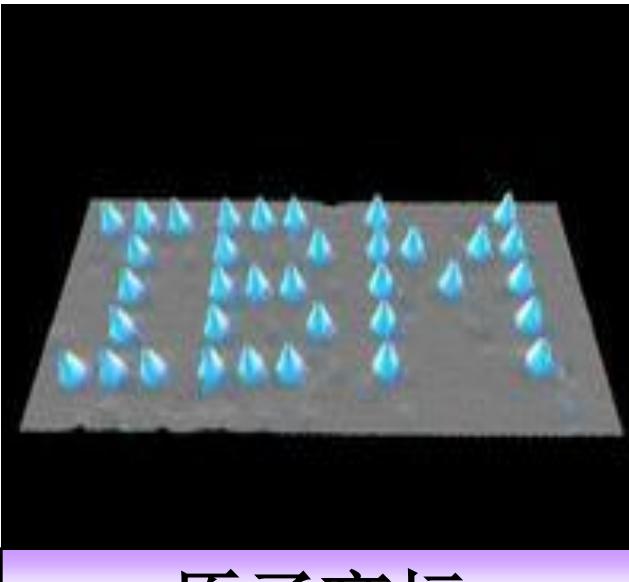
应用

1981年宾尼希和罗雷尔利用电子的隧道效应制成了扫描遂穿显微镜(STM)，可观测固体表面原子排列的状况，还可进行单原子操作，实现了初步的原子结构制造技术。

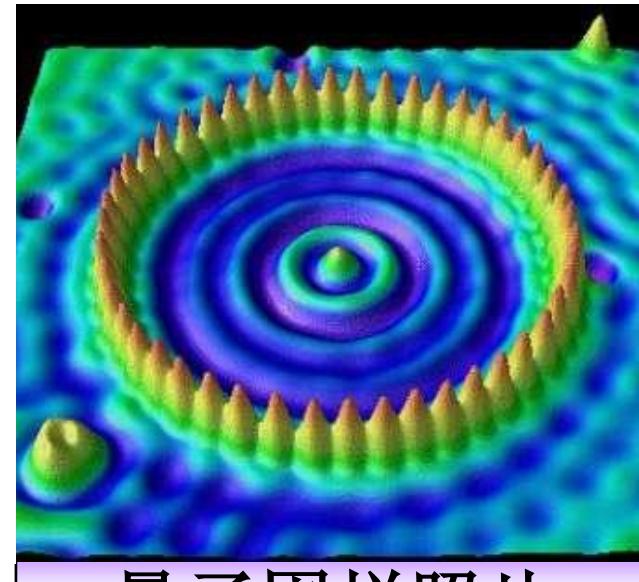
1986年宾尼希又研制了原子力显微镜。



15-8 量子力学简介



原子商标



量子围栏照片



选择进入下一节：

15-0 教学基本要求

15-1 黑体辐射 普朗克能量子假设

15-2 光电效应 光的波粒二象性

15-3 康普顿效应

15-4 氢原子的玻尔理论

*15-5 弗兰克-赫兹实验



- 15-6 德布罗意波 实物粒子的二象性
- 15-7 不确定关系
- 15-8 量子力学简介
- 15-9 氢原子的量子理论简介
- *15-10 多电子原子中的电子分布