§19.2　波函数　一维定态薛定谔方程

为什么要讨论波函数和薛定谔方程

波函数用于描述微观粒子的状态

而薛定谔方程则是量子力学最核心的方程，求解薛定谔方程可以得到微观粒子的波函数，进而可以确定微观粒子的状态。

本讲基本要求

掌握波函数的统计意义

理解薛定谔方程

19.1.2 波函数

微观粒子具有波动性 —— 1925年薛定谔 → **用物质波波函数Ψ(r,t)描述微观粒子状态**

1.自由粒子的波函数

自由粒子沿x轴正方向运动，能量（E）、动量(p)为常量，类比 $y(x,t)=A\cos 2\pi(\nu t-\frac{x}{\lambda})$

自由粒子的物质波波函数为

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

2. 非自由粒子的波函数

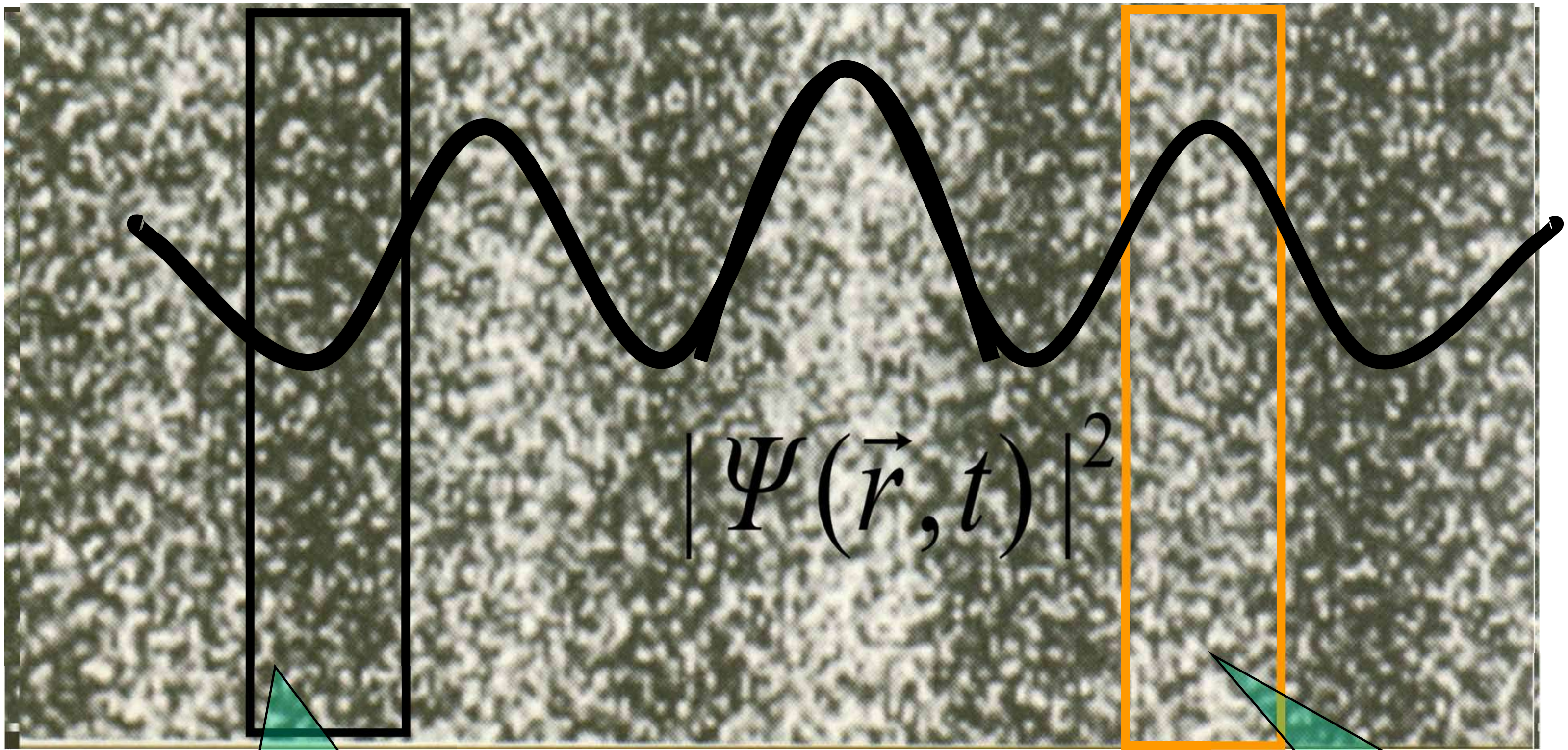
受到外力场的作用和边界条件的限制的粒子

非自由粒子同样具有波粒二象性,可以用一个波函数来描述，这是量子力学的基本假设。

显然，非自由粒子波函数显然应该取决于外力场的作用和边界条件。

3 波函数的统计解释

电子双缝干涉图样



出现概率小

电子数

N=20000

出现概率大

◆ 物质波波函数的物理意义

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

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

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

4 波函数的数学性质

- 归一化条件 (粒子在整个空间出现的概率为1)

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

- 标准条件：波函数必须单值、有限、连续

物质波与经典波

	物理意义	出现位置	叠加原理
物质波	无直接意义	概率	满足
经典波	物理量的传播	确定	满足

例：某量子数为*n* 的微观粒子的波函数为

$$\Psi_n(x)=\begin{cases}A_n\sin\dfrac{n\pi}{a}x & 0\le x\le a\\ 0 & \text{其它}\end{cases}$$

求（**1**）$\mathbf{A_n}$；

（**2**）**n=1,2,3**时粒子出现概率最大的位置。

解（**1**）**由归一化条件** $\int_{-\infty}^{+\infty}|\Psi_n(x)|^2\mathrm{d}x=1$

可得 $A_n=\pm\sqrt{a/2}$

定态波函数 $\Psi_n(x)=\pm\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi}{a}x$

（2）粒子出现概率由$\left|\Psi_n(x)\right|^2$决定

$$\left|\Psi_n(x)\right|^2 = A_{\mathrm{n}}^2 \sin^2 \frac{n\pi}{a}x \qquad 0 \le x \le a$$

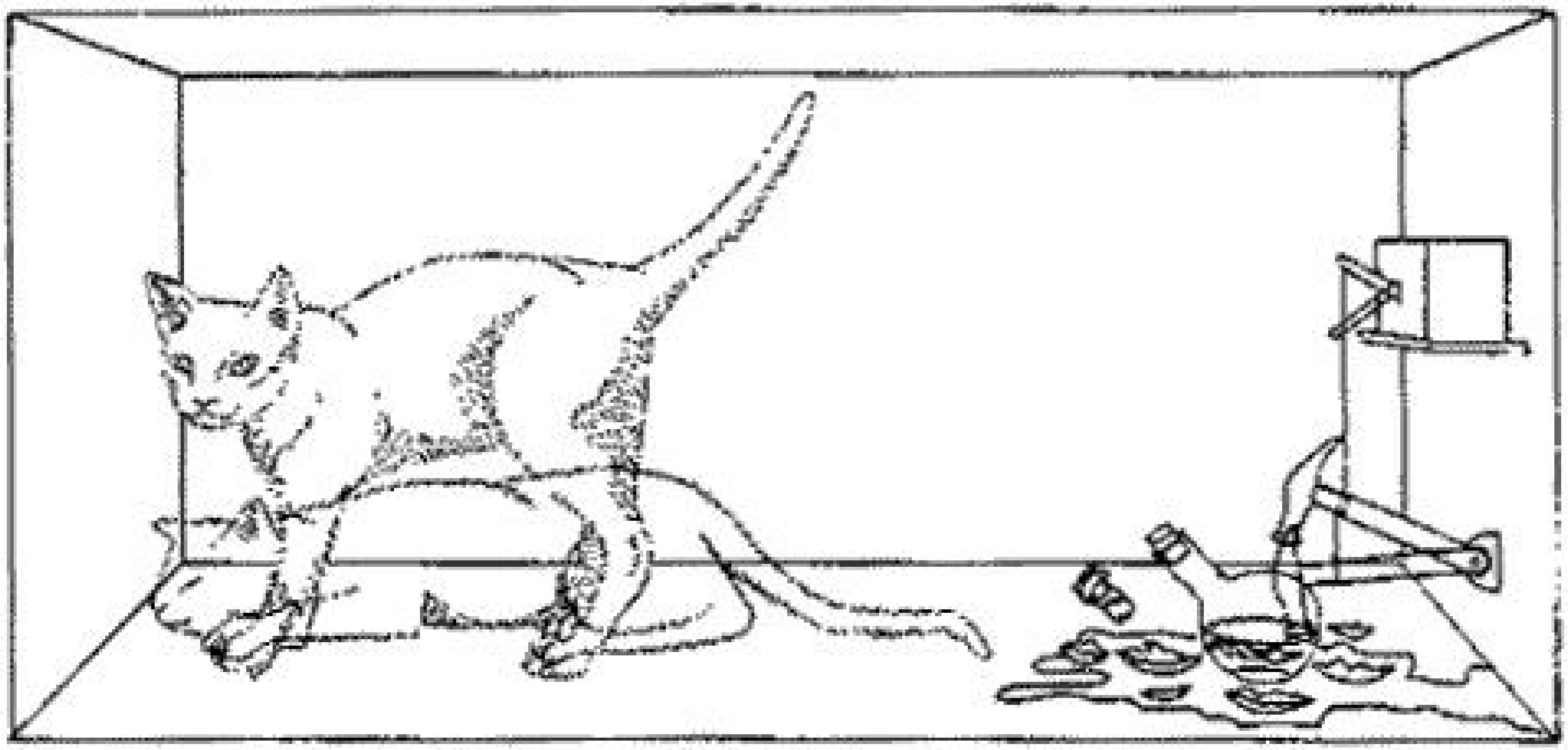
n=1时：$\left|\Psi_n(x)\right|^2 = A_{\mathrm{n}}^2 \sin^2 \frac{\pi}{a}x \qquad 0 \le x \le a$

$\left|\Psi_n(x)\right|^2$ 取极大值时 $x = \frac{a}{2}$

n=2时：$\left|\Psi_n(x)\right|^2$ 取极大值时 $x = \frac{a}{4}, \frac{3a}{4}$

n=3时：$\left|\Psi_n(x)\right|^2$ 取极大值时 $x = \frac{a}{6}, \frac{a}{2}, \frac{5a}{6}$

19.2　薛定谔方程（1926年）



19.2.1 薛定谔方程（1926年）

低速情况下，宏观粒子的状态由牛二定律确定。
牛二定律不可能由其它任何定理推导出来。
牛二定律是经典力学的核心方程。

低速情况下，微观粒子在外力场中的状态由薛定谔方程确定，薛定谔方程也不可能由其它原理推导出来。**薛定谔方程是量子力学的核心方程。**

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

质量为m，势能为 $V(\vec{r},t)$的粒子的薛定谔方程。

将$V=0$带入薛定谔方程，即可解出自由运动粒子的波函数

$$\Psi(x,y,z,t)=\Psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-p_x x-p_y y-p_z z)}=\Psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-\vec{p}\cdot\vec{r})}$$

注意：

（1）薛定谔方程是一个假设，但是几十年的实践证明了它是一个正确的量子力学基本方程。

（2）薛定谔方程是一个非相对论的基本方程，对高速运动的微观粒子不适用。

（3）只要知道了粒子的质量和它所处于的势场中的势能函数，就可以通过薛定谔方程求出微观粒子的运动状态。

19.2.2 定态薛定谔方程

粒子在稳定力场中运动，势能函数 $V(r)$、能量 E 不随时间变化，粒子处于定态 $\Psi(\vec{r},t)=\Psi(\vec{r})T(t)$

代入薛定谔方程，有

$$\frac{1}{\Psi(\vec{r})}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial}{\partial z^2}\right)+V(\vec{r})\right]\Psi(\vec{r})=\frac{i\hbar}{T(t)}\frac{\partial T(t)}{\partial t}=E$$

粒子的能量

$$\frac{\partial T(t)}{\partial t}=-i\frac{E}{\hbar}T(t) \Rightarrow T(t)\sim e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

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

$\Psi(\vec{r})$ **(定态波函数)**

19.2.2 定态薛定谔方程

- **说明**

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial}{\partial z^2}\right)\Psi(\vec{r})+\frac{2m}{\hbar}[E-V(\vec{r})]\Psi(\vec{r})=0$$

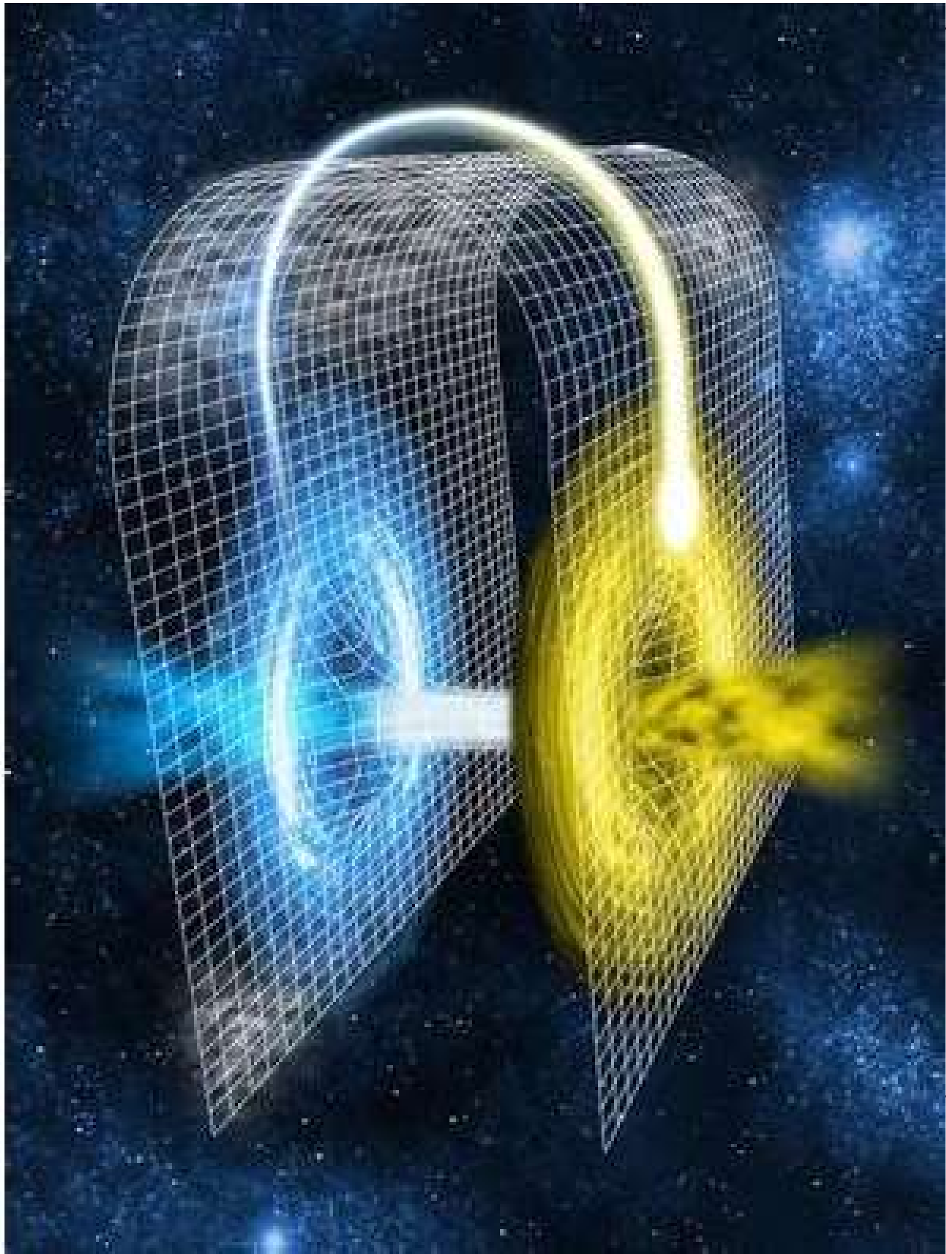
- **求解粒子能量*E*和定态波函数$\Psi(r)$。**
- **定态时，概率密度在空间上的分布稳定**

$$\left|\Psi(\vec{r},t)\right|^2=\left|\Psi(\vec{r})\right|^2 \qquad \Leftarrow \Psi(\vec{r})e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

- **一维定态薛定谔方程（粒子在一维空间运动）**

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

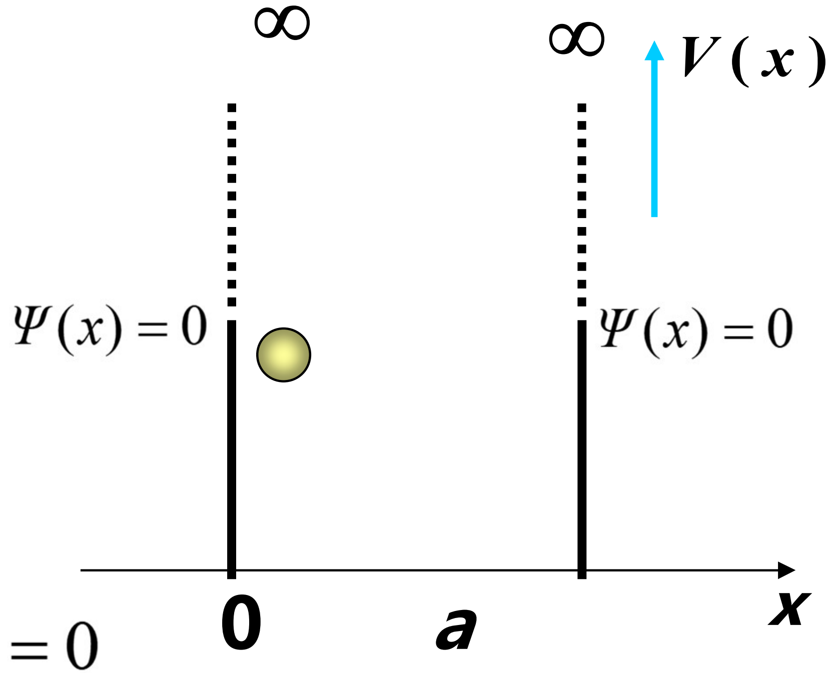
19.3 一维定态问题



19.2.4 一维无限深势阱中的粒子

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

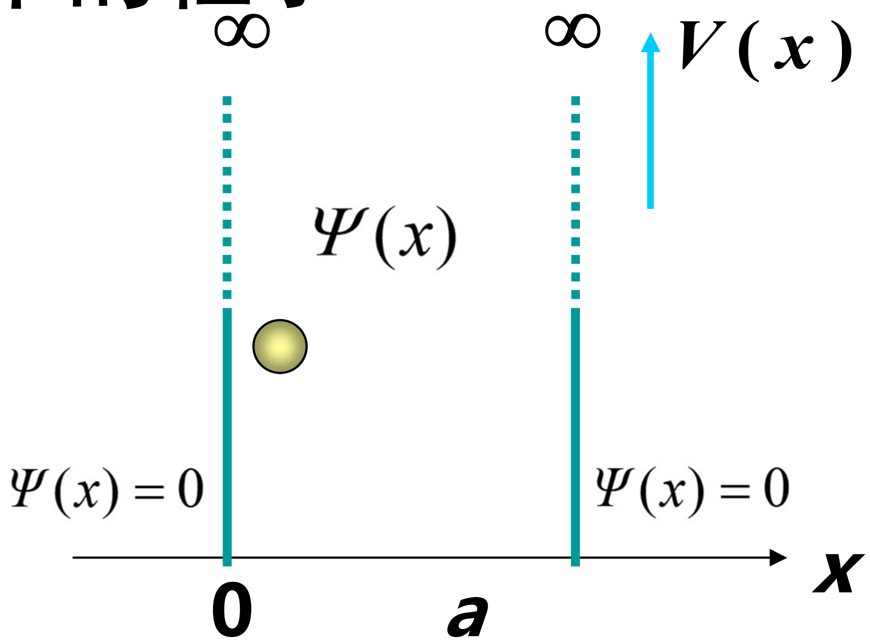
$$\boxed{\frac{\mathrm{d}^2\Psi(x)}{\mathrm{d}x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\Psi(x) = 0}$$



- $0 > x$ **或** $x > a$ **区域** $\Psi(x) = 0$
- $0 < x < a$ **区域，定态薛定谔方程为**

$$\frac{\mathrm{d}^2\Psi(x)}{\mathrm{d}x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\Psi(x) = 0 \qquad \text{令} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

19.2.4 一维无限深势阱中的粒子



解为 $\Psi(x)=A\sin kx+B\cos kx$

波函数在 $x = 0$ 处连续，有

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

所以 $B=0$

因此 $\Psi(x)=A\sin kx$

在$x=a$处连续，有

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

所以 $k=\dfrac{n\pi}{a}$

粒子的能量

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

19.2.4 一维无限深势阱中的粒子

能量量子化和定态波函数

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

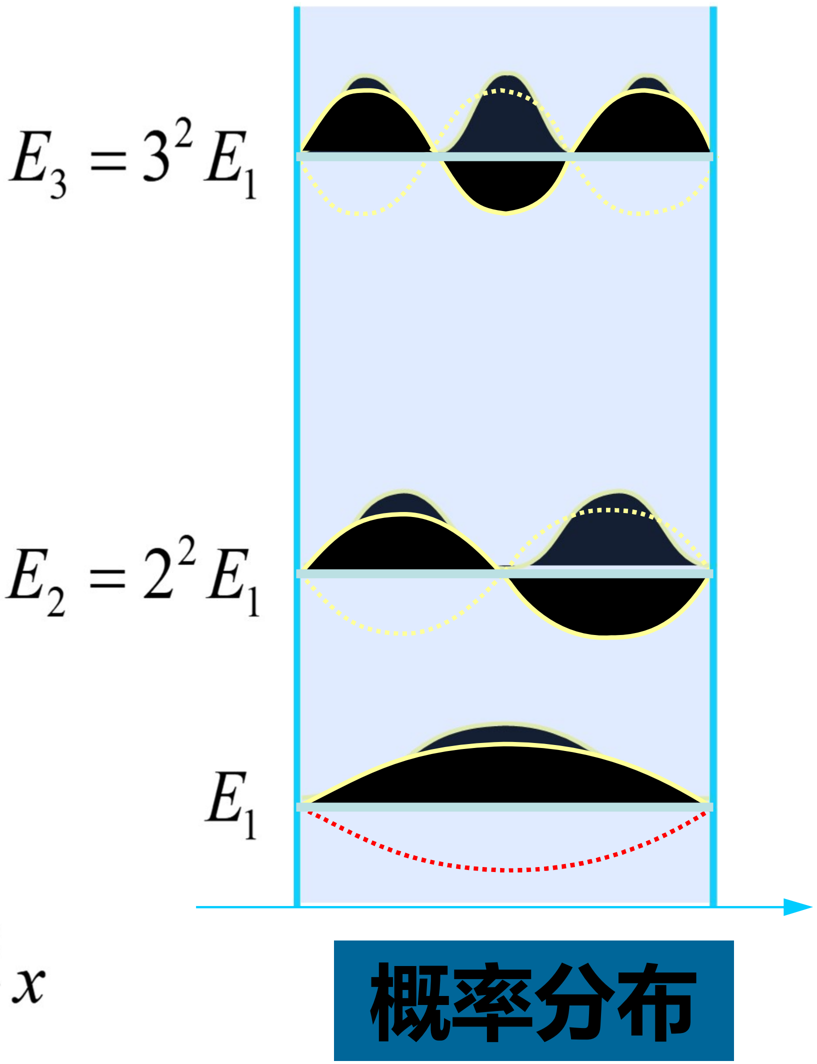
量子数为*n* 的定态波函数为

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

由归一化条件 $\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi_n(x)|^2 \mathrm{d}x = 1$

可得 $A_n = \pm\sqrt{a/2}$

定态波函数 $\Psi_n(x) = \pm\sqrt{\frac{2}{a}} \sin\frac{n\pi}{a}x$



19.2.4 一维无限深势阱中的粒子

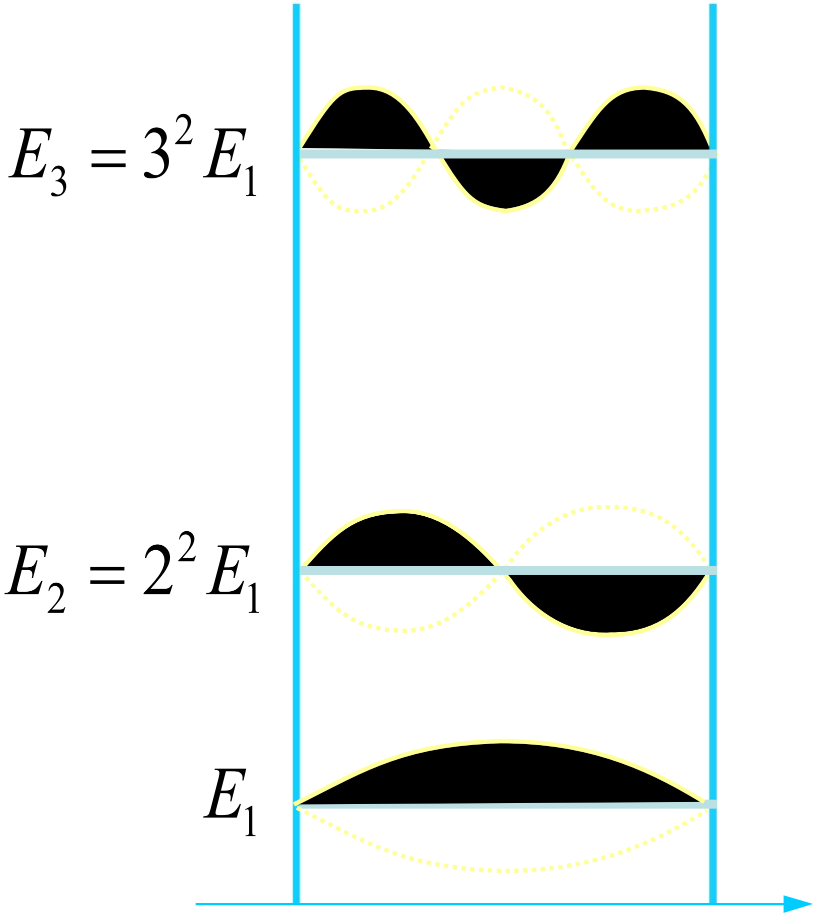
- **一维无限深势阱粒子的驻波特征**

$$\lambda_1 = 2a \qquad \lambda_2 = a \qquad \lambda_n = \frac{2a}{n}$$

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

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

$$p_n = n\frac{h}{2a} \qquad \lambda_n = \frac{h}{p_n} = \frac{2a}{n}$$



波函数

小结

$|\Psi(\vec{r},t)|^2$ —— t 时刻，粒子在空间 r 处的单位体积中出现的概率。波函数必须满足单值、连续、有限。

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

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