

大学物理

张磊 (13072919527)

B824, Cyrus Tang Building



薛定谔方程 (1926年)

描述低速，在外力场中运动的微观粒子的微分方程
(即对应的波函数满足的微分方程)

质量 m 的粒子在外力场中运动，势能函数 $V(\vec{r}, t)$

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

—— 薛定谔方程

★ 量子力学的基本定律，它不可能由更基本的原理经过逻辑推理得到。

下面通过对自由粒子物质波波函数微分得到相应的自由粒子应满足的薛定谔方程。



The Nobel Prize
in Physics 1933

例：沿 x 轴正方向运动的自由粒子 $\Psi(x,t) = \Psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)}$

沿 \vec{r} 方向自由运动的粒子

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

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E\Psi, \text{ 其中 } E \text{ 是自由粒子的能量, 即 } E = \frac{p^2}{2m}$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{i}{\hbar} p_x \Psi, \quad \frac{\partial \Psi}{\partial y} = \frac{i}{\hbar} p_y \Psi, \quad \frac{\partial \Psi}{\partial z} = \frac{i}{\hbar} p_z \Psi$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{1}{\hbar^2} p_x^2 \Psi, \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} = -\frac{1}{\hbar^2} p_y^2 \Psi, \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = -\frac{1}{\hbar^2} p_z^2 \Psi$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} = -\frac{1}{\hbar^2} p^2 \Psi = -\frac{1}{\hbar^2} 2mE\Psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right) = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad \text{自由粒子满足的薛定谔方程}$$

● 定态、定态波函数、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，定态波函数写为

定态薛定谔方程 $\Psi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r})T(t) = \Psi(\vec{r})e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$

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

粒子能量

描述外力场的势能函数



讨论

(1) 求解: E (粒子能量) $\Psi(\vec{r})$ (定态波函数)

(2) 定态时，概率密度在空间上的分布稳定

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

(3) 一维定态薛定谔方程 (粒子在一维空间运动)

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

平均值 算符

问题：已知一维粒子位置波函数 $\psi(x)$ ，位置和动量平均值？

位置平均值 $\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 x dx$

位置函数的平均值 $\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 f(x) dx$

动量平均值？ $\langle p_x \rangle \neq \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 p_x dx$ x 处动量不确定，
 p_x 没有定义！

解决：利用动量空间的波函数 $\varphi(p)$ $\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(p)|^2 p dp$

傅立叶变换

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ipx/\hbar} \varphi(p) dp \\ \varphi(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ipx/\hbar} \psi(x) dx\end{aligned}$$

回到坐标空间：

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(p) p \varphi(p) dp$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) e^{ipx/\hbar} dx \right] p \varphi(p) dp$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ipx/\hbar} p \varphi(p) dp \right] dx$$

$$\downarrow \quad \frac{d}{dx} \psi(x) = \frac{i}{\hbar} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ipx/\hbar} p \varphi(p) dp$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi(x) dx$$

$$\psi(x) \rightarrow |\psi\rangle$$

定义动量算符 $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ $\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \hat{p} \psi(x) dx = \langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle$

$$\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ipx/\hbar} \psi(x) dx$$
$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ipx/\hbar} \varphi(p) dp$$

➤ 推广：力学量用算符表示

$$\langle F(\vec{r}, \vec{p}) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(\vec{r}) \left[\hat{F}(\vec{r}, \vec{p}) \psi(\vec{r}) \right] d^3\vec{r}$$

动量算符

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \quad \hat{p} = -i\hbar \nabla$$

能量算符

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}, t) \equiv \hat{H} \quad \text{哈密顿量}$$

薛定谔方程

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}, t) = E\Psi(\vec{r}, t)$$

算符的对易关系:

对于任意的波函数, 如果把算符看做一种变换, 那么一个算符作用于一个波函数, 将会得到新的一个波函数。因此, 多个算符作用于波函数, 很多情况下是不可以调换顺序的。

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \begin{cases} = 0 \dots \dots \hat{A}, \hat{B} & \text{对易} \\ \neq 0 \dots \dots \hat{A}, \hat{B} & \text{不对易} \end{cases}$$

1. 坐标算符 \hat{x} 和动量算符 \hat{p}_x 的对易关系 $[\hat{x}, \hat{p}_x] = ?$

将 $[\hat{x}, \hat{p}_x] = \hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x}$ 作用在任意波函数 $\Psi(x)$ 上, 即:

$$\begin{aligned} (\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x})\Psi(x) &= x(-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} (x\Psi(x)) \\ &= \frac{\hbar}{i} x \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) - \frac{\hbar}{i} x \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) - \frac{\hbar}{i} \Psi(x) \\ &= i\hbar \Psi(x) \end{aligned}$$

而 $\Psi(x)$ 是任意的，因此：
$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$$

该式称为 \hat{x} 和 \hat{p}_x 的对易关系，等式右边不等于0，即 \hat{x} 和 \hat{p}_x 不对易。同样可得：
$$[\hat{y}, \hat{p}_y] = i\hbar$$

$$[\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar$$

$$[\hat{x}, \hat{p}_y] = [\hat{x}, \hat{p}_z] = 0$$

$$[\hat{y}, \hat{p}_z] = [\hat{y}, \hat{p}_x] = 0$$

$$[\hat{z}, \hat{p}_y] = [\hat{z}, \hat{p}_x] = 0$$

$$[\hat{p}_x, \hat{p}_y] = [\hat{p}_x, \hat{p}_z] = [\hat{p}_y, \hat{p}_z] = 0$$

以上可总结为基本对易关系：

$$\begin{cases} [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij} & i, j = 1, 2, 3 \\ [\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0 \\ [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \end{cases}$$

即动量分量和它所对应的坐标分量是不对易的，而和不对应的坐标分量是对易的；动量各分量和坐标各分量是对易的。

说明：a. $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ 称为 \hat{A} 与 \hat{B} 的对易关系，等于 0 称二算符对易；否则称二算符不对易。

b. 以上 \hat{x}_i 和 \hat{p}_j 的对易关系是量子力学算符的基本对易关系，由它们可以推出其他的一些算符（与经典对应的）对易关系。

➤ 推广：力学量用算符表示

$$\langle F(r) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(r, p) [\hat{F}(r, p) \psi(r)] d^3r$$

不确定性原理 (Uncertainty principle) (1927年)

海森堡 (Heisenberg 1901 - 1976) ,
德国人, 提出微观世界的测不准原理, 与
波恩共创矩阵力学, 获1932年诺贝尔物理学奖。



若两算符不对易，则一般它们没有共同的本征态，即不可能同时具有确定值。

一个确定（如自由粒子） \vec{p} ，另一个不确定（如 \vec{r} ），形成一种按可能值的统计分布；或二者均无定值，都形成按自己的可能值的一种统计分布（如谐振子原子中电子的 \vec{r}, \vec{p} ）。下面确定两个不对易的力学量的统计分布范围之间的一般关系——测不准关系（不确定关系）。

➤ 力学量 F 的标准差：不确定度

$$\Delta F = \sqrt{\langle (F - \langle F \rangle)^2 \rangle}$$

若算符 \hat{A} 与 \hat{B} 是不对易的，可以证明（见下页ppt）：

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq \langle [A, B]/i \rangle^2 / 4$$

即：
$$\Delta A \cdot \Delta B \geq |\langle [A, B] \rangle| / 2$$

以位置算符和动量算符为例： $[\hat{x}, \hat{p}_x]/i = \hbar$

因此：
$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq |\langle [A, B] \rangle| / 2 = \hbar / 2$$

这表明坐标和动量无法同时测准。

而时间与能量也是一对对偶量，它们的对易关系为：

$$[\hat{E}, \hat{t}] = i\hbar$$

所以对于能量和时间也同样具有不确定性关系：

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar / 2$$

1.一般数学推导关系:

设 \hat{F}, \hat{G} 是代表两力学量的厄米算符, 且它们的对易关系为:

$$[\hat{F}, \hat{G}] = \hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F} = i\hat{k} \quad (1)$$

其中 \hat{k} 是厄米算符或普通的数。再设 Ψ 为归一化的波函数, 则 $\hat{F}, \hat{G}, \hat{k}$ 在 Ψ 态的平均值分别为:

$$\bar{F} = \int \Psi^* \hat{F} \Psi d\tau; \quad \bar{G} = \int \Psi^* \hat{G} \Psi d\tau; \quad \bar{k} = \int \Psi^* \hat{k} \Psi d\tau$$

定义偏差算符: $\Delta\hat{F} = \hat{F} - \bar{F}, \quad \Delta\hat{G} = \hat{G} - \bar{G} \quad (2)$

其中 $\Delta\hat{F}, \Delta\hat{G}$ 都是厄米的。

考虑这样一个积分：

$$0 \leq I(\xi) = \int \left| (\xi \Delta \hat{F} - i \Delta \hat{G}) \Psi \right|^2 d\tau \quad (3)$$

(ξ 是实参数，积分区域是变量变化的整个空间)

则：

$$\begin{aligned} I(\xi) &= \int [(\xi \Delta \hat{F} - i \Delta \hat{G}) \Psi]^* [(\xi \Delta \hat{F} - i \Delta \hat{G}) \Psi] d\tau \\ &= \int [\xi (\Delta \hat{F} \Psi)^* + i (\Delta \hat{G} \Psi)^*] [\xi (\Delta \hat{F} \Psi) - i (\Delta \hat{G} \Psi)] d\tau \\ &= \int [\xi^2 (\Delta \hat{F} \Psi)^* (\Delta \hat{F} \Psi) - i \xi (\Delta \hat{F} \Psi)^* (\Delta \hat{G} \Psi) \\ &\quad + i \xi (\Delta \hat{G} \Psi)^* (\Delta \hat{F} \Psi) + (\Delta \hat{G} \Psi)^* (\Delta \hat{G} \Psi)] d\tau \end{aligned}$$

由 (2)

$$\begin{aligned} &= \xi^2 \int \Psi^* (\Delta \hat{F})^2 \Psi d\tau - i \xi \int \Psi^* (\Delta \hat{F} \Delta \hat{G}) \Psi - \Psi^* (\Delta \hat{G} \Delta \hat{F}) \Psi d\tau \\ &\quad + \int \Psi^* (\Delta \hat{G})^2 \Psi d\tau \end{aligned}$$

即
$$I(\xi) = \xi^2 \overline{(\Delta\hat{F})^2} - i\xi \overline{[\Delta\hat{F}, \Delta\hat{G}]} + \overline{(\Delta\hat{G})^2} \quad (4)$$

又因为
$$\begin{aligned} [\Delta\hat{F}, \Delta\hat{G}] &= [\hat{F} - \bar{F}, \hat{G} - \bar{G}] = [\hat{F}, \hat{G}] - [\hat{F}, \bar{G}] - [\bar{F}, \hat{G}] + [\bar{F}, \bar{G}] \\ &= [\hat{F}, \hat{G}] = i\hat{k} \end{aligned}$$

于是(4)可写为:
$$I(\xi) = \overline{(\Delta\hat{F})^2} \xi^2 + \bar{k} \xi + \overline{(\Delta\hat{G})^2} \geq 0$$

而根据代数二次式理论可知, 要使不等式

$$a\xi^2 + b\xi + c \geq 0, \quad \text{即} \quad a\left[\left(\xi + \frac{b}{2a}\right)^2 + \frac{c}{a} - \frac{b^2}{4a^2}\right] \geq 0, \quad (a > 0)$$

成立, 系数必须满足条件: $c - \frac{b^2}{4a} \geq 0$, 即 $\Delta = b^2 - 4ac \leq 0$

于是有: $\Delta = \bar{k}^2 - 4 \overline{(\Delta\hat{F})^2} \cdot \overline{(\Delta\hat{G})^2} \leq 0$, 即

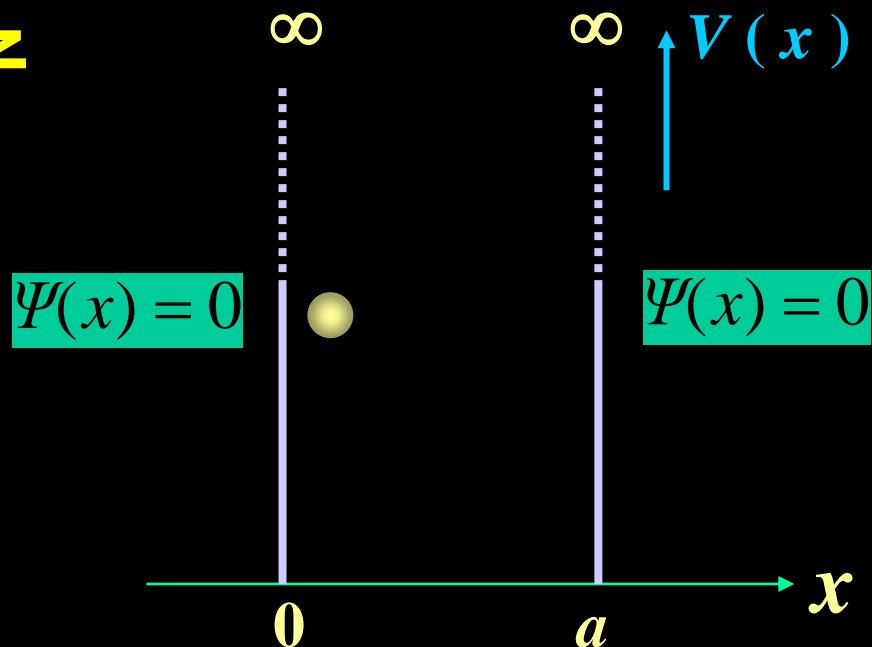
$$\overline{(\Delta\hat{F})^2} \cdot \overline{(\Delta\hat{G})^2} \geq \frac{\bar{k}^2}{4}$$

此即为 \hat{F}, \hat{G} 的测不准关系。

三. 一维无限深势阱中的粒子

势能函数

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



$x < 0$ 或 $x > a$ 区域 $\Psi(x) = 0$

$0 < x < a$ 区域, 定态薛定谔方程为

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

$$\text{令 } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

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

解为

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

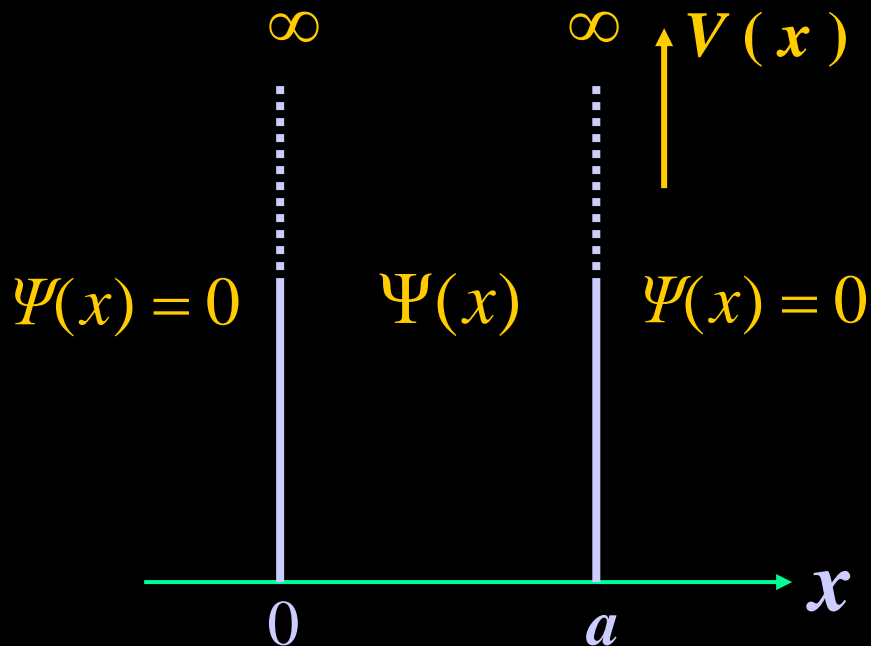
波函数在 $x = 0$ 处连续, 有

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

$$\therefore B = 0$$

因此 $\psi(x) = A \sin kx$

在 $x = a$ 处连续, 有



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

所以 $k = \frac{n\pi}{a}$

而 $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

粒子能量

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

✦ 能量是不连续的，
是量子化的

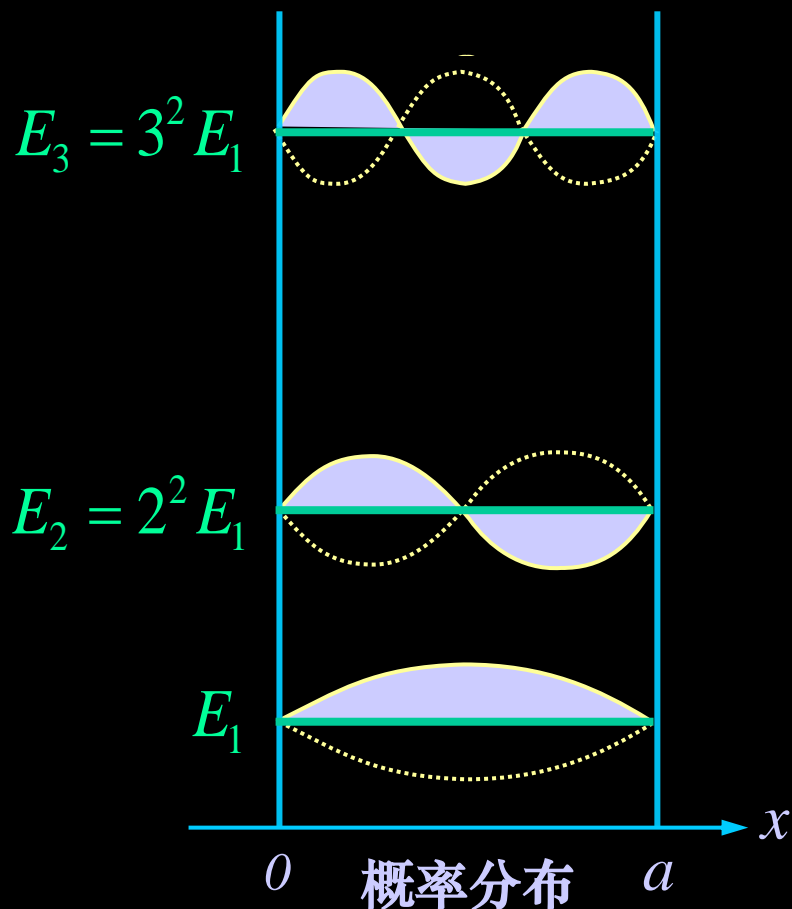
量子数为 n 的定态波函数为

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

由归一化条件

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

可得 $A_n = \pm \sqrt{2/a}$



波函数

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

$$\Psi(x=0) = \Psi(x=a) = 0$$

→ 波节

驻波条件

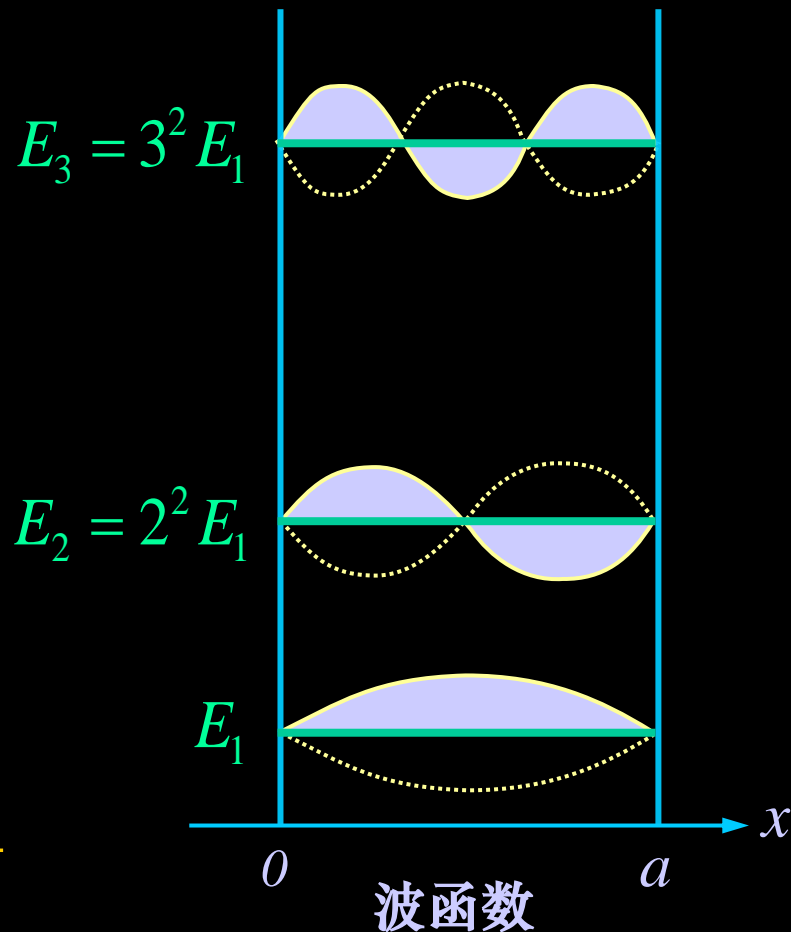
$$\left. \begin{array}{l} n \frac{\lambda}{2} = a \\ \lambda = \frac{h}{p} \end{array} \right\} \Rightarrow p = \frac{h}{\lambda} = \frac{nh}{2a}$$

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

基态能量

$$E_1 = \frac{h^2}{8ma^2} \neq 0$$

← 不确定关系: x 的确定性不为零, 所以 p_x 的确定性不为零



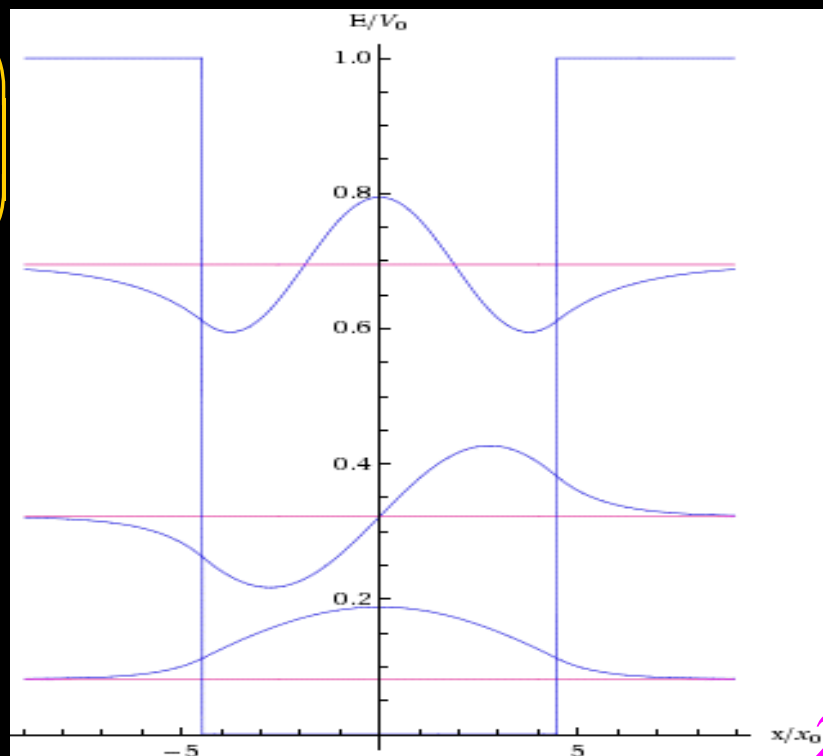
推广1： 三维无限深方势阱

$$\begin{cases} V(\mathbf{r}) = 0 & 0 < x < L_x, \quad 0 < y < L_y, \quad 0 < z < L_z \\ V(\mathbf{r}) = \infty & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \Psi_{n_x n_y n_z} = \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L_y}\right) \sin\left(\frac{n_z \pi z}{L_z}\right) \\ E_{n_x n_y n_z} = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right) \end{cases}$$

推广2： 有限深方势阱

$$\begin{cases} V(x) = 0 & 0 < x < a \\ V(x) = V_0 & x < 0 \text{ 或 } x > a \end{cases}$$



扩展之例1. 隧道效应（势垒贯穿）



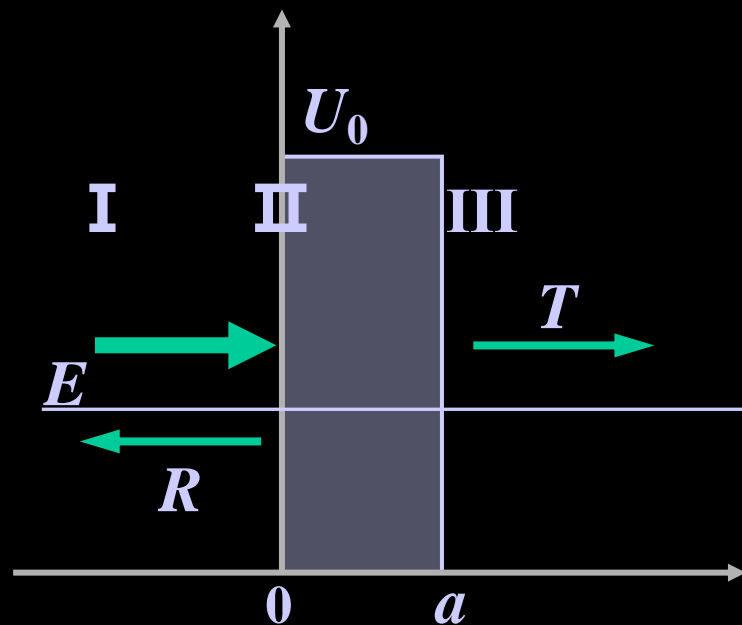
这样的场景可在量子世界中真实存在！

一维方势垒势垒

I 区 $U(x) = 0 \quad x \leq 0$

II 区 $U(x) = U_0 \quad 0 \leq x \leq a$

III 区 $U(x) = 0 \quad x \geq a$



$$T + R = 1$$

入射粒子一部分透射到达 III 区，另一部分被势垒反射回 I 区

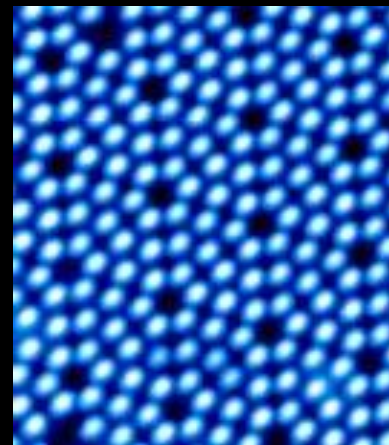
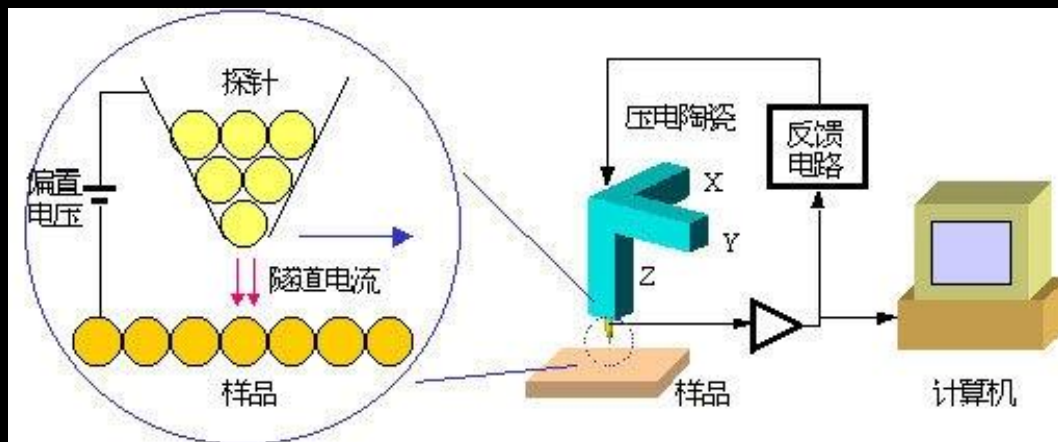
★讨论

- (1) $E > U_0, R \neq 0 \rightarrow$ 即使粒子总能量大于势垒高度，入射粒子并非全部透射进入 III 区，仍有一定概率被反射回 I 区。
- (2) $E < U_0, T \neq 0 \rightarrow$ 虽然粒子总能量小于势垒高度，入射粒子仍可能穿过势垒进入 III 区 — 隧道效应

(3) 透射系数 T 随势垒宽度 a 、粒子质量 m 和能量差变化，
随着势垒的加宽、加高，透射系数减小。

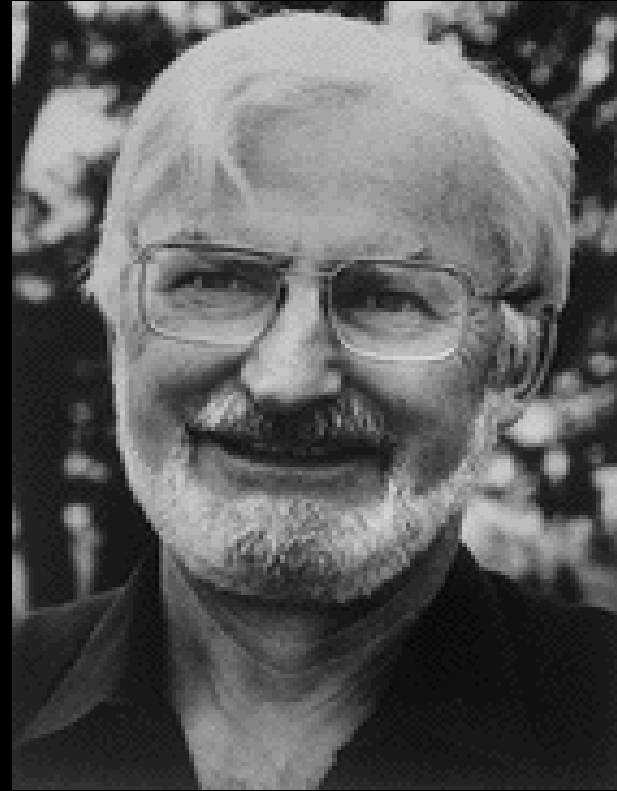
粒子类型	粒子能量	势垒高度	势垒宽度	透射系数
电子	1eV	2eV	$5 \times 10^{-10}\text{m}$	0.024
	1eV	2eV	$2 \times 10^{-10}\text{m}$	0.51
质子	1eV	2eV	$2 \times 10^{-10}\text{m}$	3×10^{-38}

应用：扫描隧道电子显微镜 (STM)



分辨率：
水平
 $<0.1\text{nm}$
垂直
 $<0.001\text{nm}$

The Nobel Prize in Physics 1986



STM的出现，使人类首次能够实时观察单个原子在物质表面上的排列状态以及与表面电子行为有关的性质，在表面、微电子、材料、生命科学等领域研究中具有重大意义和应用前景。

例 设质量为 m 的微观粒子处在宽度为 L 的一维无限深势阱中，
求 (1) 粒子在 $0 \leq x \leq L/4$ 区域中出现的概率？

(2) 在哪些量子态上， $L/4$ 处的概率密度最大？

解 (1) 已知粒子的定态波函数 概率密度为

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x \quad \Rightarrow \quad \omega = |\psi(x)|^2 = \frac{2}{L} \sin^2 \frac{n\pi}{L} x$$

在 $0 \leq x \leq L/4$ 区域中出现的概率

$$P = \int_0^{L/4} \omega dx = \int_0^{L/4} \frac{2}{L} \sin^2 \frac{n\pi}{L} x dx = \frac{1}{4} - \frac{1}{2\pi n} \sin \frac{n\pi}{2}$$

(2) 在 $L/4$ 处的概率密度：

$$\omega\left(\frac{L}{4}\right) = \frac{2}{L} \sin^2 \frac{n\pi}{L} \cdot \frac{L}{4} \quad \xrightarrow{\text{概率密度最大对应}} \quad \sin \frac{n\pi}{4} = \pm 1$$

$$\text{概率密度最大的量子态 } n=2, 6, 10, \dots \quad \leftarrow \quad \frac{n\pi}{4} = (2k+1)\frac{\pi}{2}$$

例 一粒子沿 x 方向运动, 其波函数为 $\varphi(x) = c \frac{1}{1+ix}$ $(-\infty < x < \infty)$

求 (1) 归一化常数 c 。

(2) 发现粒子密度概率最大的位置。

(3) 在 $x=0$ 到 $x=1$ 之间粒子出现的概率。

解 (1) 由归一化条件有 $\int |\varphi|^2 dV = 1$

一维情况下 $\int_{-\infty}^{\infty} c^2 \left| \frac{1}{1+ix} \right|^2 dx = 1 = 2c^2 \frac{\pi}{2} = \pi c^2 \quad c = \frac{1}{\sqrt{\pi}}$

(2) 概率密度 $\rho(x) = |\varphi(x)|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{1+ix} \right|^2 = \frac{1}{(1+x^2)\pi}$

$$\frac{d\rho(x)}{dx} = -\frac{1}{\pi} \frac{2x}{(1+x^2)^2} \quad x=0, \quad \rho_{\max}(0)$$

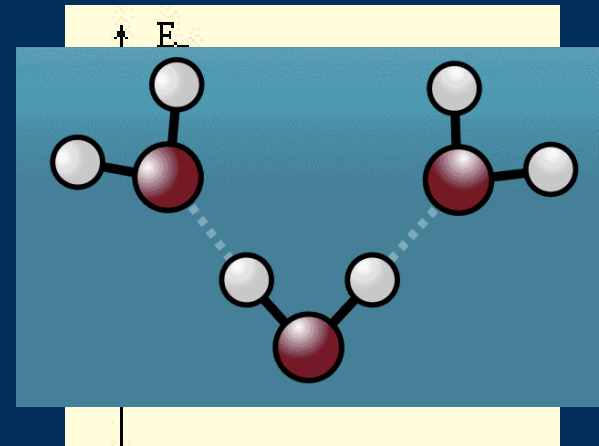
(3) 在 $x=0$ 到 $x=1$ 之间粒子出现的概率为

$$w = \int_0^1 |\varphi(x)|^2 dx = \int_0^1 \frac{1}{\pi} \frac{dx}{1+x^2} = 25\%$$

扩展之例2. 一维线性谐振子

在稳定平衡位置附近的微振动可简化为线性谐振子来处理。

例如：原子核内质子和中子的振动、原子和分子的振动、固体晶格中离子的振动等



1. 经典谐振子

$$F = -kx$$

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

m — 振子质量

ω — 固有频率

x — 位移

2. 量子模型

哈密顿量:
$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} kx^2 = E$$

定态薛定谔方程:
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2 \psi = E\psi$$

3. 波函数

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} H_n(\xi)$$

其中 $\xi = \sqrt{m\omega/\hbar} x = \alpha x$,

$H_n(\xi)$ 为厄米多项式

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}$$

n	$H_n(\xi)$
0	A_0
1	$A_1 \xi$
2	$A_2 (1 - 2\xi^2)$
3	$A_3 (3\xi - 2\xi^3)$
4	$A_4 (3 - 12\xi^2 + 4\xi^4)$

4. 能量量子化

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

$$\Delta E = \hbar\omega = h\nu$$

零点能



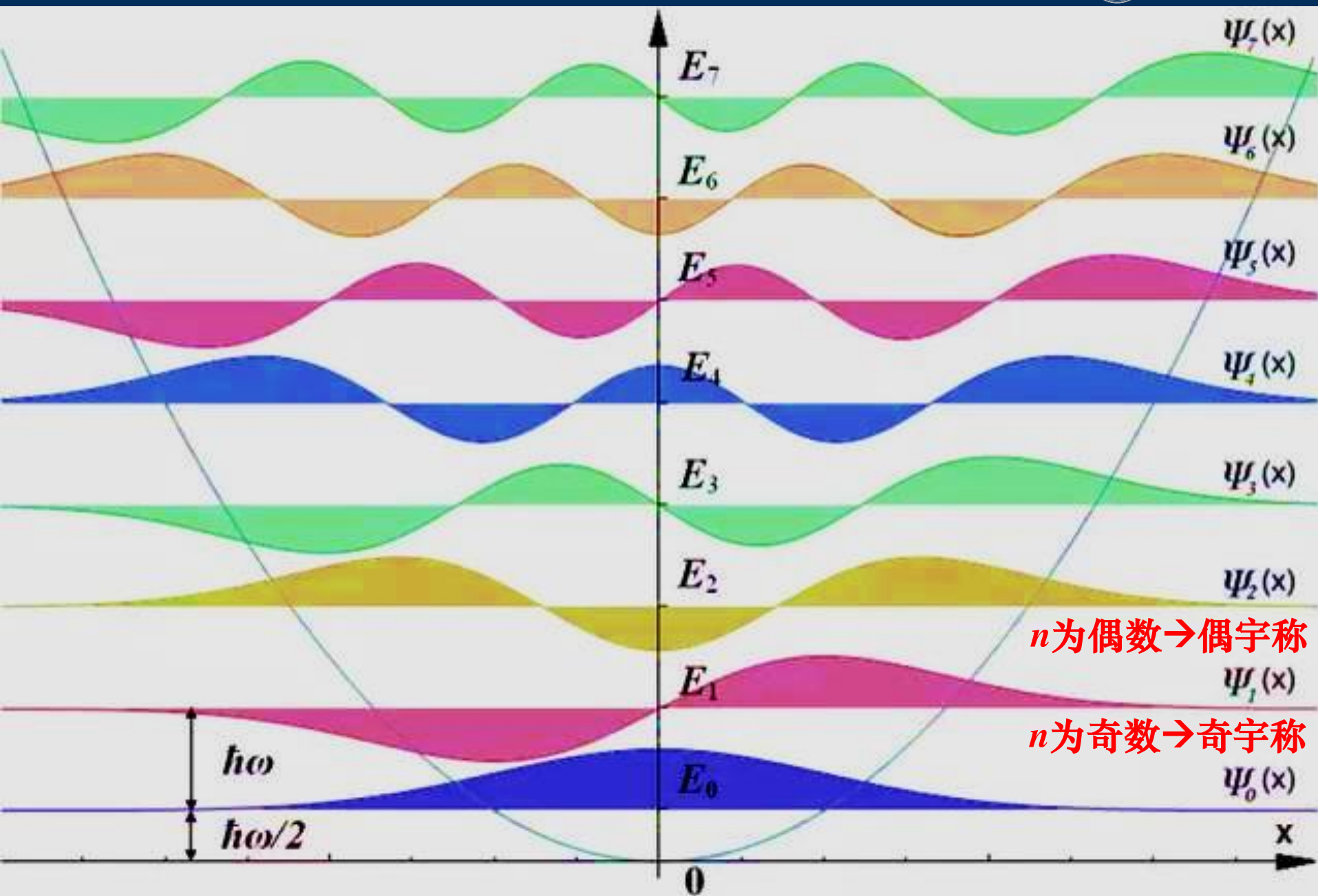
说明 普朗克量子化假设
量子物理计算结果

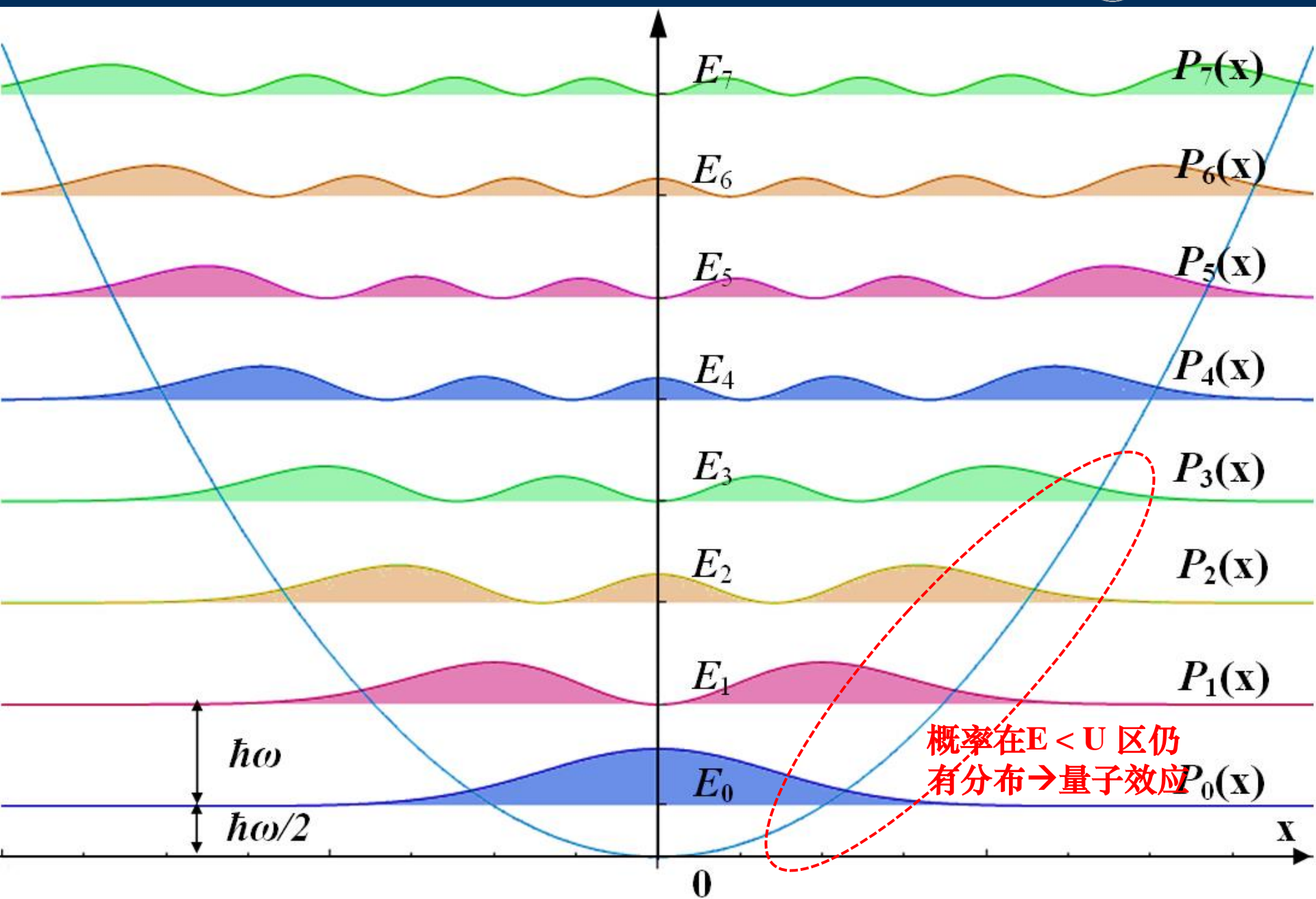
$$E_n = nh\nu$$

$$E_0 = 0$$

$$E_n = (n + 1/2)h\nu$$

$$E_0 = h\nu/2$$





扩展之例3. 氢原子

$$\begin{cases} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \Psi = 0 \\ V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \end{cases}$$

球坐标的定态薛定谔方程

$$\begin{aligned} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) \\ + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \Psi = 0 \end{aligned}$$

1. 能量量子化

能量 $E_n = -\frac{1}{n^2} \left(\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \right) = -\frac{E_1}{n^2}$

主量子数 $n = 1, 2, 3, \dots$

波函数 $\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$

电子云 电子云密度 \longleftrightarrow 概率密度 $\Psi_{nlm}^2(r, \theta, \varphi)$

$$r_1 = 0.529 \times 10^{-10} \text{ m}$$

$$r_2 = 4r_1 \quad r_3 = 9r_1 \quad \dots\dots$$

电子在这些地方
出现的概率最大

→ 玻尔氢原子理论中，电子的轨道位置

2. 角动量量子化

电子绕核转动的角动量 \vec{L} 的大小

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar$$

角量子数 $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$

3. 角动量空间量子化

角动量 \vec{L} 的在外磁场方向(z)的投影

$$L_z = m_l \hbar$$

磁量子数 $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$

例如 $l=2$ 电子角动量的大小及空间取向？

\vec{L} 的大小

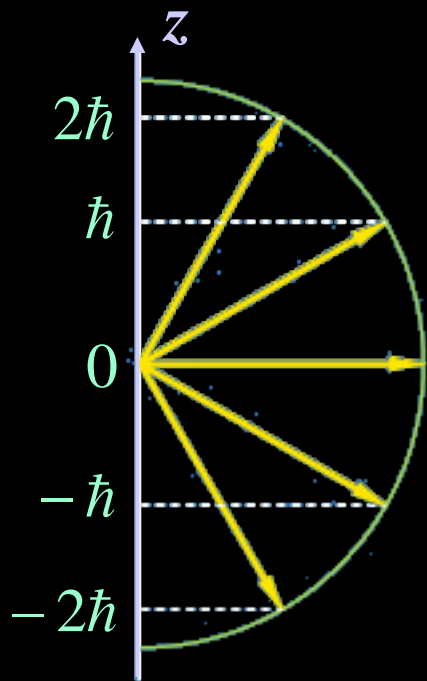
$$L = \sqrt{2(2+1)}\hbar = \sqrt{6}\hbar$$

磁量子数

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2$$

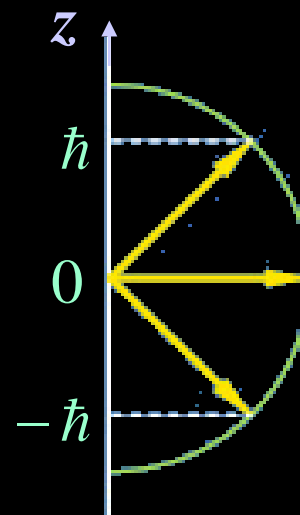
\vec{L} 在 z 方向的投影

$$L_z = 2\hbar, \hbar, 0, -\hbar, -2\hbar$$



$$L = \sqrt{6}\hbar$$

$$l = 2$$

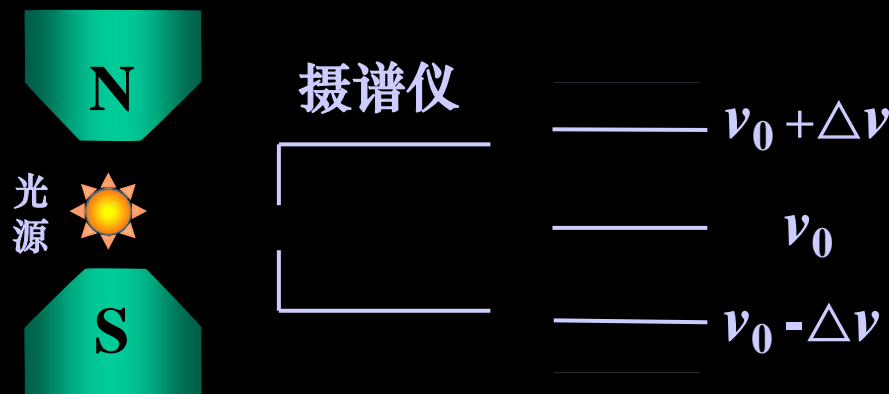


$$l = 1 \quad L = \sqrt{2}\hbar$$

4. 塞曼效应

(1) 实验现象

光源处于磁场中时，一条谱线会分裂成若干条谱线



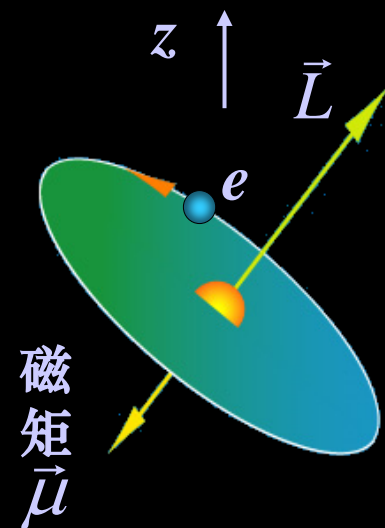
(2) 解释

- 磁场作用下的原子附加能量
磁矩和角动量的关系

$$\vec{\mu} = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}$$

z 轴（外磁场方向）投影

$$\mu_z = -\frac{e}{2m_e} L_z = -\frac{e}{2m_e} (m_l \hbar) = -m_l \mu_B \quad \mu_B \text{ — 玻尔磁子}$$



由于磁场作用，原子附加能量为

$$\Delta E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\mu_z B = m_l \mu_B B$$

其中 $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$

- 能级分裂

