DOI:10.11721/cqnuj20140217

浅析自由粒子的薛定谔方程的解*

罗　光
(重庆师范大学 物理与电子工程学院，重庆 401331)

摘要:基于自由粒子满足的薛定谔方程,文章对此方程作了深入讨论,得出方程仅有平庸解。另外,从一维无限深势阱在势阱宽度为无限宽和一维方势垒在势垒高度趋于零这两种极限情况下,同样得到平庸解。虽然是平庸解,却说明了某些和经典力学一致的内容,说明了经典力学和量子力学之间的联系。该平庸解说明:1)对于无限自由粒子,遵循牛顿第一运动定律的规律;2)对于无限自由粒子,不表现物质波波动的特性,只有在有约束(或者相互作用)的情况下,才体现波粒二象性的统一。

关键词:薛定谔方程;自由粒子;量子力学;经典力学
中图分类号:O413.1　　**文献标志码**:A　　**文章编号**:1672-6693(2014)02-0077-03

在量子场论和高等量子力学中,经常看到有关自由粒子比如电子所满足的方程的讨论,虽然经过量子化以后,以场的形式出现,实质是亦粒子亦场[1-2]。而量子力学研究的是微观粒子运动规律,奇怪的是无涉及无限自由的粒子的运动情况的研究。这对于初学者而言,无疑增加了对量子力学基本精髓理解的难度。而且在量子力学中,重点介绍了量子力学与经典力学之间的不同,很少讨论与经典力学之间的联系问题[3-4]。对比量子力学和相对论这两大现代物理学的基石,给初学者的印象是,粒子或者物质在高速运动时,需要用相对论去解释,而对于低速情形,则符合牛顿力学的范围,而且总所周知,经典力学是相对论在 $v<<c$ 的极限形式。但是,对于量子力学和经典力学,人们大多知道微观情形下用量子力学解释粒子的运动规律,而宏观是则用牛顿力学,而对二者的联系则要模糊得多[5-8]。因此,揭示经典力学与量子力学之间的这种联系无疑显得非常重要,也极有意义。本文正是着眼于此,讨论了微观情况下自由粒子的运动的问题。

1 无限自由粒子的运动满足的薛定谔方程及其解

微观情况下,粒子的运动遵循薛定谔方程,根据该方程可以得出,对于一维情况下的自由粒子而言,在由于没有受到任何约束,其势能函数 $U(x)=0$,此时根据文献[3]描述该粒子的波函数满足的方程为

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}\tag{1}$$

这里,$\hbar=\dfrac{h}{2\pi}$,h 为普朗克常数,μ 为粒子的质量。

对于方程(1),由于势能函数 $U(x)=0$,显然是不含时间的,因此可以考虑用分离变数法进行简化

$$\psi(x,t)=\varphi(x)f(t)\tag{2}$$

代入(1)式,得

$$\frac{i}{f(t)}\frac{\partial f(t)}{\partial t}=-\frac{\hbar}{2\mu\varphi(x)}\frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2}\tag{3}$$

由于 t 和 x 是时间和空间这两个相互独立的变量,因此,只有当两边等于同一常量时,这里假定为能量 E,等式才满足,即分离成两个方程

$$\frac{i}{f(t)}\frac{\partial f(t)}{\partial t}=E\tag{4}$$

$$-\frac{\hbar}{2\mu\varphi(x)}\frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2}=E\tag{5}$$

这里,方程(4)的解为

$$f(t)=\mathrm{C}e^{-iEt}\tag{6}$$

* **收稿日期**:2013-01-12　**修回日期**:2013-05-18　**网络出版时间**:2014-03-10　19:23
资助项目:重庆市科委自然科学基金(No. cstc2012jjA50018);重庆市教委理科科研项目(No. KJ120613)
作者简介:罗光,男,副教授,研究方向为现代材料测试技术和理论物理,E-mail:photoncn@cqnu.edu.cn
网络出版地址:http://www.cnki.net/kcms/detail/50.1165.N.20140310.1923.017.html

其中,C 是任意常数,由于有(2)式,故可以把 C 放到 $\varphi(x)$ 里面。

对于方程(5),可以化简为

$$\frac{\partial^2\varphi(x)}{\partial x^2}+\frac{2\mu E}{\hbar}\varphi(x)=0 \tag{7}$$

按量子力学的观点,这里 E 是粒子的能量,对于自由粒子来说,由于 $U(x)=0$,E 就成为粒子的动能,因此有 $E\geqslant 0$,因此(7)式的解的形式为

$$\varphi(x)=C_1\mathrm{e}^{i\sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar}}x}+C_2\mathrm{e}^{-i\sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar}}x} \tag{8}$$

其中,C_1 和 C_2 是两个任意实常数,根据归一化条件,有

$$\int_{-\infty}^{+\infty}(C_1\mathrm{e}^{i\sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar}}x}+C_2\mathrm{e}^{-i\sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar}}x})^*(C_1\mathrm{e}^{i\sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar}}x}+C_2\mathrm{e}^{-i\sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar}}x})\mathrm{d}x=1 \tag{9}$$

因此可得 C_1 和 C_2 只能为零。即(7)式的解只能为零解,是一个平庸解(注:对于波函数可归一化为 delta 函数的情况,可以类似讨论并得到类似的结论,本文不再详述)。

如果 $E<0$,(7)式的解的形式为 $\varphi(x)=C_1\mathrm{e}^{\sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar}}x}+C_2\mathrm{e}^{-\sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar}}x}$,根据归一化条件,该解仍只能为零解,仍是一个平庸解。

由于 $\varphi(x)$ 的零解,可以得出(1)式中的解

$$\psi(x,t)=\varphi(x)f(t)=0 \tag{10}$$

说明自由粒子的薛定谔方程的解只有零解。

2 以一维无限深势阱的极限形式得到薛定谔方程的平庸解

其实这样的解通过对一维无限深势阱的极限形式可以求得。在一维无限深势阱中,根据文献[3]波函数的形式为

$$\varphi(x)=\begin{cases}\frac{1}{\sqrt{a}}\sin\frac{n\pi}{2a}(x+a) & |x|<a\\ 0 & |x|\geqslant a\end{cases}\quad(2a\text{ 为势阱的宽度}) \tag{11}$$

在 $a\to\infty$ 时的极限结果也可以得到类似的平庸解。

3 以一维方势垒的极限形式得到薛定谔方程的平庸解

同样这样的解通过一维方势垒的极限形式也可得到,在一维方势垒中,根据文献[3]波函数的解为

$$\varphi(x)=\begin{cases}A\mathrm{e}^{ik_1x}+A'\mathrm{e}^{-ik_1x} & x<0\\ B\mathrm{e}^{ik_2x}+B'\mathrm{e}^{-ik_2x} & 0<x<a\\ A\mathrm{e}^{ik_1x}+A'\mathrm{e}^{-ik_1x} & x>a\end{cases} \tag{12}$$

其中,$k_1=\sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}$,$k_2=\sqrt{\frac{2\mu(E-U_0)}{\hbar^2}}$,$A$、$B$、$C$、$A'$、$B'$、$C'$ 分别为任意常数,a 为势垒宽度。在势能函数 $U(x)\to 0$ 的条件下,$k_1=k_2$,(8)式和(12)式相同的。因此,仍然得到了平庸解的结果。假如把 $x<0$ 的区域看成入射区域,$x>a$ 的区域看成透射区域,甚至还可得透射系数 D

$$D=\frac{4k_1^2k_2^2}{(k_1^2-k_2^2)^2\sin^2ak_2+4k_1^2k_2^2}=1 \tag{13}$$

4 讨论

对于上述平庸解,笔者认为至少可从以下几方面进行理解。

1)在求解过程中,并未出现如量子力学中所描述的量子化的能量,即能量 E 可以连续的任意取值。对于自由粒子,由于受到的约束为零,所以能量 E 仅指动能。如果 $E=0$,表示可以停留在任何位置而不动,直到有约束施加于其上为止。而如果 $E\neq 0$,由于通过上文的求解过程,没有出现对 E 造成影响的情况,意味着 E 一旦取定某一个值,粒子将保持具有这种值的状态运动,即表示粒子将保持它原有的运动状态,直到有约束施加于其上为止。这实际上就是牛顿第一运动定律,和经典力学的结果一致。

2)对于满足薛定谔方程的无限自由的粒子而言,虽然用波函数对之进行了描述,但实际上并不表现物质波的意义,粒子并未表现出波动的特征,即仅表现出粒子性。自由粒子不具有波粒二象性。另一方面,对于微观粒子,只有在有约束(或者相互作用)的情况下,才体现波粒二象性统一。不能脱离约束(或者相互作用)讨论粒子

表现波粒二象性。

3)在 $a\to\infty$时,从一维无限深势阱的极限结果得到的平庸解可以得出,牛顿第一运动定律是无限深势阱宽度为无限大时的极限结果,由此揭示出量子力学和经典物理之间的关系并非像人们想象的存在巨大的鸿沟,实际上是在不同条件下粒子运动形式的不同表现而已。

4)在 $U(x)\to 0$ 时,一维方势垒的极限结果也是平庸解,假如把 $x<0$ 的区域看成入射区域,$x>a$ 的区域看成透射区域,由(12)式得出透射系数为 1,说明粒子在没有障碍物的情况下,不可能反射回来,这再一次说明,粒子将保持它原有的运动状态,直到有障碍为止。这同样也是牛顿第一运动定律,和经典力学的结果一致。

5 结论

基于自由粒子满足的薛定谔方程,文章对该方程作了深入讨论,虽然得到的是平庸解,但是这种解却说明了某些和经典力学一致的内容,说明了经典力学和量子力学之间的联系,甚至得出了牛顿第一定律。另一方面,也得到了粒子只有在受到约束(或者相互作用)的情况下,对于粒子所表现的波粒二象性的特征。

参考文献:

[1] Weinberg S. the Quantum Theory of Fields[M]. Volume I. New York:Cambridge University Press,1995.

[2] 卢里 D. 粒子和场[M]. 董明德,译. 北京:科学出版社,1981:7.
Lurie D,Particles and Fields[M]. Dong M D,Translation. Beijing: Science Press,1981:7.

[3] 倪光炯,陈苏卿. 高等量子力学[M]. 2 版. 上海:复旦大学出版社,2005:8.
Ni G J,Chen S Q. Advanced quantum mechanics[M]. Shanghai: Fudan University press,2005:8.

[4] 周世勋. 量子力学[M]. 北京:高等教育出版社,2006:4.
Zhou S X. quantum mechanics[M]. Beijing: Higher Education Press,2006:4.

[5] 马平,曾月新. 经典守恒定律的量子力学推导[J]. 大学物理,2007,26(12):57-59.
Ma P,Zeng Y X,Quantum mechanical discussion of the classical conservation laws[J]. College Physics, 2007, 26 (12):57-59.

[6] 徐来自,钱尚武. 量子力学是经典统计力学的自然推广[J],北京大学学报:自然科学版,1994,30(3):354-358.
Xu L Z,Qian S W. Quantum mechanics as a natural generalization of classical statistical mechanics[J]. Acta Scicentianrum Naturalum Universitis Pekinesis,1994,30(3):354-358.

[7] 王周琴,高岳. 在量子力学到经典力学过渡中的应用[J]. 科技信息,2008(7):146-147.
Wang Z Q, Gao Y. The applications during the transition between quantum mechanics to classical mechanics[J],Science & Technology Information, 2008(7):146-147.

[8] 方在庆. 一个半经典模型是如何成为经典的—纪念玻尔原子模型诞生 100 年[J]. 科学,2013,3,47-52.
Fang Z Q. How a semi-classical model became classical — in commemoration of the 100th anniversary for Niels Bohr's atomic model[J],Kexue,2013(3):47-52.

Analysis of the Solution of Schrödinger Equation for Free Particle

LUO Guang

(College of Physics and Electronic Engineering, Chongqing Normal University, Chongqing 401331, China)

Abstract: Based on the theory of Schrödinger equation for the free particle, the solution of that equation was discussed in detail. It is found that the equation only exist an insignificant solution. And the mediocre solution can be also obtained from the one-dimensional infinitely deep potential well in a potential well width tending to infinite and from one-dimensional square potential barrier in the barrier height tending to zero. Although the solution is insignificant, but it describes some ideal that is consistent with that of classical mechanics. It explains the connection between the classical mechanics and quantum mechanics. The mediocre solutions show that 1) For infinite free particles, it is followed by Newton's first motion law, 2) For infinite free particle, it does not exist matter wave characteristics. Only if there is some potential (i. e. interactions), the Wave-particle duality be embodied.

Key words: Schrödinger equation; free particle; quantum mechanics; classical mechanics

(责任编辑　方　兴)