第二章 量子物理的基本概念与框架（14）

2.1 波函数与薛定谔方程（3）
2.2 力学量与算符 （3）
2.3 基矢与表象（4）
2.4 测量与不确定原理 （2）
2.5 本章总结 （2）

2.1 波函数与薛定谔方程

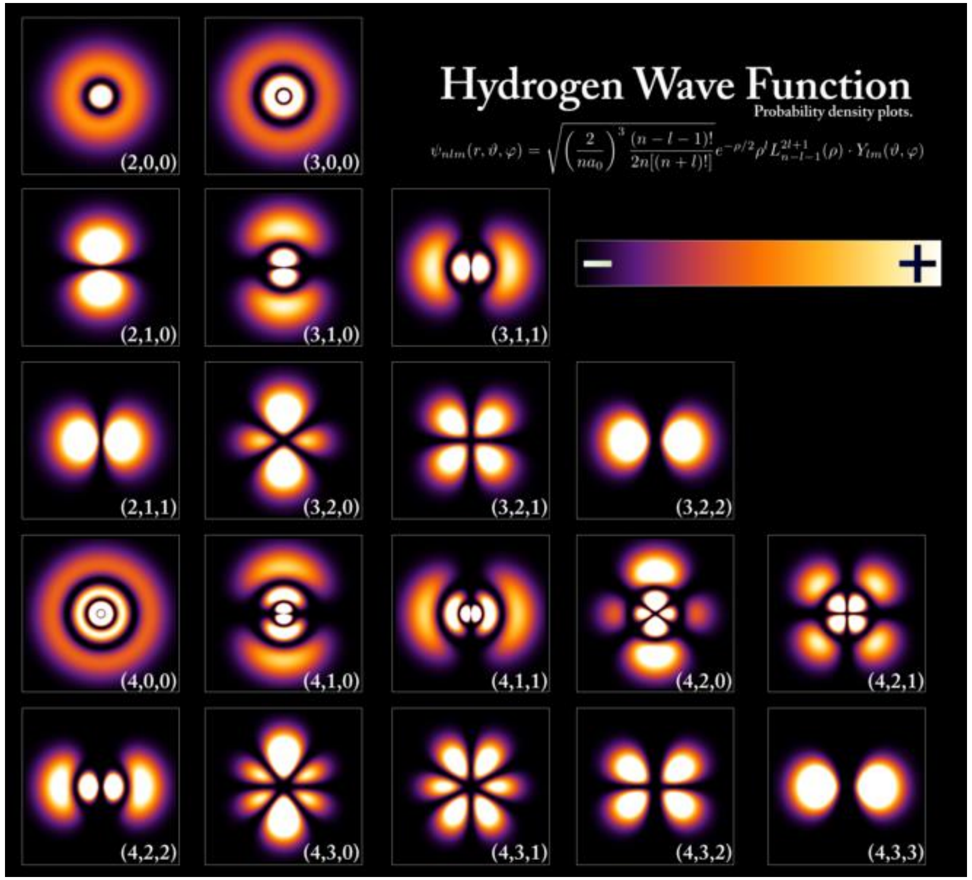
1. 波函数及其性质
   ① 离散位置空间的“波函数”： ψ_1、 ψ_2、 $\psi_3 \ldots$
   ② 连续位置空间的波函数：$\psi(x,t)$
   ③ 波函数的模平方$|\psi(x,t)|^2$代表在某个时刻t，在空间中一点x找到例子的几率密度
   ④ $c\psi(x,t)$与$\psi(x,t)$代表的是相同的状态
   ⑤ 波函数的归一化
   ⑥ 多粒子体系的波函数
   ⑦ 哪些波函数是允许的？一般来说，只要能通过某种方式归一化都可以。（ “标准条件”：有限、连续、单值）

波函数举例

- 谐振子的波函数：
  - $\psi(x) \cong e^{-m\omega x^2/2\hbar}$
  - $\psi(x) \cong xe^{-m\omega x^2/2\hbar}$
- 一维无限深势阱的波函数
  - $\psi(x) \cong \begin{cases} \sin\left(\frac{\pi}{W}nx\right) & 0<x<W \\ 0 & otherwise \end{cases}$

波函数举例

- 氢原子的波函数



2.1 波函数与薛定谔方程

2. 态叠加原理

① 量子态的概念，波函数与量子态的对应关系

② 态叠加原理——如果波函数$\psi_1(x,t)$和$\psi_2(x,t)$对应的量子态是粒子可能的状态，那么对于任意复数c_1和c_2，$\psi(x,t)=c_1\psi_1(x,t)+c_2\psi_2(x,t)$也同样对应粒子的可能状态，叫做叠加态

③ 处于叠加态$\psi(x,t)$的粒子，既处于$\psi_1(x,t)$中，又处于$\psi_2(x,t)$中，并且几率分别是$|c_1|^2$和$|c_2|^2$，这是经典物理所绝不允许的，但是又是量子物理的核心

④ 态叠加原理导致了或者说反映了物质波作为一种波的可叠加性

2.1 波函数与薛定谔方程

3. 态的分解（展开）

① 态叠加原理的反向表述：只要我们可以把粒子所处的波函数$\psi(x,t)$写成$\psi(x,t)=c_1\psi_1(x,t)+c_2\psi_2(x,t)$的形式，我们就可以说粒子处于$\psi_1(x,t)$和$\psi_2(x,t)$的叠加态

② 例如$\psi(x,t)=(\mathrm{a}x^2+bx)e^{-x^2}$,可以认为是波函数$x^2e^{-x^2}$和$xe^{-x^2}$分别对应的态的叠加，也可以认为是波函数$(x^2+x)e^{-x^2}$和$(x^2-x)e^{-x^2}$分别对应的态的的叠加，... 原则上可以任意分解

高斯积分

- $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}$
- $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\pi/a}$
- $\int_{-\infty}^{\infty} x e^{-ax^2} dx = 0$
- $\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2a}\sqrt{\pi/a}$

delta函数

- 函数 $G_a(x)=\frac{1}{a\sqrt{\pi}}e^{-(x/a)^2}$ （a>0） 曲线形状
- 当$a\to 0$时， $G_a(x)$称为delta函数，记做$\delta(x)$
- $\delta(x)\cong\begin{cases}+\infty & x=0\\ 0 & x\neq 0\end{cases}$
- $\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x)dx=1$
- $\int_{-\infty}^{\infty}f(x)\delta(x)dx=f(0)$
- $\int_{-\infty}^{\infty}f(x)\delta(x-x_0)dx=f(x_0)$
- $\delta(ax)=\delta(x)/|a|$

傅里叶变换复习

1. 积分公式
   $\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-ix\nu} dx = 2\pi\delta(\nu)$
2. 傅里叶变换与反变换：
   $g(\nu) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\mathrm{e}^{-ix\nu} dx \qquad f(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} g(\nu)\mathrm{e}^{ix\nu} d\nu$
   或者
   $F(\xi) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\mathrm{e}^{-i2\pi x\xi} dx \qquad f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} F(\xi)\mathrm{e}^{i2\pi x\xi} d\xi$
3. 傅里叶变换有用的本质原因：$\{\mathrm{e}^{-ix\nu}\}$是正交完备基
4. 傅里叶变换的应用：解微分方程
   $f(x) \to g(\nu)$，则$f'(x) \to i\nu g(\nu)$
5. 分离变量法

2.1 波函数与薛定谔方程

3. 态的分解（展开）

① 一类特殊的分解：平面波展开

a. 平面波$\psi_p(x) = e^{i\frac{p}{\hbar}x}/\sqrt{2\pi\hbar}$对应的物质波动量为$p$

b. $\{\psi_p(x)\}$满足归一化关系$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_{p'}^*(x)\psi_p(x)dx = \delta(p-p')$

c. 任何波函数都可以用$\{\psi_p(x)\}$展开：$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty}c(p)\psi_p(x)dp$
其中$c(p) = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_p^*(x)\psi(x)dx$

d. 这本质上就是傅里叶变换

e. 三维推广

f. 为什么没有写时间依赖关系？因为波函数要满足薛定谔方程，时间依赖关系已经蕴含在$\psi(x)$中

2.1 波函数与薛定谔方程

4. 薛定谔方程

① 描述了波函数在空间、时间传播（演化）的方式

② 三维形式 $$i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r},t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r},t)+V(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t)$$

③ 一维形式 $$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)+V(x,t)\psi(x,t)$$

④ 多粒子体系的薛定谔方程

2.1 波函数与薛定谔方程

4. 薛定谔方程
   ⑤ 如何从$\psi(x,0)$ 得到$\psi(x,t)$?
   ⑥ 任意时刻的波函数在全空间的分布决定了过去和将来的波函数，所以波函数代表了量子体系的状态
   ⑦ 证明平面波是自由粒子薛定谔方程（V=0）的解
   ⑧ 定态薛定谔方程(分离变量法)
   ⑨ 通过找出所有定态薛定谔方程的解，去解任意波函数的演化
   ⑩ 几率密度守恒

2.1 波函数与薛定谔方程

4. 薛定谔方程

⑩ 几率密度守恒

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0$$

$$\rho=\psi^*\psi$$

$$\boldsymbol{j}=\frac{i\hbar}{2m}(\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi)$$