



光子学基础

物理与天文学院

丁岚



第一章第1讲
不确定度关系
波函数及其统计诠释

第1讲提纲

- 一、波粒二象性与不确定度关系
- 二、量子力学讨论的对象：波函数
- 三、自由粒子的波函数
- 四、一般粒子的波函数及其物理意义
- 五、波函数的统计诠释及其性质
- 六、动量分布概率
- 七、再论不确定度关系

一、波粒二象性与不确定度关系

1924年，de Broglie提出物质波概念：

光与实物粒子（甚至宏观物体）都具有波粒二象性

$$E = mc^2 = h\nu$$

$$p = m\mathbf{v} = h / \lambda$$

宏观物体之所以没有表现出明显波动性，是因为物体的波长 $\lambda = h / p$ 太小了（因为 m 相对 h 太大）。

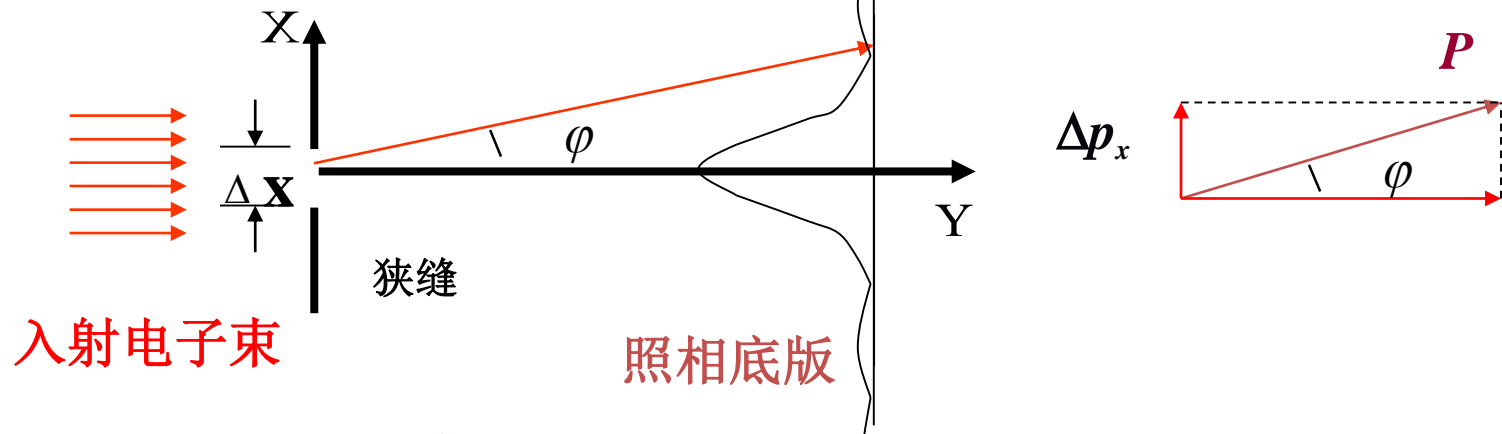
$$h = 6.62 \times 10^{-34} \text{Js}, \quad p = mv$$

一、波粒二象性与不确定度关系

在经典力学中，宏观粒子在任何时刻都有完全确定的位置、动量、能量等。然而，对于微观粒子，其波动性远远大于宏观粒子，以致于它的某些成对的物理量（如位置坐标和动量、时间和能量等）不可能同时具有确定的量值。这就叫不确定度关系或测不准原理。

下面以电子单缝衍射为例讨论这个问题

一、波粒二象性与不确定度关系



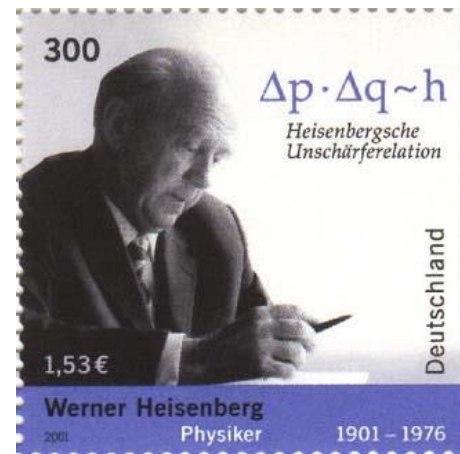
一、波粒二象性与不确定度关系

严格的理论给出的**不确定性关系**为：

$$\left. \begin{aligned} \Delta x \cdot \Delta p_x &\geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta y \cdot \Delta p_y &\geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta z \cdot \Delta p_z &\geq \frac{\hbar}{2} \end{aligned} \right\}$$

首先由海森堡给出(1927)
海森堡不确定性关系
(海森堡测不准关系)

$$\hbar = h / (2\pi),$$



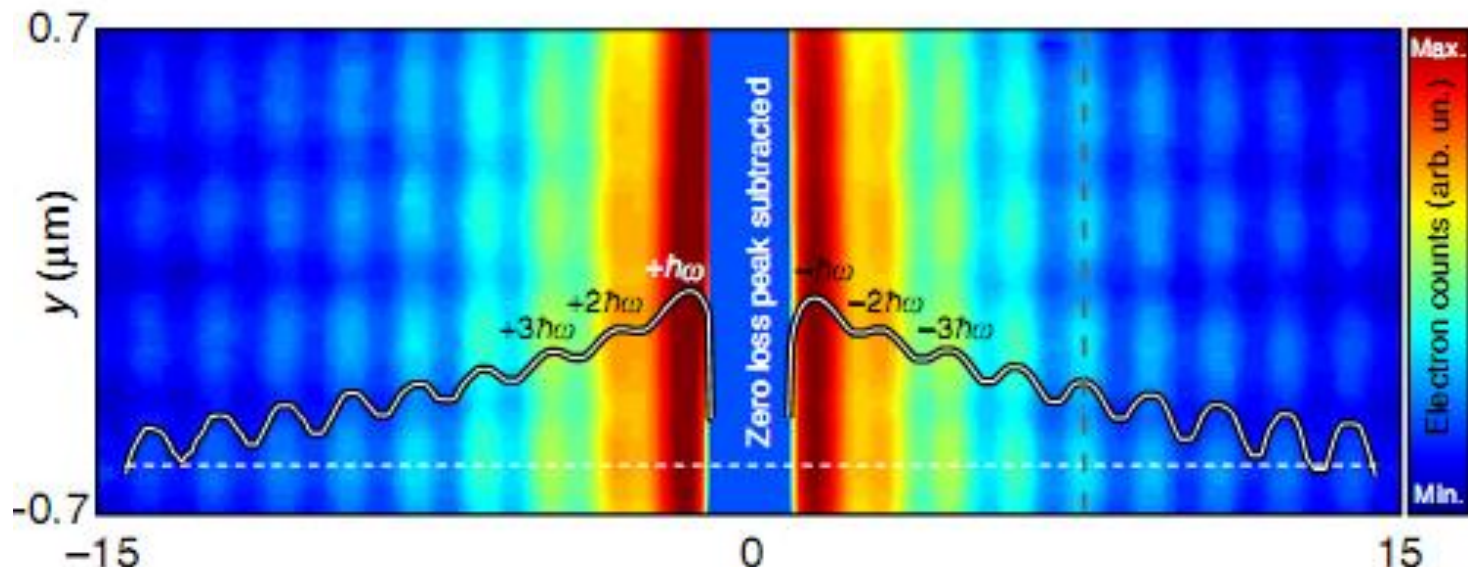
Heisenberg
(1901-1976)

它的物理意义是，微观粒子不可能同时具有确定的位置和动量。**粒子位置的不确定量 Δx 越小，动量的不确定量 Δp_x 就越大，反之亦然**。因此在某一时刻微观粒子的位置和动量不可能同时完全确定。**轨道**的概念已失去意义，经典力学规律也不再适用。

-----微观粒子的“波粒二象性”的具体体现

一、波粒二象性与不确定度关系

2015: 首次直接成像观测光的波粒二象性



ARTICLE

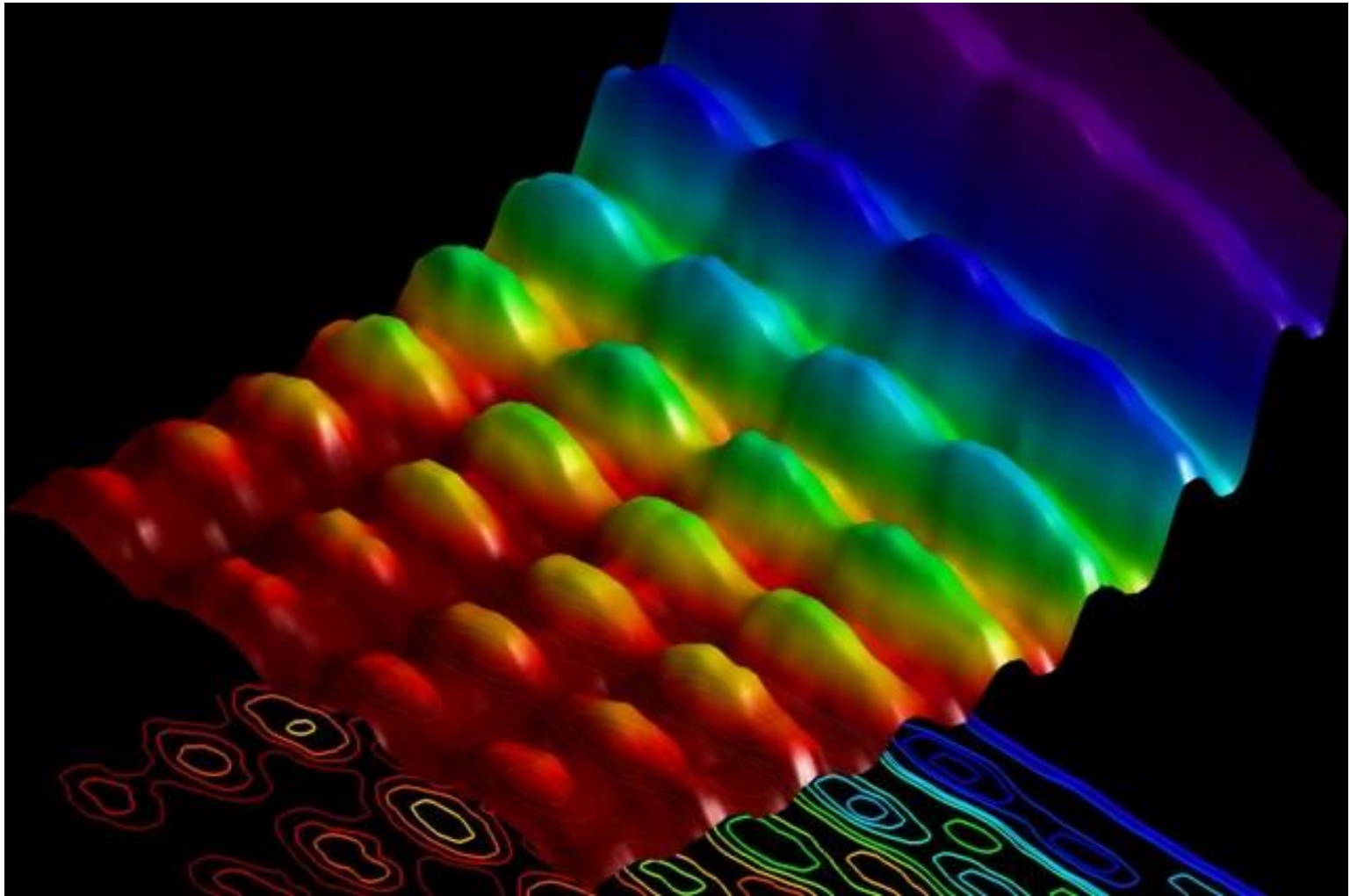
Received 25 Apr 2014 | Accepted 27 Jan 2015 | Published 2 Mar 2015

DOI: [10.1038/ncomms7407](https://doi.org/10.1038/ncomms7407)

OPEN

Simultaneous observation of the quantization and the interference pattern of a plasmonic near-field

L. Piazza^{1,*}, T.T.A. Lummen^{1,*}, E. Quiñonez², Y. Murooka¹, B.W. Reed³, B. Barwick² & F. Carbone¹



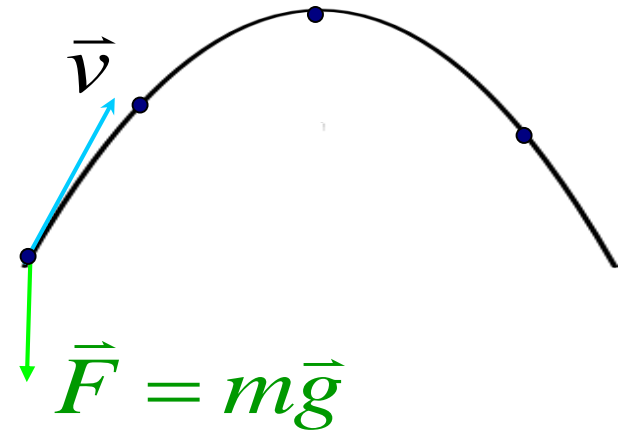
二、量子力学讨论的对象：波函数

1、经典物理讨论对象：

牛顿力学：质点（经典粒子）

讨论对象：质点的坐标、动量、能量等

$$\vec{F}(\vec{r}, t) = m \frac{d^2 \vec{r}(t)}{dt^2} = \frac{d\vec{p}}{dt}$$



二、量子力学讨论的对象：波函数

电动力学：电磁场（经典波动）

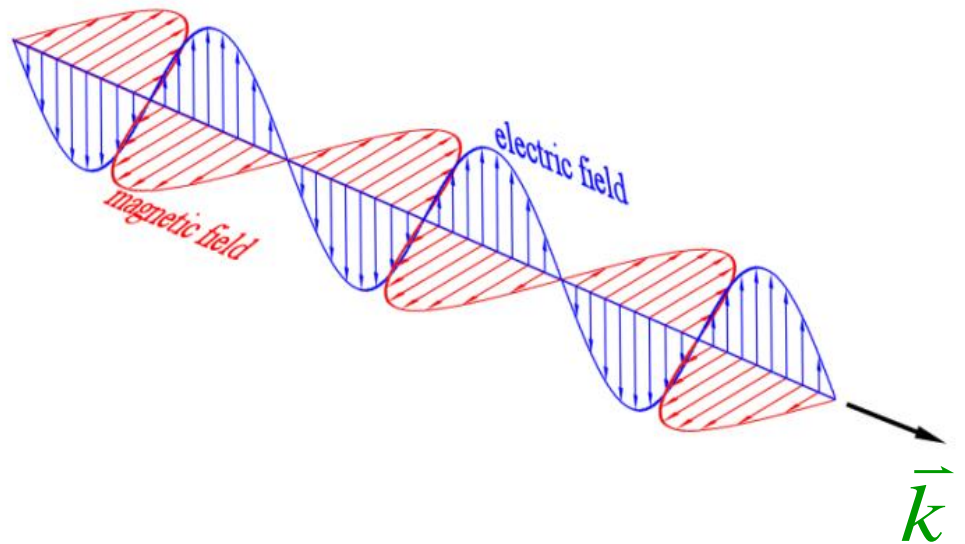
讨论对象：电磁场的波幅、波矢、能量等

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} - \vec{j}_m$$

$$\nabla \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{j}$$



Maxwell 方程组

二、量子力学讨论的对象：波函数

量子物理讨论的对象是什么？

根据de Broglie的“波粒二象性”假设：一切实物粒子具有波粒二象性，即具有确定动量 p 和确定能量 E 的实物粒子相当于频率为 ν 和波长为 λ 的波。满足de Broglie关系：

$$E = h\nu \quad p = h / \lambda$$

量子力学：引入一个物理量——波函数： $\psi(\vec{r}, t)$

波函数 $\psi(\vec{r}, t)$ 表征了粒子所具有的波粒二象性，完全描述了微观体系的状态。（量子力学基本假设之一）

三、自由粒子的波函数

平面波与傅里叶变换的简介

只考虑一维空间情况下，平面波为： $\psi = A \exp(ikx)$

任意函数 $f(x)$ 均可用 $\exp(ikx)$ 展开：

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(k) e^{ikx} dk \quad F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx$$

$F(k)$ 为 $f(x)$ 的Fourier变换

特别地，若 $F(k) = 1/\sqrt{2\pi}$ ，有

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dk = \delta(x)$$

三、自由粒子的波函数

自由粒子：指的是不受外力作用，静止或匀速运动的质点。**因此，其能量 E 和动量 \vec{p} 都是常量。**

根据de Broglie关系：可得与自由粒子对应的物质波的频率和波长为： $\nu = E/h$ 和 $\lambda = h/p$

波矢定义为： $k = 2\pi/\lambda$ 所以看出自由粒子的频率和波矢均为**常量**。

改写de Broglie关系为（**量子物理中常用关系**）

$$E = h\nu = \hbar\omega \quad \vec{p} = \frac{h}{\lambda} \vec{e} = \hbar \vec{k}$$
$$\omega = 2\pi\nu, \hbar = h/2\pi$$

三、自由粒子的波函数

ω 和 \vec{k} 都为常量的波应该是平面波，可用以下函数描述 $\psi = A \cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)$ 或 $\psi = A \exp[i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)]$
代入 de Broglie 关系得到：

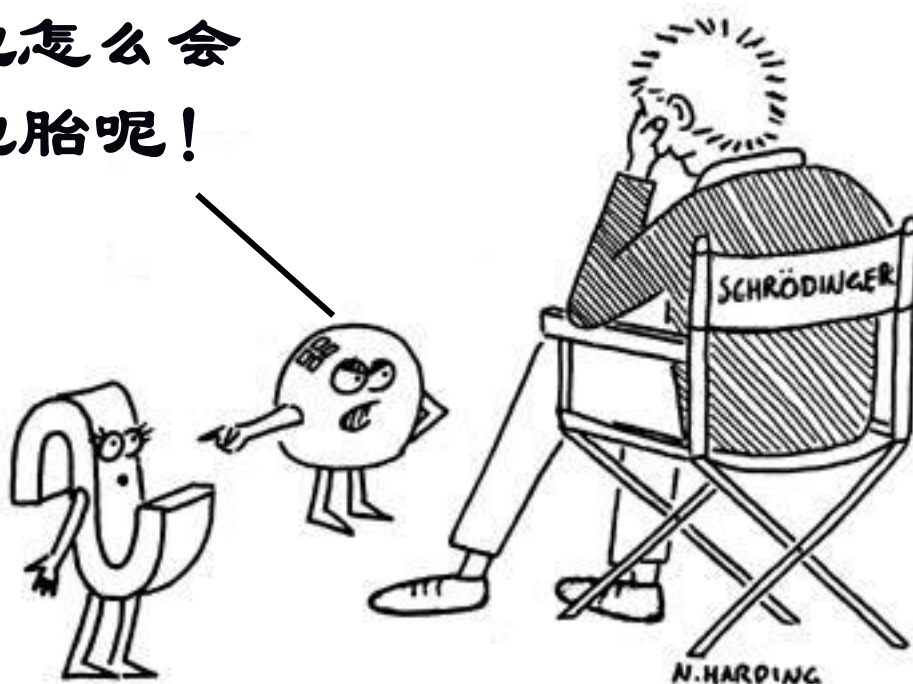
$$\psi = \psi_k = A \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)\right]$$

即：自由粒子的波函数，它将粒子的波动同其能量和动量联系了起来。它是时间和空间的函数。

三、自由粒子的波函数

总结：由于自由粒子的能量和动量为常量，根据de Broglie关系，其对应物质波的角频率和波矢也为常量，
根据经典波动理论，角频率和波矢为常量的波为平面波，
即：自由粒子的波函数为平面波：
$$\psi = A \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)\right]$$

我和他怎么会
是双胞胎呢！



四、一般粒子的波函数及其物理意义

当粒子受到外力的作用时，其能量和动量不再是常量，因此波函数无法用平面波表示。用一般函数来表示

$$\psi(\vec{r}, t)$$

问题是：该如何理解波函数所代表的物理意义呢？

经典物理：质点动量的物理意义： $\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt}$

电场强度的物理意义： $\vec{F} = \vec{E}q$

四、一般粒子的波函数及其物理意义

出发点：波粒二象性

一切实物粒子都具有波粒二象性！

如何理解一个实物粒子具有波动性？

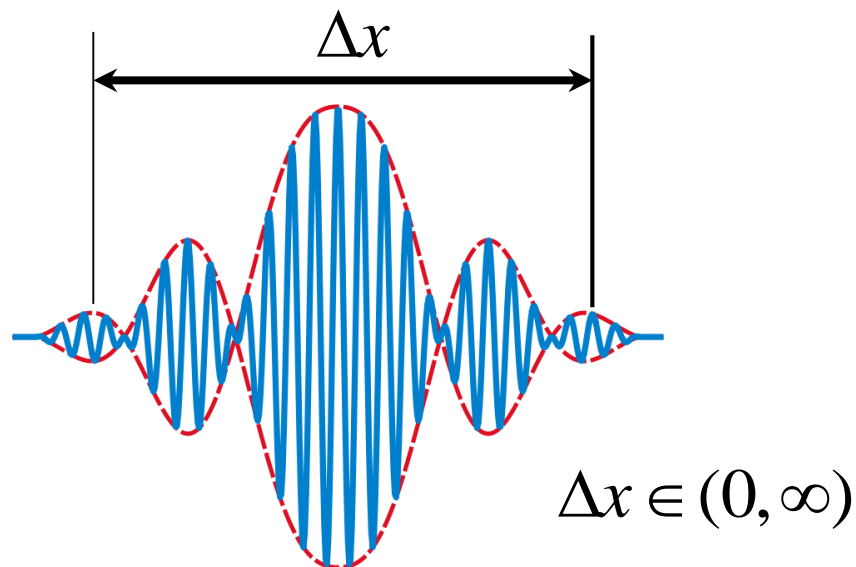
历史上对粒子波动性的认识有两种**误解**：

(1) 波包说：认为粒子波就是粒子的某种实际结构，即将粒子看成是三维空间中连续分布的一种物质**波包**。波包的大小即粒子的大小，波包的速度即粒子的运动速度。粒子的干涉和衍射等波动性都源于这种波包结构。

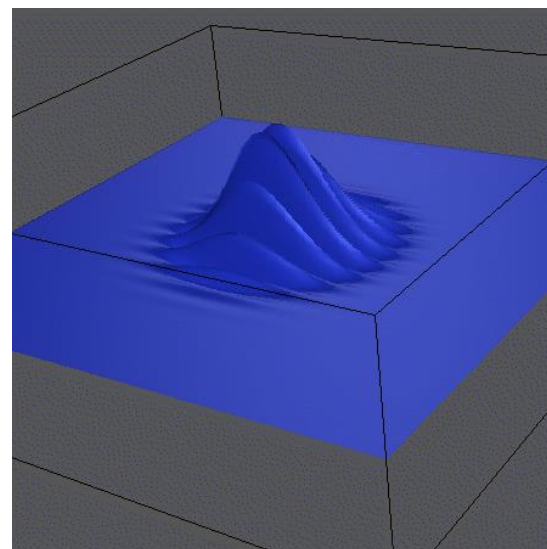
(2) 群体说：认为体现粒子波动性的衍射行为是**大量粒子相互作用或疏密分布**而产生的结果。

四、一般粒子的波函数及其物理意义

1、波包说：



波动的强度空间分布只在
有限区域内不为零

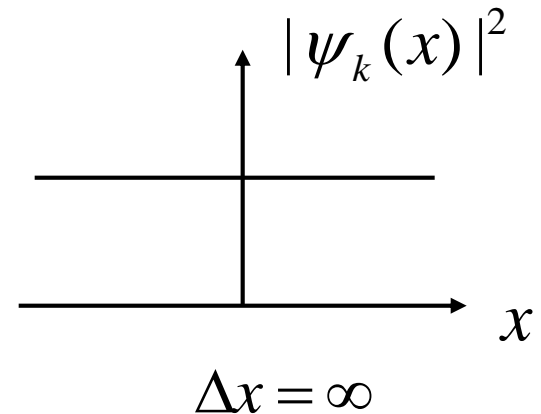


波包说：认为粒子波就是粒子的某种实际结构，即将粒子看成是三维空间中连续分布的一种物质**波包**。**波包的大小即粒子的大小**，波包的速度即粒子的运动速度。

四、一般粒子的波函数及其物理意义

一维自由粒子的波函数为：

$$\psi = A \exp(i(kx - \omega t))$$



$\Delta x = \infty$ ：自由粒子尺寸难道无限大？

两种选择：

- 1、自由粒子波函数是错的？！
- 2、波包说是错的？！

四、一般粒子的波函数及其物理意义

一般粒子的波函数为： $\psi(x)$ 根据Fourier变换

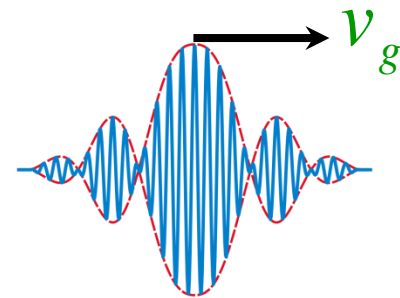
$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{ikx} dk$$

物理意义：波包可以看做各种波长的平面波的**叠加**。

定义群速 v_g ，表示波包中心的移动速度；

即，整个波包的移动速度。

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}$$



若 $dv_g / dk \neq 0$ ，即： $v_g = v_g(k)$ 则整个波包在运动过程中会发生**扩散**。

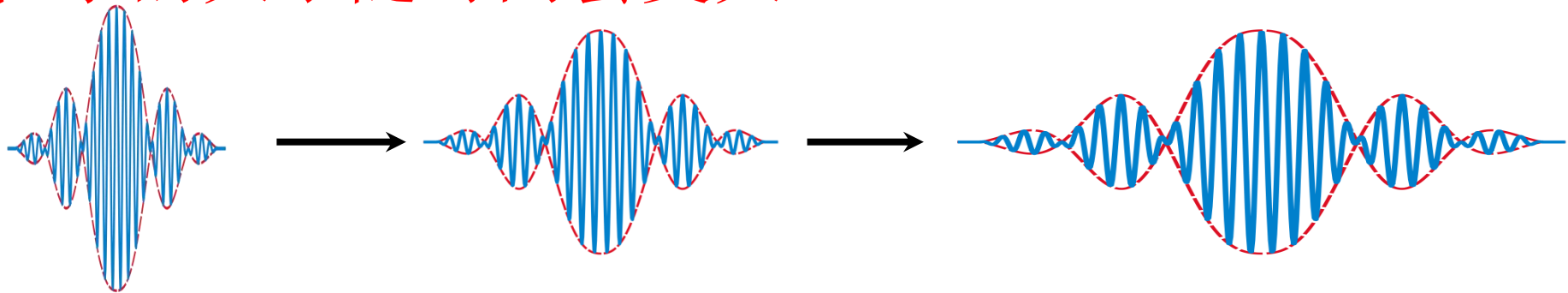
四、一般粒子的波函数及其物理意义

对于de Broglie波，有关系： $\omega = \hbar k^2 / 2m$

$$v_g = \hbar k / m \Rightarrow \frac{dv_g}{dk} = \frac{\hbar}{m} \neq 0$$

根据波包说：粒子为三维空间中连续分布的一种物质波包，波包的大小即粒子的大小。由于

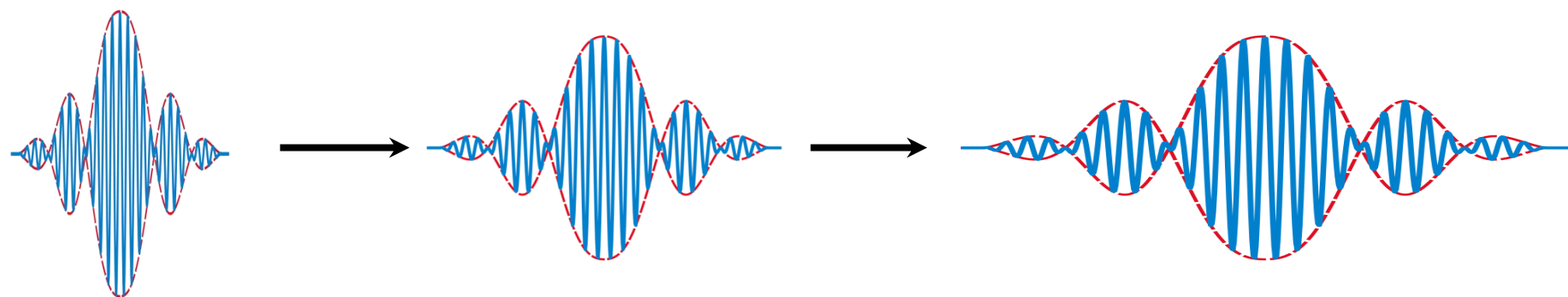
$dv_g / dk \neq 0$ ，则波包会随着运动发生扩散，即：粒子的大小随时间会变大。



难道电子会随着时间 “变胖” ？

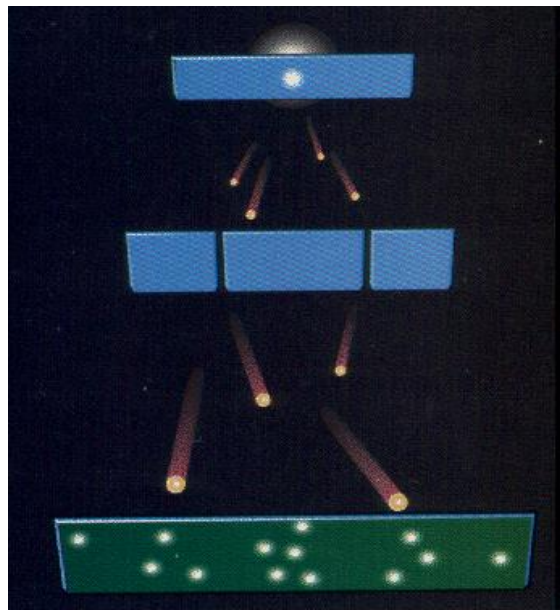
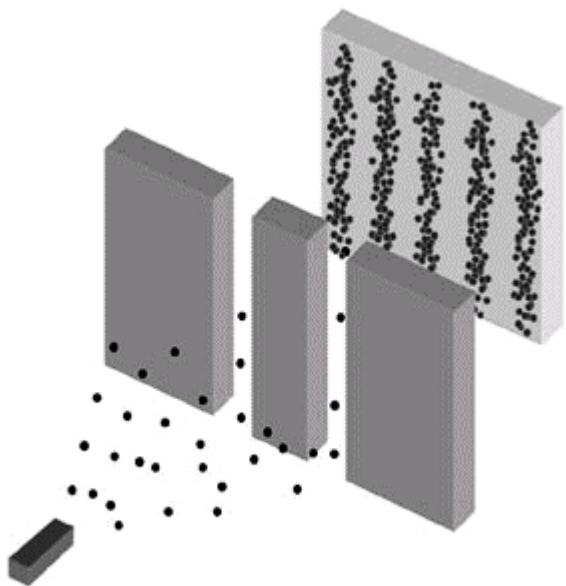
四、一般粒子的波函数及其物理意义

波包说的错误之处在于：物质波包的观点**夸大了波动性**的一面，**抹杀了粒子性**的一面，与实际不符。



四、一般粒子的波函数及其物理意义

2、群体说：认为体现粒子波动性的衍射行为是大量粒子相互作用或疏密分布而产生的结果。



然而，电子衍射实验表明，就衍射效果而言：

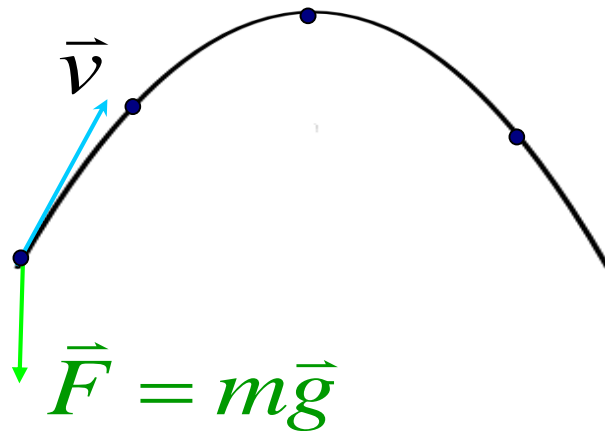
弱电子密度+长时间=强电子密度+短时间

群体说**夸大了粒子性**的一面，**抹杀了波动性**的一面，与电子衍射实验不符。

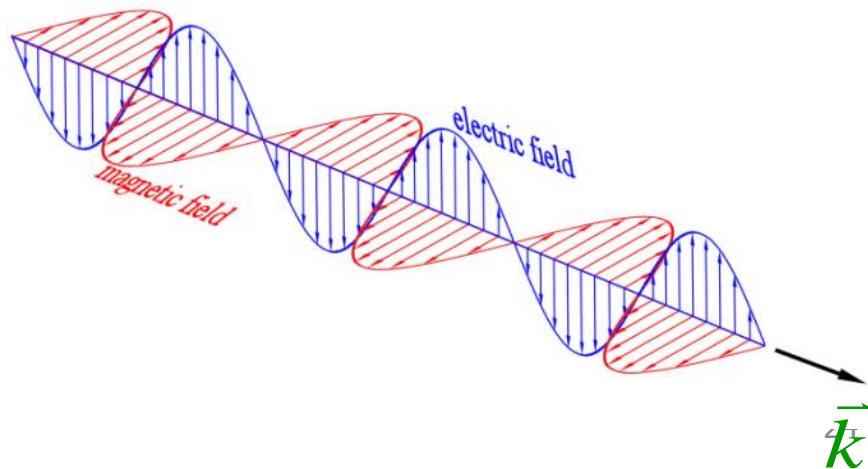
四、一般粒子的波函数及其物理意义

3、再论波粒二象性

经典粒子：哲学上是一个客体，强调了**颗粒性**或者是**原子性**！其运动时总是有一个确切的**轨道**。



经典波动：强调了某种实在物理量的空间分布做**周期性**变化。



四、一般粒子的波函数及其物理意义

对于de Broglie物质波（波函数 $\psi(\vec{r}, t)$ ），绝不能用经典的概念生搬硬套来解释。

要想解释de Broglie物质波，我们必须重新认识什么是“粒子性”和“波动性”！

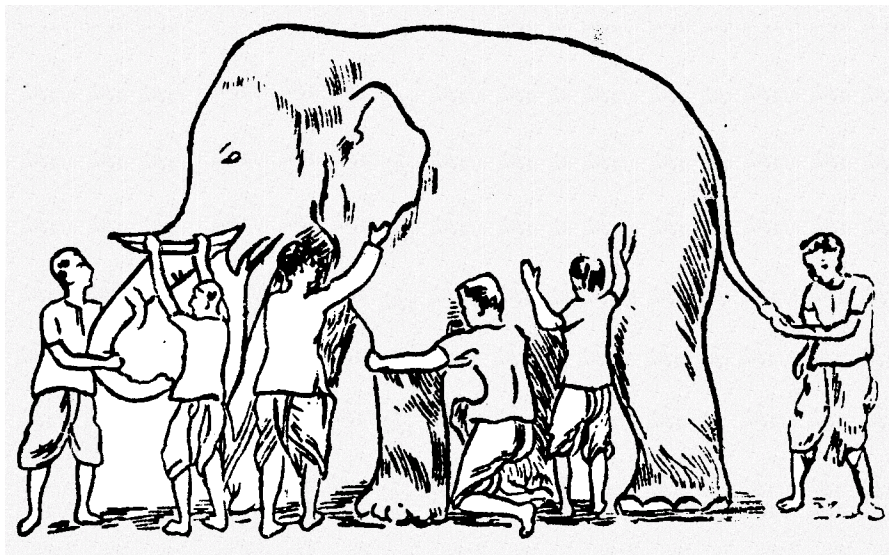
$$E = \hbar\omega \qquad \vec{p} = \hbar\vec{k}$$

“粒子性”

“波动性”

de Broglie
物质波

四、一般粒子的波函数及其物理意义



我们一直在探索世界的真实，但任何学科都只能描述它的一部分，这些描述都是近似的、相对的。

道可道，非常道。
名可名，非常名。

——《道德经》



四、一般粒子的波函数及其物理意义

4、统计诠释：

粒子的波粒二象性可以用波函数来表示：

$$\psi = \psi(x, y, z) = |\psi(x, y, z)| e^{i\varphi(x, y, z)}$$

1926年，M. Born提出：
波函数 $\psi(x, y, z)$ 为刻画
粒子在空间的**概率**分布的
概率波， $|\psi(x, y, z)|^2$ 表征
了粒子出现在点 (x, y, z)
附近的概率大小的一个量。



M. Born
(1882–1970)
Nobel Prize in
Physics (1954)

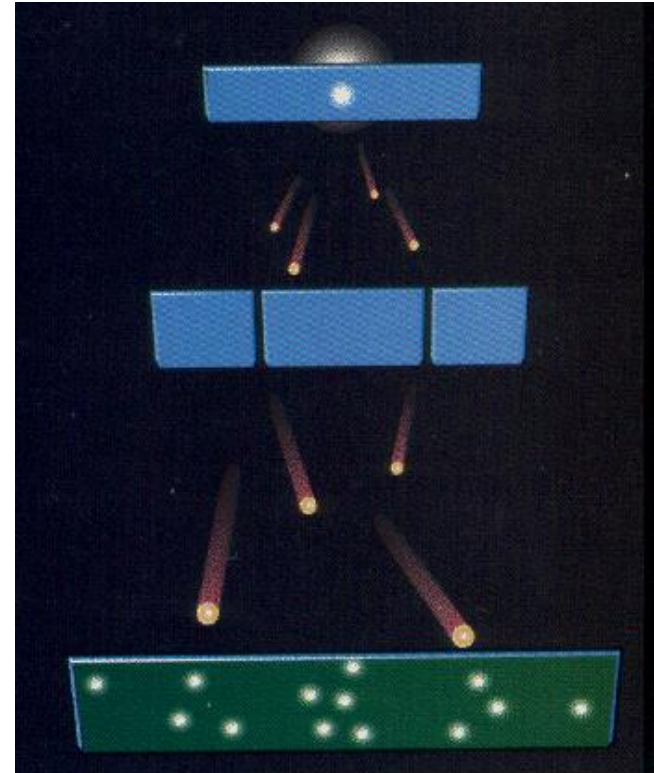
五、波函数的统计诠释及其性质

1、统计诠释的详细表述：

$|\psi(x, y, z)|^2$ 表示粒子出现在点 (x, y, z) 附近的概率。

$|\psi(x, y, z)|^2 \Delta x \Delta y \Delta z$ 表示点 (x, y, z) 处的体积元 $\Delta \tau = \Delta x \Delta y \Delta z$ 中找到粒子的概率。

$|\psi(x, y, z)|^2 d\tau$ 表示在体积微元 $d\tau$ 中找到粒子的概率。



五、波函数的统计诠释及其性质

2、统计诠释下波函数的性质：

(1) 归一性：在全空间中找到粒子的概率为1

$$\int_{\infty} |\psi(x, y, z)|^2 d\tau = 1$$

(2) 相对概率：对于概率分布，重要的是**相对概率分布**。

ψ 和 $C\psi$ 所描述的相对概率分布是完全相同的。

例：在空间任意两点 \vec{r}_1 和 \vec{r}_2 处， $C\psi$ 描述的相对概率为：

$$\left| \frac{C\psi(\vec{r}_1)}{C\psi(\vec{r}_2)} \right|^2 = \left| \frac{\psi(\vec{r}_1)}{\psi(\vec{r}_2)} \right|^2$$

五、波函数的统计诠释及其性质

(3) 波函数的常数因子不定性: 设 C 是一个常数, 则:

$\psi(x, y, z)$ 和 $C\psi(x, y, z)$ 对粒子在点 (x, y, z) 附近出现概率的描述是相同的。

$$\int_{\infty} |\psi(x, y, z)|^2 d\tau = A > 0 \Rightarrow \int_{\infty} \left| \frac{1}{\sqrt{A}} \psi(x, y, z) \right|^2 d\tau = 1$$
$$\psi(x, y, z) \text{ 等同于 } \frac{1}{\sqrt{A}} \psi(x, y, z)$$

(4) 相位不定性: 若 $C = e^{i\alpha}$, 则:

$$\psi(x, y, z) \text{ 和 } e^{i\alpha} \psi(x, y, z)$$

对粒子在点 (x, y, z) 附近出现概率的描述是相同的。
这是因为:

$$|\psi(x, y, z)|^2 = |e^{i\alpha} \psi(x, y, z)|^2$$

五、波函数的统计诠释及其性质

3、统计诠释下对波函数的要求

(1)、可积性

(2)、归一化

(3)、单值性， ψ

(4)、连续性

六、动量分布概率

设 $\vec{r} = x\vec{i} + y\vec{j} + z\vec{k}$ ，则 $|\psi(x, y, z)|^2 = |\psi(\vec{r})|^2$ 表示粒子出现在点 \vec{r} 附近的概率。

设 $\vec{p} = p_x\vec{i} + p_y\vec{j} + p_z\vec{k}$ ，那么粒子具有动量 \vec{p} 的概率如何表示？

平面波的波函数为： $\psi = \exp[i\vec{k} \cdot \vec{r}] = \exp[i\vec{p} \cdot \vec{r} / \hbar]$

任意粒子的波函数可以按此平面波做Fourier展开：

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \phi(\vec{p}) e^{i\vec{p} \cdot \vec{r} / \hbar} d^3 p$$
$$\phi(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \psi(\vec{r}) e^{-i\vec{p} \cdot \vec{r} / \hbar} d^3 r$$

六、动量分布概率

$$\phi(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \psi(\vec{r}) e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} d^3r$$

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \phi(\vec{p}) e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} d^3p \approx \sum_i \phi(\vec{p}_i) e^{i\vec{p}_i\cdot\vec{r}/\hbar}$$

可见, $\phi(\vec{p}_i)$ 代表 $\psi(\vec{r})$ 中含有平面波 $e^{i\vec{p}_i\cdot\vec{r}/\hbar}$ 的成分, 因此, $|\phi(\vec{p}_i)|^2$ 应该代表粒子具有动量 \vec{p}_i 的概率。

六、动量分布概率

求证 $\phi(\vec{p}_i)$ 的归一性:

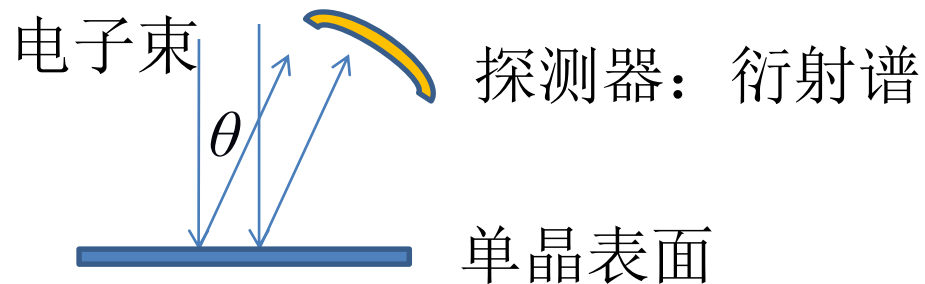
证明:

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(\vec{p})|^2 d^3 p &= \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(\vec{p}) \phi(\vec{p}) d^3 p \\&= \iiint_{\infty} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \psi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}') e^{i\vec{p} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')/\hbar} d^3 r' d^3 r d^3 p \\&= \iint_{\infty} \psi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}') \delta(\vec{r} - \vec{r}') d^3 r' d^3 r \\&= \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(\vec{r})|^2 d^3 r \\&= 1\end{aligned}$$

六、动量分布概率

电子衍射实验

1. 波包入射到单晶表面
2. 每一个Fourier分波按一定角度 θ_n 出射，衍射波分解为波谱



七、再论不确定度关系

经典粒子：可以同时具有确定的动量和空间位置，即

$\Delta p_x = 0$ 和 $\Delta x = 0$ 可以同时成立。

微观粒子： $\Delta p_x = 0$ 和 $\Delta x = 0$ 不能同时成立。

例1：设一维自由粒子具有确定的动量 p_0 ，即 $\Delta p = 0$ ，
其相应的波函数为平面波 $\psi = \psi_{p_0}(x) = e^{ip_0x/\hbar}$

已证明平面波 $\Delta x = \infty$

七、再论不确定度关系

例2：设一维粒子具有确定的位置 x_0 ，即 $\Delta x = 0$ ，则其波函数为

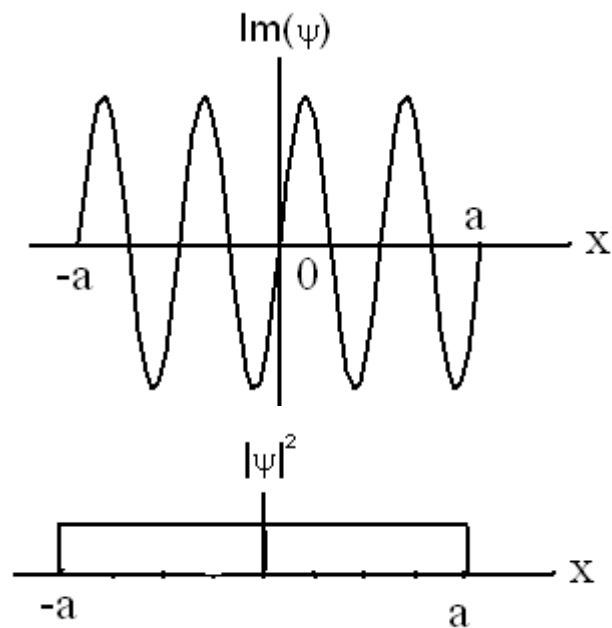
$$\psi = \psi_{x_0}(x) = \sqrt{2\pi\hbar}\delta(x - x_0) \begin{cases} 0, x \neq x_0 \\ \infty, x = x_0 \end{cases}$$

七、再论不确定度关系

例3：有限长波列

$$\psi(x) = \begin{cases} (2a)^{-1/2} e^{ik_0 x}, & |x| \leq a \\ 0, & |x| > a \end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = \int_{-a}^{+a} \frac{1}{2a} dx = 1$$



七、再论不确定度关系

严格证明表明，对一般粒子，有

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar / 2$$

物理意义：粒子的坐标和动量不可能同时**被准确测量**。或者说，微观粒子的位置（坐标）和动量不能同时具有**完全确定**的值。

七、再论不确定度关系

不确定度关系是微观粒子波粒二象性所带来的必然结果。这是因为，*对波动而言，不能提“空间某一点 x 的波长”*。从而，*对微观粒子，只要承认其具有波粒二象性，“微观粒子在空间某一点 x 的动量”（ p 与波长有关），这样的提法也没有意义*。所以，对一个给定点 x ，动量只能是不确定的，这就是不确定度关系。

作业：

1. 《量子力学教程》 p8, 练习题
1,2,5.

2. 求证 $\int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(\vec{p})|^2 d^3 p = 1$