第 2 章 物质波函数的描述和解释

2.1 波函数及统计解释

2.2 不确定性关系

2.1. 物质波的感念以及解释

1. 实物粒子的波动性

1923年，法国物理学家路易·德布罗意在权威的英国《哲学研究》杂志上发表论文，提出了物质波的概念和理论。

德布罗意假设

一个能量为E,动量为P的实物粒子同时具有波动性，且:

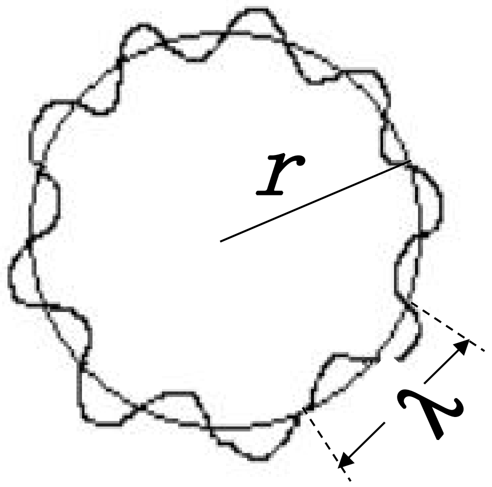
$$E = h\nu \qquad P = h/\lambda \rightarrow \lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mu}$$

与粒子相联系的波称为物质波，或德布罗意波。 λ —德布罗意波长。

静质量为m_0　动量 $p = m_0 u$　$\lambda = \dfrac{h}{m_0 u}$

相对论粒子　可与 C比较

驻波



$$p = \frac{m_0 u}{\sqrt{1-u^2/c^2}} \quad \to \lambda = \frac{h}{m_0 u}\sqrt{1-u^2/c^2}$$

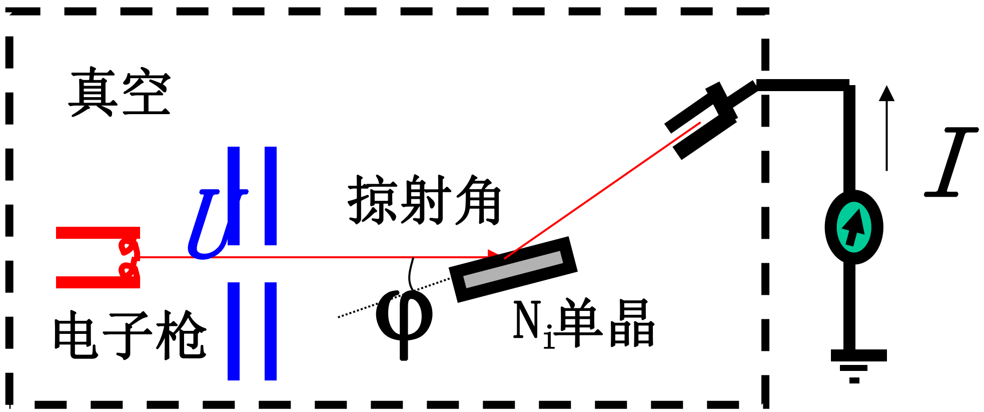
他用物质波的概念成功地解释了玻尔提出的轨道量子化条件：

$$2\pi r = n\lambda = n\frac{h}{mu} \quad \to mur = n\frac{h}{2\pi}$$

朗之万把德布洛意的文章寄给爱因斯坦，爱因斯坦说：“揭开了自然界巨大帷幕的一角”“瞧瞧吧，看来疯狂，可真是站得住脚呢”

2. 波函数的实验验证

① 戴维逊—革末实验（1927年）



- 实验的基本思想

对于电子，m=9.1×10^{-31}kg，设加速电压为U

$$\frac{1}{2}mu^2 = eU \rightarrow u = \sqrt{\frac{2eU}{m}}$$

$$\lambda = \frac{h}{p} \rightarrow \lambda = \frac{h}{mu} = \frac{h}{\sqrt{2emU}}$$

$$\lambda = \frac{12.25}{\sqrt{U}}$$

若 U=100伏 λ=1.225Å

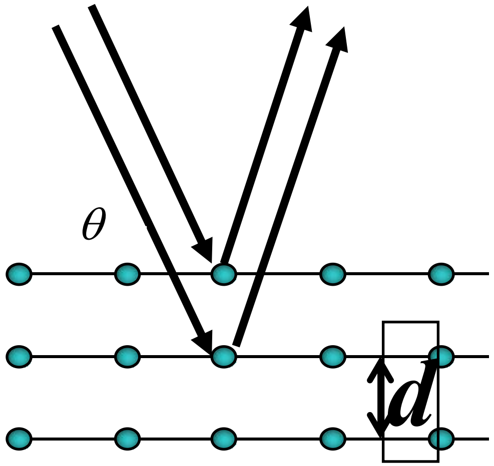
— X射线波段

相当于晶格常数量级，通过类似于晶体对X射线的衍射，可以实现晶体对电子的衍射。

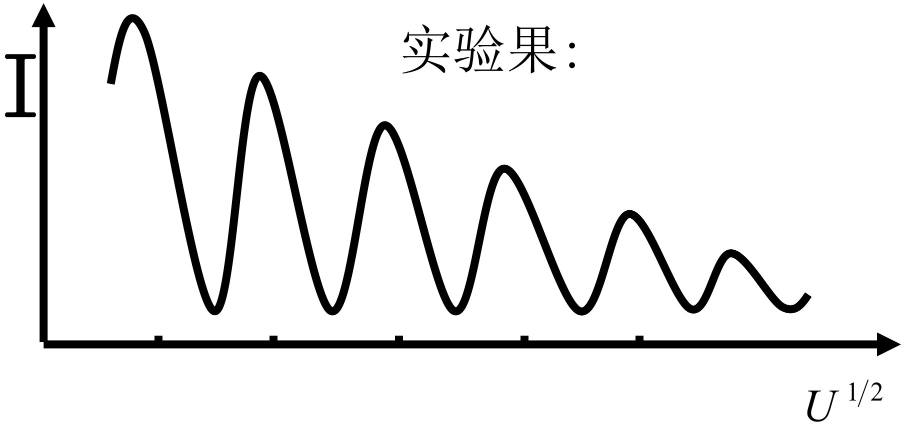
$$2d\sin\theta = k\lambda = k\frac{12.25}{\sqrt{U}} \rightarrow \sqrt{U} = k\frac{12.25}{2d\sin\theta}$$

布拉格方程

$$= \frac{12.25}{2d\sin\theta},\ 2\bullet\frac{12.25}{2d\sin\theta},\ 3\bullet\frac{12.25}{2d\sin\theta},\cdots$$



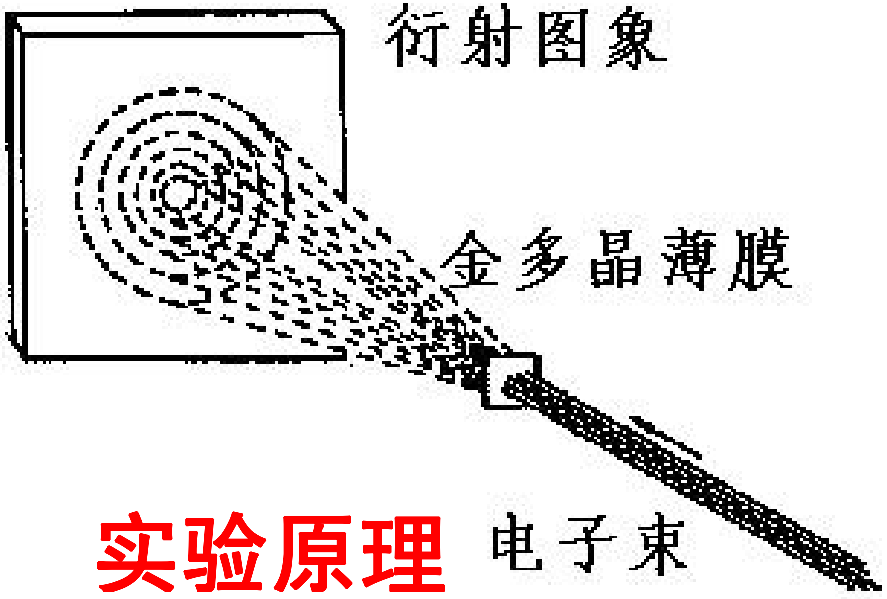
若固定θ 角，改变加速电压，会多次出现电流极大



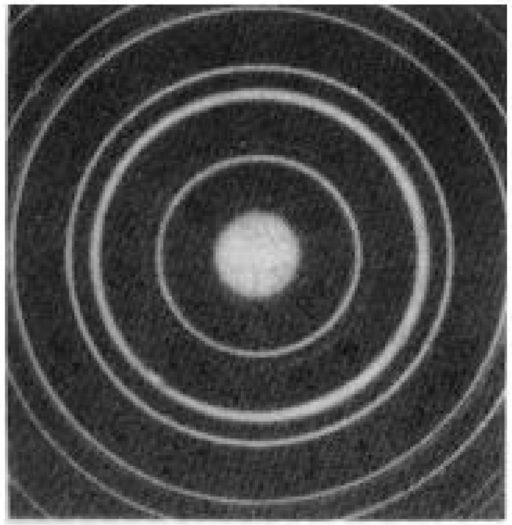
实验果:

$$\sqrt{U} = \frac{12.25}{2d\sin\theta},\ 2\bullet\frac{12.25}{2d\sin\theta},\ 3\bullet\frac{12.25}{2d\sin\theta},\cdots$$

② **G.P.汤姆逊（1927年）**
电子通过金属多晶薄膜的衍射实验.



实验原理



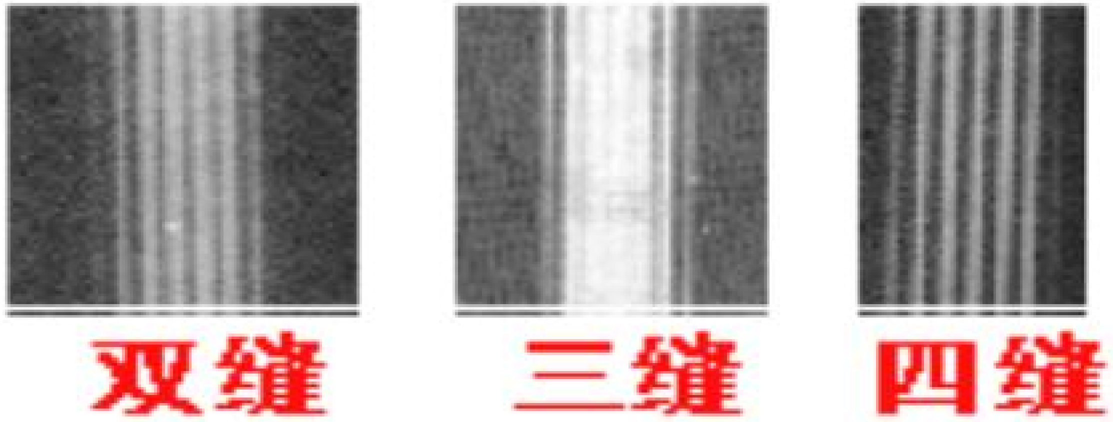
衍射图象

1929年 德布洛意获诺贝尔物理奖。

1937年 戴维逊 与 G.P.汤姆逊获诺贝尔物理奖。

③ 约恩逊实验

1961年C. Jönsson运用铜箔中形成的2-5条细缝得到了电子的多缝干涉图样。

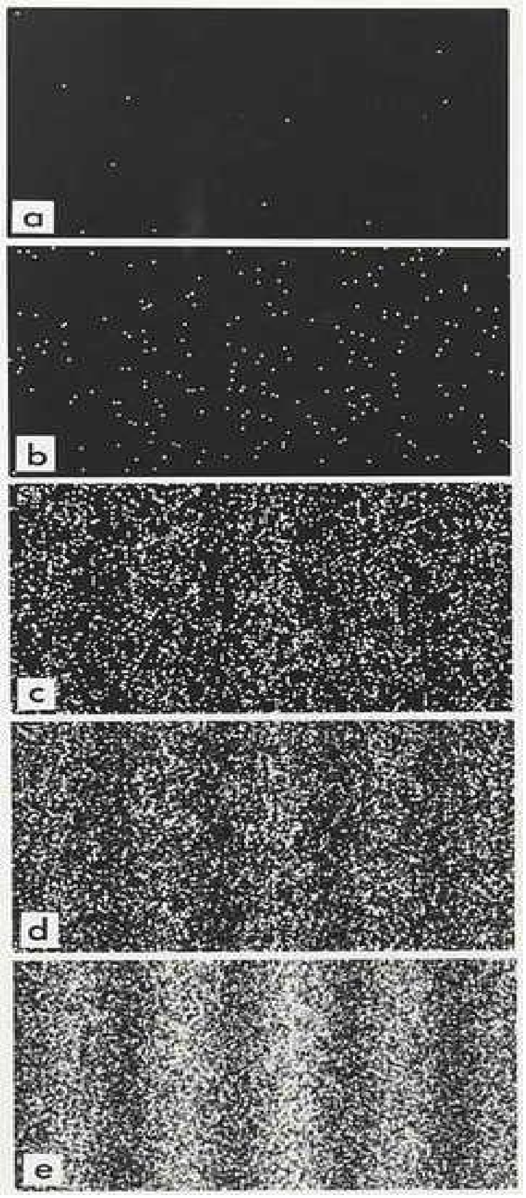


④ 其它实验

1930年艾斯特曼、斯特恩、和他们的同事们证实了普通原子具有波动性。后来实验又验证了质子、中子等实物粒子都具有波动性。

例.　用几率波说明弱电子流单缝衍射

让入射电子几乎一个一个地通过单缝



底片上出现一个一个的点子，开始时点子无规则分布——说明电子具有粒子性，但不满足经典的决定论。

随着电子数增大，逐渐形成衍射图样——衍射图样来源于“单个电子”所具有的波动性——统计规律。

一个电子重复许多次相同实验表现出的统计结果。

德布洛意波（物质波）也称为概率波。

例：质量m=0.01kg，速度v=300m/s的子弹的德布洛意波长为

$$\lambda=\frac{h}{p}=\frac{h}{mv}=\frac{6.63\times10^{-34}}{0.01\times300}=2.21\times10^{-34}m$$

因普朗克常数极其微小，子弹的波长小到实验难以测量的程度(足球的波长也是如此)，它们只表现出粒子性，并不是说没有波动性。

2.2. 波函数及统计解释

1).波函数

既然粒子具有波动性，描述波动性的函数——波函数。

奥地利物理学家薛定谔1925年提出用波函数Ψ(r,t)描述粒子运动状态。

按德布罗意假设：能量E、动量p的“自由粒子”沿x方向运动对应的物质波应为“单色平面波”：

$$\psi(x,t)=\psi_0 e^{-i(\omega t-kx)}$$

或由关系数
$$\begin{cases} E = h\nu = h\dfrac{\omega}{2\pi} = \hbar\omega \rightarrow \omega = \dfrac{E}{\hbar} \\ p = \dfrac{h}{2\pi}\dfrac{2\pi}{\lambda} = \hbar k \rightarrow k = \dfrac{p}{\hbar} \end{cases}$$

可将波函数改写为
$$\begin{cases} \omega = \dfrac{E}{\hbar} \\ k = \dfrac{p}{\hbar} \end{cases} \rightarrow \psi(x,t) = \psi_0 e^{-i(\omega t - kx)} = \psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)}$$

若粒子为三维自由运动，波函数可表示为

$$\psi(\vec{r},t) = \psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r} - Et)}$$

波函数的物理意义是什么？粒子的什么性质在波动？

2).波函数的统计解释

爱因斯坦为了解释光粒子和波的二象性，把光波的强度解释为光子出现的几率密度。

玻恩在这个观念的启发下，马上将其推广到 Ψ函数上：

$|\Psi|^2$必须是电子（或其它粒子）的几率密度”。

物理意义在于：波函数的模的平方（波的强度）代表时刻t、在空间点 $\vec{r}$处，单位体积元中微观粒子出现的概率。

1954年，玻恩获诺贝尔物理奖。

$\psi(\vec{r},t)=\psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\bullet\vec{r}-Et)} \rightarrow$ 不同于经典波的波函数，它无直接的物理意义。

$\rho(\vec{r},t)=\left|\psi(\vec{r},t)\right|^2=\psi(\vec{r},t)^*\psi(\vec{r},t)$

$\rightarrow$ 对单个粒子，表示粒子在某一时刻某一地方出现的概率, $\rho(\vec{r},t)$ 概率分布函数

$N\,|\,\Psi\,|^2 \rightarrow$ 对于N个粒子构成的系统，给出某一时刻某一位置的粒子数的分布密度

$\rho(\vec{r},t)dV=\psi(\vec{r},t)^*\psi(\vec{r},t)dV \rightarrow$ 表示在某一时刻，空间某一位置，体积元中发现粒子的概率

$dN=N\psi(\vec{r},t)^*\psi(\vec{r},t)dV$

$\rightarrow$ 对N个粒子构成的系统，在某一时刻某一位置，在体积元中发现的粒子数

$\psi(\vec{r},t)=\psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\bullet\vec{r}-Et)} \rightarrow \psi_0$ 定义为概率幅度

3).如何理解微观粒子的波粒二象性

① 粒子性:指它与物质相互作用的整体性。但不是经典的粒子，因为微观粒子没有确定的轨道.

② 波动性:可叠加性、干涉、衍射。不是经典的波，并不对应某真实物理量的波动.

③ 在一些情况下，实物粒子突出显示出其粒子特性；而在另一些情况下，则突出显示出波动特性—即波粒二象性。

波动性与粒子性的联系—玻恩统计解释。

4):互补原理

玻尔的原话是:一些经典概念的应用不可避免的排除另一些经典概念的应用，而这另一些经典概念在另一条件下又是描述现象不可或缺的;必须而且只需将所有这些既互斥又互补的概念汇集在一起，才能而且定能形成对现象的详尽无遗的描述。

光和粒子都有波粒二象性，而波动性与粒子性又不会在同一次测量中出现，那么，二者在描述微观粒子时就是互斥的;另一方面，二者不同时出现就说明二者不会在实验中直接冲突。同时二者在描述微观现象，解释实验时又是缺一不可的。因此二者是"互补的"，或者"并协的"。

如果说海森伯的不确定关系从数学上表达了物质的波粒二象性。那么互补原理则从哲学高度概括了波粒二象性。互补原理与不确定关系是量子力学哥本哈根解释的两大支柱

波和粒子在同一时刻是互斥的，但它们在更高层次上统一。

4）.波函数应满足的条件

自然条件：单值、有限和连续

粒子出现在dV 体积内的几率为：粒子在空间各点的概率总和应为 1

$$\rho(\vec{r},t)dV = |\psi(\vec{r},t)|^2 dV \to \int_{\Omega} \psi^*(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t)dV = 1$$

—（**Ω** – 全空间 ）

2.3、不确定性关系

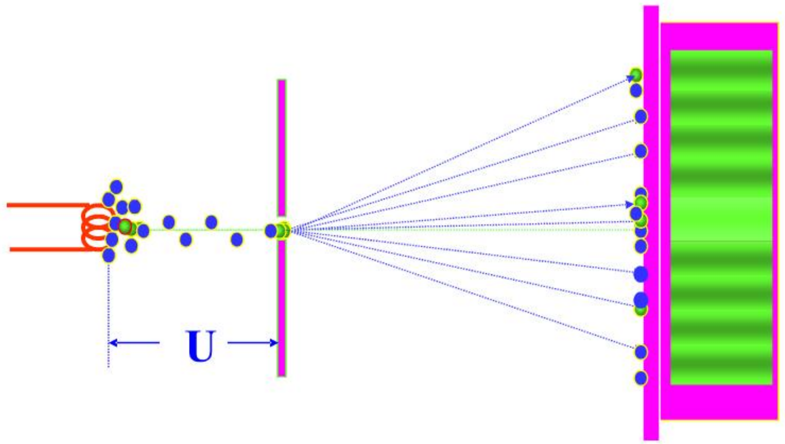
1. 位置—动量不确定关系

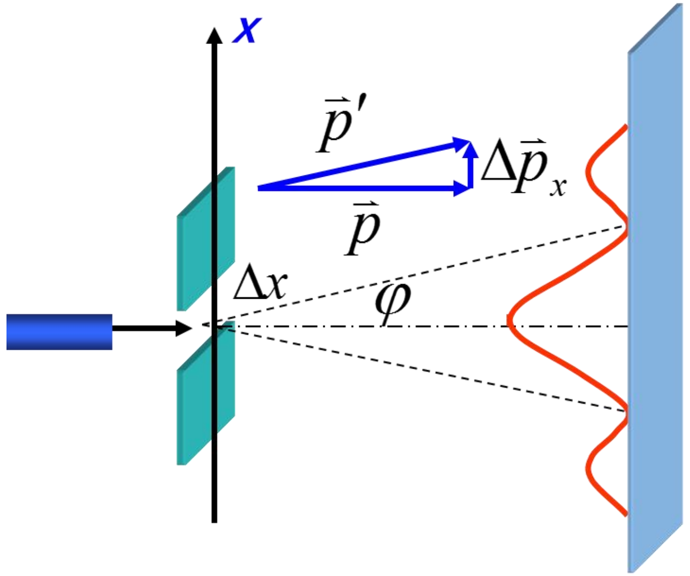
按照经典波动理论，约束在空间某区域内的波不可能是单色的—，不可能具有唯一的波长。

这一结论对物质波同样正确：被束缚在某区域的粒子不可能具有确定的动量，即粒子的坐标和动量不能同时取确定值，存在一个不确定关系。

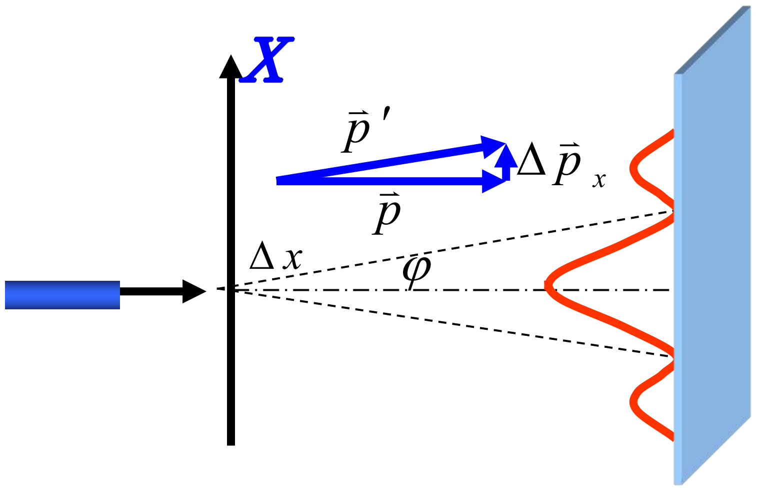
海森堡在1927年发表了著名的位置—动量不确定关系 $\Delta x \bullet \Delta p_x \sim h$

●电子的单缝衍射





$$\Delta x \sin\phi = \pm\lambda \rightarrow \phi \approx \sin\phi \approx \frac{\lambda}{\Delta x}$$



如果把单缝看成对电子坐标的测量仪器，
Δx—相当于对电子坐标测量的不确定度。

单缝存在使电子在x方向的动量分量出现不确定性

$$\Delta p_x = \left|\vec{p}\,' - \vec{p}\right| \approx \varphi p = \frac{\lambda}{\Delta x} p = \frac{h}{\Delta x}$$

$$\Delta x \bullet \Delta p_x = h$$

对坐标x测量得越精确（Δx越小），动量不确定性Δp_x 就越大（衍射越厉害）。

电子的坐标和动量不能同时确定。

不限制电子坐标时，动量可以取确定值。

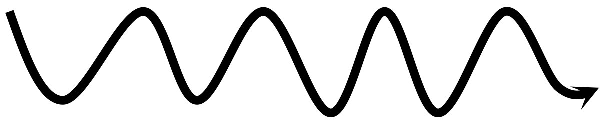
严格的不确定性关系应该是：

$$\begin{cases} \Delta x \bullet \Delta p_x \geq \dfrac{\hbar}{2} \\ \Delta y \bullet \Delta p_y \geq \dfrac{\hbar}{2} \\ \Delta z \bullet \Delta p_z \geq \dfrac{\hbar}{2} \end{cases}$$

三维空间中

例．氦氖激光器发光波长 $\lambda = 632.8nm$ ，

谱线宽度 $\Delta\lambda = 10^{-9}nm$ 求即相干长度，



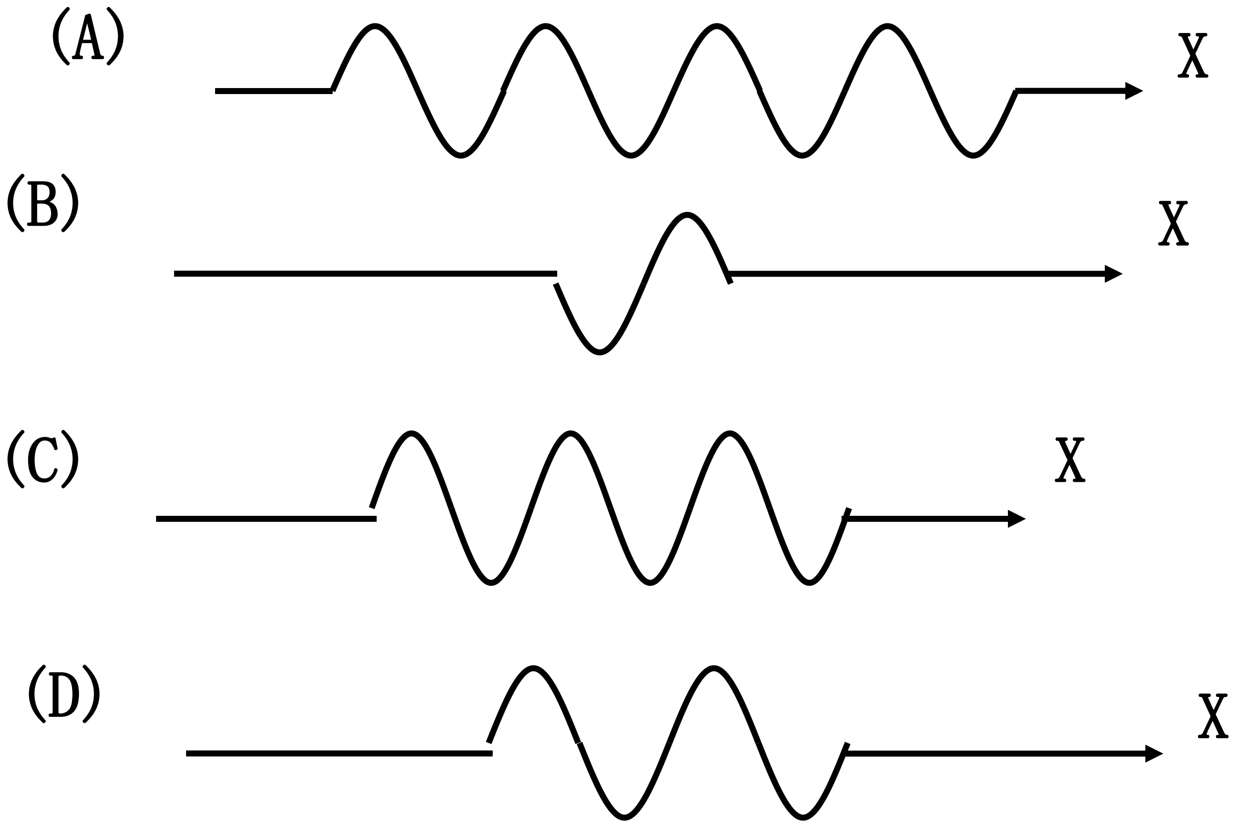
解： 谱线展宽导致光子动量的不确定

$$p = \frac{h}{\lambda} \to \Delta p_x = \frac{h}{\lambda^2}\Delta\lambda$$

$$\Delta x \bullet \Delta p_x = h \to \Delta x \bullet \frac{h}{\lambda^2}\Delta\lambda = h$$

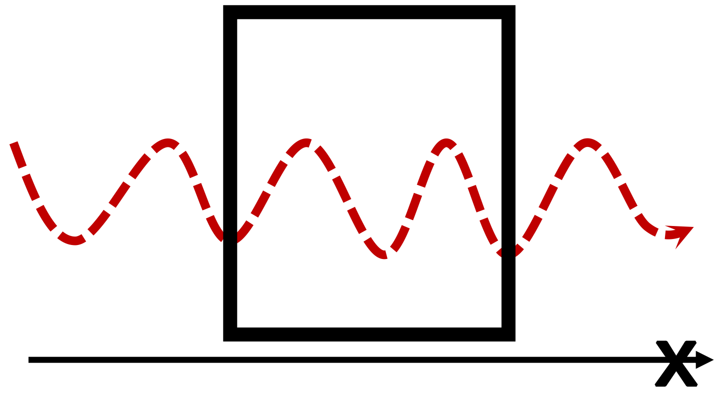
$$\Delta x = \frac{\lambda^2}{\Delta\lambda} = 400km$$

例. 如图,(A)、(B)、(C)、(D)分别为粒子运动的波函数图线，则其中确定粒子动量精确度最高的波函数是哪个?



解： Δp_x 最小 $\rightarrow$ Δx最大 $\rightarrow$ ψ非零区域最大$\rightarrow$ (A)

思考题：一单色波传播到缝时，根据测不准原理判断？



解：

$$\Delta p \cdot \Delta x \geq h \rightarrow \Delta p \geq \frac{h}{\Delta x}$$

$$p = \frac{h}{\lambda} \rightarrow \Delta p = \left| \frac{h}{\lambda^2} \Delta\lambda \right|$$

$$\left| \frac{h}{\lambda^2} \Delta\lambda \right| \geq \frac{h}{\Delta x} \rightarrow \Delta\lambda \geq \frac{\lambda^2}{\Delta x}$$

已知：电子位置的不确定度为0.1A.计算其动量的不确定度；如果能量为1KeV,计算能量的不确定度；

解：

$$\Delta x \bullet \Delta p_x = h$$

$$\Delta p_x = \frac{h}{\Delta x} = \frac{h}{\left(0.1\times 10^{-10}\right)}$$

$$E = \frac{p^2}{2m} \to \Delta E = \frac{2p\Delta p}{2m} = \frac{p\Delta p}{m}$$

$$p^2 = E2m \to \Delta E = \frac{2p\Delta p}{2m} = \frac{\sqrt{E2m}\Delta p}{m} = \sqrt{\frac{2E}{m}}\frac{h}{\Delta x}$$

思考题：研究深阱中粒子的最小能量

解：

$$L\Delta p = h$$

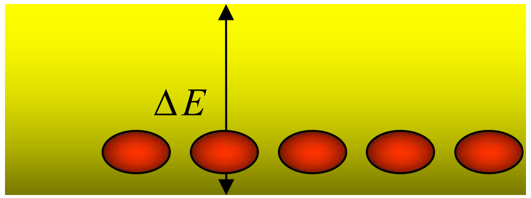
$$\Delta p = 2p = \frac{h}{L}$$

$$p = \frac{h}{2L}$$

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{8mL^2}$$

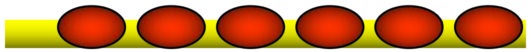
2.4. 能量和时间的不确定关系

- 原子处于激发态的平均寿命

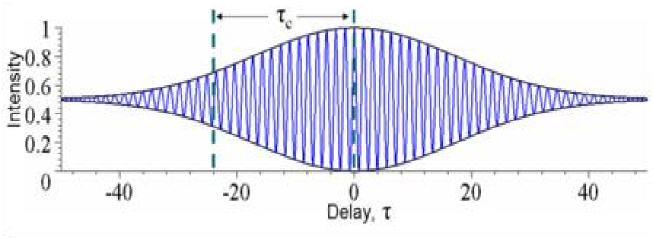


$$\Delta x \cdot \Delta p_x = \frac{\hbar}{2} \rightarrow c\Delta t \cdot \Delta p_x = \frac{\hbar}{2}$$

$$E = cp \rightarrow \Delta E = c\Delta p$$



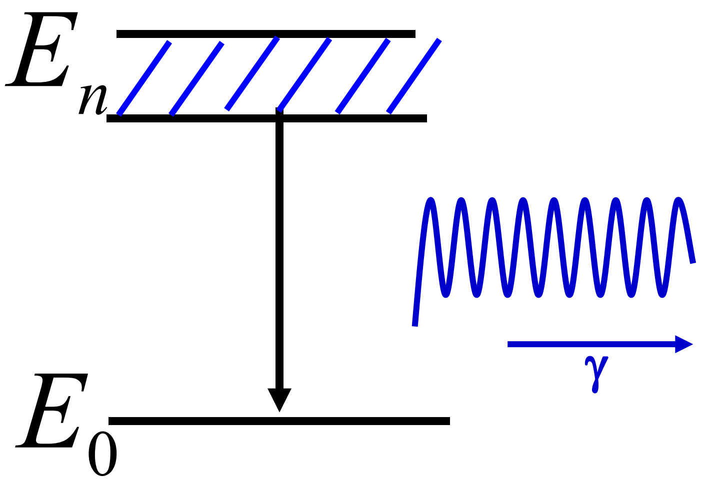
$$\Delta E \, \Delta t = \frac{\hbar}{2}$$



例. 原子在激发态的寿命为10^{-8} s，由不确定关系 $\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$

可以解释为什么原子谱线自然宽度

$$\Delta E \geq \hbar / (2\Delta t) \approx 1\times 10^{-7}\,\text{eV}$$



谱线宽度：

$$\Delta \nu = \frac{\Delta E}{h} \approx 1\times 10^{8}\,\text{Hz}$$

原子基态寿命无穷长，基态有确定的能量值。

与实验测量结果吻合！