知 识 回 顾

波粒二象性：

$$\boldsymbol{\varepsilon = h\nu}$$

$$\boldsymbol{p = \frac{h}{\lambda}}$$

德布罗意波长：

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_0 v}$$

$$\lambda \approx \frac{h}{\sqrt{2m_0 E_k}}$$

坐标和动量的不确定关系：

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq h$$

一、坐标和动量的不确定关系

严格推导可证明，在平均意义上

$$\boxed{\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}}$$

$$\boxed{\Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}}$$

$$\boxed{\Delta z \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}}$$

海森伯不确定关系

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.0545887 \times 10^{-34} J \cdot s$$

缝宽越小，粒子衍射性越明显，动量越不容易确定！

解释问题：要同时确定x、P，必定有一个范围Δx 、ΔP.

二、能量和时间的不确定关系

$$\boxed{\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}}$$

Δt：为原子处于该激发态的平均寿命

ΔE ：为原子激发态的能级宽度

原子在激发态的时间 $\Delta t = 10^{-8}\,(s)$

原子激发能级的宽度 $\Delta E \geq \dfrac{\hbar}{2\Delta t} \approx 5.0 \times 10^{-27}\,(J)$

原子光谱的谱线必有一定宽度

物理意义：

1） 微观粒子同一方向上的坐标与动量不可同时准确测量，微观粒子运动失去了“轨道”概念。

2） 不确定性的根源是微观粒子的“波粒二象性”，与仪器精度和测量方法的缺陷无关。

3） 对宏观粒子，因h 很小，所以 $\Delta x \Delta p_x \to 0$ 可视为位置和动量能同时准确测量。

例： 试比较电子和质量为10g的子弹位置的不确定量，假设它们在x方向都以速度200m/s运动，速度的不确定度在0.01%内。

解： $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \Rightarrow \Delta x = \frac{\hbar}{2\Delta p_x} = \frac{h}{4\pi\Delta p_x}$

电子：$\Delta p_x = 0.01\% m v_x = 10^{-4} \times 9.1 \times 10^{-31} \times 200 = 1.8 \times 10^{-32}$

$$\Delta x = \frac{6.63 \times 10^{-34}}{4\pi \times 1.8 \times 10^{-32}} = 2.93 \times 10^{-3} m$$

子弹：$\Delta p_x = 0.01\% m v_x = 10^{-4} \times 10 \times 10^{-3} \times 200 = 2.0 \times 10^{-4} kg \cdot m \cdot s^{-1}$

$$\Delta x = \frac{6.63 \times 10^{-34}}{4\pi \times 2.0 \times 10^{-4}} = 3.3 \times 10^{-30} m$$

例、光子的波长 λ=3000Å，如果确定精确度为 $\Delta\lambda/\lambda=10^{-6}$，求此光子的位置不确定度.

解： 不确定度关系：$\Delta x \Delta p_x \geq \dfrac{\hbar}{2}$

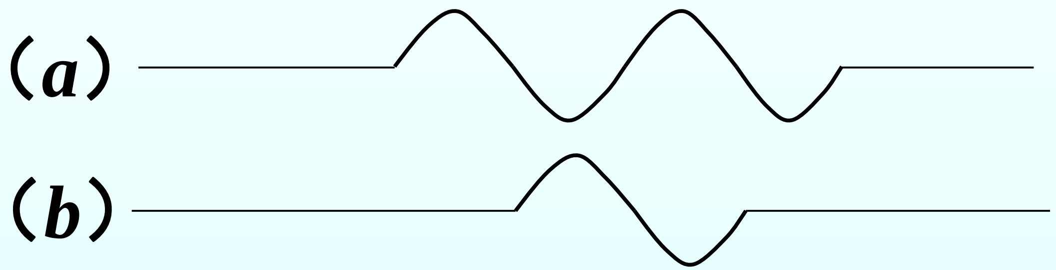
$$\Rightarrow \quad \Delta x \geq \frac{\hbar}{2\Delta p_x} = \frac{h}{4\pi \Delta p_x}$$

$$\because\ p = \frac{h}{\lambda} \qquad \therefore\ |\Delta p| = \left| -\frac{h\Delta\lambda}{\lambda^2} \right| = \frac{h\Delta\lambda}{\lambda^2}$$

$$\Delta x \geq \frac{h}{4\pi \Delta p_x} = \frac{\lambda^2}{4\pi \Delta\lambda} = \frac{\lambda}{4\pi \dfrac{\Delta\lambda}{\lambda}} = 0.024m$$

思考：

粒子（a）（b）的波函数分别如图所示，若用位置和动量描述他们的运动状态，两者中那个位置不确定度大，那个动量不确定度大？



由图可知（a）粒子的位置不确定度大

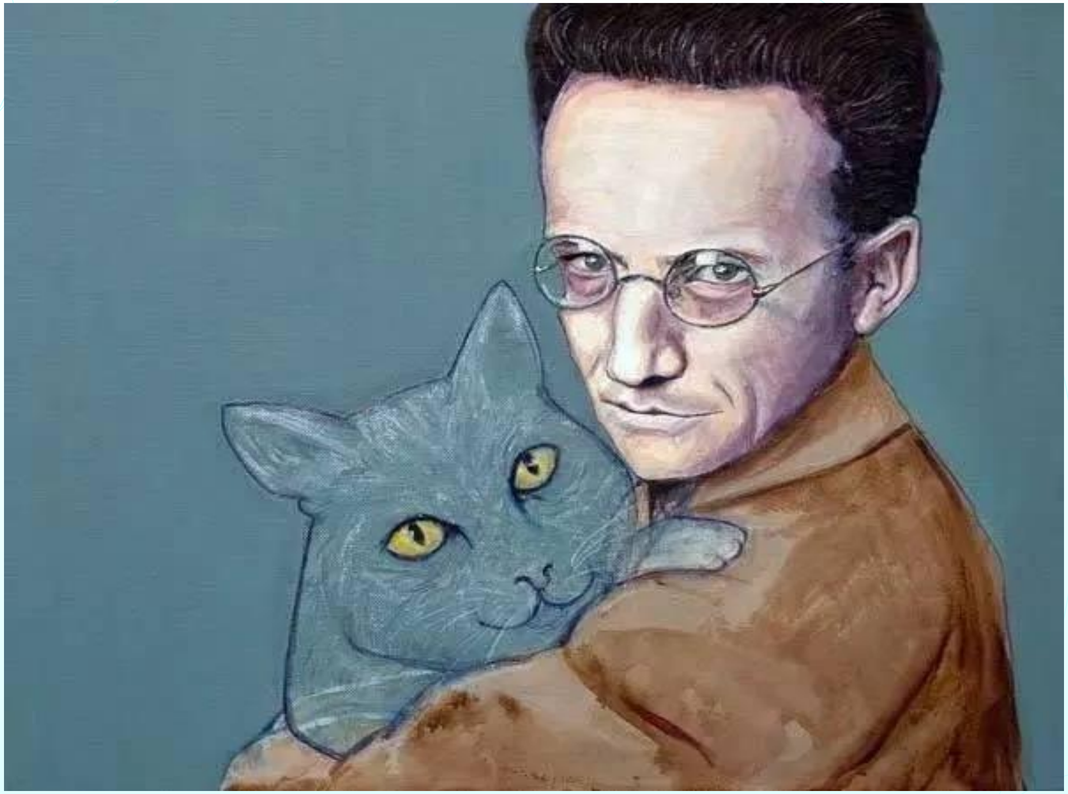
$$\because \Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

因而（b）粒子的动量不确定度大

小　结

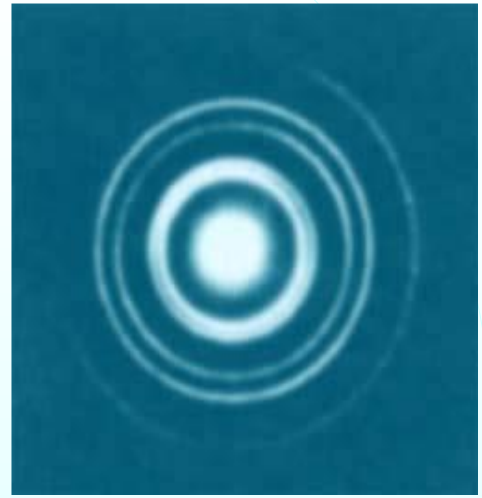
不确定度关系

- 维尔纳-海森堡
  - 1901-1976
  - 德国物理学家
  - 矩阵力学
  - 不确定性原理
  - 1932年诺贝尔物理学奖
- 坐标-动量不确定关系
  - 单缝衍射
  - $$\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$$
- 能量-时间不确定度关系
  - 谱线宽度
  - $$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$



问题："薛定谔的猫"真能超越生死吗？

知识回顾



一切实物粒子具有波粒二象性

描述微观粒子运动状态如何描述？

§13-7 波函数及其统计诠释

一、宏观运动物体与微观运动粒子

	轨道	运动状态描述	运动基本方程
宏观运动物体	有	位矢、动量	牛顿第二定律
微观运动粒子	无	波函数	薛定谔方程

- 机械波 $y(x,t)=A\cos 2\pi(\nu t-\frac{x}{\lambda})$

- 电磁波 $\begin{cases} E(x,t)=E_0\cos 2\pi(\nu t-\frac{x}{\lambda}) \\ H(x,t)=H_0\cos 2\pi(\nu t-\frac{x}{\lambda}) \end{cases}$

- 复数形式 $y(x,t)=y_0 e^{-i2\pi(\nu t-\frac{x}{\lambda})}$

Erwin Schrodinger
1887—1961

二、微观粒子状态的描述——波函数

自由粒子：

- 沿x轴匀速直线运动，有确定动量、能量
- 平面单色波

$$\Psi(x,t)=\Psi_0 e^{-i2\pi(\nu t-\frac{x}{\lambda})}$$

$$E=h\nu \quad p=\frac{h}{\lambda}$$

$$\boxed{\Psi=\Psi_0 e^{-\frac{2\pi i}{h}(Et-px)}} \Rightarrow \boxed{\Psi=\Psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)}}$$

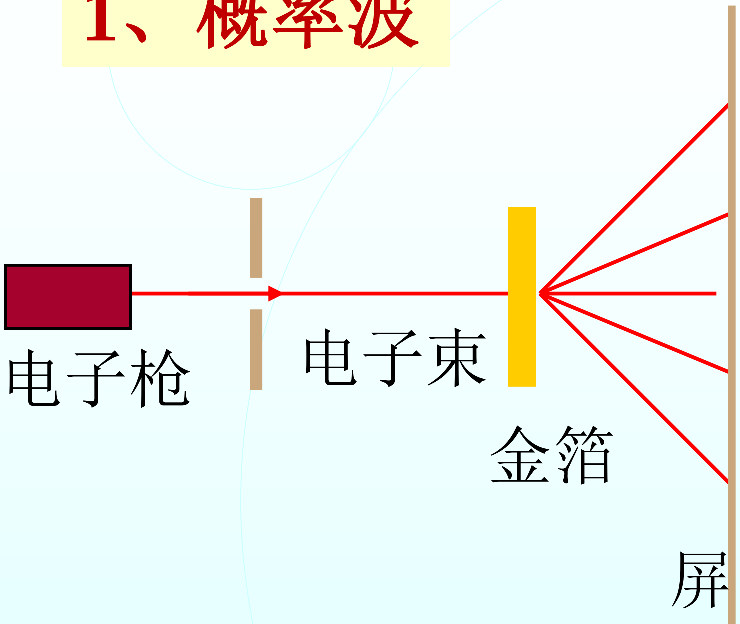
沿 $\vec{r}$ 方向：

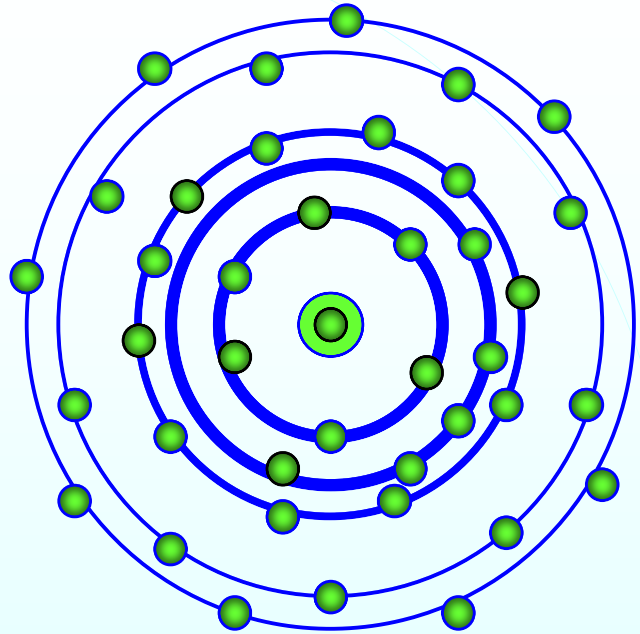
$$\Psi(\vec{r},t)=\Psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-\vec{p}\cdot\vec{r})}$$

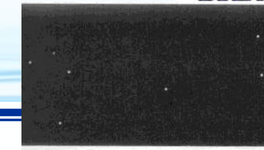
自由粒子波函数

三、波函数的统计解释

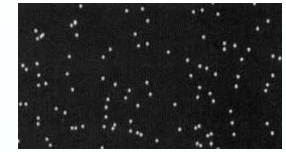
1、概率波







几个电子



数百个电子

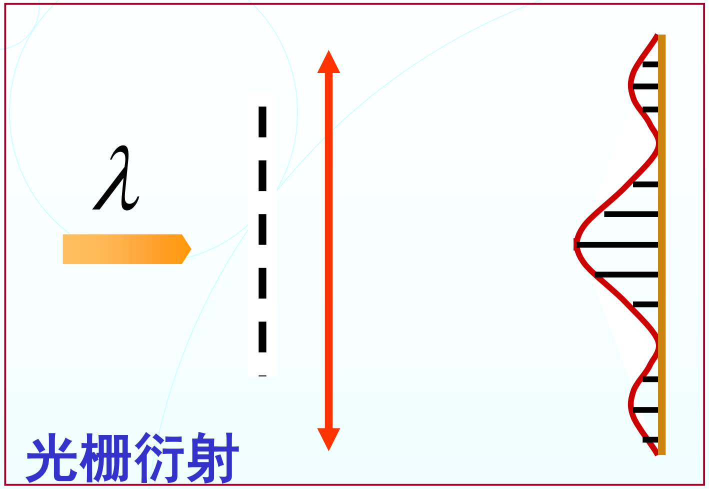
数万个电子

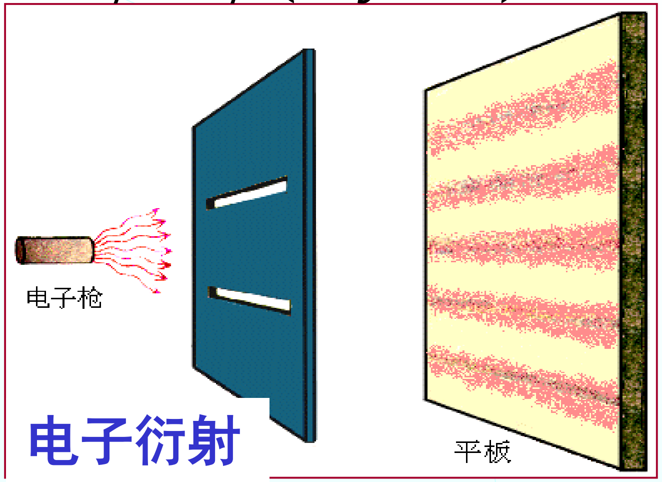
- 1926年：粒子在空间位置出现的概率具有波动性的分布.
- 1927年：德布罗意波是描述粒子在空间的概率分布，即“概率波”．

Max Born
1882-1970
The Nobel Prize in Physics 1954

类　比

$$\psi = \psi(x, y, z, t)$$





波动观点：	$I \propto E_0^2$	$I \propto \lvert\Psi\rvert^2$
粒子观点：	$I = Nh\nu \propto N$	$I \propto N$
I 大处：	光子在该处出现概率大	电子在该处出现概率大

⟹ 粒子出现概率 $\propto \lvert\Psi\rvert^2$ $\xrightarrow{\text{正实数}}$ $I \propto \lvert\Psi\rvert^2 = \Psi\Psi^*$

2、玻恩的统计解释：

德布罗意波的强度与粒子在该处出现的概率 W成正比

$$W \propto |\Psi|^2$$

某一时刻粒子出现在某点附近在体积元 dV 中的概率为：

$$dW = |\Psi|^2 dV = \Psi\Psi^* dV$$

概率密度 $|\Psi|^2$**：**

是粒子 t 时刻在空间某处单位体积内粒子出现的概率

$$\boxed{|\Psi|^2 = \Psi\Psi^*}$$

$$|\Psi|^2 = \Psi\Psi^*$$

波函数 Ψ（*x, y, z, t*）的统计解释：

- 波函数在某点的强度 $|\Psi|^2$ 和该点找到电子的几率成正比
- 波函数是概率波
- 波函数满足态叠加原理：

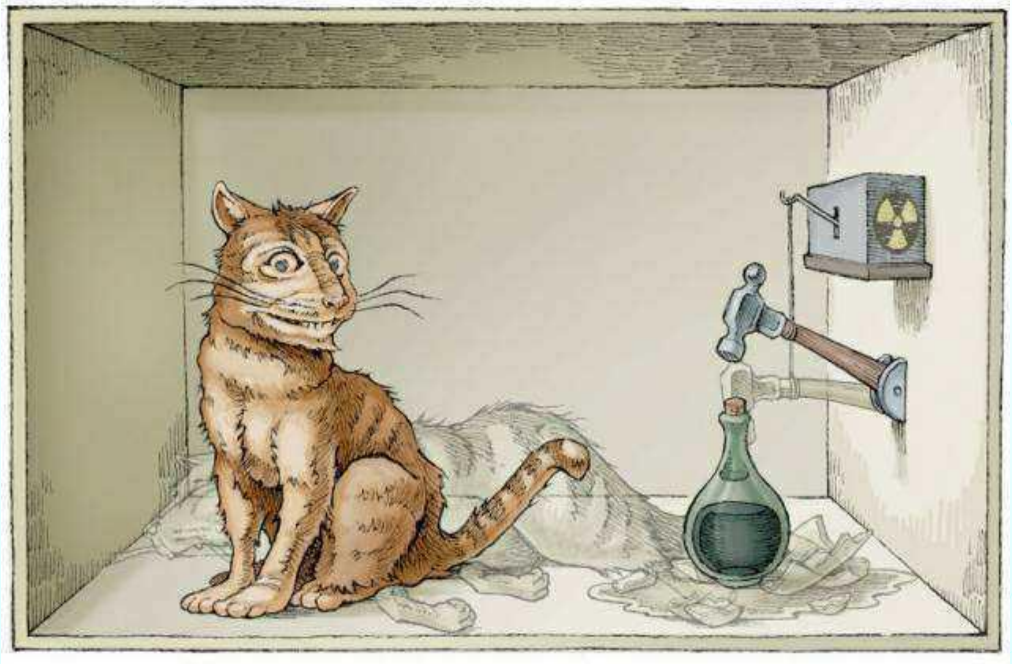
$$\boxed{\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \cdots + c_n\psi_n}$$

3、波函数必须满足的条件

- 标准条件：<u>单值性</u>、<u>连续性</u>、<u>有限性</u>
- 归一化条件：$\int_V |\Psi|^2 dV = 1$

解释问题：

"薛定谔的猫"



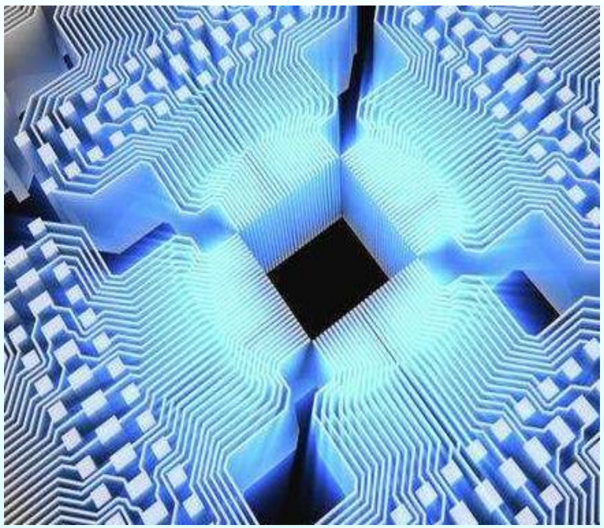
封闭盒子里的猫处于一种叠加态

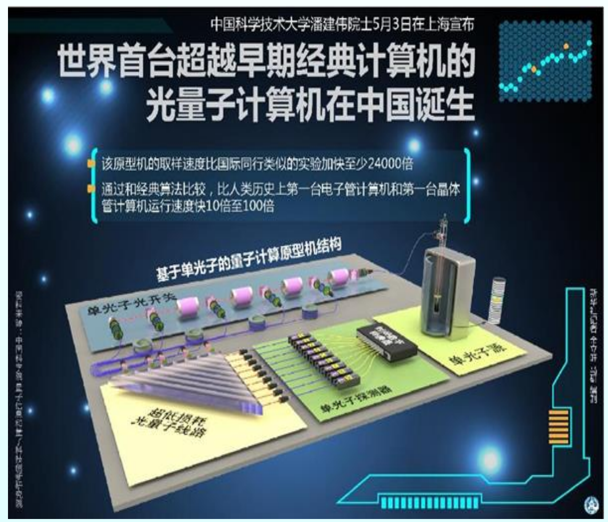
此思想实验的目的：反驳哥本哈根学派对量子系统叠加态的理论

四、量子力学的应用

量子计算机：遵循量子力学规律，进行高速数学和逻辑运算、存储及处理量子信息的物理装置。

应用的是量子比特, 可同时处在多个状态.





- 2017年5月3日，中国科学技术大学潘建伟教授宣布，利用高品质量子点单光子源构建了**世界首台单光子量子计算机.**
- 2018年12月6日，首款量子计算机控制系统 OriginQ Quantum AIO在中国合肥诞生.

波函数

- **1 定义**
  - 描述粒子德布罗意波的函数
  - 自由粒子波函数 $\psi = \psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)}$
- **2 统计解释**
  - 波动观点
    - 条纹亮度对应于波的衍射强度
    - $I \propto |\psi|^2 = \psi\psi^*$
  - 量子观点
    - 条纹亮度对应于粒子出现的概率
    - $I \propto |\psi|^2 = \psi\psi^* = \frac{dN}{N\,dv}$
- **3 条件**
  - 单值
  - 有限
  - 连续
  - 归一化

一、薛定谔方程的引入

1、自由粒子的薛定谔方程（含时）

一维自由粒子的波函数

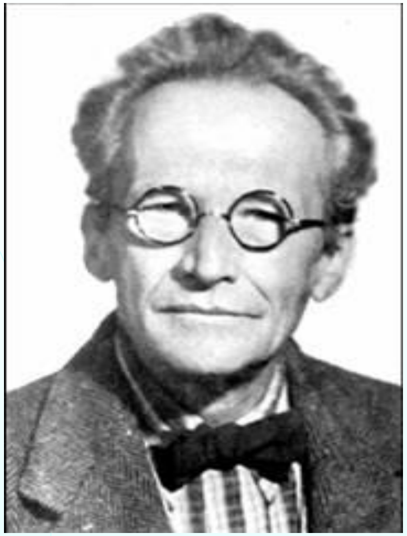
$$\Psi(x,t)=\psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)}$$

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{i}{\hbar}E\psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)}=-\frac{i}{\hbar}E\Psi$$

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}=\left(\frac{ip}{\hbar}\right)^2\psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)}=-\left(\frac{p}{\hbar}\right)^2\Psi$$

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

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}\quad\Longleftrightarrow\quad-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}$$



Erwin Schrödinger
1887—1961

The Nobel Prize in Physics 1933

一维自由粒子含时薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}$$

2、三维自由粒子的薛定谔方程：

拉普拉斯算符： $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\vec{r},t)}$$

说明：

- 由态叠加原理，薛定谔方程是线性方程；
- 含有对时间的一阶偏导数，且要求波函数ψ是复数。

二、势场中的薛定谔方程

对于势场 $U(\vec{r},t)$ 中的粒子，其能量

$$E=\frac{p^2}{2m}+U(\vec{r},t)$$

势场中的含时薛定谔方程：

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t)=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\vec{r},t)\right]\Psi(\vec{r},t)}$$

薛定谔方程与经典波动方程之间的重要差别是出现了虚数i

三、定态薛定谔方程

若势函数不显含时间， 即 $U(\vec{r},t)=U(\vec{r})$

令 $\Psi(\vec{r},t)=\psi(\vec{r})f(t)$

代入 $$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t)=[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\vec{r})]\Psi(\vec{r},t)$$

两边同时除以 $\psi(\vec{r})f(t)$

$$\Rightarrow\quad \underline{i\hbar\frac{1}{f(t)}\frac{\partial f(t)}{\partial t}}=\underline{\frac{1}{\psi(\vec{r})}\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\vec{r})\right]\psi(\vec{r})}$$

时间函数 = 空间函数 = 常量（与x、t无关）

$$i\hbar\frac{1}{f}\frac{\partial f}{\partial t}=E \Rightarrow \frac{\partial f}{\partial t}=\frac{1}{i\hbar}Ef(t)=-\frac{i}{\hbar}Ef(t)$$

$$\Rightarrow \boxed{f(t)=Ce^{-\frac{i}{\hbar}Et}}$$

$$\Psi(\vec{r},t)=\psi(\vec{r})f(t)$$

$$\Rightarrow \boxed{\Psi(\vec{r},t)=\psi(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}Et}}$$

E --- 自由粒子的能量

定态薛定谔方程

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\vec{r})\right]\psi(\vec{r})=E\psi(\vec{r})$$

$\psi(\vec{r})$——定态波函数

或

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r})+(U-E)\psi(\vec{r})=0$$

定态波函数性质：

1）能量 E 不随时间变化

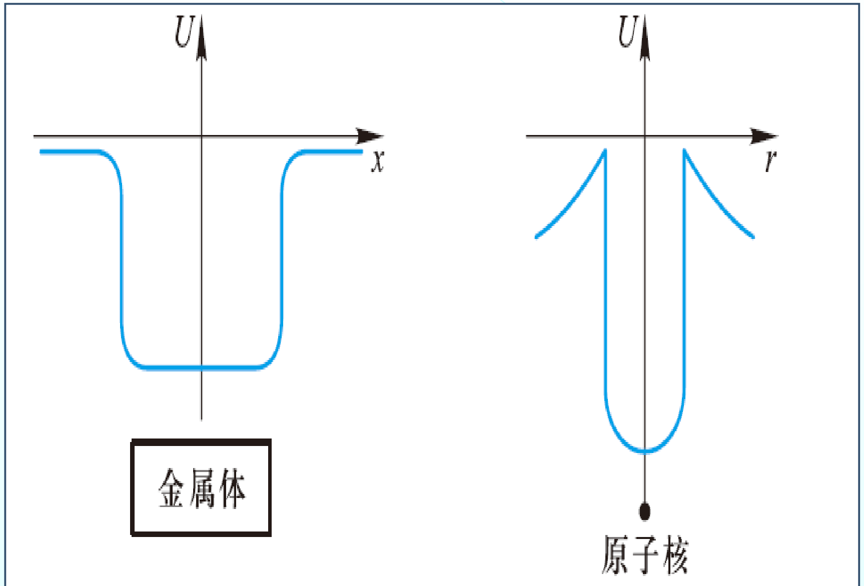
2）概率密度 $|\psi|^2$ 不随时间变化

E：称为能量的本征值

$\psi(\vec{r})$：称为本征态波函数

问题：为何狮子能穿山而过呢？

§13-9 一维定态薛定谔方程的应用



(a) 电子在金属中的势能曲线　(b) 质子在原子核中的势能曲线

理想模型：一维无限深方势阱

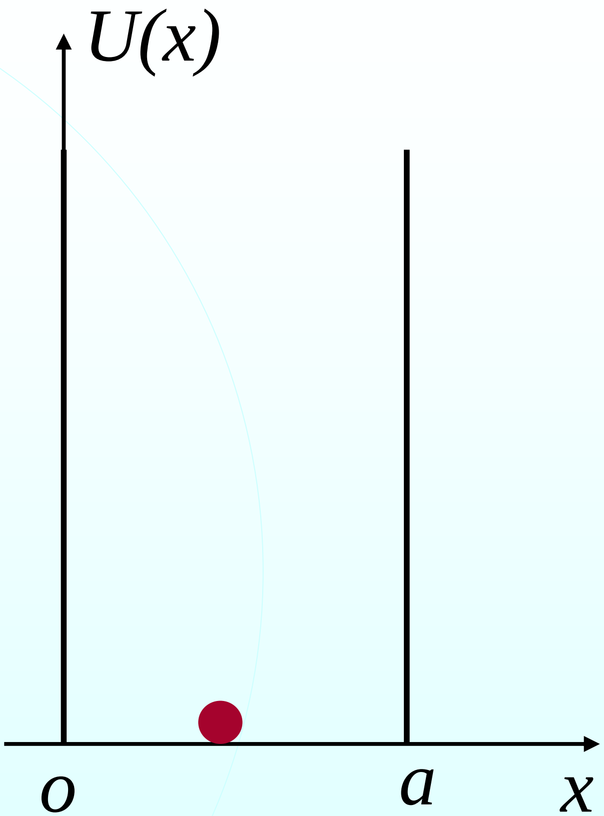
理想反射壁：粒子与壁发生弹性碰撞，粒子不受力，动能不变.

一、一维无限深势阱问题

设粒子质量为 m

势能函数：

$$U(x)=\begin{cases}0 & (0\le x\le a)\\ \infty & (x<0,\ x>a)\end{cases}$$



无限深方势阱

定态薛定谔方程：

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\vec{r})]\psi(\vec{r})=E\psi(\vec{r})$$

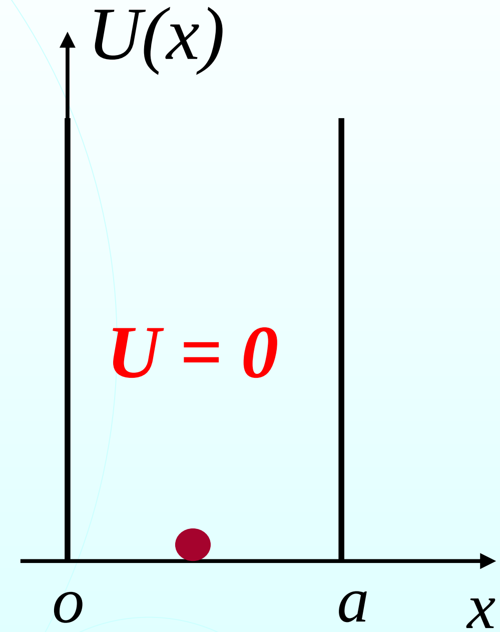
$$\Rightarrow\quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+U\psi=E\psi \quad\Rightarrow\quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}=(E-U)\psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}=(E-U)\psi$$

阱外：（1） $x<0\,,\,x>a$

$\because\ U=\infty$ $\qquad$ $\boxed{\therefore\ \psi_e(x)\equiv 0}$

结论： 阱外粒子出现的几率为零



阱内：（2） $0<x<a$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_i}{dx^2}=E\psi_i \;\Rightarrow\; \frac{d^2\psi_i}{dx^2}=-\frac{2mE}{\hbar^2}\psi_i$$

令 $k^2=\dfrac{2mE}{\hbar^2}$ 得 $\dfrac{d^2\psi_i}{dx^2}=-k^2\psi_i$

通解： $\psi_i(x)=C\sin(kx+\delta)$

常数 C 和 δ 由波函数的自然条件确定

$$\psi_{\mathrm{i}}(x) = C\sin(kx+\delta)$$

- 波函数在阱壁上的连续性条件

$$\psi(0) = \psi(a) = 0$$

$$\psi_{\mathrm{i}}(0) = \psi_{\mathrm{e}}(0) = 0 \Rightarrow C\sin\delta = 0 \Rightarrow \delta = 0$$

$$\psi_{\mathrm{i}}(a) = \psi_{\mathrm{e}}(a) = 0 \Rightarrow C\sin ka = 0$$

$$\Rightarrow ka = n\pi \Rightarrow k = \frac{n\pi}{a}$$

$$\Rightarrow \psi_i(x) = C\sin\frac{n\pi}{a}x \quad (n = 1,2,\cdots)$$

- 归一化常数C 和定态波函数：

$$\psi_i(x) = C\sin\frac{n\pi}{a}x$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x)|^2\,\mathrm{d}x = 1$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x)|^2\,\mathrm{d}x = \int_0^a C^2\sin^2\frac{n\pi x}{a}\,\mathrm{d}x = 1$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{C = \sqrt{\frac{2}{a}}}$$

定态波函数为：

$$\psi_i(x) = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi}{a}x & 0 \le x \le a \\ 0 & 0 > x,\ x > a \end{cases}$$

$n=1,2,3\ldots\ldots$

讨论：

（1）粒子的能量量子化

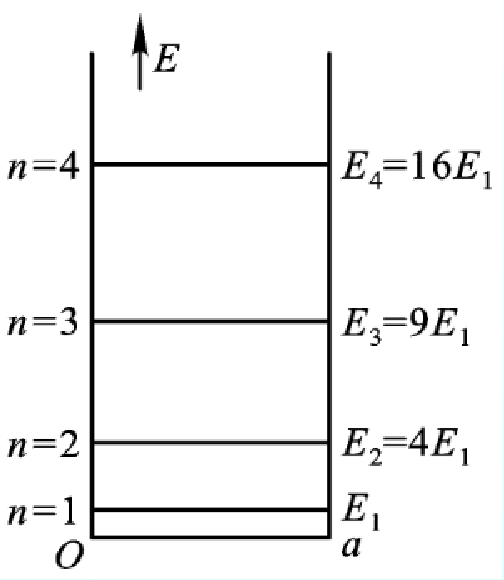
$$\left.\begin{aligned} k^2 &= \frac{2mE}{\hbar^2} \\ k &= n\pi/a \end{aligned}\right\}$$

$$\Rightarrow \boxed{E = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = E_n}$$

能量本征值

$$(n = 1,2,\cdots)$$

能量量子数



能量量子化（能级）

（2）粒子的最小能量不等于零

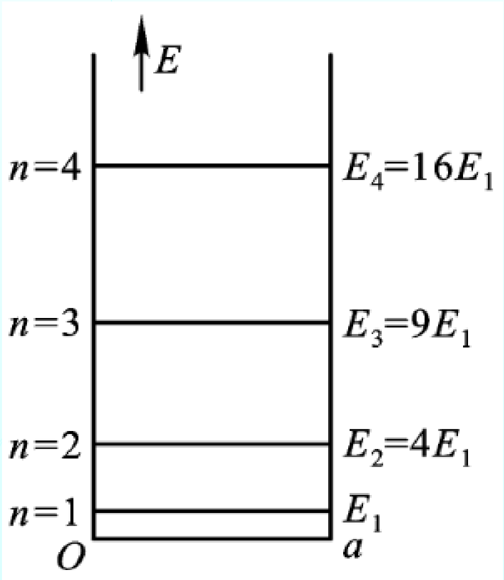
$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} > 0$$

（基态能、零点能）

在阱内不可能有静止的粒子——波动性

零点能的存在与不确定度关系协调一致

“静止的波”无意义!

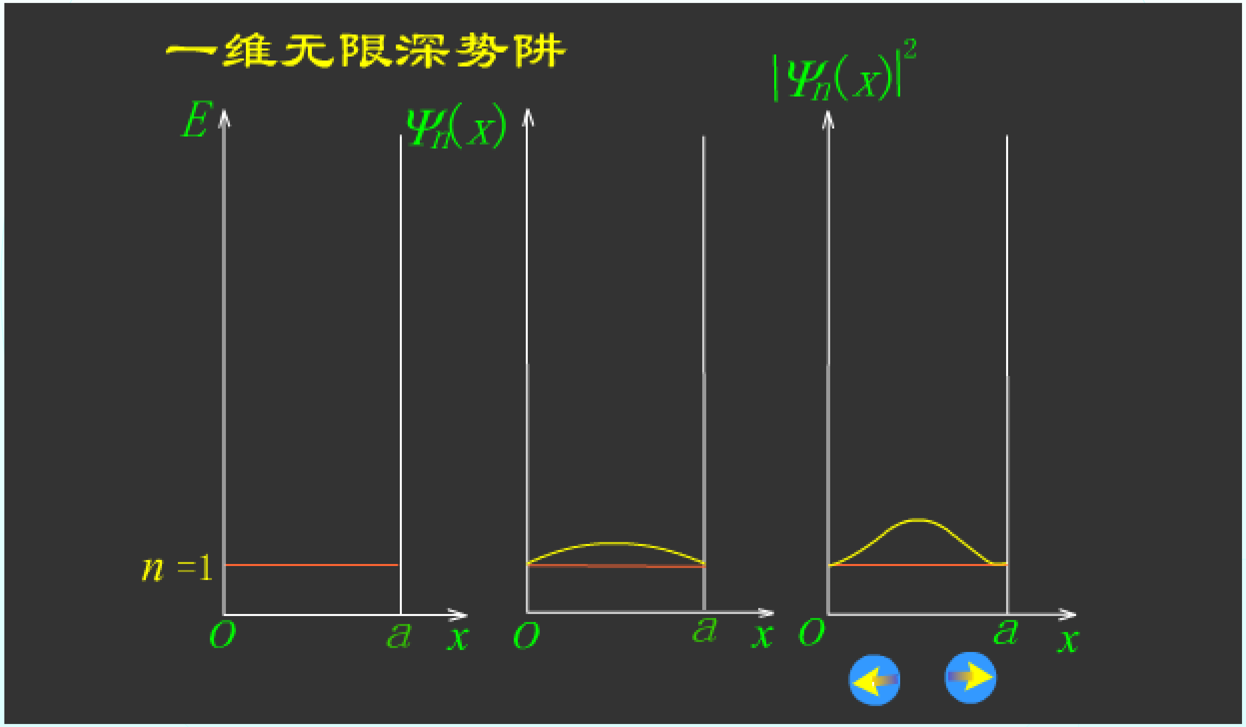


思考：能量间隔又如何呢？

（3）势阱中粒子出现的概率是不均匀的

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

$$\rho_n(x)=\left|\psi_n(x)\right|^2=\frac{2}{a}\sin^2\frac{n\pi x}{a}$$



当 $n\to\infty$ 时，阱内的概率分布趋向均匀，量子→经典。

例、试求一维无限深势阱中粒子概率密度最大值的位置.

解：一维无限深势阱中粒子的概率密度为

$$\left|\psi_n(n)\right|^2=\frac{2}{a}\sin^2\frac{n\pi}{a}x \qquad n=1,2,3,\cdots$$

将上式对x求导一次，并令它等于零

$$\left.\frac{d\left|\psi_n(x)\right|^2}{dx}\right|_{x=0}=\frac{4n\pi}{a^2}\sin\frac{n\pi}{a}x\cos\frac{n\pi}{a}x=0$$

因为在阱内，即 $0<x<a$， $\sin\frac{n\pi}{a}x\neq 0$

只有 $\cos\frac{n\pi}{a}x=0$

$$\frac{n\pi}{a}x=(2k+1)\frac{\pi}{2} \qquad k=0,1,2,\cdots,n-1$$

最大值的位置: $\boxed{x=(2k+1)\dfrac{a}{2n}}$

例如:

$n=1, k=0$ 最大值位置: $x=\frac{1}{2}a$

$n=2, k=0,1$ 最大值位置: $x=\frac{1}{4}a, \frac{3}{4}a$

$n=3, k=0,1,2$ 最大值位置: $x=\frac{1}{6}a, \frac{3}{6}a, \frac{5}{6}a$

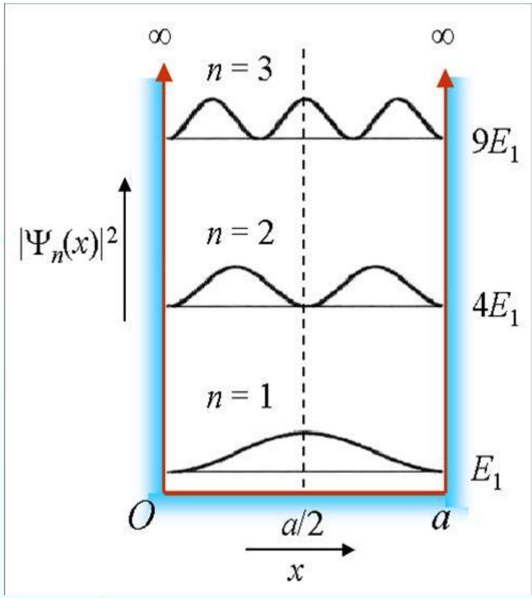
概率密度最大值的数目和量子数 n 相等

相邻两个最大值之间的距离: $\boxed{\Delta x=\dfrac{a}{n}}$

例、一维无限深方势阱中，运动粒子的状态用

$$\boxed{\psi(x)=\frac{4}{\sqrt{a}}\sin\frac{\pi x}{a}\cos^2\frac{\pi x}{a}}$$

描述，求粒子能量的可能值及相应的概率.



解：粒子的本征函数和能量本征值为

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi}{a}x \qquad E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2=n^2E_1$$

将波函数用本征波函数展开

$$\psi(x)=\frac{4}{\sqrt{a}}\sin\frac{\pi x}{a}\cos^2\frac{\pi x}{a}=\frac{2}{\sqrt{a}}\sin\frac{\pi x}{a}\left(1+\cos\frac{2\pi x}{a}\right)$$

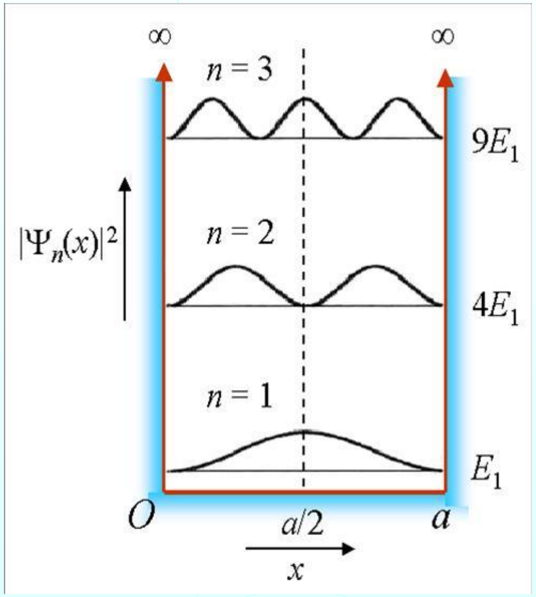
$$=\frac{1}{\sqrt{a}}\left(2\sin\frac{\pi x}{a}+2\sin\frac{\pi x}{a}\cos\frac{2\pi x}{a}\right)=\frac{1}{\sqrt{a}}\left(\sin\frac{\pi x}{a}+\sin\frac{3\pi x}{a}\right)$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_1(x)+\psi_3(x)\right]$$

$$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{a}}\left(\sin\frac{\pi x}{a}+\sin\frac{3\pi x}{a}\right)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_1(x)+\psi_3(x)\right]$$

1) 能量的可能值

$$\boxed{E_1=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}} \qquad \boxed{E_3=\frac{9\pi^2\hbar^2}{2ma^2}}$$

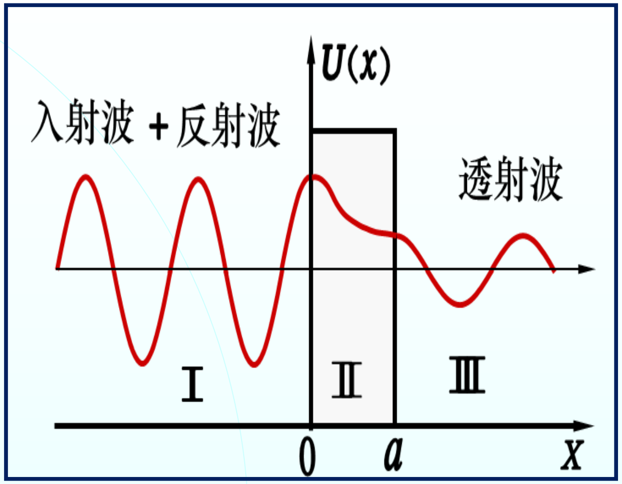


2) 相应的概率

$$\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2=\frac{1}{2}$$

粒子处于 n =1、3 本征态上的几率均为1/2

二、隧道效应

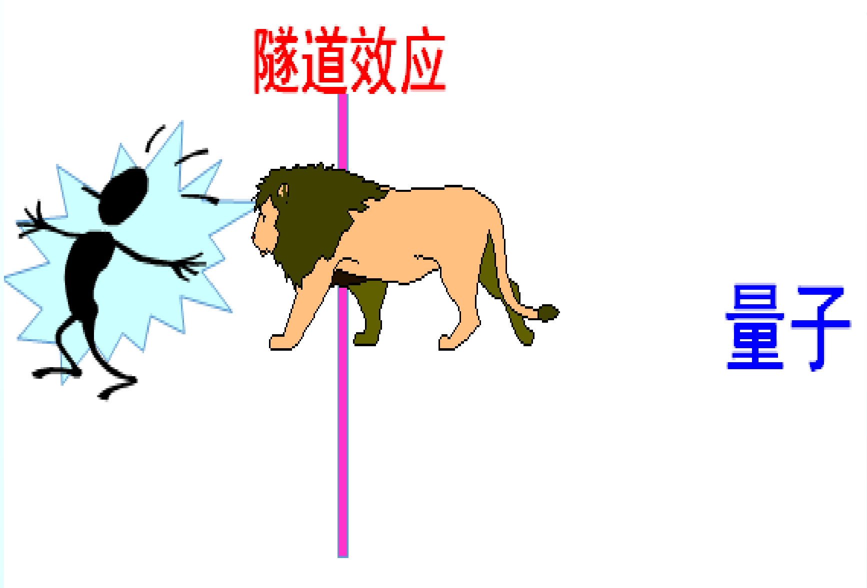


经典理论
1. $E > U_0$的粒子， 越过势垒.
2. $E < U_0$的粒子， 不能越过势垒.

量子理论
1. $E > U_0$的粒子，也存在被弹回的概率—— 反射波
2. $E < U_0$的粒子，也可能越过势垒—— **隧道效应**

在粒子总能量低于势垒壁高的情况下，有一定的概率穿透势垒.

解释问题



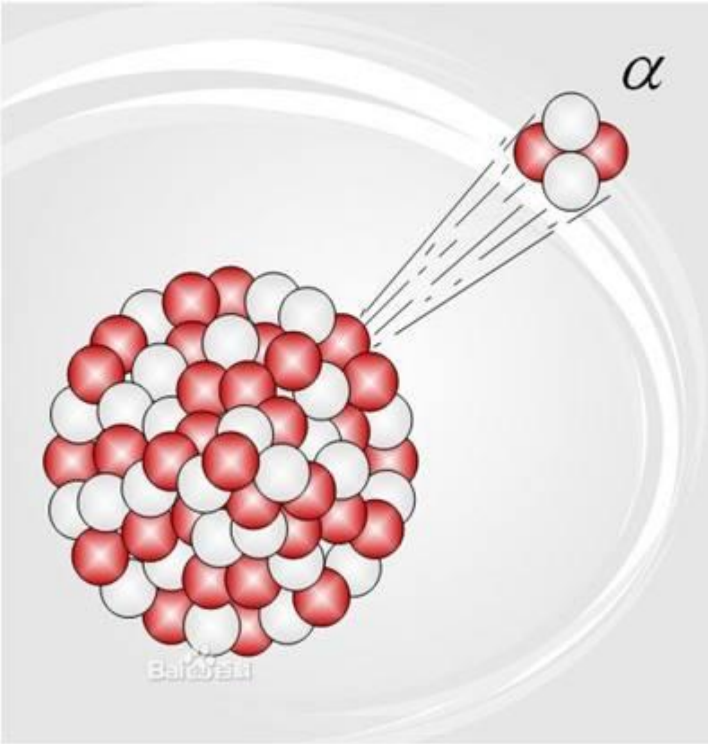
在量子世界里，狮子可隧穿垒壁

当势垒很宽，能量差很大时，

穿透势垒的概率为零，与经典力学结果相符。

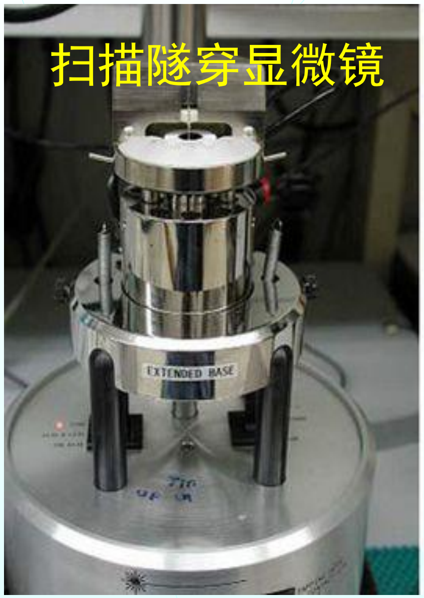
三、隧道效应的应用

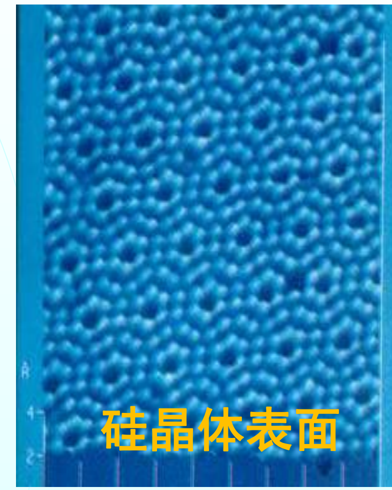
1、解释原子核α衰变的产生机制



根据**隧道效应**，α粒子有一定几率穿透势垒跑出原子核。

2、扫描隧穿显微镜（STM） (Scanning Tunneling Microscope)



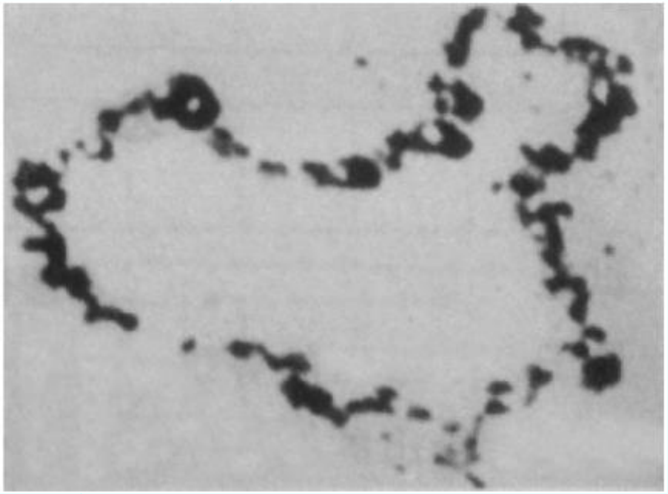


1986 Nobel Prize in Physics

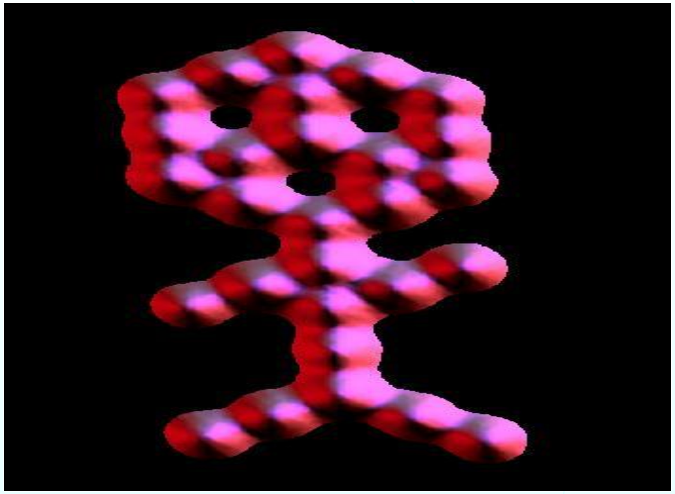
高分辨率： 横向0.1 nm，纵向0.01 nm，可分辨单个原子

思考：能否操纵原子？

STM扫描图像



世界上最小的中国地图

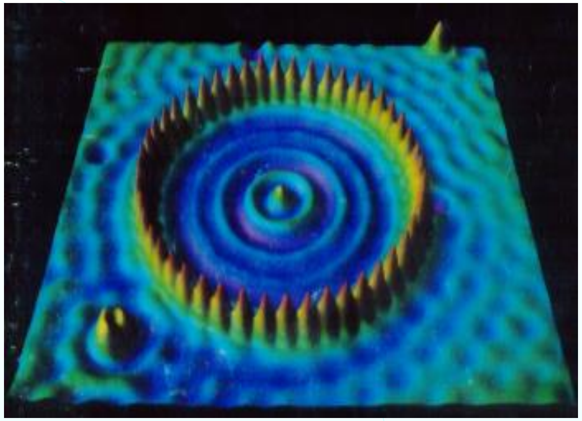


Carbon Monoxide
on Platinum (111)

STM扫描图像

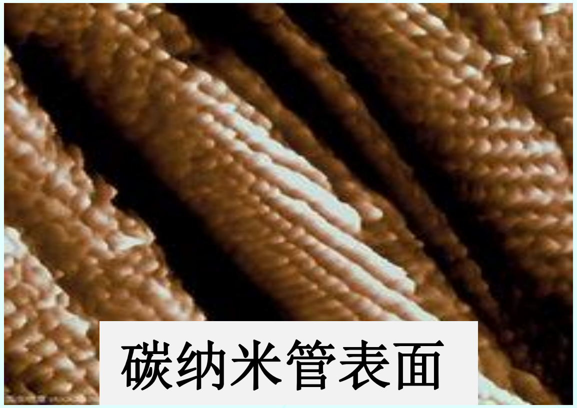
✓ 量子围栏

- Cu 表面镶嵌了48个 Fe 原子
- Fe 原子形成“电子围栏”
- 围栏中的电子形成驻波



✓ STM 可用于金属、半导体、绝缘体和有机物表面的研究;

✓ 研究材料科学、生命科学、纳米科学技术的强有力武器.



碳纳米管表面

科学家疯狂的研究方向：

通过原子扫描大脑，人类能获得新生吗？