

量子力學

第一章：波函数

杨焕雄

中国科学技术大学物理学院近代物理系

hyang@ustc.edu.cn

September 20, 2018

实物粒子的波动性

在 Planck-Einstein 光量子假设的启发下，面对 Bohr 关于原子结构的旧量子论所取得的成功和困难，de Broglie 于 1923 年大胆猜测：

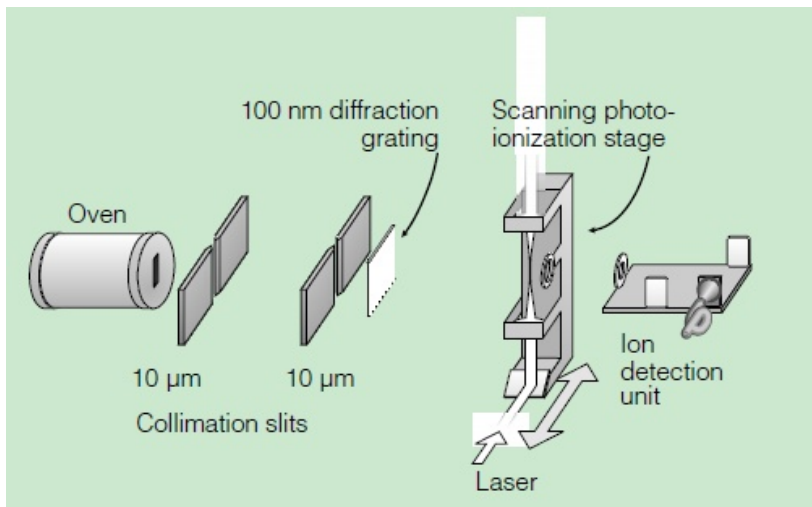
静止质量不为零的实物粒子也具有波粒二象性。与动量为 p 、能量为 $E = p^2/2m$ 的自由运动粒子相联系的物质波是波长 λ 、频率为 ν 的单色平面波，

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

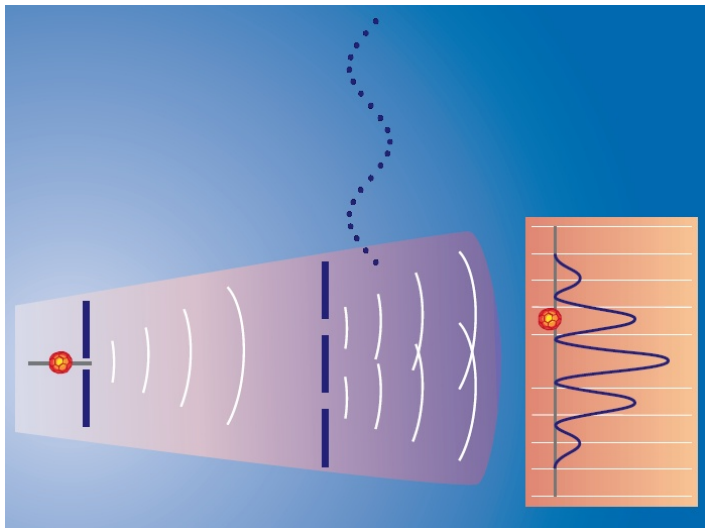
实验检验：

- ① 1927 年，电子的波动性在 Davisson 和 Germer 的实验中率先得到了证实。
- ② 后来，人们又在实验上观测到了分子和中子的波动性。
- ③ 1999 年，Arndt 等人观测到了 C_{60} 分子束的衍射现象。

在 Arndt 实验中, C_{60} 分子从约 $1000K$ 的高温炉中升华出来, 经过两条准直狭缝射向一个吸收光栅.



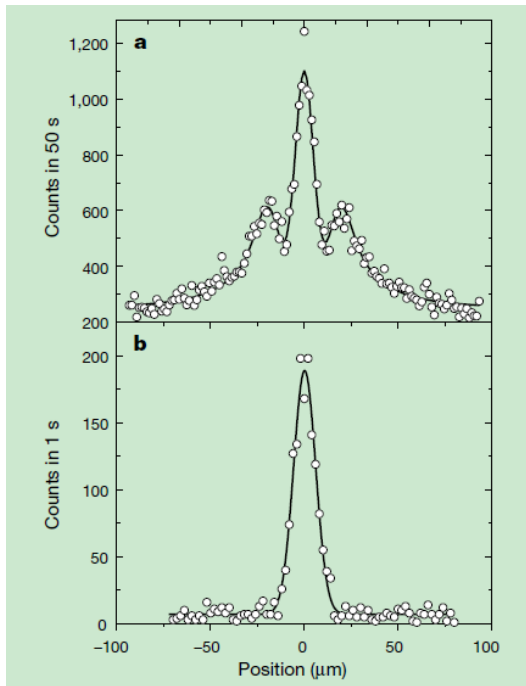
在其行进过程中，探测屏上记录下来的是一个一个的 C_{60} 分子。然而，随着到达探测屏上的 C_{60} 分子数目的增加，探测屏上逐渐出现了与经典波动双缝干涉图样无异的衍射图样。



Arndt 等的实验记录.

摘自：

M. Arndt et al, Nature,
401(1999), 680.



Question: 那么，应该如何理解微观粒子在双缝干涉中呈现出来的波动性呢？

经典粒子流的双缝实验：

设想有一挺机枪从远处向靶子盲目射击，机枪与靶之间有一堵子弹不能穿透的墙，墙上有两个洞。

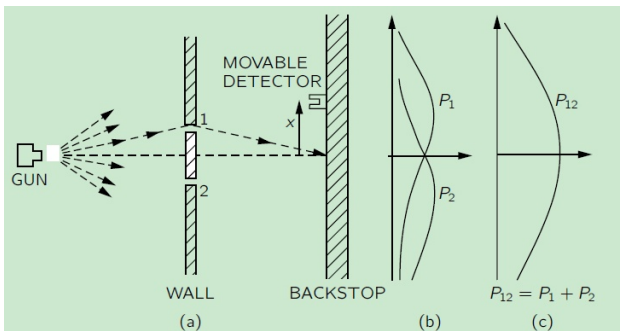


Fig. 1-1. Interference experiment with bullets.

- ① 当只开放洞 1 时，靶上子弹的数密度分布为：

$$P_1 = \rho_1(x)$$

- ② 当只开放洞 2 时，靶上子弹的数密度分布为：

$$P_2 = \rho_2(x)$$

- ③ 当两洞一齐打开时，穿过洞 1 的子弹与穿过洞 2 的子弹，各不相干地一粒一粒打到靶子上，靶上子弹的数密度简单地等于：

$$P_{12} = P_1 + P_2 = \rho_1(x) + \rho_2(x)$$

子弹经过洞 1 (2) 的运动轨道与洞 2 (1) 的存在与否并无关系。

经典波动的双缝实验：

设想掷石头于水塘中产生水波. 波源与探测器之间有一堵不透水的墙, 墙上有两个小孔.

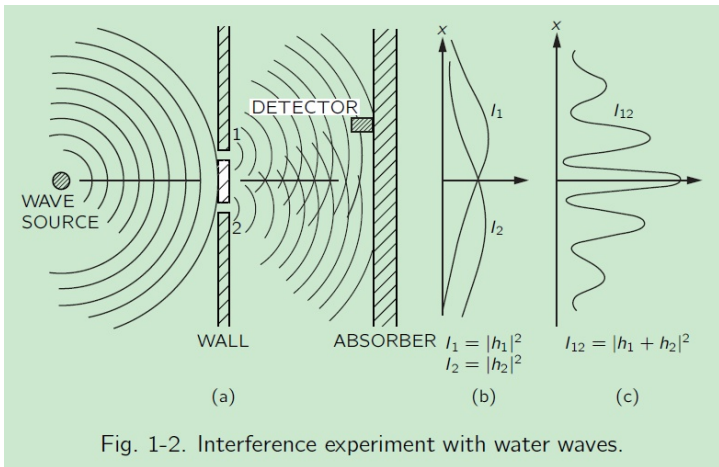


Fig. 1-2. Interference experiment with water waves.

- ① 当只开孔 1 时, 设水波在探测器处高度的瞬时值为 $h_1(x)e^{i\omega t}$, 则探测器处水波的强度为 $I_1(x) = |h_1(x)|^2$.
- ② 当只开孔 2 时, 设水波在探测器处高度的瞬时值为 $h_2(x)e^{i\omega t}$, 则探测器处水波的强度为 $I_2(x) = |h_2(x)|^2$.
- ③ 两孔齐开时, 穿过两孔的水波之间会发生干涉现象. 设分别打开孔 1 和孔 2 时探测器所在处水波高度的瞬时值分别是 $h_1(x)e^{-i\omega t}$ 和 $h_2(x)e^{-i\omega t+i\delta}$, 则两孔齐开时水波的高度为:

$$h_{12}(x, t) = h_1(x)e^{-i\omega t} + h_2(x)e^{-i\omega t+i\delta}$$

其强度为:

$$\begin{aligned} I_{12}(x, t) &= |h_{12}(x, t)|^2 \\ &= |h_1(x)|^2 + |h_2(x)|^2 + 2 \operatorname{Re}[h_1^*(x)h_2(x)] \\ &= I_1(x) + I_2(x) + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos \delta \end{aligned}$$

由于干涉项的影响, 经典波动的强度分布与经典粒子的数密度分布大不相同. 特别是:

$$I_{12} \neq I_1 + I_2$$

用微观粒子（如 C_{60} 分子）做双缝实验，所观察到的物质波强度的衍射图样与水波双孔干涉的强度分布图样并无二致。但物质波的强度并不是什么类似于水波强度那样的物理量，它只代表观测屏上被测到的微观粒子的数密度。

困惑：

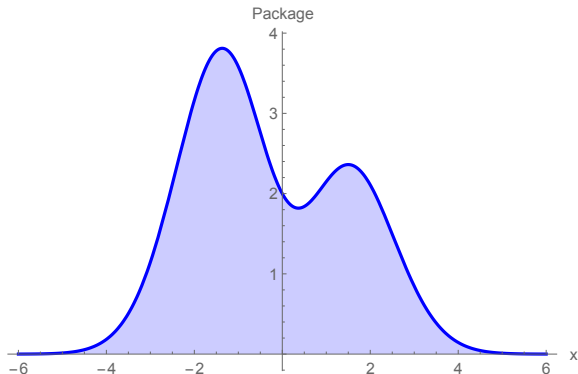
我们应该如何理解在双缝干涉实验中实物粒子所展现出的这种波动粒子二重性呢？

物质波包观点：

量子力学发展初期，Schrödinger 和 de Broglie 等波动力学创始人把微观粒子看作三维空间中某种连续分布的物质波包，因此呈现出实验上观察到的干涉、衍射现象。

- ① 波包的大小即微观粒子的大小。
- ② 波包的群速度即微观粒子的运动速度。
- ③ 微观粒子在本质上是波、不是粒子。

微观粒子在本质上是 de Broglie 波包？



物质波包的观点夸大了微观粒子波动性的一面，实际上抹杀了其粒子性的一面. 不能作为对于实物粒子波粒二象性的正确诠释.

波包观点遭遇到了两个难以逾越的困难：

- ❶ 如前所述，德布罗意物质波包在演化过程中会发生宽度扩散现象。即使初始时刻的波包宽度很小，经过一段时间的演化之后，波包也会扩散到很大的空间区域。因此，若把粒子看作德布罗意波包本身，粒子将在运动过程中愈来愈胖。

这一推论与实验事实是矛盾的。实验上观测到的一个个电子，总是处于空间一个个小区域中。

- ❷ 在电子衍射实验中，电子的德布罗意波碰到晶体表面后发生衍射，衍射波将沿不同的方向传播开去。如果把电子本身就看成三维空间中的一个物质波包，则在衍射屏不同地点观测到的应当只是一个电子的一部分。

这一推论也与实验事实不符。实验上测得的总是一个个完整的电子，各个电子都具有相同的质量和电荷。

疏密波观点：

与物质波包观点相反的另一看法是：

类似于空气振动出现的声波，电子的波动性是由于有大量的电子分布于空间、电子数密度疏密相间所形成的疏密波。

这种看法仍然不能通过实验的检验：

- ① 首先，疏密波观点不能解释氢原子（只含一个电子）中电子的波动性，进而不能对氢原子的离散化光谱做出理解。
- ② 其次，可以以这样的方式做电子衍射实验：让入射电子流及其微弱，以致于电子几乎是一个一个地通过狭缝。只要时间足够长，衍射屏上仍将出现衍射图样。

所以，电子的波动性并不是很多电子聚集在空间同一区域时才呈现的现象，**单个电子就具有波动性。**

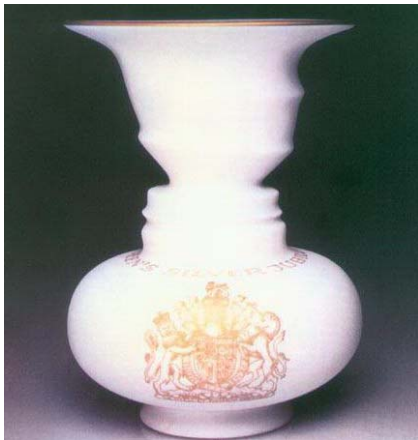
波粒二象性诘问：

电子究竟是什么东西？是粒子？还是波？

Feynman 语录：“电子既不是粒子，也不是波。”

更确切地复述 Feynman 的观点，应该说：电子既不是经典粒子，也不是经典的波动。

按照辩证法，我们也可以说：电子既是粒子，也是波动。但这个波不再是经典物理学意义下的波，粒子也不再是经典力学概念下的质点。



平面单色波：

波动光学中，波长为 λ 、频率为 ν 的一维平面单色波可以表示为

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

或其实部，

$$\psi_k(x, t) = A \cos(kx - \omega t)$$

式中 $k = 2\pi/\lambda$ 称为波数， $\omega = 2\pi\nu$ 称为角频率。波函数 $\psi_k(x, t)$ 的物理意义通常是光波的电场强度。

平面波的特点是其波幅（或强度）在空间各点都相同，其等相位面是一个运动的平面，由下式给出：

$$kx - \omega t = \text{const.}$$

等相位面移动的速度称为平面波的相速：

$$u = \frac{dx}{dt} = \omega/k$$

波包及其 Fourier 分析:

严格的平面波是不存在的, 实际问题中碰到的波动都是波包, 它们的强度只在空间有限区域中不为零.

按照 Fourier 分析, 波包可以表示为各种不同波长的平面波的线性叠加:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \varphi(k) e^{i[kx - \omega(k)t]}$$

显然当 $t = 0$,

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \varphi(k) e^{ikx}$$

$\varphi(k)$ 称为初始时刻波函数 $\psi(x, 0)$ 的 Fourier 变换, 或者称为 k -空间的波函数,

$$\varphi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi(x, 0) e^{-ikx}$$

它表示波包 $\psi(x, 0)$ 中所含波数为 k 的平面波的波幅, $|\varphi(k)|^2$ 则代表此分波的强度.

对于波包中的分波而言, 角频率 $\omega(k)$ 一般是波数 k 的函数. 例如对于 de Broglie 物质波波包,

$$\omega(k) = \hbar k^2 / 2m$$

角频率对于波数的依赖关系通常称为波包的色散关系.

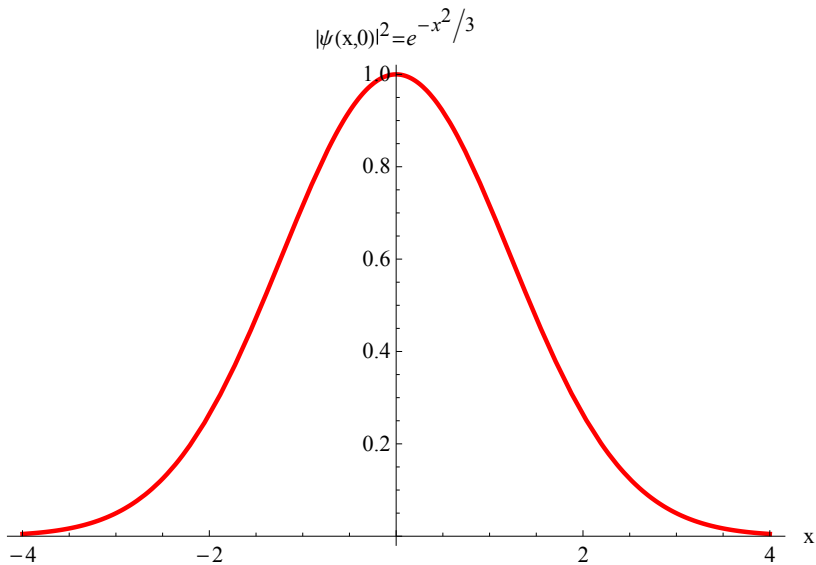
① 最典型的波包是所谓 Gauss 波包:

$$\psi(x, 0) = e^{-\alpha^2 x^2 / 2}$$

注意到此波包的强度 $|\psi(x, 0)|^2 = e^{-\alpha^2 x^2}$ 主要集中在 $|x| < \alpha^{-1}$ 的区域内, Gauss 波包的半宽度 $\Delta x \approx \alpha^{-1}$. Gauss 波包的 Fourier 变换为:

$$\varphi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\alpha^2 x^2 / 2} e^{-ikx} = \frac{1}{\alpha} e^{-k^2 / 2\alpha^2}$$

高斯波包:



$|\varphi(k)|^2 = \frac{1}{\alpha^2} e^{-k^2/\alpha^2}$ 主要集中在 $|k| < \alpha$ 范围内, $\Delta k \approx \alpha$. 所以,

$$\Delta x \cdot \Delta k \approx 1.$$

此式不限于 Gauss 波包, 它对于任何波包都适用¹.

波包的运动与扩散:

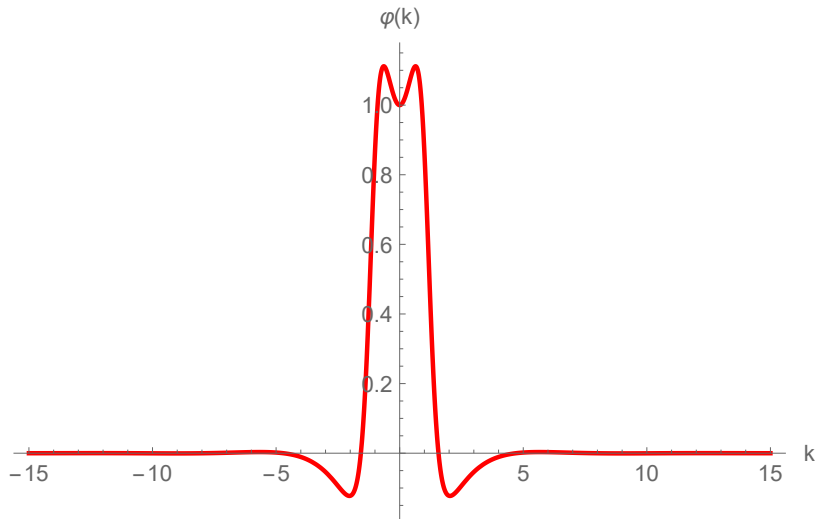
考虑在一维直线上传播的波包,

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \varphi(k) e^{i[kx - \omega(k)t]}$$

假设 $\varphi(k)$ 是在某个 k_0 处的狭窄分布, 即对上述积分有实质贡献的 $\varphi(k)$ 集中在波数 k_0 附近. 如此, 可把 $\omega(k)$ 在 k_0 处作泰勒展开:

$$\omega(k) \approx \omega(k_0) + \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0} (k - k_0) + \mathcal{O}((k - k_0)^2)$$

¹证明见后.



Example: $\varphi(k)$ 集中分布在 $k = 0$ 附近.

做变量代换 $k \rightarrow \epsilon = k - k_0$, 约定

$$\omega(k_0) = \omega_0, \quad \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0} = \omega'_0$$

波包的波函数可重新表为:

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \varphi(k) e^{i[kx - \omega(k)t]} \\&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \varphi(\epsilon + k_0) e^{i[(\epsilon + k_0)x - \omega_0 t - \omega'_0 \epsilon t + \mathcal{O}(\epsilon^2)t]} \\&\approx e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \varphi(\epsilon + k_0) e^{i\epsilon(x - \omega'_0 t)} \\&= e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \psi(x - \omega'_0 t, 0)\end{aligned}$$

所以,

$$|\psi(x, t)| = |\psi(x - \omega'_0 t, 0)|$$

对于波包常常引入**波包中心**的概念.

波包中心即是 $|\psi(x, t)|$ 显著不为零的区域. 对于所考虑的一维波包而言, 因为有:

$$|\psi(x, t)| = \left| \psi(x - \omega'_0 t, 0) \right|$$

倘若在 $t = 0$ 时刻波包中心位于 $x_c(0) = 0$ 的地点, 则在以后的某个时刻 t , 波包中心的位置 $x_c(t)$ 应由下式确定:

$$x_c(t) - \omega'_0 t = 0$$

所以, 波包中心的位置坐标 x_c 以速度

$$v_g = \frac{dx_c}{dt} = \omega'_0 = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0}$$

运动. v_g 称为波包的**群速度**.

对于 de Broglie 物质波波包而言,

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad \rightsquigarrow \quad v_g = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m}$$

群速度恰为实物粒子的运动速度².

下面研究波包形状在波包运动过程中可能的变化. 设 $\varphi(k)$ 是一个颇窄的波包, 波数集中在 k_0 附近一个小范围内. 在 $k \approx k_0$ 处对 $\omega(k)$ 作 Taylor 展开,

$$\begin{aligned}\omega(k) &\approx \omega(k_0) + \left[\frac{d\omega}{dk} \right]_{k_0} (k - k_0) + \frac{1}{2} \left[\frac{d^2\omega}{dk^2} \right]_{k_0} (k - k_0)^2 \\ &= \omega(k_0) + v_g(k - k_0) + \frac{1}{2}\beta(k - k_0)^2\end{aligned}$$

式中,

$$\beta = \left[\frac{d^2\omega}{dk^2} \right]_{k_0}$$

²但其相速度只有粒子运动速度的一半, $v_p = p/2m$.

设体系在 $t = 0$ 时刻的初始波函数为 $\psi(x, 0)$, 其在动量空间的 Fourier 变换是:

$$\varphi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi(x, 0) e^{-ikx}$$

则在 $t > 0$ 时刻,

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \varphi(k) e^{i[kx - \omega(k)t]} \\ &\approx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \varphi(k) e^{i[kx - \omega(k_0)t - v_g(k - k_0)t - \frac{1}{2}\beta(k - k_0)^2 t]} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i[k_0 x - \omega(k_0)t]} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \varphi(\xi + k_0) e^{i[\xi(x - v_g t) - \frac{1}{2}\beta\xi^2 t]} \end{aligned}$$

以 Gauss 波包为例. 设 $\psi(x, 0) = e^{-\alpha^2 x^2/2}$, 则:

$$\varphi(k) = \frac{1}{\alpha} e^{-k^2/2\alpha^2}$$

为简单计, 进一步取 $k_0 = 0$, 所以,

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi} \alpha} e^{-i\omega(0)t} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi e^{i\xi(x-v_g t) - \frac{\xi^2}{2}(i\beta t + 1/\alpha^2)} \\ &= e^{-i\omega(0)t} \frac{1}{\sqrt{1 + i\beta\alpha^2 t}} \exp \left[-\frac{(x - v_g t)^2 \alpha^2}{2(1 + i\beta\alpha^2 t)} \right]\end{aligned}$$

此 Gauss 波包的强度分布为:

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{1 + \beta^2 \alpha^4 t^2}} \exp \left[-\frac{(x - v_g t)^2 \alpha^2}{(1 + \beta^2 \alpha^4 t^2)} \right]$$

因此，波包的半宽度是随时间增大的，

$$\Delta x = \frac{1}{\alpha} \sqrt{1 + \beta^2 \alpha^4 t^2}$$

注意到 $t = 0$ 时刻 Gauss 波包的半宽度是 $\Delta x_0 = \alpha^{-1}$ ，可以把上式改写为：

$$\Delta x = \Delta x_0 \sqrt{1 + \frac{\beta^2 t^2}{(\Delta x_0)^4}}$$

点评：

- ① 如 $\beta \neq 0$ ，则当 $t \rightarrow \infty$ ，波包的宽度会无限制地扩散开去。
- ② 对于 de Broglie 波而言，

$$\beta = \left. \frac{d^2 \omega}{dk^2} \right|_{k=0} = \frac{\hbar}{m} \neq 0$$

故与实物粒子相联系的 de Broglie 波包在运动过程中会越来越胖，最终是要扩散到全空间里的。

忠告：

de Broglie 波在传播过程中其宽度会发散的特点排除了按波包理解微观体系粒子性的企图³.

³这是量子力学发展初期 Schrödinger 与 de Broglie 等人曾持有的观点.

粒子：

- ① 朴素地讲，粒子就是自然界中的这样一个物质分布，它具有一定的质量、电荷等属性且这些物理量只分布于空间的一个有限区域内。简言之，对于粒子而言物质的分布具有**颗粒性**。
- ② 然而，在经典力学中，除了上述颗粒性之外，还赋予粒子一个附加的性质：**粒子的演化在空间中有一条确定的轨道，即在每时每刻粒子都有确定的空间位置和速度。**
- ③ 从实证哲学的角度看，物质粒子的颗粒性确是无数观测所证实了的实验事实，但粒子有完全确定的轨道的看法只是经典力学体系强加于粒子的额外概念。对于在宏观世界和日常生活中所处理的质点、质点组而言，轨道概念是合理的。**对于原子层次的实物粒子（例如电子）而言，粒子具有确定轨道的经典概念并未被任何实验证实。**

波动：

- ① 在经典物理中谈到一个波动时，总是意味着某种实在的物理量（如光波的电场强度）弥散于全空间且在时空中作周期性的变化。
- ② 波动性更本质的特征是波函数的线性叠加性。正是由于波函数的线性叠加导致了波的干涉、衍射现象中衍射图样的出现。

点评：

在经典物理学中，粒子和波的图象的确难以统一到同一个物质存在上去。

那么，究竟该如何理解在微观世界中所观测到的实物粒子的波粒二象性呢？

电子的双缝干涉:

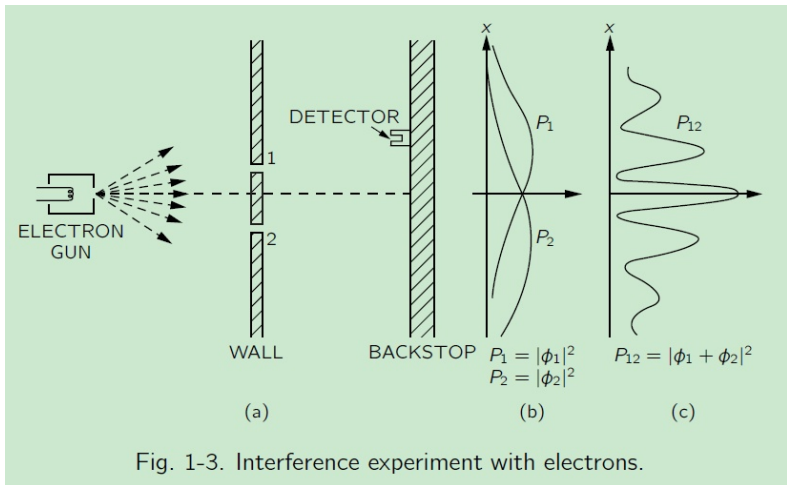


Fig. 1-3. Interference experiment with electrons.

仔细分析电子双缝干涉实验可知：

- ① 电子所呈现出来的粒子性，只是经典粒子概念中的颗粒性，即衍射屏上所观测到的电子的质量、电荷等物理量总是分布在空间的一个小区域内。
- ② 干涉实验并不同时支持经典力学中粒子运动有确定轨道的附加概念。
- ③ 电子呈现出来的波动性，也只不过是波函数的线性叠加性。
- ④ 电子的波动性并不与类似于光波电场强度那样实在的物理量在时空中的波动联系在一起。

那么，电子到底是怎样穿过两条狭缝的呢？

1926 年, Born 提出了量子力学的统计诠释.

Born 认为:

de Broglie 波所描写的, 并不像经典波动那样表示某个实在物理量的波动, 它只不过是刻画实物粒子在空间的概率分布的概率波 (probability wave) 而已.

点评:

Born 对电子波动性的诠释本质上是把电子的颗粒性与 de Broglie 波的波函数相干叠加性统一到了概率波这一概念上了.

在双缝干涉实验中, 电子以概率波波动的方式穿过了两条狭缝. 概率幅的线性叠加是造成观测屏上出现衍射图案的原因.

为了抽象出 Born 的概率波概念，让我们再次回顾一下电子的双缝干涉实验. 设入射电子流很微弱，电子几乎是一个一个地穿越狭缝，然后在衍射屏上被记录下来.

- ① 在起初的一段时间内，衍射屏上随机地出现着一些零散斑点，它们代表与狭缝原子发生散射后出射的电子.
- ② 随着时间的推移，衍射屏上接受到的电子愈来愈多，就会发现有些地方斑点很密，另一些地方却几乎没有斑点.
- ③ 最后，衍射屏上散射电子的数密度分布构成了一个有规律的图案，与光波的双缝干涉强度分布完全一致.

Born 是怎样理解这一现象的呢？

原来,

衍射屏上某点附近衍射图样的强度

\propto 该点附近感光斑点的数目

\propto 该点附近出现的散射电子的数目

\propto 电子出现在该点附近的概率

设 de Broglie 波的波函数为 $\psi(\vec{r}, t)$, 则衍射波强度 $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ 正比于电子出现在衍射屏上 \vec{r} 点附近的概率. $|\psi(\vec{r}, t)|^2 \Delta x \Delta y \Delta z$ 代表着 t 时刻在 \vec{r} 点附近的体积元内 $\Delta x \Delta y \Delta z$ 找到电子的概率.

这就是 Born 所发现的 de Broglie 波的概率诠释. 它是量子力学的基本原理之一, 其正确性已被无数次的实验观测所证实.

按照 Born 的统计诠释, 习惯上亦把波函数 $\psi(\vec{r}, t)$ 称为概率波幅.

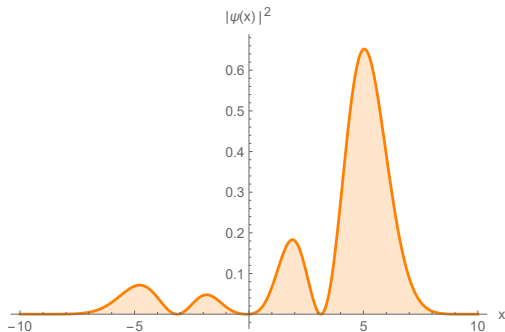
波函数的统计诠释:

若粒子被允许在三维空间运动, 则:

$$\int_V |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3x = t \text{ 时刻发现粒子处于区域 } V \text{ 中的概率.}$$

若粒子局限在一维直线上运动, 则:

$$\int_a^b |\psi(x, t)|^2 dx = t \text{ 时刻发现粒子处于区间 } a \leq x \leq b \text{ 中的概率.}$$



点评:

波函数的统计诠释在量子力学中引入了一种不确定性: 即便你根据量子力学知道了一个粒子的所有信息(波函数), 你仍然不能在一个简单的测量其位置的实验中确切地预言测量结果. 量子力学所能提供的只是一些可能结果的统计信息.

Q: 这种不确定性到底是研究对象的本质, 还是量子力学理论的缺陷?

为了暴露这个问题的要害, 我们考虑一个假想实验: 假定我们对处于量子态 $\psi(x, t)$ 的量子力学粒子的位置做了一次测量. 测量的结果是在 $t = 1s$ 时刻粒子的位置坐标是 $x = 5cm$. 我们现在的的问题是: 在恰好进行测量之前, 例如在 $t = 0.9999999999999999s$ 时刻, 这个粒子到底处在哪里?

三种学派：

- 现实主义学派 (Realist) 观点：粒子的位置坐标仍是 $x = 5\text{cm}$.

代表人物：爱因斯坦，薛定谔，玻姆等。

对于 Realist 而言，粒子在测量前就处在 $x = 5\text{cm}$ 的地点，只是量子力学本身没有能力告诉我们这一点。换言之，量子力学中出现的不确定性不是微观粒子的本性、它只是反映了量子力学理论的不完备。需要在现有量子力学理论之外提供某些附加的信息，称为隐变量 (hidden variables)，才能提供对微观粒子运动状态的完全描写。

- 正统学派 (Orthodox) 观点：粒子哪里都不存在。

代表人物：Bohr, Born, Heisenberg, Dirac, Feynman, Jordan 等。

正统学派又称为 Copenhagen 学派，它认为**是测量强迫粒子在某处露面**。测量未完成之前，粒子只是以

$$|\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3x$$

的概率出现在位置矢径 \vec{r} 附近的微元体积 d^3x 中，它并不确定地出现在空间任何一个地点。

Jordan 语录：

观测者不仅扰动了被观测量，而且产生了它。我们对于位置坐标的测量强迫粒子出现在了特定的位置。

- 不可知论学派 (Agnostic) 观点：拒绝回答。

代表人物：Pauli 等。

不可知论者认为讨论“测量前粒子是不是有一个确定位置”这一问题本身无意义。从某种意义上说，Agnostic 有保留地支持了 Copenhagen 学派的见解。

数十年来，绝大多数物理学家采取了这种鸵鸟 (Ostrich) 姿态，不关心量子力学是否完备等基础问题、只是从实用的角度接受量子力学。

Pauli 语录：

与讨论一个针尖上能坐多少个天使的远古问题一样，我们无需为某些我们根本无法回答的事情浪费脑力。

量子力学诞生以来直到 1960 年代，关于量子力学理论中出现的
不确定性的上述三种观点各有自己的支持者，相互间的争论很
大程度上局限于哲学层面、不见输赢。

事情在 1964 年有了重大转机。英国物理学家 John Bell 的著名论
文：

J. Bell, On the Einstein-Podolsky-Rosen paradox, *Physics 1*
(1964) 195-200.

中 (基于 Realist 观点) 提出了一个判据：

$$\left| P(\vec{a}, \vec{b}) - P(\vec{a}, \vec{c}) \right| \leq 1 + P(\vec{b}, \vec{c})$$

按照这个判据，粒子在测量前有没有一个确定的位置在实验上会
导致不同的测量结果。

Bell 判据的意义:

- ❶ Bell 判据的发现排除了不可知论作为一种合理观点的可能性.
- ❷ Bell 判据把判断 Orthodox 观点与 Realistic 观点谁是谁非的问题从哲学争论变成了一个物理实验问题.
- ❸ 基于 Aspect 等人 1980 年以来立足于 Bell 判据的大量实验的结果, 我们现在知道:

Orthodox 观点是正确的⁴, 粒子在测量前没有一个确定的位置. 有关粒子位置的测量完成之后, 正是这个具体测量过程赋予了粒子一个确切的位置坐标.

⁴这并不表明 Orthodox 学派的观点是量子力学诠释的唯一可靠的观点. 目前仍有多世界、可择历史等诠释与 Orthodox 竞争.

波函数的归一化:

- ① 在非相对论量子力学意义下, 实物粒子既不产生, 也不湮灭.

根据波函数的统计诠释, 粒子出现在空间各点的概率总和应等于壹:

$$\int_{\text{全空间}} d^3x |\psi(\vec{r}, t)|^2 = 1$$

此式称为波函数的归一化条件.

- ② 能否归一化是 de Broglie 波与经典波之间的本质区别之一.

一个经典光波的波幅若增大一倍, 则相应电磁场的能量会增大为原来能量的 4 倍, 因而代表完全不同的波动状态. 因此, 经典波动的波函数根本谈不上归一化.

点评:

对于概率分布而言, 重要的是**相对概率分布**.

显然, 两个波函数 $\psi(\vec{r}, t)$ 和 $C\psi(\vec{r}, t)$ 所描写的相对概率分布是完全相同的. 在空间任意两点 \vec{r}_1 和 \vec{r}_2 处, $C\psi(\vec{r}, t)$ 所描写的发现粒子的相对概率

$$\frac{|C\psi(\vec{r}_1, t)|^2}{|C\psi(\vec{r}_2, t)|^2}$$

完全等同于 $\psi(\vec{r}, t)$ 所描写的相对概率

$$\frac{|\psi(\vec{r}_1, t)|^2}{|\psi(\vec{r}_2, t)|^2}$$

所以, $\psi(\vec{r}, t)$ 和 $C\psi(\vec{r}, t)$ 描写的是同一个概率波.

~~~~~ 波函数可以有一个常数因子的不确定性.

德布罗意波原则上可以被归一化.

$$\int_{\text{全}} d^3x |\psi(\vec{r}, t)|^2 = 1/A \quad \rightsquigarrow \quad \int_{\text{全}} d^3x |\sqrt{A} \psi(\vec{r}, t)|^2 = 1$$

作为概率波,  $\psi(\vec{r}, t)$  和  $\sqrt{A} \psi(\vec{r}, t)$  描写的是同一个德布罗意波,  $\sqrt{A}$  称为归一化因子.

忠告:

- ① 波函数归一化与否并不影响所代表的概率分布.
- ② 即使加上了归一化条件, 波函数仍然有一个模为壹的相因子的模糊性. 显然,  $\psi(\vec{r}, t)$  和  $e^{i\alpha} \psi(\vec{r}, t)$  描写的是同一个德布罗意波.
- ③ 波函数的归一化应不受  $\psi(\vec{r}, t)$  随时间演化的影响. 怎么保证这一性质?

## 思考题：

- ① 对于相互等价的两个波函数  $\psi(\vec{r}, t)$  和  $e^{i\Lambda} \psi(\vec{r}, t)$  而言，参数  $\Lambda$  可否允许作为时空坐标的某一普通函数  $\Lambda = \Lambda(\vec{r}, t)$  出现？
- ② 假定在势能中增加一个常数项  $V_0$ ，这在经典力学中相当于调整势能零点，它不改变任何事情。请问在量子力学中如何？

### 重要的事情再说一遍：

- 是否解答思考题全凭志愿、老师不强求。若决定解答此思考题，请在一周内将解答寄至邮箱：

*hyang@ustc.edu.cn*

- 请使用 word 或者 tex 的文件格式。
- 请使用 Office 插件 axmath 或者 mathtype 在 word 中书写数学方程。axmath 的下载网址：<http://www.amyxun.com/>

## 多粒子体系的波函数：

量子力学本质上是单粒子理论. 但是, 在没有粒子产生、湮灭的非相对论情形下, 量子力学仍然能够把粒子数守恒的多粒子体系作为自己的研究对象.

对于  $N$  个粒子构成的体系, 它的波函数表示为:

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \cdots, \vec{r}_N, t)$$

其中  $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \cdots, \vec{r}_N$  分别表示各粒子在三维空间的位置矢径. 此情况下,

$$|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \cdots, \vec{r}_N, t)|^2 d^3x_1 d^3x_2 \cdots d^3x_N$$

解释为粒子 1 出现在体积元  $d^3x_1$  中, 同时粒子 2 出现在体积元  $d^3x_2$  中,  $\cdots$ , 同时粒子  $N$  出现在体积元  $d^3x_N$  中的概率.

归一化条件表示为：

$$\int_{\text{全}} |\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)|^2 d^3x_1 d^3x_2 \dots d^3x_N = 1$$

显然，de Broglie 波  $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)$  描写的不是 3 维空间中的某种实在物理量的波动，而是抽象的  $3N$  维位形空间<sup>5</sup>中的概率波。

- 纠缠 (entanglement) 是量子力学前沿研究中一个时髦的名词。纠缠这个概念只有在把概率波理解为位形空间的波动的基础上才能准确把握。

---

<sup>5</sup>i.e., configuration space.

# 波函数空间中的内积

量子力学假设波函数所在的函数空间是复内积空间。

两个波函数  $\psi$  和  $\varphi$  之间的内积运算定义为：

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \int_{\text{全}} d\tau \psi^* \varphi$$

①  $\int_{\text{全}} d\tau$  表示对体系的全部坐标空间进行积分，

$$\int_{\text{全}} d\tau = \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} d^3x_1 \cdots d^3x_N$$

② 借助于内积运算，波函数的归一化条件可以简单地表达为：

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1$$



# 单色平面概率波及其归一化

电磁波最基本的存在方式是所谓单色平面电磁波：

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 \cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)$$

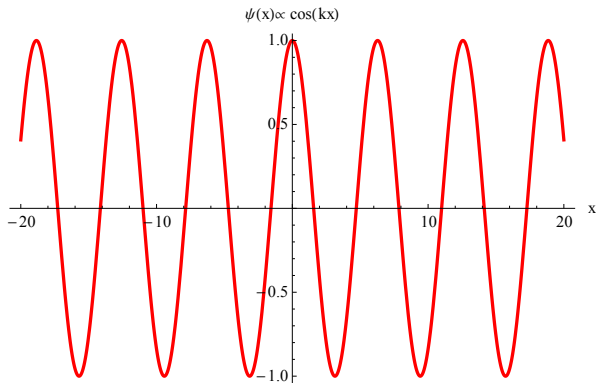
为方便计常将其写为复数形式， $\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$ ，但这样做时须记住只有其实部才具有物理意义。

与此类似，最基本的概率波是单色平面概率波。结合波函数的统计诠释与德布罗意假设可知，

单色平面波形式的概率波

$$\psi(\vec{r}, t) = A e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} = A e^{i(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)/\hbar}$$

所描写的是一个具有确定的动量  $\vec{p}$  和能量  $E = p^2/2m$  的自由粒子。



两个问题：

- ① 单色平面概率波  $\psi(\vec{r}, t) = A e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$  中的归一化常数  $A = ?$
- ② 可否把单色平面概率波的波函数写为

$$\psi(\vec{r}, t) = A \cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) ?$$

先考虑第一个问题.

- ❶ 显而易见, 单色平面波不可能归一化为壹:

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{\text{全}} d^3x |A e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}|^2 \\ &= \int_{\text{全}} d^3x |A|^2 \\ &= |A|^2 \cdot \infty \quad \rightsquigarrow \quad A = 0 \end{aligned}$$

- ❷ 从波函数的统计诠释看, 不能归一化的波函数并不必然就是不合理的.

就单色平面波而言, 其不能归一化为壹的表象下面所隐藏的物理实质是: **自由粒子出现在空间各点的概率处处相同**. 这显然是合理的, 正是自由粒子应该具有的特点.

## Dirac $\delta$ 函数:

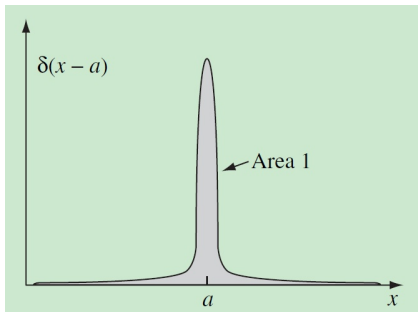
解决单色平面概率波的归一化有求于一个特殊函数, 即 Dirac  $\delta$  函数.

Dirac  $\delta$  函数定义为:

$$\delta(x-a) = \begin{cases} \infty, & x = a \\ 0, & x \neq a \end{cases}$$

其最重要的性质是:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx F(x) \delta(x-a) = F(a)$$



$\delta$  函数可以有很多表达式. 其中最著名的一个是:

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

在量子力学中，我们通常把单色平面波归一化为 Dirac  $\delta$  函数。

① 如此归一化的单色平面波波函数表示为：

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r} - p^2 t/2m)}$$

② 暂且不考虑波函数随时间的演化，在上式中取  $t = 0$ ,

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}, 0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}$$

注意到数学恒等式，

$$\int d^3x e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}')\cdot\vec{r}} = (2\pi\hbar)^3 \delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{p}')$$

单色平面波的归一化条件表达为：

$$\int d^3x \psi_{\vec{p}'}^*(\vec{r}, 0) \psi_{\vec{p}}(\vec{r}, 0) = \delta^{(3)}(\vec{p}-\vec{p}')$$

# 动量分布概率

按照波函数的统计诠释， $t$ 时刻在 $\vec{r}$ 点附近找到粒子的概率正比于 $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ 。

试问，如果测量由波函数 $\psi(\vec{r}, t)$ 所描写体系的其他力学量，例如动量，其概率分布如何计算？

线索：

在一般的情形下，de Broglie 波的波函数是一个可以正常归一化的波包，由许多单色平面波线性叠加而成：

$$\psi(\vec{r}, 0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p \varphi(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}}$$

这样的波包中包含有各种不同波长的平面分波，因而所描写的粒子没有确定的动量和能量，其动量、能量只有一个概率分布。

在波函数

$$\psi(\vec{r}, 0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p \varphi(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}$$

中,

- ① 展开系数  $\varphi(\vec{p})$  代表着波函数  $\psi(\vec{r}, 0)$  所含平面波  $e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}$  的相对比重.
- ②  $|\varphi(\vec{p})|^2$  可以解释为由初始波函数  $\psi(\vec{r}, 0)$  所描写实物粒子的动量分布概率密度. 因此, 在由波函数  $\psi(\vec{r}, 0)$  描写的状态下, 粒子动量处于动量空间体积元  $(\vec{p}, \vec{p} + d\vec{p})$  中的概率是  $|\varphi(\vec{p})|^2 d^3p$ .

于是, 我们自然地期望有如下形式的归一化条件:

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

证明如下.

通过求  $\psi(\vec{r}, 0)$  的逆 Fourier 变换可得:

$$\varphi(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3x \psi(\vec{r}, 0) e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}$$

所以,

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(\vec{p})|^2 d^3p \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p d^3x d^3x' \psi^*(\vec{r}, 0) \psi(\vec{r}', 0) e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot(\vec{r}'-\vec{r})} \\ &= \int d^3x d^3x' \psi^*(\vec{r}, 0) \psi(\vec{r}', 0) \left[ \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot(\vec{r}'-\vec{r})} \right] \\ &= \int d^3x d^3x' \psi^*(\vec{r}, 0) \psi(\vec{r}', 0) \delta^{(3)}(\vec{r}' - \vec{r}) \\ &= \int d^3x |\psi(\vec{r}, 0)|^2 \\ &= 1 \end{aligned}$$



# 不确定度关系

波函数的统计诠释把电子的波粒二象性统一到了“概率波”的概念上. 在此概念中,

- ① 经典波的内涵只是部分地 (波函数的线性叠加性) 被保留了下来, 但波函数表示可观测物理量的概念被摒弃.
- ② 经典粒子的内涵也只保留了一部分 (质量、位置、电荷、能量和动量等反映其物质属性的物理量在分布特征上的颗粒性), 粒子运动具有确定轨道的概念被摒弃.

简言之, 概率波不代表任何可观测物理量在时空中的波动, 它只代表颗粒状实物粒子运动的非轨道性.

点评:

既然微观粒子的运动不是轨道运动, 粒子在运动过程中的每一时刻就没有确定的位置坐标  $\vec{r}$  和动量  $\vec{p}$ . 所以, 经典力学中用于描写宏观质点轨道运动的物理量对于描写微观粒子的概率波运动而言不可能无障碍地全盘适宜.

我们现在所面临的局面是：

- ① 自牛顿运动定律公布于世到量子力学诞生前夕，经典力学在其长达 300 年的发展过程中，分析、总结出了一系列适宜于描写质点轨道运动的物理量，例如质点的位置矢径  $\vec{r}$ ，动量  $\vec{p}$ ，轨道角动量  $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$  和能量  $E$  等。
- ② 这些物理量具有如此鲜明的可观测性，以致于当我们面对不做轨道运动的微观粒子时，仍不得不借用这些物理量来描写其运动。
- ③ 但不要忘了，微观粒子是按照概率波波动的方式在时空中演化的。那么，如果把经典力学中用于描写质点轨道运动的物理量强行用于描写微观粒子的概率波波动，会产生多么大的不准确性？

可以把问题提的更直白些：经典力学中的轨道概念究竟在多大程度上适用于描写微观体系的波粒二象性？

Heisenberg 发现的不确定度关系<sup>6</sup>可以解读为量子力学对此问题的答案.

## Heisenberg 不确定度关系:

1927 年, Heisenberg 通过分析若干理想实验, 发现了著名不确定度关系:

$$\Delta x \Delta p \sim \hbar$$

此关系后来又根据波函数的统计诠释得以严格证明并推广应用到其他可观测物理量, 使其含义和表述更加准确.

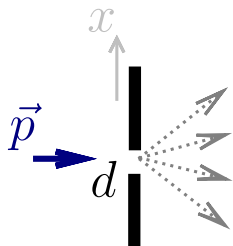
---

<sup>6</sup>i.e., uncertainty relation.

# Gedanken Experiment:

考虑某动量为  $\vec{p}$  的电子沿水平方向射向宽度为  $d$  的单狭缝。

电子通过狭缝时，电子在竖直方向的位置坐标显然有一个不确定度：



$$\Delta x \sim d$$

由于电子具有波粒二象性，其通过狭缝时会发生电子波的衍射现象。主极大对应的衍射角  $\alpha$  满足关系：

$$\sin \alpha \sim \frac{\lambda}{d} \sim \frac{h}{pd}$$

所以，刚刚通过了单狭缝的电子的动量在竖直方向的分量有一个不确定度：

$$\Delta p_x \sim p \sin \alpha \sim \frac{h}{d}$$

$$\rightsquigarrow \Delta x \cdot \Delta p_x \sim h$$

为了正确理解 Heisenberg 不确定度关系，我们现在考虑几个简单的理想化的 de Broglie 波包。

首先，考虑一维单色平面 de Broglie 波描写的微观粒子：

$$\psi_p(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p x}$$

- ❶ 此粒子具有确定的动量  $p$ ，即动量的不确定度  $\Delta p = 0$ 。
- ❷ 但由于  $|\psi_p(x, t)|^2 = 1/2\pi\hbar$ ，粒子出现在空间各点的概率都相同。等价地说，粒子的位置是完全不确定的，位置坐标的不确定度  $\Delta x = \infty$ 。
- ❸ 这样的结论显然与 Heisenberg 关系  $\Delta x \Delta p \sim \hbar$  相容。

接着考虑另一具有确定位置的微观粒子，其初始波函数表为：

$$\psi_{\xi}(x, 0) = \delta(x - \xi)$$

- ❶ 此粒子明确地处在坐标为  $x = \xi$  的位置，其位置的不确定度  $\Delta x = 0$ .
- ❷ 把此波函数做 Fourier 展开，

$$\psi_{\xi}(x, 0) = \delta(x - \xi) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{\frac{i}{\hbar}p(x-\xi)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \varphi_{\xi}(p) e^{\frac{i}{\hbar}px}$$

其中动量分布的概率波幅是：

$$\varphi_{\xi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}p\xi}$$

所以  $|\varphi_{\xi}(p)|^2 = 1/2\pi\hbar$ ，表明粒子动量取各种值的概率都相同，动量完全不确定， $\Delta p = \infty$ 。

- ❸ 此结论与 Heisenberg 不确定度关系  $\Delta x \Delta p \sim \hbar$  也是相容的。

最后考虑波函数为 Gauss 波包  $\psi(x, 0) = e^{-\alpha^2 x^2/2}$  的微观粒子,

$$|\psi(x, 0)|^2 = e^{-\alpha^2 x^2}$$

- ① 从粒子位置概率密度的表达式可知, 粒子位置的有效分布区间是  $|x| < 1/\alpha$ , 即  $\Delta x \sim 1/\alpha$ .
- ②  $\psi(x, 0)$  的 Fourier 变换是:

$$\varphi(p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\alpha^2 x^2/2 - ipx/\hbar} = \frac{1}{\alpha} e^{-p^2/2\alpha^2\hbar^2},$$

$$\rightsquigarrow |\varphi(p)|^2 = \frac{1}{\alpha^2} e^{-p^2/\alpha^2\hbar^2}$$

从而  $\Delta p \sim \alpha\hbar$ .

- ③ 对于波函数采取 Gauss 波包的微观粒子而言, 粒子的位置坐标和动量都没有确定值. 但二者的不确定度的乘积仍然满足 Heisenberg 关系  $\Delta x \Delta p \sim \hbar$ .

Heisenberg 不确定度关系表明：

微观粒子的位置坐标和动量不能同时具有完全确定的值。

- ① 这一结论与是否进行测量无关，它是微观粒子所具有的波粒二象性的反映，其实质是说微观粒子的运动不是轨道运动。
- ② 若承认 de Broglie 关系

$$p = h/\lambda$$

则正如波在空间某个场点处的波长的提法在波动理论中没有意义一样<sup>7</sup>，微观粒子在空间某个场点处的动量在量子力学中也是没有意义的无效词语。

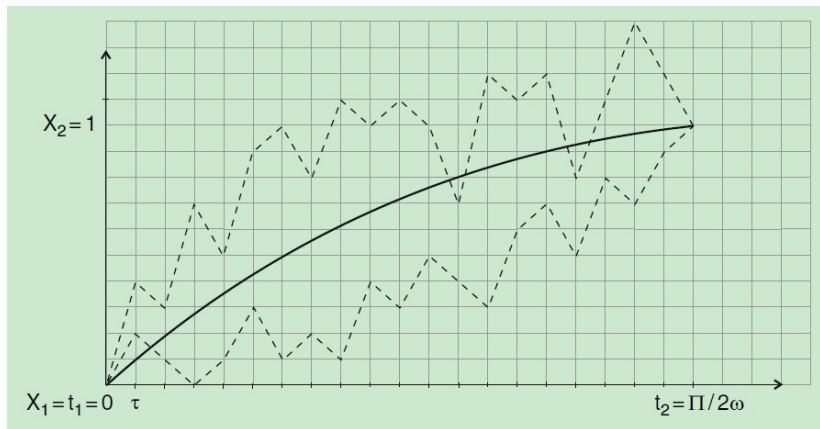
- ③ 既然粒子的动量不与粒子在运动过程中每时每刻的位置坐标相联系，粒子的运动就不是在时空中某个确定的轨道上进行的。

---

<sup>7</sup> 波长  $\lambda$  是描写波在空间变化快慢的物理量，从而是与整个波动相联系的。



**Question:** 微观粒子不做轨道运动的物理图像是什么？



粒子在运动过程中，对应于一个确定的位置坐标，存在着无穷多可能的动量选择。反之亦然。

点评:

① Heisenberg 不确定度关系

$$\Delta x \Delta p \sim \hbar$$

正确地反映了原子、亚原子层次上实物粒子表现出来的波粒二象性。它是量子力学的一条基本原理。

- ② 不确定度关系曾经被译为测不准关系。这个译名突出了波粒二象性对于物理测量的影响。但从本质上讲，不确定度关系与测量无关，它强调的是微观粒子按概率波的波动不是具有确定轨道的轨道运动。
- ③ 对于宏观尺度而言， $\hbar$  是一个可以忽略不计的小量， $\hbar \rightarrow 0$ （这就是通常所说的经典极限）， $\Delta x \Delta p \sim 0$ ，这样在经典极限下轨道运动的概念就成为一个有意义的近似。

# 力学量的平均值与力学量算符

量子力学假定实物粒子的状态由波函数  $\psi(\vec{r}, t)$  描写.

- ① 由于波粒二象性 (或非确定轨道性), 在  $\psi(\vec{r}, t)$  状态下不是所有力学量都可以具有确定值的.
- ② 虽然如此, 所有的力学量都有确定的概率分布, 从而有确定的平均值.

位置坐标的平均值:

按照波函数  $\psi(\vec{r}, t)$  的概率诠释,

$$\langle \vec{r}(t) \rangle = \int_{\text{全}} d\tau \vec{r} |\psi(\vec{r}, t)|^2$$

式中已假定:

$$\int_{\text{全}} d\tau |\psi(\vec{r}, t)|^2 = 1$$

推论:

- ① 若某力学量  $V(\vec{r})$  只是位置矢径的函数, 例如氢原子中电子与原子核之间的静电作用势能

$$V(\vec{r}) = -\frac{Ze^2}{r}$$

则在归一化波函数  $\psi(\vec{r}, t)$  描写的态下, 此力学量的平均值由下式计算:

$$\langle V(\vec{r}, t) \rangle = \int d\tau V(\vec{r}) |\psi(\vec{r}, t)|^2$$

- ② 但必须注意, 由于微观粒子不做轨道运动, 其在空间某一场点处没有唯一的动量,  $\rightsquigarrow$  粒子的动量不是其位置矢径的函数. 所以,

$$\langle \vec{p} \rangle \neq \int d\tau \vec{p} |\psi(\vec{r}, 0)|^2$$

## 动量的平均值:

那么, 怎样在由波函数  $\psi(\vec{r}, t)$  描写的状态下求粒子动量的平均值呢?

如前所述, 给定初始波函数  $\psi(\vec{r}, 0)$  之后, 测得粒子动量在  $\vec{p}$  附近的概率密度是  $|\varphi(\vec{p})|^2$ , 此处  $\varphi(\vec{p})$  定义为波函数  $\psi(\vec{r}, 0)$  的傅里叶变换:

$$\varphi(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} d^3x \psi(\vec{r}, 0) e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}$$

按照物理测量对于平均值的定义,

$$\langle \vec{p} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d^3p \vec{p} |\varphi(\vec{p})|^2$$

### Question:

可否不借助于  $\varphi(\vec{p})$ , 而是直接使用波函数  $\psi(\vec{r}, 0)$  来计算粒子动量的平均值?

答案是肯定的. 利用  $\varphi(\vec{p})$  与  $\psi(\vec{r}, 0)$  的关系, 我们有:

$$\begin{aligned}\langle \vec{p} \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} d^3p \, \vec{p} |\varphi(\vec{p})|^2 \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \iiint_{-\infty}^{+\infty} d^3p \, d^3x \, d^3x' \, \psi^*(\vec{r}', 0) \psi(\vec{r}, 0) \vec{p} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{r}' - \vec{r})}\end{aligned}$$

注意到

$$\nabla e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{r}' - \vec{r})} = \vec{e}_a \partial_{x_a} e^{\frac{i}{\hbar} p_b (x'_b - x_b)} = -\frac{i}{\hbar} \vec{e}_a p_a e^{\frac{i}{\hbar} p_b (x'_b - x_b)} = -\frac{i}{\hbar} \vec{p} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{r}' - \vec{r})}$$

即:

$$\vec{p} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{r}' - \vec{r})} = i\hbar \nabla e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{r}' - \vec{r})}$$

将此式代回到动量平均值的公式, 交换对于动量和位置坐标的积分次序, 可得:

$$\begin{aligned}
\langle \vec{p} \rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \iint_{-\infty}^{+\infty} d^3x d^3x' \psi^*(\vec{r}', 0) \psi(\vec{r}, 0) \left[ i\hbar \nabla \int_{-\infty}^{+\infty} d^3p e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{r}' - \vec{r})} \right] \\
&= i\hbar \iint_{-\infty}^{+\infty} d^3x d^3x' \psi^*(\vec{r}', 0) \psi(\vec{r}, 0) \nabla \delta^{(3)}(\vec{r}' - \vec{r}) \\
&= i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} d^3x \psi(\vec{r}, 0) \nabla \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} d^3x' \psi^*(\vec{r}', 0) \delta^{(3)}(\vec{r}' - \vec{r}) \right] \\
&= i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} d^3x \psi(\vec{r}, 0) \nabla \psi^*(\vec{r}, 0) \\
&= i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} d^3x \nabla |\psi(\vec{r}, 0)|^2 - i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} d^3x \psi^*(\vec{r}, 0) \nabla \psi(\vec{r}, 0)
\end{aligned}$$

利用矢量积分恒等式<sup>8</sup>

$$\int_V d^3x \nabla \mathcal{A}(\vec{r}) = \oint_S d\vec{\sigma} \mathcal{A}(\vec{r})$$

以及粒子出现在无穷远的概率密度为零的物理考虑, 可知:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d^3x \nabla |\psi(\vec{r}, 0)|^2 = 0$$

所以:

$$\langle \vec{p} \rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} d^3x \psi^*(\vec{r}, 0) \nabla \psi(\vec{r}, 0)$$

---

<sup>8</sup>参见 J.D. Jackson, Classical Electrodynamics, 3rd Edition, 高等教育出版社影印版, 2004 年, 第 2 页.



这就是直接使用波函数  $\psi(\vec{r}, 0)$  计算此态下粒子动量平均值的公式，其中出现了一种全新的概念：**动量用对粒子位置坐标的梯度算符表示**，

$$\vec{p} \rightarrow \hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla$$

任意力学量的平均值：

动量平均值的上述计算公式在量子力学中具有普遍意义。在此基础上量子力学归纳出了一条基本原理：**力学量用算符表示**。

因此，在归一化波函数  $\psi(\vec{r}, 0)$  描写的态下，微观粒子力学量  $A$  的平均值可按下式求出：

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d^3x \psi^*(\vec{r}, 0) \hat{A} \psi(\vec{r}, 0)$$

$\hat{A}$  是与力学量  $A$  相应的算符<sup>9</sup>。

---

<sup>9</sup>下一章将较系统地讨论构造力学量算符的方法。

几个在经典力学中常见的力学量所对应的量子力学算符如下：

① 位置矢量  $\vec{r} \rightsquigarrow$

$$\hat{\vec{r}} = \vec{r}$$

② 动量  $\vec{p} \rightsquigarrow$

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla$$

③ 保守力体系的 Hamilton 量  $H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \rightsquigarrow$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})$$

④ 轨道角动量  $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \rightsquigarrow$

$$\hat{\vec{L}} = -i\hbar \vec{r} \times \nabla$$

# 统计诠释对波函数提出的要求:

Born 统计诠释赋予了波函数确切的物理意义:

$|\psi(\vec{r}, t)|^2 = t$  时刻发现粒子处在位矢为  $\vec{r}$  的场点处的概率密度.

按此理解, 可以对波函数  $\psi(\vec{r}, t)$  的数学形式提出些什么要求呢?

有人曾提出波函数  $\psi(\vec{r}, t)$  应满足所谓标准条件, 即要求波函数在空间各点

- ① 有限.
- ② 单值.
- ③ 连续.

我们现在逐一分析这些条件的合理性.

## 有限性:

根据统计诠释,  $|\psi(\vec{r}, t)|^2$  只是表示发现粒子的概率密度, 它并不是概率本身.

- ① 从物理测量的角度看, 只应要求在空间任何有限大的体积中找到粒子的概率为有限值.
- ② 并不排除在空间某些孤立点处  $|\psi(\vec{r}, t)|$  是发散的. 换句话说, 若  $\vec{r} = \vec{r}_0$  是波函数  $\psi(\vec{r}, t)$  的一个孤立奇点,  $\tau_0$  是包围  $\vec{r}_0$  点在内的任意有限体积, 则物理上只要求

$$\int_{\tau_0} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3x = \text{有限值}$$

设  $\tau_0$  是半径为  $r$  的球面所包围的三维空间,  $\vec{r}_0$  处于球心. 显然, 当  $r \rightarrow 0$  时, 上式的积分值应趋于零, 从而

$$\lim_{r \rightarrow 0} r^3 |\psi(\vec{r}, t)|^2 = 0$$

如果  $r \rightarrow 0$  时波函数的发散行为是  $\psi \sim 1/r^s$ , 则只要  $s < 3/2$  这样的波函数就是物理上可接受的.

## 单值性:

统计诠释要求  $|\psi(\vec{r}, t)|$  在时空各点具有单值性. 但是,

- ① 要求波函数的绝对值单值并不同时意味着要求波函数本身也一定单值.
- ② 量子力学中的确存在在  $\vec{r}$  空间不单值的波函数, 例如计及了自旋自由度的电子波函数.
- ③ 波函数本身是否单值要考察其他因素, 如力学量算符的厄米性等. 仅仅从波函数的统计诠释角度考虑的话, 单值性不应作为波函数必须满足的条件.

## 连续性:

按照  $\psi(\vec{r}, t)$  在时空中的演化所必须遵从的 Schrödinger 方程. 波函数本身的连续性是其一阶空间导数存在的必要条件, 但一般性地要求波函数的各阶空间导数满足连续性则是无理的.  $\psi(\vec{r}, t)$  及其各阶空间导数的连续性, 要根据体系所处势场  $V(\vec{r}, t)$  的性质具体分析.

## 波函数描写粒子状态的完备性:

按照波函数的统计诠释, 给定与某个微观粒子相联系的 de Broglie 波的波函数  $\psi(\vec{r}, t)$  后, 粒子所有可观测力学量的测量值概率分布就完全确定了. 例如:

- ① 若测量粒子的位置, 则粒子出现在  $\vec{r}$  点附近的概率密度是  $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ .
- ② 若测量粒子的动量, 则粒子动量为  $\vec{p}$  的概率密度是  $|\varphi(\vec{p}, t)|^2$ , 这里  $\varphi(\vec{p}, t)$  是  $\psi(\vec{r}, t)$  的 Fourier 变换,

$$\varphi(\vec{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} d^3x \psi(\vec{r}, t) e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}$$

类似还可以写出其他可观测力学量测量值的概率分布. 从这个意义上讲, 波函数  $\psi(\vec{r}, t)$  给出了所描写微观粒子的全部信息, 它完全性地描写了粒子的一个量子态. 所以, 波函数也称为态函数.

两种表象:

比较  $\psi(\vec{r}, t)$  与  $\varphi(\vec{p}, t)$  的关系:

$$\varphi(\vec{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} d^3x \psi(\vec{r}, t) e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}$$
$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} d^3p \varphi(\vec{p}, t) e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}$$

我们看到波函数  $\psi(\vec{r}, t)$  与其 Fourier 变换  $\varphi(\vec{p}, t)$  具有完全对等的地位:

给定  $\varphi(\vec{p}, t)$  后, 不仅粒子动量测量值的概率分布  $|\varphi(\vec{p}, t)|^2$  完全确定, 粒子位置矢径测量值的概率分布也可通过从  $\varphi(\vec{p}, t)$  的傅里叶变换求得  $\psi(\vec{r}, t)$  而完全确定. 因此,  $\varphi(\vec{p}, t)$  也完全性地描写了粒子的同一个量子态.

由此我们看到：粒子的量子态既可以用  $\psi(\vec{r}, t)$  描写，也可以用  $\varphi(\vec{p}, t)$  描写。当然还可以有其他的方式。

这些描写方式之间有确定的变换关系，彼此完全等价，它们描写的都是同一个量子态，只不过采用了不同的表象<sup>10</sup>。我们称

- ①  $\psi(\vec{r}, t)$  是粒子在位置表象中的波函数。
- ②  $\varphi(\vec{p}, t)$  是粒子在动量表象中的波函数。

不同表象中的波函数之间的纽带是量子力学中的一条基本原理：

量子态叠加原理。

---

<sup>10</sup> 犹如 3 维空间中一个普通的矢量可以在不同的坐标系表达出来一样。有关量子力学中的表象及表象变换的系统知识，见后。



## 态叠加原理:

假设若体系处于  $\psi_1$  描写的态下, 测量力学量  $A$  所得的结果是一个确定值  $a_1$ <sup>11</sup>. 又假设若体系处于  $\psi_2$  描写的态下, 测量力学量  $A$  所得的结果是另一个确定值  $a_2$ . 则线性叠加波函数

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$$

所描写的也是体系一个可能的量子态.

- ① 在线性叠加态  $\psi$  描写的状态下, 测量力学量  $A$  所得的结果既可能是  $a_1$ , 也可能是  $a_2$ , 但不会有其他可能性.
- ② 在线性叠加态  $\psi$  下测量粒子的力学量  $A$ , 不会有确定的测量值. 测量结果将以正比于  $|c_1|^2$  的概率得到本征值  $a_1$ , 以正比于  $|c_2|^2$  的概率得到本征值  $a_2$ .

---

<sup>11</sup> 习惯上称  $a_1$  是力学量算符  $\hat{A}$  的一个本征值,  $\psi_1$  是  $\hat{A}$  属于本征值  $a_1$  的一个本征态. 记作:  $\hat{A}\psi_1 = a_1\psi_1$ .

点评:

量子力学中的态叠加原理是与测量密切联系在一起的一个公设, 它与经典物理学中经典波动的线性叠加在物理内容上有本质的不同.

为了对态叠加原理的有一个初步理解, 考虑在任一波函数  $\psi(\vec{r}, 0)$  描写的态下对粒子动量的测量.

我们知道: 单色平面波形式的概率波

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r} - p^2 t/2m)}$$

描写的是具有确定动量的自由粒子态(动量本征态).

按照态叠加原理, 可以把  $\psi(\vec{r}, t)$  看作一个由无穷多个对应不同动量本征值的动量本征态  $\psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t)$  线性叠加而成的波包:

$$\psi(\vec{r}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d^3p \varphi(\vec{p}) \psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t)$$

特别地,

$$\psi(\vec{r}, 0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} d^3p \varphi(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}$$

这样, 在  $\psi(\vec{r}, 0)$  态下对粒子的动量进行测量就可能出现许多不同的测量结果.

- ① 凡是波包  $\psi(\vec{r}, 0)$  中包含有的平面波  $\sim e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}$  所对应的  $\vec{p}$  值, 按量子力学态叠加原理, 均是体系可能的动量测量值.
- ② 每一个可能的  $\vec{p}$  出现在动量测量结果中的相对概率也是确定的.

在线性叠加态  $\psi(\vec{r}, 0)$  下, 粒子以概率  $|\varphi(\vec{p})|^2 d^3p$  部分地处于动量本征态  $\sim e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}$  上, 观测者以概率  $|\varphi(\vec{p})|^2 d^3p$  测得粒子的动量为  $\vec{p}$ .

## 测量与波函数坍缩:

虽然态叠加原理与力学量的测量紧密地联系在一起, 但叠加态

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$$

反映的仍然是实际测量发生之前微观粒子的量子态.

一旦对粒子力学量  $A$  的某次实际测量过程完成, 力学量  $A$  的该次测量值就是完全确定的. 这样, 在对力学量  $A$  的这次实际测量完成之后, 粒子就不再处于原来的叠加态  $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ , 而是突变为实际测量值所对应的本征态, 例如  $\psi_2$ .

这种由于对体系某力学量进行的测量所导致的体系状态从线性叠加态突变为所测力学量某一本征态的现象称为量子态的坍缩 (collapse).

至于为什么量子态会发生坍缩, 目前仍是一个没有解决的量子力学前沿问题.

## 量子态坍塌的物理图像:

假设体系事先处于叠加态,

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$$

式中  $\psi_1$  和  $\psi_2$  是力学量算符  $\hat{A}$  的两个本征态, 相应的本征值分别为  $a_1$  和  $a_2$ .

- ① 对体系力学量  $A$  的第一次测量导致了量子态的坍塌,

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 \quad \rightsquigarrow \quad \psi_2$$

第一次测量  $A$  将以概率  $|c_2|^2$  得到测量值  $a_2$ . 第一次测量完成后, 体系的状态不再由  $\psi$  描写, 而是由  $\psi_2$  描写.

- ② 量子态发生坍塌  $\psi \rightsquigarrow \psi_2$  之后, 若立刻<sup>12</sup>再测量体系的力学量  $A$ , 测量结果必定仍然是  $a_2$ .

---

<sup>12</sup>Q: 请问再次测量为什么要立刻进行?

Q:

两次物理测量之间体系的波函数是如何随时间演化的？

量子力学假设：两次物理测量之间体系波函数随时间的演化服从如下波动方程，

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(\vec{r}, t)$$

- ① 此方程的发明权属于奥地利物理学家薛定谔 (E. Schrödinger) (1926)，因此通常称其为薛定谔方程。
- ② 薛定谔方程是量子力学的基本方程，其地位与牛顿第二定律在经典力学中的地位相当，本质上应当认为它是量子力学的一个基本假定<sup>13</sup>。

---

<sup>13</sup> 必须记住：在量子力学理论框架内，并不能从什么更基本的原理出发推导出薛定谔方程。薛定谔方程的正确性，只能靠实验来检验。

点评：

在薛定谔最初建议的薛定谔方程中，

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}, t)$$

但此式只有在  $V(\vec{r}, t) = V(\vec{r})$  下才有明确的物理解释。一般情况下，此式的含义是模糊的。

## Schrödinger 方程的建立：

当然，Schrödinger 方程不可能凭空出现。下面我们进一步审视德布罗意假设，以期对 Schrödinger 方程的建立过程有所体会。

根据德布罗意假设，动量  $\vec{p}$ 、能量  $E$  的自由粒子所处的量子态应由一系列单色平面概率波描写，其波矢和频率分别为

$$\vec{k} = \vec{p}/\hbar, \quad \omega = E/\hbar.$$

借鉴机械波或经典电磁波，可以猜想其波函数为：

$$\begin{aligned}\tilde{\varphi}_{\vec{p}}(\vec{r}, t) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \cos[(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)/\hbar]\end{aligned}$$

或将其写为复数形式<sup>14</sup>：

$$\varphi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)}$$

---

<sup>14</sup> 此处沿用经典波动理论的习惯，暂且假定这两种形式的波函数是等价的。



单色平面概率波的波动方程：

首先聚焦单色平面波  $\tilde{\varphi}_{\vec{p}}(\vec{r}, t)$ ,

$$\tilde{\varphi}_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \cos [(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)/\hbar]$$

现研究其可以满足的微分方程. 因为  $\tilde{\varphi}_{\vec{p}}(\vec{r}, t)$  的数学形式是余弦函数, 其对于时间  $t$  的一阶导数和对位置矢量的梯度都不与波函数本身成比例:

$$\begin{aligned}\partial_t \tilde{\varphi}_{\vec{p}}(\vec{r}, t) &= \frac{E}{\hbar} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \sin [(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)/\hbar] \\ \nabla \tilde{\varphi}_{\vec{p}}(\vec{r}, t) &= -\frac{\vec{p}}{\hbar} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \sin [(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)/\hbar]\end{aligned}$$

当然, 相应的二阶导数与波函数成正比:

$$\partial_t^2 \tilde{\varphi}_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = -\frac{E^2}{\hbar^2} \tilde{\varphi}_{\vec{p}}(\vec{r}, t), \quad \nabla^2 \tilde{\varphi}_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = -\frac{p^2}{\hbar^2} \tilde{\varphi}_{\vec{p}}(\vec{r}, t).$$

倘若  $\tilde{\varphi}_{\vec{p}}$  描写的自由粒子是静止质量为  $m$  的相对论性粒子，其能量、动量满足关系

$$E^2 = c^2 p^2 + m^2 c^4$$

则显然有：

$$0 = \left[ -\frac{E^2}{c^2} + p^2 + m^2 c^2 \right] \tilde{\varphi}_{\vec{p}} = \hbar^2 \left[ \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right] \tilde{\varphi}_{\vec{p}}$$

即  $\tilde{\varphi}_{\vec{p}}$  满足的波动方程是：

$$\left[ \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right] \tilde{\varphi}_{\vec{p}} = 0$$

追溯量子力学的真实发展史，Schrödinger 最初发现的波动方程正是此方程，但随即被他本人抛弃<sup>15</sup>。

---

<sup>15</sup>Klein 和 Gordon 后来重新发现了此方程，故其得名 Klein-Gordon 方程。

Schrödinger 抛弃 Klein-Gordon 方程的理由，是因为此方程不能给出非相对论性自由粒子的能量、动量关系式：

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

随着量子力学的发展，人们逐渐认识到 Klein-Gordon 方程作为单粒子的量子力学方程还存在负概率困难<sup>16</sup>。所以，Schrödinger 的放弃显示了他在物理上的远见。

正确的自由粒子概率波波动方程或许可以通过求 Klein-Gordon 方程

$$\left[ \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right] \tilde{\varphi} = 0$$

的非相对论极限得到。Klein-Gordon 方程左端质量项  $m^2 c^2 \tilde{\varphi} / \hbar^2$  的存在使得非相对论极限  $c \rightsquigarrow \infty$  很难求。为克服此困难，做波函数代换：

---

<sup>16</sup> 换言之，Klein-Gordon 方程与波函数的统计诠释不兼容。这是不可接受的。

$$\tilde{\varphi}(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}, t) e^{-imc^2 t/\hbar}$$

如此,

$$\frac{\partial^2 \tilde{\varphi}}{\partial t^2} = \left[ \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \frac{i2mc^2}{\hbar} \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{m^2 c^4}{\hbar^2} \psi \right] e^{-imc^2 t/\hbar}$$

把上式代回到 Klein-Gordon 方程中, 发现质量项神奇地消失了,

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \frac{i2m}{\hbar} \frac{\partial \psi}{\partial t} - \nabla^2 \psi = 0$$

再取极限  $c \rightsquigarrow \infty$ , 即得期望中的自由粒子 Schrödinger 方程:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi$$

点评:

- ① Schrödinger 方程采取扩散方程的数学形式反映微观粒子的波动性, 因此, 虚数因子  $i$  是 Schrödinger 方程不可或缺的部分。
- ② 不难看出: 实数形式的单色平面波

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \cos \left[ \left( \vec{p} \cdot \vec{r} - \frac{p^2 t}{2m} \right) / \hbar \right]$$

不满足自由粒子的 Schrödinger 方程

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi$$

但其复数对应

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} (\vec{p} \cdot \vec{r} - p^2 t / 2m)}$$

却是此 Schrödinger 方程的解。事实上, 量子力学中用以描写粒子任一时刻量子态的完全波函数  $\psi(\vec{r}, t)$  绝不能是实函数。虚因子  $i$  实质性地进入到了量子体系的状态描写之中。

Question : 为什么说

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \cos \left[ \left( \vec{p} \cdot \vec{r} - \frac{p^2 t}{2m} \right) / \hbar \right]$$

不是 Schrödinger 方程的解 ?

直接验证即可证明. 求此波函数对于时间参数和空间坐标的微商, 可得:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t} &= \frac{p^2}{2m\hbar} \cdot \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \sin \left[ \left( \vec{p} \cdot \vec{r} - \frac{p^2 t}{2m} \right) / \hbar \right] \\ \nabla^2 \psi &= -\frac{p^2}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \cos \left[ \left( \vec{p} \cdot \vec{r} - \frac{p^2 t}{2m} \right) / \hbar \right] \end{aligned}$$

自由粒子的 Schrödinger 方程要求对任一时空点, 均有:

$$i \cdot \sin \left[ \left( \vec{p} \cdot \vec{r} - \frac{p^2 t}{2m} \right) / \hbar \right] = \cos \left[ \left( \vec{p} \cdot \vec{r} - \frac{p^2 t}{2m} \right) / \hbar \right]$$

这显然是不可能的.

点评:

虽然实数单色平面波

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \cos \left[ \left( \vec{p} \cdot \vec{r} - \frac{p^2 t}{2m} \right) / \hbar \right]$$

不是自由粒子 Schrödinger 方程

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi$$

的解, 但复数单色平面波

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r} - p^2 t / 2m)}$$

却是解<sup>17</sup>. 事实上, 不仅如此. 容易验证: 以下形式的波函数也都满足自由粒子的 Schrödinger 方程:

$$\psi_1 \sim \cos(\vec{p} \cdot \vec{r} / \hbar) e^{-ip^2 t / 2m\hbar}, \quad \psi_2 \sim \sin(\vec{p} \cdot \vec{r} / \hbar) e^{-ip^2 t / 2m\hbar}.$$

---

<sup>17</sup> 忠告: 物理波函数的复共轭不服从薛定谔方程, 因此不是物理上可接受的波函数.

## 量子化方法:

从自由粒子 Schrödinger 方程的建立过程可知: 在自由粒子的非相对论能量、动量关系式  $E = p^2/2m$  中作如下替换:

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \vec{p} \rightarrow -i\hbar \nabla$$

再作用于波函数  $\psi(\vec{r}, t)$ , 即得自由粒子的 Schrödinger 方程.

现在把这一规则推广应用于在势场  $V(\vec{r}, t)$  中运动的粒子. 此时粒子的非相对论性能量、动量关系式是:

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

把其算符化, 再把算符化的结果作用于  $\psi(\vec{r}, t)$ , 可得:

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

这就是此情形下的 Schrödinger 方程.



Dirac 建议，普遍情形下薛定谔方程应表示为：

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(\vec{r}, t)$$

- $\hat{H}$  是作用于波函数空间的某个线性算符。
- 若粒子的运动服从概率守恒定律， $\hat{H}$  须为厄米算符 (详见下一节)。
- 通常把  $\hat{H}$  称为体系的 Hamilton 算符。顾名思义，许多情形下  $\hat{H}$  可以通过在相应经典力学体系的 Hamilton 量  $H(\vec{r}, \vec{p})$  中做替换：

$$\vec{p} \rightarrow -i\hbar \nabla$$

获得。但须注意这并不是构造  $\hat{H}$  的金科玉律，它充其量只是为构造 Hamilton 算符的正确形式提供了最初的思路和借鉴<sup>18</sup>。 $\hat{H}$  归根结底是要通过薛定谔方程的理论预言与实验结果之间的一致性确定的。

---

<sup>18</sup> 随着课程的展开，我们会陆续介绍一些构造  $\hat{H}$  的实例。

## 思考题:

- ① 若微观粒子在非保守力场中运动，其波函数的时间演化遵从什么规律？

微观世界中最典型的非保守力场是电磁场。所以，以上问题又可以换一个方式提问：

- ① 从波函数的概率诠释角度看：若带电微观粒子在电磁场中运动，试问其波函数的时间演化方程是什么？

## 定域的概率守恒定律:

Schrödinger 方程描写的是非相对论情况下实物粒子 ( $m \neq 0$ ) 在时空中的运动规律, 此时没有粒子的产生、湮灭现象发生.

因此, 虽然粒子按概率波波动的方式随时间演化, 物理直观上仍应期望粒子在每个时刻必定出现在空间中的某个地点. 换句话说, 在全空间中发现粒子的总概率应为壹:

$$\int_{\text{全}} d^3x |\psi(\vec{r}, 0)|^2 = 1$$

且此总概率应不随时间改变,

$$\frac{d}{dt} \int_{\text{全}} d^3x |\psi(\vec{r}, t)|^2 = 0$$

**Question:** 那么, 这一基于波函数的概率诠释作出的合理判断可否通过 Schrödinger 方程得到论证呢?

如果粒子所处势场的势能可看作实函数,  $V^*(\vec{r}, t) = V(\vec{r}, t)$ , 则答案是肯定的.

此情形下, Schrödinger 方程及其复共轭方程分别表达为:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}, t) \right] \psi \\ -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} &= \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}, t) \right] \psi^* \end{aligned}$$

❶ 复共轭方程并不是 Schrödinger 方程, 从而  $\psi^*(\vec{r}, t)$  不是描写体系状态的波函数<sup>19</sup>.

用  $\psi^*$  与 Schrödinger 方程相乘, 再用  $\psi$  与复共轭方程相乘. 然后相减, 得:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$$

---

<sup>19</sup>再次领悟: 量子力学体系的完全波函数  $\psi(\vec{r}, t)$  不能是时间参数的实函数.

令

$$\begin{aligned}\rho(\vec{r}, t) &= |\psi(\vec{r}, t)|^2 \\ \vec{j}(\vec{r}, t) &= -\frac{i\hbar}{2m}(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)\end{aligned}$$

则前式可重新表为：写成一个的形式：

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

此式在数学形式上类似于流体的连续性方程。它被称为是量子力学体系的**概率守恒定律**。

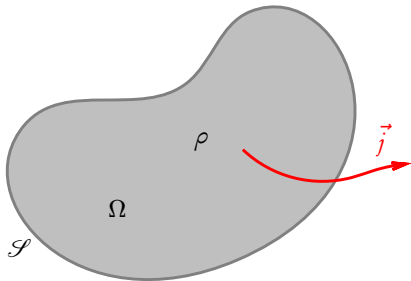
为了看出它的物理意义，我们计算其在空间某闭区域  $\Omega$  上的体积分：

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho \, d^3x = \int_{\Omega} \frac{\partial \rho}{\partial t} \, d^3x = - \int_{\Omega} d^3x \, \nabla \cdot \vec{j} = - \oint_S \vec{j} \cdot d\vec{s}$$

这里  $S$  是包围区域  $\Omega$  的二维闭合曲面。

即:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho \, d^3x = - \oint_S \vec{j} \cdot d\vec{s}$$



- ①  $\rho = |\psi|^2$  是发现粒子的概率密度. 所以, 上式左端应解释为在  $\Omega$  内找到粒子的总概率随时间增加的速率.
- ② 从概率守恒的观点看: 当粒子出现在空间某区域内的概率增加了, 它出现在另外一些地方的概率必然要减小 (以保证在全空间发现粒子的概率守恒), 且一定伴随有概率的流动来实现这种变化.
- ③ 因此, 上式右端表示的是粒子在单位时间内穿过边界面  $S$  进入到  $\Omega$  内部的概率. 按此理解,  $\vec{j}(\vec{r}, t)$  在量子力学中被诠释为概率流密度矢量.

任何真实的波函数都应满足平方可积条件

$$\int_{\text{全}} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3x = \text{Finite}$$

对于这样的波函数，可以选择适当的归一化常数使某个选定时刻（例如  $t = 0$ ）的波函数正常归一化为壹：

$$\int_{\text{全}} |\psi(\vec{r}, 0)|^2 d^3x = 1$$

对于平方可积的波函数，当  $r \rightarrow \infty$ ， $\psi \sim r^{-(3/2+s)}$ ， $s > 0$ 。因此，对半径为无穷大的球面  $S$  而言，

$$\oint_S \vec{j} \cdot d\vec{s} \sim \oint_S (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \cdot d\vec{s} \sim \lim_{r \rightarrow \infty} r^2 \cdot r^{-2(3/2+s)-1} = 0$$

将此结果代入到概率守恒定律中，得：

$$\frac{d}{dt} \int_{\text{全}} \rho d^3x = 0$$

即在全空间发现粒子的概率不随时间变化。

所以，当粒子按 Schrödinger 方程所示的规律在时空中演化时，既无新粒子的产生，亦无旧粒子的湮灭. 在任一时刻总可以在空间某点找到此粒子：

$$\int_{\text{全}} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3x = 1$$

从这一角度看，量子力学本质上是单粒子量子理论.

忠告：

需要强调指出的是：量子力学中存在概率守恒定律的本质原因在于 Schrödinger 方程只含有波函数  $\psi(\vec{r}, t)$  对时间参数  $t$  的一阶导数.

正因为如此，才有  $\rho(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2$ ，连续性方程

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

才能在波函数的统计诠释的基础上诠释为概率守恒定律.



点评:

倘若波动方程含有波函数对时间的二阶导数, 例如相对论性的 Klein-Gordon 方程:

$$\left( \nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \Psi = 0$$

此情形下仍可推导出形如

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

那样的连续性方程. 具体细节如下. 把 Klein-Gordon 方程与其复共轭方程重新写为:

$$\nabla^2 \Psi = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \Psi, \quad \nabla^2 \Psi^* = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial t^2} + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \Psi^*$$

据此计算组合

$$\Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^*$$

得:

$$\begin{aligned}\nabla \cdot (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) &= \Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^* \\ &= \frac{1}{c^2} (\Psi^* \ddot{\Psi} - \Psi \ddot{\Psi}^*) \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \left[ \frac{1}{c^2} (\Psi^* \dot{\Psi} - \Psi \dot{\Psi}^*) \right]\end{aligned}$$

即:

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

式中,

$$\rho = -\frac{i}{c} (\Psi^* \dot{\Psi} - \Psi \dot{\Psi}^*), \quad \vec{j} = ic (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*)$$

在  $\rho$  与  $\vec{j}$  的表达式里引入  $i$  是为了保证  $\rho$  取实数值:  $\rho^* = \rho$ . 须注意如此定义的  $\rho$  是可正可负的, 因此这样的  $\rho$  不能诠释为发现粒子的概率密度, Klein-Gordon 方程并无资格可以被诠释为量子力学体系的状态演化方程.

## 专题：单光子的量子力学是否存在？

光子是电磁场的量子，但长期以来物理学界主流民意认为并不存在以单个光子作为研究对象的量子力学。这个信念的理论基础是真空中电磁波的波动方程

$$\left( \nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \vec{E}(\vec{r}, t) = 0$$

与复标量场的 Klein-Gordon 方程的数学相似性。

然而近年来有物理学家指出，上述相似性并不足以否定建立单光子量子力学理论的可能性。电磁强度是实矢量场，

$$\vec{E}^*(\vec{r}, t) = \vec{E}(\vec{r}, t)$$

困扰复标量场的负概率问题可能在单光子的量子力学理论中并不存在。特别地，Bialynicki-Birula 发现了单个光子的波函数及其服从的演化方程<sup>20</sup>，明确地核实了这一猜测。所以，有理由相信单光子的量子力学可能是存在的。

---

<sup>20</sup>Bialynicki-Birula, On the wave function of the photon, Acta Physica Polonica A, 86(1994)97.

鉴于波动方程

$$\left( \nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \vec{E}(\vec{r}, t) = 0$$

涉及场强  $\vec{E}(\vec{r}, t)$  对时间参数的二阶导数，Bialynicki-Birula 认为它不是光子波函数应该满足的演化方程。  $\vec{E}(\vec{r}, t)$  自然地也不应该诠释为光子的波函数。

为了建立合理的光子量子力学方程式，Bialynicki-Birula 建议直接考察真空中的 Maxwell 方程组。在没有电荷、电流存在的区域，Maxwell 方程组中的独立方程仅有两个：

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad \nabla \times \vec{B} = \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$$

分别取此二式的散度，回忆旋度场无散的数学定理，自然就得到 Maxwell 方程组中的另两个方程  $\nabla \cdot \vec{E} = 0$  与  $\nabla \cdot \vec{B} = 0$ 。

引入复场强：

$$\vec{\psi} = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{2}} \vec{E} + i \frac{\vec{B}}{\sqrt{2\mu_0}}$$

其模方代表电磁场的能量体密度,

$$|\vec{\psi}|^2 = \frac{1}{2}\epsilon_0 \vec{E}^2 + \frac{1}{2\mu_0} \vec{B}^2$$

不难看出:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \vec{\psi}}{\partial t} &= \sqrt{\frac{\epsilon_0}{2}} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \frac{i}{\sqrt{2\mu_0}} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \\&= \sqrt{\frac{\epsilon_0}{2}} \frac{1}{\mu_0 \epsilon_0} \nabla \times \vec{B} - \frac{i}{\sqrt{2\mu_0}} \nabla \times \vec{E} \\&= -\frac{i}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}} \nabla \times \left( \sqrt{\frac{\epsilon_0}{2}} \vec{E} + i \frac{\vec{B}}{\sqrt{2\mu_0}} \right) \\&= -ic \nabla \times \vec{\psi}\end{aligned}$$

这里  $c = 1/\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}$  为真空中的光速. 显然, 此式可以等价地表达为:

$$i\hbar \frac{\partial \vec{\psi}}{\partial t} = \hbar c \nabla \times \vec{\psi}$$

为了看出此式的物理意义，我们在 3 维位置矢量空间中取笛卡尔直角坐标系使得  $\vec{\psi} = \psi_a \vec{e}_a$ 。如此，上式又可写为：

$$i\hbar \frac{\partial \psi_a}{\partial t} = -\hbar c \epsilon_{jab} \partial_j \psi_b$$

引入厄米矩阵  $S_j$  ( $j = 1, 2, 3$ ):

$$(S_j)_{ab} = -i\epsilon_{jab}$$

其显示的矩阵形式是：

$$S_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad S_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_3 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

可以把  $\psi_a$  满足的方程改写为：

$$i\hbar \frac{\partial \psi_a}{\partial t} = -i\hbar c (S_j)_{ab} \partial_j \psi_b = -i\hbar c (\vec{S} \cdot \nabla)_{ab} \psi_b$$

最后一式中约定， $\vec{S} = S_j \vec{e}_j$ 。

所以，自由运动的光子的波函数应采取如下列矩阵形式：

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \end{pmatrix}$$

其时间演化方程是：

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\hbar c (\vec{S} \cdot \nabla) \psi$$

点评：

- 光子波函数的时间演化方程采取的是薛定谔方程的形式，但这个方程与 Maxwell 方程组等价。
- 自由光子的 Hamilton 算符是：

$$\hat{H} = -i\hbar c \vec{S} \cdot \nabla = c \vec{S} \cdot \hat{\vec{p}}$$

它恰好是经典的光子能量、动量关系式  $E = pc$  的量子力学对应。

- 光子波函数模方的计算如下：

$$\begin{aligned}
 |\psi(\vec{r}, t)|^2 &= \psi^\dagger \psi = \sum_{a=1}^3 |\psi_a|^2 = |\vec{\psi}(\vec{r}, t)|^2 \\
 &= \frac{1}{2} \epsilon_0 \vec{E}^2 + \frac{1}{2\mu_0} \vec{B}^2
 \end{aligned}$$

所以， $|\vec{\psi}(\vec{r}, t)|^2$  唯一合理的物理解释应该是电磁场的能量密度、而不是发现光子的概率密度<sup>21</sup>。换言之，光子的波动性是电磁波的波动性、并不是概率波。

- 鉴于矩阵波函数  $\psi$  失去了概率幅的物理意义，它不能归一化为一。实际上，积分

$$\int d^3x |\vec{\psi}(\vec{r}, t)|^2$$

表示的是电磁场的能量（在单光子量子力学中，它也就是一个光子的能量），它应该等于  $\hbar\omega$ ，而不是一。

---

<sup>21</sup>虽然  $|\psi(\vec{r}, t)|^2$  与发现光子的概率密度成正比，但因其具有能量密度的量纲，它并不能直接诠释为概率密度。



- 与电子的波函数不同，光子的波函数  $\psi$  本身是有物理意义的(电磁场的场强)。所以， $\psi$  与  $e^{i\alpha} \psi$  描写不同的光子态。
- $t$  时刻在位置矢量为  $\vec{r}$  的场点处发现光子的概率密度是：

$$\rho(\vec{r}, t) = \frac{|\psi(\vec{r}, t)|^2}{\int d^3x' |\vec{\psi}(\vec{r}', t)|^2}$$

显然， $\rho \geq 0$ 。在电磁场能量密度取非零值的任意场点处，光子均有一定的概率出现。换言之，在单光子量子力学中，位置矢径算符没有本征态。

- $\vec{S}$  称为光子的自旋角动量算符。容易验证： $\vec{S}^2 = 2 \rightsquigarrow$  光子的自旋为一<sup>22</sup>。

---

<sup>22</sup> 顾及电磁波有两个独立偏振方向的实验事实，光子的波函数与波动方程还须做新的修正。详见 Bialynicki-Birula 的文章。

## 初值问题，能量本征方程：

Schrödinger 方程只含有波函数对时间的一阶微商。

- ① 只要给定体系在初始时刻  $t'$  的状态  $\psi(\vec{r}, t')$ ，体系在以后任何时刻  $t > t'$  的状态  $\psi(\vec{r}, t)$  原则上可以通过求解 Schrödinger 方程完全确定。
- ② 一般情况下，从已知初态  $\psi(\vec{r}, t')$  出发求解 Schrödinger 方程很困难。

以下假设势能不显含时间  $t$  (保守力场)，

$$V(\vec{r}, t) = V(\vec{r})$$

在此情形下，Schrödinger 方程简化为：

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

它可以用分离变量法求解。

考虑如下因子化形式的特解：

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi_E(\vec{r}) F(t)$$

代入 Schrödinger 方程，得：

$$\frac{i\hbar}{F(t)} \frac{dF}{dt} = \frac{1}{\psi_E(\vec{r})} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \psi_E(\vec{r}) = E$$

此处  $E$  是一既不依赖于  $t$ ，也不依赖于  $\vec{r}$  的具有能量量纲的待定常数。这样，

$$\frac{d}{dt} \ln F(t) = -\frac{iE}{\hbar} \quad \rightsquigarrow \quad F(t) \sim e^{-iEt/\hbar}$$

因此<sup>23</sup>，上述波函数的特解可表达为：

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi_E(\vec{r}) e^{-iEt/\hbar}$$

---

<sup>23</sup> 显然， $F(t)$  不可能具有  $\sin(Et/\hbar)$  或者  $\cos(Et/\hbar)$  这样的实函数形式。

其中的空间因子波函数  $\psi_E(\vec{r})$  要通过求解方程

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

才能最终确定.

点评:

- Schrödinger 方程是关于波函数的线性方程, 其一般解是上述特解的线性叠加:

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_E C_E \psi_E(\vec{r}) e^{-iEt/\hbar}$$

此式是态叠加原理的另一种实现方式.

- 由不含时 Schrödinger 方程确定的空间因子波函数  $\psi_E(\vec{r})$  有可能是粒子位置矢径  $\vec{r}$  的实函数. 但由于含时因子  $e^{-iEt/\hbar}$  的存在, 描写粒子状态的完整波函数  $\psi(\vec{r}, t)$  必定是复函数.

并不是对于一切  $E$  值所求得的  $\psi_E(\vec{r})$  都能满足物理上的要求. 物理上对波函数提出的要求例如有束缚态边界条件、周期性边界条件和散射态边界条件等. 这些条件中, 有些来自于波函数的统计诠释, 有些来自于实验对理论的反馈.

忠告:

在束缚态边界条件下, 只有某些离散分布的  $E$  值所对应的因子波函数  $\psi_E(\vec{r})$  才是物理上可以接受的.

不含时的 Schrödinger 方程

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

称为势场  $V(\vec{r})$  中粒子的能量本征方程.  $E$  值称为体系的能量本征值, 空间因子波函数  $\psi_E(\vec{r})$  称为能量本征函数.

Hamilton 算符:

Schrödinger 方程更一般性的表达式是:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi$$

$\hat{H}$  是体系的 Hamilton 算符.

- 当粒子在势场  $V(\vec{r}, t)$  中运动时,

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}, t)$$

- 倘若势能不显含时间参数  $t$ , 也可称  $\hat{H}$  为体系的能量算符. 在此情形中, Schrödinger 方程可以通过分离变量法求解,

$$\psi(\vec{r}, t) \sim \psi_E(\vec{r}) e^{-iEt/\hbar}$$

其中  $\psi_E$  是  $\hat{H}$  属于本征值  $E$  的本征函数, 确定它需要求解能量本征方程

$$\hat{H} \psi_E = E \psi_E$$

## 定态与非定态:

定态与非定态的概念都属于 Hamilton 算符不显含时间  $t$  的量子力学体系.

若粒子的量子态用属于其某一能量本征值  $E$  的能量本征函数  $\psi_E$  与时间演化因子  $e^{-iEt/\hbar}$  之积所构造的波函数

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi_E(\vec{r}) e^{-iEt/\hbar}$$

来描写, 则此量子态就称为 **定态** (stationary state). 能量本征值方程亦可等价地称为 **定态 Schrödinger 方程**.

- 粒子处于定态意味着粒子在随时间演化的过程中始终处在同一个能量本征态.
- 对于处于定态的粒子而言, 其在空间出现的概率密度  $\rho$  和概率流密度矢量  $\vec{j}$  都不随时间改变:

$$\rho(\vec{r}) = |\psi_E(\vec{r})|^2$$

$$\vec{j}(\vec{r}) = -\frac{i\hbar}{2m} [\psi_E^*(\vec{r}) \nabla \psi_E(\vec{r}) - \psi_E(\vec{r}) \nabla \psi_E^*(\vec{r})]$$

- 在定态下，粒子的任何不显含  $t$  的力学量的平均值不随时间改变：

$$\langle A \rangle = \int d^3x \psi^*(\vec{r}, t) \hat{A} \psi(\vec{r}, t) = \int d^3x \psi_E^*(\vec{r}) \hat{A} \psi_E(\vec{r})$$

- 在定态下，任何不显含  $t$  的力学量的所有可能测量值的概率分布也不随时间改变<sup>24</sup>。

若体系初态不是某一确定的能量本征态、而是若干个能量本征态的线性叠加，

$$\psi(\vec{r}, 0) = \sum_E C_E \psi_E(\vec{r})$$

不难验证：

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_E C_E \psi_E(\vec{r}) e^{-iEt/\hbar}$$

满足含时的 Schrödinger 方程，

---

<sup>24</sup>证明见后。



$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) &= \sum_E C_E \psi_E(\vec{r}) E e^{-iEt/\hbar} \\
&= \sum_E C_E \hat{H} \psi_E(\vec{r}) e^{-iEt/\hbar} \\
&= \hat{H} \sum_E C_E \psi_E(\vec{r}) e^{-iEt/\hbar} = \hat{H} \psi(\vec{r}, t)
\end{aligned}$$

这种状态称为非定态。

初值问题的传播子：

后面我们将证明一个结论：Hamilton 算符属于不同能量本征值的本征函数相互正交。因此当进一步加入波函数的归一化条件后，

$$\langle \psi_E | \psi_{E'} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d^3x \psi_E^*(\vec{r}) \psi_{E'}(\vec{r}) = \delta_{EE'}$$

于是从给定的初始波函数

$$\psi(\vec{r}, 0) = \sum_E C_E \psi_E(\vec{r})$$

可知,

$$C_E = \int_{-\infty}^{+\infty} d^3x \psi_E^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}, 0)$$

利用  $C_E$  的这一表达式, 可以把  $t > 0$  时刻处于非定态  $\psi(\vec{r}, t)$  的波函数重新写为:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}, t) &= \sum_E C_E \psi_E(\vec{r}) e^{-iEt/\hbar} \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} d^3x' \left[ \sum_E \psi_E^*(\vec{r}') \psi_E(\vec{r}) e^{-iEt/\hbar} \right] \psi(\vec{r}', 0) \end{aligned}$$

即对于  $t \geq 0$ , 我们有:

$$\psi(\vec{r}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d^3x' G(\vec{r}, t; \vec{r}', 0) \psi(\vec{r}', 0)$$

式中出现的

$$G(\vec{r}, t; \vec{r}', 0) = \sum_E \psi_E^*(\vec{r}') \psi_E(\vec{r}) e^{-iEt/\hbar}$$

称为量子力学初值问题的传播子。

以下分析  $G(\vec{r}, t; \vec{r}', 0)$  的性质及其物理意义。

① 传播子的自洽性要求  $G(\vec{r}, 0; \vec{r}', 0) = \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}')$ 。所以,

$$\sum_E \psi_E^*(\vec{r}') \psi_E(\vec{r}) = \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}')$$

此式称为能量本征函数系的完备性条件。它是量子态叠加原理的数学基础之一。

- ① 倘若初始时刻粒子确定地处于  $\vec{r}_0$  点,  $\psi(\vec{r}', 0) = \delta^{(3)}(\vec{r}' - \vec{r}_0)$ , 在此情形下,

$$\begin{aligned}\psi(\vec{r}, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} d^3x' G(\vec{r}, t; \vec{r}', 0) \psi(\vec{r}', 0) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} d^3x' G(\vec{r}, t; \vec{r}', 0) \delta^{(3)}(\vec{r}' - \vec{r}_0) \\ &= G(\vec{r}, t; \vec{r}_0, 0)\end{aligned}$$

即传播子  $G(\vec{r}, t; \vec{r}_0, 0)$  所描写的正是  $t$  时刻在  $\vec{r}$  点找到粒子的概率幅.

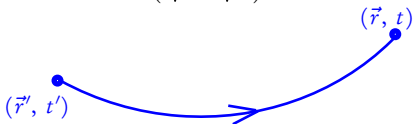
- ① 一般性地，初始时刻粒子并不确定地处于空间某点，它处在  $\vec{r}'$  点的概率幅是  $\psi(\vec{r}', 0)$ ，则  $t$  时刻在空间点  $\vec{r}$  找到由  $(\vec{r}', 0)$  传播过来的粒子的概率幅就是  $G(\vec{r}, t; \vec{r}', 0) \psi(\vec{r}', 0)$ 。按照演化方程，

$$\psi(\vec{r}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d^3x' G(\vec{r}, t; \vec{r}', 0) \psi(\vec{r}', 0)$$

所以，在  $t$  时刻于空间点  $\vec{r}$  找到粒子的总概率幅  $\psi(\vec{r}, t)$  是初始时刻粒子在空间各点的概率幅传播到  $\vec{r}$  点后的相干叠加。

传播子是量子力学中描写量子态随时间演化规律的基本手段之一。

常用如下 Feynman 图表示  $G(\vec{r}, t; \vec{r}', t')$ ：



## 自由粒子的传播子：

作为例题，我们现在计算自由粒子的传播子. 自由粒子的特点是  $V(\vec{r}) = 0$ ，此情形下含时 Schrödinger 方程的通解是：

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p \varphi(\vec{p}) \exp \left[ \frac{i}{\hbar} (\vec{p} \cdot \vec{r} - p^2 t / 2m) \right]$$

粒子的初始波函数为：

$$\psi(\vec{r}, 0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p \varphi(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}}$$

所以， $\varphi(\vec{p})$  正是  $\psi(\vec{r}, 0)$  的傅里叶变换. 求上式的傅里叶逆变换可得：

$$\varphi(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3x \psi(\vec{r}, 0) e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}}$$

把此式代回到本页第一个方程、即  $\psi(\vec{r}, t)$  的表达式中，我们有：

$$\begin{aligned}
\psi(\vec{r}, t) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p \varphi(\vec{p}) e^{\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r}-p^2t/2m)\right]} \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p \left[ \int d^3x' \psi(\vec{r}', 0) e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}'} \right] e^{\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r}-p^2t/2m)\right]} \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3x' \int d^3p e^{\frac{i}{\hbar}[\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')-p^2t/2m]} \psi(\vec{r}', 0)
\end{aligned}$$

于是，自由粒子的传播子求得为：

$$G(\vec{r}, t; \vec{r}', 0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [\vec{p} \cdot (\vec{r} - \vec{r}') - p^2 t / 2m] \right\}$$

再使用著名的高斯积分公式， $\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-x^2} = \sqrt{\pi}$ ，可把自由粒子的传播子最终写为：

$$G(\vec{r}, t; \vec{r}', 0) = \left( \frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{3/2} \exp \left[ \frac{im(\vec{r} - \vec{r}')^2}{2\hbar t} \right]$$

## 思考题：

- ❶ 请问，对于质量为  $m$  的非相对论性自由粒子而言，表达式

$$m(\vec{r} - \vec{r}')^2/2t$$

在经典力学中的物理意义是什么<sup>25</sup>？

---

<sup>25</sup>答题时请认真复习一下理论力学教材。



## 多粒子系的 Schrödinger 方程

设体系由  $N$  个粒子组成, 粒子质量分别为  $m_i (i = 1, 2, \dots, N)$ . 体系的波函数表达为,

$$\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)$$

设第  $i$  个粒子受到的外势场势能为  $U_i(\vec{r}_i)$ , 体系内部粒子之间的相互作用势能为  $V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ . 对于这样的多粒子体系, 含时 Schrödinger 方程应为:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left[ \sum_{i=1}^N \left( -\frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 + U_i(\vec{r}_i) \right) + V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \right] \psi$$

势场不显含时间时存在定态. 相应的定态 Schrödinger 方程是:

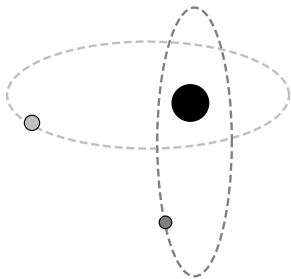
$$\left[ \sum_{i=1}^N \left( -\frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 + U_i(\vec{r}_i) \right) + V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \right] \psi_E = E \psi_E$$

式中  $E$  是多粒子体系的总能量.

多粒子体系的一个典型特例是含有  $Z$  个电子的多电子原子.

电子系内部电子之间的相互作用势能描写  
电子间的 Coulomb 排斥作用:

$$V(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \sum_{i < j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$



而原子核对第  $i$  个电子提供由如下势能描写的吸引作用:

$$U_i(\vec{r}_i) = -\frac{Ze^2}{r_i}$$

这里我们取原子核所在的位置为坐标原点, 无穷远点的静电势能取为零.

## 专题:

对于两个相互等价的波函数  $\psi(\vec{r}, t)$  与  $\psi'(\vec{r}, t) = e^{i\alpha} \psi(\vec{r}, t)$  而言, 相因子  $\alpha$  是否可以粒子空间位置坐标和时间参数的函数,  $\alpha = \alpha(\vec{r}, t)$ ?

## 分析:

即使  $\alpha = \alpha(\vec{r}, t)$ , 下式总是成立的:

$$|\psi(\vec{r}, t)|^2 = |\psi'(\vec{r}, t)|^2$$

所以, 按照 Born 的概率诠释,  $\psi'(\vec{r}, t)$  确实有资格与  $\psi(\vec{r}, t)$  描写同一个量子态. 不过, 倘若  $\psi(\vec{r}, t)$  是 Schrödinger 方程

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

的解, 则  $\psi' = e^{i\alpha} \psi$  在一般情形下并不是 Schrödinger 方程的解 (除非  $\alpha$  为常数).

事实上，注意到  $\psi = e^{-i\alpha}\psi'$ ，我们有：

$$\partial_t \psi = e^{-i\alpha} [\partial_t \psi' - i(\partial_t \alpha) \psi']$$

$$\nabla \psi = e^{-i\alpha} [\nabla \psi' - i(\nabla \alpha) \psi']$$

$$\nabla^2 \psi = e^{-i\alpha} [\nabla^2 \psi' - 2i(\nabla \alpha) \cdot \nabla \psi' - (\nabla \alpha)^2 \psi' - i(\nabla^2 \alpha) \psi']$$

把此处一、三两个表达式代入到前页  $\psi$  所服从的 Schrödinger 方程中，可知：

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t} = & -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi' + V(\vec{r}, t) \psi' \\ & - \hbar(\partial_t \alpha) \psi' + \frac{i\hbar^2}{\mu} (\nabla \alpha) \cdot \nabla \psi' + \frac{\hbar^2}{2\mu} (\nabla \alpha)^2 \psi' \\ & + \frac{i\hbar^2}{2\mu} (\nabla^2 \alpha) \psi' \end{aligned}$$

由于相因子  $\alpha$  相关项的存在， $\psi'$  服从的方程不再是 Schrödinger 方程。既如此，**概率诠释所赋予的等价性  $\psi' \sim \psi$  是否作废了？**

然而事情并没有如此简单。前面已经指出，如下形式的薛定谔方程

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

具有明显的局限性：

- ① 它仅仅适用于保守力体系。对于处于非保守力场中的粒子而言，势场  $V(\vec{r}, t)$  的物理意义不明确。
- ② 它也不适于描写具有非零内禀自旋的粒子的运动。

鉴于此，Dirac 建议：量子力学体系波函数随时间演化的一般规律应推广为<sup>26</sup>，

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi$$

这里  $\hat{H}$  是体系的 Hamilton 算符。对于这个普遍形式的薛定谔方程，有理由相信概率诠释所暗示的等价性  $\psi \sim \psi' = \psi e^{i\alpha}$  可以得到保证。

---

<sup>26</sup> 此式习惯上也称为薛定谔方程。

下面让我们颠倒逻辑，尝试从波函数的等价性  $\psi \sim \psi' = \psi e^{i\alpha}$  出发来建立一类量子力学体系合格的 Hamilton 算符。

从前面的分析可知，原始形式薛定谔方程

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

情形下波函数等价性  $\psi \sim \psi' = \psi e^{i\alpha}$  失效的原因在于

$$\partial_t \psi = e^{-i\alpha} \partial_t \psi' - i(\partial_t \alpha) e^{-i\alpha} \psi', \quad \nabla \psi = e^{-i\alpha} \nabla \psi' - i(\nabla \alpha) e^{-i\alpha} \psi'$$

❶ 倘若此两式可以变为：

$$\partial_t \psi = e^{-i\alpha} \partial_t \psi', \quad \nabla \psi = e^{-i\alpha} \nabla \psi'$$

则  $\psi$  与  $\psi' = \psi e^{i\alpha}$  满足相同的时间演化方程，如此即有等价性  $\psi' \sim \psi$ 。但是，这两式在  $\alpha = \alpha(\vec{r}, t)$  的前提下显然是不可能成立的。

为了保证  $\psi \sim \psi' = \psi e^{i\alpha}$ , 现尝试把作用于波函数的普通时空导数替换为相应的协变导数:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rightsquigarrow D_t = \frac{\partial}{\partial t} + i\varphi(\vec{r}, t), \quad \nabla \rightsquigarrow \vec{D} = \nabla - i\vec{A}(\vec{r}, t)$$

式中的  $\varphi(\vec{r}, t)$  和  $\vec{A}(\vec{r}, t)$  是描写一类相互作用的经典场<sup>27</sup>. 要求在  $\psi \rightarrow \psi' = \psi e^{i\alpha}$  的同时,

$$\begin{aligned} \varphi &\rightarrow \varphi', & D_t &\rightarrow D'_t = \frac{\partial}{\partial t} + i\varphi', \\ \vec{A} &\rightarrow \vec{A}', & \vec{D} &\rightarrow \vec{D}' = \nabla - i\vec{A}' \end{aligned}$$

且:

$$D_t \psi = e^{-i\alpha} D'_t \psi', \quad \vec{D} \psi = e^{-i\alpha} \vec{D}' \psi'$$

则不难看出:

$$\varphi' = \varphi - \frac{\partial \alpha}{\partial t}, \quad \vec{A}' = \vec{A} + \nabla \alpha$$

---

<sup>27</sup> 请问:  $(\vec{A}, \varphi)$  精确的物理意义是什么?

以及,

$$\begin{aligned}\vec{D}^2\psi &= \vec{D} \cdot \vec{D}\psi = \vec{D} \cdot (e^{-i\alpha} \vec{D}'\psi') \\&= (\nabla - i\vec{A}) \cdot (e^{-i\alpha} \vec{D}'\psi') \\&= e^{-i\alpha} \nabla \cdot \vec{D}'\psi' + (\nabla e^{-i\alpha} - ie^{-i\alpha} \vec{A}) \cdot \vec{D}'\psi' \\&= e^{-i\alpha} (\nabla - i\nabla\alpha - i\vec{A}) \cdot \vec{D}'\psi' \\&= e^{-i\alpha} (\nabla - i\vec{A}') \cdot \vec{D}'\psi' = e^{-i\alpha} \vec{D}' \cdot \vec{D}'\psi' = e^{-i\alpha} \vec{D}'^2\psi'\end{aligned}$$

所以, 把原始的薛定谔方程

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

修正为:

$$i\hbar D_t \psi = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \vec{D}^2 \psi, \quad \rightsquigarrow \quad i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} (\nabla - i\vec{A})^2 \psi + \hbar \varphi \psi$$

就可保证波函数  $\psi$  与  $\psi' = \psi e^{i\alpha}$  的等价性.



## 点评:

### ① 变换式

$$\psi \rightsquigarrow \psi' = \psi e^{i\alpha}, \quad \vec{A} \rightsquigarrow \vec{A}' = \vec{A} + \nabla\alpha, \quad \varphi \rightsquigarrow \varphi' = \varphi - \frac{\partial\alpha}{\partial t}$$

的数学形式提示我们,  $(\vec{A}, \varphi)$  可以解释为电磁场的规范势.

- ②  $\psi \rightsquigarrow \psi' = \psi e^{i\alpha}$  称为波函数的规范变换<sup>28</sup>, 选择  $\alpha(\vec{r}, t)$  相当于选取规范.
- ③ 要求量子力学理论具有局域规范变换下的对称性使得我们写出了外电磁场中带电粒子体系的 Hamilton 算符:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}(\nabla - i\vec{A})^2 + \hbar\varphi$$

这一见解是杨振宁先生对于现代物理学最杰出的贡献: **规范对称性决定基本相互作用力.**

---

<sup>28</sup> 相因子  $\alpha = \alpha(\vec{r}, t)$  时的规范变换称为局域规范变换.

- ① 在电磁场  $(\vec{A}, \varphi)$  中，带电粒子的物理动量为  $\vec{p} = m\vec{v}$ ，而

$$\vec{p} = m\vec{v} - \hbar\vec{A}$$

是其正则动量。正则量子化程序正是把正则动量算符化：

$$\vec{p} \rightsquigarrow \hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla$$

需要强调的是，带电粒子物理动量的本征值、分布概率与平均值均是和规范选择无关的物理量。

- ② 倘若存在标量函数  $\alpha(\vec{r}, t)$  使得电磁势可以表达为：

$$\vec{A} = -\nabla\alpha, \quad \varphi = \frac{\partial\alpha}{\partial t}$$

这样的电磁场称为纯规范，实际上是不存在的。完全可以通过规范变换

$$\psi \rightsquigarrow \psi' = \psi e^{i\alpha}, \quad \vec{A} \rightsquigarrow \vec{A}' = \vec{A} + \nabla\alpha, \quad \varphi \rightsquigarrow \varphi' = \varphi - \frac{\partial\alpha}{\partial t}$$

让纯规范从理论中消除<sup>29</sup>。

---

<sup>29</sup>在此规范变换定义的新规范里， $\vec{A}' = \varphi' = 0$ 。

## 顿悟：

坚持波函数的概率诠释，必然要求波函数具有局域规范变换

$$\psi(\vec{r}, t) \rightarrow \tilde{\psi}(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}, t) \exp[i\alpha(\vec{r}, t)]$$

下的物理等价性、薛定谔方程必须具有局域规范变换下的不变性。因此，

- ① 量子力学研究的微观粒子必然参与某种规范相互作用、例如电磁相互作用。换句话说，此微观粒子必然携带着某种规范场的荷<sup>30</sup>。
- ② 从量子力学第一原理的视角看，出现在薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(\vec{r}, t)$$

中的 Hamilton 算符  $\hat{H}$  必定包含规范场的规范势  $(\vec{A}, \varphi)$  的贡献。

---

<sup>30</sup> 例如电荷。

Q: 怎样看待原版的薛定谔方程

$$i\hbar\partial_t\Psi(\vec{r},t) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(\vec{r},t) \right] \Psi(\vec{r},t)$$

在波函数局域规范变换  $\Psi(\vec{r},t) \rightarrow \tilde{\Psi}(\vec{r},t) = \Psi(\vec{r},t) \exp[i\alpha(\vec{r},t)]$  的非不变性？

- ❶ 把  $V(\vec{r},t)$  理解为粒子与外界之间相互作用的有效势能、从而把原版的薛定谔方程仅仅看作一个唯象方程，不承认它量子力学理论基本方程的地位。
- ❷ 或者把原版的薛定谔方程看作是修正版的薛定谔方程

$$i\hbar\partial_t\Psi(\vec{r},t) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu}(\nabla - i\vec{A})^2 + \hbar\varphi \right] \Psi(\vec{r},t)$$

在某个特定规范里的有效形式。鉴于规范已经取定，自然可以期望：

$$\Psi(\vec{r},t) \propto \tilde{\Psi}(\vec{r},t) = \Psi(\vec{r},t) \exp[i\alpha(\vec{r},t)]$$

## 忠告:

- 波函数  $\psi(\vec{r}, t)$  与  $\psi(\vec{r}, t)e^{i\alpha}$  之间的等价性没有遗传性<sup>31</sup>. 需要强调的是, 倘若  $\psi_1 \neq \psi_2$ , 则:

$$\psi_1 \sim \psi_1 e^{i\alpha_1}, \quad \psi_2 \sim \psi_2 e^{i\alpha_2}$$

并不必然地意味着:

$$\psi_1 + \psi_2 \sim \psi_1 e^{i\alpha_1} + \psi_2 e^{i\alpha_2}$$

叠加态情形下, 只有当分波间的相对相因子退化为叠加态波函数的整体相因子时才存在等价性关系:

$$\psi_1 + \psi_2 \sim (\psi_1 + \psi_2) e^{i\alpha}$$

若  $\alpha_1 \neq \alpha_2$ , 则叠加态波函数  $\psi_1 e^{i\alpha_1} + \psi_2 e^{i\alpha_2}$  与  $\psi_1 + \psi_2$  一般情形下不可能相互等价. 显然有  $|\psi_2|^2 = |\psi_2 e^{i\pi/3}|^2$ , 但:

$$|\psi_1 + \psi_2|^2 \neq |\psi_1 + \psi_2 e^{i\pi/3}|^2$$

---

<sup>31</sup> 此结论与  $\alpha$  是否为时空坐标的函数无关.

- 在把握概率波波函数的等价性问题上，我们要牢记整体上的相因子差别是无关要紧的，

$$\Psi(\vec{r}, t) \sim \Psi(\vec{r}, t) \exp[i\alpha(\vec{r}, t)]$$

或者，

$$\Psi_1(\vec{r}, t) + \Psi_2(\vec{r}, t) \sim \left[ \Psi_1(\vec{r}, t) + \Psi_2(\vec{r}, t) \right] \exp[i\alpha(\vec{r}, t)]$$

但叠加态下各分波之间的相对相因子是重要的、不能随意忽略<sup>32</sup>：

$$\Psi_1(\vec{r}, t) + \Psi_2(\vec{r}, t) \propto \left[ \Psi_1(\vec{r}, t) + e^{i\beta} \Psi_2(\vec{r}, t) \right]$$

---

<sup>32</sup> 此处假定  $\beta$  为实参数且  $\beta \neq 0$ 。