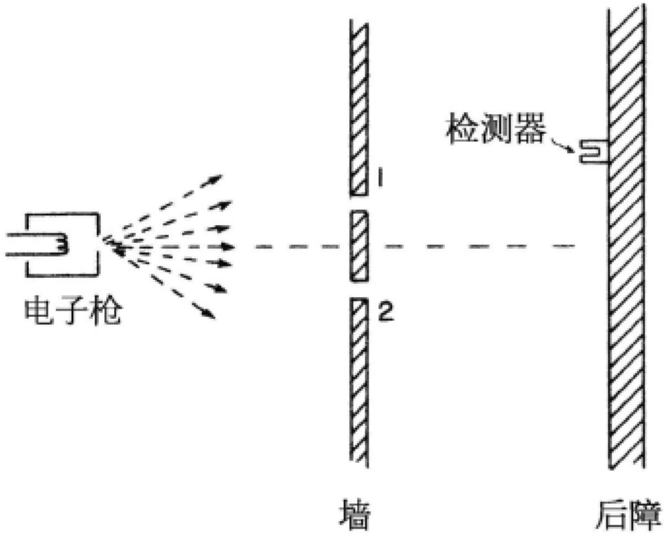
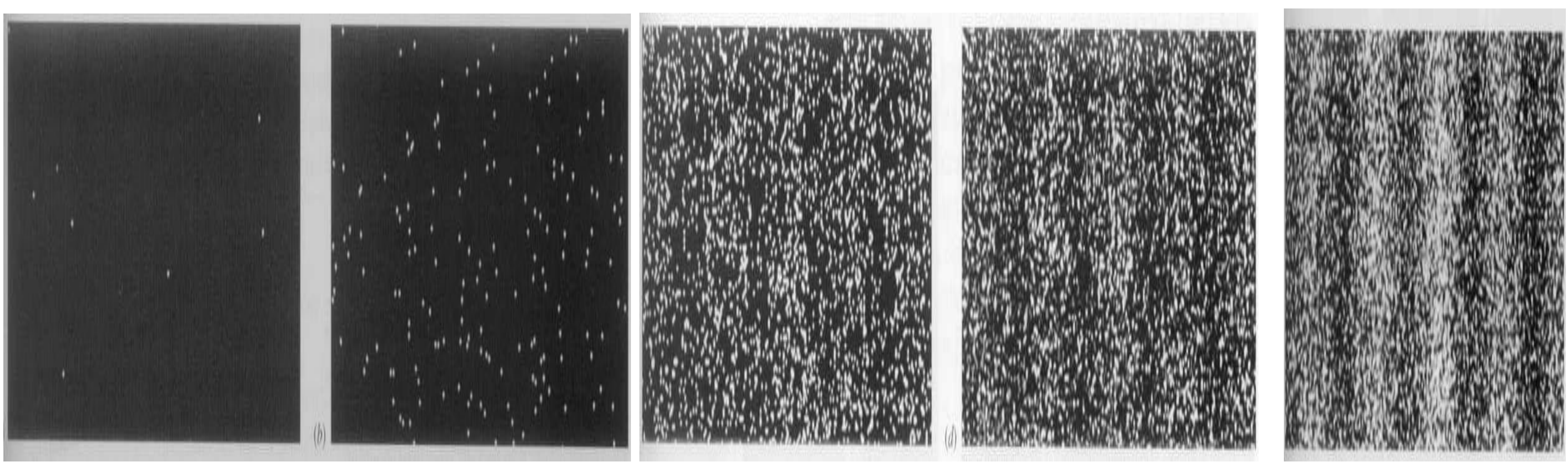


电子波函数：$\varphi = Ae^{i(kx-\omega t)}$

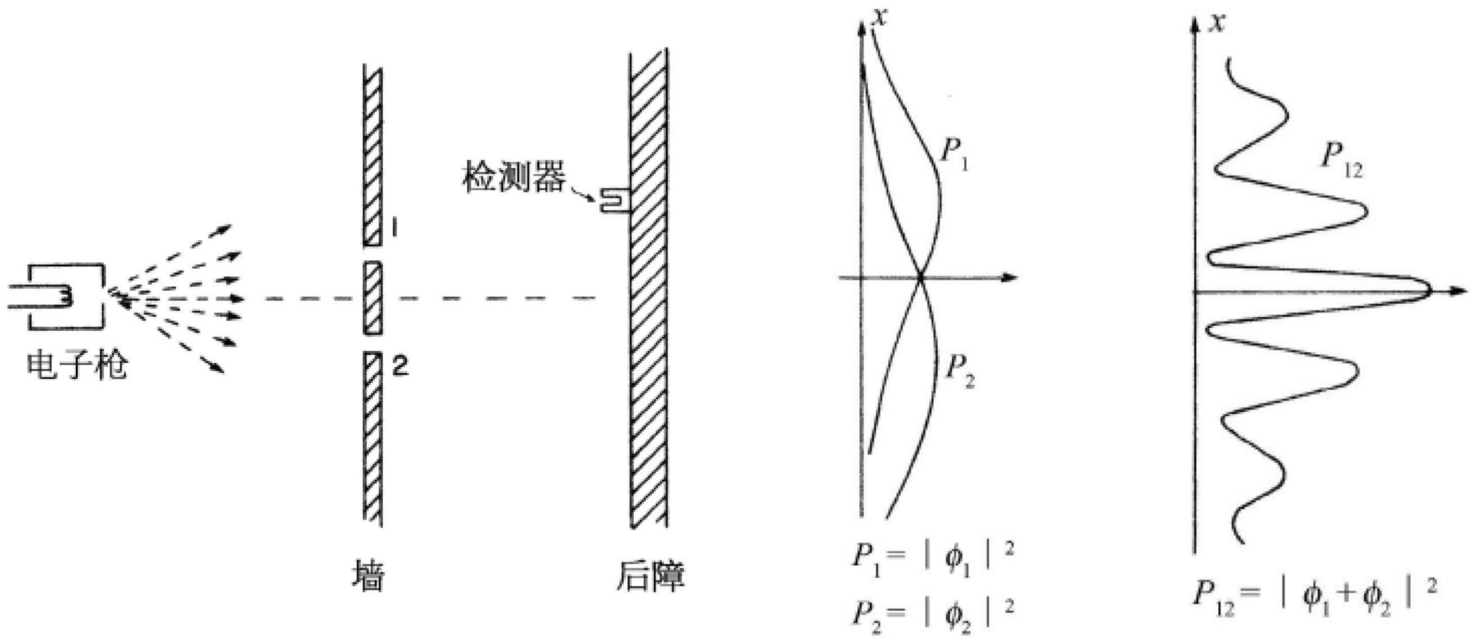
电子在空间中出现的概率：

$$P \propto |\varphi|^2$$

波函数的强度 $|\varphi|^2$ 与粒子在该处附近出现的概率成正比



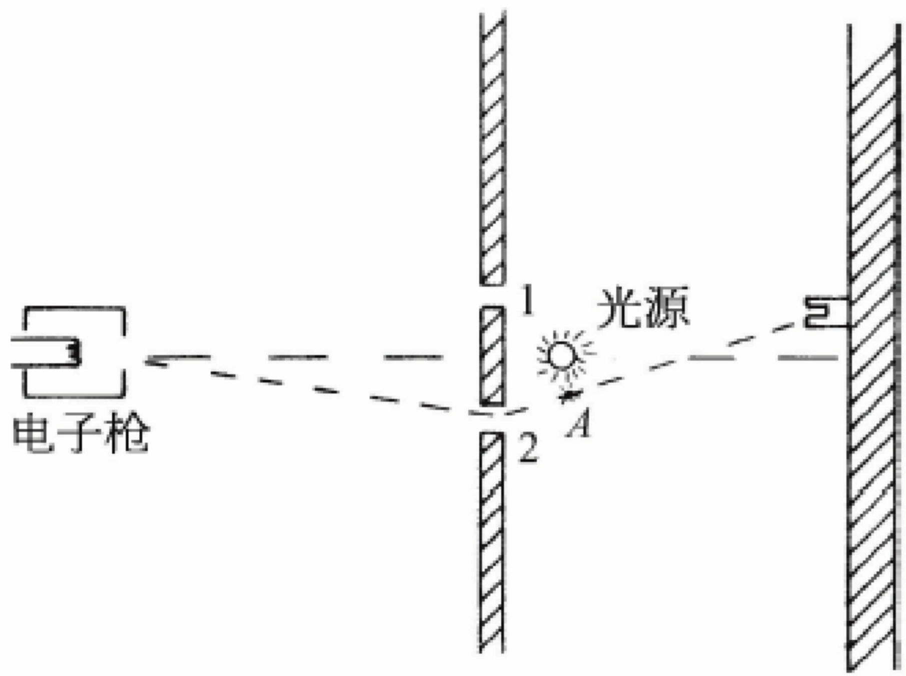
7个电子　　100个电子　　3000个电子　　20000个电子　　70000个电子



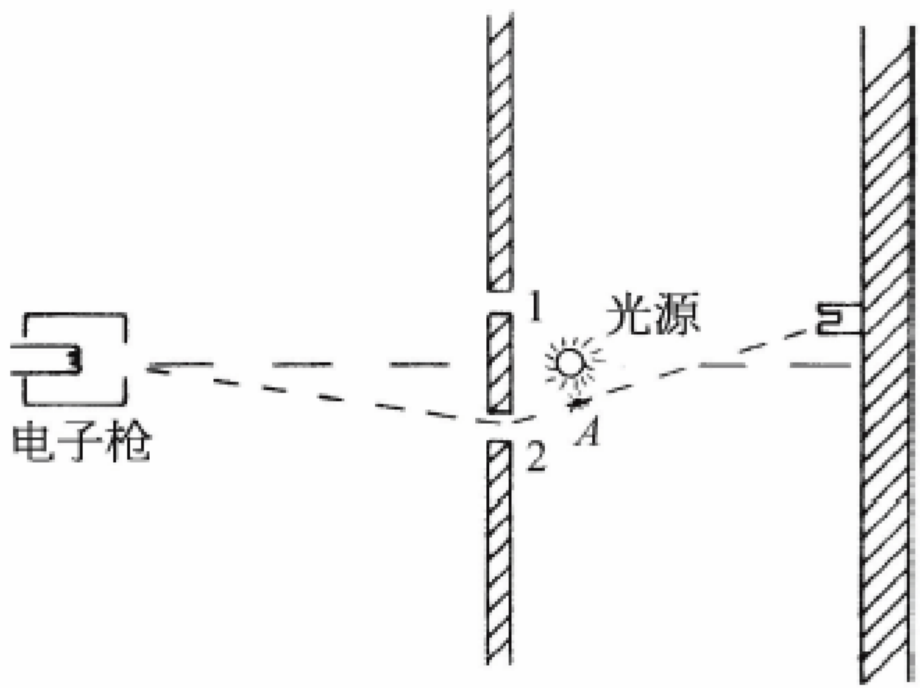
然而，我们现在发现：在某些点上，当两个狭缝都开放时，只有很少电子到达。到达某个特定点的电子数目并不等于通过狭缝1的数目加上通过狭缝2的数目，与从之前命题本应得出的推论相反。我们的命题——电子不是通过狭缝1就是通过狭缝2——这一点并不正确。

那么电子是怎么通过狭缝的？

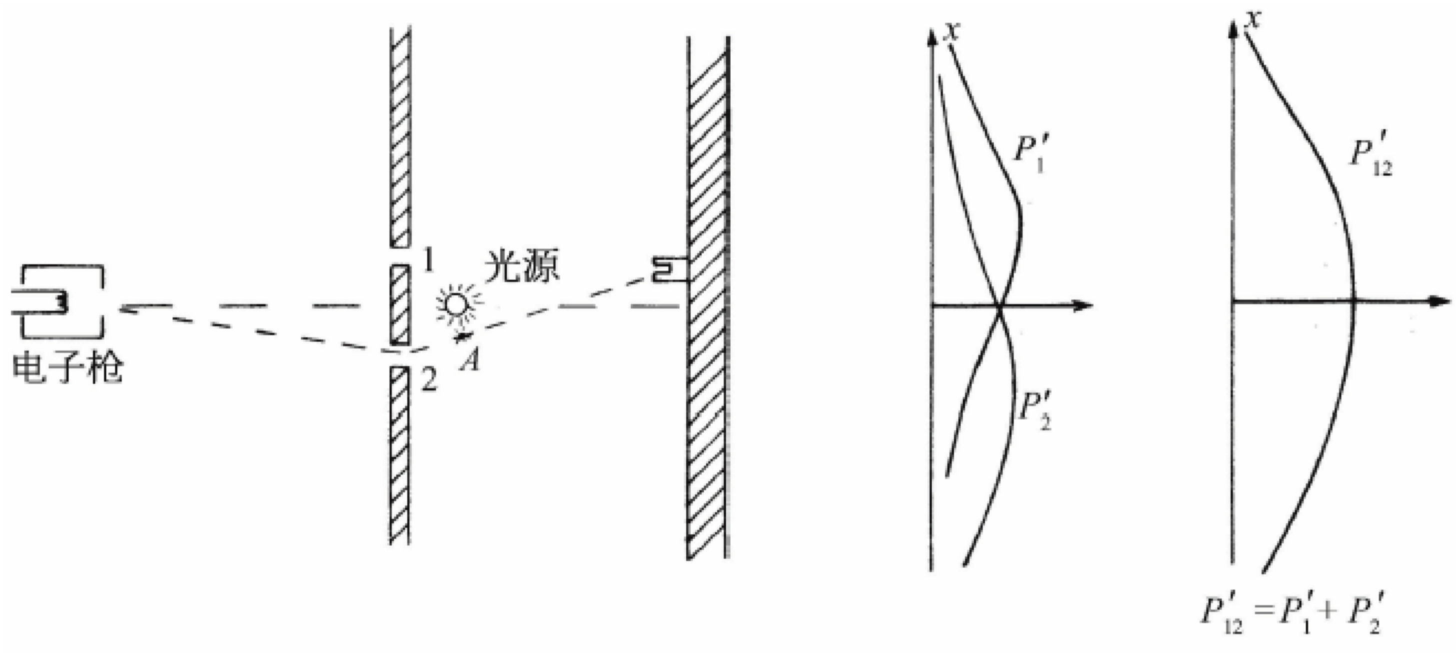
现在我们来追踪电子的轨迹：我们在电子干涉的仪器中加上一个光源，光源放置在墙的后面并在两个小孔之间。我们知道，电荷能散射光，这样，当电子在到达检测器的途中通过光时，不论它是怎样通过的，都会将一些光散射到我们的眼睛中，因而我们可以看见电子在哪里飞过。

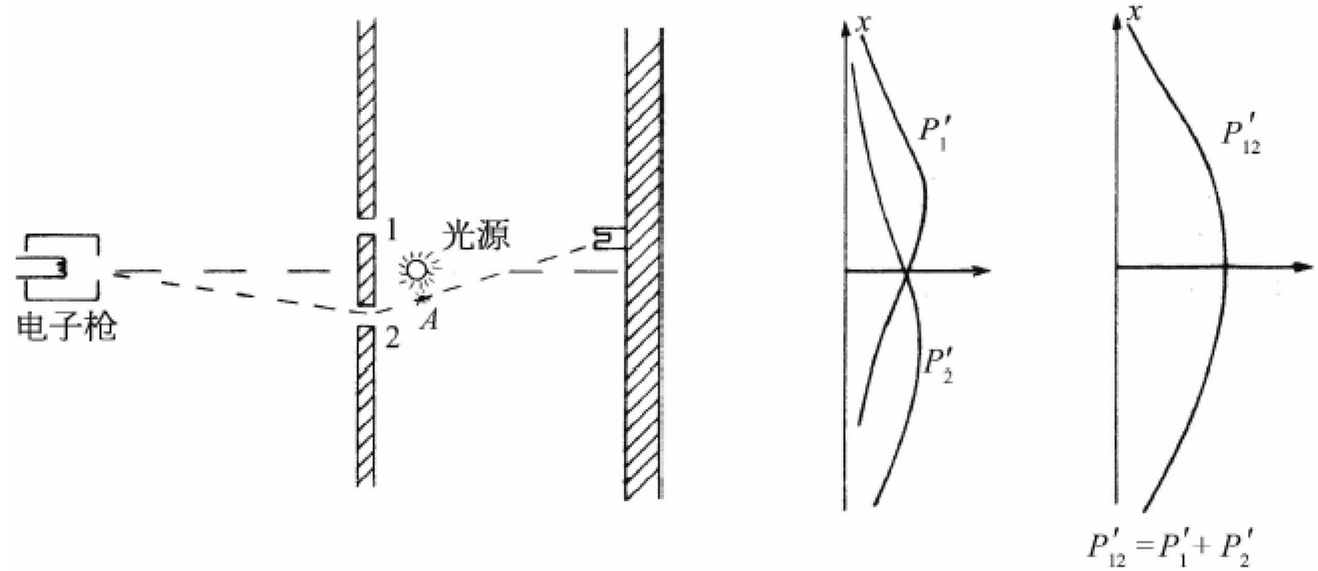


我们所看到的情况是：每当我们在检测器检测到电子时，我们也见到闪光——不是在靠近狭缝1处就是在靠近狭缝2处的闪光。但是，我们从未同时在两处见到闪光！无论将检测器放到哪里，我们都观察到同样的结果。由这样的观察可以断言，在追踪电子的运动轨迹时，我们发现电子不是通过这个狭缝，就是通过另一个狭缝——实验上我们的命题是正确的！

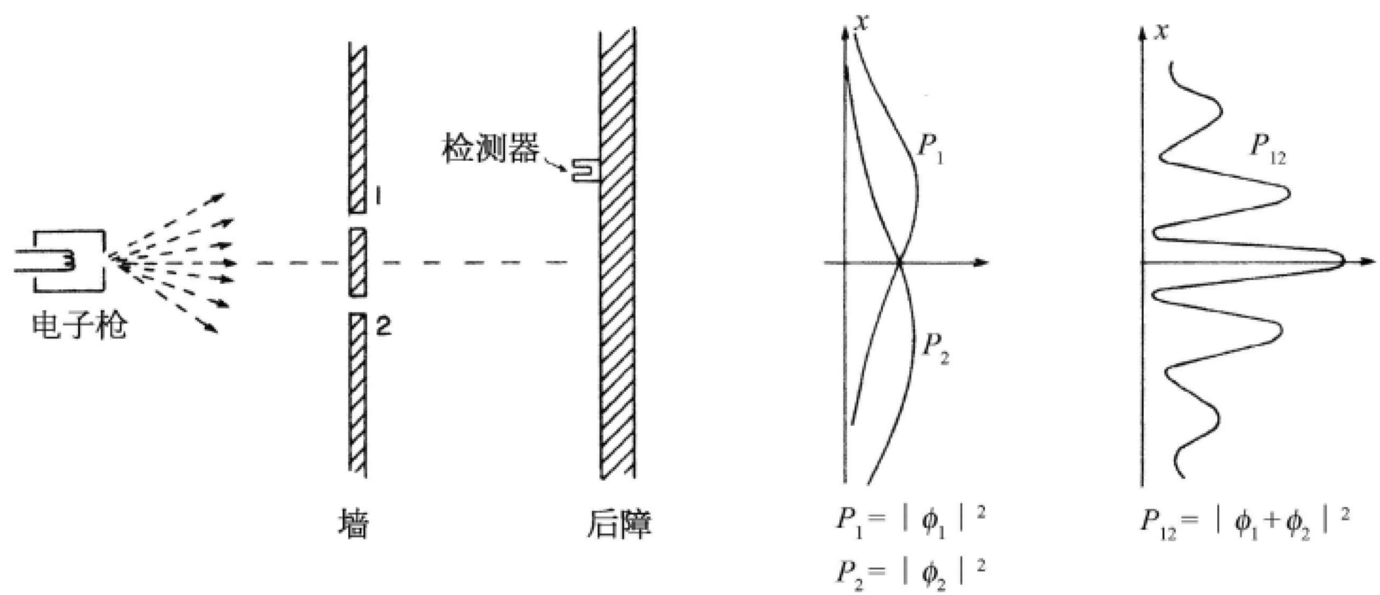


但是！令人惊奇的事情是，现在我们获得的电子衍射图像与之前的不一样了！干涉的图像消失，而概率分布恰好是**P1+P2**。这就是说，虽然我们成功地观察到电子所经过的是哪个狭缝，但我们不再得到原来的干涉曲线**P12**，而是新的、不显示干涉现象的曲线！





1
2
光源
A
电子枪
x
P'_1
P'_2
P'_{12}
$P'_{12}=P'_1+P'_2$



检测器
1
2
电子枪
墙
后障
x
P_1
P_2
P_{12}
$P_1=|\phi_1|^2$
$P_2=|\phi_2|^2$
$P_{12}=|\phi_1+\phi_2|^2$

三、海森伯不确定关系

我们对之前实验的结论是：当我们观察电子时，它们在屏上的分布与我们不观察电子时的分布不同——由于“观察”这件事情产生的扰动（观察时光子对电子的影响），导致电子的运动轨迹改变了。

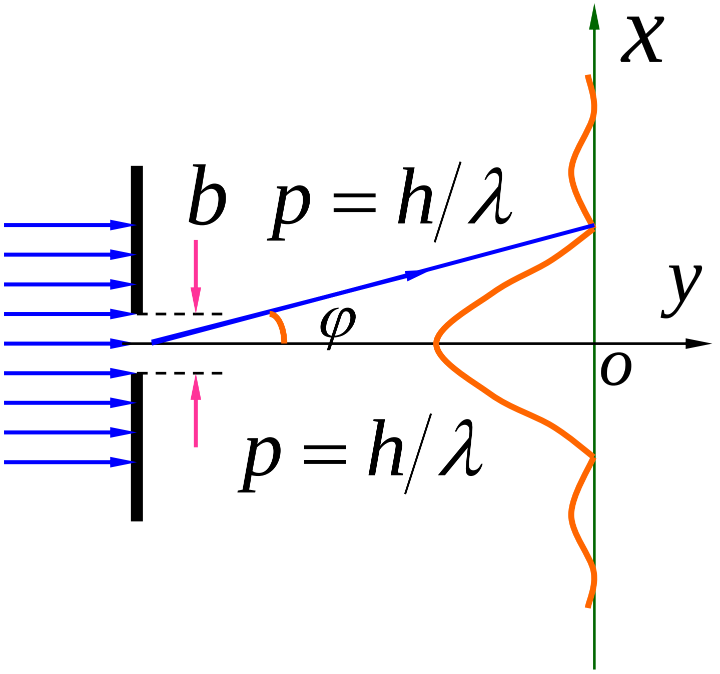
1925年6月，海森伯在论文《运动与机械关系的量子理论重新诠释》（**Quantum-Theoretical Re-interpretation of Kinematic and Mechanical Relations**）里写出了量子力学的矩阵力学表述形式。他大胆地假设，经典的运动概念不适用于量子层级，束缚在原子内部的电子并不具有明确定义的轨道，而是运动于模糊不清，无法观察到的轨道。

不确定性关系

海森伯于1927年发表论文《论量子理论运动学与力学的物理内涵》，希望能够定性分析与表述简单量子实验的物理性质，这原理又称为“海森伯不确定性关系”。海森伯在论文里提出，只有在实验里能够观察到的物理量才具有物理意义，才可以用理论描述其物理行为，其它都是无稽之谈。因此，他刻意避开任何涉及粒子运动轨道的详细计算，用代表位置与动量的矩阵来计算电子的波函数。这些矩阵能够正确地预测电子跃迁所发射出光波的强度。

维尔纳·海森伯 (Werner Heisenberg，1901－1976)，德国物理学家，量子力学创始人之一，“哥本哈根学派”代表性人物。因为“创立量子力学以及由此导致的氢的同素异形体的发现”而获得1932年度的诺贝尔物理学奖。

◈ 用电子衍射说明不确定关系



电子的单缝衍射实验

电子经过缝时的位置不确定度

$$\Delta x = b$$

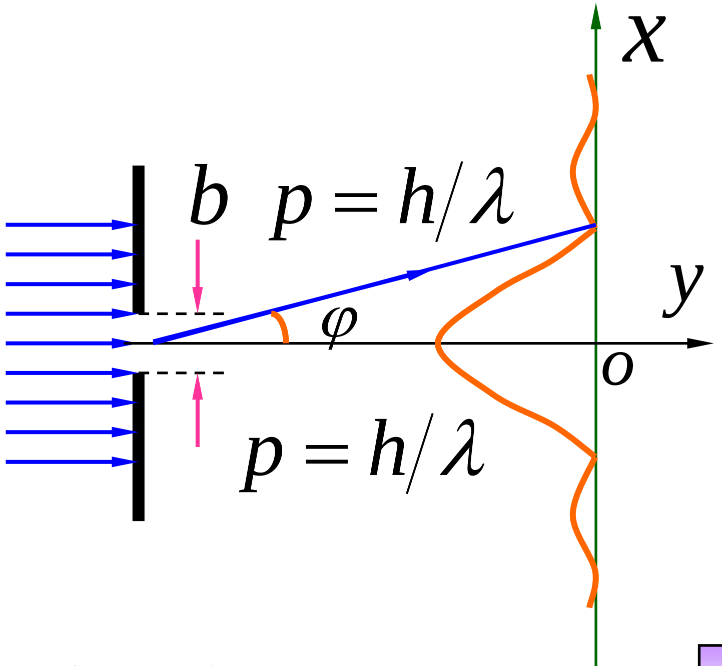
一级最小衍射角

$$\sin\varphi = \lambda/b$$

电子经过缝后 x 方向动量大小的不确定度

$$\Delta p_x = p\sin\varphi = p\frac{\lambda}{b} \qquad \lambda = \frac{h}{p} \qquad \Delta p_x = \frac{h}{b}$$

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



考虑衍射次级有 $\Delta x \Delta p_x \geq h$

- 海森伯于 1927 年提出不确定原理

对于微观粒子不能同时用确定的位置和确定的动量来描述 .

不确定关系
$$\begin{cases} \Delta x \Delta p_x \geq h \\ \Delta y \Delta p_y \geq h \\ \Delta z \Delta p_z \geq h \end{cases}$$

不确定性关系

$$\Delta x \Delta p \geq h$$

- 海森伯原来对不确定性原理的叙述是这样的：**假如对任何客体进行测量，并且测定其动量的 x 分量时，不确定量为 Δp，那么关于其位置 x，就不可能同时知道得比 $\Delta x = h/\Delta p$ 更准确**。在任何时刻，位置的不确定量和动量的不确定量的乘积必定大于普朗克常数。

- 比较普遍的表述是，人们不可能用任何方式设计出这样一个仪器，它能确定在两种可供选择的方式中采取的是哪一种方式，而同时又不扰动干涉图案。在我们之前讨论的实验中，它可以这样表述：“要**设计出一种仪器来确定电子经过哪一个狭缝，同时又不使电子受到足以破坏其干涉图样的扰动是不可能的**”。

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，它们的精度存在一个终极的不可逾越的限制．

$$\Delta x\downarrow,\text{则}\Delta p_x\uparrow;\Delta x\to 0,\text{则}\Delta p_x\to\infty$$

$$\Delta p_x\downarrow,\text{则}\Delta x\uparrow;\Delta p_x\to 0,\text{则}\Delta x\to\infty$$

微观世界固有规律

（2）不确定的根源是“波粒二象性”这是微观粒子的根本属性．

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

对于微观粒子，$\boldsymbol{h}$ 不能忽略， $\boldsymbol{\Delta x}$、$\boldsymbol{\Delta p_x}$ 不能同时具有确定值．此时，只有从概率统计角度去认识其运动规律． 在量子力学中，将用波函数来描述微观粒子. 不确定关系是量子力学的基础.

例 **质量10 g 的子弹，速率200 m/s. 其动量的不确定范围为动量的0.01% (这在宏观范围是十分精确的)， 该子弹位置的不确定量范围为多大?**

解 子弹的动量 $p = mv = 2\,\mathrm{kg\cdot m\cdot s^{-1}}$

动量的不确定范围

$$\Delta p = 0.01\% \times p = 2\times10^{-4}\ \mathrm{kg\cdot m\cdot s^{-1}}$$

位置的不确定范围

$$\Delta x \geq \frac{h}{\Delta p} = \frac{6.63\times10^{-34}}{2\times10^{-4}}\,\mathrm{m} = 3.3\times10^{-30}\ \mathrm{m}$$

例　一电子具有200 m/s的速率， 动量的不确范围为动量的 0.01%（这也是足够精确的了），则该电子的位置不确定范围有多大？

解　电子的动量

$$p = mv = 9.1\times10^{-31}\times200\,\mathrm{kg\cdot m\cdot s^{-1}}$$

$$p = 1.8\times10^{-28}\,\mathrm{kg\cdot m\cdot s^{-1}}$$

动量的不确定范围

$$\Delta p = 0.01\%\times p = 1.8\times10^{-32}\,\mathrm{kg\cdot m\cdot s^{-1}}$$

位置的不确定范围

$$\Delta x \ge \frac{h}{\Delta p} = \frac{6.63\times10^{-34}}{1.8\times10^{-32}}\,\mathrm{m} = 3.7\times10^{-2}\,\mathrm{m}$$

§4 波函数与薛定谔方程

一、波函数 概率密度

1 波函数

由于微观粒子具有波粒二象性，其位置与动量不能同时确定. 所以已无法用经典物理方法去描述其运动状态. 用波函数来描述微观粒子的运动.

(1) 经典的波与波函数

- 机械波 $y(x,t)=A\cos 2\pi(\nu t-\dfrac{x}{\lambda})$
- 电磁波 $\begin{cases} E(x,t)=E_0\cos 2\pi(\nu t-\dfrac{x}{\lambda}) \\ H(x,t)=H_0\cos 2\pi(\nu t-\dfrac{x}{\lambda}) \end{cases}$
- 经典波为实函数 $y(x,t)=\mathrm{Re}[A\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi(\nu t-\frac{x}{\lambda})}]$

(2) 量子力学波函数（复函数）

描述微观粒子运动的波函数 $\Psi(x, y, z, t)$

微观粒子的波粒二象性 $\nu = \dfrac{E}{h}$ $\lambda = \dfrac{h}{p}$ 恒定——单色波

不确定关系： $\Delta p = 0 \Rightarrow \Delta x \to \infty$ 沿整个x轴传播

$\Delta E = 0 \Rightarrow \Delta t \to \infty$ 波列无穷长

自由粒子的能量和动量是确定的，其德布罗意频率和波长不变 ，可认为是一平面单色波. 波列无限长，根据不确定原理，粒子在 x方向上的位置完全不确定.

- 自由粒子平面波函数

$$\Psi(x,t) = \psi_0 e^{-i2\pi(\nu t - \frac{x}{\lambda})} = \psi_0 e^{-i(\omega t - k\cdot x)} = \psi_0 e^{-i\frac{2\pi}{h}(Et - px)}$$

自由粒子平面波函数

一维 $$\Psi(x,t)=\psi_0 e^{-\mathrm{i}\frac{2\pi}{h}(Et-px)}$$

**三维 $$\Psi(\vec{r},t)=\psi_0 e^{-\mathrm{i}\frac{2\pi}{h}(Et-\vec{p}\cdot\vec{r})}$$

2 波函数的统计意义

概率密度：在某处单位体积内粒子出现的概率

$$\boxed{|\Psi|^2=\Psi\Psi^*}$$ 正实数

某一时刻出现在某点附近在体积元dV中的粒子的概率为

$$|\Psi|^2\mathrm{d}V=\Psi\Psi^*\mathrm{d}V$$

德布罗意波（或物质波）与机械波、电磁波不同，是一种概率波.

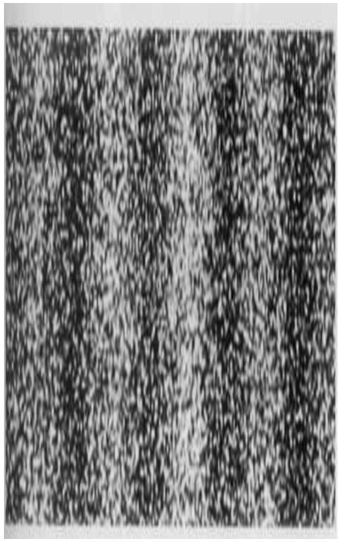
玻恩（Max Born ）的波函数统计铨释(1926)

物质波并不像经典波那样代表实在物理量的波动而是描述粒子在空间概率分布的概率波。波函数ψ是描述粒子空间概率分布的“概率幅”。

波函数的模方 $\left|\Psi(\vec{r},t)\right|^2 = \Psi^*(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t)$

表示 t 时刻微观粒子出现在空间 $\vec{r}$点附近单位体积内的“相对概率密度”。

概率幅大的地方粒子出现概率大——亮纹



3 波函数的条件

物质波不代表任何物质实在的经典波动，波函数也不是测量到的某一物理量，而是用来计算测量几率的数学量。

(1) $\Psi(\vec{r},t)$是单值函数。

(2) $\Psi(\vec{r},t)$ 是有限的。

(3) $\Psi(\vec{r},t)$是空间连续的。

波函数的标准化条件

(4) $\Psi(\vec{r},t)$在全空间内满足归一化条件。

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

$$\boxed{\int |\Psi|^2 \mathrm{d}V = 1}$$

1926年：薛定谔方程

由于微观粒子的位置与动量不能同时确定，所以已经无法用经典物理去描述其运动状态。

1926年，薛定谔受到德布罗意的启发，试图用波函数来描述微观粒子的运动。这一年他连续发表了四篇文章：1926年1月，他在物理年鉴发表文章"以特征值问题处理量子化理论"，提出了著名的薛定谔方程。这被视二十世纪最重要的物理学成就之一。第二篇文章在四个星期后发表，给出了量子谐振子、刚体及双原子分子的薛定谔方程的解。在五月发表的第三篇文章中，薛定谔证明了他的做法等价于海森堡的矩阵力学。第四篇文章说明了如何处理随时间变化的系统，例如散射问题。

薛定谔（Erwin Schrodinger，1887—1961）奥地利物理学家.

1926年建立了以薛定谔方程为基础的波动力学，并建立了量子力学的近似方法 .

1933年与狄拉克获诺贝尔物理学奖.

薛定谔方程是非相对论微观粒子的基本方程

地位同经典物理的牛顿定律

二、薛定谔方程

1　自由粒子薛定谔方程的建立

自由粒子平面波函数

$$\Psi(x,t)=\psi_0 e^{-\mathrm{i}\frac{2\pi}{h}(Et-px)}$$

取 x 的二阶偏导数和 t 的一阶偏导数

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}=-\frac{4\pi^2 p^2}{h^2}\Psi \qquad \frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\mathrm{i}2\pi}{h}E\Psi$$

自由粒子 $(v \ll c)$　　$E=E_\mathrm{k}$　　$p^2=2mE_\mathrm{k}$

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}=\mathrm{i}\frac{h}{2\pi}\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

一维运动自由粒子的含时薛定谔方程

2 粒子在势能为 E_{p} 的势场中运动

$$E = E_{\mathrm{k}} + E_{\mathrm{p}}$$

- 一维运动粒子的含时薛定谔方程

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + E_{\mathrm{p}}(x,t)\Psi = \mathrm{i}\frac{h}{2\pi}\frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

3 粒子在恒定势场中的运动

$$E = \frac{p^2}{2m} + E_{\mathrm{p}} \qquad E_{\mathrm{p}}(x) \text{ 与时间无关}$$

$$\Psi(x,t) = \psi_0 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{2\pi}{h}(Et-px)} = \psi(x)\phi(t) \qquad \text{分离变量}$$

$$\Psi(x,t)=\psi_0 e^{-\mathrm{i}2\pi(Et-px)/h}$$

$$=\psi_0 e^{\mathrm{i}2\pi px/h}e^{-\mathrm{i}2\pi Et/h}$$

$$=\psi(x)\phi(t)$$

$$\psi(x)=\psi_0 e^{\mathrm{i}2\pi px/h}$$

代入 $$-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+E_{\mathrm{p}}\Psi=\mathrm{i}\frac{h}{2\pi}\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

◆ 在势场中一维运动粒子的定态薛定谔方程

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2}+\frac{8\pi^2 m}{h^2}(E-E_\mathrm{p})\psi(x)=0$$

◆ 三维势场中运动粒子的定态薛定谔方程

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}+\frac{8\pi^2 m}{h^2}(E-E_\mathrm{p})\psi=0$$

拉普拉斯算子

$$\boxed{\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}}$$

$$\nabla^2\psi+\frac{8\pi^2 m}{h^2}(E-E_\mathrm{p})\psi=0$$

定态波函数 $\psi(x,y,z)$

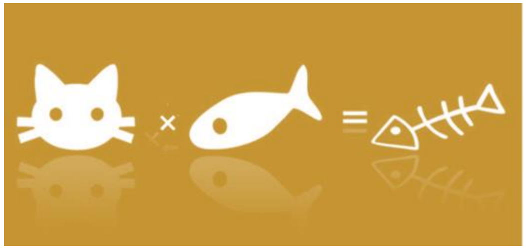
**定态薛定谔方程

$$\frac{\boldsymbol{d}^2\psi(x)}{\boldsymbol{d}x^2}+\frac{8\boldsymbol{\pi}^2 m}{h^2}(E-E_{\boldsymbol{p}})\psi(x)=0 \qquad \hbar=\frac{h}{2\pi}$$

现在我们定义一个算符： $\hat{H}=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+E_p$

那么定态薛定谔方程将简写为：

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



这里我们将算符 ***H*** 称为哈密顿算符，***E*** 称为本征能量值——这是一个量子系统最基本的特征——粒子所具有能量。

例如，氢原子的定态薛定谔方程

$$E_{\mathrm{p}} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$$

$$\nabla^2\psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2}\left(E + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)\psi = 0$$

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.

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi Et/h} \qquad |\Psi|^2 = |\psi|^2$$

（3） 粒子在无限深势阱中的运动，电子在原子内的运动等，可视为定态下的运动.

◆ 波函数的标准条件：单值、有限和连续

(1) $\int_{-\infty<x,y,z<\infty} |\psi|^2 \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z = 1$ 可归一化

(2) ψ 和 $\frac{\partial \psi}{\partial x}, \frac{\partial \psi}{\partial y}, \frac{\partial \psi}{\partial z}$ 连续

(3) $\psi(x, y, z)$ 为有限的、单值函数

**更多讨论

$$\left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\nabla^2 + E_{\mathrm{p}}\right)\Psi = \mathrm{i}\frac{h}{2\pi}\frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

- 薛定谔方程是量子力学中的一项基本假设；地位与经典力学的牛顿定律相当。

$$\left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\nabla^2 + E_{\mathrm{p}}\right)\Psi = \mathrm{i}\frac{h}{2\pi}\frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

- 薛定谔方程的解满足态叠加原理

若 Ψ_1 和 Ψ_2 是薛定谔方程的解，

则 $c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ 也是薛定谔方程的解。

这是因为薛定谔方程是线性偏微分方程。

- 薛定谔方程是关于时间的一阶偏微分方程

知道初始时刻波函数，就可以确定以后任何时刻的波函数.

- 薛定谔方程中含有虚数 i

所以它的解 Ψ 必然是复数，只有 Ψ 的模方才有直接的物理意义。