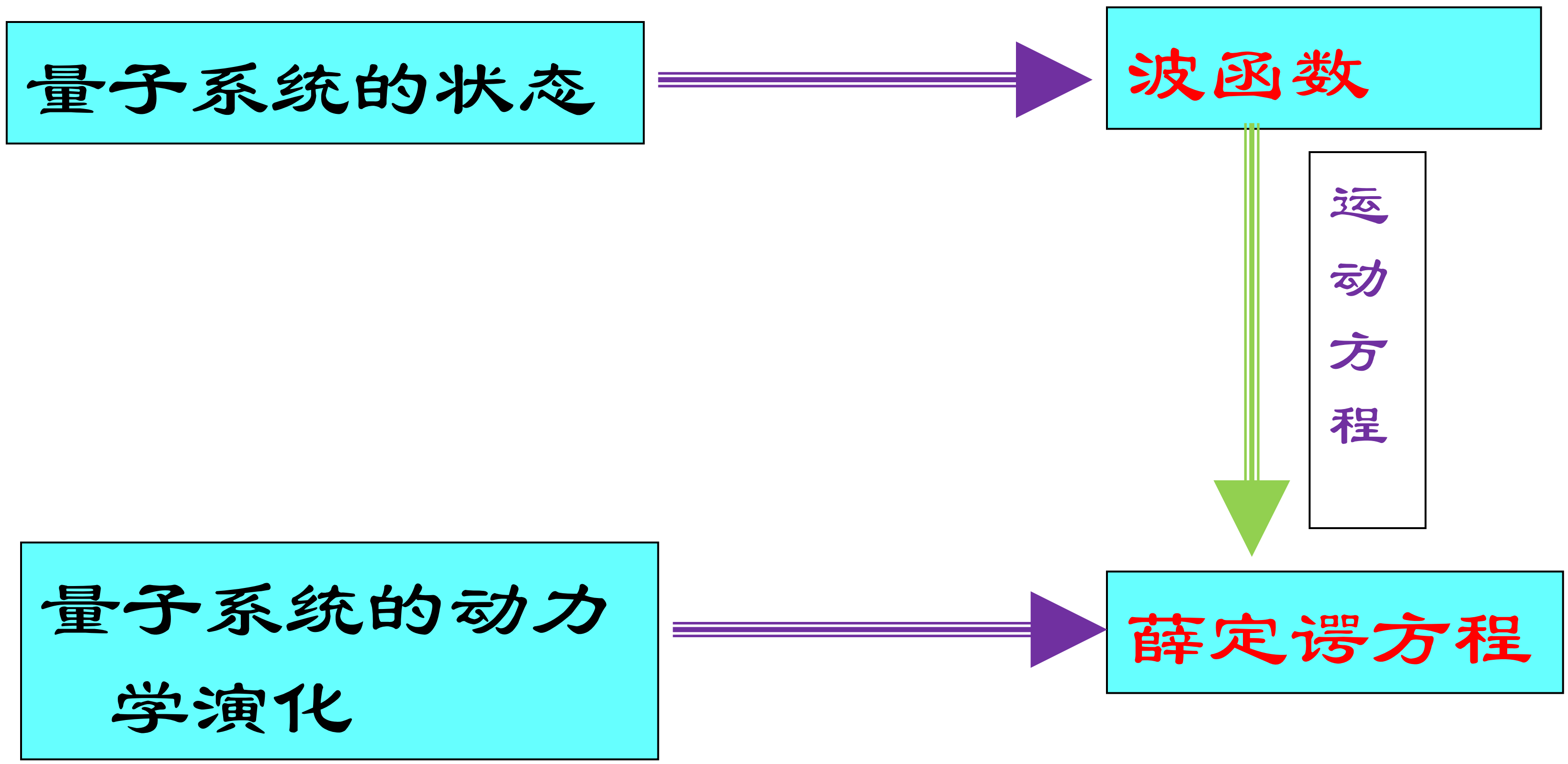
量子力学与统计物理

Quantum mechanics and statistical physics

光电科学与工程学院 王智勇

第二章　波函数与薛定谔方程



4. 德布罗意物质波假说：实物粒子的波粒二象性

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

一个能量为E动量为P的实物粒子同时具有波动性, 且:

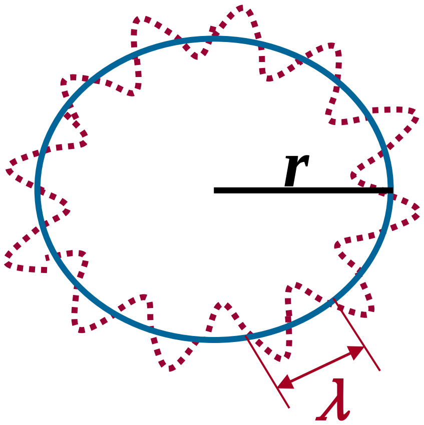
$$\left.\begin{array}{ll} \lambda = \dfrac{h}{p} & p = \dfrac{h}{\lambda} \\ \nu = \dfrac{E}{h} & E = h\nu \end{array}\right\}$$

爱因斯坦－德布罗意关系式

与粒子相联系的波称为物质波或德布罗意波

λ — **德布罗意波长**

对于氢原子圆轨道稳定条件，德布罗意用电子的轨道驻波来解释



$$\begin{cases} 2\pi r = n\lambda \\ \lambda = h/mu \end{cases} \Rightarrow 2\pi rmu = nh \Rightarrow$$

$$L = rmu = nh/2\pi = n\hbar,\ n = 1, 2, 3, \cdots$$

正是玻尔的电子轨道角动量量子化条件！

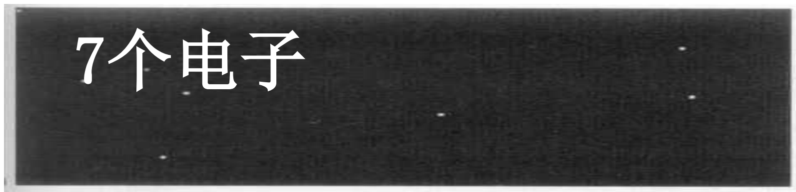
索莫非（Sommerfeld）将量子化条件推广：

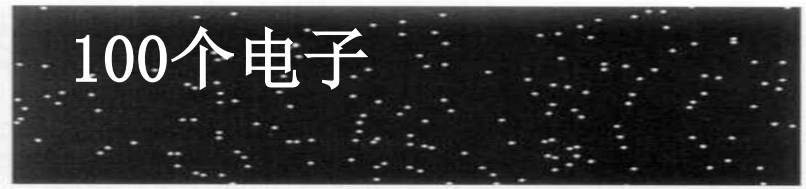
$$\oint p \mathrm{d} q = nh$$

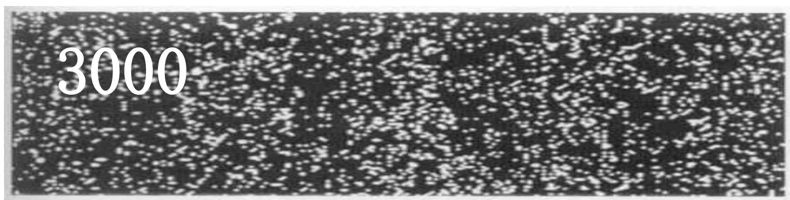
q是电子的一个广义坐标，p是对应的广义动量。回路积分是沿运动轨道积分。

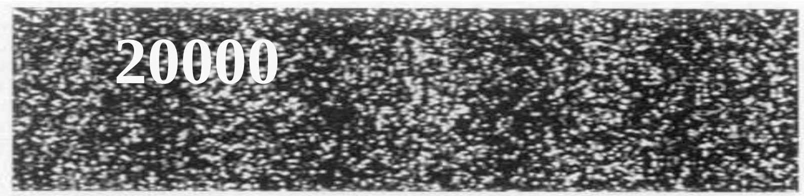
1. 对微观粒子波粒二象性的认识

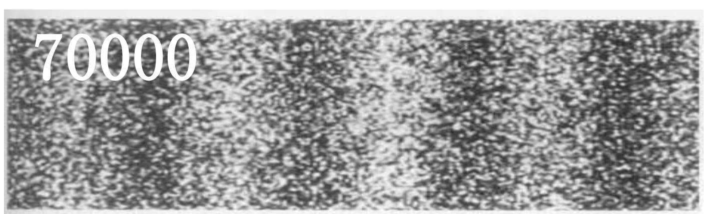
为了获得正确理解，再以电子双缝干涉实验为例：











底片上出现一个个的点子

→电子具有粒子性。

随着电子增多，逐渐形成衍射图样→来源于单个电子所具有的波动性

不是电子间相互作用的结果（发射上一个电子与发射下一个电子可以间隔一段时间）。

① 单个电子入射每次集中于一点，出现在屏上；

——电子是一个完整的颗粒，不可分割

② 电子在屏上的落点是随机分布的，多次积累以后出现衍射花纹；

——在测量前具有不确定性，但是有一定的统计性

③ 外界条件一定，重复实验，结果衍射花纹不变；

——电子在空间的统计分布是一定的

④ 电子一个一个发射，重复实验，结果衍射花纹不变；

—— 单个电子就具有波动性，不是电子间相互作用的结果。

⑤ 双缝齐开与先后各开一缝，前者才能获得干涉条；

——经典粒子：$P=P_1+P_2$ 量子客体：$P\neq P_1+P_2$

1. 对微观粒子波粒二象性的认识

错误看法1：把波当成是粒子的内部结构。

把粒子看成一个波包。

批　判 I： 波包会扩散，即微观粒子要膨胀，这与实际相悖。

批　判 II： 波包衍射后变成许多部分，即微观粒子被分割成小块，这也与实际相悖（微观粒子的完整性）

错误根源： 夸大微观粒子的波动性一面。

错误看法2：把微观粒子的波动图像看成许多粒子组成的疏密波

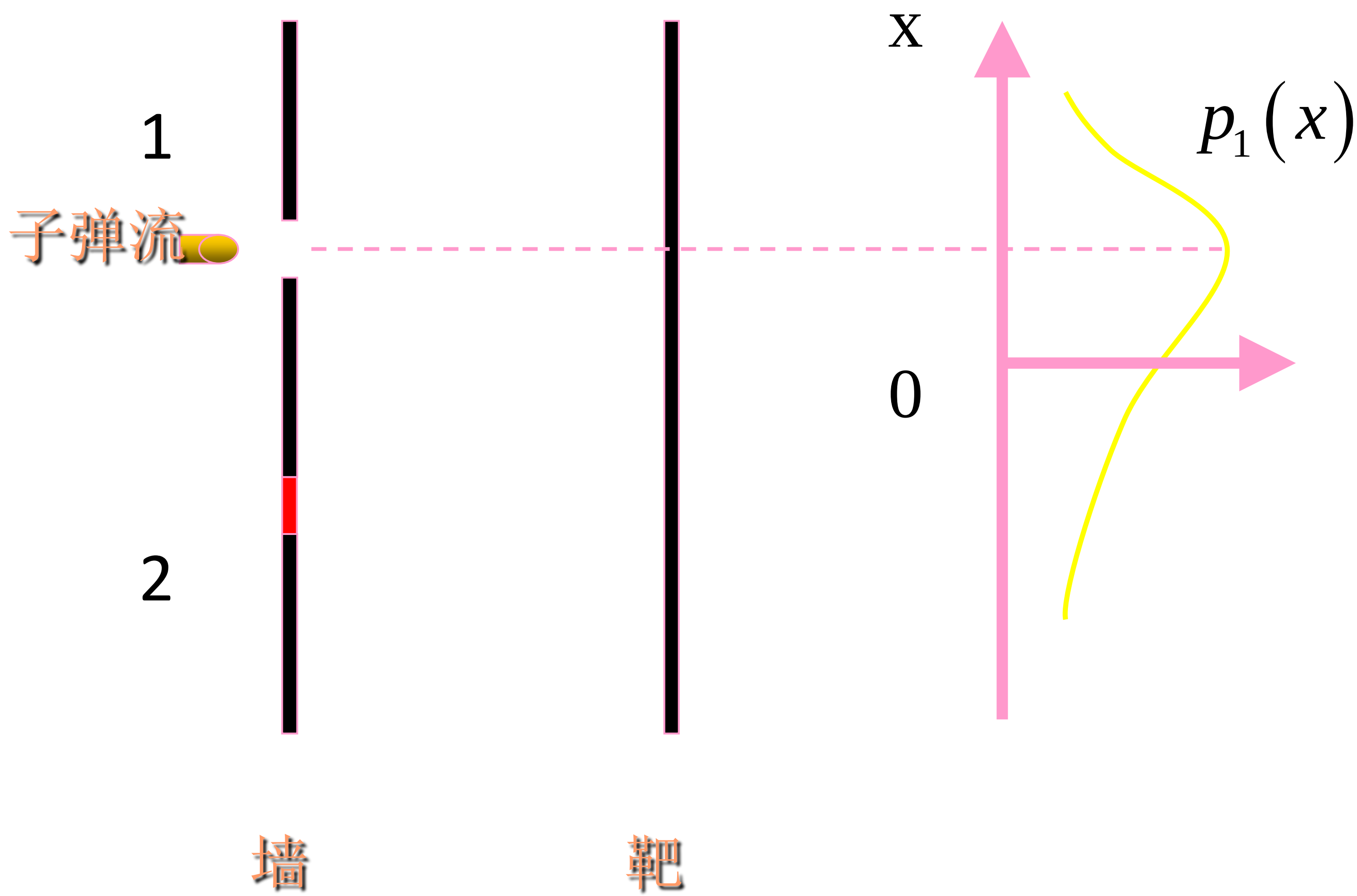
批　判：实际上单个粒子同样具有波动性

（单个粒子同样可形成衍射和干涉图样）

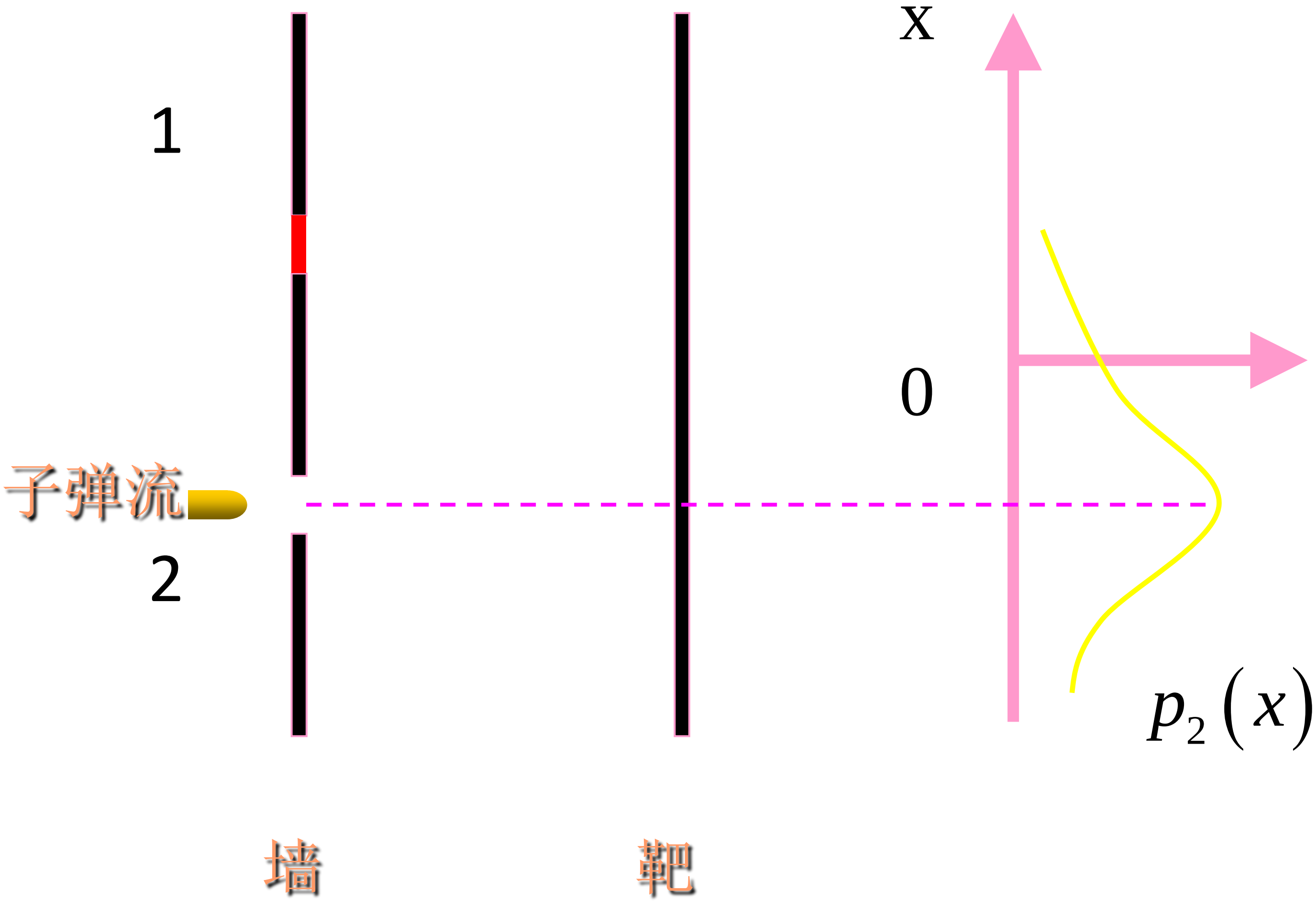
错误根源：片面强调微观粒子的粒子性

- 真正将微观粒子的粒子性和波动性统一起来的要归功于Born对波函数的统计解释。
- 在介绍波函数概念之前先看两个实验：

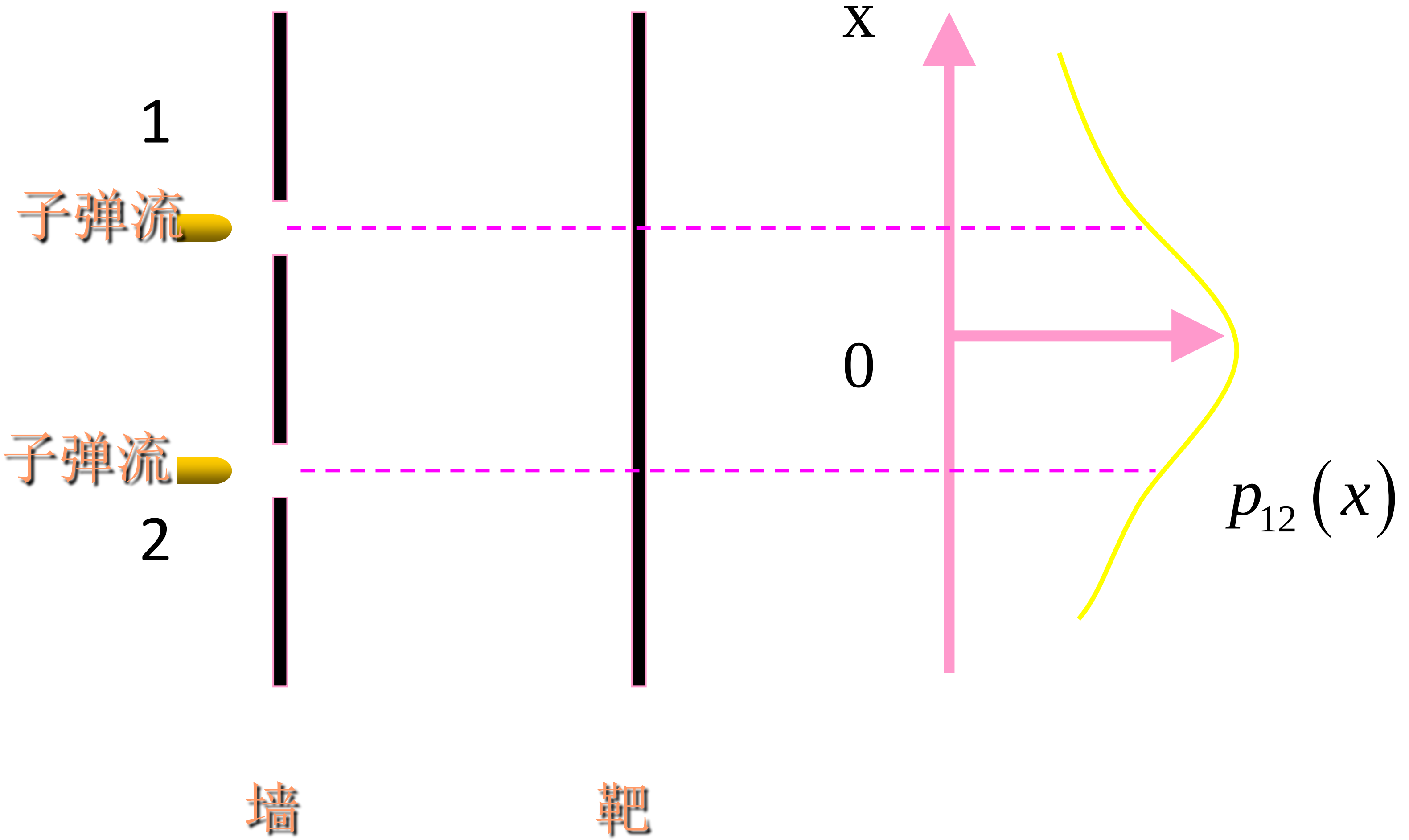
1. 子弹流的双孔实验



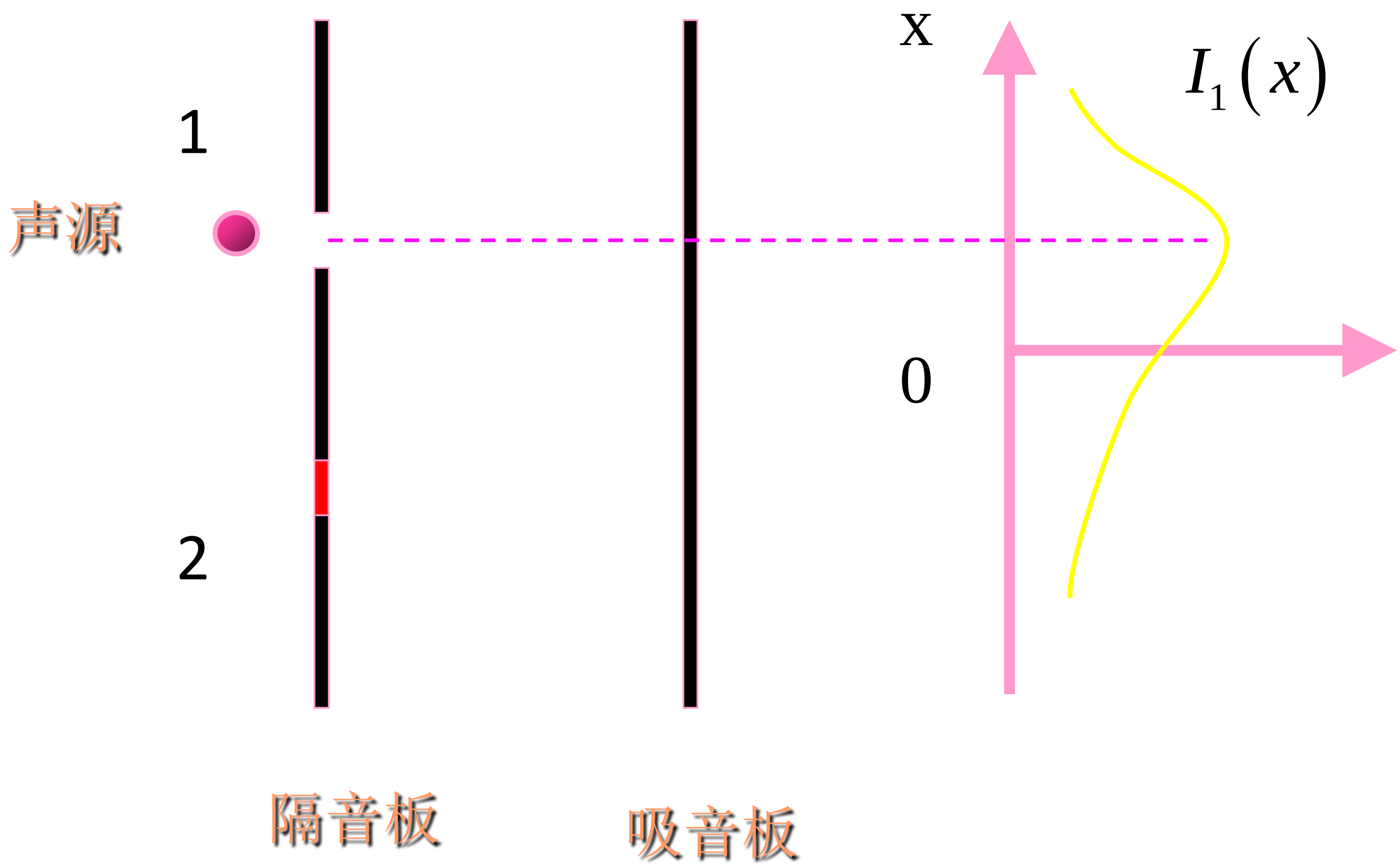
1. 子弹流的双孔实验



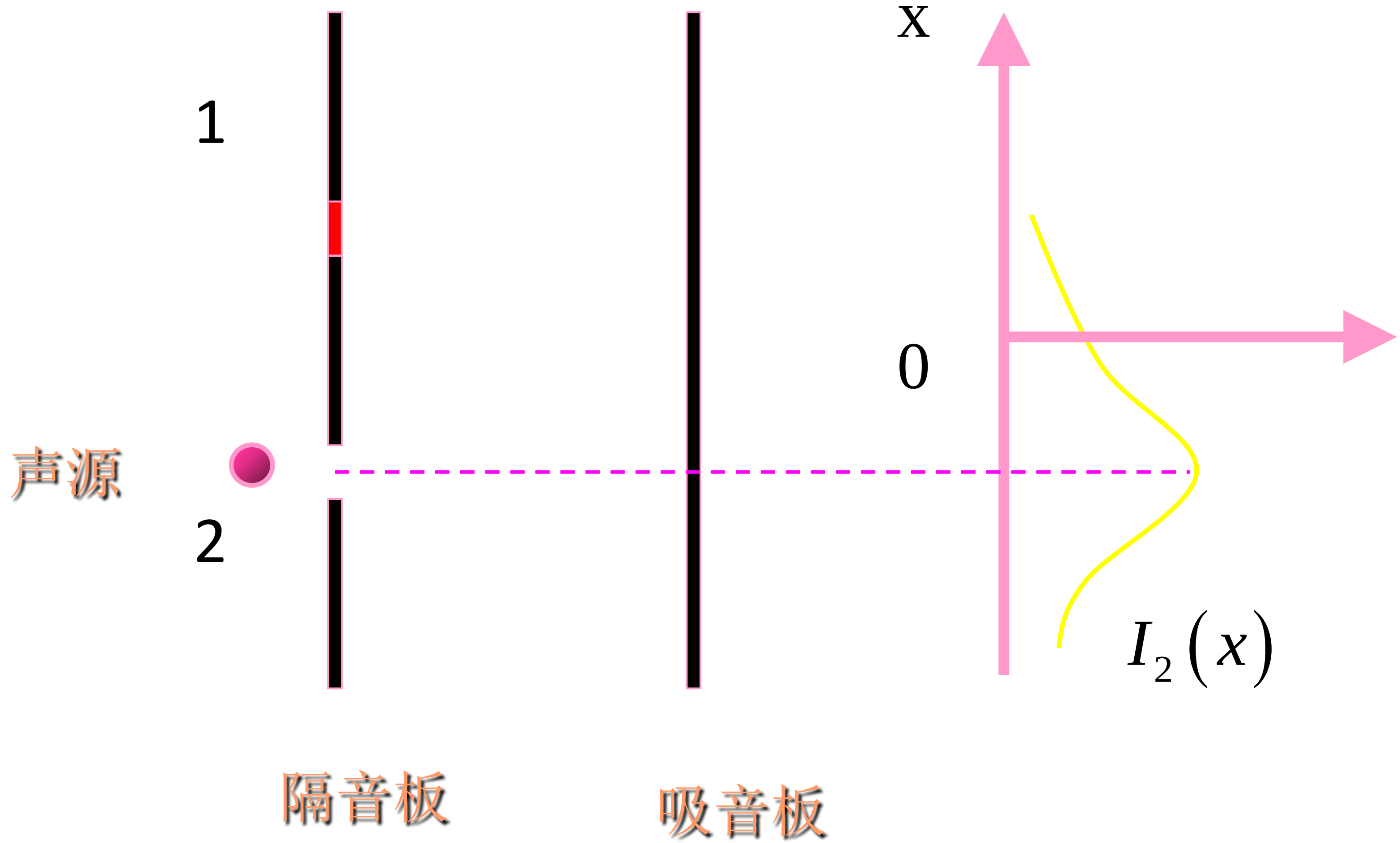
1. 子弹流的双孔实验



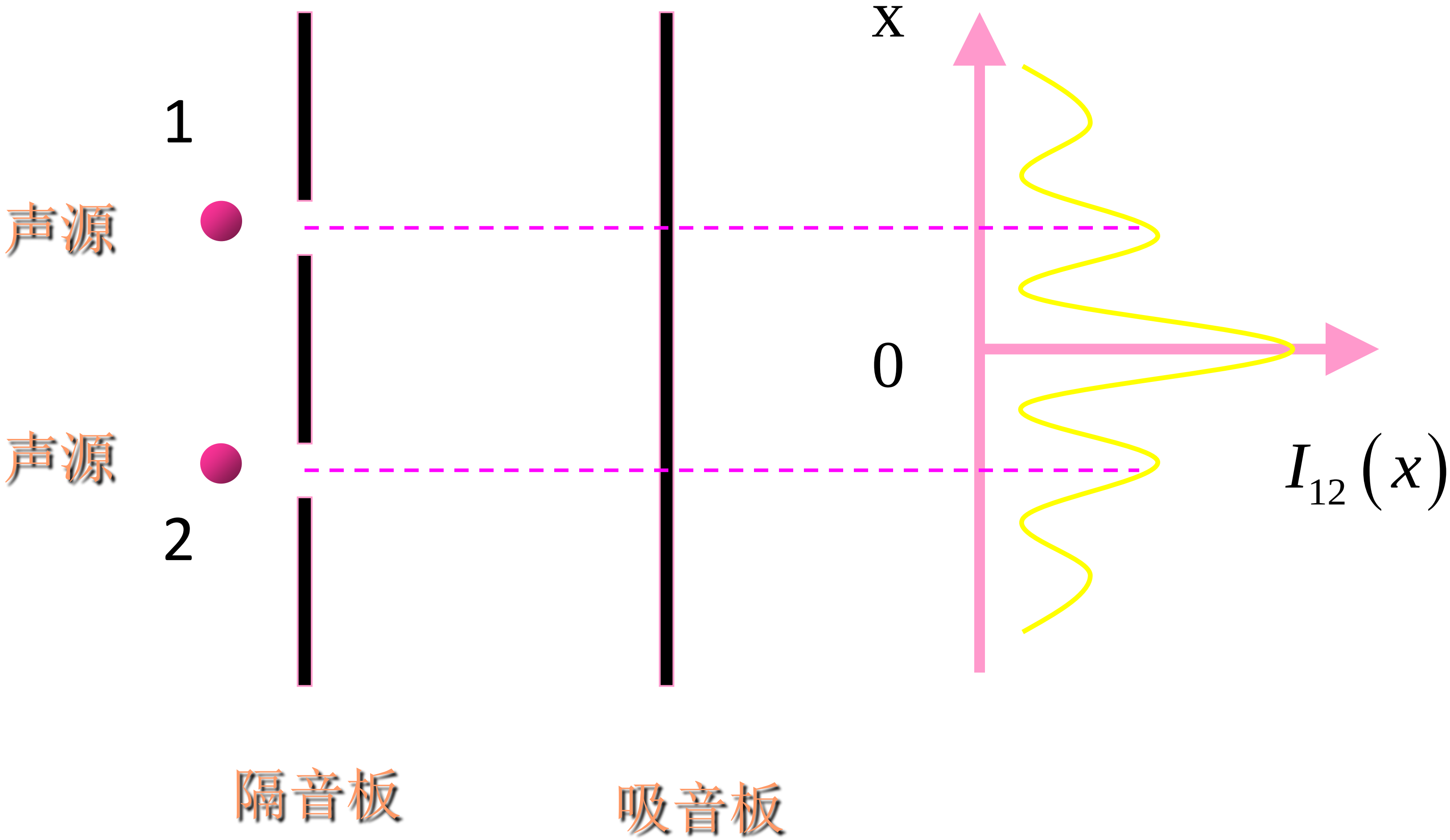
2. 声波的双缝干涉实验



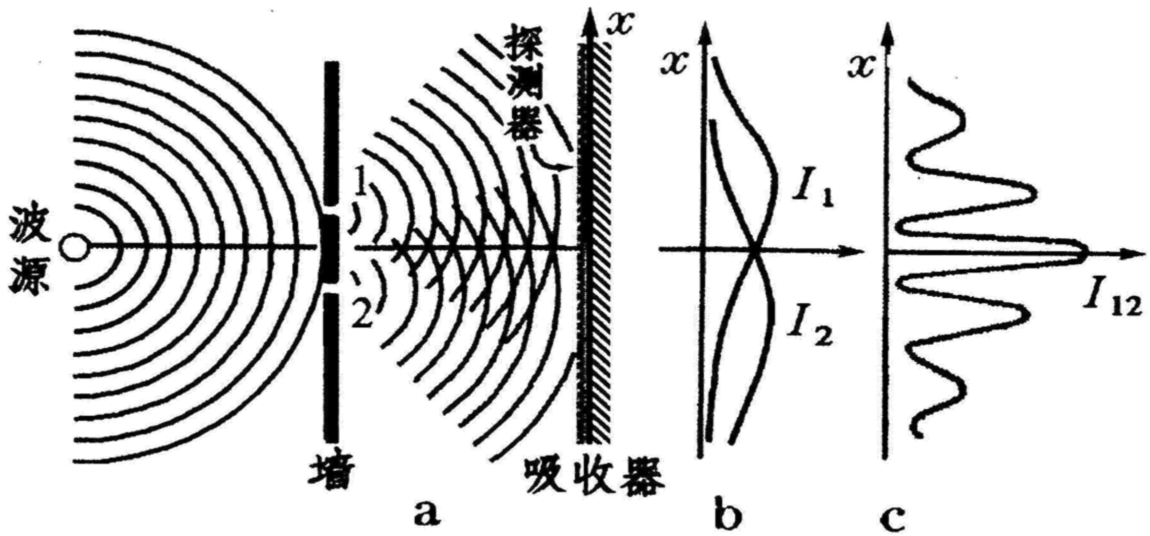
2. 声波的双缝干涉实验



2. 声波的双缝干涉实验



2. 声波的双缝干涉实验



为什么两种图存在如此大的区别?

物理意义

- 子弹流的双孔实验 → 无相干分布
- 声波的双缝干涉实验 → 相干分布

数学形式

- 子弹流的双孔实验 → 几率相加
- 声波的双缝干涉实验 → 振幅相加

注：声波是由量子化的声子组成的，因此其叠加干涉背后体现的是量子波函数行为

子弹流的双孔实验：

仅开上面的孔1时，靶上子弹的分布为： $p_1(x)$

仅开下面的孔2时，靶上子弹的分布为： $p_2(x)$

同时打开孔1和2时，靶上子弹分布为： $p_{12}(x) = p_1(x) + p_2(x)$

声波的双缝干涉实验：

仅开上面的缝1时，吸收屏上所获得的波强度为： $I_1(x) = \left|E_1(x)\right|^2$

仅开下面的缝2时，吸收屏上所获得的波强度为： $I_2(x) = \left|E_2(x)\right|^2$

同时打开缝1和2时，吸收屏上得到的强度分布为：

$$I_{1.2}(x) = \left|E_1(x) + E_2(x)\right|^2$$

$$= \left|E_1(x)\right|^2 + \left|E_2(x)\right|^2 + E_1^*(x)E_2(x) + E_1(x)E_2^*(x)$$

$$= I_1(x) + I_2(x) + I_c(x)$$

其中

$$I_c(x) = E_1^*(x)E_2(x) + E_1(x)E_2^*(x)$$

为干涉项，正是干涉项的存在，才导致干涉图样。

电子的双缝干涉实验：

只开上缝时，电子有一定的概率通过上缝，

其状态用 $\psi_1(x)$ 描述，电子的概率分布为 $P_1 = |\Psi_1|^2$

只开下缝时，电子有一定的概率通过下缝，

其状态用 $\psi_2(x)$ 描述，电子的概率分布为 $P_2 = |\Psi_2|^2$

双缝齐开时，电子同时通过上缝和下缝的状态用总的概率幅描述

总的概率幅为 $\Psi_{12} = \Psi_1 + \Psi_2$

电子可通过双缝的总概率为

$$P_{12} = |\Psi_{12}|^2 = |\Psi_1 + \Psi_2|^2$$

$$\neq |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 = P_1 + P_2$$

$$\Psi_{12} = \Psi_1 + \Psi_2$$

$$P_{12} = |\Psi_{12}|^2 = |\Psi_1 + \Psi_2|^2$$

出现了干涉。

可见，干涉是概率波的干涉，

是由于概率幅的线性叠加产生的。

即使只有一个电子，当双缝齐开时，

它的状态就要用 $\Psi_{12} = \Psi_1 + \Psi_2$ 来描述

两部分概率幅的叠加就会产生干涉。

微观粒子的波动性，实质上就是概率幅的相干叠加性。

对于概率幅叠加这样一个奇特的规律，费曼（Feynman)在他的《物理学讲义》中称之为量子力学的第一原理，他写到：“如果一件事件可能以几种方式实现，则该事件的概率幅就是各种方式单独实现时的概率幅之和。于是就出现了干涉！

在物理学中引入概率概念在哲学上有重要的意义。它意味着：在已知的条件下不可能精确预知结果，只能预言某些可能结果的概率。

量子客体	经典粒子	经典波
粒子性 ▪ 具有能量，动量 ▪随机性, 抛弃轨道概念	相同 有确定轨道	
波动性 ▪ 干涉、衍射 ▪ 具有频率和波矢 ▪ 没有实在的物理量在周期性变化		相同 有一个的物理量在周期性变化

量子客体既不是经典的粒子，它没有确定的“轨道”概念，也不是经典的波，没有实在的物理量在周期性变化。

微观粒子的波粒二象性

波动性

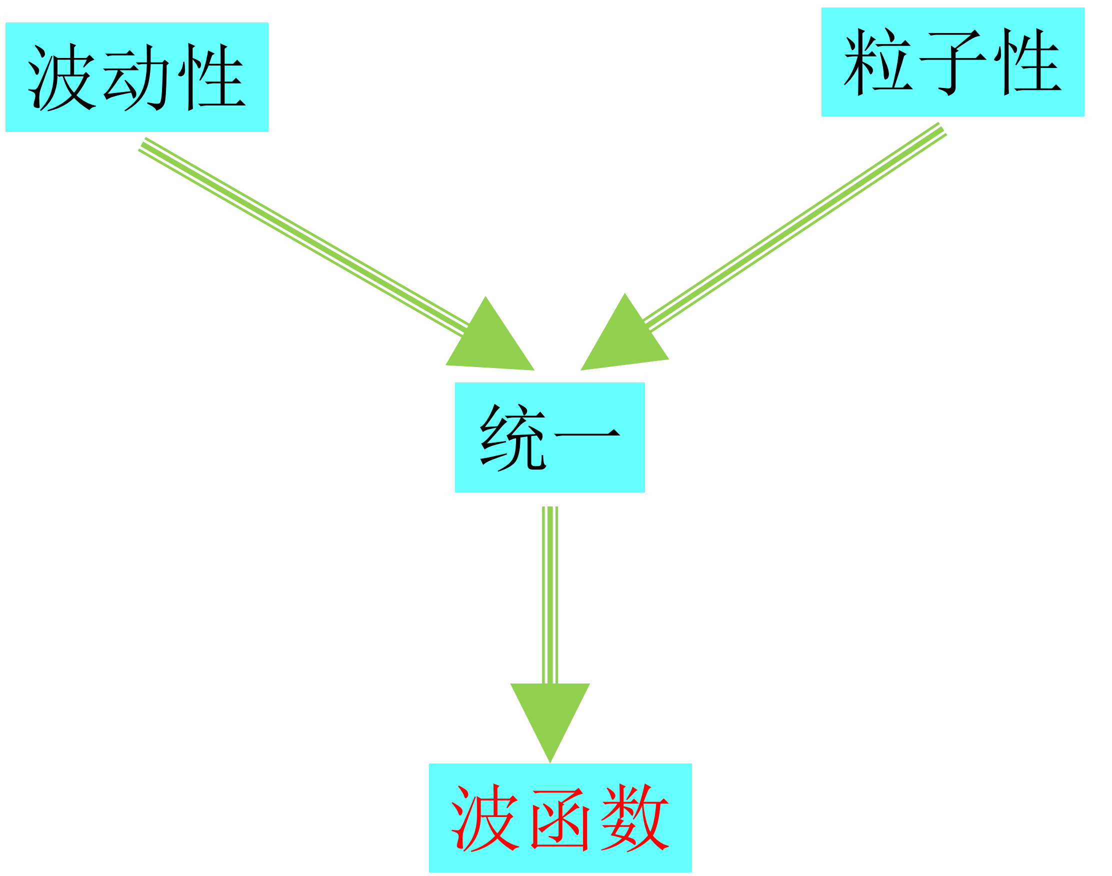
粒子性

量子态的相干性

粒子的内禀属性

微观粒子既具有质量、电荷、自旋等内禀属性，也具有量子状态相干叠加产生的干涉、衍射等波动性。

量子系统的状态由波函数来描述



微观粒子在某些条件下表现出粒子性，在另一些条件下表现出波动性，而两种性质虽寓于同一体中，却不能同时表现出来。

德布罗意波不代表一个实在的物理量的波动，
那么它是什么波？它的本质是什么？

2. 自由粒子波函数的引入

自由粒子 $\vec{F}_{外}=0 \longrightarrow E=\text{const.},\ \vec{p}=\text{const.}$

$$\longrightarrow \nu=\frac{E}{h}=\text{const.},\quad \lambda=\frac{h}{p}=\text{const.}$$

在经典电磁场理论中，对沿正x轴传播的单色平面波，有：

$$A(x,t)=A_0\exp[-\mathrm{i}2\pi(\nu t-x/\lambda)]=A_0\exp[-\mathrm{i}(\omega t-kx)]$$

$$=A_0\exp[-\mathrm{i}(\hbar\omega t-\hbar kx)/\hbar]=A_0\exp[-\mathrm{i}(Et-px)/\hbar]$$

类比：自由粒子沿正x轴方向的运动，波函数可写成：

$$\Psi(x,t)=\Psi_0\exp[-\mathrm{i}2\pi(\nu t-x/\lambda)]=\Psi_0\exp[-\mathrm{i}(Et-px)/\hbar]$$

代入德布罗意关系：$\nu=E/h,\ \lambda=p/h$

式中 $\hbar=h/2\pi$

自由粒子在三维空间中运动的波函数：

$$\Psi(\boldsymbol{r},t)=\Psi_0\exp[-\mathrm{i}(Et-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar]$$

$$=\Phi(\boldsymbol{r})\exp(-\mathrm{i}\,Et/\hbar)$$

$$\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}=p_x x+p_y y+p_z z$$

描写粒子状态的波函数，它通常是一个复函数。

其中 $\Phi(\boldsymbol{r})=\Psi_0\exp(\mathrm{i}\,\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar)$ **是空间波函数**

此波函数描述动量、能量不变的粒子（自由粒子）的运动状态。

自由粒子 $|\Psi|^2=|\Psi_0|^2=\mathrm{constant}$

即一旦粒子的动量完全确定，则粒子在各处的概率都相等
---于是粒子的空间位置完全不确定了！

若粒子处于势场 $U(\boldsymbol{r},t)$ 内运动，波函数会变得复杂

3. 波函数的统计解释

1926 年玻恩提出：德布罗意波是概率波.

德布罗意波的强度（即振幅绝对值的平方）与粒子在相应位置出现的概率成比例。

波函数是一种概率幅，并没有对应什么实际物理量的空间分布。（所以是复函数）

1954年诺贝尔物理学奖

M.玻恩，(Max Born 1882～1970)德国理论物理学家，量子力学的奠基人之一

📖 启发性分析：物质波是什么波？

电子双缝干涉实验说明单个粒子就有波性。

波动观点：光波干涉条纹→亮处波的强度大(暗处强度小）→振幅的平方大.

光子观点：光的强度大→单位时间内到达的光子数多.

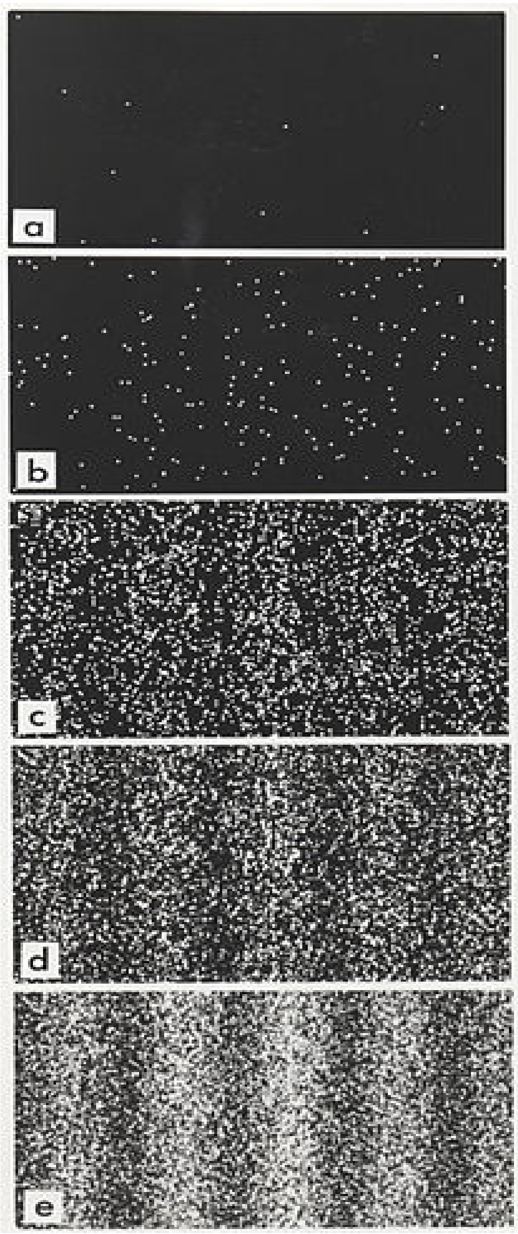
→光子到达亮处的概率远大于光子到达暗处的概率.

粒子在某处出现的概率与波在此处的振幅平方成正比!

用波函数完全地描述量子状态，

是量子力学的基本假设之一.

对电子双缝干涉实验的统计解释



自由电子是平面波，理论上可以等概率地出现在整个空间的任一位置

电子通过双缝设备时发生衍射和干涉，使得它在某些位置的振幅较大，某些位置的振幅较小

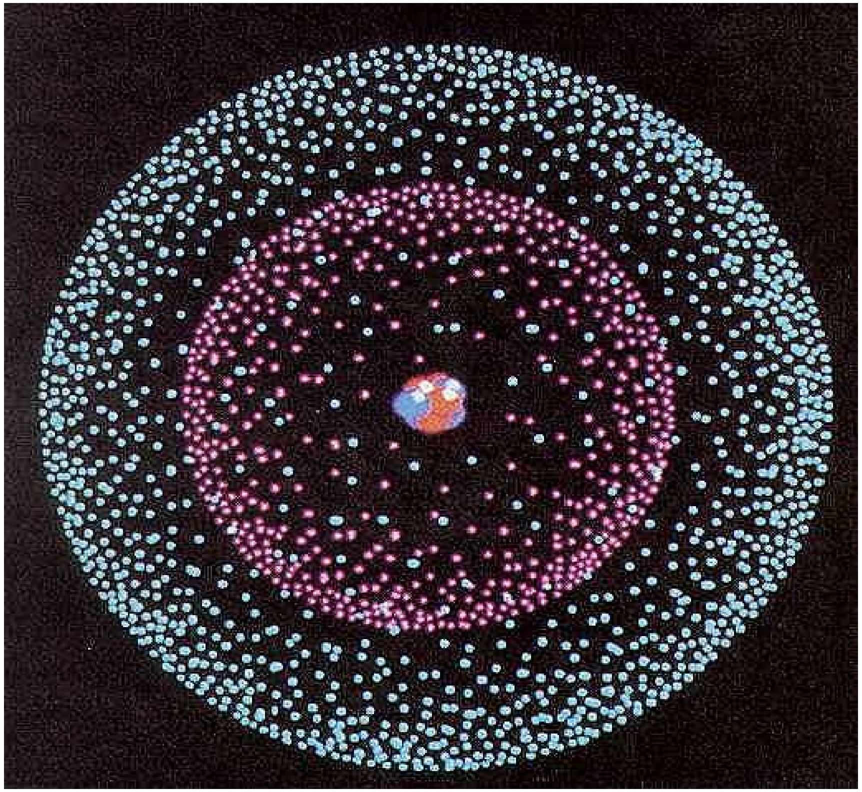
振幅较大的位置电子出现的概率较大，形成明纹。振幅较小的位置电子出现的概率较小，形成暗纹。

明暗干涉条纹不体现电子波函数本身的形状，它是电子波函数模方的形状，体现的是电子的概率分布情况。

🕮玻恩（M. Born）假定

玻恩的统计解释:在某一时刻、空间某一地点,粒子出现的概率正比于该时刻、该地点波函数模的平方.

德布罗意波并不像经典波那样代表某种实在的物理量的波动,而是刻画粒子在空间中概率分布的概率波。



右图是计算机根据波函数计算并绘制的原子内部图象,其中原子核被放大了.

经典的"轨道"已无意义!

物质波的波函数 Ψ 是描述粒子在空间概率分布的“概率振幅”(几率幅)。$\Rightarrow \Psi(\vec{r},t)$ **概率振幅**

其模的平方:

$$\left|\Psi(\vec{r},t)\right|^2 = \Psi(\vec{r},t)^* \Psi(\vec{r},t)$$ **概率密度**

代表t时刻，在$\vec{r}$处单位体积内找到粒子的几率，称为概率密度(几率密度)。

t 时刻在处 $\vec{r}$ 附近dV内发现粒子的概率为:

$$\left|\Psi(\vec{r},t)\right|^2 \mathrm{d}V$$

这是玻恩1926年给出的波函数 Ψ 的统计解释。

注意：有物理意义的是$\left|\Psi(\vec{r},t)\right|^2$,而不是$\Psi$。

$\Psi(\vec{r},t)$ 不同于经典波的波函数，

它无直接的物理意义，有意义的是 $|\Psi|^2$ 。

对单个粒子， $|\Psi|^2$ 给出粒子的概率密度分布；

对 N 个粒子， $N|\Psi|^2$ 给出粒子数的分布。

🕮波函数须满足的数学条件

- 自然条件：单值、有限和连续。
- 归一化条件 $\int_{\Omega}|\Psi(\vec{r},t)|^2 dV = 1$ $(\Omega - \text{全空间})$

例：将波函数 归一化：$f(x) = \exp\left(-\alpha^2 x^2 / 2\right)$

解：设归一化因子为C，则归一化的波函数为

$$\Psi(x)=C\exp(-\alpha^2x^2/2)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left|\Psi(x)\right|^2 \mathrm{d}x = 1$$

计算积分得 $|C|^2 = \alpha/\pi^{1/2}$

$$C = (\alpha/\pi^{1/2})^{1/2}\exp(\mathrm{i}\delta)$$

取 $\delta = 0$，则归一化的波函数为

$$\Psi(x) = (\alpha/\pi^{1/2})^{1/2}\exp(-\alpha^2x^2/2)$$

例：设粒子在一维空间运动，其状态可用波函数描述为：

$$\begin{cases} \psi(x,t)=0 & x<0 \\ \psi(x,t)=Axe^{-\lambda x} & x\geq 0 \end{cases}$$

其中A为任意常数

求：1)归一化的波函数；2)概率密度 3)何处几率最大

解：由归一化条件，

$$\int_{-\infty}^{0}|\psi(x,t)|^2\,dx+\int_{0}^{\infty}|\psi(x,t)|^2\,dx=1$$

即：

$$A^2\int_0^{\infty}x^2e^{-2\lambda x}dx=1 \qquad A=2\lambda\sqrt{\lambda}$$

归一化的波函数

$$\psi(x,t)=2\lambda\sqrt{\lambda}\,xe^{-\lambda x}$$

2) 概率密度：

$$\rho(x) = |\psi(x,t)|^2 = 0 \qquad x < 0$$

$$\rho(x) = |\psi(x,t)|^2 = 4\lambda^3 x^2 e^{-2\lambda x} \qquad x \geq 0$$

3) 何处几率最大

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}|\psi(x,t)|^2 = 0$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} x^2 e^{-2\lambda x} = 0$$

得到$x=1/\lambda$几率最大

（实际计算时，还需要证明该点是最大值）

例：设粒子在一维空间运动, 其状态可用波函数描述为：

$$\begin{cases} \psi(x,t)=0 & x\le -b/2,\ x\ge b/2 \\ \psi(x,t)=A\cos(\dfrac{\pi x}{b})e^{-\frac{iE}{\hbar}t} & -b/2\le x\le b/2 \end{cases}$$

其中A为任意常数，E和b均为确定的常数

求：归一化的波函数；概率密度ρ.

解：　由归一化条件,

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

即：$$A^2\int_{-b/2}^{b/2}\cos^2(\frac{\pi x}{b})\mathrm{d}x=1$$

$$\because A^2\frac{b}{2}=1 \qquad \therefore A=\sqrt{\frac{2}{b}}$$

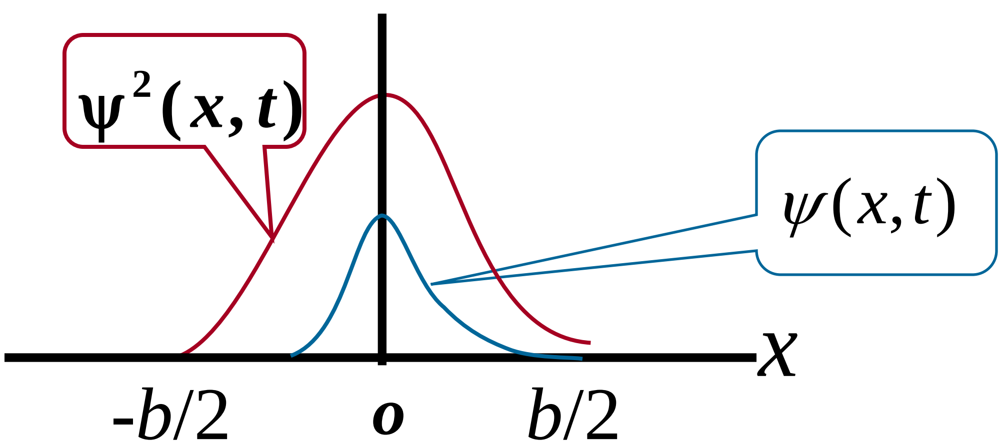
由此可求出归一化的波函数 $\psi(x,t)=\sqrt{\frac{2}{b}}\cos(\frac{\pi x}{b})e^{-\frac{iE}{\hbar}t}$

概率密度为：

$$\rho(x)=|\psi(x,t)|^2=0 \qquad x\le -b/2,\ x\ge b/2$$

$$\rho(x)=|\psi(x,t)|^2=\frac{2}{b}\cos^2(\frac{\pi\cdot x}{b}) \qquad -b/2\le x\le b/2$$

如图所示，在区间（$-b/2,b/2$)以外找不到粒子。在x=0处找到粒子的概率最大。



4. 玻恩统计解释的数学形式

设有波函数 $\Psi(x,y,z,t)$ 描写某粒子的状态

(1) 波强度为： $|\Psi|^2 = \Psi^*\Psi$

(2) 位置概率 ： $\mathrm{d}W(x, y, z, t)$：

t 时刻，粒子出现在空间区域（$x \to x+\mathrm{d}x$、$y \to y+\mathrm{d}y$、$z \to z+\mathrm{d}z$）内的概率由两个因素决定：

$$\mathrm{d}W \propto \mathrm{d}\tau = \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z, \quad \mathrm{d}W \propto |\Psi|^2$$

依据统计解释，有：

$$\mathrm{d}W(x,y,z,t) = C\,|\Psi(x,y,z,t)|^2\,\mathrm{d}\tau$$

(3）归一化：在整个空间找到粒子的几率应为1；

归一化条件：
$$\int_{-\infty}^{+\infty} C\,|\Psi(x,y,z,t)|^2\,\mathrm{d}\tau = \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} C\,|\Psi(x,y,z,t)|^2\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z = 1$$

归一化常数 $C = 1\Big/\int_{-\infty}^{+\infty}|\Psi|^2\mathrm{d}\tau$

归一化波函数：$\Phi = \sqrt{C}\exp(\mathrm{i}\theta)\Psi \xrightarrow{\text{let }\theta=0} \Phi = \sqrt{C}\Psi$

对于归一化波函数有：$\mathrm{d}W(x,y,z,t) = |\Phi(x,y,z,t)|^2\,\mathrm{d}\tau$

多粒子系统的波函数

对于N个粒子组成的体系，它的波函数表示为$\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\ldots,\boldsymbol{r}_N,t)$

其中 $\boldsymbol{r}_1=(x_1,y_1,z_1)$, $\boldsymbol{r}_2=(x_2,y_2,z_2)$, $\cdots$, $\boldsymbol{r}_N=(x_n,y_n,z_n)$

分别表示各粒子的坐标，此时

$$\left|\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\ldots,\boldsymbol{r}_N,t)\right|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2\cdots\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_N$$

表示粒子1分别在体积微元 $\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1=\mathrm{d}x_1\mathrm{d}y_1\mathrm{d}z_1$

同时粒子2分别在体积微元 $\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2=\mathrm{d}x_2\mathrm{d}y_2\mathrm{d}z_2$

....

同时粒子N分别在体积微元 $\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_N=\mathrm{d}x_N\mathrm{d}y_N\mathrm{d}z_N$ 中的概率。

归一化条件

$$\int_{全}\left|\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\ldots,\boldsymbol{r}_N,t)\right|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2\cdots\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_N=1$$

多粒子系统的波函数

如果这N个粒子彼此是相互独立的，则 N粒子体系的波函数可以分离变量，表达为各个粒子波函数的乘积

$$\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\ldots,\boldsymbol{r}_N,t)=\psi_1(\boldsymbol{r}_1,t)\psi_2(\boldsymbol{r}_2,t)\ldots\psi_N(\boldsymbol{r}_N,t)$$

它们的模方代表概率密度，因此符合概率相乘原理

$$\begin{aligned}&\left|\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\ldots,\boldsymbol{r}_N,t)\right|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2\cdots\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_N\\&=(\left|\psi_1(\boldsymbol{r}_1,t)\right|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1)(\left|\psi_2(\boldsymbol{r}_2,t)\right|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2)\ldots(\left|\psi_N(\boldsymbol{r}_N,t)\right|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_N)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}&\int_{\text{全}}\left|\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\ldots,\boldsymbol{r}_N,t)\right|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2\cdots\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_N=1\\&=(\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\psi_1(\boldsymbol{r}_1,t)\right|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1)(\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\psi_2(\boldsymbol{r}_2,t)\right|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2)\ldots(\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\psi_N(\boldsymbol{r}_N,t)\right|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_N)\end{aligned}$$

(4) 位置空间波函数与动量空间波函数

$$\begin{cases} C(\boldsymbol{p},t)=\dfrac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\displaystyle\int\psi(\boldsymbol{r},t)\exp(-\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \\ \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty}|C(\boldsymbol{p},t)|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}=1,\ \mathrm{d}^3\boldsymbol{p}=\mathrm{d}p_x\mathrm{d}p_y\mathrm{d}p_z \end{cases}$$

$$\Leftrightarrow\begin{cases} \psi(\boldsymbol{r},t)=\dfrac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\displaystyle\int C(\boldsymbol{p},t)\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar)\mathrm{d}^3\boldsymbol{p} \\ \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=1,\ \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z \end{cases}$$

在t时刻、动量坐标点(p_x, p_y, p_z)附近动量空间体积元内出现粒子的概率为

$$|C(\boldsymbol{p},t)|^2\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}=|C(p_x,p_y,p_z,t)|^2\,\mathrm{d}p_x\mathrm{d}p_y\mathrm{d}p_z$$

（5）位置空间概率密度与动量空间

描述在t时刻，在位置空间坐标 $(x,\ y,\ z)$点附近单位体积内找到粒子的概率，用$w(x,\ y,\ z)$表示；在动量空间坐标 (p_x, p_y, p_z)点附近单位体积内找到粒子的概率，用$u(x, y, z)$ 表示

位置空间波函数：$\psi(\boldsymbol{r},t)=\dfrac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\displaystyle\int C(\boldsymbol{p},t)\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar)\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}$

位置空间几率密度：$w(x,y,z,t)=\left|\psi(\boldsymbol{r},t)\right|^2=\left|\psi(x,y,z,t)\right|^2$

动量空间波函数：$C(\boldsymbol{p},t)=\dfrac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\displaystyle\int \psi(\boldsymbol{r},t)\exp(-\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$

动量空间几率密度：$u(p_x,p_y,p_z,t)=\left|C(\boldsymbol{p},t)\right|^2=\left|C(p_x,p_y,p_z,t)\right|^2$

波函数$\psi(\boldsymbol{r},\ t)$的傅里叶展开可以理解为ψ用平面波展开，展开系数$C(\boldsymbol{p},\ t)$描述波包中包含各个动量成分的多少

从位置空间波函数到动量空间波函数

每个单色平面波有确定的能量E（频率ω）和动量$\boldsymbol{p}$（波数矢量$\boldsymbol{k}$）

$$\varphi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\exp[\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)]=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\exp[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et)]$$

一个波包是许多单色平面波叠加而成，故对波包来说，存在动量的概率分布。此时，用ψ描述波包的状态，则根据态叠加原理ψ可表示成$\boldsymbol{p}$取各种可能值的平面波的线性叠加，即

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\sum_{\boldsymbol{p}}c(\boldsymbol{p})\exp[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et)]=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\sum_{\boldsymbol{p}}c(\boldsymbol{p},t)\exp(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})$$

$$c(\boldsymbol{p},t)=c(\boldsymbol{p})\exp(-\mathrm{i}\omega t)=c(\boldsymbol{p})\exp(-\mathrm{i}\,Et/\hbar)$$

由于动量$\boldsymbol{p}$是连续变量，上面是连续求和，即积分

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int c(\boldsymbol{p},t)\exp[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})]\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int c(\boldsymbol{p})\exp[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et)]\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}$$

$$\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}=\mathrm{d}p_x\mathrm{d}p_y\mathrm{d}p_z$$

$|c(\boldsymbol{p})|^2$描述动量的概率分布，$c(\boldsymbol{p})$ 描述动量分布的概率振幅（波函数）。它的具体形式有傅立叶逆变换可得到：

$$c(\boldsymbol{p},t)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int\psi(\boldsymbol{r},t)\exp[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})]\mathrm{d}^3\boldsymbol{r},\quad \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}=\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z$$

$\psi(\boldsymbol{r},t)$是以坐标 $\boldsymbol{r}$ 和时间t为自变量的波函数，
坐标空间波函数，坐标表象波函数；
$c(\boldsymbol{p},t)$ 是以动量 $\boldsymbol{p}$和时间t为自变量的波函数，
动量空间波函数，动量表象波函数.

$$\mathrm{d}w(\boldsymbol{r},t)=|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$$

$\rightarrow$ 粒子在时刻t出现在$\boldsymbol{r}$点附近$\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}$体积元内的几率

$$\mathrm{d}u(\boldsymbol{p},t)=|c(\boldsymbol{p},t)|^2\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}$$

$\rightarrow$ 粒子在时刻t、动量在$\boldsymbol{p}$附近$\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}$体积元内的几率

求证：若 $\psi(\boldsymbol{r}, t)$已被归一化，则 $c(\boldsymbol{p}, t)$也满足归一化条件

证明

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|c(\boldsymbol{p},t)|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{p} = \int_{-\infty}^{+\infty} c^*(\boldsymbol{p},t)c(\boldsymbol{p},t)\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty}\left\{\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(\boldsymbol{r}',t)\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}'\right)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\right\}\left\{\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(\boldsymbol{r},t)\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}\right)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\right\}\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(\boldsymbol{r}',t)\psi(\boldsymbol{r},t)\left\{\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\right]\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}\right\}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(\boldsymbol{r}',t)\psi(\boldsymbol{r},t)\delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t)\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = 1$$

其中利用到

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[\pm\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\right]\mathrm{d}^3\boldsymbol{p} = \delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$$

$$\delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') = \delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z')$$

注意：

两不同波函数描述同一量子态的基本判据：

————由它们计算出的概率分布完全一样

波函数ψ乘上一个常数C与原波函数ψ描述同一状态，例如在两个不同位置的相对概率分布相同

$$\because \left|\frac{C\psi(\boldsymbol{r}_1,t)}{C\psi(\boldsymbol{r}_2,t)}\right|^2=\left|\frac{\psi(\boldsymbol{r}_1,t)}{\psi(\boldsymbol{r}_2,t)}\right|^2$$

特例：波函数乘上一个常数相位因子，与原波函数描述同一状态

ψ与$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}\psi$描述同一状态

$$\because \quad \left|\exp(\mathrm{i}\delta)\right|^2=1$$

5. 波函数的性质 （标准化条件）

根据玻恩的波函数统计解释，波函数应有如下性质：

1. ψ **单值**——概率密度确定性所要求

2. ψ **连续**—— $\psi, \dfrac{\partial\psi}{\partial x}, \dfrac{\partial\psi}{\partial y}, \dfrac{\partial\psi}{\partial z}$ 连续，

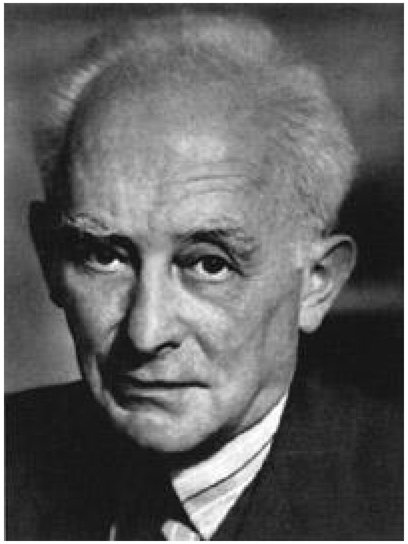
   甚至 $\dfrac{\psi'}{\psi} = (\ln\psi)'$ 均连续——波的一般性特点

3. ψ **有限**——概率不可能无穷大。

4. $|\psi|$ **平方可积**——归一化 $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 \, \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi \, \mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = 1$

$\psi(\boldsymbol{r}, t)$ 在同一时刻同一位置，只能取同一个确定的值

玻恩 (Max Born 1882～1970)



德国理论物理学家，量子力学的奠基人之一。与海森伯、约尔丹等人创立了矩阵力学。因对量子力学的基础性研究尤其波函数的统计解释，荣获**1954年度诺贝尔物理学奖**

1912年受聘为哥廷根大学无薪金讲师， 1933年希特勒拿权德国，玻恩由于犹太血统关系被剥夺了教授职位和财产。流亡英国

《玻恩-爱因斯坦书信集(1916-1955)：动荡时代的友谊、政治和物理学》
他们两人都很卓越和谦虚，而且无所畏惧地说出他们认为该说的话。在一个道德沦丧的时代，他们的生命闪现出一种强烈的美。

泡利、海森堡和黄昆（中国）都是他的学生。

例1： 有 $\psi = \sin x$ ，$0 \le x \le \pi$ ，求归一化波函数

解：设 $\psi_1 = A\sin x$ 由归一化条件 $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_1|^2 \mathrm{d}x = 1$

$$A^2 \int_0^{\pi} \sin^2 x\mathrm{d}x = A^2[\frac{1}{2}x - \frac{1}{4}\sin 2x]\Big|_0^{\pi} = 1$$

得归一化常数 $A = \sqrt{2/\pi}$

归一化波函数为 $\psi_1 = \sqrt{2/\pi}\sin x$，$0 \le x \le \pi$

例2：有 $\psi = \exp(-x^2/a^2)$，$-\infty < x < \infty$，$a > 0$，求归一化常数

解：设 $\psi_1 = A\exp(-x^2/a^2)$，有 $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_1|^2 \mathrm{d}x = 1$，即

$$A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-2x^2/a^2)\mathrm{d}x$$

$$= A^2 [\int_{-\infty}^{0} \exp(-2x^2/a^2)\mathrm{d}x + \int_{0}^{+\infty} \exp(-2x^2/a^2)\mathrm{d}x]$$

$$= 2A^2 \int_{0}^{+\infty} \exp(-2x^2/a^2)\mathrm{d}x$$

由积分公式 $\int_{0}^{+\infty} \exp(-bx^2)\mathrm{d}x = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{b}}$，得

$$2A^2 \int_{0}^{+\infty} \exp(-2x^2/a^2)\mathrm{d}x = 2A^2 \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{2}}a = 1$$

所以，$A = (\frac{2}{\pi})^{1/4} \frac{1}{\sqrt{a}}$

作 业

1. 下列一组波函数共描写粒子的几个不同状态?并指出哪几个波函数描写同一个状态。

$$\psi_1 = e^{i2x/\hbar}, \qquad \psi_2 = e^{-i2x/\hbar}, \qquad \psi_3 = 3e^{-i(2x+\pi\hbar)/\hbar},$$

$$\psi_4 = e^{i3x/\hbar}, \qquad \psi_5 = -e^{i2x/\hbar}, \qquad \psi_6 = (4+2i)e^{i2x/\hbar}.$$

2. 已知下列两个波函数

$$\psi_1(x) = \begin{cases} A\sin\dfrac{n\pi}{2a}(x-a) & |x| \le a \\ 0 & |x| > a \end{cases} \qquad n = 1, 2, 3, \cdots$$

$$\psi_2(x) = \begin{cases} A\sin\dfrac{n\pi}{2a}(x+a) & |x| \le a \\ 0 & |x| > a \end{cases} \qquad n = 1, 2, 3, \cdots$$

试判断: (1) 波函数$\psi_1(x)$ 和$\psi_2(x)$ 是否描述同一状态?

(2) 对 $\psi_1(x)$取 $n = \pm 2$ 两种情况,得到的两个波函数是否等价?

3. 论述什么是波函数的统计解释及其物理意义

课外阅读：位置空间和动量空间之间的对偶性？

●我们知道狭义相对论统一了时间和空间，把时间和空间变成不可分割的四维时空连续统。

Space $\boldsymbol{r}$ and Time t→Spacetime ($\boldsymbol{r}$, t)

●另一方面，在经典力学中，位置空间和动量空间构成相空间，一个系统在任意时刻的状态，对应相空间中的一点。但经典力学中，相空间只是位置空间与动量空间的直积空间/直和空间（物理学家与数学家称呼不尽相同）。哈密顿力学用微分几何描述时对应辛几何（辛流形，辛形式）。相空间可以被定义为位置空间的“余切丛”。

Position $\boldsymbol{r}$ and Momentum $\boldsymbol{p}$ → Phase space ($\boldsymbol{r}$, $\boldsymbol{p}$)

●量子力学进一步把位置空间与动量空间关联起来。同一个粒子的位置和动量是一对正则共轭量，满足正则对易关系。更一般地，场的广义坐标与广义动量构成一对正则共轭量，由它们之间满足的正则对易关系出发，可以给出正则量子化内容。在量子力学中，一对正则共轭量不能同时确定，存在测不准关系。因此二者之间存在很强的约束。

●N粒子系统的一个量子力学状态与相空间中的一个体积大小为h^{3N}的相格对应（不考虑自旋等内部自由度时），而不再是与相空间中的一个点对应。再考虑系统状态处于不同能级的概率不同，并结合全同粒子对称性原理，就可以给出量子统计物理的基本表述。

以上仅供对物理有兴趣的同学课外阅读。但如果想理解以上全部文字，需要学过微分几何和量子场论