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Schrödinger方程

第二讲：态叠加原理

一：量子态

1. 区分经典体系和量子体系的判据

德布罗意波体现了物质的波粒二象性

$$\begin{cases} \nu = \dfrac{E}{h} \\ \lambda = \dfrac{h}{p} \end{cases}$$

$$h = 6.62559(16) \times 10^{-34}\ J \bullet s$$

波动性和粒子性通过普朗克常数(h)相联系。

因此：当物质系统的每一个可观测物理量用普朗克常数来量度都显得非常大时，这个系统就是经典体系。反之，若系统的某个可观测量，h起重要作用，这个系统就是量子系统。

波粒二象性起重要作用的体系是量子系统！

2. 量子系统的状态用波函数描述，称为：量子态

经典体系的运动状态具有**确定性**，遵守**经典因果律**。

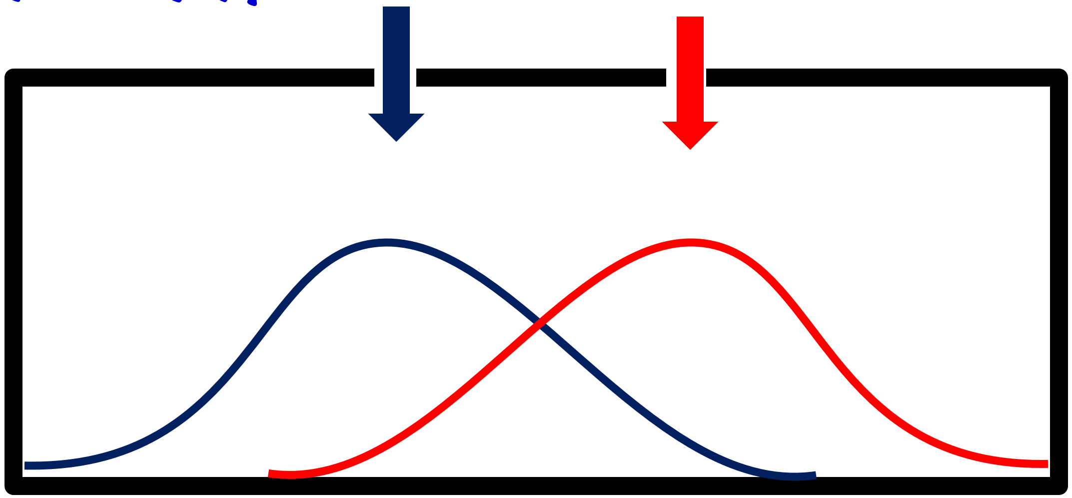
经典粒子在每一个给定时刻同时有确定的位置和动量，有确定的运动轨道，由经典物理学定律，原则上可以知道粒子每一时刻的确切运动状态，并可以测量代表这个运动状态的各种物理量（位置，速度，加速度，动量，能量等）。

量子体系中波粒二象性起重要作用，不遵守**经典因果律**，遵守**量子力学统计规律**

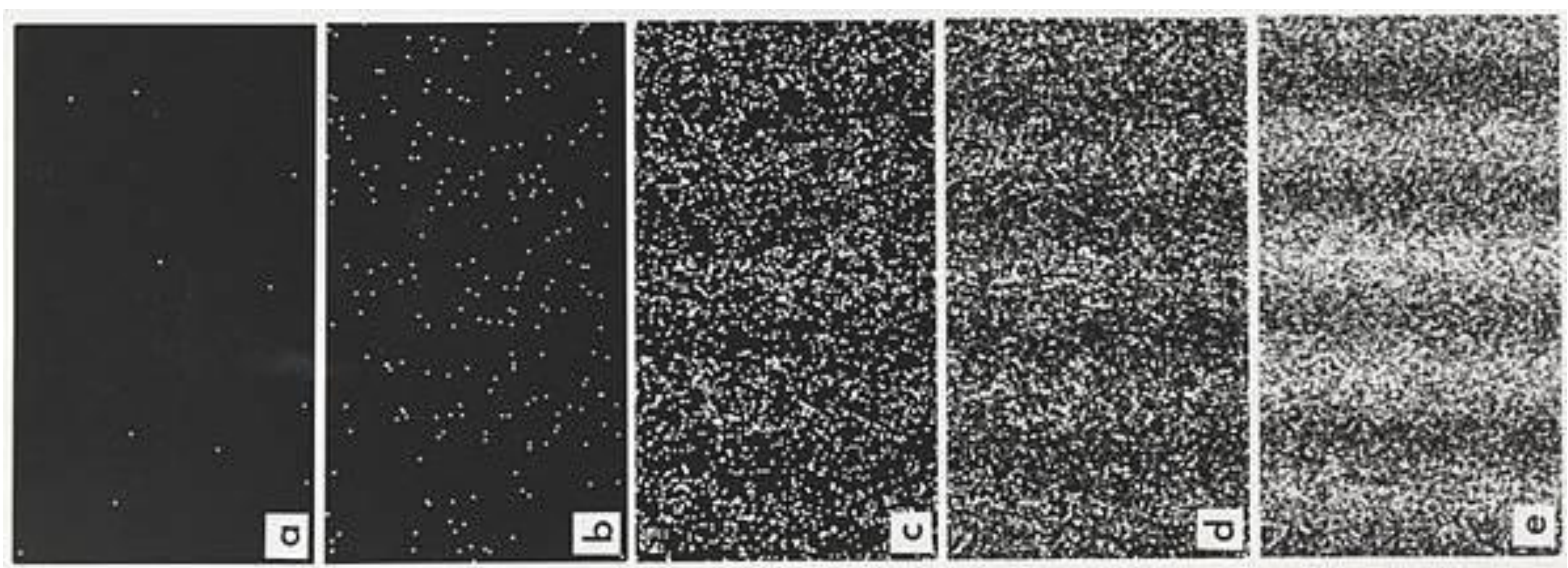
量子体系的运动具有**不确定性**，用概率波函数描述其状态。在同一时刻，粒子的力学量如坐标、动量等可以有许多可能值。只有对其进行多次测量，测量的统计平均值才具有确定性。微观粒子的这种量子化的运动状态称为**量子态（quantum state）**。因此，描述其运动状态的波函数也称为**态函数**，服从**态叠加原理**

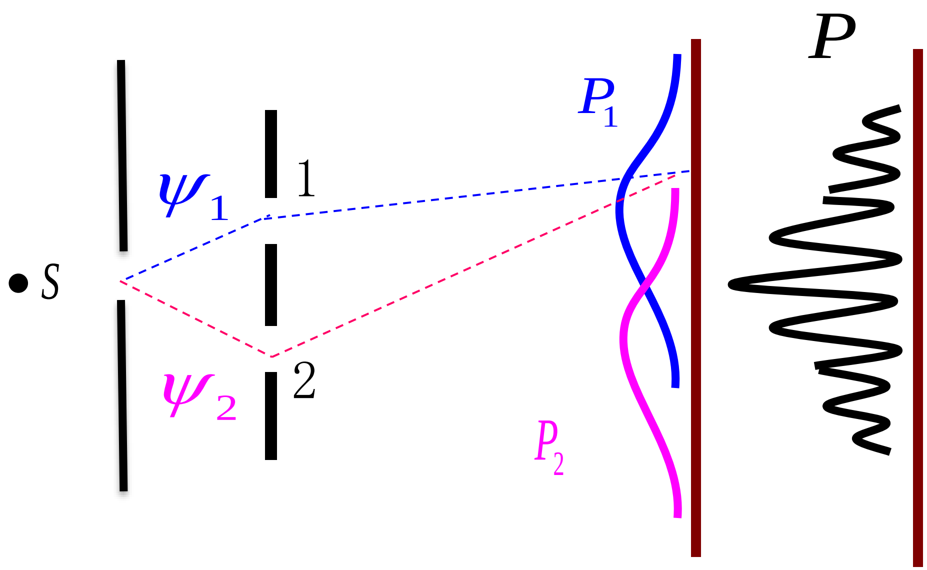
3. 态叠加原理的引入

沙子：



电子：





(1) 经典条件下：

$$P_c = P_1 + P_2$$

很明显，是概率叠加

(2) 量子条件下：

$$P \neq P_1 + P_2$$

$$P \propto |\psi|^2 = |\psi_1 + \psi_2|^2$$

即：经典条件下概率相加；量子条件下概率幅相加！

$$\psi = \psi_1 + \psi_2$$

电子双缝衍射实验说明：

当两个缝都开着时，电子既不处在 ψ_1态，也不处在 ψ_2态，而是处在 ψ_1 和 ψ_2 的线性叠加态 $\psi = \psi_1 + \psi_2$。可见，若 ψ_1和 ψ_2 是电子的可能状态，则其线性叠加态也是其可能状态。

叠加态的概率计算：

干涉项

$$w = |\psi|^2 = |\psi_1 + \psi_2|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + \boxed{\psi_1^* \psi_2 + \psi_1 \psi_2^*}$$

电子穿过狭缝 1 出现在 P 点的概率密度

电子穿过狭缝 2 出现在 P 点的概率密度

当两缝的几何参数不同或电子束相对位置不完全对称时，叠加态为 $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$，其概率为

$$w = |\psi|^2 = |c_1|^2|\psi_1|^2 + |c_2|^2|\psi_2|^2 + \underbrace{\boxed{c_1^*c_2\psi_1^*\psi_2 + c_1c_2^*\psi_1\psi_2^*}}_{\text{干涉项}}$$

4. 态叠加原理的表述

1. 若 $\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_n$ 是粒子的可能状态，它们的线性叠加也是粒子的可能状态

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \cdots + c_n\psi_n = \sum_k c_k\psi_k$$

2. 当体系处于 ψ 态时，发现体系处于 ψ_k 态的概率是 $|c_k|^2 \quad (k = 1, 2, \cdots, \cdots, n,)$，并且有：

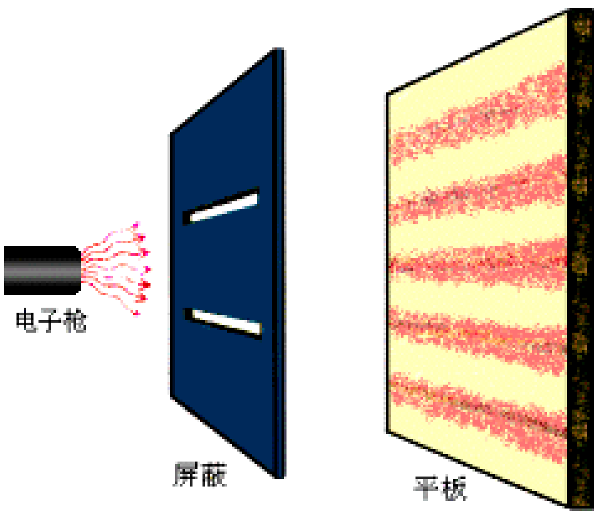
$$\sum_{k=1}^{n} |c_k|^2 = 1$$

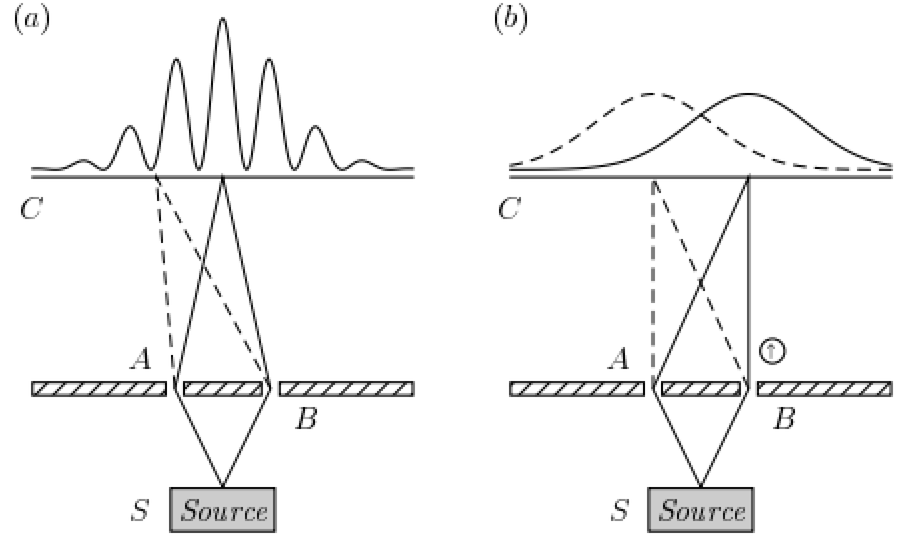
推论：若粒子的所有基本状态都知道，则其任一运动状态必然是这些基本状态的某种线性叠加。

二、量子测量与量子力学的诠释

电子双缝衍射实验的升级版

原来的结论：一个电子同时穿过两个狭缝，并与自己发生干涉，形成明暗条纹，如图（a)所示。





升级：如果在狭缝上安装上电子探测器，探测电子到底是如何通过两狭缝的。

结果发现：（1）每一次测量都只能测得电子要么从第一狭缝通过，要么从第二狭缝通过。（2）探测器越灵敏，干涉条纹越模糊，当探测器能长时间地保持几乎可以完全判断电子是通过哪条缝时，干涉条纹消失！,如图(b)所示

对实验的解释：

1.测量是很重要的

探测前：电子处于叠加态 $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$，

测量时：测得电子通过缝-1（即处于ψ_1 态）的概率为 $|c_1|^2$

测得电子通过缝-2（即处于ψ_2 态）的概率为$|c_2|^2$

测量后：如果测量时，电子处于ψ_1态，则测量后电子依然处于ψ_1 态，不再处于叠加态 $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ ，反之依然。这样的电子不能形成干涉条纹！

当探测器不很灵敏时，只是少数电子被测量，没有被测量的电子依然处于叠加态（能干涉），因此干涉条纹变**模糊**；

当探测器很灵敏时，没有电子不被测量，**不再有电子处于叠加态**，因此干涉条纹完全消失！

2. 测量导致波函数坍塌（collapse）

量子测量导致量子体系的状态发生改变，波函数从原来的 $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ 坍塌成 ψ_1，或 ψ_2，并且在测量后继续处于坍塌之后的这种状态。

态叠加原理的概括性讲述

若体系具有一系列不同的可能状态：

$$\{\varphi_1, \ \varphi_2, \ \cdots\}$$

则它们的线性组合：

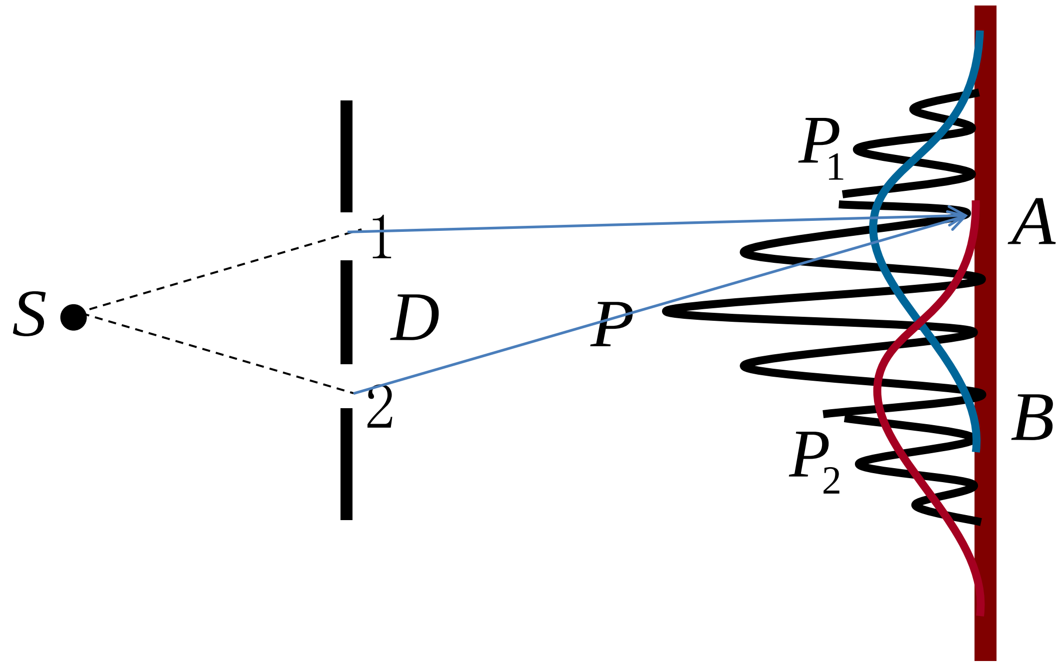
$$\boxed{\psi = \sum_n c_n \varphi_n}$$

也是该体系的一个可能的状态，这里 c_n 为任意复常数。当体系处于状态ψ时，通过多次反复测量会发现，该体系处于φ_n状态的概率为$|c_n|^2$ $(n=1, 2, 3\ldots)$。

注意：若体系的各个可能状态之间是连续变化的，则应该用积分代替求和

$$\boxed{\psi = \int c_a \varphi_a \, \mathrm{d}\, a}$$

一个实例：仍用电子双缝干涉说明态的叠加原理



- 通过单缝1的电子其量子态用φ_1表示；
- 通过单缝2的电子其量子态用φ_2表示；
- 当双缝同时打开时，通过双缝的电子量子态为 $\psi = c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2$

当双缝几何结构完全一样、且相对于电子源和接收屏完全对称时，则有c_1=c_2（此时可以取为1）；但此时对于干涉条纹上某一点处，参与叠加的φ_1和φ_2不相同（经历的路径不同）；尽管如此，可以把$c_1\varphi_1$统一写成φ_1，把$c_2\varphi_2$统一写成φ_2。
这里为了讲解态叠加原理才故意写成上面这样

双缝同时打开时，电子的概率分布为：

$$\psi = c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2 \Rightarrow$$

$$P = |\psi|^2 = \psi^*\psi = (c_1^*\varphi_1^* + c_2^*\varphi_2^*)(c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2)$$

$$= |c_1\varphi_1|^2 + |c_2\varphi_2|^2 + c_1^* c_2 \varphi_1^* \varphi_2 + c_1 c_2^* \varphi_1 \varphi_2^*$$

$$= P_1 + P_2 + \text{干涉项}$$

在采用Dirac符号之后，可以采用状态矢量的概念，更为深入讲解态叠加原理。可以通过重新定义c_1和c_2，让量子态φ_1和 φ_2是归一化的

$$|\varphi_1|^2 = |\varphi_2|^2 = 1$$

量子力学中态的叠加原理量子力学的又一个基本假设。

1. 态叠加原理的表述

1. 若 $\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_n$ 是量子力学系统的可能状态，它们的线性叠加也是系统的一个可能状态

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \cdots + c_n\psi_n = \sum_k c_k\psi_k$$

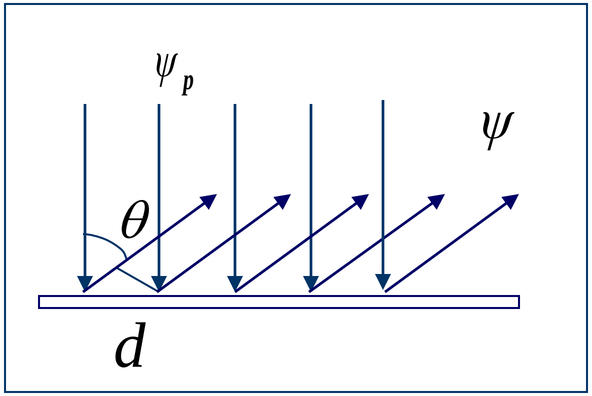
2. 当体系处于 ψ 态时，发现体系处于 ψ_k 态的概率是 $|c_k|^2$ $(k = 1,\ 2,\ \cdots,\ n)$，并且有：

$$\sum_{k=1}^{n} |c_k|^2 = 1$$

2. 态叠加原理的应用

根据态叠加原理，如果能找到一个量子体系的一组完备“基函数”，比如$\{\psi_n\}$.那么这个体系处于任一状态的波函数都可以得到。（基函数满足归一化条件）

例如：电子在晶体表面的衍射实验中，反射回来的电子其动量有一定的分布。一个确定动量的自由电子波，其函数是平面波：



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

反射回来的电子，其波函数必然是各种动量的平面波的线性叠加

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\sum_{\boldsymbol{p}}c(\boldsymbol{p})\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r},t)=\int c(\boldsymbol{p},t)\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}$$

式中：$\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})\equiv\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\exp(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})$

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

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

上式说明：任一波函数都可以看作是动量不同的所有平面波（基函 数）的线性叠加

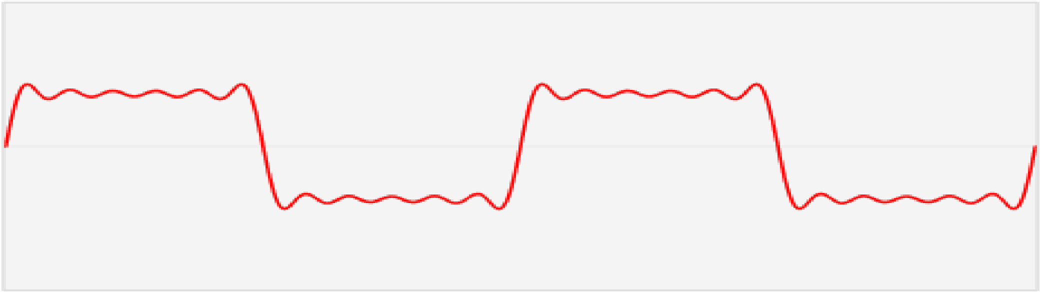
对上式作Fourier变换，得到的是以动量为自变量的波函数

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

结论：对于处于某一量子状态的粒子，其状态可以用自变量不同的多个波函数进行描述。并且这些波函数可以通过Fourier变换或者逆Fourier转换相互联系。

Fourier变换

时域信号是由很多不同频率的波叠加形成的。任何一个实际测得的时域信号，都可以展开成多个**不同频率**、**不同初相**和**不同振幅**的正弦波的叠加。信号中的Fourier变换，实现的是时域与频率之间的变换！



Fourier变换基本公式：

$$F(u) = (\frac{a}{2\pi})^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\mathrm{i}aux) f(x) \mathrm{d}x$$

量子力学中的取：$a = 1/\hbar$

$$\Psi(p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \exp(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} px) \mathrm{d}x$$

任何一个位置空间波函数，都可以表示成不同动量平面波的叠加。利用Fourier变换实现的是空间域与动量域之间的变换

$$\because \quad \Psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}) \equiv \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}\right), \text{ 有}$$

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

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

Fourier变换：

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

$$\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z$$

3、量子力学之Copenhagen诠释

- **波函数的统计解释：**

  不对应空间中某种实在的物理场，只是概率幅

- **态叠加原理：**

  不是概率叠加，而是概率幅（波函数）的叠加

- **量子测量：**

  测量对体系产生不可逆转的影响。不去观测，说物体具有什么性质是没有意义的，只有测量才导致客观实在。

- **互补原理**

  各种测量结果互补地一同体现着物体的完整属性

- **不确定性原理**

薛定谔猫

EPR佯谬

EPR佯谬

爱因斯坦：

“我不能相信，仅仅是因为看了它一眼，一只猫就能使宇宙发生了如此剧烈的改变”。

←→ 多世界理论

“你是否相信，月亮只有在看着它的时候才真正存在？

←→ 量子测量

“上帝不玩弄骰子”←→ 波函数的统计解释

“爱因斯坦，你不要告诉上帝怎么做，好不？”

--玻尔

局域实在论：

局域论：

这种鬼魅般的超距作用是不存在的，因为它违反了信息传递速度的上限（光速c）

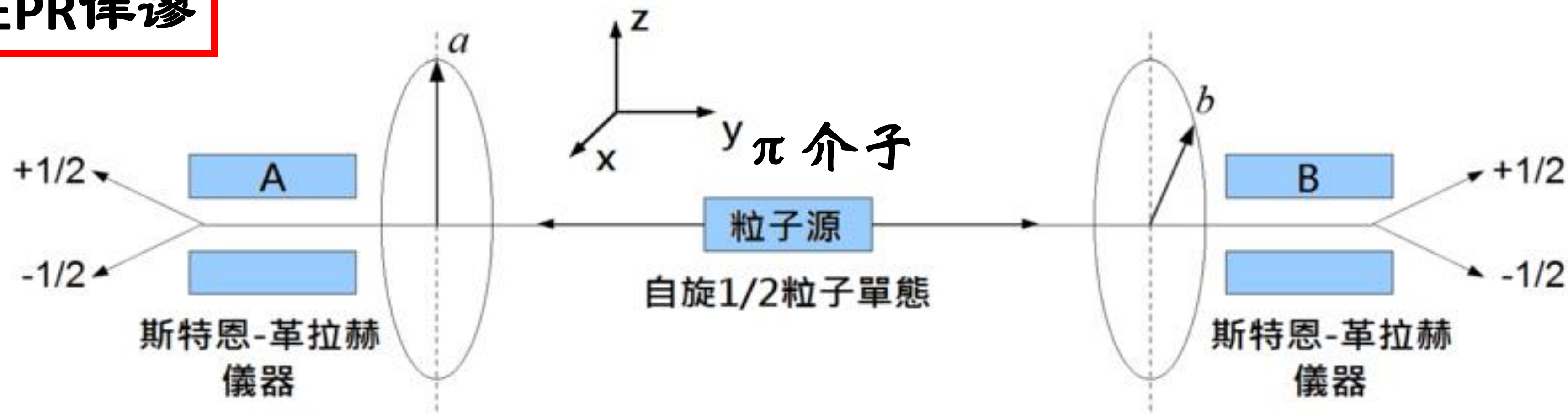
实在论：

真实的存在，是独立于人类感官、信仰、概念与想法之外的，是不以人的意志为转移的。

实验观测到的现象必出自某种物理实在，与观测无关。

“月亮依旧存在，即使无人赏月”

EPR佯谬



假设一个零自旋中性π介子衰变成一个电子与一个正电子，它们构成一个系统。这个系统的两个粒子各自朝着相反方向移动。设电子移动到区域A，观察者“Alice”观测到电子沿着z轴的自旋为+1/2和-1/2的概率各为50%。设想爱丽丝测量的为+1/2，那么“Bob”在测得B区域正电子沿Z轴的自旋为-1/2的概率是100%。

正负电子对在产生前后，保持能量动量和角动量守恒。

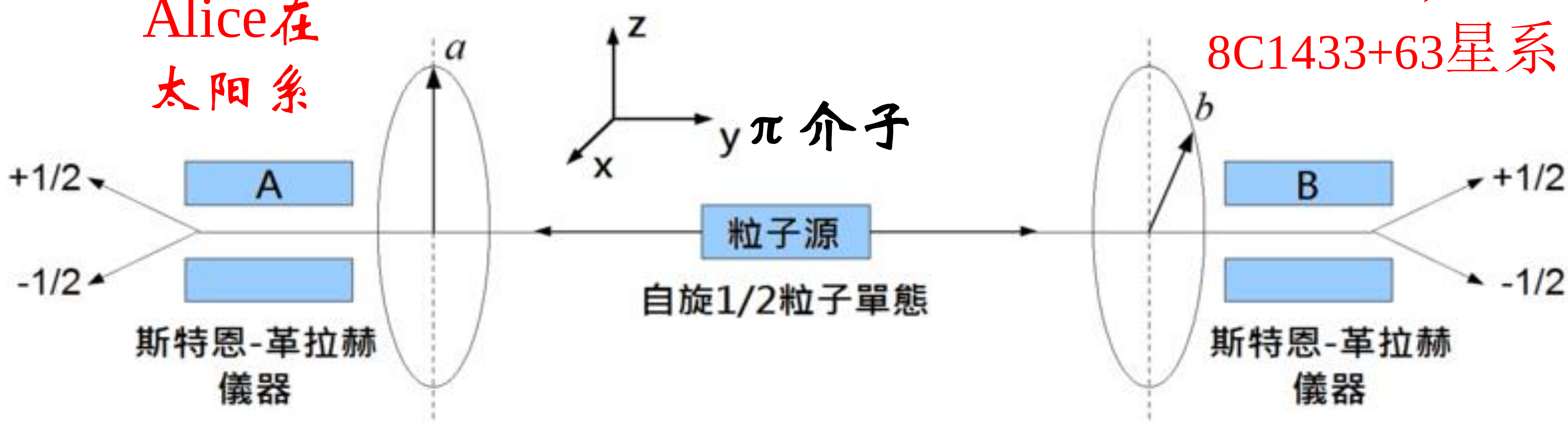
正负电子对构成一个量子力学系统，其波函数为

$$\begin{cases} \Psi = C_1\psi_A(x_A,\uparrow,t)\psi_B(x_B,\downarrow,t)+C_2\psi_A(x_A,\downarrow,t)\psi_B(x_B,\uparrow,t) \\ |C_1|^2+|C_2|^2=1 \end{cases}$$

Alice与Ｂob相距150亿光年

Alice在太阳系

Ｂob在8C1433+63星系



Alice测量纠缠粒子对中的粒子A自旋状态

量子关联

Ｂob测量纠缠粒子对中的粒子B自旋状态

$$\Psi = C_1\psi_A(x_A,\uparrow,t)\psi_B(x_B,\downarrow,t)+C_2\psi_A(x_A,\downarrow,t)\psi_B(x_B,\uparrow,t)$$

$$\text{纠缠态}\,\Psi \xrightarrow[\text{波包坍塌}]{\text{测量}} \begin{cases}\psi_A(x_A,\uparrow,t)\psi_B(x_B,\downarrow,t)\\ C_2\psi_A(x_A,\downarrow,t)\psi_B(x_B,\uparrow,t)\end{cases}$$

补：δ函数与平面波归一化

设想一条质量为1，长为$2l$的均匀直线，显然直线的线密度为$\rho=1/2l$；若将直线的中点放置于坐标轴的原点，有：

$$\rho(x)=\begin{cases}\dfrac{1}{2l}(-l\le x\le l)\\ 0(x<-l,x>l)\end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\rho(x)dx=1$$

考虑$l\to 0$的情况，并记所得函数为$\delta(x)$

$$\delta(x)=\begin{cases}\infty(x=0)\\ 0(x\ne 0)\end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x)dx=1$$

可以证明$\delta(x)=\delta(-x)$与1构成Fourier变换对：

The fourier transformation of $\delta(x)$ is

$$c(p)=\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x)\exp(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px)\mathrm{d}x$$

$$=\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x-0)\exp(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px)\mathrm{d}x=\exp(0)=1,$$

then the inverse fourier transformation of $c(p)$ is

$$\delta(x)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}c(p)\exp(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px)\mathrm{d}p=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px)\mathrm{d}p,$$

Moreover,

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x)\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(-x)\mathrm{d}x=1\Rightarrow\delta(x)=\delta(-x)\Rightarrow$$

$$\delta(x)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(\pm\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px)\mathrm{d}p$$

作变量代换$x \to x - x_0$，可得：

$$\delta(x-x_0)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp[\pm\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p(x-x_0)]\mathrm{d}p$$

同理，对于动量空间中的δ函数，有：

$$\delta(p-p')=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp[\pm\frac{\mathrm{i}}{\hbar}x(p-p')]\mathrm{d}x$$

★ 自由粒子平面波的归一化问题

自由粒子的波函数不能按照传统办法归一化，得另外定义

例3：已知平面波 $\psi_{p_x} = A\exp[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p_x x - Et)]$，求归一化常数

解：
$$\int_{-\infty}^{\infty}\left|\psi_{p_x}(x,t)\right|^2 \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*_{p'_x}(x,t)\psi_{p_x}(x,t)\mathrm{d}x$$

$$= |A|^2 \boxed{\int_{-\infty}^{\infty}\exp[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p_x - p'_x)x]\mathrm{d}x}$$

$$= |A|^2 2\pi\hbar\delta(p_x - p'_x) = \delta(p_x - p'_x)$$

故归一化常数 $A = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$

归一化的平面波：$\psi_{p_x} = (1/\sqrt{2\pi\hbar})\exp[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(p_x x - Et)]$

作业：

1. 试述如何用态叠加原理描述一个粒子的所有可能运动状态

2 .试用波粒二象性解释光的双缝干涉实验

3. 设 ϕ_1, ϕ_2 是体系的两基本状态，试问以下两个叠加态相同吗，为什么?

$$\psi_1 = \phi_1 + \phi_2$$
$$\psi_2 = \phi_1 - \phi_2$$

Bohr对波粒二象性的认识：互补原理（complimentarity principle）

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

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