

第十三章 量子物理学基础

13.1 黑体辐射 普朗克量子化基础

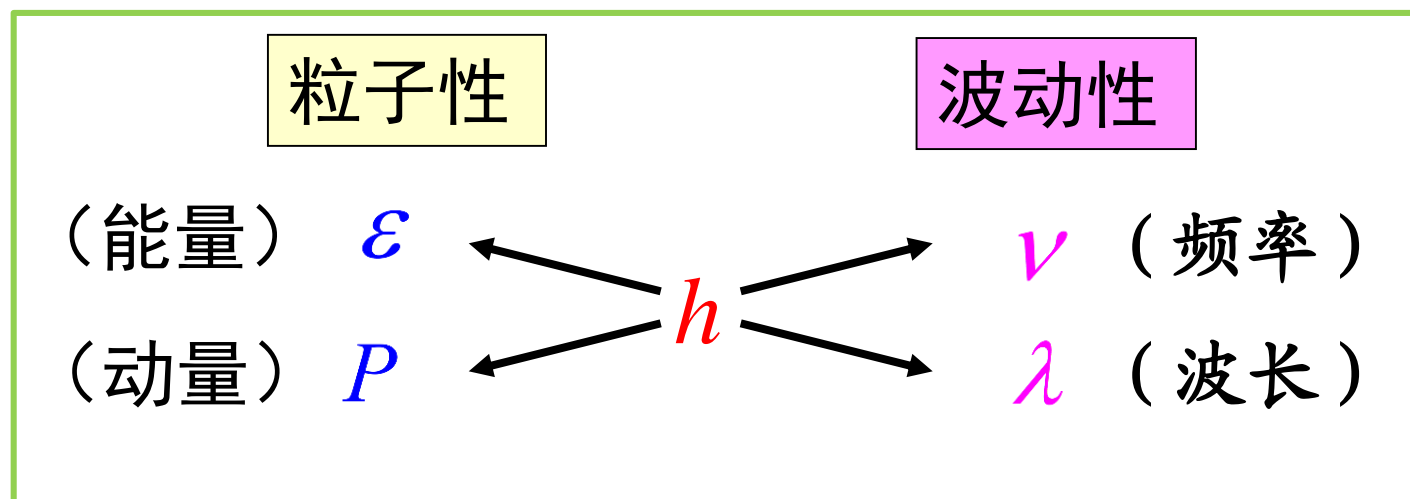
13.2 光的波粒二象性

13.3 量子力学引论

13.4 薛定谔方程

光具有波粒二象性

光量子假说： $\varepsilon = h\nu$ $p = \frac{h}{\lambda}$



自然界的对称性

光(波)具有粒子性



实物粒子也具有波动性

一、德布罗意的物质波理论

1924.11.29, 德布罗意把题为“量子理论的研究”的博士论文提交给了巴黎大学。

不仅光具有波粒二象性, 而且一切实物粒子(静止质量 $m_0 \neq 0$ 的粒子)也具有波粒二象性。

德布罗意关系式:

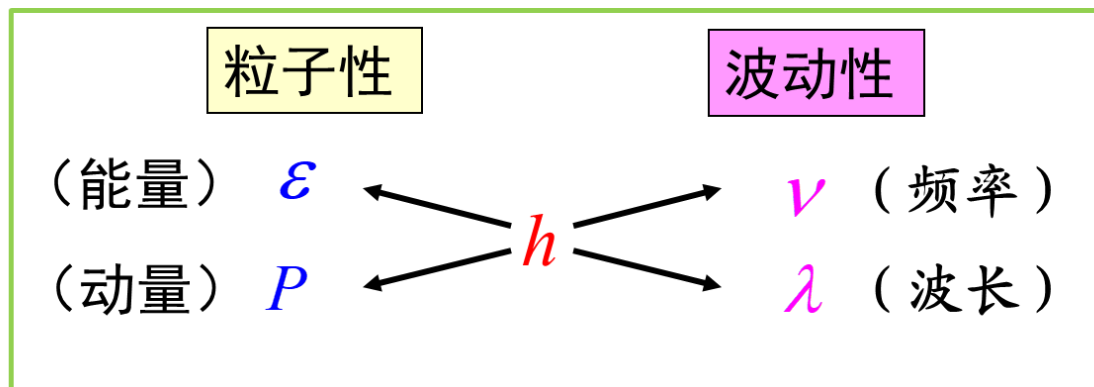
$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

$$\nu = \frac{E}{h} = \frac{mc^2}{h}$$



L.V. de Broglie 法,
(1892-1986)
1924年提出假设,
1929年诺奖

与实物粒子相联系的波称为物质波, λ -- 德布罗意波长。



例： $m = 0.01\text{kg}$, $v = 300\text{m/s}$ 的子弹

$$\lambda = \frac{h}{P} = \frac{h}{mv} = \frac{6.63 \times 10^{-34}}{0.01 \times 300} = 2.21 \times 10^{-34} \text{m}$$

实物粒子的德布罗意波长非常短！

二、实验验证

1. 戴维逊—革末实验（1927年）

(1) 原理 电子的波长： $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE_k}}$ （电子 $v \ll c$ ）

电子动能： $E_k = \frac{1}{2}mv^2 = eU$ 加速电压 $U = 100\text{V}$

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\sqrt{2emU}} = \frac{1.23 \times 10^{-9}}{\sqrt{U}} = 0.123 \text{nm}$$

电子波长与 X 射线波长相当，因此可以用晶体衍射的方式验证物质波的存在。

(2) 实验装置

假如电子具有波动性

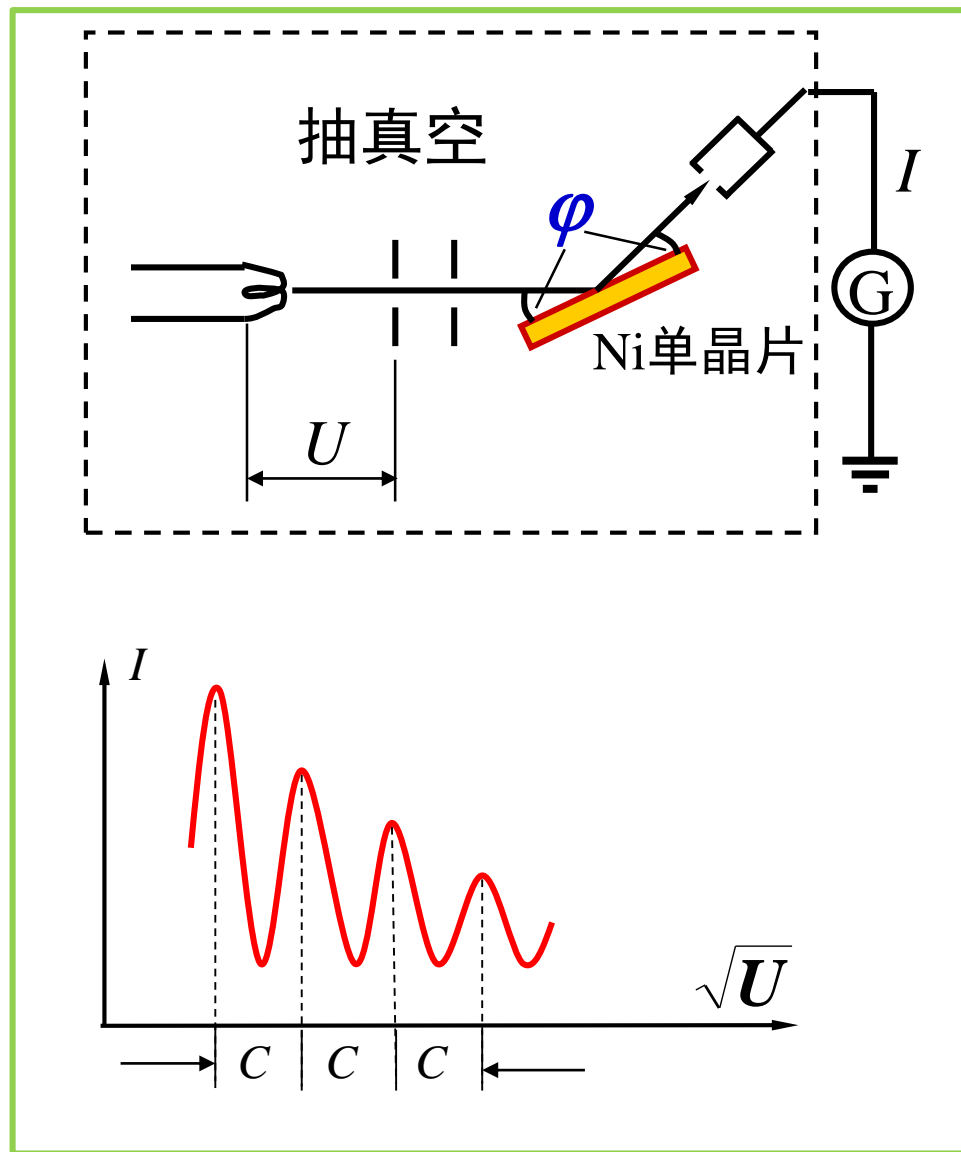
$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2meU}}$$

当满足 $2d\sin\varphi = k\lambda$
($k = 1, 2, 3\dots$) 时,

$$\sqrt{U} = \frac{k \cdot h}{2d \sin \varphi \sqrt{2em}} = k \cdot C$$

当 $\sqrt{U} = C, 2C, 3C\dots$ 时,

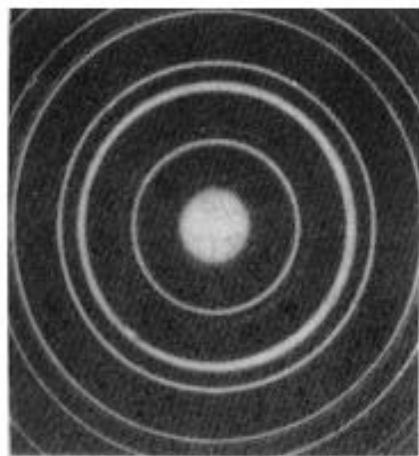
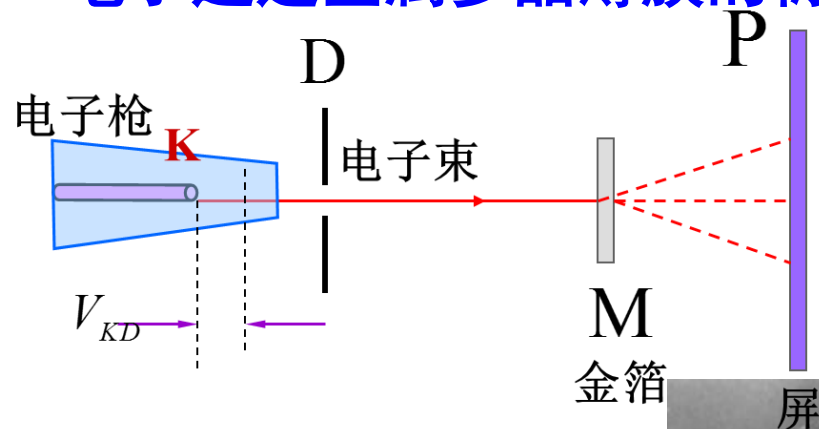
可观察到电流 I 的极大 (即衍射极大) 。



2. G.P.汤姆孙实验 (1927年)

G.P.汤姆孙，J.J汤姆孙(电子的发现者，1906年获诺贝尔物理学奖)之子

电子通过金属多晶薄膜的衍射实验。



衍射图象

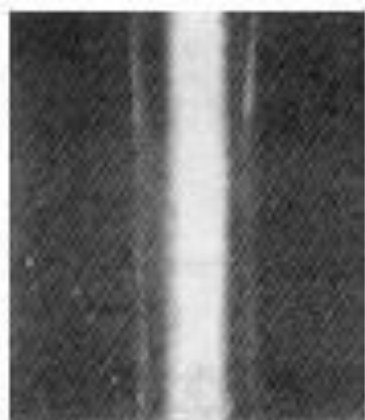


戴维逊(左)和革末在贝尔实验室，
电子衍射在这里首次发现

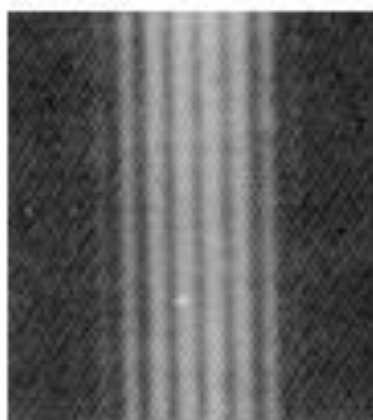
G. P. Thomson
(1892~1975)，英
国物理学家，
1937年诺贝尔物
理奖得主。

3. 琼森(Jonsson)实验 (1961)

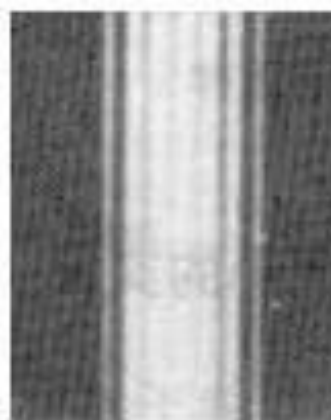
大量电子的单、双、三、四缝衍射实验



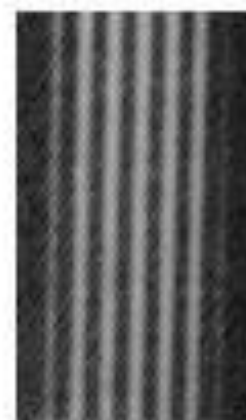
单 缝



双 缝



三 缝



四 缝

后来实验又验证了：质子、中子和原子、分子 等实物粒子都具有波动性，并都满足德布罗意关系。

宏观粒子也具有波动性

h 极小 \rightarrow 宏观物体的波长小得实验难以测量

三、波函数及其统计解释

1. 波函数

一个沿 x 方向作匀速直线运动的自由粒子(能量为 E , 动量为 p_x)

由德布罗意关系式:

$$E = h\nu = \frac{h}{2\pi} 2\pi\nu = \hbar\omega$$
$$p_x = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi} \cdot \frac{2\pi}{\lambda} = \hbar k$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

自由粒子能量 E , 动量 p_x 均不变,

$$\because E = \text{const}, \quad P_x = \text{const} \quad \therefore \nu = \frac{E}{h}, \quad \lambda = \frac{h}{p} \quad \text{恒定!}$$

故, 自由粒子的波是平面单色波!

$$\text{其波函数为: } \Psi = \Psi_0 \cos(\omega t - \frac{2\pi}{\lambda} x) = \Psi_0 \cos(\frac{E}{\hbar} t - \frac{p_x}{\hbar} x)$$

其波函数为：
$$\Psi = \Psi_0 \cos\left(\frac{E}{\hbar}t - \frac{p_x}{\hbar}x\right) = \Psi_0 \cos\left[-\left(\frac{E}{\hbar}t - \frac{p_x}{\hbar}x\right)\right]$$

写成

复数形式：

$$\Psi = \Psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - p_x x)}$$

$$i = \sqrt{-1}$$

(三维)自由粒子波函数
$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p} \cdot \vec{r})}$$

物质波的强度 $|\Psi|^2 = \Psi \cdot \Psi^*$ 怎样理解物质波？

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

2. 波函数的玻恩统计诠释

玻恩 (M.Born) 英籍德国人
(1882—1970)



1926年，对波函数作出的统计解释。

1954年，获诺贝尔物理学奖

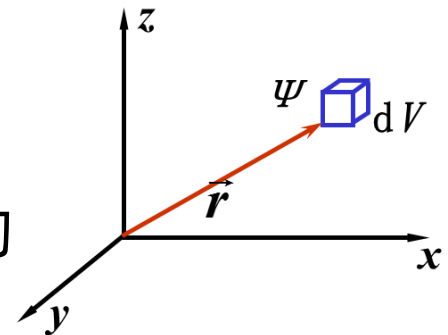
- ① 一个微观粒子在时刻 t 状态，用波函数 $\Psi(\vec{r}, t)$ 完全描述，
——波函数也称为态函数。
- ② 波函数本身 $\Psi(\vec{r}, t)$ 没有直接的物理意义。

③ 波函数的模方

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \Psi(\vec{r}, t) \cdot \Psi^*(\vec{r}, t)$$

表示 t 时刻，在 \vec{r} 处附近单位体积中发现粒子的概率，称为概率密度。

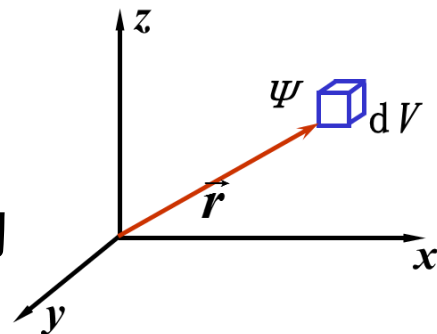
——量子力学基本原理之一。



③波函数的模方

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \Psi(\vec{r}, t) \cdot \Psi^*(\vec{r}, t)$$

表示 t 时刻，在 \vec{r} 处附近单位体积中发现粒子的概率，称为概率密度（概率幅）。



——量子力学基本原理之一

对于概率分布来讲，重要的是相对概率分布

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

$\psi(\vec{r}, t)$ 和 $C\psi(\vec{r}, t)$ 描写同一个概率波（物质波）

3. 波函数的性质

(1) 波函数的标准化条件

波函数必须是单值,有限,连续的函数

- ① **单值性** 任意时刻粒子在空间出现的概率只可能有一个
- ② **有限性** 粒子在空间某处出现的概率不能无限大
- ③ **连续性** 概率不能在某处发生突变

(2) 波函数的归一化条件

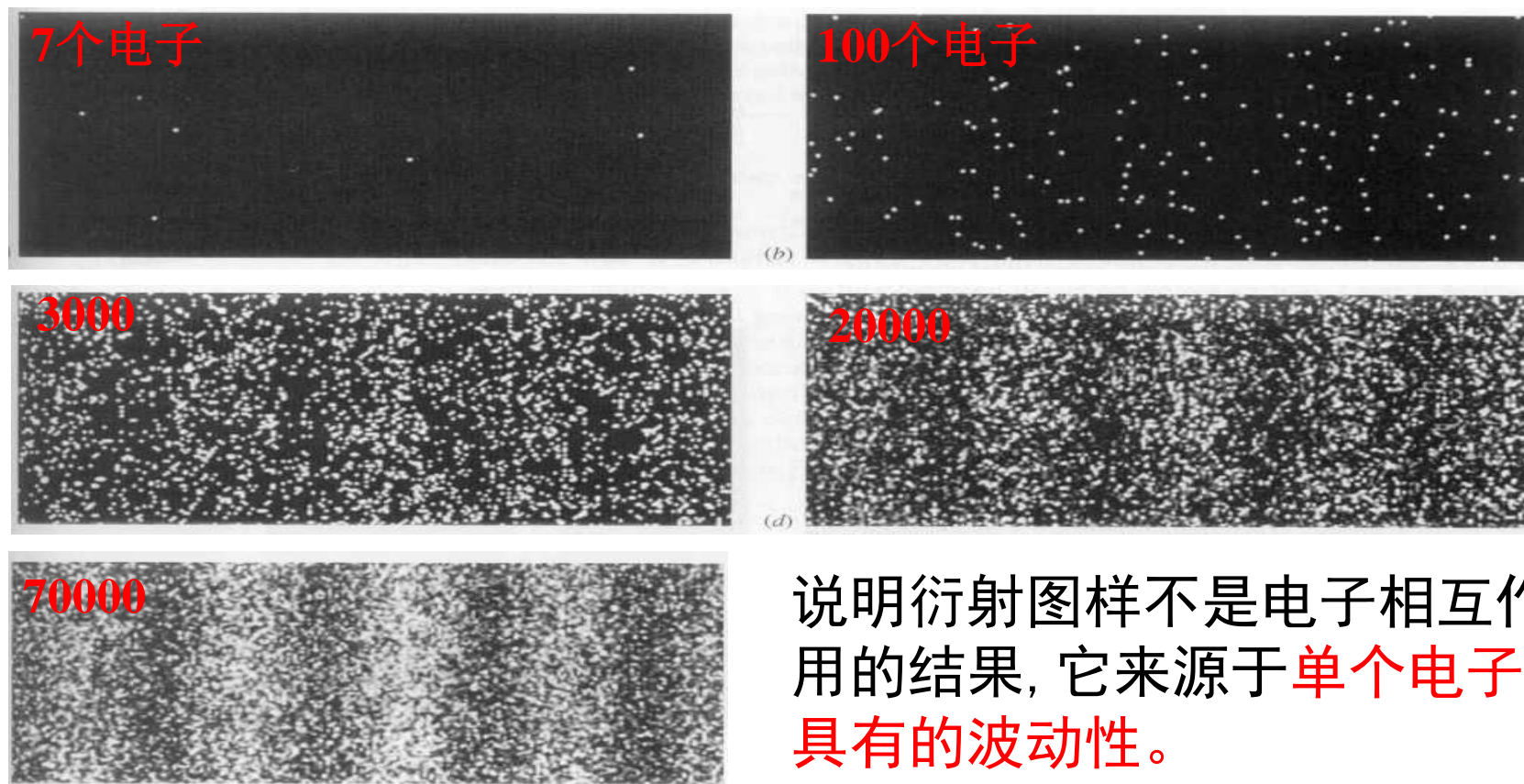
$$\int_{\Omega} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV = 1 \quad \Omega \text{——全空间}$$

4. 进一步理解微观粒子的波粒二象性

1949年，前苏联物理学家费格尔曼做了一个非常精确的

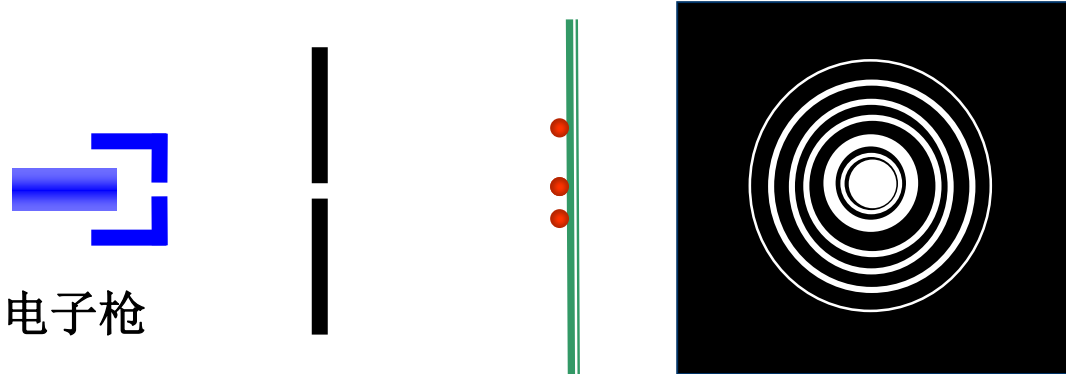
单电子双缝衍射实验

电子几乎是一个一个地通过双缝，底片上出现一个一个的感光点。（显示出电子具有粒子性）



说明衍射图样不是电子相互作用的结果，它来源于单个电子具有的波动性。

单电子小孔衍射实验



	粒子的观点	波动的观点
极大值	较多电子到达	波的强度大, Ψ_0^2 或 $ \Psi ^2$ 大
极小值	较少电子到达	波的强度小, Ψ_0^2 或 $ \Psi ^2$ 小

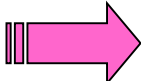
电子在某处出现的概率正比于该处 Ψ_0^2 或 $|\Psi|^2$

尽管单个电子的去向具有不确定性，
但一定条件下（如双缝），它在空间某处出现的概率是可以确定的。

经典力学

经典粒子：

给定初始条件，其位置、动量及运动轨迹等就具有确定的数值。

$\vec{r} = \vec{r}(t)$  粒子的轨迹

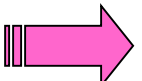
经典波：

某种实在物理量随时间和空间作周期性变化，满足叠加原理，可产生干涉、衍射等现象

量子力学

粒子性：

与物质相互作用的“颗粒性”或“整体性” 在空间以概率出现，没有确定的轨道

$|\Psi(\vec{r}, t)|^2$  粒子出现的概率

波动性：

不代表实在物理量的波动。在空间传播有“可叠加性”，有“干涉”、衍射”、等现象

1. 如果两种不同质量的粒子，其德布罗意波长相同，则这两种粒子的

(A) 动量相同 (B) 能量相同 (C) 速度相同 (D) 动能相同

2. 将波函数在空间各点的振幅同时增大 D 倍，则粒子在空间的分布概率将

(A) 增大 D^2 倍 (B) 增大 $2D$ 倍 (C) 增大 D 倍 (D) 不变

3. 波长 $\lambda = 300\text{nm}$ 的光沿 x 轴正向传播，若光的波长的不确定量 $\Delta\lambda / \lambda = 10^{-6}$ ，则利用不确定关系式可得光子的坐标的不确定量至少为多少？

1. 如果两种不同质量的粒子，其德布罗意波长相同，则这两种粒子的

(A) 动量相同 (B) 能量相同 (C) 速度相同 (D) 动能相同

[A]

2. 将波函数在空间各点的振幅同时增大 D 倍，则粒子在空间的分布概率将

(A) 增大 D^2 倍 (B) 增大 $2D$ 倍 (C) 增大 D 倍 (D) 不变

[D]

3. 波长 $\lambda = 300\text{nm}$ 的光沿 x 轴正向传播，若光的波长的不确定量 $\Delta\lambda / \lambda = 10^{-6}$ ，则利用不确定关系式可得光子的坐标的不确定量至少为多少？

四、海森伯不确定性关系

1. 引言

经典物理：宏观粒子

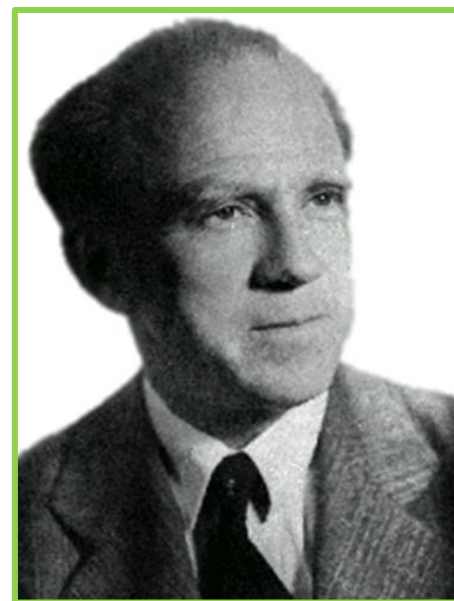
由 $t = 0$ 时 粒子坐标、动量 \Rightarrow 任意时刻 粒子坐标、动量
 \Rightarrow 粒子的轨迹

量子物理：微观粒子

波动性使微观粒子的坐标和动量（或能量和时间）
不能同时取确定值。

1927年，海森伯（W. Heisenberg）
首先提出了微观粒子的不确定关系

德国理论物理学家。他于1925年为量子力学的创立作出了最早的贡献，而于25岁时提出的不确定关系则与物质波的概率解释一起奠定了量子力学的基础。为此，他于1932年获得诺贝尔物理学奖金。



2. 不确定关系的表述和含义

(1) 坐标与动量不确定关系

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

微观粒子的坐标 与该方向上的动量不能同时确定！

(2) 能量与时间不确定关系

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

存在不确定关系的一对物理量称为共轭物理量，

一对共轭物理量的不确定量的乘积 $\geq \hbar / 2$

3. 坐标与动量不确定关系的简单验证

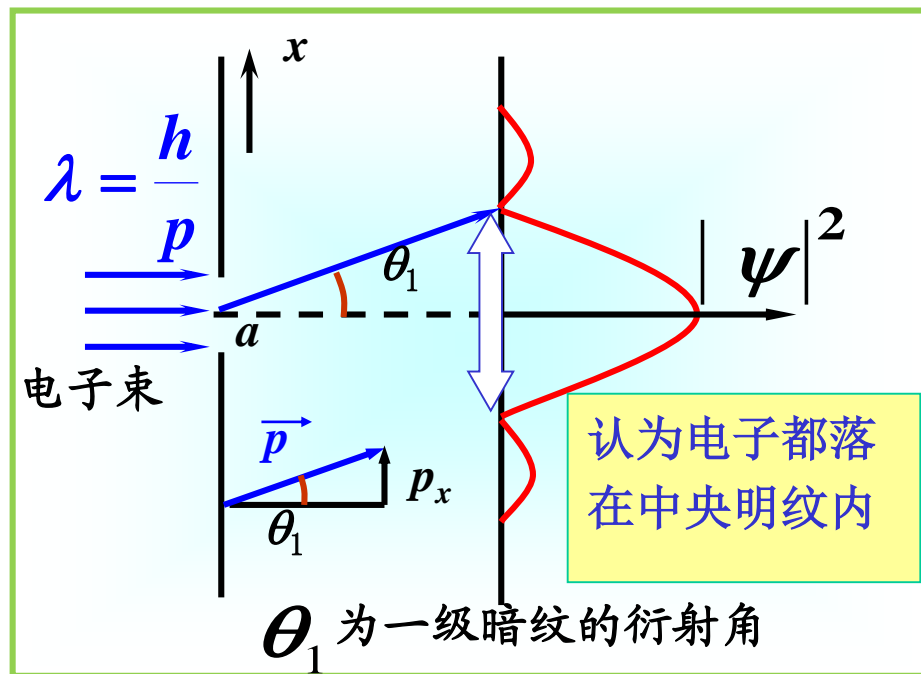
以电子束单缝衍射为例

$$\begin{cases} a \sin \theta = (2k+1) \frac{\lambda}{2} & \text{极大} \\ a \sin \theta = k\lambda & \text{极小} \end{cases}$$

电子在单缝的何处通过是不确定的！
只知是在宽为 a 的缝中通过。

电子在单缝处的 **位置不确定量**为：

$$\Delta x = a$$



观察屏上 x 方向的动量取值范围？

假设电子均打在中央亮区，电子进来往哪走？

粒子直着走： $p_x = 0$

粒子往第一级极小处走： $p_x = p \sin \theta_1$

$$\left. \begin{array}{l} \text{粒子直着走： } p_x = 0 \\ \text{粒子往第一级极小处走： } p_x = p \sin \theta_1 \end{array} \right\} 0 \leq p_x \leq p \sin \theta_1$$

即电子在 x 轴方向上的 **动量不确定量**为： $\Delta p_x = p \sin \theta_1$

即电子在 x 轴方向上的动量不确定量为: $\Delta p_x = p \sin \theta_1$

由单缝暗纹条件: $a \sin \theta_1 = k\lambda = \lambda$, $\sin \theta_1 = \frac{\lambda}{a}$

$$\therefore \Delta p_x = p \frac{\lambda}{a} = \frac{h}{\lambda} \cdot \frac{\lambda}{a} = \frac{h}{\Delta x} \quad \Delta x \Delta p_x = h$$

考虑次极大的影响: $\Delta p_x = p \sin \theta \geq p \sin \theta_1 = \frac{h}{\Delta x}$

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq h \text{ ---- 动量位置不确定量关系式}$$

严格的量子力学理论给出不确定关系:

$$\left. \begin{array}{l} \Delta x \Delta p_x \\ \Delta y \Delta p_y \\ \Delta z \Delta p_z \end{array} \right\} \geq \frac{\hbar}{2}$$

海森伯不确定关系式

例 1 一颗质量为 **10 g** 的子弹，具有 **$200\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$** 的速率。若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)，则该子弹位置的不确定量范围为多大？ $\Delta x \Delta p \geq h$

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

动量的不确定范围： $\Delta p = 0.01\% \times p = 2 \times 10^{-4} \text{kg}\cdot\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$

位置的不确定量范围：

$$\Delta x \geq \frac{h}{\Delta p} = \frac{6.63 \times 10^{-34}}{2 \times 10^{-4}} \text{m} = 3.3 \times 10^{-30} \text{m}$$

例2 一电子具有 $200\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ 的速率，动量的不确定范围为动量的 **0.01%**，
则该电子的位置不确定范围有多大？

$\Delta x \Delta p \geq h$, 电子质量 $9.1 \times 10^{-31}\text{kg}$

解 电子的动量：
$$p = mv = 9.1 \times 10^{-31} \times 200 \text{kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$$
$$= 1.8 \times 10^{-28} \text{kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$$

动量的不确定范围：
$$\Delta p = 0.01\% \times p = 1.8 \times 10^{-32} \text{kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$$

位置的不确定量范围：

$$\Delta x \geq \frac{h}{\Delta p} = \frac{6.63 \times 10^{-34}}{1.8 \times 10^{-32}} \text{m} = 3.7 \times 10^{-2} \text{m}$$

4. 不确定关系的的意义

(1) 两个共轭物理量的不确定量不能同时无限制地减小。

不确定关系使微观粒子运动“轨道”的概念失去意义！

(2) 波粒二象性的必然结果。

微观粒子的固有属性，与仪器精度和测量方法的完善与否无关！

(3) 直接推论：

微观粒子永远不可能静止，存在最小能量（零点能）！

热运动不可能完全停止，0 K 不能实现！

(4) 宏观问题中， h 是可忽略的小量，不确定关系失去实际意义。

普朗克常量 h 成为判定宏观和微观的依据！

例 波长 $\lambda=300\text{nm}$ 的光沿 x 轴正向传播，如果确定此波长的精确度 $\Delta\lambda/\lambda=10^{-6}$ ，试求光子位置的不确定量。

解： $\therefore \Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2},$

光子动量： $p = \frac{h}{\lambda}, \quad \Delta p = \left| -\frac{h\Delta\lambda}{\lambda^2} \right|$

$$\begin{aligned}\Delta x &\geq \frac{\hbar}{2\Delta p_x} = \frac{\lambda\hbar}{2h(\Delta\lambda/\lambda)} = \frac{\lambda}{4\pi(\frac{\Delta\lambda}{\lambda})} \\ &= \frac{3.0 \times 10^{-5}}{4\pi \times 10^{-6}} = 2.4(\text{cm})\end{aligned}$$

(也可用 $\therefore \Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar$ ，计算)

第十三章 量子物理学基础

13.1 黑体辐射 普朗克量子化基础

13.2 光的波粒二象性

13.3 量子力学引论

13.4 薛定谔方程

一、薛定谔方程的建立

瑞士联邦工业大学物理讨论会（1926）

一月以后：薛定谔向大家介绍了德布罗意的论文。



薛定谔 Erwin Schrodinger
奥地利人(1887-1961)
创立量子力学的波动理论
获1933年诺贝尔物理学奖

你这种谈论太幼稚，作为索末菲的门徒，都知道：处理波要有一个波动方程才行啦！



又过了几个星期：

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

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

原来薛定谔方程是利用经典物理，用类比的办法得到的，或者说开始只不过是一个假定，尔后为实验证实。

薛定谔方程是非相对论微观粒子的基本方程

——量子力学基本假设（基本原理之三）

地位同经典物理的牛顿定律



	经典力学（质点）	量子力学(微观粒子)
特点	粒子性	波粒二象性
运动情况	有轨道	无轨道
状态描述	坐标 \vec{r} 和动量 \vec{p}	波函数 Ψ
运动方程	牛顿方程 $\frac{d\vec{p}}{dt} = m \frac{d^2\vec{r}}{dt^2}$	薛定谔方程 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}, t) \right] \psi(\vec{r}, t)$

二、一维自由粒子薛定谔方程

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

1. 一维自由粒子的波函数: $\Psi(x, t) = \Psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - p_x x)}$

应该是一维薛定谔方程的解

2. 一维自由粒子含时薛定谔方程:

而自由粒子: $U(\vec{r}, t) = 0$

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

将一维自由粒子波函数代入可以验证该方程:

$$i\hbar \cdot \left(-\frac{i}{\hbar} E \right) \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\frac{i}{\hbar} p_x \right)^2 \Psi(x, t)$$

质量为 m 的自由粒子,

在非相对论下能量和动量的关系:

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

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

三、 一维势场中粒子薛定谔方程

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

引入哈密顿算符： $\hat{H} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}, t) \right]$

四、 薛定谔方程普遍形式

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

五、讨论

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

- (1) 薛定谔方程是一个复数偏微分方程；
其解波函数 $\Psi(\vec{r}, t)$ 是一个复函数。
- (2) 薛定谔方程是线性偏微分方程
从而保证了波函数满足态叠加原理
若 $\Psi_1(\vec{r}, t)$ 和 $\Psi_2(\vec{r}, t)$ 是薛定谔方程的解，
则 $c_1\Psi_1(\vec{r}, t) + c_2\Psi_2(\vec{r}, t)$ 也是薛定谔方程的解。
- (3) 它并非推导所得，最初是假设，后来通过实验检验正确性。
- (4) 它是非相对论形式的方程。

当势能与时间 t 无关时: $U(\vec{r})$

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

六、定态薛定谔方程求解 (不含时的薛定谔方程)

哈密顿量 $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r})$ 不显含时间

采用分离变量法, 将波函数写成 $\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) f(t)$

代入定态薛定谔方程 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \hat{H} \Psi(\vec{r}, t)$

得 $i\hbar \frac{df(t)}{dt} \psi(\vec{r}) = [\hat{H} \psi(\vec{r})] f(t)$

左右两边同除 $\psi(\vec{r}) f(t)$

得 $i\hbar \frac{df(t)}{dt} \frac{1}{f(t)} = \frac{1}{\psi(\vec{r})} \hat{H} \psi(\vec{r})$

$$i\hbar \frac{df(t)}{dt} \frac{1}{f(t)} = \frac{1}{\psi(\vec{r})} \hat{H} \psi(\vec{r})$$

令 $= E$

上式 左边是 t 的函数
 右边是 \vec{r} 的函数
 且两变量相互独立

两边必须等于同一个常量时才成立

得到两个独立的方程：

$$i\hbar \frac{df(t)}{dt} = E f(t) \quad (1)$$

$$\hat{H} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (2)$$

(1)的解：

$$\int \frac{df(t)}{f(t)} = \int \frac{-i}{\hbar} E dt \Rightarrow f(t) = C e^{-iEt/\hbar}$$

E : 具有能量的量纲，代表粒子的能量。

物理上的主要任务是解方程(2)

$$\hat{H} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

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

定态薛定谔方程：

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

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

方程解的形式？

- ❖ 依赖于 $U(\vec{r})$ 的具体形式；
- ❖ 从数学上讲，给定一个 E 就有相应的解；
- ❖ 从物理上讲，只有特定的 E 才是物理上可接受的，即波函数满足单值，有限，连续。
- ❖ 特定 E 值称为能量本征值；各 E 值对应 $\psi_E(\vec{r})$ 叫能量本征函数；
- ❖ 方程又称为：能量本征方程
- ❖ 定态波函数为 $\Psi_E(\vec{r}, t) = \psi_E(\vec{r}) f(t) = \psi_E(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} Et}$

或写成

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

- ❖ 定态：能量取确定值的状态。

