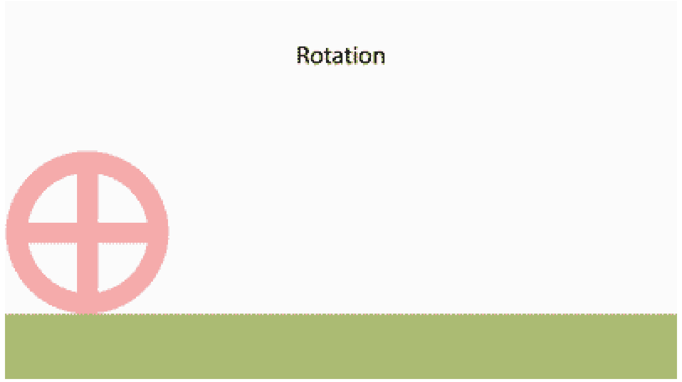
整体结构

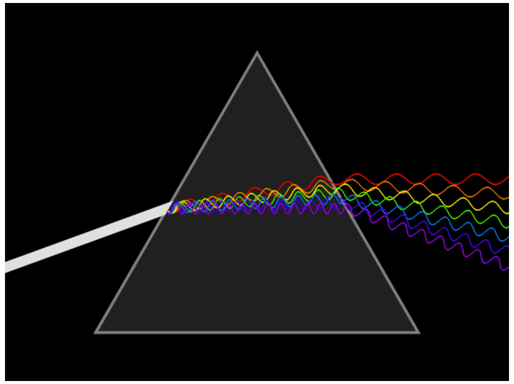
第二章 波函数和薛定谔方程

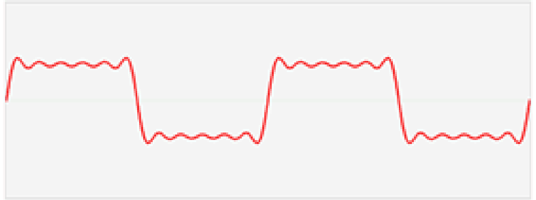
- ✓ 波函数及其统计解释
- ➢ 态叠加原理
- ➢ Schrödinger方程
- ➢ 粒子流密度和粒子数守恒定律
- ➢ 定态Schrödinger方程

叠加原理（Superposition principle）

The superposition principle states that, for all linear systems, the net response caused by two or more stimuli is the sum of the responses that would have been caused by each stimulus individually.



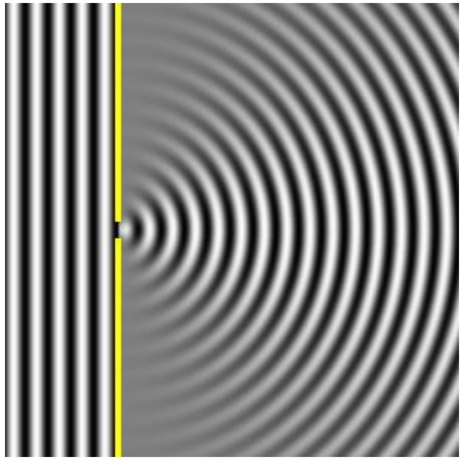


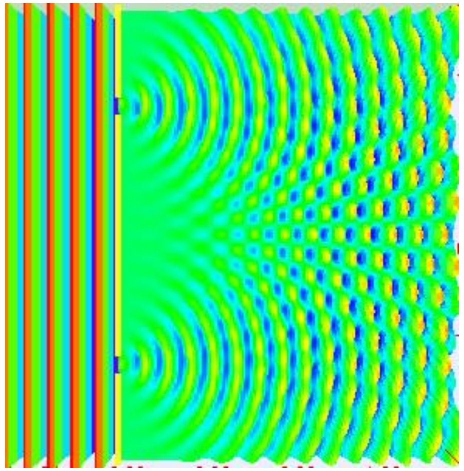


Interference? Diffraction? Superposition!

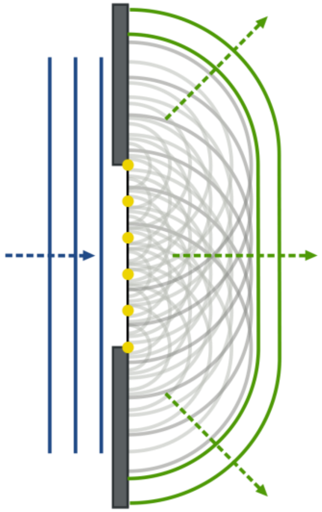
"No-one has ever been able to define the difference between interference and diffraction satisfactorily. It is just a question of usage, and there is no specific, important physical difference between them. The best we can do is, roughly speaking, is to say that when there are only a few sources, say two, interfering, then the result is usually called interference, but if there is a large number of them, it seems that the word diffraction is more often used."

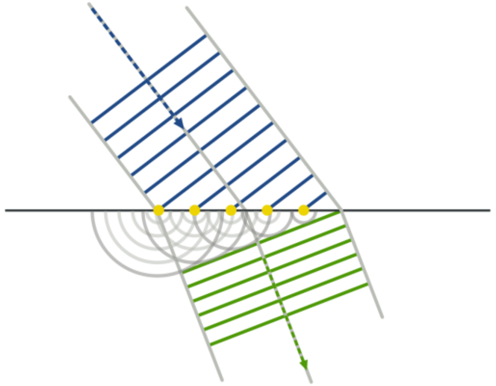
—— R. Feynman





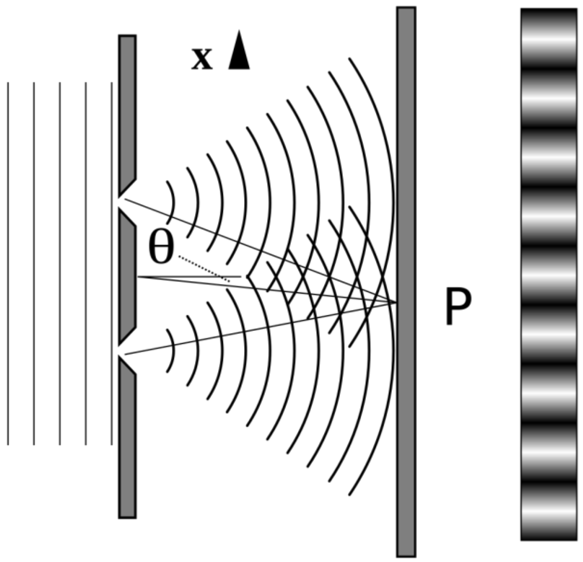
Huygens-Fresnel principle





Superposition of quantum states

微观粒子具有波动性，会产生干涉和衍射图样，而干涉和衍射的本质在于波的叠加性；量子力学中，波函数决定体系的状态，故波函数也被称为状态波函数；所以量子力学的波叠加也被称为态叠加。



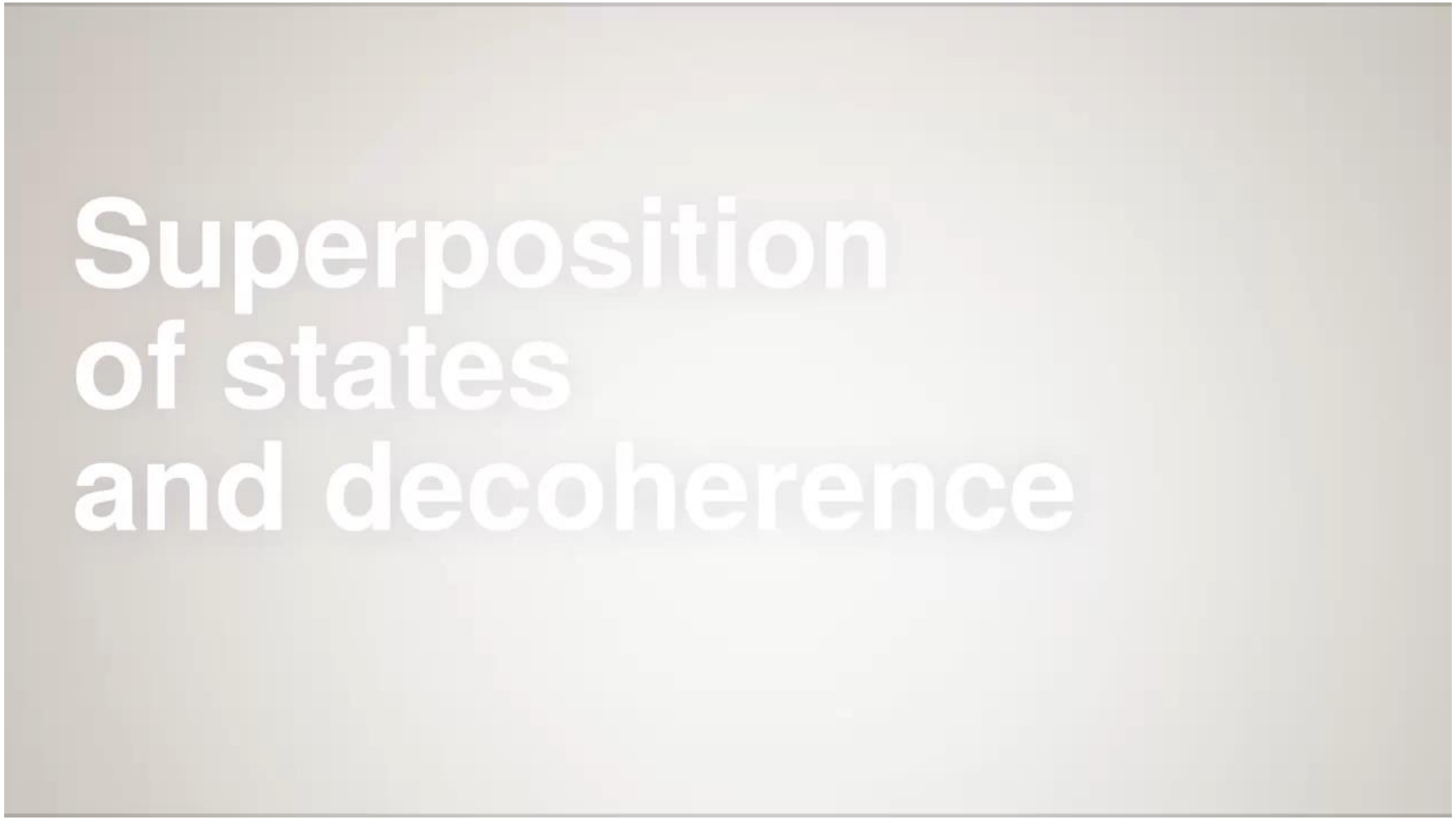
一个电子有Ψ_1和Ψ_2两种可能的状态，则$\Psi = C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2$也是电子的可能状态。空间找到电子的几率是：

$$\begin{aligned}|\Psi|^2 &= |C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2|^2 \\ &= (C_1^*\Psi_1^* + C_2^*\Psi_2^*)(C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2) \\ &= |C_1\Psi_1|^2 + |C_2\Psi_2|^2 + C_1^*\Psi_1^*C_2\Psi_2 + C_1\Psi_1C_2^*\Psi_2^*\end{aligned}$$

Superposition of quantum states

- 若$\Psi_1, \Psi_2, \ldots, \Psi_n$是体系的一系列可能的状态，则这些态的线性叠加$\Psi = C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2 + \ldots + C_n\Psi_n$也是体系的一个可能状态，其中$C$为复常数。
- 处于Ψ态的体系，部分的处于Ψ_1态，部分的处于Ψ_2态，…，部分的处于Ψ_n态。

Quantum superposition



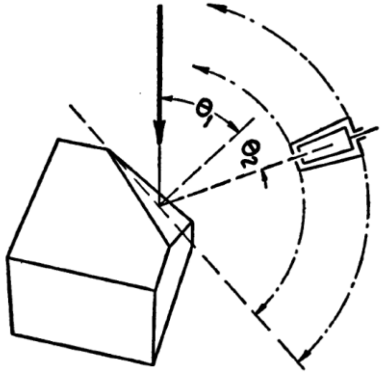
视频来自Wikipedia的词条：

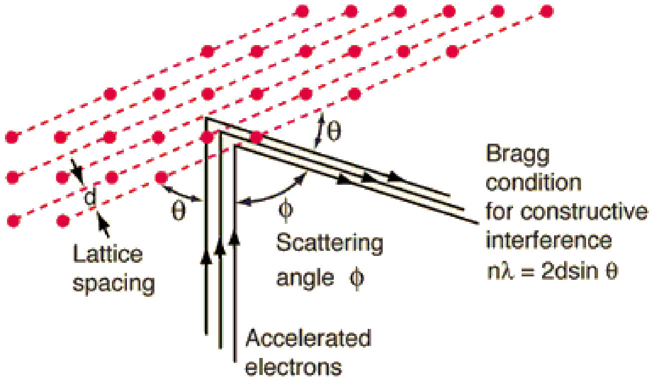
“Quantum superposition”

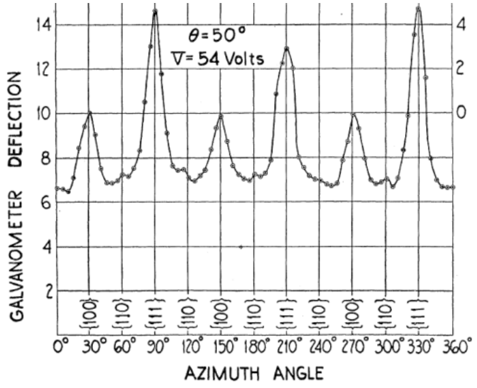
态叠加原理举例 —— Davisson-Germer experiment

- 电子在晶体表面反射后，电子可能以各种不同的动量p运动。
- 具有确定动量的运动状态用de Broglie 平面波表示

$$\Phi_n(\mathbf{r},t)=C\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\mathbf{p}_n\cdot\mathbf{r}-Et)}$$

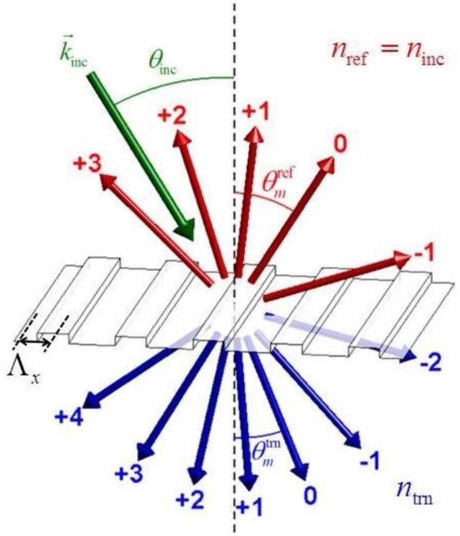


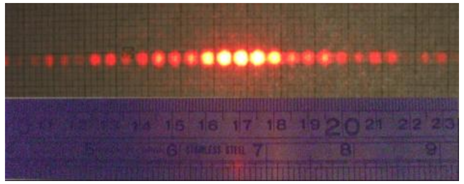


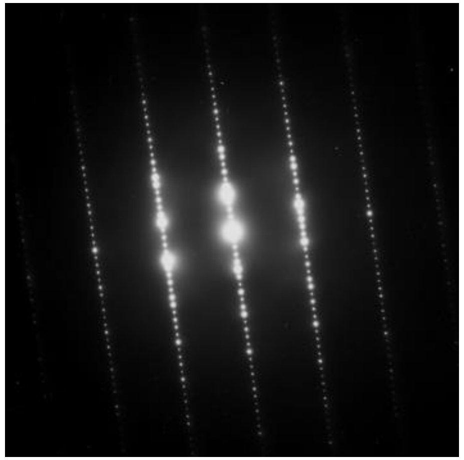


- 根据叠加原理，在晶体表面反射后，电子的状态Ψ可表示成 p 取各种可能值的平面波的线性叠加，即

$$\Psi(\mathbf{r},t)=\sum_{n=1}^{N}c_n\Phi_n(\mathbf{r},t)$$

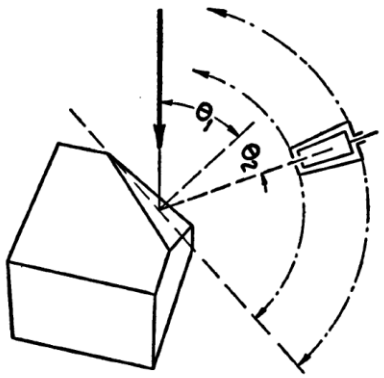


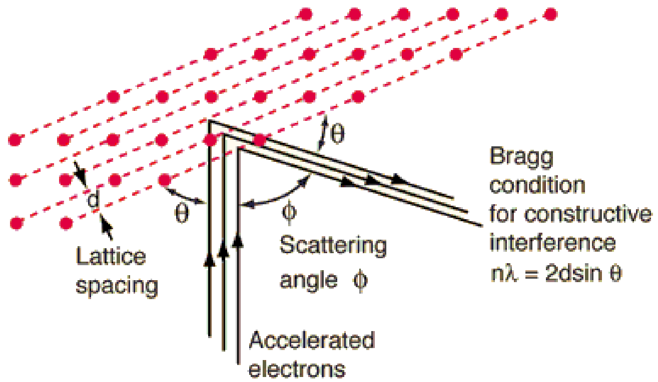


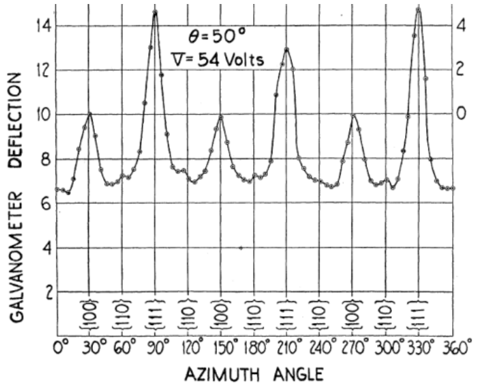


态叠加原理举例 —— Davisson-Germer experiment

- 电子在晶体表面反射后，电子可能以各种不同的动量p运动。
- 具有确定动量的运动状态用de Broglie平面波表示







$$\Phi_{n}(\mathbf{r},t)=C\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\mathbf{p}_{n}\cdot\mathbf{r}-Et)}$$

- 根据叠加原理，在晶体表面反射后，电子的状态Ψ可表示成 p 取各种可能值的平面波的线性叠加，即

$$\Psi(\mathbf{r},t)=\sum_{n=1}^{N}c_{n}\Phi_{n}(\mathbf{r},t)$$

- 量子力学中，由于动量可以连续取值，因此叠加变积分：

$$\Psi(\mathbf{r},t)=\int_{\infty}c(\mathbf{p})\Phi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r},t)\mathrm{d}\mathbf{p}$$

$$=C\int_{\infty}c(\mathbf{p})\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-Et)}\mathrm{d}\mathbf{p}$$

动量空间的波函数

任意波函数Ψ(r,t)都可用平面波叠加来表示：

$$\begin{cases} f(t) = A\int_{\infty} F(\omega)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\mathrm{d}\omega \\ F(\omega) = B\int_{\infty} f(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\mathrm{d}t \end{cases}$$

一维：

$$\begin{cases} \Psi(x,t) = C\int_{\infty} c(p,t)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{d}p \\ c(p,t) = C\int_{\infty} \Psi(x,t)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\mathrm{d}x \end{cases}$$

三维：

$$\begin{cases} \Psi(\mathbf{r},t) = C\int_{\infty} c(\mathbf{p},t)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}\mathrm{d}^3\mathbf{p} \\ c(\mathbf{p},t) = C\int_{\infty} \Psi(\mathbf{r},t)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}\mathrm{d}^3\mathbf{r} \end{cases}$$

- 二式互为Fourier变换对；
- Ψ(r,t)与c(p,t)一一对应，是同一量子态的两种不同描述；
- Ψ(r,t)是以坐标r为自变量的波函数，即坐标空间的波函数；
- c(p,t)是以动量p为自变量的波函数，即动量空间的波函数。

动量空间的几率密度

$$w(\mathbf{r},t)=\frac{\mathrm{d}W(\mathbf{r},t)}{\mathrm{d}\mathbf{r}}=\left|\Psi(\mathbf{r},t)\right|^2$$

Ψ的量纲：$\mathbf{L}^{-3/2}$　　Ψ的单位：$\mathbf{m}^{-3/2}$

t时刻粒子在坐标空间中出现在**r**点的几率密度。

$$w(\mathbf{p},t)=\frac{\mathrm{d}W(\mathbf{p},t)}{\mathrm{d}\mathbf{p}}=\left|c(\mathbf{p},t)\right|^2$$

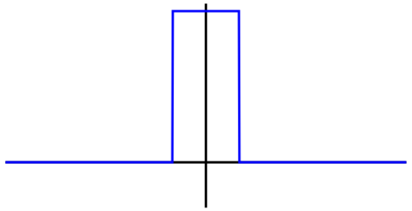
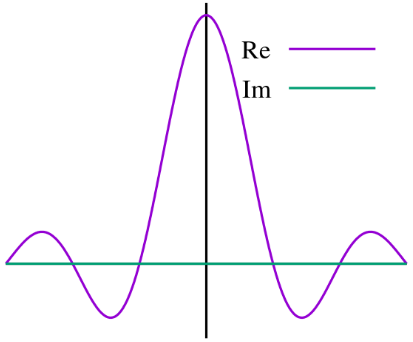
c的量纲：$(\mathbf{LM/T})^{-3/2}$　c的单位：$(\mathbf{kg{\cdot}m/s})^{-3/2}$

t时刻粒子在动量空间中出现在**p**点的几率密度。

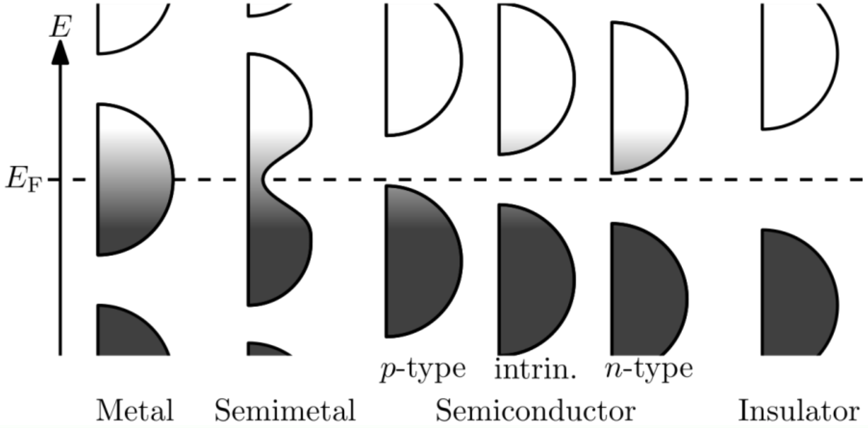
$$V(\omega)=\int_{\infty} v(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\mathrm{d}t$$

Fourier Transform

信号与系统：$f(t) \Leftrightarrow F(\omega)$

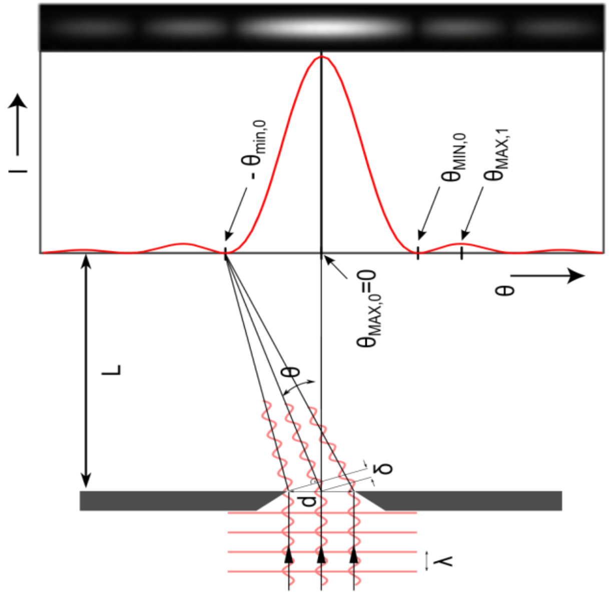



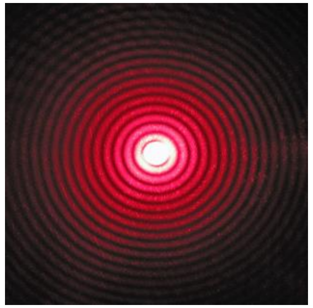
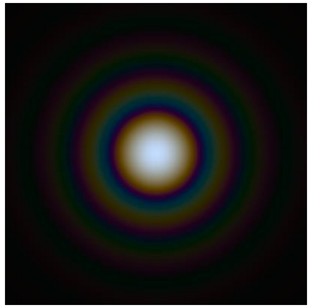
半导体物理：$V(x) \Leftrightarrow E(k)$



Jean-Baptiste Joseph Fourier
1768 ~ 1830

波动光学：$\phi(x,y) \Leftrightarrow \psi(k_x,k_y)$



动量空间波函数的归一化问题

$$\begin{cases} \Psi(\mathbf{r},t) = C\int_{\infty} c(\mathbf{p},t)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}\mathrm{d}^3\mathbf{p} \\ c(\mathbf{p},t) = C\int_{\infty} \Psi(\mathbf{r},t)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}\mathrm{d}^3\mathbf{r} \end{cases}$$

若Ψ(r,*t*)已归一化，那么*c*(p,*t*)的归一化情况如何？

四个数学基础：

1. **Unitary Fourier Transform**
2. **Normalization factor *C* can be a real constant**
3. **Fourier Transform pair: e^{ikx} and $\delta(k)$**

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

4. **The sifting property of $\delta(x)$**

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

动量空间波函数的归一化问题

$$\begin{cases} \Psi(\mathbf{r},t) = C\int_{\infty} c(\mathbf{p},t)e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}\,d^3\mathbf{p} \\ c(\mathbf{p},t) = C\int_{\infty} \Psi(\mathbf{r},t)e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}\,d^3\mathbf{r} \end{cases}$$

若$\Psi(\mathbf{r},t)$已归一化，那么$c(\mathbf{p},t)$的归一化情况如何？

$$\int_{\infty}|c(\mathbf{p},t)|^2\,d\mathbf{p} = \iiint_{\infty} C\Psi^*(\mathbf{r}_1,t)e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}_1}d\mathbf{r}_1 C\Psi(\mathbf{r}_2,t)e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}_2}d\mathbf{r}_2 d\mathbf{p}$$

$$= C^2\iiint_{\infty}\Psi^*(\mathbf{r}_1,t)d\mathbf{r}_1\Psi(\mathbf{r}_2,t)d\mathbf{r}_2 e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)}d\mathbf{p}$$

$$= C^2\iint_{\infty}(2\pi\hbar)^3\delta(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\Psi^*(\mathbf{r}_1,t)\Psi(\mathbf{r}_2,t)d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2$$

$$= C^2(2\pi\hbar)^3\int_{\infty}\Psi^*(\mathbf{r}_2,t)\Psi(\mathbf{r}_2,t)d\mathbf{r}_2 = C^2(2\pi\hbar)^3$$

若$C = (2\pi\hbar)^{-3/2}$，那么$c(\mathbf{p},t)$也是归一化的。

$$\Psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}$$

作业

1. 设ψ_1和ψ_2是体系的两个可能的状态，问$\psi_1+\psi_2$和$\psi_1-\psi_2$描述的是相同的状态吗？为什么？
2. 设某一时刻，粒子的状态为$\Phi(x) = C[\sin^2(kx)+2\cos(kx)]$，其中，$C$为一复常数，$k$为一实常数。问该状态可以表示为几个自由粒子平面波叠加而成？它们的动量分别是多少？
3. 设一自由粒子具有确定动量p_0，试分别写出该自由粒子在坐标空间和动量空间的波函数。
4. 设一粒子具有确定的坐标r_0，试分别写出该粒子在坐标空间和动量空间的波函数。