



电子科技大学

University of Electronic Science and Technology of China

量子力学与统计物理

张希仁，孙启明

2021

光电科学与工程学院



整体结构

第一章 量子力学的诞生

第二章 波函数和薛定谔方程

第三章 量子力学中的力学量

第四章 态和力学量的表象

第五章 求解定态薛定谔方程实例

第六章 微扰理论

第七章 自旋与全同粒子

第八章 统计物理

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



大神镇楼

“如果基础科学像我所希望的那样成为一般知识的一部分的话，那么，目前作为量子理论悖论而出现的東西，对于我们孩子们的孩子们来说，就将不过是常识而已。”

—— Stephen Hawking

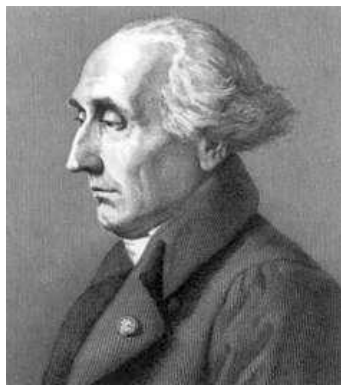


波函数

- “能把波函数讲清楚的老师就是好老师。” —— 曹则贤
- A wave function in quantum physics is a mathematical description of an isolated quantum system.
- 因此，量子力学中，波函数也称为态函数！
- 经典力学中，一个粒子在某一时刻的运动状态由六维相空间的一个点来描述。



quantum state



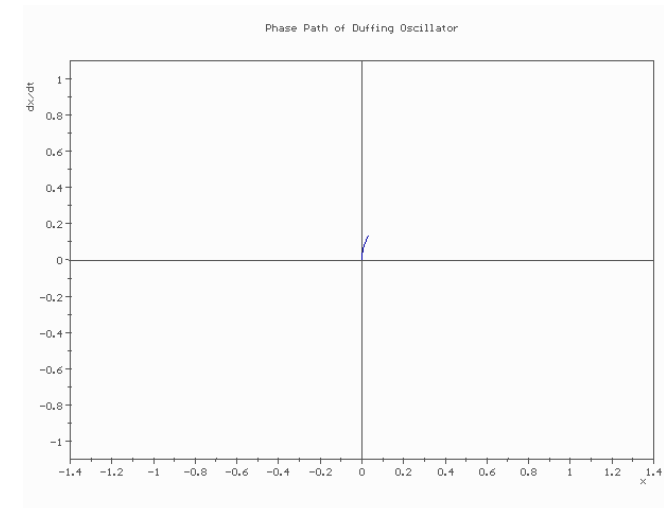
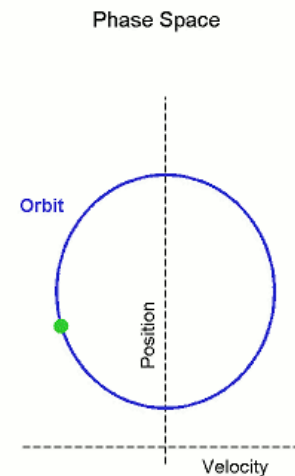
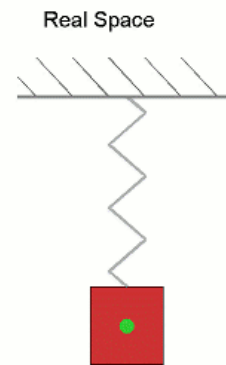
J. L. Lagrange
1736 ~ 1813



W. R. Hamilton
1805 ~ 1865

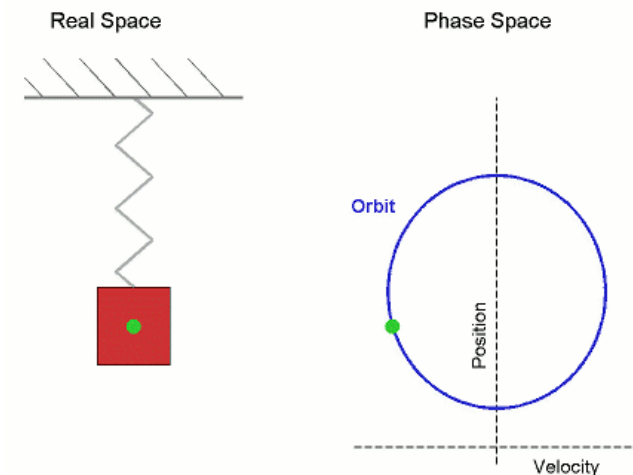


L. Boltzmann
1844 ~ 1906

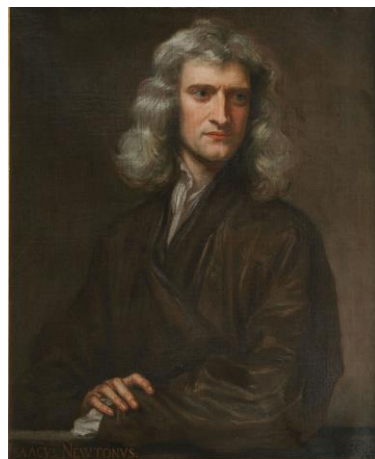
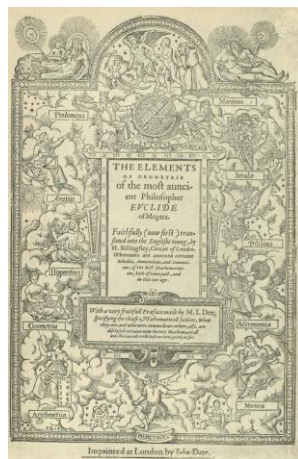


波函数

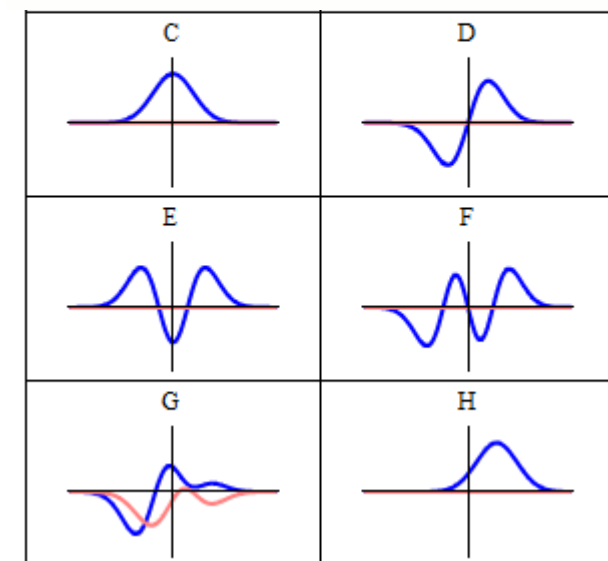
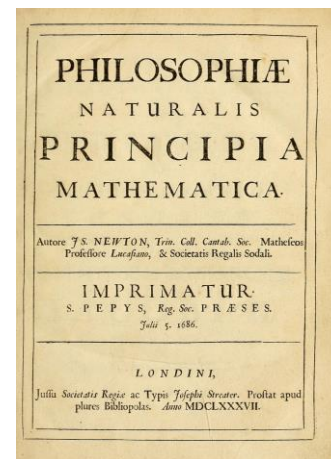
- 经典力学中，一个粒子在某一时刻的运动状态由六维相空间的一个点来描述。
- 量子力学五大基本假设第一条：微观体系的状态被一个波函数完全描述，从这个波函数可以得出体系的所有性质。



Euclid's *Elements*



Newton's *Principia*





波函数

经典物理中的平面波：
$$U(\mathbf{r}, t) = A \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$$
$$= A \operatorname{Re}[e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}]$$

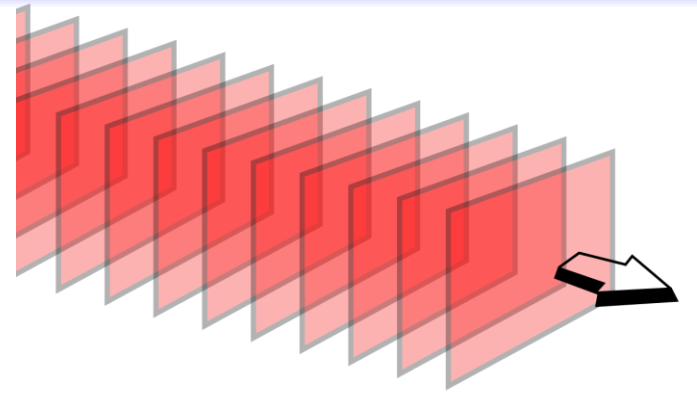
de Broglie关系：

$$\begin{cases} E = \hbar \omega \\ \mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} \end{cases}$$

量子力学中描写自由粒子平面波的函数：

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

如果粒子处于随时间和位置变化的力场中运动，其动量和能量不再是常量，粒子的状态就不能用平面波描写，而必须用较复杂的波函数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 描写。



辣个波到底是个什么波？

de Broglie波对当时
物理学界造成的冲击



关于这个问题，众神之间曾经经历过一番激烈的争论：

✓ **Copenhagen interpretation**

➤ **Many-worlds interpretation**

➤ **De Broglie-Bohm (pilot-wave) theory**

➤ **Quantum Bayesianism**

➤ **Quantum decoherence theories**

...

Copenhagen interpretation



Max Born
1882 ~ 1970
1954 Nobel Prize

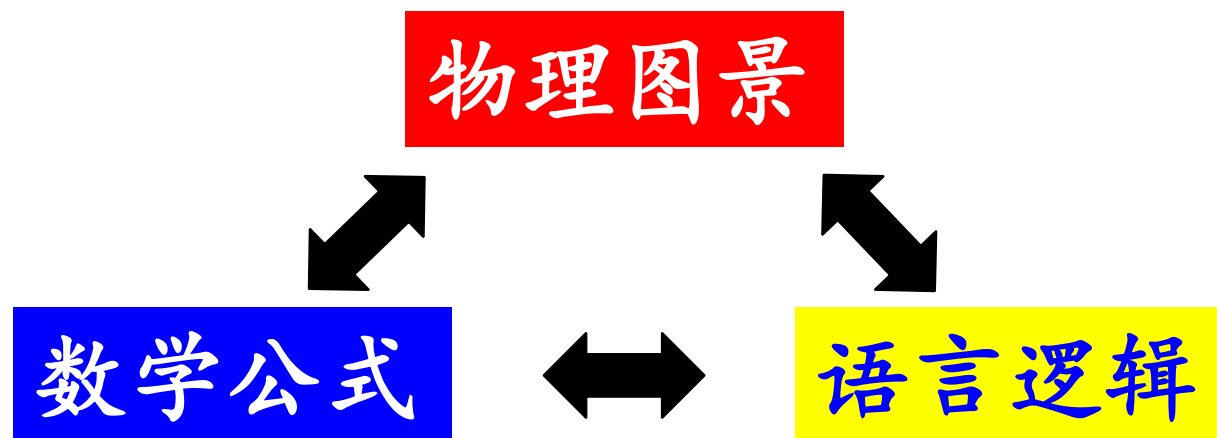
Born won the 1954 Nobel Prize in Physics for his “fundamental research in quantum mechanics, especially in the **statistical interpretation** of the wave function”.



Niels Bohr
1885 ~ 1962
1922 Nobel Prize



Werner Heisenberg
1901 ~ 1976
1932 Nobel Prize





孙师兄词汇

✓ Dawn

✓ *Annus Mirabilis*

✓ Fundamental

✓ Reluctant

✓ Heuristic

➤ Qualitative / Quantitative

➤ Photonic / Optical

➤ Dimension

➤ Interpretation



经典粒子、经典波、辣个波、以及量子玄学的物理图景

视频来自 Wikipedia 的
词条：
“wave-particle duality”

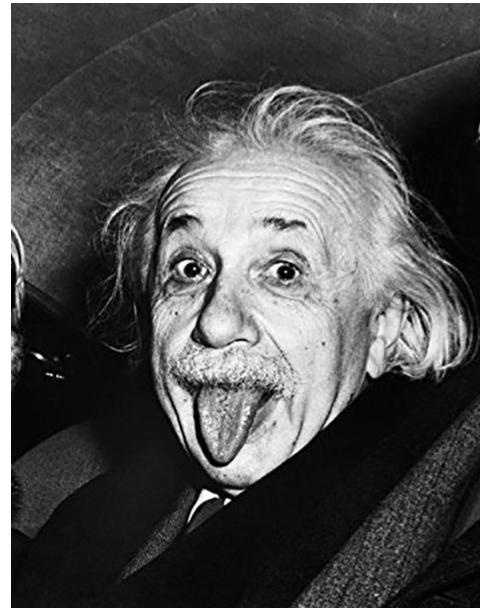
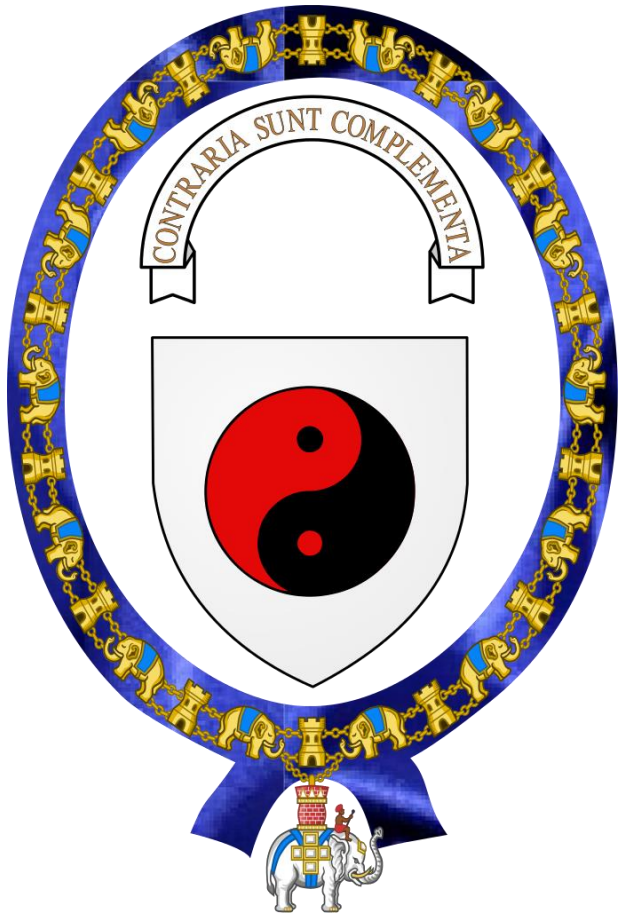
**WAVE
PARTICLE DUALITY**

All the animations and explanations on
www.toutestquantique.fr

Which-way experiment

Contraria sunt complementa (opposites are complementary)

Principle of Complementarity, both a theoretical and an experimental result of quantum mechanics, holds that objects have certain pairs of complementary properties which cannot all be observed or measured simultaneously.





波函数的统计解释

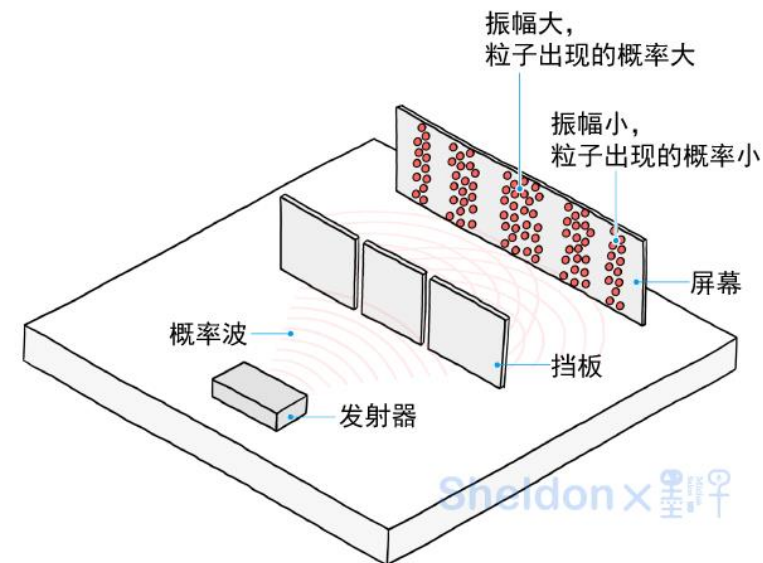
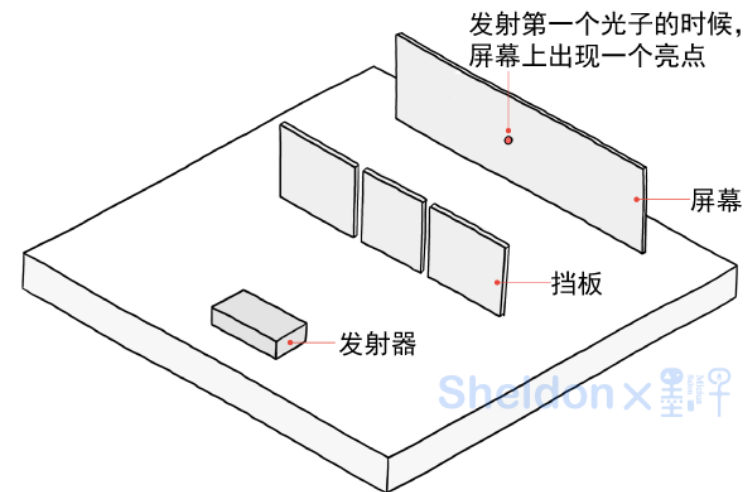
光/电子的双缝干涉实验现象显示：

- 当入射粒子流强度大时，观测屏很快显示出干涉条纹图样；
- 当入射粒子流强度小时，开始时粒子位置杂乱无章，长时间后亦显示出干涉条纹图样。

Copenhagen学派认为，这一现象是大量粒子在同一个实验中的统计结果，或者是一个粒子在许多次相同实验中的统计结果。

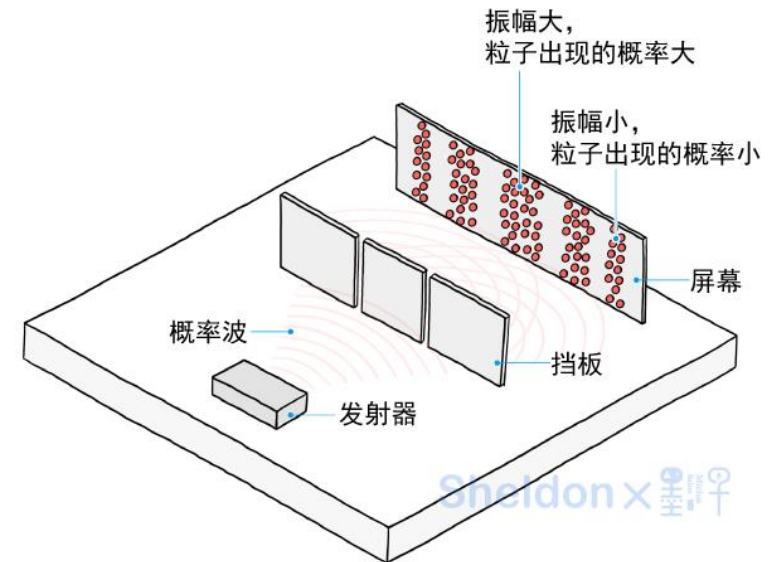
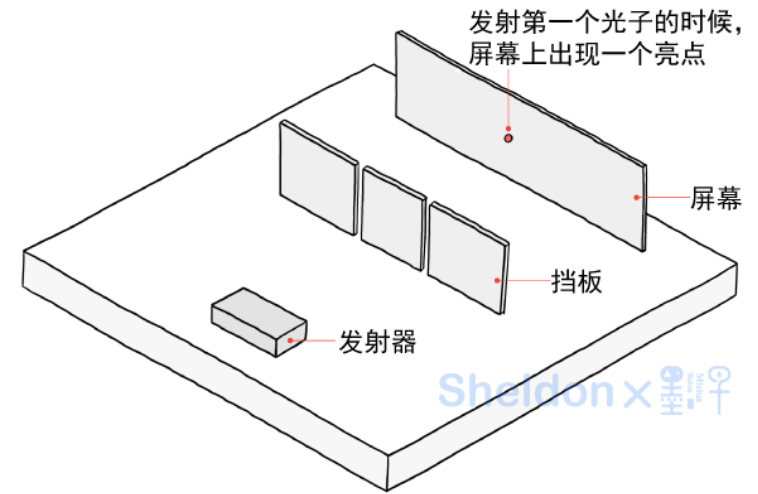
在电子衍射实验中，观测屏 r 点附近信号的强度：

- 正比于该点附近感光点的数目；
- 于是，正比于该点附近出现的电子数目；
- 于是，正比于电子出现在 r 点附近的几率。



波函数的统计解释

- 假设几率波的空间部分用 $\Psi(\mathbf{r})$ 描述，与经典波动理论类比，可知几率波的强度为 $I = |\Psi(\mathbf{r})|^2 = \Psi^* \Psi$ ；
- $|\Psi(\mathbf{r})|^2$ 的意义是代表电子出现在 \mathbf{r} 点附近几率的大小；
- 更严格地说， $|\Psi(\mathbf{r})|^2 \Delta x \Delta y \Delta z$ 表示在 \mathbf{r} 点邻域体积微元 $\Delta x \Delta y \Delta z$ 中找到粒子的几率；
- 此即 Copenhagen 学派的波函数的统计解释，由 M. Born 首先提出；
- 波函数的统计解释是量子力学的基本原理之一。





几率密度

根据波函数的统计解释，在 t 时刻 \mathbf{r} 点邻域体积微元 $d\tau = dx dy dz$ 中找到粒子的几率为：

$$dW(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\tau$$

则在体积 V 内， t 时刻找到粒子的几率为：

$$W(\mathbf{r}, t) = \int_V dW(\mathbf{r}, t) = \int_V |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\tau$$

则在 t 时刻 \mathbf{r} 点单位体积内找到粒子的几率为：

$$w(\mathbf{r}, t) = \frac{dW(\mathbf{r}, t)}{d\tau} = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$$

此即几率密度。

波函数的物理意义：

几率振幅 (Probability Amplitude)



波函数的性质

1、平方可积

由于粒子在空间总会出现（非相对论，不讨论粒子产生和湮灭情况），所以在全空间找到粒子的几率应为1，即：

$$\int_{\infty} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\tau = 1 \quad \Psi(\mathbf{r}, t) = C e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)}$$

这即是要求描写粒子量子状态的波函数 Ψ 必须是绝对值平方可积的函数。

思考：自由粒子平面波的波函数是否满足平方可积条件？

2、几率分布的相对性

$\Psi(\mathbf{r}, t)$ 和 $C\Psi(\mathbf{r}, t)$ 所描写状态的相对几率是相同的，这里 C 是一个复常数。

$$\left| \frac{C\Psi(\mathbf{r}_1, t)}{C\Psi(\mathbf{r}_2, t)} \right|^2 = \left| \frac{\Psi(\mathbf{r}_1, t)}{\Psi(\mathbf{r}_2, t)} \right|^2$$

只相差一个常数因子的两个波函数描写同一状态！



波函数的归一化 (Normalization)

对于某一波函数 $\Phi(\mathbf{r}, t)$, 若 $\int_{\infty} |\Phi(\mathbf{r}, t)|^2 d\tau = A$

则有 $\int_{\infty} |A^{-1/2} \Phi(\mathbf{r}, t)|^2 d\tau = 1$ $\Psi(\mathbf{r}, t) \equiv A^{-1/2} \Phi(\mathbf{r}, t)$

也就是说, $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 是归一化了的波函数, $A^{-1/2}$ 称为归一化因子。

思考: $\sqrt{A} \stackrel{?}{=} \sqrt{|A|}$, $A \in \mathbb{C}$

注意: 对归一化波函数仍有一个模为一的相位不确定因子。若 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 是归一化波函数, 那么, $e^{i\varphi} \Psi(\mathbf{r}, t)$ 也是归一化波函数(其中 φ 是实数), 与前者描述同一几率波。



波函数的三个标准条件

波函数在定义域的全部空间中都必须**是单值、有限、连续的**。

- 单值：因任一体积元内出现的概率只有一种，故波函数一定是单值的；
- 有限：因概率不可能为无限大，故波函数必须是有限的；
- 连续：因概率不会在某处发生突变，故波函数及其一阶导数必须处处连续。



经典波和几率波的对比

经典波：

- 是振动状态的传播；
- 波的强度（振幅的平方）代表通过某点的能流密度；
- 能流密度分布取决于空间各点的波强的绝对值，若将波函数在空间各点的振幅同时增大 C 倍，则个处的能流密度增大 C^2 倍，变为另一种能流密度分布状态；
- 波函数无归一化问题和标准条件。

振幅的模的平方!!!

几率波：

- 不代表任何物理量的传播；
- 波强（振幅的平方）代表粒子在某处出现的概率密度；
- 概率密度分布取决于空间各点波强的相对比例，并非取决于波强的绝对值，若将波函数在空间各点的振幅同时增大 C 倍，不改变概率密度分布；
- 波函数存在归一化问题和标准条件。



随堂附加题 (5分)

下列波函数哪些与 $\psi_1(x)$ 描写同一状态? $\psi_1(x) = e^{\frac{i}{\hbar}2x}$

$$\psi_2(x) = e^{-\frac{i}{\hbar}2x} \quad \psi_3(x) = e^{\frac{i}{\hbar}3x} \quad \psi_4(x) = -e^{\frac{i}{\hbar}2x} \quad \psi_5(x) = 3e^{-\frac{i}{\hbar}(\pi\hbar-2x)} \quad \psi_6(x) = (4+2i)e^{\frac{i}{\hbar}2x}$$

2.1节作业

1、将如下所示的波函数归一化，并写出相应的概率密度函数。其中 α 为复常数。

$$\Phi(x) = e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}$$

2、如右所示的两个波函数是否等价？其中， C 为任一复常数， n 为正整数， a 为任一正数。

$$\psi_1(x) = \begin{cases} C \sin\left[\frac{n\pi}{2a}(x-a)\right], & |x| \leq a \\ 0, & |x| > a \end{cases}$$

$$\psi_2(x) = \begin{cases} C \sin\left[\frac{n\pi}{2a}(x+a)\right], & |x| \leq a \\ 0, & |x| > a \end{cases}$$



讨论题

1. 氢原子轨道半径、能级、和Rydberg常数。（王鑫、陈琰昇臻、胡嘉辉，3月18日）
2. 小德的驻波条件是半波长还是波长呢？（王子彦、丁欣怡、李濮存，3月23日）
3. Planck黑体辐射公式是怎么来的？（朱松柏、？、？）
4. Bohr如何利用CP原理推出角动量量子化的？
5. 角动量何德何能，能做普朗克常数的量纲？还是这其中另有隐情？
6. 小德是从Planck-Einstein关系式直接推出他的波粒二象性关系式的吗？
7. Which-way experiment以及细思极恐的量子玄学。
8. 量子力学中为什么一定要用复变函数来描述自由粒子平面波？虚数 i 的引入在量子力学中有什么意义？谈谈你对虚数 i 的理解。

$$e^{i\pi} + 1 = 0$$



讨论题

- 平时成绩20%（作业10、出勤5、讨论题5）；
- 期中考试20%；
- 期末考试60%。

讨论题分值构成（总分25分）：

- 内容（数学、物理、逻辑） 10分；
- 演讲（PPT、台风、时间） 10分；
- 互动5分。
- 高质量提问加5分。