

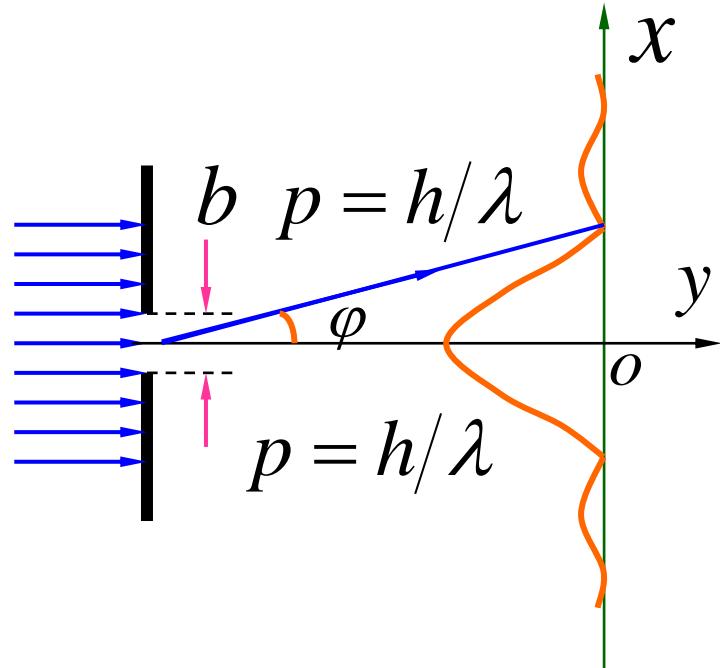
## ➤ 用电子衍射说明不确定关系

电子经过缝时的**位置**不确定度

$$\Delta x = b$$

一级最小衍射角

$$\sin \varphi = \lambda/b$$

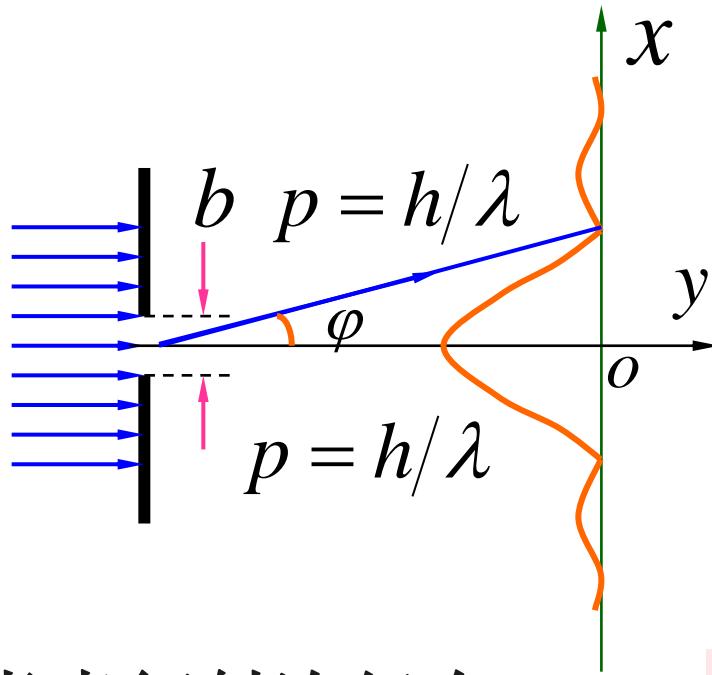


电子的单缝衍射实验

电子经过缝后  $x$  方向动量大小的不确定度

$$\Delta p_x = p \sin \varphi = p \frac{\lambda}{b} \quad \lambda = \frac{h}{p} \quad \Delta p_x = \frac{h}{b}$$

$$\Delta x \Delta p_x = h$$



考虑衍射次级有

$$\Delta x \Delta p_x \geq h$$

- ◆ 海森伯于 1927 年提出不确定原理

对于微观粒子不能同时用确定的位置和确定的动量来描述 .

不确定关系

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

# 不确定关系

$$\Delta x \Delta p \geq h$$

- 海森伯原来对不确定性原理的叙述是这样的：假如对任何客体进行测量，并且测定其动量的  $x$  分量时，不确定量为  $\Delta p$ ，那么关于其位置  $x$ ，就不可能同时知道得比  $\Delta x = h/\Delta p$  更准确。在任何时刻，位置的不确定量和动量的不确定量的乘积必定大于普朗克常数。
- 比较普遍的表述是，人们不可能用任何方式设计出这样一个仪器，它能确定在两种可供选择的方式中采取的是哪一种方式，而同时又不扰动干涉图案。在我们之前讨论的实验中，它可以这样表述：“要设计出一种仪器来确定电子经过哪一个狭缝，同时又不使电子受到足以破坏其干涉图样的扰动是不可能的”。

# \*严格证明: $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$

The presence of the  $i$  then makes the operator in (2.15) Hermitian. Note that the uncertainty inequality can also be written as

$$\boxed{\Delta A \Delta B \geq \left| \langle \Psi | \frac{1}{2i} [A, B] | \Psi \rangle \right|.} \quad (2.17)$$

where the bars on the right-hand side denote absolute value.

Before we prove the theorem, let's do the canonical example! Substituting  $\hat{x}$  for  $A$  and  $\hat{p}$  for  $B$  results in the position-momentum uncertainty relation you have certainly worked with:

$$(\Delta x)^2 (\Delta p)^2 \geq \left( \langle \Psi | \frac{1}{2i} [\hat{x}, \hat{p}] | \Psi \rangle \right)^2. \quad (2.18)$$

Since  $[\hat{x}, \hat{p}] / (2i) = \hbar/2$  we get

$$(\Delta x)^2 (\Delta p)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4} \rightarrow \Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (2.19)$$

We are interested in the proof of the uncertainty inequality for it gives the information that is needed to find the conditions that lead to saturation.

**Proof.** We define the following two states:

$$\begin{aligned} |f\rangle &\equiv (A - \langle A \rangle I) |\Psi\rangle \\ |g\rangle &\equiv (B - \langle B \rangle I) |\Psi\rangle. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Note that by the definition (1.2) of uncertainty,

$$\begin{aligned} \langle f|f \rangle &= (\Delta A)^2, \\ \langle g|g \rangle &= (\Delta B)^2. \end{aligned} \quad (2.21)$$

The Schwarz inequality immediately furnishes us an inequality involving precisely the uncertainties

$$\langle f|f \rangle \langle g|g \rangle \geq |\langle f|g \rangle|^2, \quad (2.22)$$

and therefore we have

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq |\langle f|g \rangle|^2 = (\text{Re}\langle f|g \rangle)^2 + (\text{Im}\langle f|g \rangle)^2. \quad (2.23)$$

Writing  $\check{A} = (A - \langle A \rangle I)$  and  $\check{B} = (B - \langle B \rangle I)$ , we now begin to compute the right-hand side:

$$\langle f|g \rangle = \langle \Psi | \check{A} \check{B} | \Psi \rangle = \langle \Psi | (A - \langle A \rangle I)(B - \langle B \rangle I) | \Psi \rangle = \langle \Psi | AB | \Psi \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle, \quad (2.24)$$

and since  $|f\rangle$  and  $|g\rangle$  go into each other as we exchange  $A$  and  $B$ ,

$$\langle g|f \rangle = \langle \Psi | \check{A} \check{B} | \Psi \rangle = \langle \Psi | BA | \Psi \rangle - \langle B \rangle \langle A \rangle. \quad (2.25)$$

From the two equations above we find a nice expression for the imaginary part of  $\langle f|g \rangle$ :

$$\text{Im}\langle f|g \rangle = \frac{1}{2i} (\langle f|g \rangle - \langle g|f \rangle) = \frac{1}{2i} \langle \Psi | [A, B] | \Psi \rangle. \quad (2.26)$$

For the real part the expression is not that simple, so it is best to leave it as the anticommutator of the checked operators:

$$\text{Re}\langle f|g \rangle = \frac{1}{2} (\langle f|g \rangle + \langle g|f \rangle) = \frac{1}{2} \langle \Psi | \{\hat{A}, \hat{B}\} | \Psi \rangle \quad (2.27)$$

Back in (2.23) we get

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq \left( \langle \Psi | \frac{1}{2i} [A, B] | \Psi \rangle \right)^2 + \left( \langle \Psi | \frac{1}{2} \{\hat{A}, \hat{B}\} | \Psi \rangle \right)^2. \quad (2.28)$$

This can be viewed as the most complete form of the uncertainty inequality. It turns out, however, that the second term on the right hand side is seldom simple enough to be of use, and many times it can be made equal to zero for certain states. At any rate, the term is positive or zero so it can be dropped while preserving the inequality. This is often done, thus giving the celebrated form (2.14) that we have now established.

Now that we have a proven the uncertainty inequality, we can ask: What are the conditions for this inequality to be saturated? If the goal is to minimize uncertainties, under what conditions can we achieve the minimum possible product of uncertainties? As the proof shows, saturation is achieved under two conditions:

1. The Schwarz inequality is saturated. For this we need  $|g\rangle = \beta|f\rangle$  where  $\beta \in \mathbb{C}$ .
2.  $\text{Re}\langle f|g \rangle = 0$ , so that the last term in (2.28) vanishes. This means that  $\langle f|g \rangle + \langle g|f \rangle = 0$ .

Using  $|g\rangle = \beta|f\rangle$  in Condition 2, we get

$$\langle f|g \rangle + \langle g|f \rangle = \beta \langle f|f \rangle + \beta^* \langle f|f \rangle = (\beta + \beta^*) \langle f|f \rangle = 0, \quad (2.29)$$

which requires  $\beta + \beta^* = 0$  or that the real part of  $\beta$  vanish. It follows that  $\beta$  must be purely imaginary. So,  $\beta = i\lambda$ , with  $\lambda$  real, and therefore the uncertainty will be saturated if and only if

$$|g\rangle = i\lambda|f\rangle, \quad \lambda \in \mathbb{R}. \quad (2.30)$$

More explicitly this requires

$$\boxed{\text{Saturation Condition: } (B - \langle B \rangle I) |\Psi\rangle = i\lambda (A - \langle A \rangle I) |\Psi\rangle.} \quad (2.31)$$

This must be viewed as a condition for  $\Psi$ , given any two operators  $A$  and  $B$ . Moreover, note that  $\langle A \rangle$  and  $\langle B \rangle$  are  $\Psi$  dependent. What is  $\lambda$ , physically? Well, the norm of  $\lambda$  is actually fixed by the equation. Taking the norm of both sides we get

$$\Delta B = |\lambda| \Delta A \rightarrow |\lambda| = \frac{\Delta B}{\Delta A}. \quad (2.32)$$

The classic illustration of this saturation condition is worked out for the  $x, p$  uncertainty inequality  $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$ . You will find that gaussian wavefunctions satisfy the saturation condition.

## 物理意义：

(1) 微观粒子同一方向上的坐标与动量不可同时准确测量，它们的精度存在一个终极的不可逾越的限制。

$\Delta x \downarrow$ , 则  $\Delta p_x \uparrow$ ;  $\Delta x \rightarrow 0$ , 则  $\Delta p_x \rightarrow \infty$       微观世界固

$\Delta p_x \downarrow$ , 则  $\Delta x \uparrow$ ;  $\Delta p_x \rightarrow 0$ , 则  $\Delta x \rightarrow \infty$       有规律

(2) 不确定的根源是“波粒二象性”这是微观粒子的根本属性。

(3) 对宏观粒子，因  $h$  很小， $\Delta x \Delta p_x \rightarrow 0$  可视为位置和动量能同时准确测量。

对于微观粒子， $h$  不能忽略， $\Delta x$ 、 $\Delta p_x$  不能同时具有确定值。此时，只有从概率统计角度去认识其运动规律。在量子力学中，将用波函数来描述微观粒子。不确定关系是量子力学的基础。

**例18-1** 质量10 g 的子弹，速率200 m/s.

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)，该子弹位置的不确定量范围为多大？

**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18-2** 一电子具有200 m/s的速率，动量的不确定范围为动量的 0.01% (这也是足够精确的了)，则该电子的位置不确定范围有多大？

**解** 电子的动量

$$p = mv = 9.1 \times 10^{-31} \times 200 \text{ kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$$

$$p = 1.8 \times 10^{-28} \text{ kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$$

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

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

# § 8 量子力学简介

## 一 波函数 概率密度

### 1 波函数

由于微观粒子具有波粒二象性，其位置与动量不能同时确定。所以已无法用经典物理方法去描述其运动状态。用波函数来描述微观粒子的运动。

#### (1) 经典的波与波函数

- ◆ 机械波  $y(x, t) = A \cos 2\pi(vt - \frac{x}{\lambda})$
- ◆ 电磁波 
$$\left\{ \begin{array}{l} E(x, t) = E_0 \cos 2\pi(vt - \frac{x}{\lambda}) \\ H(x, t) = H_0 \cos 2\pi(vt - \frac{x}{\lambda}) \end{array} \right.$$
- ◆ 经典波为**实**函数  $y(x, t) = \text{Re}[A e^{-i 2\pi(vt - \frac{x}{\lambda})}]$

## (2) 量子力学波函数(复函数)

描述微观粒子运动的波函数  $\Psi(x, y, z, t)$

微观粒子的波粒二象性  $v = \frac{E}{h}$      $\lambda = \frac{h}{p}$  恒定——单色波

不确定关系:     $\Delta p = 0 \Rightarrow \Delta x \rightarrow \infty$     沿整个x轴传播

$\Delta E = 0 \Rightarrow \Delta t \rightarrow \infty$     波列无穷长

自由粒子的能量和动量是确定的，其德布罗意频率和波长不变，可认为是一平面单色波. 波列无限长，根据不确定原理，粒子在x方向上的位置完全不确定.

### ◆ 自由粒子平面波函数

$$\Psi(x, t) = \psi_0 e^{-i2\pi(\nu t - \frac{x}{\lambda})} = \psi_0 e^{-i\frac{2\pi}{\hbar}(Et - px)}$$

# 自由粒子平面波函数

一维

$$\Psi(x, t) = \psi_0 e^{-i\frac{2\pi}{\hbar}(Et - px)}$$

三维

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi_0 e^{-i\frac{2\pi}{\hbar}(Et - \vec{p} \cdot \vec{r})}$$

## 2 波函数的统计意义

概率密度：在某处单位体积内粒子出现的概率

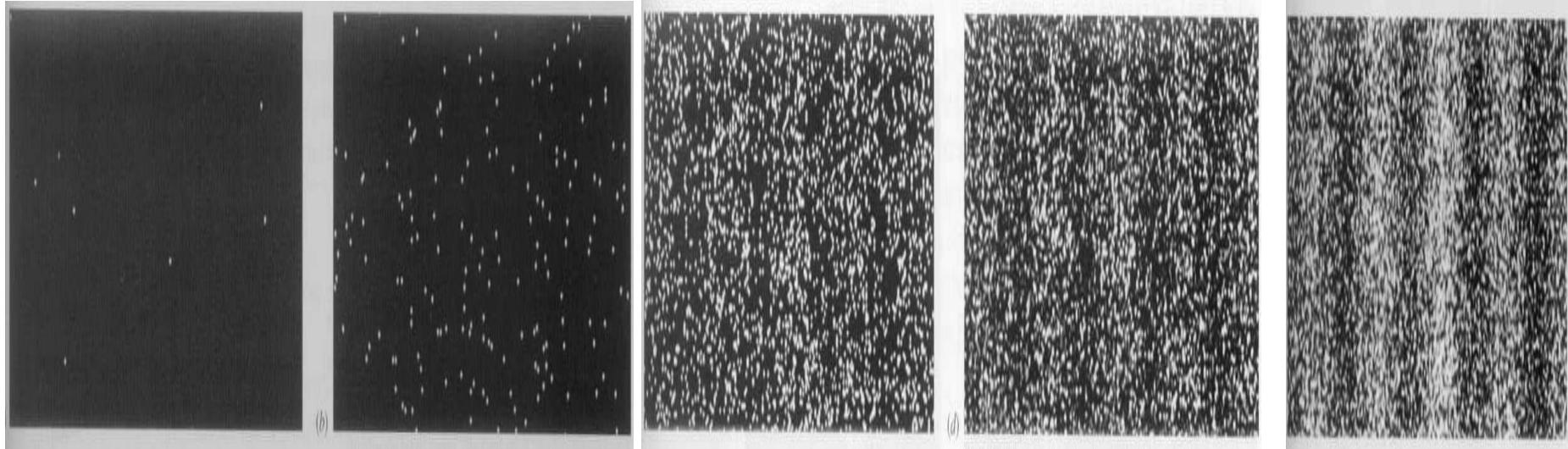
$$|\Psi|^2 = \psi\psi^* \quad \text{正实数}$$

某一时刻出现在某点附近在体积元 $dV$ 中的粒子的概率为

$$|\Psi|^2 dV = \psi\psi^* dV$$

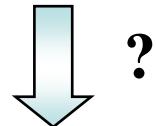
德布罗意波(或物质波)与机械波、电磁波不同，是一种概率波。

## \*单电子双缝衍射实验：“一个电子”所具有的波动性



7个电子      100个电子    3000个电子    20000个电子 70000个电子

粒子观点     $\longrightarrow$  亮度  $\propto$  粒子数  $\propto$  粒子出现的概率



波动观点     $\longrightarrow$  亮度  $\propto$  波强  $\propto$  振幅的平方

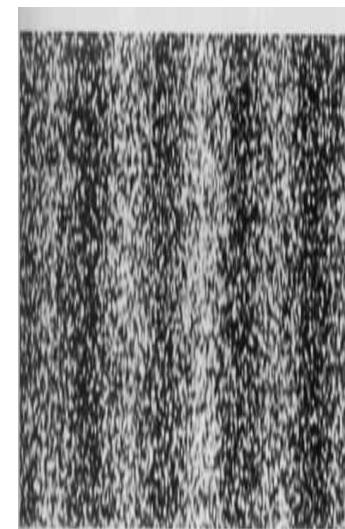
## \*玻恩 (Max Born) 的波函数统计诠释( 1926 )

物质波并不像经典波那样代表实在物理量的波动而是描述粒子在空间概率分布的**概率波**。波函数 $\psi$ 是描述粒子空间概率分布的“**概率幅**”。

波函数的模方 
$$|\psi(\vec{r}, t)|^2 = \psi^*(\vec{r}, t)\psi(\vec{r}, t)$$

表示  $t$  时刻微观粒子出现在空间  $\vec{r}$  点附近单位体积内的“**相对概率密度**”。

概率幅大的地方粒子**出现概率大**——亮纹



### 3 波函数的条件

物质波不代表任何物质实在的经典波动，波函数也不是测量到的某一物理量，而是用来计算测量几率的数学量。

- (1)  $\psi(\vec{r}, t)$  是**单值**函数。  
(2)  $\psi(\vec{r}, t)$  是**有限**的。  
(3)  $\psi(\vec{r}, t)$  是空间**连续**的。  
(4)  $\psi(\vec{r}, t)$  在全空间内满足**归一化**条件。
- 波函数的标准化条件

$$\int_{\text{全空间}} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3 r = 1$$

$$\int |\Psi|^2 dV = 1$$

# 1926年：薛定谔方程

由于微观粒子的位置与动量不能同时确定，所以已经无法用经典物理去描述其运动状态。

1926年，薛定谔受到德布罗意的启发，试图用波函数来描述微观粒子的运动。这一年他连续发表了四篇文章：1926年1月，他在物理年鉴发表文章“以特征值问题处理量子化理论”，提出了著名的薛定谔方程。这被视二十世纪最重要的物理学成就之一。第二篇文章在四个星期后发表，给出了量子谐振子、刚体及双原子分子的薛定谔方程的解。在五月发表的第三篇文章中，薛定谔证明了他的做法等价于海森堡的矩阵力学。第四篇文章说明了如何处理随时间变化的系统，例如散射问题。



薛定谔 (Erwin Schrodinger, 1887—1961) 奥地利物理学家.

1926年建立了以薛定谔方程为基础的**波动力学**，并建立了量子力学的近似方法 .

1933年与狄拉克获诺贝尔物理学奖.

薛定谔方程是非相对论微观粒子的基本方程  
地位同经典物理的牛顿定律

## 二 薛定谔方程

### 1 自由粒子薛定谔方程的建立

自由粒子平面波函数

$$\Psi(x, t) = \psi_0 e^{-i\frac{2\pi}{h}(Et - px)}$$

取  $x$  的二阶偏导数和  $t$  的一阶偏导数

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{4\pi^2 p^2}{h^2} \Psi \quad \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i2\pi}{h} E \Psi$$

自由粒子 ( $v \ll c$ )       $E = E_k$        $p^2 = 2mE_k$

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = i \frac{h}{2\pi} \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

一维运动自由粒子  
的含时薛定谔方程

## 2 粒子在势能为 $E_p$ 的势场中运动

$$E = E_k + E_p$$

### ◆ 一维运动粒子的含时薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + E_p(x, t) \Psi = i \frac{\hbar}{2\pi} \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

## 3 粒子在恒定势场中的运动

$$E = \frac{p^2}{2m} + E_p \quad E_p(x) \text{ 与时间无关}$$

$$\Psi(x, t) = \psi_0 e^{-i \frac{2\pi}{\hbar} (Et - px)} = \psi(x)\phi(t) \quad \text{分离变量}$$

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\phi(t)$$

$$\text{代入} \quad -\frac{h^2}{8\pi^2 m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + E_p(x)\Psi = i \frac{h}{2\pi} \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \phi(t) \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + E_p(x)\psi(x)\phi(t) = i \frac{h}{2\pi} \psi(x) \frac{\partial \phi}{\partial t}$$

等式两边除以  $\psi(x)\phi(t)$

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \frac{1}{\psi} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + E_p(x) = i \frac{h}{2\pi \phi} \frac{\partial \phi}{\partial t}$$

**x 的函数**

**t 的函数**

$$i \frac{h}{2\pi \phi} \frac{\partial \phi}{\partial t} = E \quad \text{常量, 能量量纲}$$

$$\therefore \phi(t) = \phi_0 e^{-i 2\pi E t / h}$$

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\phi_0 e^{-i 2\pi E t / h} = \psi(x)e^{-i 2\pi E t / h}$$

$$\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-i 2\pi E t / h}$$

代入  $-\frac{h^2}{8\pi^2 m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + E_p \Psi = i \frac{h}{2\pi} \frac{\partial \Psi}{\partial t}$

- 在势场中一维运动粒子的定态薛定谔方程

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - E_p) \psi(x) = 0$$

- 三维势场中运动粒子的定态薛定谔方程

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - E_p) \psi = 0$$

拉普拉斯算子

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$$\nabla^2 \psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - E_p) \psi = 0$$

定态波函数  $\psi(x, y, z)$

## 例：氢原子的定态薛定谔方程

$$E_p = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$\nabla^2 \psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \left( E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi = 0$$

### 定态波函数性质

- (1) 能量  $E$  不随时间变化.
- (2) 概率密度  $|\psi|^2$  不随时间变化.

$$\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-i 2\pi E t / h} \quad |\Psi|^2 = |\psi|^2$$

- (3) 粒子在无限深势阱中的运动，电子在原子内的运动等，可视为定态下的运动.