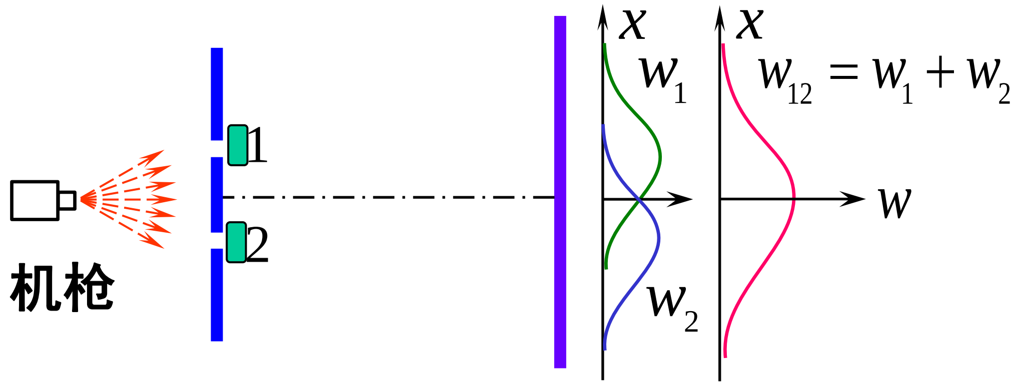
22.3 波函数与概率密度

三、波函数的态叠加原理

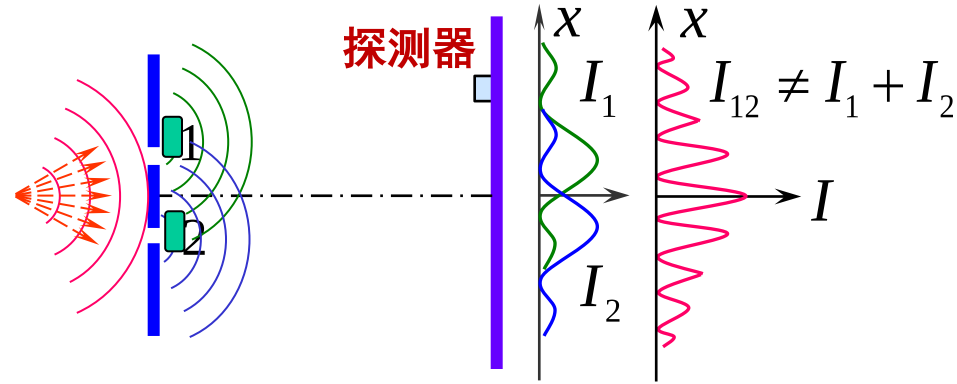
1.经典粒子--子弹



$$w_{12} = w_1 + w_2$$

结论：子弹是整颗地出现，其到达接收屏的概率**不显示干涉现象**。

2.经典波--声波

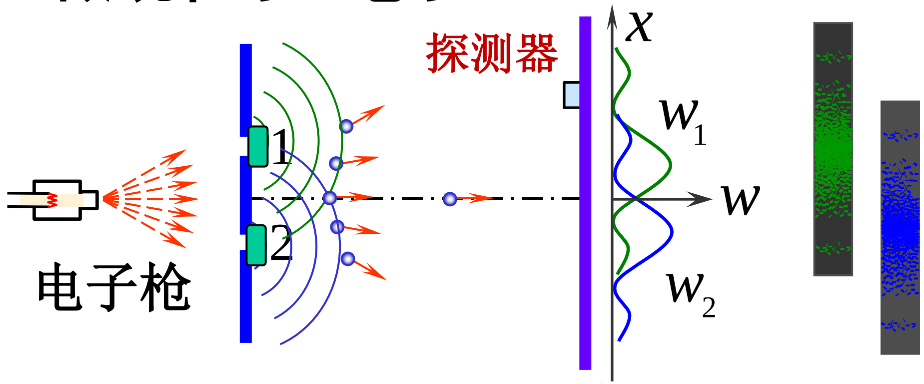


当双缝齐开时，由于波的相干，使声波强度重新分布。

$$I_{12} = I_1 + I_2 + \underline{2\sqrt{I_1 I_2}\cos\Delta\varphi}$$ 干涉项

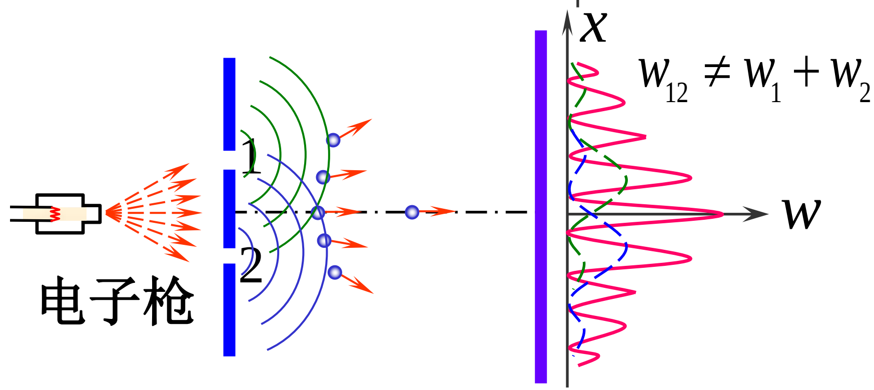
波的强度分布与子弹的概率分布完全不同。

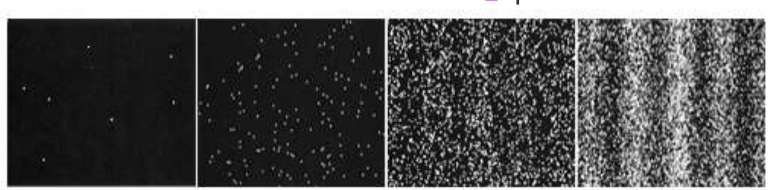
3.微观粒子--电子



$$w_1 = |\Psi_1|^2$$

$$w_2 = |\Psi_2|^2$$





7个电子 100个电子 3000个电子 70,000个电子

$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$$

$$w_{12} = |\Psi_1 + \Psi_2|^2$$

双缝**同时打开**时

$$w_{12} = |\Psi_1 + \Psi_2|^2 = (\Psi_1 + \Psi_2)(\Psi_1^* + \Psi_2^*)$$

$$= \Psi_1^*\Psi_1 + \Psi_2^*\Psi_2 + (\Psi_1^*\Psi_2 + \Psi_2^*\Psi_1)$$

$$= w_1 + w_2 + \underline{(\Psi_1^*\Psi_2 + \Psi_2^*\Psi_1)}$$

当双缝同时打开时，电子的概率分布并不是两次概率分布之和，多出**第三项**，从而出现了**干涉图样**。

量子力学中态的叠加导致了在叠加态下观测结果的不确定性

4.波函数的态叠加原理

如果波函数$\Psi_1, \Psi_2, \ldots \Psi_n$ 都是物理系统的可能状态，那么它们的线性组合也是这个系统的一个可能的状态。

$$\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2 + \cdots + c_n\Psi_n + \cdots = \sum_n c_n\Psi_n$$

$c_1, c_2 \cdots c_n$ 是复数

——量子力学的基本原理之三

- 对于一个指定的量子体系，如果找到了它的完备的基本状态，如 $\{\Psi_n\,(\mathrm{n}=1,2,..)\}$ ，则任何状态都可以由这些基本状态叠加得到。

- 量子力学和经典力学有完全不同的自由度。

如：一维空间中运动的粒子

经典力学：自由度为1　　　运动学变量为$x=x(t)$

量子力学：自由度为无穷多　运动学变量为$c_n(t)(n=1,2\ldots)$

量子态满足叠加原理，一个量子系统的全部可能状态构成一个数学上的线性空间（又称矢量空间）。

——Hilbert空间

➤ 动量分布几率

一个自由粒子的波函数 $\Psi(\vec{r},t)=\Psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-\vec{p}\cdot\vec{r})}$

先不考虑时间变量，则 $\Psi(\vec{r},t)$ 的空间部分为

$$\vec{u}_{\vec{p}}(\vec{r})=\sqrt{\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}}e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}$$

$\sqrt{\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}}$ 为归一化系数

由叠加原理，任何波函数（不一定是自由粒子的波函数）都可以写成

$$\Psi(\vec{r},t)=\int_\infty \Phi(\vec{p},t)\sqrt{\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}}e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}d^3\vec{p} \qquad (d^3\vec{p}=dp_x dp_y dp_z)$$

动量空间

即各种不同动量的平面波叠加。

反过来说，由$\Psi(\vec{r},t)$ 决定$\Phi(\vec{p},t)$的式子（即上面变换的反变换）

$$\Phi(\vec{p},t)=\int_{\infty}\Psi(\vec{r},t)\sqrt{\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}}\mathrm{e}^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\mathrm{d}^3\vec{r}\qquad(\mathrm{d}^3\vec{r}=\mathrm{d}r_x\mathrm{d}r_y\mathrm{d}r_z)$$

数学上的傅立叶（Fourier）变换

由于$\Psi(\vec{r},t)$和$\Phi(\vec{p},t)$ 可以唯一的互求，即它们包含了同样多的信息

$\Phi(\vec{p},t)$和 $\Psi(\vec{r},t)$ 一样，完全描写了体系的状态。

动量表象

坐标表象

$\Phi(\vec{p},t)$ 的物理意义：动量几率振幅 $|\Phi(\vec{p},t)|^2$ 表示动量几率密度

一维情况

$$\Psi(x,t)=\int_{\infty}\Phi(p,t)\sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{ip\cdot x/\hbar}\mathrm{d}p$$

$$\Phi(p,t)=\int_{\infty}\Psi(x,t)\sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{-ip\cdot x/\hbar}\mathrm{d}x$$

可以证明：傅立叶（Fourier）变换保证了粒子在动量空间中的总几率和在坐标空间中的总几率是相同的。

$$\int_{\infty}\Phi^{*}(\vec{p},t)\Phi(\vec{p},t)\mathrm{d}^{3}\vec{p}=\int_{\infty}\Psi^{*}(\vec{r},t)\Psi(\vec{r},t)\mathrm{d}^{3}\vec{r}$$

波函数的统计诠释：用 $|\Psi|^{2}$ 表达的任何力学量空间的概率密度。

➤ 力学量的平均值

坐标x的平均值 $\bar{x} = \int_{\infty} |\Psi(x)|^2 x \mathrm{d}^3\vec{r}$

三维情况 $\bar{\vec{r}} = \int_{\infty} |\Psi(\vec{r})|^2 \vec{r} \mathrm{d}^3\vec{r} = \int_{\infty} \Psi^*(\vec{r})\vec{r}\Psi(\vec{r})\mathrm{d}^3\vec{r}$

$\Psi(\vec{r})$ 是归一化的

若 $\Psi(\vec{r})$ 不归一

$$\bar{\vec{r}} = \frac{\int_{\infty} \Psi^*(\vec{r})\vec{r}\Psi(\vec{r})\mathrm{d}^3\vec{r}}{\int_{\infty} \Psi^*(\vec{r})\Psi(\vec{r})\mathrm{d}^3\vec{r}}$$

势能平均值 $\bar{U}(\vec{r}) = \int_{\infty} \Psi^*(\vec{r})U(\vec{r})\Psi(\vec{r})\mathrm{d}^3\vec{r}$

动量平均值 $\bar{\vec{p}} = \int_\infty \Phi^*(\vec{p})\vec{p}\Phi(\vec{p})\mathrm{d}^3\vec{p}$

若用 $\Psi(\vec{r})$ **计算** $\bar{\vec{p}}$ $\quad \Phi(\vec{p}) = \int_\infty \Psi(\vec{r})\sqrt{\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}}\mathrm{e}^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\mathrm{d}^3\vec{r}$

$$\bar{\vec{p}} = \int_\infty \Phi^*(\vec{p})\vec{p}\Phi(\vec{p})\mathrm{d}^3\vec{p}$$

$$= \int_\infty \left(\int_\infty \Psi^*(\vec{r})\sqrt{\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}}\mathrm{e}^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\mathrm{d}^3\vec{r}\right)\vec{p}\Phi(\vec{p})\mathrm{d}^3\vec{p}$$

$$= \int_\infty \Psi^*(\vec{r})\left[\int_\infty \sqrt{\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}}\mathrm{e}^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\vec{p}\Phi(\vec{p})\mathrm{d}^3\vec{p}\right]\mathrm{d}^3\vec{r}$$

$$\nabla = \vec{i}\frac{\partial}{\partial x} + \vec{j}\frac{\partial}{\partial y} + \vec{k}\frac{\partial}{\partial z}$$

$$= \int_\infty \Psi^*(\vec{r})(-\mathrm{i}\hbar\nabla)\left[\int_\infty \sqrt{\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}}\mathrm{e}^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\Phi(\vec{p})\mathrm{d}^3\vec{p}\right]\mathrm{d}^3\vec{r}$$

$$= \int_\infty \Psi^*(\vec{r})(-\mathrm{i}\hbar\nabla)\Psi(\vec{r})\mathrm{d}^3\vec{r} = \int_\infty \Psi^*(\vec{r})\hat{\vec{p}}\Psi(\vec{r})\mathrm{d}^3\vec{r}$$

动量算符 $\hat{\vec{p}} = -\mathrm{i}\hbar\nabla$

借助$-\mathrm{i}\hbar\nabla$可以直接用坐标的波函数计算动量的平均值。

经典力学中，动能T是动量的函数 $T = \dfrac{\vec{p}^{\,2}}{2m}$

动能算符 $\hat{T} = \dfrac{\hat{\vec{p}}^{\,2}}{2m} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$ ∇^2 是拉普拉斯算符

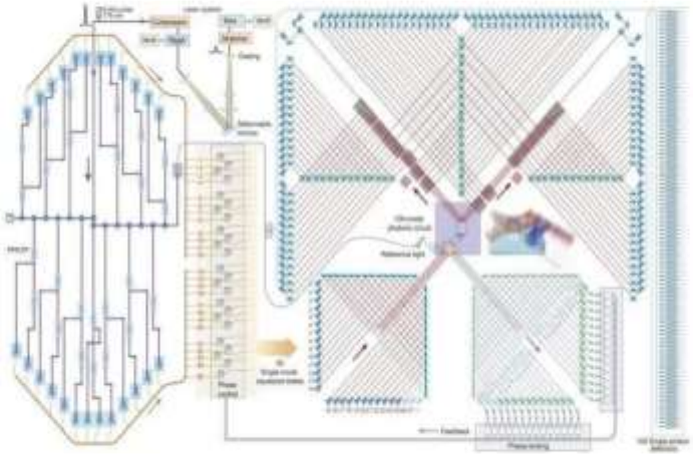
坐标算符 $\hat{\vec{r}} = \vec{r}$ **势能算符** $\hat{U} = U(\vec{r})$

角动量算符 $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{r} \times \nabla$

利用算符，求平均值的公式就适用于任何物理量

即 $$\bar{F} = \int_{\infty} \Psi^*(\vec{r})\hat{F}(\vec{r})\Psi(\vec{r})\mathrm{d}^3\vec{r}$$

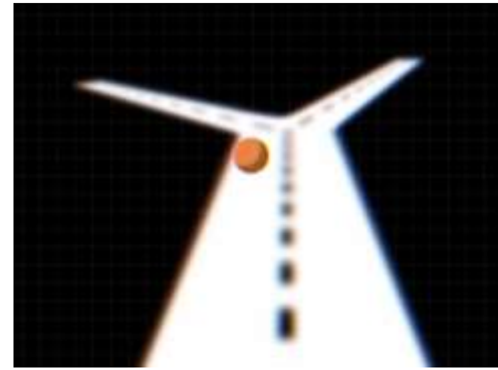
薛定谔的猫



量子计算原型机——九章

观测的时候发生了什么？

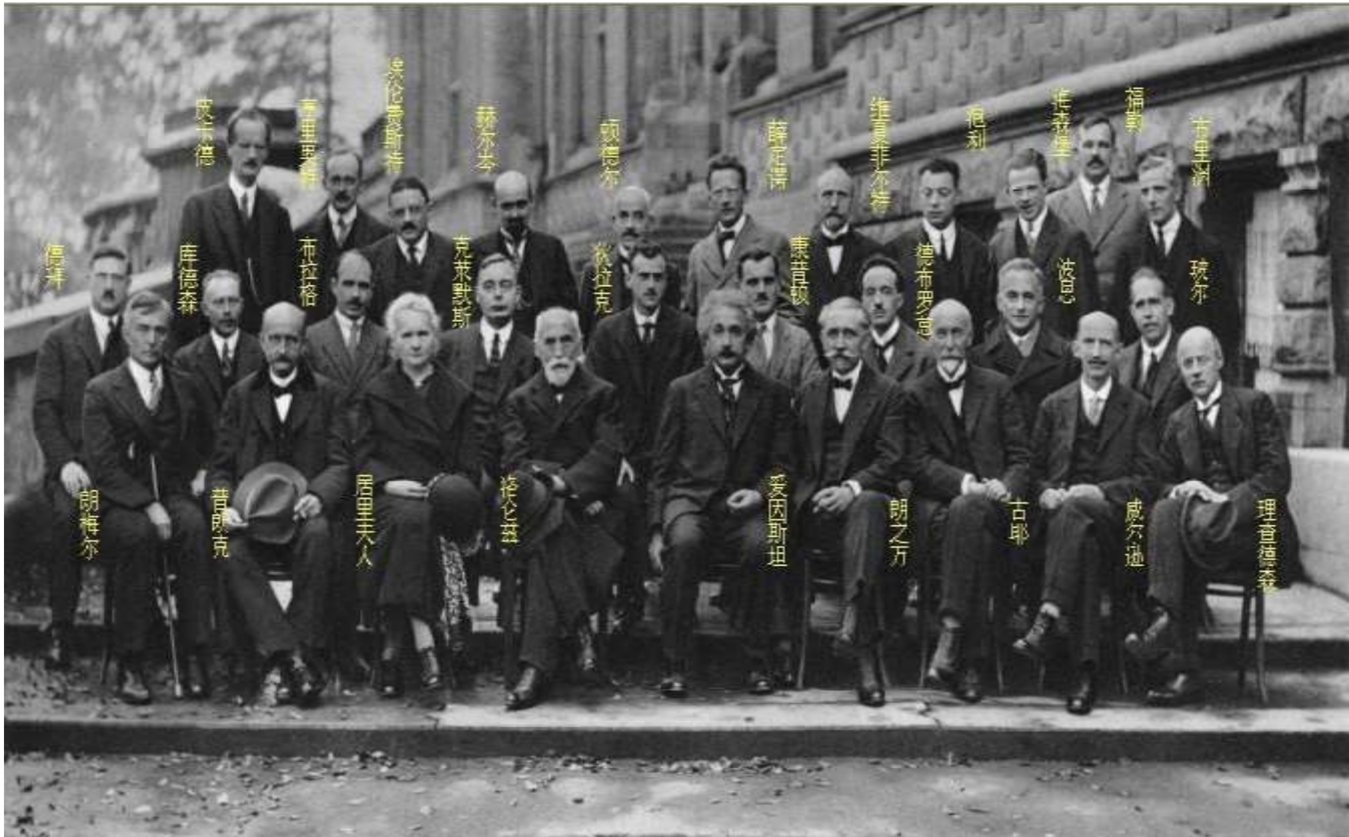
哥本哈根诠释



量子塌缩

弦景观 多重宇宙

埃弗雷特诠释


埃伦费斯特
赫尔岑
顿德尔
薛定谔
维夏菲尔特
泡利
海森堡
福勒
布里渊
德拜
库德森
布拉格
克莱默斯
狄拉克
康普顿
德布罗意
波恩
玻尔
朗梅尔
普朗克
居里夫人
洛伦兹
爱因斯坦
朗之万
古耶
威尔逊
理查德森

第五届索尔维会议

第23章 薛定谔方程

我们从什么地方得到薛定谔方程？没有地方，它不可能从你知道的任何公式推导出来，它是在薛定谔脑子里想出来的。

——理查德·费曼

23.1 薛定谔方程

一、引进方程的基本考虑

1. 经典粒子情况

粒子满足的方程是牛顿方程：$\vec{F}=m\dfrac{\mathrm{d}^2\vec{r}}{\mathrm{d}t^2}$

动力学方程是t的二阶常微分方程

2. 经典的波情况

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2}=\frac{1}{u^2}\frac{\partial^2 y}{\partial t^2}$$

动力学方程是t，x的二阶偏微分方程

2. 量子情况

（1）方程应是线性的

因波函数满足态叠加原理

$$\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2 + \cdots + c_n\Psi_n + \cdots = \sum_n c_n\Psi_n$$

(2) 方程应与粒子的内在属性参数（如质量、电荷、自旋）有关，而与粒子的状态参数（如动量、能量、角动量）无关。

因方程可以给出粒子的各种可能状态，故在方程里的参数不能包含状态参数。

二、自由粒子的薛定谔方程

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

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E\Psi \qquad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\Psi$$

☞ 低速条件下（非相对论性） $E = \frac{p^2}{2m}$

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

一维运动自由粒子含时薛定谔方程

三维情况

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

自由粒子

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

三维运动自由粒子含时薛定谔方程

☞ **在高速条件下（相对论性）** $E^2 = c^2p^2 + m_0^2c^4$

$$\hbar^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = c^2\hbar^2\nabla^2\Psi - m_0^2c^4\Psi$$

克莱因—戈尔登方程

三、一般情况的薛定谔方程

势场 $E_p = U(x, t)$ 总能量 $E = \dfrac{p^2}{2m} + U$

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

三维势场 $U(\vec{r}, t)$ $E = \dfrac{p^2}{2m} + U(\vec{r},t)$

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

——薛定谔（Schrödinger）方程

四、定态薛定谔方程（能量本征方程）

定态： 当**势能函数**仅是坐标的函数，而与时间无关

定态波函数： 描述处于定态的粒子状态的波函数

定态下的薛定谔方程

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

$$设:\Psi(\vec{r},t)=\psi(\vec{r})f(t)$$

如：$\Psi(x,t)=\psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-p\cdot x)}=\psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}p\cdot x}\cdot e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$

则三维的情况

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

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

两边同除以 $\psi(\vec{r})f(t)$

$$\frac{1}{\psi(\vec{r})}[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r})+U(\vec{r})\psi(\vec{r})]=\frac{i\hbar}{f(t)}\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t}$$

要两边相等，只有等于同一常数

$$\frac{1}{\psi(\vec{r})}[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r})+U(\vec{r})\psi(\vec{r})]=\frac{i\hbar}{f(t)}\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t}$$

对右边 $\frac{i\hbar}{f(t)}\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t}=E$　　其解为 $f(t)=Ce^{-\frac{i}{\hbar}Et}$

讨论：

（1）由于指数只能是无量纲的纯数,故 E 的量纲为焦耳,即 E 为能量。

（2） C 并入 $\psi(\vec{r})$ 中 波函数为 $\Psi(\vec{r},t)=\psi(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$

$$\left|\Psi(\vec{r},t)\right|^2=\Psi\Psi^*=\left|\psi(\vec{r})\right|^2 e^{-\frac{i}{\hbar}Et}e^{\frac{i}{\hbar}Et}=\left|\psi(\vec{r})\right|^2$$

概率密度不随时间变化，代表粒子的稳定状态

$\psi(\vec{r})$ 满足的方程叫定态薛定谔方程

作业：

P244: 一. 1 、2 二. 1、2