大学物理

张磊 （13072919527）
B824，Cyrus Tang Building

怎样理解物质波（德布罗意波）？

德布罗意：物质波是引导粒子运动的“导波”

—— 本质是什么，不明确

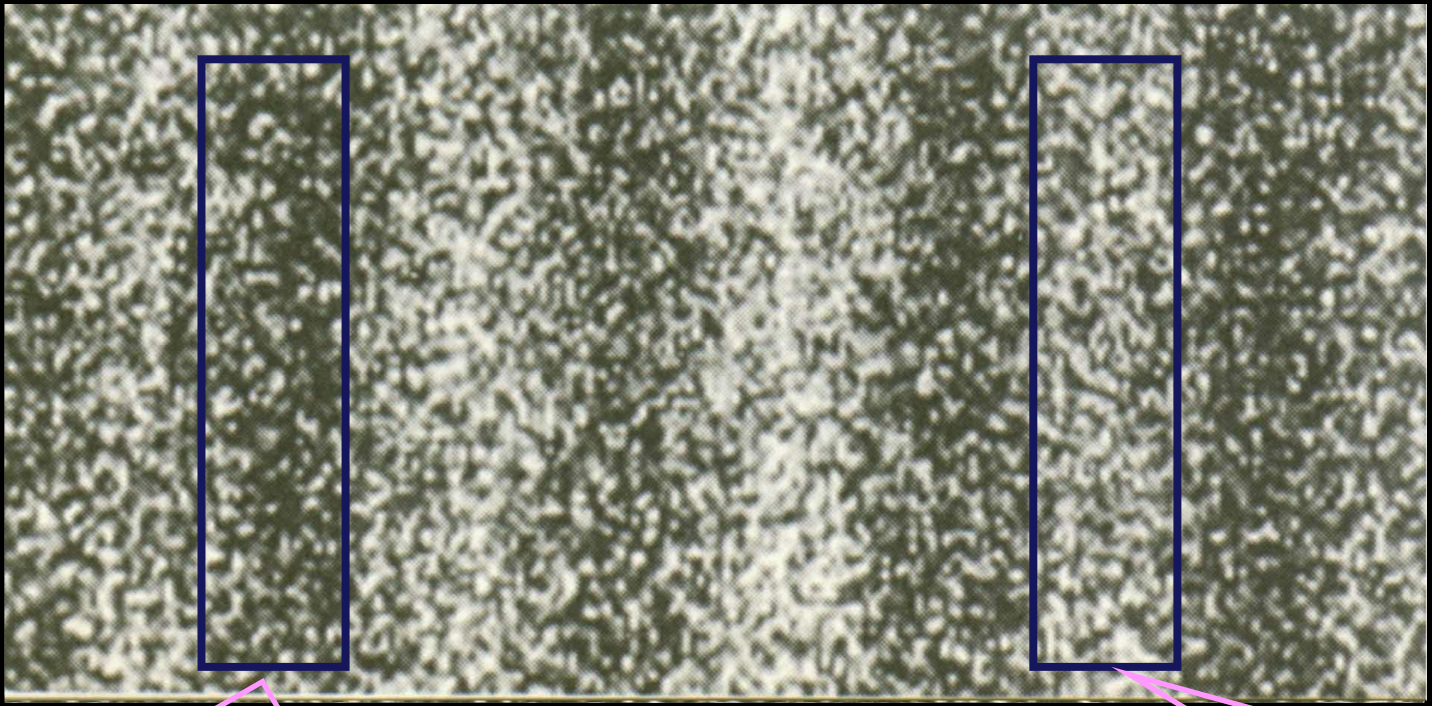
薛定谔：波是基本的， 电子是“物质波包”

—— 夸大了波动性，抹煞了粒子性

- 通过电子衍射可以在空间不同方向上观测到波包的一部分：如果波代表实体，那就意味着能观测到电子的一部分，这与显示电子具有整体性的实验结果矛盾。
- 波包总要扩散，而电子是稳定的。

另一种理解：粒子是基本的，电子的物质波是大量电子相互作用形成的。

为防止电子间发生作用，让电子一个一个地入射，发现时间足够长后的干涉图样和大量电子同时入射时完全相同。



电子双缝干涉图样

电子数少

电子数 N=70000

电子数多

电子的波动性并不是很多电子在空间聚集在一起时相互作用的结果，而是单个电子本身就具有波动性。换言之，干涉是电子“自己和自己”的干涉。

无论是大量电子同时入射，还是电子一个一个地长时间地入射，都只是让单个电子干涉的效果在底片上积累并显现出来而已。

单个粒子在哪一处出现是偶然事件；

大量粒子的分布有确定的统计规律。

玻恩（M.Born）：德布罗意波并不像经典波那样是代表实在物理量的波动，而是描述粒子在空间的概率分布的“概率波”。

对微观粒子波粒二象性的正确理解

粒子性

整体性

不是经典的粒子 没有“轨道”概念

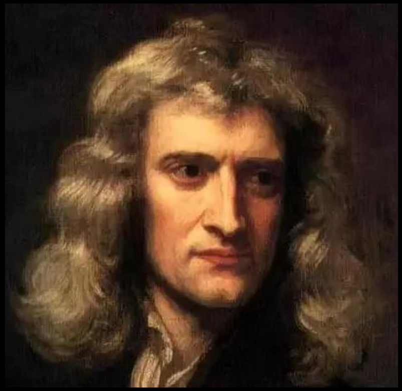
波动性

“可叠加性”

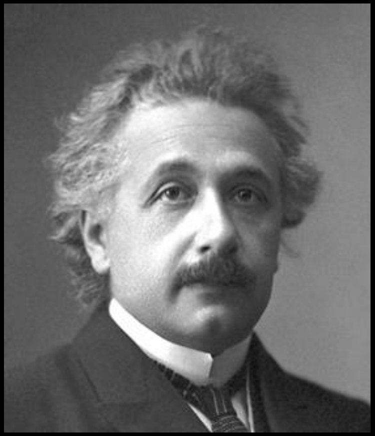
有“干涉”、“衍射”、“偏振”现象

不是经典的波 不代表实在物理量的波动

微观粒子在某些条件下表现出粒子性，在另一些条件下表现出波动性，而两种性质虽寓于同一客体中，却不能同时表现出来。



我们掌握了世界的真理！

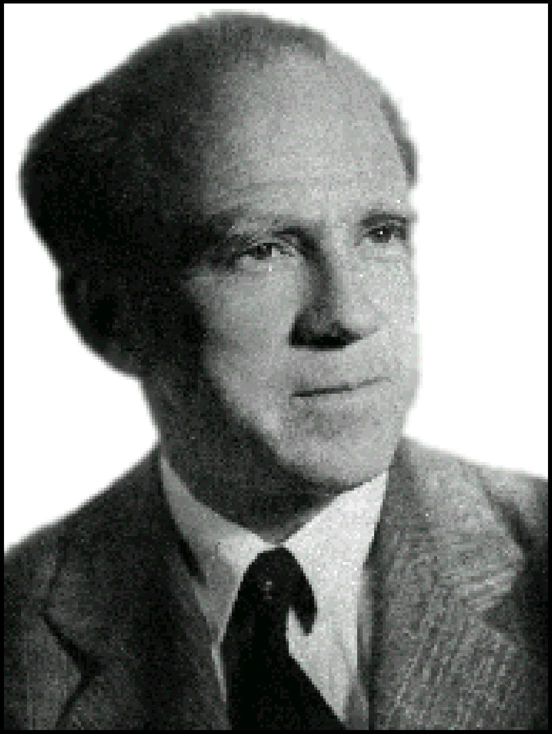


别急，出来走两步，跑快点看

别忙，放大看两眼，仔细点看

不确定关系
Uncertainty principle

海森伯（W. K. Heisenberg，1901-1976）



德国物理学家

量子力学的主要创始人，哥本哈根学派的代表人物。

- 1925年，创立了量子力学的一种形式体系—矩阵力学；
- 1926年，提出了物质波波函数的概率解释；
- 1927年，提出了不确定关系。
- 1932年，获得诺贝尔物理学奖。

1927年，海森伯分析了一些理想实验并考虑到德布罗意关系，得出**不确定关系**（or 测不准关系）。

1. “动量-坐标”的不确定关系

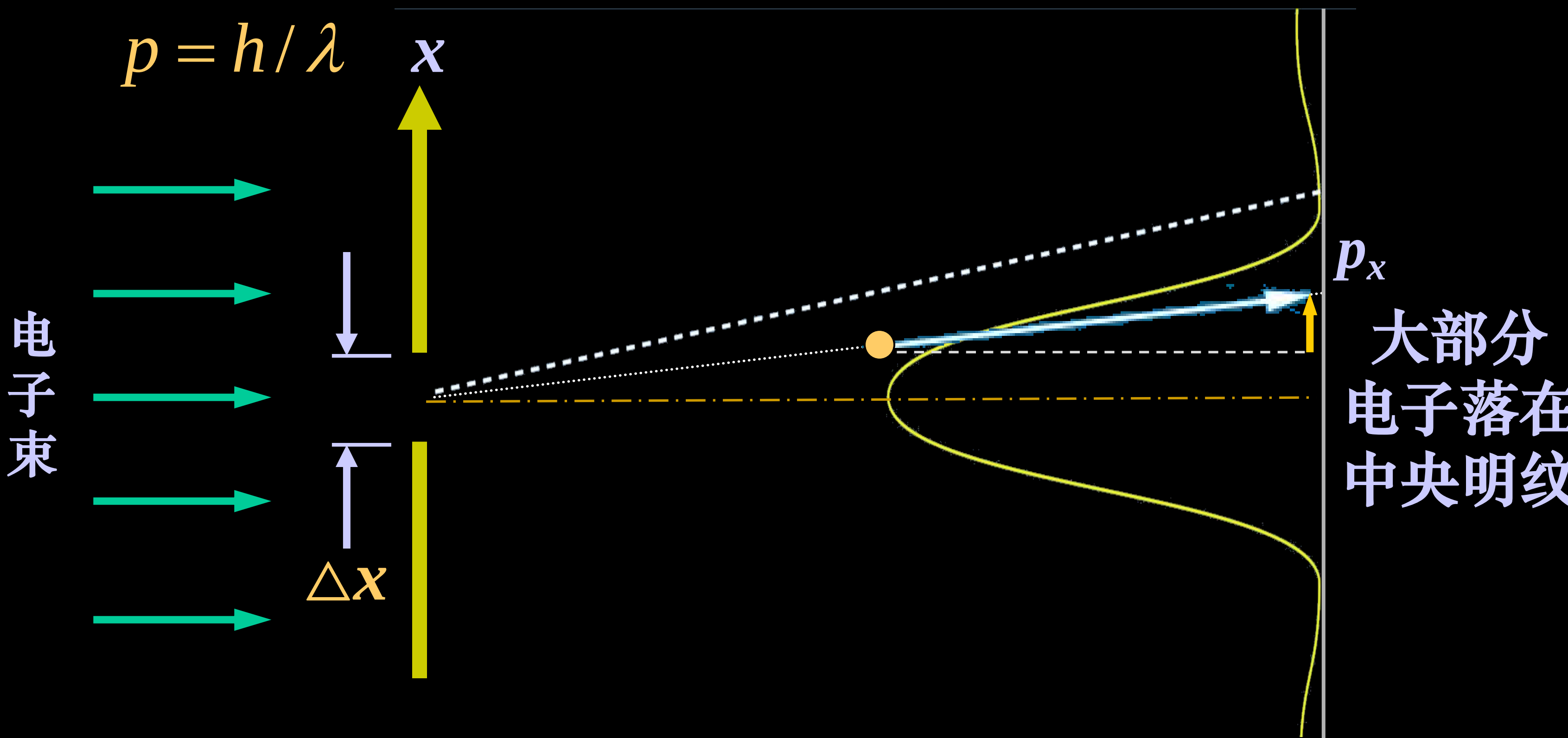
微观粒子的位置坐标 x、 动量分量 p_x 不能同时具有确定的值。

Δx、Δp_x 分别是 x、 p_x 的不确定量，其乘积

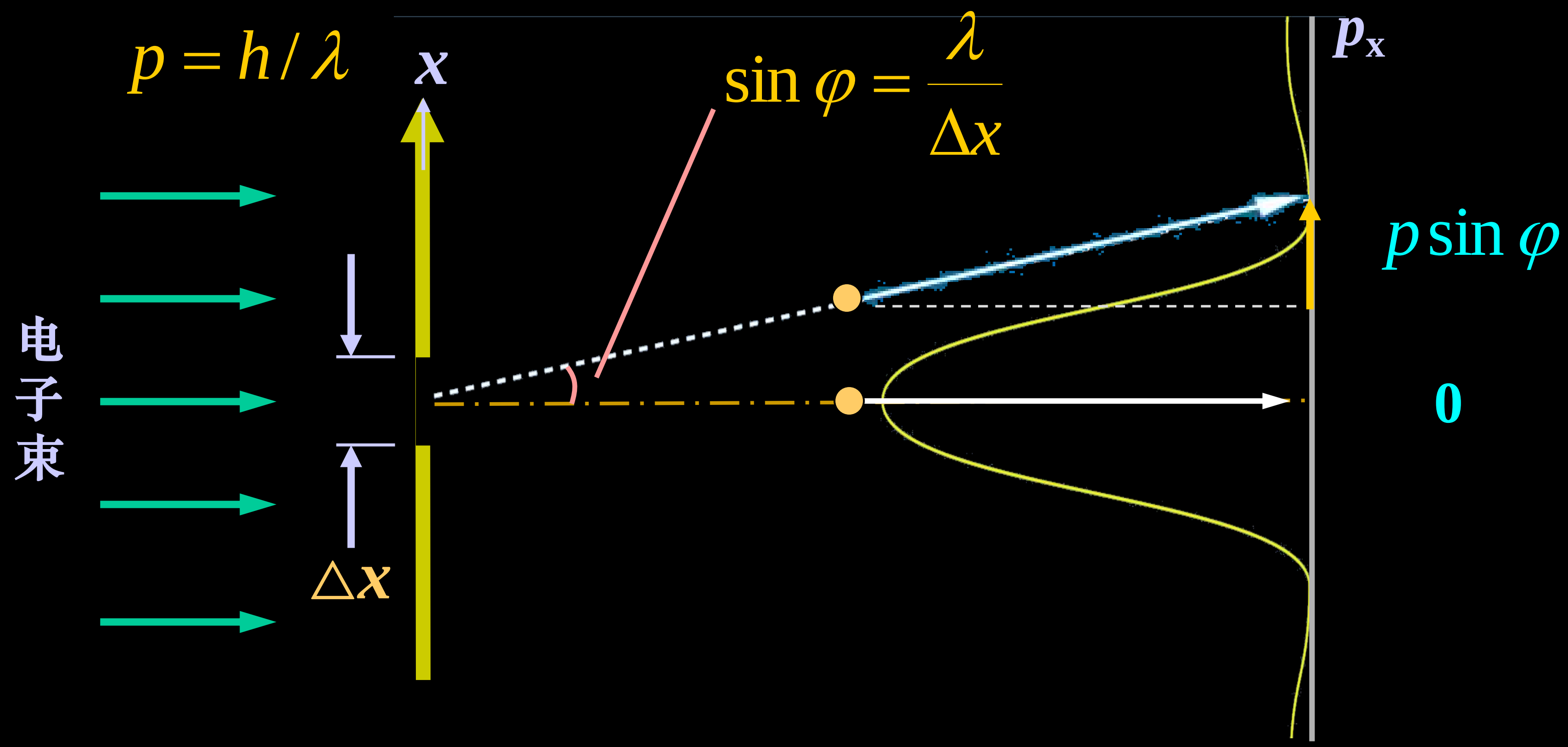
$$\Delta x \, \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

一个量确定的越准确，另一个量的不确定程度就越大。

下面借助电子单缝衍射实验加以说明。



电子经过狭缝，其坐标 x 的不确定量为 $\triangle x$ ；



电子经过狭缝，其坐标 x 的不确定量为 Δx ； 动量分量 p_x 的不确定量为

$$\Delta p_x = p\sin\varphi = h/\Delta x \qquad \Delta x\,\Delta p_x = h$$

减小缝宽 Δx, x 确定的越准确 → p_x的不确定度, 即Δp_x越大

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 。

2. 不确定的根源是“波粒二象性”，这是自然界的根本属性 。

3. 不确定关系提供了一个判据：当不确定关系施加的限制可以忽略时，则可以用经典理论来研究粒子的运动。当不确定关系施加的限制不可以忽略时，那只能用量子理论来处理问题。

例 一颗质量为 10g 的子弹，具有 200m/s 的速度，动量的不确定量为 0.01%，问：在确定该子弹的位置时，有多大的不确定范围?

解 子弹的动量为

$$p = mv = 0.01 \times 200 = 2\mathrm{kg \cdot m \cdot s^{-1}}$$

子弹的动量的不确定量为

$$\Delta p = p \cdot 0.01\% = 2 \times 10^{-4}\,\mathrm{kg \cdot m \cdot s^{-1}}$$

由不确定关系，可以得到子弹位置的不确定范围为

$$\Delta x = \frac{h}{\Delta p} = \frac{6.63 \times 10^{-34}}{2 \times 10^{-4}} = 3.32 \times 10^{-30}\,\mathrm{m}$$

这个不确定范围是微不足道的，可见不确定关系对宏观物体来说，实际上是不起作用的。

例 子弹（$m = 0.10$ g，$\upsilon = 200$ m/s）穿过 0.2 cm 宽的狭缝.

求 沿缝宽方向子弹的速度不确定量.

解 $\Delta x = 2\times 10^{-3}\,\mathrm{m}$

子弹速度的不确定量为

$$\Delta \upsilon_x = \frac{\Delta p_x}{m} \geq \frac{\hbar}{2m\Delta x} = \frac{6.63\times 10^{-34}}{4\times 3.14\times 0.1\times 10^{-3}\times 2\times 10^{-3}}$$

$$= 2.64\times 10^{-28}\ \mathrm{m/s}$$

例 原子的线度约为 10^{-10} m，求原子中电子速度的不确定量。

解 原子中电子的位置不确定量 10^{-10} m，由不确定关系

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

电子速度的不确定量为

$$\Delta \upsilon_x = \frac{\Delta p_x}{m} \geq \frac{\hbar}{2m\Delta x} = \frac{6.63\times 10^{-34}}{4\times 3.14\times 9.1\times 10^{-31}\times 10^{-10}}$$

$$= 5.8\times 10^{5}\ \mathrm{m/s}$$

说明

氢原子中电子速率约为 10^{6} m/s。速率不确定量与速率本身的数量级基本相同，因此原子中电子的位置和速度不能同时完全确定，也没有确定的轨道。

例 氦氖激光器所发红光波长 $\lambda = 6328$ Å，谱线宽度 $\Delta\lambda = 10^{-8}$ Å.

求 当这种光子沿 x 方向传播时，它的 x 坐标不确定度(波列长度).

解

$$p_x = \frac{h}{\lambda}$$

$$\Delta p_x = \frac{h}{\lambda_1} - \frac{h}{\lambda_2} = \frac{h(\lambda_1 - \lambda_2)}{\lambda_1 \lambda_2} \approx \frac{h\Delta\lambda}{\lambda^2}$$

$$\Delta x = \frac{\hbar}{\Delta p_x} = \frac{\lambda^2}{2\pi\Delta\lambda} \approx 4\times 10^5 \mathrm{m}$$

2. “能量-时间”的不确定关系

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

反映了原子能级宽度 ΔE 和原子在该能级的平均寿命 Δt 之间的关系。

激发态

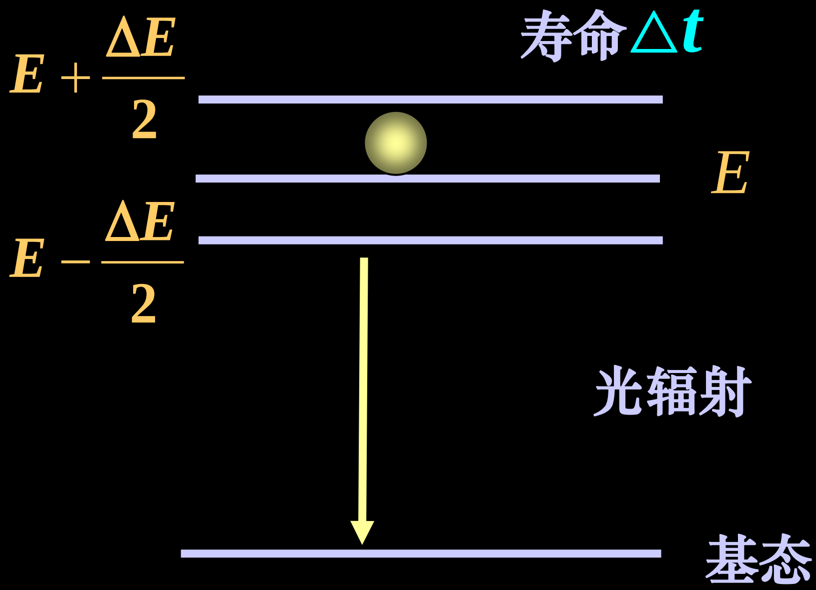
平均寿命 $\Delta t \sim 10^{-8}\ \mathrm{s}$

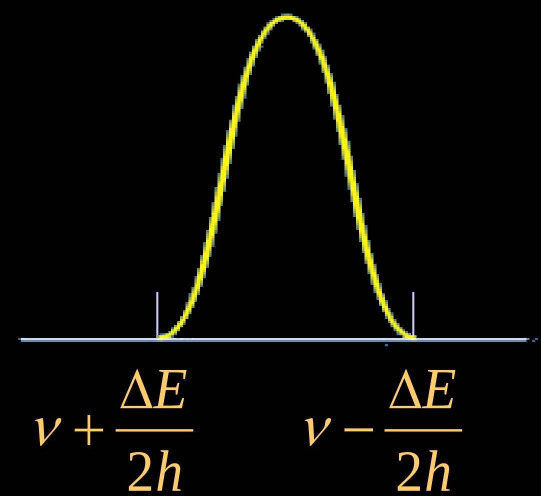
能级宽度 $\Delta E \geq \dfrac{\hbar}{2\Delta t} \sim 10^{-8}\ \mathrm{eV}$

基态

平均寿命 $\Delta t \to \infty$

能级宽度 $\Delta E \to 0$





辐射光谱线固有宽度

§16.6 波函数 一维定态薛定谔方程

机械波	波函数	$y(x,t)=A\cos[2\pi(\nu t-\frac{x}{\lambda})+\varphi_0]$
	波动方程	$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2}=\frac{1}{u^2}\frac{\partial^2 y}{\partial t^2}$
电磁波	波函数	$E=E_0\cos\left[\omega\left(t-\frac{x}{u}\right)\right]$
	波动方程	$\frac{\partial^2 E}{\partial x^2}=\frac{1}{u^2}\frac{\partial^2 E}{\partial t^2}$
物质波	波函数	?
	波动方程	?

薛定谔 (Erwin Schrödinger, 1887–1961)

薛定谔在德布罗意思想的基础上，于1926年在《量子化就是本征值问题》的论文中，提出氢原子中电子所遵循的波动方程（薛定谔方程），并建立了以此为基础的波动力学和量子力学的近似方法。薛定谔方程在量子力学中占有极其重要的地位，它与经典力学中的牛顿运动定律的价值相似。

1933年，薛定谔（同英国物理学家狄拉克一起）获诺贝尔物理奖。

薛定谔还是现代分子生物学的奠基人，1944年，他发表一本名为《什么是生命-活细胞的物理面貌》的书，从能量、遗传和信息方面来探讨生命的奥秘。

一. 波函数及其统计解释

微观粒子具有波动性

不确定关系 → 不能用坐标、速度、加速度等物理量描述

1925年薛定谔 → 用物质波波函数描述微观粒子状态

波粒二象性

→要求在描述微观粒子的运动时，要有创新的概念和思想来统一波和粒子这两个在经典物理中截然不同的物理图像。

波函数就是作为**量子力学基本假设**之一引入的一个新的概念。

量子力学认为：**微观粒子的运动状态可用一个复函数** $\Psi(x,y,z,t)$ **来描述**，函数 $\Psi(x,y,z,t)$ ——称为**波函数**。

平面简谐波

一个频率为ν，波长为 λ 、沿 x 方向传播的单色平面波的波函数为

$$y(x,t) = A\cos 2\pi\left(\nu t - \frac{x}{\lambda}\right)$$

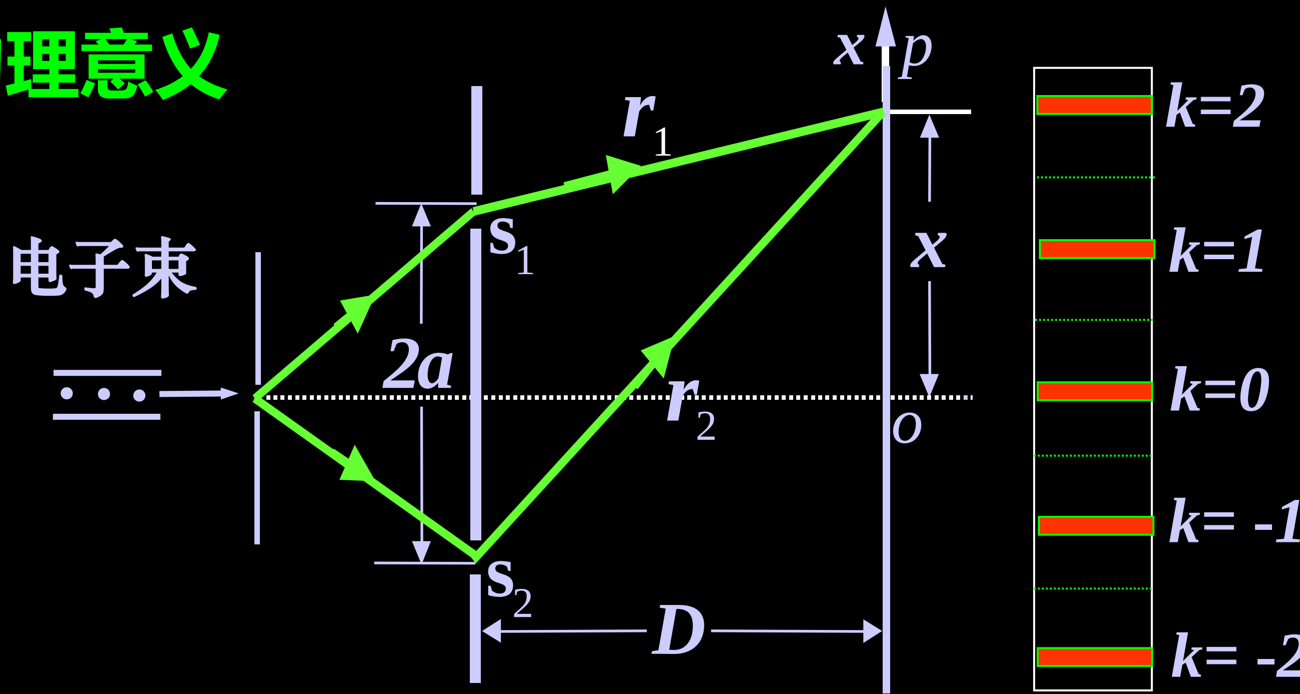
复数形式→ $y(x,t) = Ae^{-i2\pi\left(\nu t-\frac{x}{\lambda}\right)}$

→自由粒子的波函数

自由粒子沿 x 轴正方向运动，具有动能 E 和动量 p 。由于其能量、动量为常量，所以 ν 、 λ 不随时间变化，其物质波是**单色平面波**，波函数为

$$\Psi(x,t) = \Psi_0 e^{-i2\pi(\nu t-\frac{x}{\lambda})} = \Psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)}$$

波函数的物理意义



波　动　观　点　　　　　　粒　子　观　点

明纹处：电子波强 $|\Psi(x,y,z,t)|^2$大　　电子出现的概率大

暗纹处：电子波强 $|\Psi(x,y,z,t)|^2$小　　电子出现的概率小

→波函数模的平方 $|\Psi(x,y,z,t)|^2 \propto$ 粒子在该处附近出现的概率

波函数Ψ(x,y,z,t)的统计解释(波恩于1926年提出，又称哥本哈根解释)：**波函数模的平方代表某时刻 t 在空间某点(x,y,z)附近单位体积内发现粒子的概率，即$|\Psi|^2$代表概率密度。**

说明:

1. 时刻 t， 粒子在空间 (x, y, z)处 $\mathrm{d}V$ 体积内出现的概率

$$\mathrm{d}W = |\Psi(x,y,z,t)|^2 \,\mathrm{d}V = \Psi(x,y,z,t)\Psi^*(x,y,z,t)\mathrm{d}V$$

2. **归一化条件** (粒子在整个空间出现的概率为1)

$$\iiint |\Psi(x,y,z,t)|^2 \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z = 1$$

3. 波函数必须满足**标准条件**：**单值、有限、连续**

概率密度在空间任一处都必须是**唯一**的、**有限**的，并在整个空间内**连续**

讨论

1. 概率波函数统计解释和 物理意义

在 t 时刻，$\vec{r}$ 点处的体积元中找到粒子的概率

$$\boxed{|\psi(\vec{r},t)|^2 \Delta x \Delta y \Delta z = \psi^*(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t)\Delta x \Delta y \Delta z}$$

2. 标准化条件

☆ 在空间任何有限体积元中，找到粒子概率是有限的

$$\int_V |\psi(\vec{r},t)|^2 dxdydz = \text{有限值}$$ —— 有限性

任意时刻、任意地点，波函数只有单一值 —— 单值性

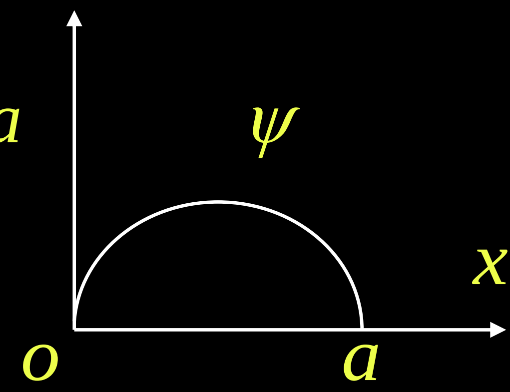
波函数不能在某处发生突变 —— 连续性

☆ 粒子在空间各点概率总和:

$$\boxed{\int_{total} |\psi(\vec{r},t)|^2 dxdydz = 1}$$ —— 归一化条件 (normalizing condition)

例： 有一粒子在一维空间运动，其波函数为

$$\psi(x,t)=\begin{cases}0 & x\le 0,\ x\ge a\\ A\exp(-i\dfrac{Et}{\hbar})\sin\dfrac{\pi}{a}x & 0<x<a\end{cases}$$



求： 波函数的归一化因子和粒子概率密度。

解： 1 根据波函数的归一化条件，可得

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2dx=1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty}=\cancel{\int_{-\infty}^{0}|\psi|^2dx}+\int_0^a|\psi|^2dx+\cancel{\int_a^{\infty}|\psi|^2dx}$$

$$\int_0^a A^2\exp(-i\frac{Et}{\hbar})\sin\frac{\pi}{a}x\cdot\exp(i\frac{Et}{\hbar})\sin\frac{\pi}{a}x\,dx$$

$$=A^2\int_0^a\sin^2(\frac{\pi}{a}x)dx=1 \Rightarrow A=\sqrt{\frac{2}{a}} \Rightarrow$$

使该波函数归一化

$$A=\sqrt{\frac{2}{a}} \longrightarrow \psi(x,t)=\begin{cases} 0 & x\le 0, x\ge a \\ A\exp(-i\frac{Et}{\hbar})\sin\frac{\pi}{a}x & 0<x<a \end{cases}$$

2 根据玻恩统计解释，可得粒子的概率密度

$$\omega=\left|\psi^2(x)\right|=\begin{cases} 0 & x\ge a, x\le o \\ \frac{2}{a}\sin^2(\frac{\pi}{a}x) & 0<x<a \end{cases}$$

取波函数

概率极值

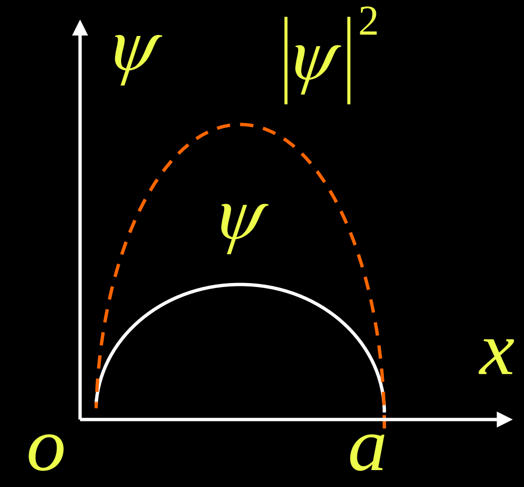
$$\frac{d}{dx}(\frac{2}{a}\sin^2\frac{\pi}{a}x)=0$$

$$\Downarrow$$

$$x=\frac{a}{2}$$

处的粒子

概率最大



The Nobel Prize in Physics 1954

M. Born

"for his fundamental research in quantum mechanics, especially for his statistical interpretation of the Wave-function"

Born and his colleagues also developed the theory of crystal lattice vibrations, and the statistical theory of fluids.

波函数的叠加原理

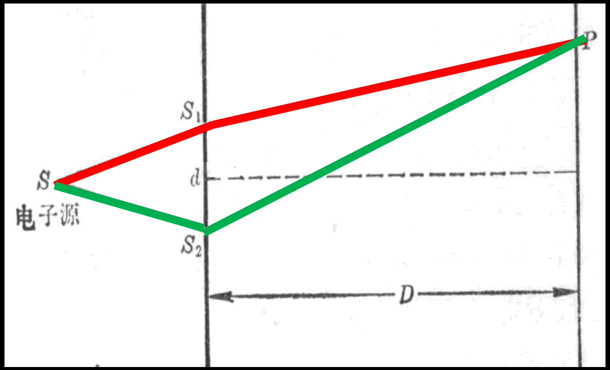
波函数叠加原理

波函数描述体系的状态，波函数的叠加原理又称态叠加原理。ψ_1, ψ_2 都是体系的可能状态，那么它们的线性叠加 $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 \left(c_1, c_2 \text{可能是复数}\right)$ 也是这个体系的一个可能状态。

如： 缝S_1单独打开时电子t时刻屏P处的波函数 $\psi_1(\vec{r}, t)$

缝S_2单独打开时 $\psi_2(\vec{r}, t)$

缝S_1，S_2同时打开时 $\psi(\vec{r}, t) = \psi_1(\vec{r}, t) + \psi_2(\vec{r}, t)$



- **说明：**

1.**当体系处于叠加态时** $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ **，也可以说体系同时处于** ψ_1, ψ_2 **相应的概率分别为** $|c_1|^2, |c_2|^2$

2.态叠加是指体系状态的叠加，叠加态模方出现交叉项，粒子在不同位置交叉项不同，粒子在不同位置出现的概率不同，微观粒子会出现干涉、衍射现象；

经典波场是可以观测的物理场，经典波的相干叠加也是物理场的叠加，不同位置出现的物理场的大小不同，经典场的叠加也会出现干涉、衍射现象。

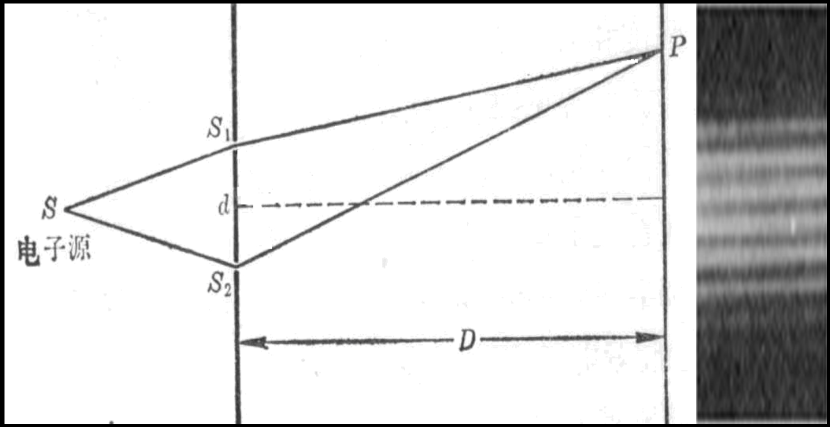
波函数叠加原理解释干涉条纹

$$\psi(\vec{r},t)=\psi_1(\vec{r},t)+\psi_2(\vec{r},t)$$

$$|\psi(r,t)|^2=|\psi_1(r,t)+\psi_2(r,t)|^2$$
$$=|\psi_1(r,t)|^2+|\psi_2(r,t)|^2$$
$$+\psi_1(r,t)\psi^*_2(r,t)+\psi^*_1(r,t)\psi_2(r,t)$$

$$\psi_1(r,t)=|\psi_1(r,t)|e^{i\varphi_1},\ \psi_2(r,t)=|\psi_2(r,t)|e^{i\varphi_2}$$

$$|\psi(r,t)|^2=|\psi_1(r,t)|^2+|\psi_2(r,t)|^2+2|\psi_1(r,t)||\psi_2(r,t)|\cos(\varphi_1-\varphi_2)$$

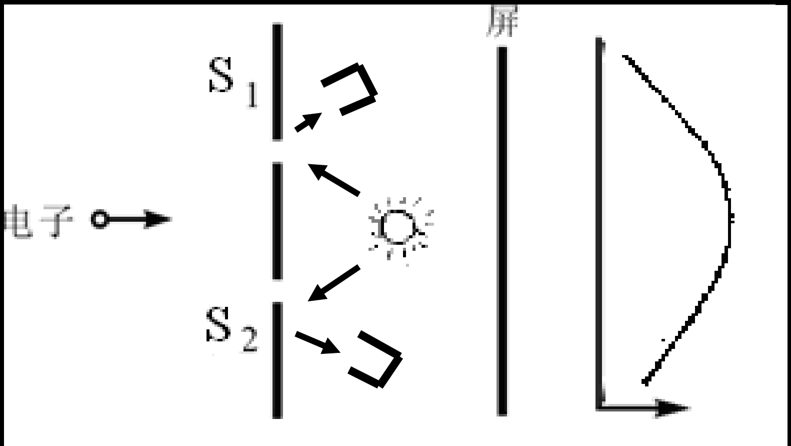


$\varphi_1-\varphi_2=2n\pi$ 电子概率大:明条纹

$\varphi_1-\varphi_2=(2n+1)\pi$ 电子概率小:暗条纹

测量电子路径

无法探测从狭缝1或狭缝2通过，屏幕上干涉条纹出现；探测出电子的路径时，干涉条纹消失。



人们的测量行为会影响测量的结果。

二. 薛定谔方程 (1926年)

—— 描述微观粒子在势场中运动的微分方程

德布洛意关于电子波动性的假设传到苏黎世后，德拜评论说，一个没有波动方程的波动理论太肤浅了！当时年轻的薛定谔在场。一周后聚会时薛定谔说：“我找到了一个波动方程！”。这就是后来在量子力学中以他的名字命名的基本动力学方程。

1. 自由粒子波函数满足的方程

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

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

自由粒子势能为零，在非相对论情况下有 $E=E_k=\dfrac{p^2}{2m}$

消去 p、E，有

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

2. 定态薛定谔方程

若粒子在某势场 U 中运动，则粒子的总能量应为

$$E = E_k + U = \frac{p^2}{2m} + U$$

$$\frac{p^2}{2m}\psi + U\psi = E\psi , \psi(x, y, z, t)$$

设 $\dfrac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -\dfrac{p_x^2}{\hbar^2}\psi , \dfrac{\partial^2\psi}{\partial y^2} = -\dfrac{p_y^2}{\hbar^2}\psi , \dfrac{\partial^2\psi}{\partial z^2} = -\dfrac{p_z^2}{\hbar^2}\psi$

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}E\psi$$

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

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+U$$ —— 哈密顿算符

薛定谔方程可写为

$$\hat{H}\psi(x,y,z,t) = i\hbar\frac{\partial\psi(x,y,z,t)}{\partial t}$$

若势能 U 不显含时间 t，则哈密顿算符和时间无关。

$$\psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z)f(t)$$

$$\hat{H}\psi(x,y,z)f(t) = i\hbar\frac{\partial\psi(x,y,z)f(t)}{\partial t}$$

两端除以 $\psi(x,y,z)f(t)$

$$\Rightarrow \frac{\hat{H}\psi(x,y,z)}{\psi(x,y,z)} = i\hbar\frac{1}{f(t)}\frac{df(t)}{dt}=E$$

一个方程： $i\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{df(t)}{dt} = E \Rightarrow f(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$

另一方程： $\hat{H}\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$

$$\boxed{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial}{\partial z^2}\right)+U\right)\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)}$$

称为**定态薛定谔方程**。

波函数： $\psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$

概率密度： $|\psi(x,y,z,t)|^2 = |\psi(x,y,z)|^2$

概率密度不随时间而改变，是一种稳定状态 → **定态**

讨论： $$\boxed{\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(\vec{r})+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\psi(\vec{r})=0}$$

(1) 求解粒子能量和定态波函数

注意：波函数的连续、单值、有限性和归一化条件

(2) 粒子在一维空间运动，可得一维定态薛定谔方程

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\psi(x)=0}$$

当粒子处于定态时，粒子出现概率是稳定的(空间分布稳定)

$$\boxed{\omega(\vec{r},t)=\left|\psi(\vec{r})\right|^2}$$

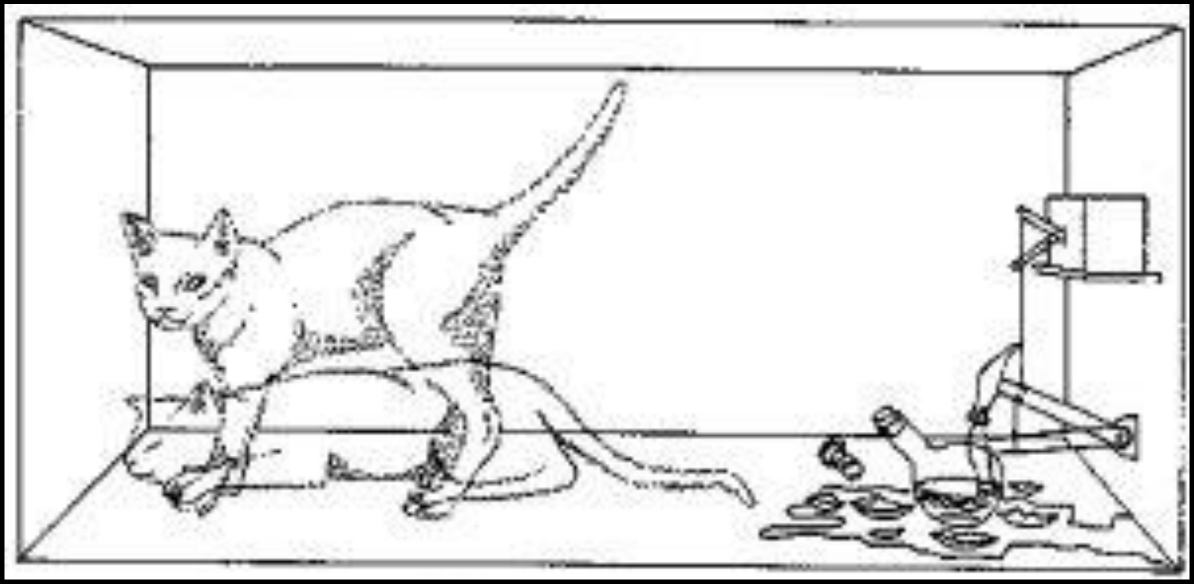
(3) 薛定谔方程是量子力学的一个基本假设，是量子力学的动力学方程，其重要性等同于经典力学的牛顿定律。其正确性依靠实验检验。

The Nobel Prize in Physics 1933

Schrödinger proposed the widely-used version of quantum mechanics known as "wave mechanics," a development of L. de Broglie's hypothesis.

Schrödinger's equation governs the structure and properties of all atoms, molecules, and macroscopic bodies except where relativistic effects are important; it is the most important equation in 20th century physical science.

物理学家薛定谔提出的一个思想实验，是指将一只猫关在装有少量镭和氰化物的密闭容器里。镭的衰变存在几率，如果镭发生衰变，会触发机关打碎装有氰化物的瓶子，猫就会死；如果镭不发生衰变，猫就存活。根据量子力学理论，由于放射性的镭处于衰变和没有衰变两种状态的叠加，猫就理应处于死猫和活猫的叠加状态。这只既死又活的猫就是所谓的“薛定谔猫”。但是是不可能存在既死又活的猫，则必须在打开箱子后才知道结果。该实验试图从宏观尺度阐述微观尺度的量子叠加原理的问题，巧妙地把微观物质在观测后是粒子还是波的存在形式和宏观的猫联系起来，以此求证观测介入时量子的存在形式。随着量子物理学的发展，薛定谔的猫还延伸出了平行宇宙等物理问题和哲学争议。



薛定谔猫：模拟宏观量子态