

量子力学与统计物理

Quantum mechanics and statistical physics

李小飞

2024 年 3 月 4 日

光电科学与工程学院

氣大為
實求真

第二章、波函数和薛定谔方程

求實求真
大氣大為

1. 波函数

波粒二象性导致的困境

波函数假说

2. 波函数统计诠释

3. 态叠加原理

4. 薛定谔方程

求實求真
大氣大為

1. 波函数

波粒二象性导致的困境

波函数假说

2. 波函数统计诠释

3. 态叠加原理

4. 薛定谔方程

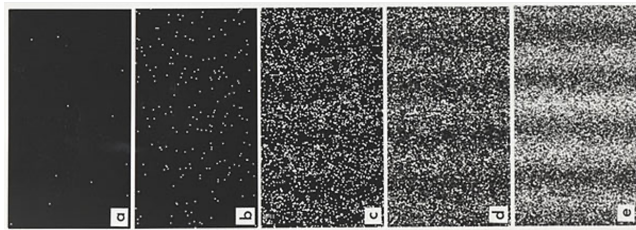
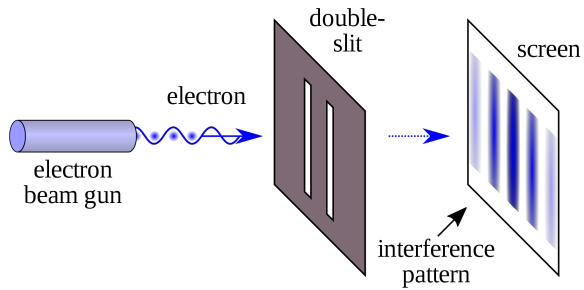
求實求真
大氣大為

1.1. 前情回顾

Wave-particle duality is the inherent attribute of matter

How to interpret a world where waves are particles and particles are waves

求
真
大
氣



求實求真
大氣大為

实验分析:

- 多个波构成电子?
- 多个电子构成波?
- 单个电子既是粒子又是波!

求實求真
大氣大為

如果单个电子既是粒子又是波

- 电子与自己干涉
- 电子同时过两个缝
- 如果可以用路径来描述粒子的运动，则电子同时至少有两条路径
- 牛顿力学失效！
- 波动学失效！

大氣大為
求實求真

1.2. 波粒二象性导致的困境

如何描述象电子这样具有波粒二象性物体的运动？

求實求真
大氣大為

1. 波函数

波粒二象性导致的困境

波函数假说

2. 波函数统计诠释

3. 态叠加原理

4. 薛定谔方程

求實求真
大氣大為

1.3. 量子力学假说 1/5

In 1924, De Broglie:

The state of matter is described by a wavefunction

(物体的状态用波函数描述)

求真
大為

构造第一个波函数(平面波函数):
在经典平面波中

$$\begin{aligned}y(x, t) &= Ae^{i(\frac{2\pi}{\lambda}x - \omega t)} \\&= Ae^{i\frac{2\pi}{h}(\frac{h}{\lambda}x - h\nu t)}\end{aligned}$$

代入德布罗意关系, 得量子平面波

$$\Psi_p(x, t) = Ae^{\frac{i}{h}(px - Et)}$$

描述自由粒子的状态

Note: 波函数是复函数

大氣大為
求實求真

一般的波，应是平面波的线性叠加

$$\Psi(x, t) = \sum_p c(p) \Psi_p(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} c(p, t) e^{\frac{i}{\hbar} p x} dp$$

求實求真
大氣大為

主要成就：

1. 物质波假说
2. 原子内电子的波动性
3. 波函数假说
4. 构造第一个波函数

“德布罗意已经揭开了面纱的一角”

… 爱因斯坦 (1925)



求實求真

统计诠释的数学描述

1. 波函数

3. 态叠加原理

2. 波函数统计诠释

4. 薛定谔方程

统计诠释

求實求真
大氣大為

统计诠释的数学描述

1. 波函数

3. 态叠加原理

2. 波函数统计诠释

统计诠释

4. 薛定谔方程

求實求真
大氣大為

In 1926, Born proposed statistical interpretation of wavefunction

2.1. 波函数统计诠释

The magnitude of wavefunction $\Psi(\vec{r}, t)$ does not tell us how much of the particle is at position \vec{r} at time t , but rather the probability (W) that the particle is at or near the position at time t .

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

(波函数的模方与粒子出现的概率成正比)

诺贝尔物理学奖 (1954)

解释干涉实验:

- 自由电子是平面波，可等概率出现在屏的任一位置
- 电子波通过双缝发生衍射和干涉，导致某些位置的振幅大，某些位置的振幅小
- 振幅较大的位置电子出现的概率大，形成明纹。振幅小的位置电子出现的概率小，形成暗纹
- 明暗干涉条纹不体现电子波的形状，体现的是电子出现概率的分布

大氣求真
大氣求真

统计诠释的数学描述

1. 波函数

3. 态叠加原理

2. 波函数统计诠释

4. 薛定谔方程

统计诠释

求實求真
大氣大為

统计诠释的数学描述:

1. 概率密度

$$\omega = |\Psi|^2 = \Psi^* \Psi$$

2. 概率

$$dW = |\Psi|^2 d\tau$$

3. 归一化

$$\int_{\Omega} |\Psi|^2 d\tau = 1$$

4. 动量波函数

$$c(\vec{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\vec{r}, t) e^{\frac{-i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} d\tau$$

大氣大為
求實求真

5. 函数 $f(x)$ 的期望值

$$\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) |\Psi(x)|^2 dx$$

6. 物理量 A 的期望值

$$\langle A \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) A \Psi(x) dx$$

大氣大為
求實求真

Tips:

■ Ψ 与 $C\Psi$ 描述同一个量子态

$$\frac{C\Psi(x_1)}{C\Psi(x_2)} = \frac{\Psi(x_1)}{\Psi(x_2)}$$

■ Ψ 与 $e^{i\varphi}\Psi$ 描述同一个量子态

$$|e^{i\varphi}\Psi|^2 = e^{-i\varphi}e^{i\varphi}|\Psi|^2 = |\Psi|^2$$

* 两相同的波叠加, 在测量上并没有什么不同, 这与经典条件下两相同的波叠加完全不同

大求
大求
大求
大求

统计诠释要求波函数满足以下条件 (标准化条件):

- 有限
- 连续
- 单值
- 平方可积

求實求真
大氣大為

例-1: 求归一化波函数

$$\psi(x) = \sin(x), \quad (0 \leq x \leq \pi)$$

解: 设归一化波函数为 $\Psi = C \sin(x)$

$$\int_0^{\pi} |C \sin(x)|^2 dx = 1$$

$$C^2 \int_0^{\pi} \sin^2(x) dx = 1$$

$$C^2 \int_0^{\pi} \frac{1 - \cos 2x}{2} dx = 1$$

$$C^2 \left[\frac{x}{2} - \frac{\sin 2x}{4} \right]_0^{\pi} = 1$$

大氣大為
求實求真

$$C = \sqrt{\frac{2}{\pi}}$$

得归一化波函数

$$\Psi = C \sin(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(x)$$

求實求真
大氣大為

例-2: 求归一化平面波函数

$$\Psi_{p_x}(x, t) = e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x - Et)}$$

解: 设归一化波函数为 $\Psi = C\Psi_{p_x}(x, t)$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |C\Psi_{p_x}(x, t)|^2 dx = 1$$

$$C^2 \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{p_x}(x) \Psi_{p_x}^*(x) dx = 1$$

$$C^2 \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{p_x}(x) \Psi_{p'_x}^*(x) dx = \begin{cases} 1 & (p_x = p'_x) \\ 0 & (p_x \neq p'_x) \end{cases}$$

$$C^2 \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{p_x}(x) \Psi_{p'_x}^*(x) dx = \delta(p_x - p'_x)$$

大氣大為
求實求真

得

$$C^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(p_x - p'_x)x} dx = \delta(p_x - p'_x)$$

代入 δ 函数的积分定义式,

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

得

$$\begin{aligned} C^2 2\pi\hbar \delta(p_x - p'_x) &= \delta(p_x - p'_x) \\ \Rightarrow C &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \end{aligned}$$

归一化平面波

$$\Psi_{p_x}(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}p_x x - Et}, \quad \Psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)}$$

大氣大學
求實求真

玻恩 (Max Born)

主要成就:

- 波函数的统计诠释
- 态叠加原理

德国理论物理学家，量子力学的奠基人之一。

因对波函数的统计解释，获 1954 年诺贝尔物理学奖。

1912 年受聘哥廷根大学无薪讲师，
1933 年因犹太血统被剥夺教职和财产，流亡英国。

泡利、海森堡和黄昆都是他的学生



求實求真

2.2. 小结

物体的状态用波函数 ($\Psi(x, t)$) 描述, 波函数的模方与 ($|\Psi(x, t)|^2$) 与粒子出现的概率成比例.

求實求真
氣大為

2.3. Big problems

Is the world obeys the rule of probability ?

求實求真
大氣大為

1. 已知氢原子电子的波函数 ($t=0$) 为 $\psi(r) = Ae^{-r/a_0}$, 试求:

(1) 归一化系数 A

(2) 电子在 $r - r + dr$ 之间出现的概率

(3) 电子在哪里出现概率最大 (r 的值)

2. 已知氢原子电子的波函数 ($t=0$) 为 Y_{10} , 试求:

(1) 电子在 $(\theta, \varphi) - (\theta + d\theta, \varphi + d\varphi)$ 之间出现的概率

(2) 电子在哪个方位出现的概率最大

大氣大為
求實求真

1. 波函数

2. 波函数统计诠释

3. 态叠加原理

态叠加原理实验基础

态叠加原理表述

波函数坍塌

学术大讨论

4. 薛定谔方程

大氣大為
求實求真

- 波粒二象性
- 波函数假说
- 波函数统计诠释

求實求真
大氣大為

态叠加原理实验基础

态叠加原理表述

波函数坍塌

学术大讨论

4. 薛定谔方程

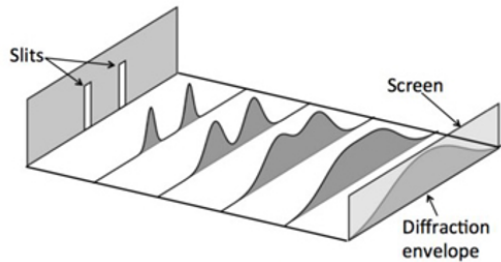
1. 波函数

2. 波函数统计诠释

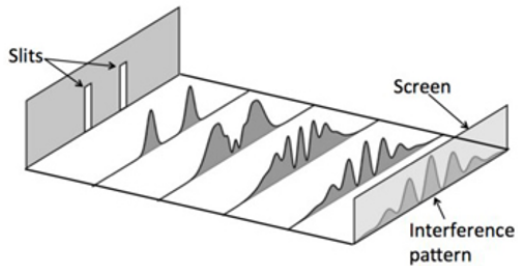
3. 态叠加原理

大氣大為
求實求真

两种双缝实验



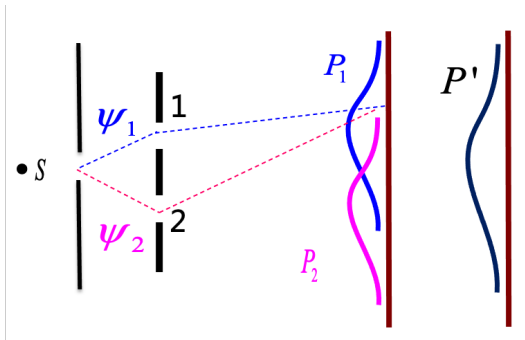
(a) 小球双缝实验



(b) 电子双缝实验

求真
求實
大為
孔

小球双缝实验

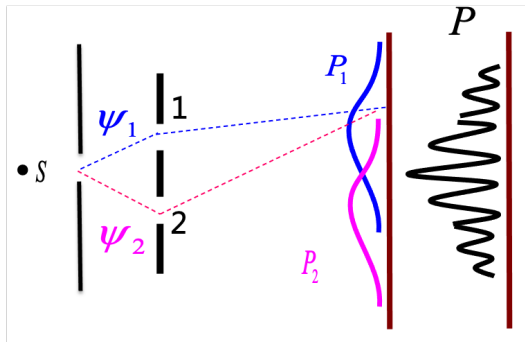


依据统计诠释，振幅是概率幅

- 小球双缝实验， $P' = P_1 + P_2$ ，是概率叠加。
- 结论：经典叠加服从概率叠加

求實求真
大氣大為

电子双缝实验



依据统计诠释，振幅是概率幅

- 电子双缝实验， $P \neq P_1 + P_2$ ，量子叠加服从的不是概率叠加！
- 波恩认为服从波函数（态）叠加，即：

$$\psi = \psi_1 + \psi_2$$

大氣大為
求實求真

分析:

- 用 ψ_1, ψ_2 分别描述电子过缝-1 和缝-2 的状态
- 双缝全开, 电子既过第一个缝和过第二个缝, 有

$$\Psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$$

- 根据统计诠释, 电子出现概率为

$$\begin{aligned}\omega d\tau &= |\Psi|^2 d\tau \\ &= (c_1\psi_1 + c_2\psi_2)^*(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) d\tau \\ &= (c_1^*\psi_1^* + c_2^*\psi_2^*)(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) d\tau \\ &= |c_1|^2\psi_1^*\psi_1 d\tau + |c_2|^2\psi_2^*\psi_2 d\tau + [c_1c_2^*\psi_1\psi_2^* + c_1^*c_2\psi_1^*\psi_2] d\tau\end{aligned}$$

- 电子处于叠加态时, 存在干涉项 (后两项), 产生干涉条纹

大氣
求實
求真

- 如果电子不处于叠加态，即电子只过一个缝，则有 ψ_1 或 ψ_2 为零，不存在干涉项，没有干涉条纹！
- 干涉条纹源于电子同时过两个缝的状态，即叠加态。

基于此，波恩提出态叠加原理

求實求真
大氣大為

态叠加原理实验基础

态叠加原理表述

波函数坍塌

学术大讨论

4. 薛定谔方程

1. 波函数

2. 波函数统计诠释

3. 态叠加原理

大氣大為
求實求真

Born also proposed that:

3.1. Superposition principle of states

If ψ_1 and ψ_2 are the possible states of the system, their linear superposition

$$\Psi = a_1\psi_1 + a_2\psi_2$$

is also the possible state of the system.

if the system locates at the superposition Ψ , the possibility of the system locating at ψ_1 is $|a_1|^2$, and at ψ_2 is $|a_2|^2$

$$|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1$$

3.2. 态叠加原理中文表述

- 如果 ψ_1 、 ψ_2 、 \dots 、 ψ_n 、 \dots 是粒子可能的状态，那么它们的线性叠加

$$\Psi = a_1\psi_1 + a_2\psi_2 + \dots + a_n\psi_n + \dots$$

也是粒子可能的状态（叠加态）

- 如果粒子处于叠加态 $\Psi = \sum_n a_n\psi_n$ ，那么粒子处在第 n 态 (ψ_n) 的概率为 $|a_n|^2$ ，且有

$$\sum_n |a_n|^2 = 1$$

* 经典叠加物体并不部分地处于原来各波的状态，测量则得到各波叠加值！

1. 波函数

2. 波函数统计诠释

3. 态叠加原理

态叠加原理实验基础

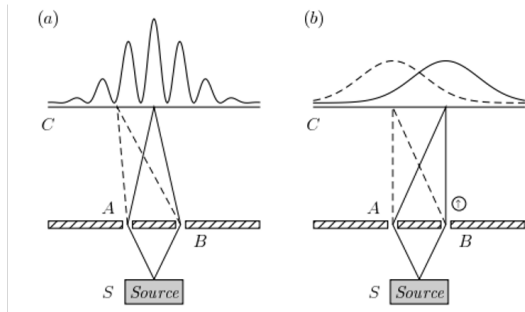
态叠加原理表述

波函数坍塌

学术大讨论

4. 薛定谔方程

大氣大為
求實求真



- 目标：观测电子是如何同时过两条缝的
- 结果：1) 只能测到电子要么过第一缝，要么过第二缝。
2) 探测器越灵敏，干涉条纹越模糊，
3) 当探测器能长时间地保持几乎可以完全判断电子过哪条缝时，干涉条纹消失！如图 (b) 所示

1. 实验目标与实验结果的一致性

- 当我们“挖出” A 和 B 两条狭缝时，“设计”了一个想要观察“波动性”的设备，也就是电子已经预先被我们设定为“波”，因此观测到波动性（干涉条纹）
- 当我们装上侦测器时，整个实验被我们“设计”成观察“粒子性”，因为想要知道电子到底是由 A 还是 B 穿过，就必须先具备确定的“位置”，因此观察到粒子性（干涉条纹消失）

2. 测量可导致状态改变

- 探测前，电子处于叠加态 ($\psi = \psi_1 + \psi_2$)
- 探测时，电子状态改变，被迫从叠加态变为确定态 (ψ_1 or ψ_2)，（称为波函数坍塌）
- 探测后，电子处于某确定态，不能干涉。
- 探测器不灵敏，有部分没有被探测到的电子处于叠加态，干涉条纹模糊。
- 探测器灵敏，全部电子被探测，没有电子处于叠加态，干涉条纹消失。

1. 测量结果的互补性（互补性原理）

- 波动性和粒子性是两种不同的属性，一般不能用同一设备进行测量
- 不能因为测得粒子性就否定波动性，反之亦然。
- 测量结果就算相互矛盾，也要同时接受，因为它们互补地揭示物体的本质。

2. 结论

- 电子具有波粒二象性，总是处于叠加态
- 不被测量，则保持在叠加态
- 测量导致确定态，但结果是随机的。
- 测得电子过某条缝，不说明电子原本就要过这条缝，只是测量导致的结果

大氣大學
求實求真

1. 波函数

2. 波函数统计诠释

3. 态叠加原理

态叠加原理实验基础

态叠加原理表述

波函数坍塌

学术大讨论

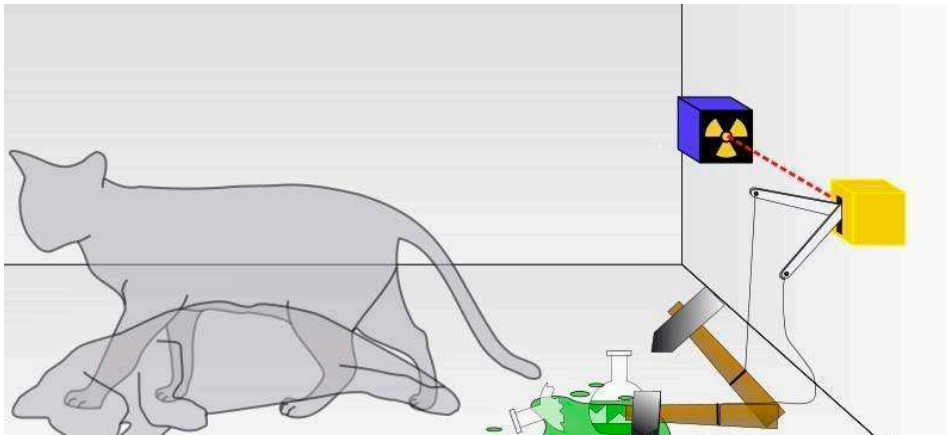
4. 薛定谔方程

大氣大為
求實求真

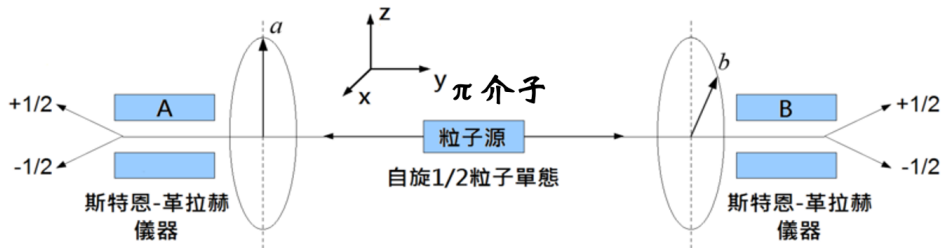
波函数的统计诠释从量子力学开始建立就成为了大家争论的要点

3.3. Which-Way 实验

- De Broglie : Pilot waves (先导波)
- Schrödinger: Schrödinger's cat (薛定谔的猫)
- Einstein: EPR 佯谬
- Wheeler: delayed choice experiment (延迟选择实验)
- Quantum eraser experiment (量子擦除实验)
-

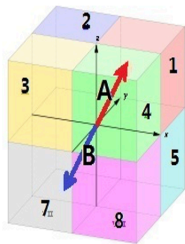


求實求真
為



求實求真
心大為

贝尔不等式



$$n_1 + n_2 + \dots + n_8 = 1$$

| Ax Ay Az | Bx By Bz | | P(xx) | P(xy) | P(xz) | P(yz) |
|----------|----------|-------|-------|-------|-------|-------|
| + + + | - - - | n_1 | -1 | -1 | -1 | -1 |
| + + - | - - + | n_2 | -1 | -1 | +1 | +1 |
| + - + | - + - | n_3 | -1 | +1 | -1 | +1 |
| - + + | + - - | n_4 | -1 | +1 | +1 | -1 |
| + - - | - + + | n_5 | -1 | +1 | +1 | -1 |
| - + - | + - + | n_6 | -1 | +1 | -1 | +1 |
| - - + | + + - | n_7 | -1 | -1 | +1 | +1 |
| - - - | + + + | n_8 | -1 | -1 | -1 | -1 |
| average | | | -1 | 0 | 0 | 0 |

$$\overline{P(xy)} = \overline{P(xz)} = \overline{P(yz)} = 0$$

$$\overline{P(xx)} = -(n_1 + n_2 + \dots + n_8) = -1$$

$$|\overline{P(xz)} - \overline{P(yz)}| = 2|(n_4 + n_5) - (n_3 + n_6)| \leq 2|n_4 + n_5| + 2|n_3 + n_6|$$

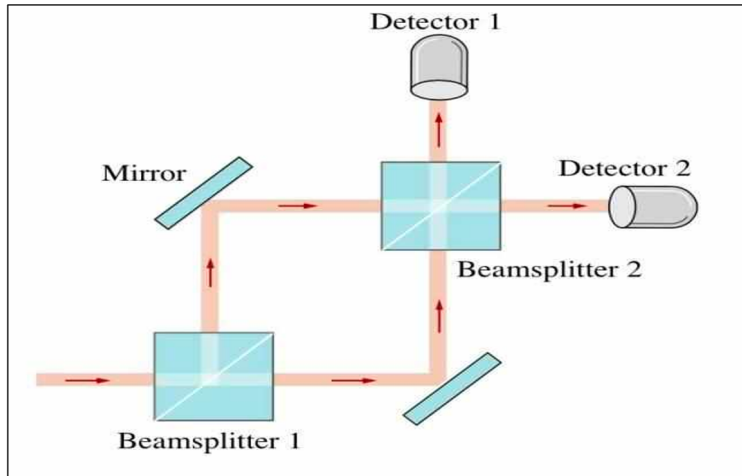
$$= (n_1 + n_2 + n_3 + n_4 + n_5 + n_6 + n_7 + n_8) + (-n_1 - n_2 + n_3 + n_4 + n_5 + n_6 - n_7 - n_8)$$

$$= 1 + \overline{P(xy)}$$

$$|\overline{P(xz)} - \overline{P(yz)}| \leq 1 + \overline{P(xy)}$$

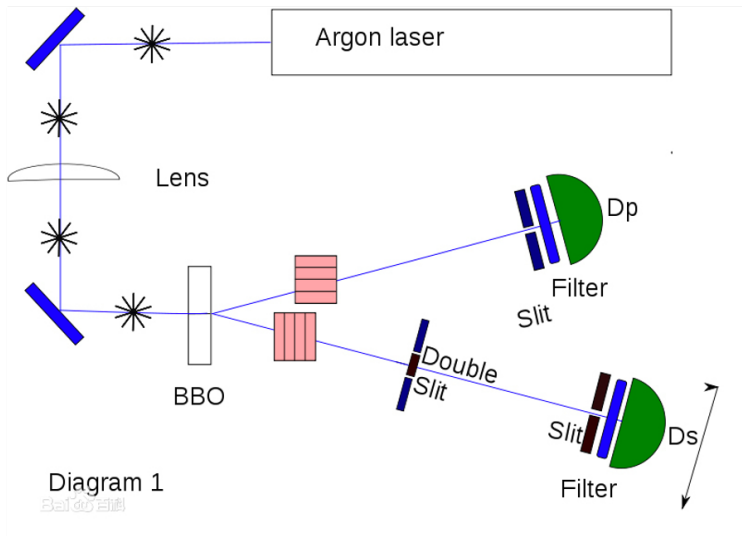
大氣大為
求實求真

惠勒延迟选择实验

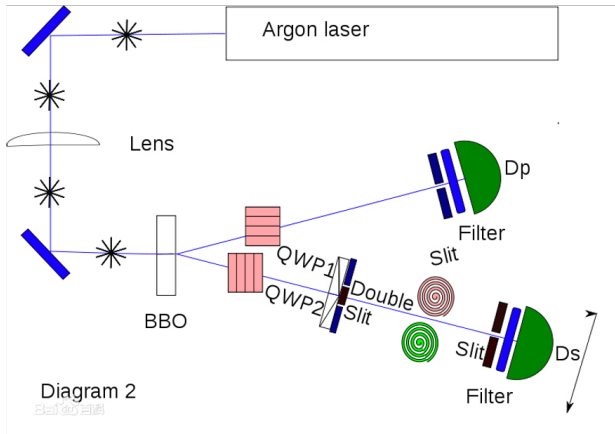


求實求真
大氣大為

量子擦除实验

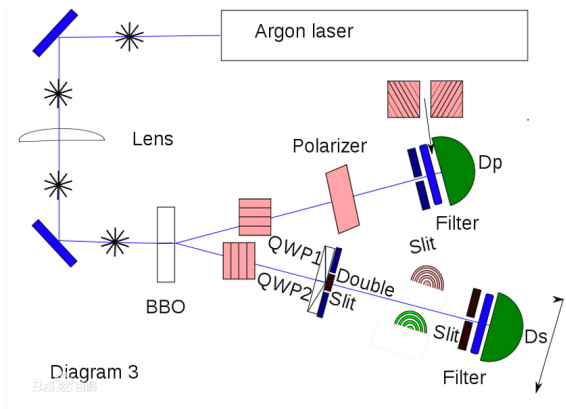


求實求真
大氣大為



| Dp | 下路 | QWP1 (缝1) | QWP2 (缝2) |
|----|----|-----------|-----------|
| 垂直 | 水平 | 顺 | 逆 |
| 水平 | 垂直 | 逆 | 顺 |

求實求真
大氣大為



| Dp | 下路 | QWP1 (缝1) | QWP2 (缝2) |
|-------|-------|-----------|-----------|
| 斜 (+) | 斜 (-) | 顺 (逆) 50% | 顺 (逆) 50% |
| 斜 (-) | 斜 (+) | 顺 (逆) 50% | 顺 (逆) 50% |

求實求真
大氣大為

3.4. 小结

1. 物体具有波粒二象性处于叠加态
2. 测量改变了状态并得到随机的结果
3. 测量结果具有互补性，都要被接受
4. 测量导致客观现实

求真
求大

3.5. Big problems

The world is not a real world?

What is the measurement?

If not performing measurement, what it should be?

求實求真
氣大為

1. 已知粒子的波函数 ($t=0$) 如下,

$$\psi(x) = \begin{cases} \sqrt{A} \sin \frac{\pi x}{a}, & 0 \leq x \leq a \\ 0, & x < 0, x > a \end{cases}$$

(1) 试求归一化系数 A

(2) 试求位置的概率密度

(3) 试求动量的概率密度

2. 试用态叠加原理解释电子双缝干涉实验

大氣大為
求實求真

4. 薛定諤方程

波函数演化假说

薛定諤方程

守恒定律

定态薛定諤方程

1. 波函数

2. 波函数统计诠释

3. 态叠加原理

求實求真
大氣大為

- 波粒二象性
- 波函数假说
- 波函数统计诠释
- 态叠加原理

求實求真
大氣大為

4.1. 小结

1. 物理具有波粒二象性处于叠加态
2. 测量改变了状态并得到随机的结果
3. 测量结果具有互补性，都要被接受
4. 测量导致客观实在

求真
為大

4.2. Big problems

If not performing measurement, what it would be?

求實求真
大氣大為

1. 波函数

2. 波函数统计诠释

3. 态叠加原理

4. 薛定谔方程

波函数演化假说

薛定谔方程

守恒定律

定态薛定谔方程

求實求真
大氣大為

4.3. 基本假设 2/5

波函数的演化服从薛定谔方程

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

氣大為
實求真

4. 薛定諤方程

波函数演化假说

薛定諤方程

守恒定律

定态薛定諤方程

1. 波函数

2. 波函数统计诠释

3. 态叠加原理

求實求真
大氣大為

- 1923 年，德布罗意博士论文传到了瑞士，一战炮兵指挥官苏黎世大学讲师薛定谔作了一个关于物质波假说的报告，德拜评注：

“有了波，总得有个波动方程吧”

- 1926 年，薛定谔：

“Dear Debye, I find one ...”

大氣大為
求實求真

“是粒子还是波？是妻子还是情人？这都是难题！”

—《薛定谔的女友》(2001)

这部话剧讲述了薛定谔方程建立的神秘过程：

1925 年圣诞节，薛定谔来到阿尔卑斯山度假。这次陪伴他的不是妻子安妮，而是维也纳的一位神秘女郎。

这位比薛定谔的猫还神秘的女郎激发了薛定谔的灵感，使他在一年的时间里连发 6 篇 “SCI” 论文，建立波动量子力学，...

求
實
求
真

可能思路

- 1: 最小作用量原理 $\int_{t_1}^{t_2} \delta L dt = 0$
- 2: 波粒二象性
- 3: 基本假设, 不能从现有理论推导

*"It is not possible to derive it from anything you know. It came out of the
❤️ of Schrödinger"*

... R. P. Feynman

大氣大為
求實求真

❤ 量子平面波应是方程的解

$$\psi(x, t) = \Psi_p(x, t) = e^{\frac{i}{\hbar}(p \cdot x - Et)}$$

对空间求导

$$\begin{aligned} -i\hbar \nabla \psi(x, t) &= p \psi(x, t) \\ -\hbar^2 \nabla^2 \psi(x, t) &= p^2 \psi(x, t) \\ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi(x, t) &= \frac{p^2}{2\mu} \psi(x, t), \quad \dots (1) \end{aligned}$$

对时间求导

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = E \psi(x, t), \quad \dots (2)$$

大氣大為
求實求真

(2)-(1)

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2) \psi(x, t) = (E - \frac{p^2}{2\mu}) \psi(x, t) = 0$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi(x, t)$$

波函数可展开成平面波

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} c(p, t) e^{\frac{i}{\hbar} p x} dp$$

重复上面的操作，有

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2) \Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} c(p, t) (E - \frac{p^2}{2\mu}) e^{\frac{i}{\hbar} p x} dp = 0$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \Psi(x, t)$$

大氣大學
求實求真

如果粒子处于势场 $U(x, t)$ 中, 有

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

这正是薛定谔方程

● 对于多粒子体系, 有

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x_1, x_2, \cdots x_N, t) = \left[-\sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2\mu_i} \nabla^2 + U(x_1, x_2, \cdots x_N, t) \right] \Psi(x_1, x_2, \cdots x_N, t)$$

大氣大為
求實求真

检验正确性:

1. 自由粒子的解 求解自由粒子的一维薛定谔方程
2. 氢原子光谱
3.

发表论文: 《Quantisierung als Eigenwert problem》(量子化是本征值问题), 整整 140 页!

大氣大為
求實求真

1. “我一阅读完毕整篇论文，就像被一个谜语困惑多时渴慕知道答案的孩童，现在终于听到了解答！”

—普朗克 (1926)

2. “这著作的灵感如同泉水般源自一位真正的天才！”

—爱因斯坦 (1926)

3. “你的方程把量子理论推进了关键性的一步！”

—玻尔 (1926)

大氣大為
求實求真

奥地利理

论物理学家，生于维也纳，量子力学的基础人之一。
薛天才，通灵的人，1926年提出薛定谔方程，获1933年诺贝尔物理学奖；1935年提出“薛定谔的猫”，至今还是“养猫人”的猫王；1943年写的《生命是什么》一书，被誉为“唤起生物革命的小册子”。

薛定谔：他玉树临风，英俊潇洒，风流倜傥，人见人爱，花见花开，情人无数，江湖人称“段正淳”



求實求真
為

4.4. 重要性

薛定谔方程是量子力学基本方程. 就象经典物理学中的牛顿第二定律一样, 薛定谔方程是我们采用量子力学描述各种体系的起点

求實求真
氣大為

4. 薛定諤方程

波函数演化假说

薛定諤方程

守恒定律

定态薛定諤方程

1. 波函数

2. 波函数统计诠释

3. 态叠加原理

求實求真
大氣大為

● 概率守恒定律

守恒定律关心的是物理量随时间的变化率问题，量子力学中最重要的是概率，我们考虑概率密度的变化率

$$\omega(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \Psi^*(\vec{r}, t)\Psi(\vec{r}, t)$$

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} = \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi, \dots (1)$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2\mu} \nabla^2 \Psi + \frac{1}{i\hbar} U \Psi, \dots (2)$$

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2\mu} \nabla^2 \Psi^* - \frac{1}{i\hbar} U \Psi^*, \dots (3)$$

大氣大為
求實求真

把 (2) (3) 代回 (1), 得:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \omega}{\partial t} &= \frac{i\hbar}{2\mu} (\Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^*) \\ &= \frac{i\hbar}{2\mu} [(\Psi^* \nabla^2 \Psi + \nabla \Psi^* \nabla \Psi) - (\nabla \Psi^* \nabla \Psi + \Psi \nabla^2 \Psi^*)] \\ &= \frac{i\hbar}{2\mu} \nabla \cdot (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \\ &= -\nabla \cdot \frac{i\hbar}{2\mu} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \\ &= -\nabla \cdot \vec{J}\end{aligned}$$

求實求真
大氣大為

上式定义了一个矢量： $\vec{J} = \frac{i\hbar}{2\mu} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi)$ ，得连续性方程 (4)，

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} = 0, \dots (4)$$

说明矢量 \vec{J} 的散度决定了概率密度变化率。

在任意空间区域 V ，对 (4) 式求积分，有：

$$\frac{d}{dt} \int_V \omega d\tau = - \int_S \vec{J} \cdot d\vec{S}, \dots (5)$$

由 Gauss 定理可知，单位时间内体系 V 内增加的概率应等于穿过 V 边界面 S 进入 V 内的概率，所以 \vec{J} 是概率流。(4) 式和 (5) 分别是概率守恒定律的微分和积分形式。

● 粒子数守恒定律

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \int_{V \rightarrow \infty} \omega d\tau &= \frac{d}{dt} \int_{V \rightarrow \infty} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d\tau \\ &= \frac{d}{dt} 1 \\ &= 0\end{aligned}$$

说明全空间概率不随时间发生变化，即粒子既未产生也未湮灭时，概率守恒定律就是粒子数守恒定律。

大氣
求
大
求
真

● 质量守恒定律

对 (4) 式, 左右两边同乘以粒子的质量 μ ,

$$\frac{\partial \mu \omega}{\partial t} + \nabla \cdot \mu \vec{J} = 0$$

得质量守恒定律

$$\frac{\partial \omega_{\mu}}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}_{\mu} = 0, \dots (6)$$

大氣大為
求實求真

● 电荷守恒定律

对 (4) 式, 左右两边同乘以粒子的电荷 e ,

$$\frac{\partial ew}{\partial t} + \nabla \cdot e\vec{J} = 0$$

得电荷守恒定律

$$\frac{\partial \omega_e}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}_e = 0, \dots (7)$$

求實求真
大氣大為

4. 薛定諤方程

波函数演化假说

薛定諤方程

守恒定律

定态薛定諤方程

1. 波函数

2. 波函数统计诠释

3. 态叠加原理

求實求真
大氣大為

定态问题

若势函数 $V(\vec{r}, t)$ 不显含时间 t , 则薛定谔方程可变量分离

解: 设 $\Psi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r})f(t)$, 代回方程

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

$$i\hbar\frac{1}{f(t)}\frac{\partial}{\partial t}f(t) = \frac{1}{\Psi(\vec{r})}\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(\vec{r})\right]\Psi(\vec{r}) = E$$

得两个微分方程:

I、演化方程 $i\hbar\frac{1}{f(t)}\frac{\partial}{\partial t}f(t) = E$, 解方程, 得: $f(t) = e^{-iEt/\hbar}$

求實求真
大氣大為

II、定态薛定谔方程 $\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r})$

算符形式：

$$\hat{H} \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r})$$

是哈密顿算符 \hat{H} 的本征方程。结合定解条件，可得能量本征值 (E_n) 及本征函数 $\Psi_{E_n}(\vec{r})$

定态：

能量有确定值的态称为定态，用定态波函数描述

$$\Psi_{E_n}(\vec{r}) e^{-iE_n t/\hbar}$$

依据态叠加原理，一般的态（叠加解）可表示为：

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n c_n(t) \Psi_{E_n}(\vec{r})$$

大氣大為
求實求真

例-1. 试证明定态的概率密度不随时间变化:

证明:

$$\begin{aligned}\omega(\vec{r}, t) &= \Psi^*(\vec{r}, t)\Psi(\vec{r}, t) \\ &= \Psi_{E_n}(\vec{r})e^{-iE_nt/\hbar}\Psi_{E_n}^*(\vec{r})e^{iE_nt/\hbar} \\ &= \Psi_{E_n}(\vec{r})\Psi_{E_n}^*(\vec{r}) \\ &= |\Psi_{E_n}(\vec{r})|^2\end{aligned}$$

求實求真
大氣大為

例-2. 试证明定态的概率流密度与时间无关:

证明: 由守恒定律

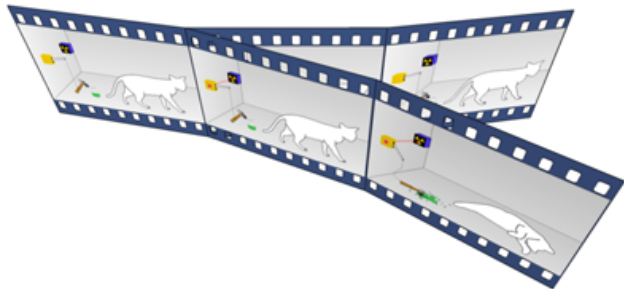
$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} = 0$$

变形

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \vec{J} &= -\frac{\partial \omega}{\partial t} \\ &= -\frac{\partial |\Psi_{E_n}(\vec{r})|^2}{\partial t} \\ &= 0\end{aligned}$$

求實求真
大氣大為

问题：体系总是处于叠加态，不测量时，波函数服从薛定谔方程演化，测量时波函数坍塌（Collapsing waves），导致客观实在。那坍塌过程服从什么规律？



"Anyone who claims to understand quantum theory is either lying or crazy."

求實求真
大氣大為

1. 已知粒子的波函数为 $\psi(x, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(p_x x - Et)}$, 试求:
 - (1) 归一化系数 A
 - (2) 概率密度 $\omega(x, t)$
 - (3) 概率流密度 $\vec{J}(x, t)$
2. 如果势场 $U(x, t)$ 不显含 x , 试求解一维薛定谔方程.
3. 设电子处于如下球型无限深势阱

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r < r_0 \\ \infty & r \geq r_0 \end{cases}$$

试求电子的能级及径向波函数 $\psi(r)$

大氣大為
求實求真



电子科技大学

University of Electronic Science and Technology of China

Thanks for your attention!

A & Q

求實求真
大氣大為