波函数与薛定谔方程

薛定谔方程

统计解释

叠加原理

• 20:16:41

量子传奇的延续 - Erwin Schrödinger

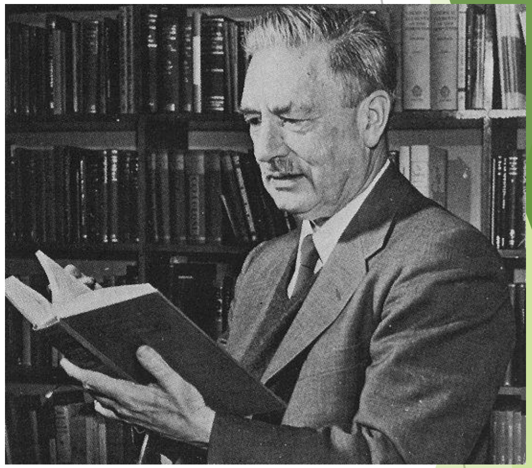
- 1926年初，维也纳大学物理教授德拜收到了de Broglie的博士论文，建议薛定谔读一读，并作一个报告。（德拜是薛定谔的导师）

- 2周后，Debye听后评论说，

  You speak about wave, but where is the wave equation?

并建议薛定谔做这一工作。

- 再2周后，薛定谔为德布罗意波找到了波动方程——薛定谔方程。



Peter Debye
1936年 诺贝尔化学奖
1962年 诺贝尔和平奖

波动方程和氢原子解

- 从“垃圾”里产生的“垃圾”？
- 写出波动方程后的两个星期，在阿尔卑斯山（和情人）滑雪的同时，薛定谔从方程中得出了Bohr的氢原子理论！
- Schrödinger Equation成为量子力学的基本方程。

普朗克说：“我像一个好奇的儿童听人讲解他久久苦思的谜语那样，聚精会神地释读您的论文。”

欧文用他的psi，
计算起来真灵通；
但psi真正代表什么，
没人能够说得清。

Erwin Schrödinger

1933年诺贝尔物理学奖

• 20:16:42

单粒子的薛定谔方程

物质波用复数波函数表示

平面波

$$\psi(\vec{r},t) = \psi_0 e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} = \psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)}$$

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

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi = p_x\psi \sim p_x \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}\psi = p_y\psi \sim p_y \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}$$

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\psi = p_z\psi \sim p_z \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

$$\vec{p} \to -i\hbar\nabla$$

自由粒子的机械能

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m}$$

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

保守力场中的粒子

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r},t)$$

单粒子非相对论薛定谔方程

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

这不是在旧理论基础上的推导，而是提出一个新理论

薛定谔论文中的“推导”利用了哈密顿-雅可比方程、光与力的类比

一般形式的薛定谔方程

Newton mechanics

$$\vec{F}_j = m_j \ddot{\vec{r}}_j, \qquad j = 1,2,\cdots,N$$

Lagrangian mechanics

$$L(t,q,\dot{q}) = T - V$$

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} = \frac{\partial L}{\partial q_\alpha}$$

Hamiltonian mechanics

$$p_\alpha = \partial L / \partial \dot{q}_\alpha$$

$$H(t,q,p) = \sum_\alpha p_\alpha \dot{q}_\alpha - L$$

$$\begin{cases} \dot{q}_\alpha = \partial H / \partial p_\alpha \\ \dot{p}_\alpha = -\partial H / \partial q_\alpha \end{cases}$$

Wave mechanics

Schrödinger equation

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(t,q) = \hat{H}\psi(t,q)}$$

量子力学的基本假设之一

例：重力场中的谐振子，牛顿方程

$$m\ddot{x} = -kx + mg$$

例：重力场中的谐振子，朗格朗日方程

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \left(\frac{1}{2}kx^2 - mgx\right)$$

$$m\ddot{x} = -kx + mg$$

例：重力场中的谐振子，哈密顿方程

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 - mgx$$

$$\begin{cases} \dot{x} = p/m \\ \dot{p} = -kx + mg \end{cases}$$

不仅是在经典物理学，控制论中也有这些方程

例：重力场中的谐振子，薛定谔方程

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2 - mgx$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2 - mgx\right\}\psi(x,t)$$

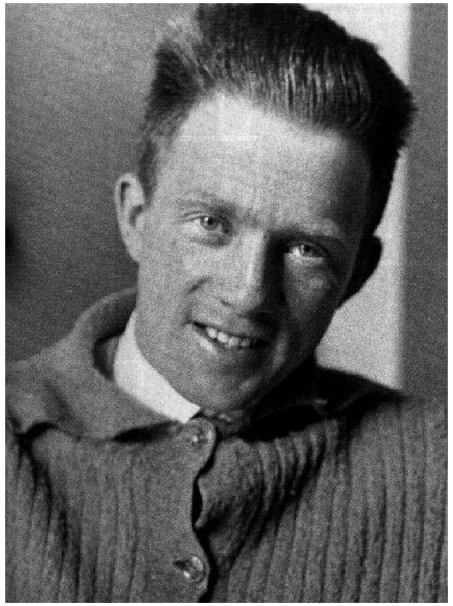
量子控制论是新兴学科

波动力学和矩阵力学

- 1926年得出的薛定谔方程作为量子力学的出发点，早期被称为波动力学。

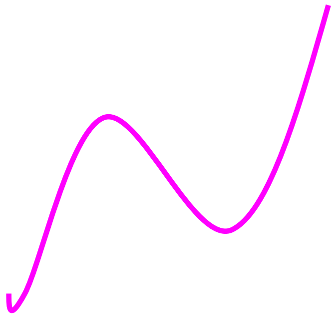
- 早在1925年，Bohr作为掌门人的哥本哈根学派中，海森堡就发展出了一套量子力学–矩阵力学，但懂的人很少。海森堡本人也是得到Born的帮助才搞懂了矩阵。

- 薛定谔证明两套体系是等价的。



Werner Heisenberg
1932年诺贝尔物理学奖

波函数的意义



经典的粒子用轨道的概念来描述

$$\vec{r} = \vec{r}(t)$$
$$\vec{v} = \vec{v}(t)$$

经典的波是可测量的空间分布

平面波

$$A(\vec{r}, t) = A_0 \cos\left(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}\right)$$

写成复数

$$A(\vec{r}, t) = A_0 \exp\left\{-i\left(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}\right)\right\}$$

物质波必须用复数表示

$$E = h\nu, p = \frac{h}{\lambda} \rightarrow \psi(\vec{r}, t)$$
$$= \psi_0 \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p} \cdot \vec{r})\right\}$$

当粒子受到外部作用时，波函数会具有更复杂的形式

物质波

不是可测量的分布

在量子理论中，假定

波函数完全描述了系统的状态

波函数的统计解释

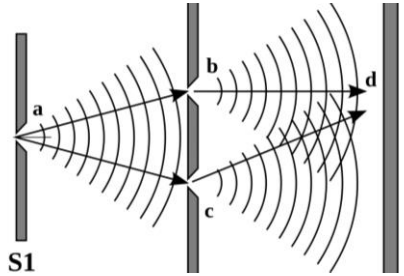
- 1917年爱因斯坦引入光波的统计解释（光子数目正比于光强）
- 1927年哥本哈根学派的玻恩给出波函数的几率解释。

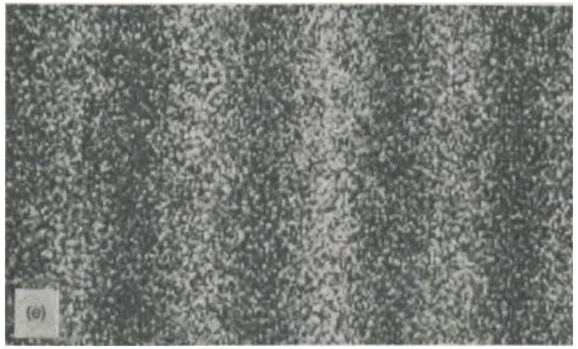
Max Born
1954年诺贝尔奖

- $\rho(\vec{r},t) \stackrel{\text{def}}{=} |\psi(\vec{r},t)|^2$是概率密度
- $|\psi(\vec{r},t)|^2 dxdydz$表示在$t$时刻、位置$\vec{r}$处的体积$dxdydz$中，找到粒子的概率
- ψ称为概率幅，物质波是概率波

量子力学的基本假设之二

电子的双缝干涉





- 事例积累一段时间后

不同位置的亮点数目不同

代表该处电子出现的概率不同

- 单电子干涉实验表明

干涉图样不是多个电子之间复杂作用的后果，

而只取决于单个电子的状态，即物质波的波函数

- 光波函数的模平方是亮度
- 物质波函数的模平方是概率

- 概率波统一了物质粒子的波动性与粒子性，并经历了大量实验考验
- 与经典物理学能够预言每个粒子的坐标和速度不同，量子力学是一种统计性的规律

量子力学是统计性规律

- 理论和实验研究表明：我们不可能得到比波函数更多物理信息，波函数是物理系统状态的完全描述，（在测量这个意义上）自然界的规律是非决定论的。
- 爱因斯坦、德布罗意、狄拉克等量子力学奠基者长期反对，认为完善的理论不是统计性的。
- 争论使得人们更深入地理解量子理论，引出了一些新概念和新应用，如量子密码、量子测量和量子计算
- 量子力学是自洽的(冯·诺依曼)
- 实验表明没有隐变量的存在（Bell不等式）

归一化

◆ 几率解释⇒波函数需归一化

$$\iiint_{\text{全空间}} |\psi(\vec{r},t)|^2 dxdydz = 1$$

◆ 波函数平方可积

- 设波函数未归一化

$$\iiint_{\mathbb{R}^3} |\psi(\vec{r},t)|^2 dxdydz = N$$

- 归一化的波函数

$$\frac{e^{i\varphi}}{\sqrt{N}}\psi(\vec{r},t)$$

- 整体相因子无可测效应，可约定

$$e^{i\varphi} = 1$$

- 为了方便，波函数可能没有归一化
- 表示完全相同的物理状态

$$\psi(\vec{r},t) \Leftrightarrow C\psi(\vec{r},t)$$

- 计算几率分布前，必须先把波函数归一化

与此对比：

经典波A→CA表示完全不同的状态

- 20:16:44

几率流和几率守恒

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

取复共轭

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

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi)$$
$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\psi^*\nabla^2\psi+\frac{\hbar^2}{2m}\psi\nabla^2\psi^*$$
$$=\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\cdot(\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi)$$

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{r},t)+\nabla\cdot\vec{j}(\vec{r},t)=0}$$

几率密度

$$\rho\overset{\text{def}}{=}\psi^*\psi$$

几率流密度

$$\vec{j}\overset{\text{def}}{=}i\frac{\hbar}{2m}(\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi)$$

- 物理学中的连续方程：电荷、质量、粒子数
- 概率的转移是连续的
- 总概率不随时间变化

在非相对论量子力学中，没有粒子的产生和湮灭

平方可积函数

- 统计解释要求波函数平方可积
- 推论：两个平方可积函数$f(\vec{r}), g(\vec{r})$叠加之后，仍是平方可积函数

$$\left.\begin{aligned}\iiint_{\mathbb{R}^3}|f(\vec{r})|^2 d^3r = N_1 \\ \iiint_{\mathbb{R}^3}|g(\vec{r})|^2 d^3r = N_2\end{aligned}\right\} \Rightarrow \iiint_{\mathbb{R}^3}|f(\vec{r})+g(\vec{r})|^2 d^3r = N_1 + N_2 + \iiint_{\mathbb{R}^3} f^*(\vec{r})g(\vec{r})d^3r + \iiint_{\mathbb{R}^3} f(\vec{r})g^*(\vec{r})d^3r$$

利用Cauchy-Schwartz不等式

$$\left|\iiint_{\mathbb{R}^3} f^*(\vec{r})g(\vec{r})d^3r\right| = \left|\iiint_{\mathbb{R}^3} f(\vec{r})g^*(\vec{r})d^3r\right| \leq \sqrt{N_1 N_2}$$

得

$$\iiint_{\mathbb{R}^3}|f(\vec{r})+g(\vec{r})|^2 d^3r \leq N_1 + N_2 + 2\sqrt{N_1 N_2}$$

- 把平方可积函数作为矢量，并引入加法，构成一个可数无穷维线性空间

希尔伯特空间

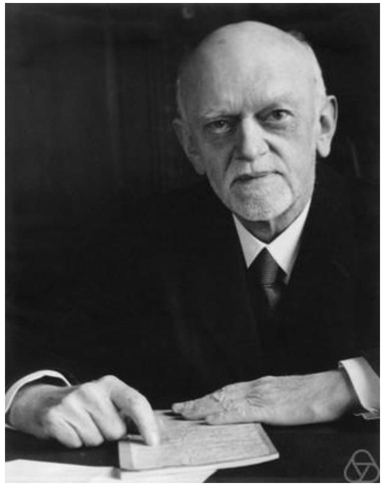
- 定义两个函数的内积

$$(f,g) \stackrel{\text{def}}{=} \iiint_{\mathbb{R}^3} f^*(\vec{r})g(\vec{r})dxdydz$$

- 平方可积函数构成内积空间，称为Hilbert Space

- 定义矢量的模长$\sqrt{(f,f)}$
- 两个矢量正交即$(f,g)=0$

- 是有限维酉空间的推广



David Hilbert
1862-1943

19世纪至20世纪初最有影响力的数学家之一。在许多领域贡献了广泛的基本思想：

不变量理论、变分法、交换代数、代数数论、几何基础、算子的谱理论、数学物理、数学基础（特别是证明理论）

- 20:16:45

叠加原理

如果ψ_1和ψ_2是一个物理系统的可能状态，那么

$$\forall a, b \in \mathbb{C}, a\psi_1 + b\psi_2$$

必然也是此系统的一个可能状态

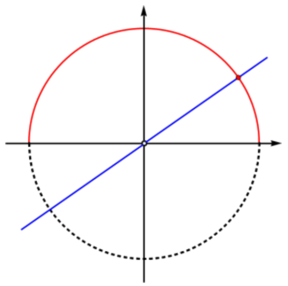
量子力学的基本假设之三

统计解释修正为

统计解释：

如果ψ_1和ψ_2正交归一，则a, b为系统处于两态的几率幅

- 任意一个可归一化的波函数，都是可分（维数可数）希尔伯特空间$\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$中的矢量
- 量子力学的态空间，是一种射影几何（projective geometry）
- 态空间中还包含了一些平方不可积的波函数，例如平面波



射影几何$\mathbf{RP}^1$中每个点对应平面上的一条线

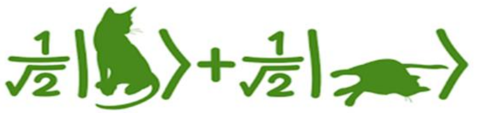
叠加原理的理解

E. Schrödinger质疑哥本哈根学派的几率解释：

把猫关在箱子中，箱子中有毒气瓶、放射源和控制电路。

如果发生衰变，控制电路收到探测器的信号打碎瓶子，猫被毒死。

观测之前，猫的状态可能是



E. P. Wigner：把朋友关在屋子里做Schrödinger猫实验，打开屋门前朋友处于叠加态

整个宇宙作为量子系统，上帝（如果存在）测量前处于叠加态

在量子力学系统中怎么描述测量者？

在量子力学中，测量是独特且基础性的问题

哥本哈根诠释 波包塌缩

多世界诠释

（两者只有哲学上的不同）

纠缠？