02 实物粒子的波粒二象性

1 德布罗意物质波

—— 1924年法国物理学家德布罗意

在光的波粒二象性的启发下

提出一切微观实物粒子都具有波粒二象性

—— 质量为m，速率为v的粒子

具有能量和动量，同时具有波长和频率

光子的能量 $E = h\nu$ $E = m_\varphi c^2$

粒子的能量 $E = mc^2$

光子的质量 $m_\varphi = \dfrac{h\nu}{c^2} = \dfrac{h}{c\lambda}$

波的频率 $\nu = \dfrac{mc^2}{h}$

光子的动量 $p = m_\varphi c = \dfrac{h}{\lambda}$

粒子的动量 $p = mv$

波长 $\lambda = \dfrac{h}{mv}$

静止质量 $m_{\varphi 0} = 0$

—— 德布罗意物质波

✌ **电子经过电场U_1=150 V和U_2=10000 V加速后计算电子的德布罗意波长。(不考虑相对论效应)**

☛ 电子的动能 $\frac{1}{2}m_0 v^2 = eU$　　$v = \sqrt{\frac{2eU}{m_0}}$

德布罗意波长 $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_0 v}$　　$\lambda = h\sqrt{\frac{1}{2m_0 eU}}$

$U_1 = 150\,V$　　$\lambda_1 = 0.1\,nm$

$U_2 = 10000\,V$　　$\lambda_2 = 0.012\,nm$

✌ 计算质量为 $m = 0.01\,kg$ 速率 $v = 300\ m/s$ 的子弹的德布罗意波长

☛ 子弹的德布罗意波长 $\lambda = \dfrac{h}{mv}$

$$\lambda = 2.21\times10^{-34}\,m$$

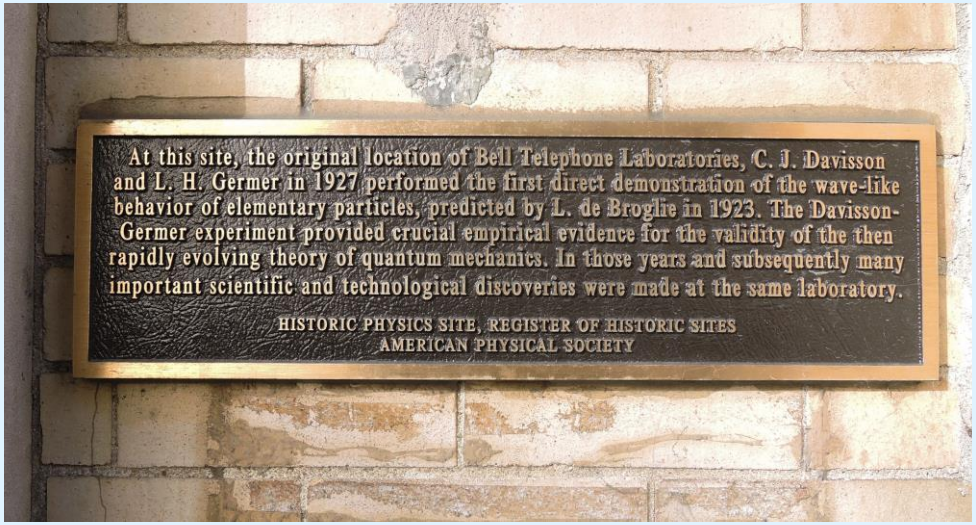
子弹的德布罗意波长太短 —— 很难测量

2 德布罗意物质波的实验验证

—— 1927年戴维孙(C. J. Davisson)和革末(L. A. Germer)

在爱尔萨塞(Elsasser)的启发下

观察到电子束在镍单晶表面的反射衍射条纹

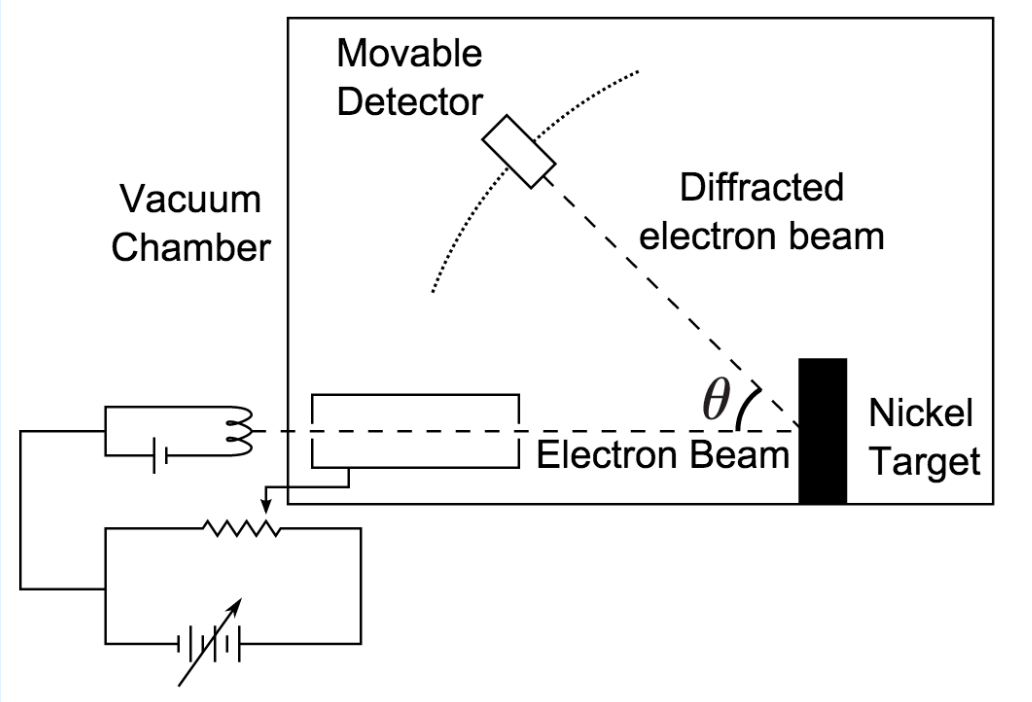


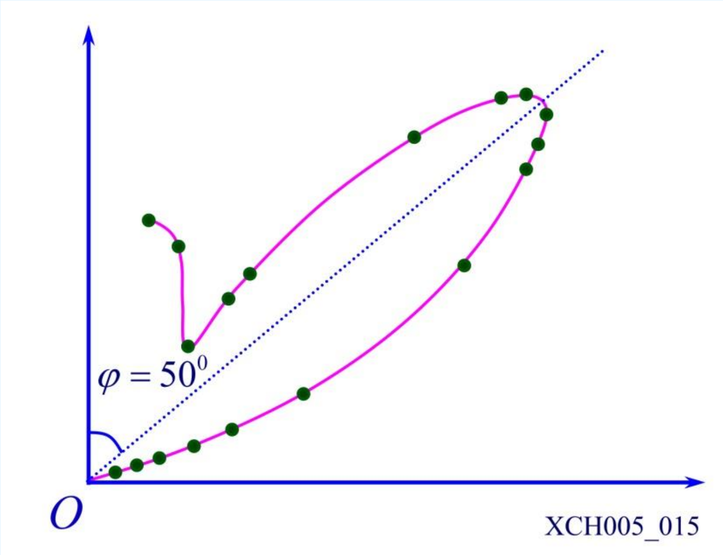
2 德布罗意物质波的实验验证

—— 1927年戴维孙(C. J. Davisson)和革末(L. A. Germer)

在爱尔萨塞(Elsasser)的启发下

观察到电子束在镍单晶表面的反射衍射条纹





实验结果

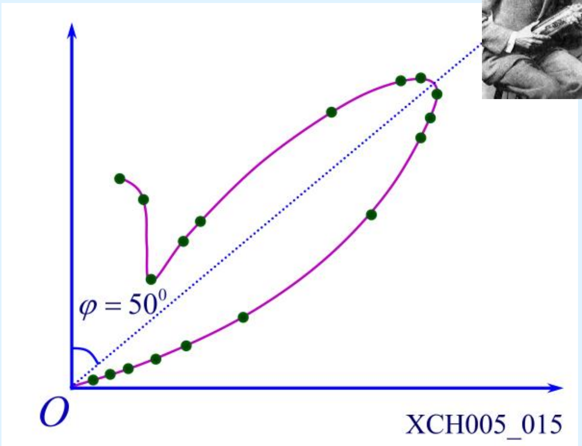
波动衍射理论 电子束衍射强度满足 $d\sin\varphi = \lambda$

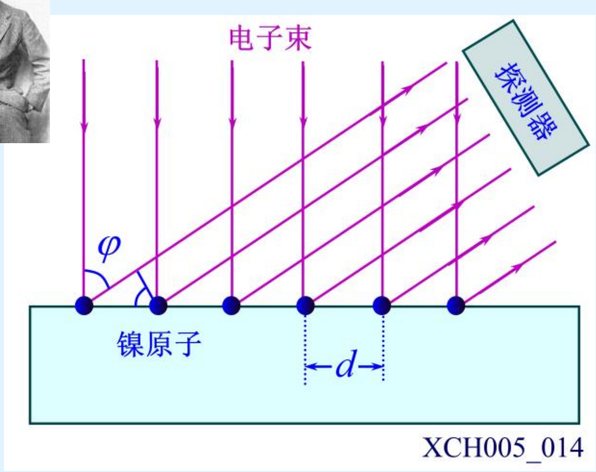
$$\lambda = d\sin\varphi \xrightarrow{\begin{cases} d = 2.15\times10^{-10}\ m \\ \varphi = 50^{0} \end{cases}} \boxed{\lambda = 1.65\times10^{-10}\ m}$$

理论结果

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

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE_k}}$$





原子距离

$$d = 2.15\times10^{-10}\ m$$

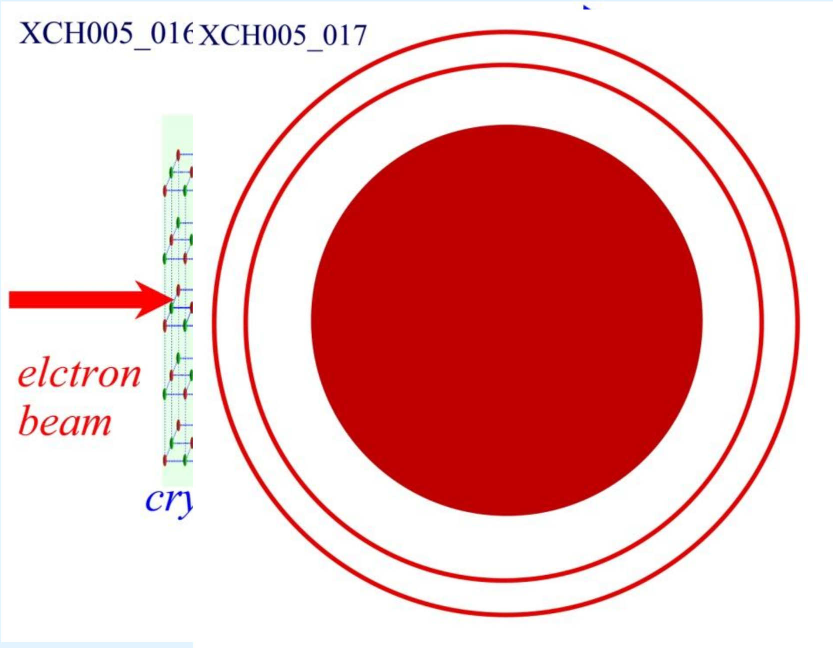
入射电子的动能 $E_k = 54\ eV$

$$\boxed{\lambda = 1.67\times10^{-10}\ m}$$

—— **1927年，汤姆孙(G. P. Thomson)**

让电子束穿过多晶薄膜

得到了与X光衍射图样极为相似的结果



—— 1961年约恩孙的电子单缝，双缝和三缝衍射实验得到的明暗条纹，证实了电子具有波动性

—— 后来证实了中子，质子，原子乃至分子具有波动性

一切微观粒子的都具有波粒二象性

—— 1933年德国人鲁斯卡研制出第一台电子显微镜

—— 1982年瑞士苏黎世IBM实验室的研究生宾尼研制出第一台扫描隧道显微镜(STM)

TUNNEL EFFECT

All the animations and explanations on
www.toutestquantique.fr

03 波函数、薛定谔方程

1 物质波是概率波

—— 德布罗意波是概率波

—— 为定量描述微观粒子的状态

波函数—— 描述粒子在空间各点出现的概率

$$\Psi=\Psi(x,y,z,t)$$ —— 时间和空间的函数

玻恩提出粒子的概率密度 $\rho=|\Psi|^2=\Psi\Psi^*$

—— **t**时刻在空间**P**点附近单位体积内发现粒子的概率

在全空间发现粒子的概率为**1** $\rho=\int_\infty |\Psi|^2 dV=1$

$$\Psi = \Psi(x, y, z, t)$$ ——时间和空间的函数

$$\vec{E}(x,t) = \vec{E}_0 \cos(2\pi\nu t - \frac{2\pi}{\lambda}x)$$

$$y(x,t) = y_0 e^{-i\frac{2p}{h}(hnt - \frac{h}{l}x)}$$

$$\vec{E}(x,t) = \vec{E}_0 e^{-i(2\pi\nu t - \frac{2\pi}{\lambda}x)}$$

$$\boxed{\psi(x,t) = \psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - Px)}}$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \qquad E = hn \qquad P = \frac{h}{l}$$

2 波函数的特征

1) 物质波 —— 概率波，具有波和概率的双重特性

2) 波函数振幅的平方 —— 在空间某点出现的概率密度

$$\rho = \left|\Psi\right|^2 = \Psi\Psi^*$$

波函数描述微观粒子的运动状态

在空间和时间上一种概率分布，只具有统计意义

波函数没有直观的物理含义 —— 不表示某个物理量

3) 某一时刻粒子在空间某点出现的概率是唯一的、有限的、连续的

空间各点的波函数 —— 必须是单值、有限、连续

4) 粒子在空间出现的概率

$$\iiint \left|\Psi(\vec{r},t)\right|^2 dV = 1$$ —— 波函数的归一化条件

5) 波函数具有波的特征 —— 满足波的叠加原理

3 薛定谔方程的一般形式


(1925年)

非相对论情况下，若粒子在某势场 V 中运动

粒子的总能量 $E=E_k+V=\dfrac{p^2}{2m}+V$

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

薛定谔方程的一般形式

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

薛定谔方程得出

一维自由粒子波函数 $\boxed{\psi(x,t)=\psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-Px)}}$

$$\because \frac{\partial\psi}{\partial t}=\psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-Px)}\left(-\frac{i}{\hbar}E\right)=-\frac{i}{\hbar}E\psi$$

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

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

$$\left.\begin{aligned}&\because \frac{\partial\psi}{\partial x}=\frac{i}{\hbar}P\psi\\ &\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=-\frac{P^2}{\hbar^2}\psi\\ &E=\frac{P^2}{2m}\end{aligned}\right\}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=-\frac{2mE}{\hbar^2}\psi$$

$$\boxed{\therefore E\psi=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}}$$

一维自由粒子的薛定谔方程

薛定谔方程的得出

在势场 $U(x,t)$ 中，粒子的总能量

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

$$P^2=2m(E-U)$$

$$\because \frac{\partial\psi}{\partial t}=\psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-Px)}\left(-\frac{i}{\hbar}E\right)=-\frac{i}{\hbar}E\psi$$

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

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

在势场中的粒子的薛定谔方程

$$\because \frac{\partial\psi}{\partial x}=\frac{i}{\hbar}P\psi$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=-\frac{P^2}{\hbar^2}\psi$$

$$E=\frac{P^2}{2m}$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=-\frac{2m(E-U)}{\hbar^2}\psi$$

$$\boxed{\therefore E\psi=-\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+U\psi}$$

在势场中的粒子的薛定谔方程 $\boxed{-\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+U\psi=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}}$

定态 $U(x)$

$$\mathrm{Y}(x,t)=y(x)f(t)$$

$$-\frac{\hbar}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}f(t)+U(x)\psi(x)f(t)=i\hbar\frac{df(t)}{dt}\psi(x)$$

两边同除 $y(x)f(t)$

$$\frac{1}{\psi}[-\frac{\hbar}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+U(x)]=\frac{i\hbar}{f}\frac{df}{dt}=E(const)$$

右边 $\frac{df}{f}=\frac{E}{i\hbar}dt=-\frac{i}{\hbar}Edt \Longrightarrow f=e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$

因为指数只能是无量纲的，所以常数E的单位是能量

在势场中的粒子的薛定谔方程 $\boxed{-\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+U\psi=i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}}$

定态 $U(x)$

$$Y(x,t)=y(x)f(t) \qquad f=e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \qquad |\Psi|^2=|\psi|^2e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\cdot e^{\frac{i}{\hbar}Et}=|\psi|^2$$

$$-\frac{\hbar}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}f(t)+U(x)\psi(x)f(t)=i\hbar\frac{df(t)}{dt}\psi(x)$$

两边同除 $y(x)f(t)$

$$\frac{1}{\psi}[-\frac{\hbar}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+U(x)]=\frac{i\hbar}{f}\frac{df}{dt}=E(const)$$

左边 $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+U\psi=E\psi$ $\Rightarrow$ $\boxed{\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+(E-U)\psi=0}$

一维定态薛定谔方程

04 态叠加原理

1 态叠加原理

微观粒子的量子态可以是若干不同态的线性叠加

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

这种态的叠加使得观测结果具有不确定性

2 不确定关系

1） 坐标和动量的不确定关系

微观粒子的波粒二象性 —— 任何时刻物理量都不确定

—— 粒子在空间的分布具有一定的概率

没有确定的位置！

没有确定的动量！

1927年海森伯根据量子力学计算得到坐标和动量满足

$$\begin{cases} \Delta x \cdot \Delta p_x \geq \dfrac{\hbar}{2} \\ \Delta y \cdot \Delta p_y \geq \dfrac{\hbar}{2} \\ \Delta z \cdot \Delta p_z \geq \dfrac{\hbar}{2} \end{cases}$$

2） 电子的单缝衍射中坐标和动量的测不准关系

一束动量为 $\vec{p}$ 的电子通过宽度为Δx的狭缝

每个电子的坐标不确定量 Δx

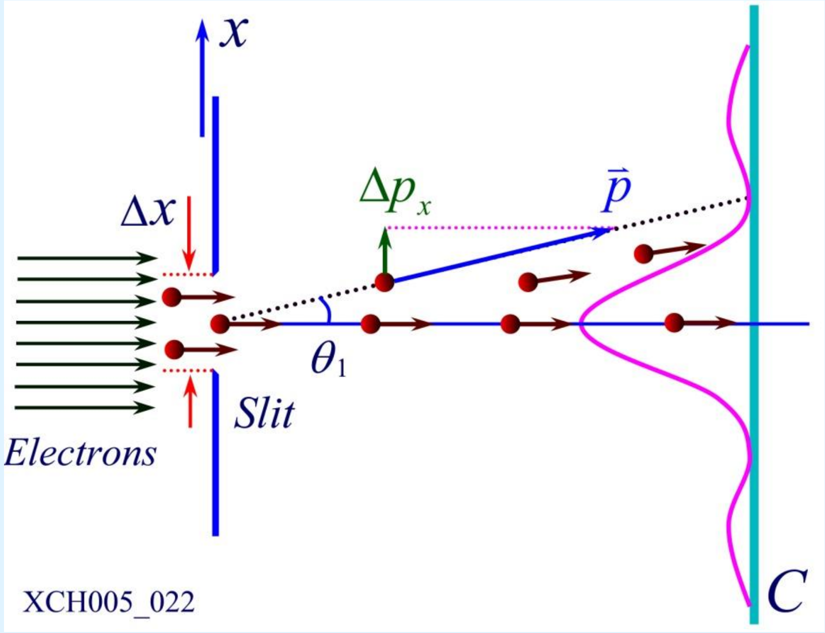
电子发生衍射 —— 动量发生变化 不确定量 Δp_x

只考虑电子

全部落在中央极大范围

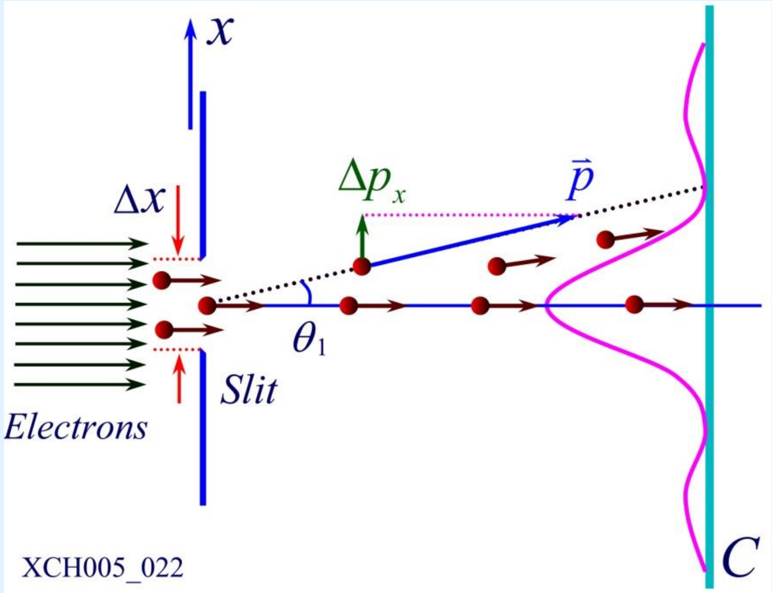
$$0 \le \Delta p_x \le p \sin\theta_1$$

最大值 $\Delta p_x = p \sin\theta_1$



最大值 $\Delta p_x = p\sin\theta_1$ $\qquad$ $\sin\theta_1 = \dfrac{\Delta p_x}{p}$

一级极小位置 $\Delta x \sin\theta_1 = \lambda = \dfrac{h}{p}$



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

考虑到一些电子

落在中央极大以外 $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq h$

量子力学结果 $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \dfrac{h}{4\pi} = \dfrac{\hbar}{2}$

Δx —— 越大

Δp_x —— 越小

原子的线度为10^{-10} m，计算原子中电子速度的不确定量讨论原子中的电子能否看成经典力学中的粒子

原子中电子的坐标不确定量 $\Delta x = 10^{-10}\ m$

电子的动量不确定量 $\Delta p_x = m\Delta v_x$

坐标 — 动量不确定关系 $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \dfrac{\hbar}{2}$

速度不确定量 $\Delta v_x \geq \dfrac{\hbar}{2m\Delta x} = 5.8\times 10^5 m/s$

玻尔理论的结果 $v \approx 10^6 m/s$

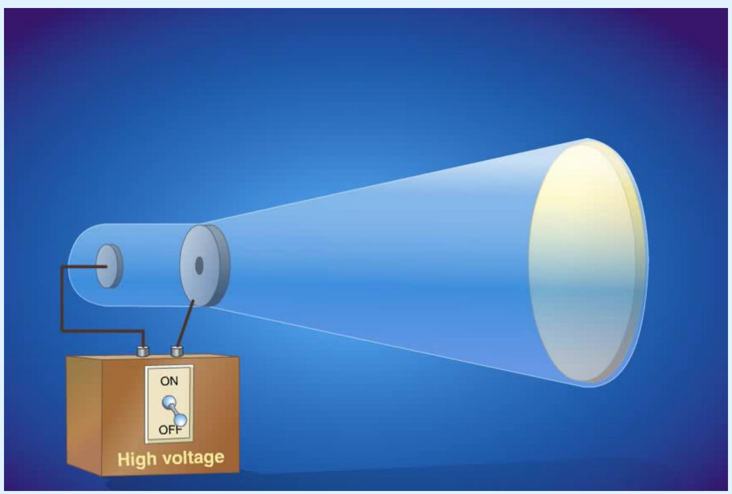
$v \sim \Delta v_x$ 原子中的电子不能看成是经典粒子！

✌ 电视显像管中电子的加速电压为U = 9×10³ V

设电子束的直径 d＝10⁻⁴ m, 求电子横向速度的不确定量

讨论电子束能否看成经典力学中的粒子

☛ 电子的速度大小 $v = \sqrt{\dfrac{2E_k}{m_0}} = \sqrt{\dfrac{2eU}{m_0}} \approx 6\times10^7 m/s$



x

横向动量不确定量

$$\Delta p_x = m\Delta v_x \geq \frac{\hbar}{2\Delta x} = \frac{\hbar}{2d}$$

横向速度不确定量

$$\Delta v_x \geq \frac{\hbar}{2md} = 0.58 m/s << v$$

—— 可以将电子束能看成经典力学中的粒子

3 一维无限深势阱

势阱模型 —— 微观粒子的运动限制在一维无限深势阱中

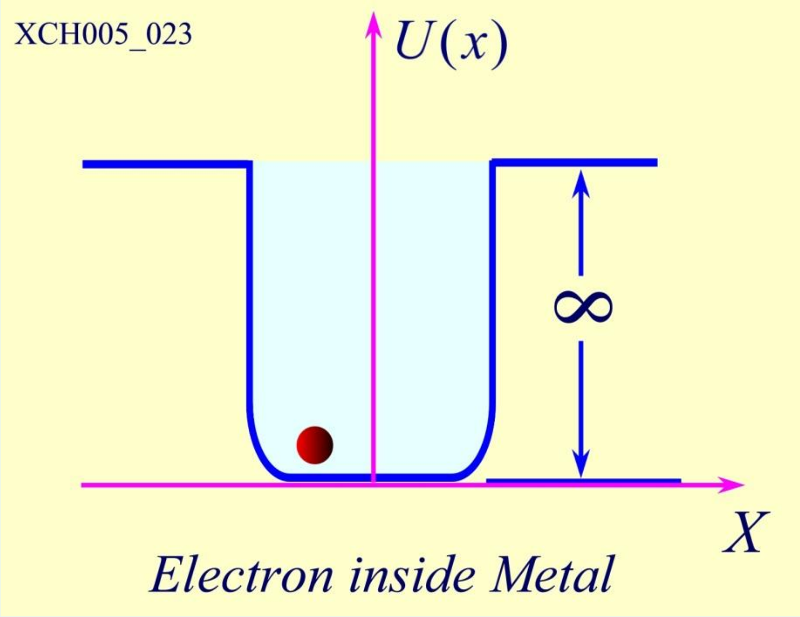
—— 电子运动被限制

在以金属表面

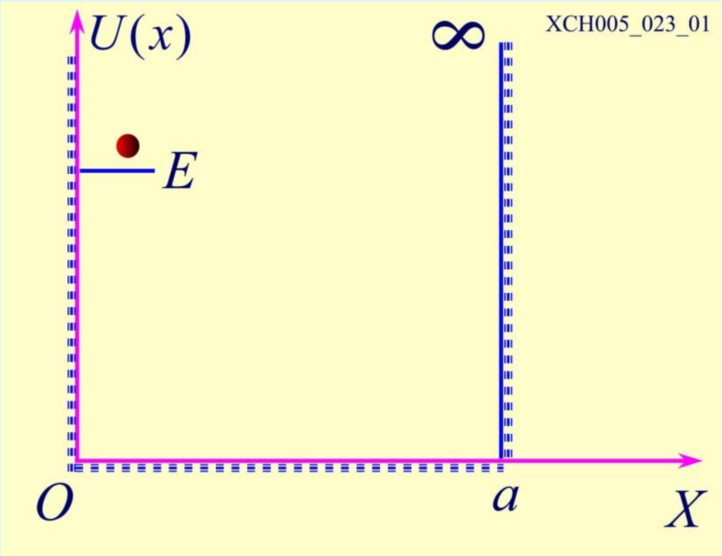
为边界的无限深势阱中

—— 原子核中的质子

质子在势阱中运动



势能函数 $\begin{cases} U(x)=0 & 0<x<a \\ U(x)=\infty & x\le 0,\ x\ge a \end{cases}$



定态薛定谔方程

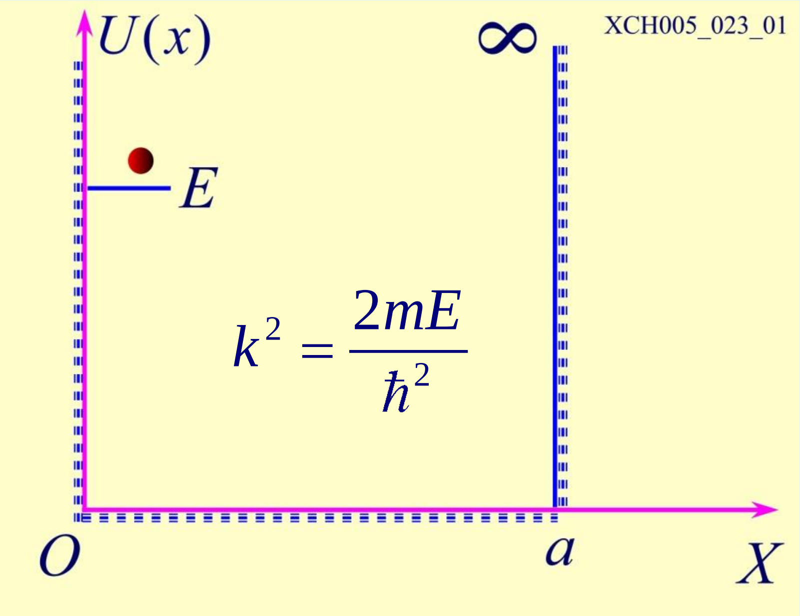
$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi(x)=0$$

x £ 0,x ³ a: U(x)=¥ $\longrightarrow$ $\psi(x)=0$

——粒子不可能出现在势阱外

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi(x)=0$$

$$0<x<a:\ U(x)=0$$



$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}E\psi(x)=0$$

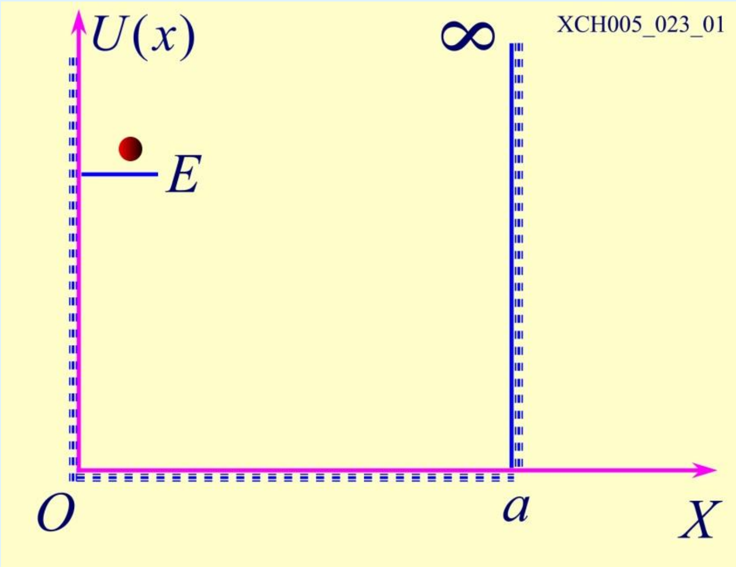
$$\frac{d^2y(x)}{dx^2}+k^2y(x)=0$$

方程的通解 $\psi(x)=A\sin kx+B\cos kx$

方程的通解 $\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx$

波函数连续、单值

$$\psi(x)\big|_{x=0} = \psi(x)\big|_{x=a} = 0$$



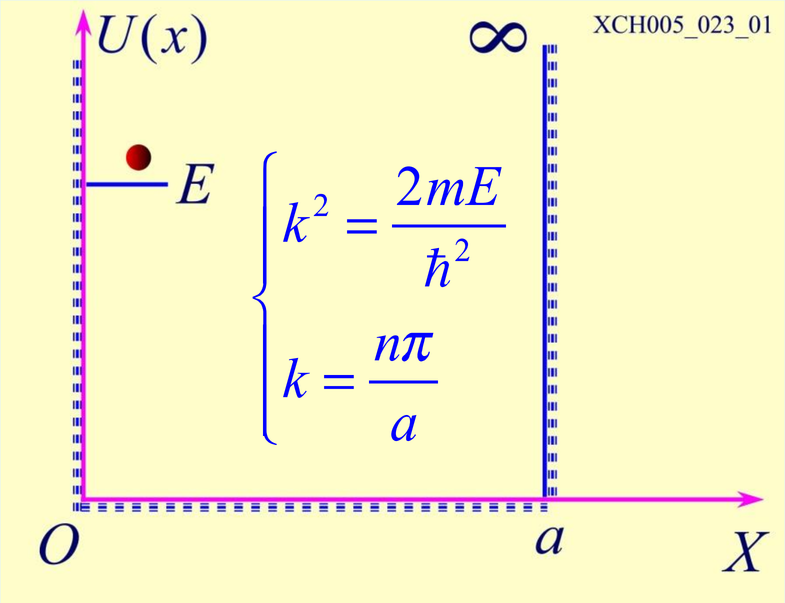
$$\psi(0) = A\cdot 0 + B\cdot 1 = 0$$

$$B = 0$$

$$\psi(a) = 0 \longrightarrow A\sin ka = 0$$

$k = \dfrac{n\pi}{a}$ $n = 1, 2, 3, \cdots$ $n \neq 0$ —— 量子数

$$E_n = n^2 \frac{h^2}{8ma^2}$$



—— 量子数为n的定态波函数

$$\psi_n(x) = A_n \sin\frac{n\pi}{a}x$$

归一化条件 —— $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} A_n^2 \sin^2\frac{n\pi}{a} x dx = 1$

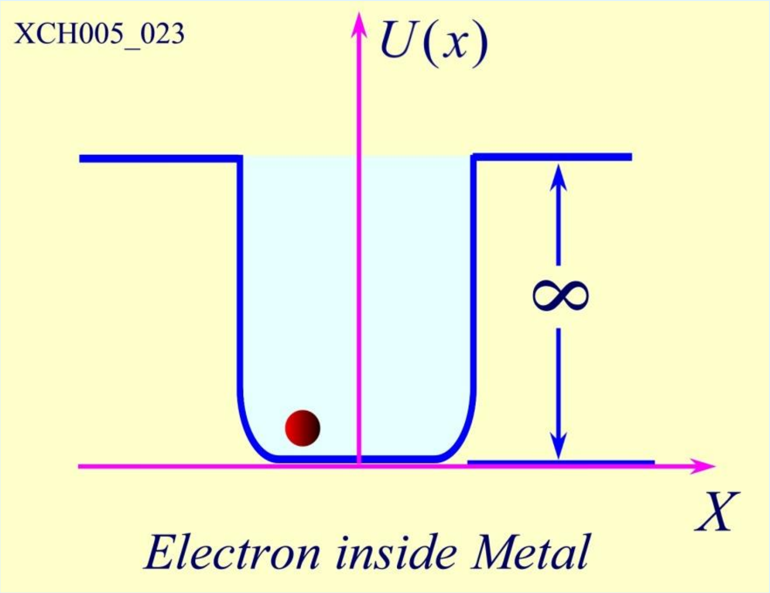
$$A_n = \sqrt{2/a}$$

—— 无限深方势阱中粒子的波函数和能量

$$y_n(x) = \begin{cases} 0 & x \le 0, x \ge a \\ \sqrt{\dfrac{2}{a}} \sin \dfrac{np}{a} x & 0 < x < a \end{cases}$$

$$E_n = n^2 \frac{h^2}{8ma^2}$$

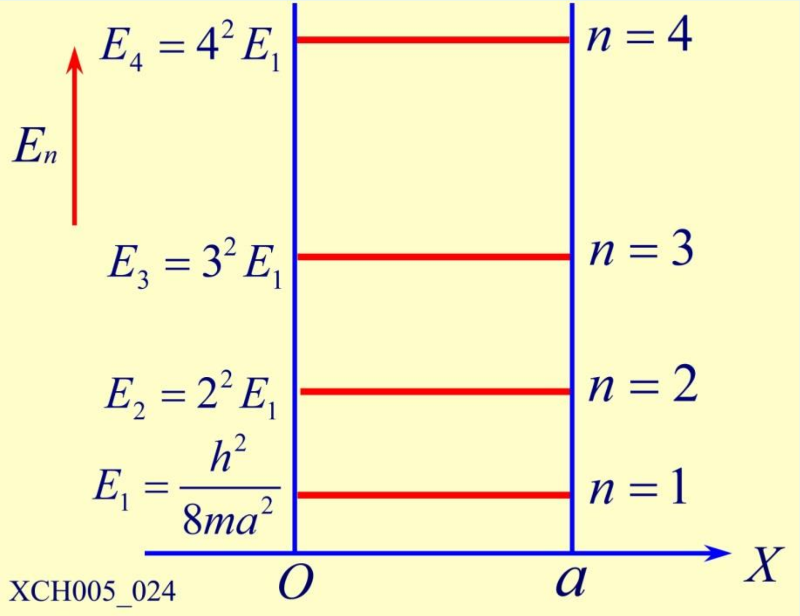
$$n = 1, 2, 3, \cdots \quad n \ne 0$$



—— 结果讨论

1) 粒子的能量是量子化的 $E_n = n^2 \dfrac{h^2}{8ma^2}$

$n = 1, 2, 3, \cdots \quad n \neq 0$



2) 零点能 —— 基态

—— 基态能 $E_1 = \dfrac{h^2}{8ma^2}$

遵守海森伯不确定关系 —— 最低能量不能是零

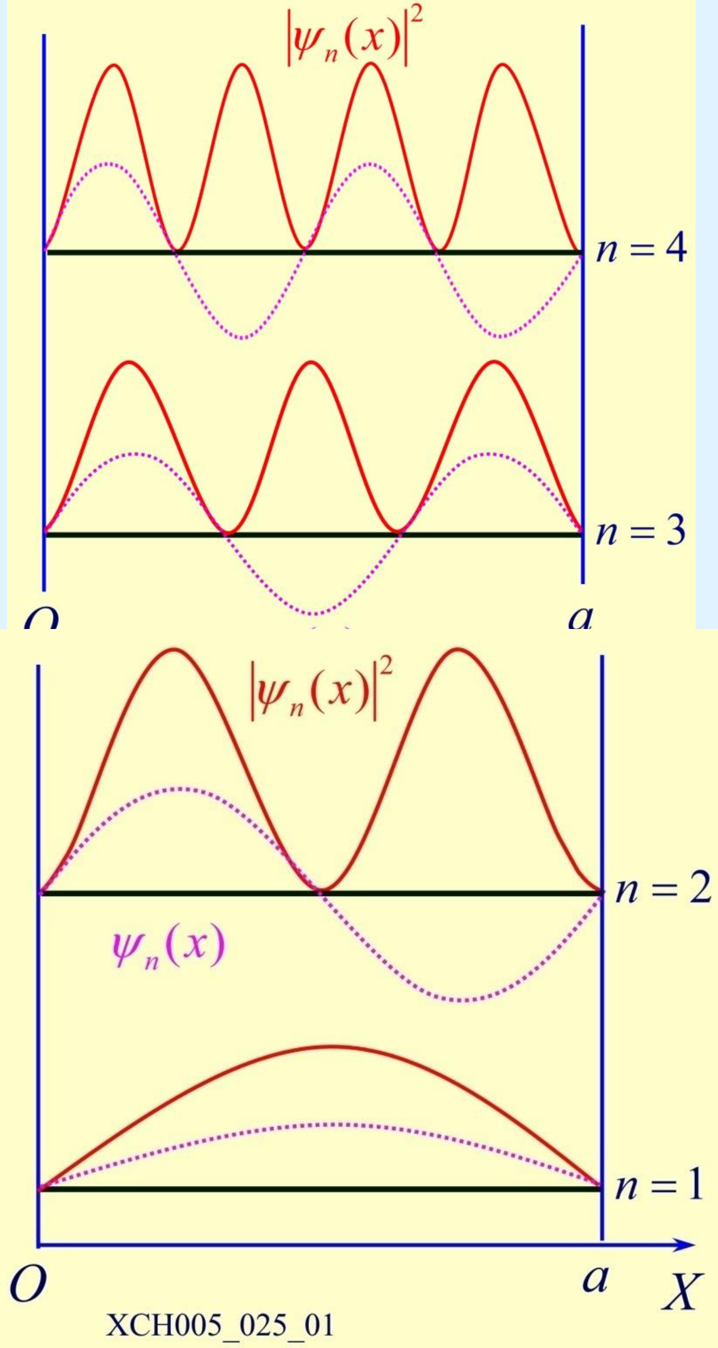
3) 概率密度分布函数

$$\rho=\begin{cases}0 & 0\le x,\ x\ge a\\ \dfrac{2}{a}\sin^2\dfrac{n\pi}{a}x & 0<x<a\end{cases}$$

—— 粒子在各处出现概率不同

—— 在 $n\to\infty$ 时

粒子出现在各处的概率趋于一样



4) 势阱中粒子的动量

$$p=\pm\sqrt{2mE} \longleftarrow E_n=n^2\frac{h^2}{8ma^2}$$

$$p_n=\frac{nh}{2a}$$ —— 动量是量子化的

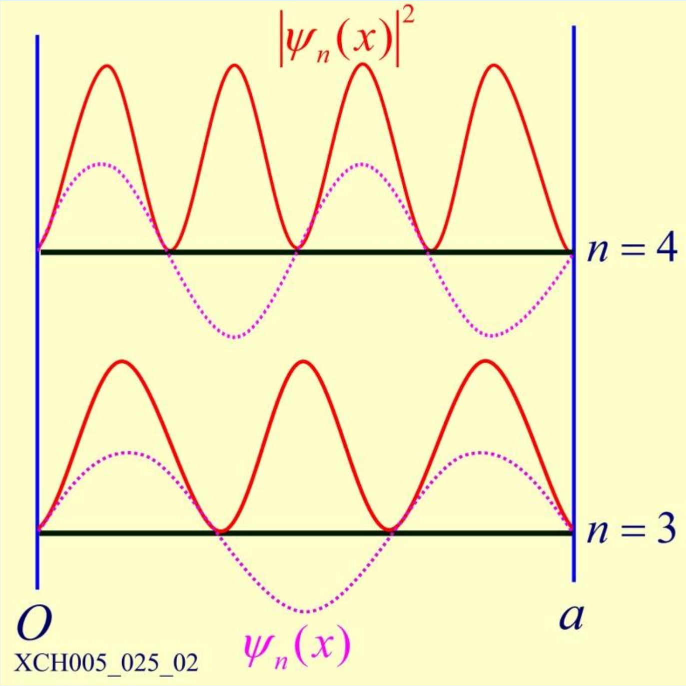
5) 粒子的德布罗意波长 $\lambda=\frac{h}{p}$

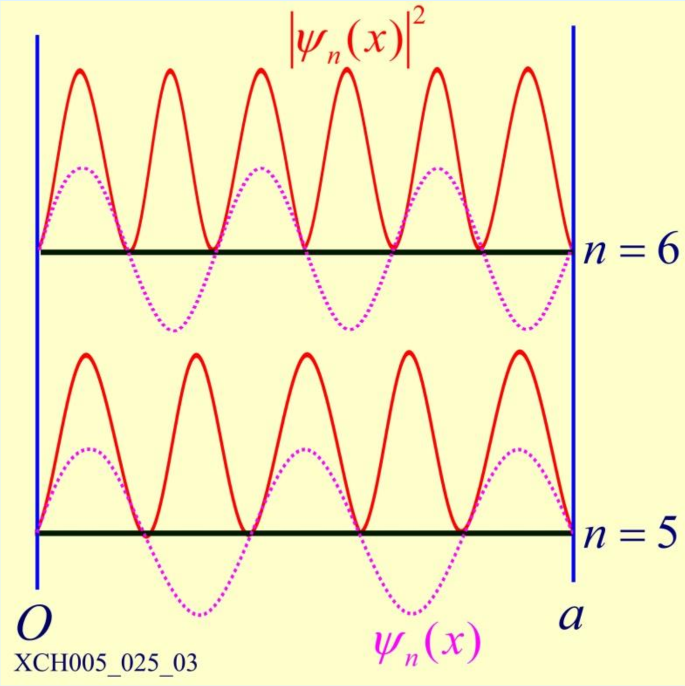
$$\lambda_n=\frac{2a}{n}$$ —— 波长是量子化的 $a=n\frac{\lambda_n}{2}$

无限深势阱中的粒子定态波函数 —— 驻波形式

$$\begin{cases} \psi_n(x) = \sqrt{\dfrac{2}{a}} \sin \dfrac{n\pi}{a} x \\ a = n \dfrac{\lambda_n}{2} \end{cases}$$

定态波函数 —— 驻波形式





QUANTIZATION

All the animations and explanations on
www.toutestquantique.fr

作业：W13 波粒二象性 波函数