第1章 波函数与薛定谔方程

§1 波函数的统计解释

§2 薛定谔方程

§3 量子态叠加原理

§1　波函数的统计解释

一　粒子和波的经典观点

二　微观粒子波粒二象性

三　微观粒子运动状态的描述

四　波函数的性质

五　动量分布概率

六　不确定性原理与不确定度关系

七　力学量的平均值与算符的引进

四 波函数的性质

（1）概率和概率密度

根据波函数的统计解释，波函数有如下重要性质：

在t时刻，r 点，体积元 $d\tau = dxdydz$ 内，找到由波函数$\Psi(r,t)$ 描写的粒子的概率是：

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

在 t 时刻 r 点，单位体积内找到粒子的概率是：

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

概率分布密度

在体积V 内，t 时刻找到粒子的概率为

$$W(t) = \int_V dW = \int_V \omega(r,t)\, d\tau = \int_V |\Psi(r,t)|^2 d\tau$$

波函数的归一化条件

令 $\psi(\vec{r},t)=C\phi(\vec{r},t)$

t 时刻，在空间任意两点 $\vec{r}_1$ 和 $\vec{r}_2$ 处找到粒子的相对概率是：

$$\left|\frac{\psi(\vec{r}_1,t)}{\psi(\vec{r}_2,t)}\right|^2=\left|\frac{C\phi(\vec{r}_1,t)}{C\phi(\vec{r}_2,t)}\right|^2=\left|\frac{\phi(\vec{r}_1,t)}{\phi(\vec{r}_2,t)}\right|^2$$

$\psi(\vec{r},t)$ 和 $\phi(\vec{r},t)$ 所描写状态的相对概率是相同的，这里的 C 是常数。

可见，$\psi(\vec{r},t)$ 和 $\phi(\vec{r},t)$ 描述的是同一概率波，所以波函数有一常数因子不定性。

非相对论量子力学仅研究低能粒子，粒子不会产生与湮灭。对一个粒子而言，它在全空间出现的概率等于一，所以粒子在空间各点出现的概率只取决于波函数在空间各点强度的相对比例，而不取决于强度的绝对大小，因而，将波函数乘上一个常数后，所描写的粒子状态不变，即

$\psi(\vec{r},t)$ 和 $C\psi(\vec{r},t)$ 描述同一状态

这与经典波截然不同。对于经典波，当波幅增大一倍（原来的 2 倍）时，则相应的波动能量将为原来的 4 倍，因而代表完全不同的波动状态。经典波无归一化问题。

为消除波函数有任一常数因子的这种不确定性，利用粒子在全空间出现的概率等于一的特性，提出波函数的归一化条件：

$$\boxed{\int_{\infty} \omega(\vec{r},t)d\tau = \int_{\infty} |\psi(\vec{r},t)|^2 d\tau = 1}$$

满足此条件的波函数 $\psi(\vec{r},t)$ 称为归一化波函数。

又因 $$\int_{\infty} |\psi(\vec{r},t)|^2 d\tau = C^2 \int_{\infty} |\phi(\vec{r},t)|^2 d\tau = 1$$

其中 $$C = \frac{1}{\sqrt{\int_{\infty} |\phi(\vec{r},t)|^2 d\tau}}$$ 称为归一化常数

于是 $$\omega(\vec{r},t) = |\psi(\vec{r},t)|^2 = \frac{|\phi(\vec{r},t)|^2}{\int_{\infty} |\phi(\vec{r},t)|^2 d\tau}$$

归一化条件消除了波函数常数因子的一种不确定性。

例1：设粒子的归一化波函数为 $\psi(x,y,z)$

求

(1)、在 $(x,x+dx)$ 范围内找到粒子的概率,

(2)、在 (y_1,y_2) 范围内找到粒子的概率,

(3)、在 (x_1,x_2) 及 (z_1,z_2) 范围内找到粒子的概率.

例1:设粒子的归一化波函数为 $\psi(x, y, z)$

（1） 在 $(x, x+dx)$ 范围内找到粒子的概率,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} \left|\psi(x, y, z)\right|^2 dz \cdot dx$$

（2） 在 (y_1, y_2) 范围内找到粒子的概率,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{y_1}^{y_2} dy \int_{-\infty}^{\infty} \left|\psi(x, y, z)\right|^2 dz$$

（3） 在 (x_1, x_2) 及 (z_1, z_2) 范围内找到粒子的概率.

$$\int_{x_1}^{x_2} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{z_1}^{z_2} \left|\psi(x, y, z)\right|^2 dz$$

例2：　已知一维粒子状态波函数为

$$\psi(\vec{r},t)=A\exp\left\{-\frac{1}{2}a^2x^2-\frac{i}{2}\omega t\right\}$$

求归一化的波函数，粒子的概率分布，粒子在何处出现的概率最大。

例2： 已知一维粒子状态波函数为

$$\psi(\vec{r},t) = A\exp\left\{-\frac{1}{2}a^2x^2 - \frac{i}{2}\omega t\right\}$$

求归一化的波函数，粒子的概率分布，粒子在何处出现的概率最大。

解： (1). 求归一化的波函数

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 dx = |A|^2\int_{-\infty}^{\infty} e^{-a^2x^2} dx = |A|^2\sqrt{\frac{\pi}{a^2}} = 1$$

归一化常数 $A = \left(a/\sqrt{\pi}\right)^{1/2}$

归一化的波函数 $\psi(\vec{r},t) = \left(a/\sqrt{\pi}\right)^{1/2} e^{-\frac{1}{2}a^2x^2 - \frac{i}{2}\omega t}$

（2）概率分布： $\omega(x,t)=|\psi(x,t)|^2=\frac{a}{\sqrt{\pi}}e^{-a^2x^2}$

（3）由概率密度的极值条件

$$\frac{d\omega(x,t)}{dx}=-\frac{a}{\sqrt{\pi}}2a^2xe^{-a^2x^2}=0 \Rightarrow x=0$$

由于 $\left.\frac{d^2\omega(x,t)}{dx^2}\right|_{x=0}<0$

故 $x=0$ 处，粒子出现概率最大。

注 意

（1）归一化后的波函数 $\psi(\vec{r},t)$ 仍有一个模为一的因子 $e^{i\delta}$ 不定性（ δ 为实函数）。

若 $\psi(\vec{r},t)$ 是归一化波函数，那末，$\psi(\vec{r},t)e^{i\delta}$ 也是归一化波函数，与前者描述同一概率波。

（2）只有当概率密度 $\omega(\vec{r},t)$ 对空间绝对可积时，才能按归一化条件 $\int_{\infty}|\psi(\vec{r},t)|^2 d\tau = 1$ 进行归一化。

若 $\omega(\vec{r},t)=|\psi(\vec{r},t)|^2$ 对空间非绝对可积时，需用所谓 δ 函数归一化方法进行归一化。

小结：在非相对论量子力学中，若仅限于波函数的统计解释，则因统计解释中只涉及波函数的振幅，因此存在下述不确定性：

(i)常数因子的不确定性。若C为常数，

$\psi(\vec{r},t)$ 和 $C\psi(\vec{r},t)$ 描述同一状态，因为它们的相对概率相同：

$$\frac{|\psi(r_1,t)|^2}{|\psi(r_2,t)|^2}=\frac{|C\psi(r_1,t)|^2}{|C\psi(r_2,t)|^2}$$

（ii）归一化后的波函数 $\psi(\vec{r},t)$ 仍有一个模为一的因子 $e^{i\delta}$ 不定性（ δ 为实函数）。

若 $\psi(\vec{r},t)$ 是归一化波函数，那末，$\psi(\vec{r},t)e^{i\delta}$ 也是归一化波函数，与前者描述同一概率波。

越来越多的实验事实证明，波函数的位相是非常重要的物理概念，只限于统计解释还不能完全穷尽对波函数的认识。

量子波函数的概率解释有不足

- 玻恩的概率解释："波函数的振幅的平方是粒子被发现的概率"。不是完整诠释，只关注所谓的可观察量（振幅），忽略了相位（因为不属于可观察量）。

- 杨振宁说，规范场论就是相位场。相位是其根本。振幅与相位合起来用复数表示。

- 相位是复杂性之源，相位导致纠缠，纠缠导致记忆与电子相干。自由度的纠缠和相干，往往会造就许多意想不到的结果。

作　业　题

1. 下列一组波函数共描写粒子的几个不同状态？并指出每个状态由哪几个波函数描写。

$$\psi_1 = e^{i2x/h}, \qquad \psi_2 = e^{-i2x/h}, \qquad \psi_3 = 3e^{-i(2x+\pi h)/h},$$

$$\psi_4 = e^{i3x/h}, \qquad \psi_5 = -e^{i2x/h}, \qquad \psi_6 = (4+2i)e^{i2x/h}.$$

2. 已知下列两个波函数

$$\psi_1(x) = \begin{cases} A\sin\dfrac{n\pi}{2a}(x-a) & |x|\le a \\ 0 & |x|>a \end{cases} \qquad n=1,2,3,L$$

$$\psi_2(x) = \begin{cases} A\sin\dfrac{n\pi}{2a}(x+a) & |x|\le a \\ 0 & |x|>a \end{cases} \qquad n=1,2,3,L$$

试判断：(1)波函数$\psi_1(x)$ 和$\psi_2(x)$ 是否描述同一状态？

(2)对 $\psi_1(x)$ 取 $n=\pm 2$ 两种情况，得到的两个波函

前面讨论的是单个粒子的波函数，假设一个体系包含两个或多个粒子时，波函数如何表示？

对于N个粒子组成的体系，它的波函数表示为

$$\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\cdots,\vec{r}_N)$$

其中$\vec{r}_1(x_1,y_1,z_1),\vec{r}_2(x_2,y_2,z_2),\cdots,\vec{r}_N(x_N,y_N,z_N)$**分别表示各粒子的空间坐标**

$$|\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\cdots,\vec{r}_N)|^2d^3r_1d^3r_2\cdots d^3r_N$$

表示

粒子 1 出现在$(\vec{r}_1,\vec{r}_1+d\vec{r}_1)$中,

同时粒子 2 出现在$(\vec{r}_2,\vec{r}_2+d\vec{r}_2)$中,

……

同时粒子 N 出现在$(\vec{r}_N,\vec{r}_N+d\vec{r}_N)$中的概率,

归一化条件表示为

$$\int_{(全)}|\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\cdots,\vec{r}_N)|^2d^3r_1d^3r_2\cdots d^3r_N=1$$

所以$\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\cdots,\vec{r}_N)$描述的是抽象的$3N$维位形空间中的概率波