

量子力学

Quantum Mechanics **学习指导**

刘莲君 张哲华 编著



WUHAN UNIVERSITY PRESS

武汉大学出版社

0413.1/73

2007

量子力学

Quantum Mechanics 学习指导

刘莲君 张哲华 编著



WUHAN UNIVERSITY PRESS

武汉大学出版社

图书在版编目(CIP)数据

量子力学学习指导(原《量子力学与原子物理学学习指导》)/刘莲君,张哲华编著. —2版. —武汉:武汉大学出版社,2007.10

ISBN 978-7-307-05854-5

I. 量… II. ①刘… ②张… III. 量子力学—高等学校—教学参考资料 IV. O413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2007)第 147912 号

责任编辑:任翔 责任校对:王建 版式设计:詹锦玲

出版发行:武汉大学出版社 (430072 武昌 珞珈山)

(电子邮件:wdp4@whu.edu.cn 网址:www.wdp.whu.edu.cn)

印刷:湖北新华印务公司

开本:787×1092 1/16 印张:29.25 字数:703千字 插页:1

版次:1999年5月第1版 2007年10月第2版

2007年10月第2版第1次印刷

ISBN 978-7-307-05854-5/O·367 定价:38.00元

版权所有,不得翻印;凡购买我社的图书,如有缺页、倒页、脱页等质量问题,请与当地图书销售部门联系调换。

再版说明

《量子力学与原子物理学学习指导》一书自 2000 年 12 月出版以来,以它的内容丰富、题型多样、适用性强等诸多特点受到了广大师生及相关的科学技术人员的普遍欢迎。为了更加有利于读者对于“量子力学”课程的学习以及排版、印刷、装订的方便与需要,这次再版是在原书的基础上删去了全部“原子物理学”的内容及部分例题,并将书名更改为《量子力学学习指导》,同时订正了第一版书中存在的一些错误。使得该书更加精练、简洁,更加适应当代科学发展的需要。

本书若有不当之处,恭请广大读者朋友批评指正。

编者

2007 年 6 月

前 言

本书是与我们编著的教材《量子力学与原子物理学》(武汉大学出版社, 1997年9月第1版)配套的教学辅助教材。按那本教材, 本书共分同样的11章。每章又分为三部分。第一部分是内容提要, 尽可能简要地总结了一章的主要内容, 并且对个别内容作了些许扩充。第二部分是例题, 全书共有335道例题, 包括了《量子力学与原子物理学》一书中的几乎全部习题; 每一道例题都有详细的解答。第三部分是练习题, 全书共有196道练习题; 练习题没有解答, 但是在每一道题后都附有答案, 有的题还给出了提示。本书从1987年起就由武汉大学教务处以讲义的形式分成上、下册刊印, 提供给本校学生为指导学习量子力学课程使用; 这次正式出版又增补了不少应用量子力学理论求解原子物理学问题的例题和练习题。期望本书能够对学生学习量子力学与原子物理学课程起到指导和辅助作用。

本书的编写工作由刘莲君主持; 张哲华编写全书的内容提要以及四分之一的例题和练习题, 刘莲君编写全书四分之三的例题和练习题。

对本书中的错误和不妥之处, 恳请读者批评指正。感谢武汉大学教务处、理学院以及武汉大学出版社的支持, 使本书得以出版。

刘莲君 张哲华

1999年1月于武汉大学理学院物理系

目 录

第一章 量子力学原理 (I):波函数及薛定谔方程	(1)
第一部分 内容精要	(1)
一、实物粒子的波粒二象性	(1)
二、量子力学的第一条假设:波函数及其统计解释	(1)
1. 波函数(1)	
2. 波函数的统计解释(2)	
3. 波函数的归一化(2)	
4. 量子态(4)	
三、测不准关系	(4)
四、态叠加原理	(4)
五、量子力学的第二条假设:薛定谔方程	(5)
1. 薛定谔方程(5)	
2. 连续性方程和几率流密度(5)	
3. 薛定谔方程的经典极限(6)	
4. 体系的时间演化算符(6)	
六、定态	(8)
1. 定态的定义(8)	
2. 定态薛定谔方程(8)	
3. 一维定态问题(9)	
4. 逆问题(9)	
5. 已知时刻 t' 的非定态波函数 $\Psi(r, t')$ 求时刻 $t(t > t')$ 的 $\Psi(r, t)$ (9)	
第二部分 例题	(10)
第三部分 练习题	(50)
第二章 量子力学原理 (II):力学量算符及量子条件	(60)
第一部分 内容精要	(60)
一、量子力学的第三条假设:力学量用算符表示	(60)
1. 算符(60)	
2. 力学量用算符表示(60)	
二、几个基本的力学量算符	(61)
1. 坐标及坐标的函数(61)	
2. 动量及动量的函数(61)	

3. 轨道角动量(62)	
4. 宇称(62)	
5. 体系的哈密顿算符(62)	
三、量子力学的第四条假设:量子条件	(62)
1. 基本量子条件的引出(62)	
2. 复变量表示的基本量子条件(63)	
3. 两个力学量算符之间的对易关系(64)	
4. 量子条件的作用(64)	
四、一般性的测不准关系	(64)
五、力学量期望值随时间变化,体系的守恒量	(65)
1. 力学量的期望值随时间的变化(65)	
2. 厄仑费斯特(P. Ehrenfest)定理(65)	
3. 体系的守恒量(66)	
六、三个定理	(66)
1. 维里定理(66)	
2. 费曼-海尔曼(R. P. Feynman-H. Hellmann)定理(67)	
3. 克喇末(H. A. Kramers)表示式(68)	
第二部分 例题	(69)
第三部分 练习题	(113)
第三章 中心力场——氢原子和类氢离子	(118)
第一部分 内容精要	(118)
一、粒子在中心力场中运动的一般特点	(118)
1. 定态薛定谔方程分离变量(118)	
2. 角向方程和角向函数(118)	
3. 径向方程、径向函数和体系的能量(119)	
4. 束缚定态的能级和波函数(119)	
二、求解束缚定态径向方程的几点说明	(120)
1. 相似于粒子在一维有效势场中运动的定态薛定谔方程(120)	
2. 克拉末表示式(120)	
3. 费曼-海尔曼定理的应用(121)	
4. 逆问题(122)	
三、电子在原子核的静电库仑势场中运动	(122)
四、氢原子和类氢离子问题	(122)
1. 将两体问题归结为一个电子在库仑场中运动问题(122)	
2. 束缚定态能量(123)	
3. 原子内电子云的角向分布和径向分布(123)	
4. 原子内的电流密度分布及原子的磁矩(124)	
5. 定态之间的量子跃迁(124)	
五、三维各向同性谐振子	(124)
六、粒子在二维中心势场中运动	(125)

第二部分 例题	(126)
第三部分 练习题	(153)
第四章 态和力学量的表示方式	(157)
第一部分 内容精要	(157)
一、狄拉克符号和表象表示	(157)
二、狄拉克符号	(157)
1. 体系态矢量的狄拉克符号;右矢(157)	
2. 右矢空间的对偶空间中的矢量;左矢(157)	
3. 算符的表示(158)	
4. 基矢量组的正交归一性和完备性表示式(159)	
三、表象表示; \hat{Q} 表象;两类情况	(159)
四、 \hat{Q} 表象;算符 \hat{Q} 的本征值谱连续情况	(159)
1. 态矢量的表示(159)	
2. 力学量算符的表示(160)	
3. 量子力学公式及方程的表示式(162)	
五、 \hat{Q} 表象;算符 \hat{Q} 的本征值谱分立情况	(164)
1. 态矢量的表示(164)	
2. 力学量算符的表示(165)	
3. 量子力学公式及方程的表示式(166)	
六、狄拉克符号与表象表示的等价性	(167)
七、表象变换及不同表象的等价性	(167)
1. 两个表象的基矢量组之间的变换(167)	
2. 态矢量的表象变换(167)	
3. 力学量算符的表象变换(168)	
4. 不同表象的等价性(168)	
第二部分 例题	(168)
第三部分 练习题	(210)
第五章 电子自旋及一般角动量	(218)
第一部分 内容精要	(218)
一、再定义轨道角动量算符	(218)
1. 定义为空间转动变换算符群的生成元(218)	
2. 由定义推导出对易关系(219)	
3. 由定义推导出坐标表象的表示式(220)	
4. 应用(221)	
二、电子自旋的假设与实验证实	(222)
三、电子自旋算符	(222)
1. 定义为空间转动变换算符群的生成元(222)	
2. 对易关系(222)	

3. 狄拉克符号表示(222)	
4. 泡利表象(223)	
5. 算符 $\hat{s} \cdot n$ (224)	
四、电子自旋态矢量	(224)
1. 本征态矢量(224)	
2. 一般态矢量(225)	
3. 旋量(225)	
4. 自旋极化方向在磁场中进动(226)	
五、一般角动量算符	(226)
1. 定义(226)	
2. 对易关系(226)	
3. 本征值问题(226)	
4. 矩阵表示(227)	
5. 角动量的施温格谐振子模型(228)	
六、两个角动量的耦合	(229)
1. 两个独立的角动量算符之和(229)	
2. 总角动量算符的本征值问题(229)	
3. 无耦合表象与耦合表象(230)	
4. 克累布施-戈登系数(230)	
5. 例 1: 一个电子的“轨道”——自旋耦合态(231)	
6. 例 2: 两个电子的自旋耦合态(231)	
第二部分 例题	(232)
第三部分 练习题	(272)
第六章 定态微扰论与变分法	(279)
第一部分 内容精要	(279)
一、瑞利-薛定谔定态微扰展开	(279)
1. 非简并情况(279)	
2. 简并情况(280)	
二、达伽诺-列维斯技巧	(281)
三、布里渊-维格纳定态微扰展开	(283)
四、瑞利-里兹变分法	(284)
五、变分—微扰法	(284)
六、原子的斯塔克效应	(285)
七、氢原子光谱的精细结构	(285)
八、兰姆位移	(286)
九、原子能级的超精细结构	(287)
1. 核磁矩与电子的相互作用(287)	
2. 核电四极矩与电子的相互作用(288)	
3. 核的有限质量效应(288)	
4. 核的有限体积效应(289)	

十、氢原子能级间距的数字计算举例	(289)
第二部分 例题	(289)
第三部分 练习题	(322)
第七章 粒子在电磁场中的运动	(326)
第一部分 内容精要	(326)
一、粒子在电磁场中的运动方程	(326)
1. 无自旋粒子运动的哈密顿算符(326)	
2. 几率流密度(326)	
3. 规范变换及规范不变性(326)	
4. 例 1:朗道能级(327)	
5. 例 2:AB 效应(328)	
6. 电子在电磁场中运动计入自旋和相对论性修正后的哈密顿算符(331)	
二、恒定均匀磁场中的原子	(331)
1. 体系的哈密顿算符(331)	
2. 强场情况:正常塞曼效应(331)	
3. 弱场情况:反常塞曼效应(332)	
4. 氢原子在外恒定均匀强磁场中运动方程的柱面坐标系式(332)	
三、电场中的原子	(333)
1. 氢原子在外恒定均匀电场中能级的线性斯塔克分裂(333)	
2. 氢原子在外恒定均匀强电场中运动方程的抛物线坐标系式(333)	
3. 振荡电场中的原子(333)	
第二部分 例题	(335)
第三部分 练习题	(358)
第八章 全同粒子系与氦原子	(362)
第一部分 内容精要	(362)
一、全同粒子系波函数的粒子交换对称性,量子力学的第五条假设	(362)
1. 全同性原理(362)	
2. 全同粒子系的粒子交换对称性(362)	
3. 全同粒子系波函数的粒子交换对称性,量子力学的第五条假设(362)	
二、独立粒子模型	(363)
1. 体系定态的波函数和能量(363)	
2. 泡利不相容原理(364)	
三、氦原子和类氦离子	(364)
1. 二电子体系的定态波函数(364)	
2. 泡利排斥和泡利吸引(364)	
3. 氦原子和类氦离子(365)	
第二部分 例题	(366)
第三部分 练习题	(386)

第九章 量子跃迁——原子的光吸收与发射	(391)
第一部分 内容精要	(391)
一、跃迁及跃迁几率	(391)
1. 含时间微扰论(391)	
2. 跃迁几率(392)	
3. 常微扰(392)	
4. 周期性微扰(392)	
二、能量-时间测不准关系	(393)
三、原子的光吸收与发射	(393)
1. 爱因斯坦 A, B 系数(393)	
2. 电偶极近似下的光吸收系数表示式(393)	
3. 电偶极辐射跃迁选择定则(393)	
四、另一类情况:绝热近似	(394)
第二部分 例题	(394)
第三部分 练习题	(413)
第十章 散射	(415)
第一部分 内容精要	(415)
一、散射截面	(415)
1. 散射截面(415)	
2. 从质心坐标系变换到实验室坐标系(415)	
3. 位势散射(416)	
二、定态描述;中心势场散射与分波法	(416)
1. 定态描述,散射振幅与散射截面(416)	
2. 中心势场散射,分波法(416)	
3. 分波法的适用范围(417)	
三、时间相关描述;玻恩近似	(417)
1. 时间相关描述,跃迁几率与散射截面;玻恩近似(417)	
2. 中心势场散射情况(418)	
3. 玻恩近似的适用条件(418)	
四、李普曼-施温格方程	(418)
1. L-S 方程(418)	
2. $\psi^{(+)}(r)$ 满足散射问题的边界条件(419)	
3. 散射振幅 $f(\theta, \varphi)$ 的表示式及其玻恩级数(419)	
五、中心势场散射的分波相移的玻恩近似表示式	(420)
六、中心势场散射的逆问题	(421)
七、全同粒子的势散射	(422)
八、带电粒子对原子的弹性散射	(422)
1. 高速粒子对原子序数为 Z 、电子数密度分布为 $\rho(r)$ 的原子散射(422)	
2. 电子-基态氢原子散射(423)	

第二部分 例题.....	(424)
第三部分 练习题.....	(448)
附录.....	(451)
一、常用物理学常数	(451)
二、单位换算	(452)
主要参考书目.....	(454)

第一章 量子力学原理(I):波函数 及薛定谔方程

第一部分 内容精要

一、实物粒子的波粒二象性

德布罗意(L. de Broglie)于1923年假设:实物粒子的运动总有某种波动(“物质波”)相伴随;自由粒子的能量 E 和动量 p 与其相伴随的单色平面波的频率 ν (或角频率 ω)和波矢 k (或波长 λ)有如下关系式

$$E = h\nu = \hbar\omega \quad (1-1)$$

和

$$p = \hbar k, \text{其大小 } p = \frac{h}{\lambda} \quad (1-2)$$

这两式统称为实物粒子的波粒二象性的德布罗意关系式。它将自由粒子相伴随的单色平面波的频率 ν (或角频率 ω)和波矢 k (或波长 λ)与自由粒子的能量 E 和动量 p 联系起来。

1927年戴维逊(C. J. Davisson)和革末(L. H. Germer)、同年汤姆逊(G. P. Thomson)各自独立地完成了电子在晶体上的衍射实验,证实电子具有波动性,以及德布罗意关系式成立。以后,实验陆续地证实,不仅电子而且质子、中子以及原子等都具有波动性。波动性是所有实物粒子普遍共有的,德布罗意关系式对所有实物粒子都成立。

实验证实微观粒子具有波粒二象性。因而,微观世界中出现的许多现象纯属量子效应,应用经典理论不能解释;可以圆满解释微观体系诸多量子现象的量子力学也不能由经典理论推演出来,其基本原理只能以假设的方式提出,假设的正确性则由其所得出的物理结果与实验事实完全符合(以及诸假设本身是自洽的)而得到检验。量子力学的基本假设共有五条,本章介绍其中两条。

二、量子力学的第一条假设:波函数及其统计解释

微观体系的运动状态由相应的一个波函数完全地描述,波函数作统计解释。

1. 波函数

微观粒子在任一外界环境下均以波动方式运动,量子力学用坐标 r 和时间 t 的一个复函数 $\Psi(r, t)$ 来描述粒子的相应一个波动状态,称 $\Psi(r, t)$ 为波函数或态函数。它是物质波场的场量。

这与经典力学描述质点运动状态的方式不同。经典力学中,一个质点的运动状态用力

学量的完全集合 $\{r(t), p(t)\}$ 来完全描述和确定。

2. 波函数的统计解释

对微观粒子的波粒二象性作正确理解,就是要对波函数作正确解释。正确的解释是玻恩(M. Born)的统计解释。粒子在运动过程中始终保持完整一颗颗的,其表现为粒子的固有属性物理量(质量 m 、电荷 q 、自旋 s 等)保持有不可分割的完整颗粒性;但是,单个粒子的运动行为具有波动性,在任一时刻 t 粒子都不是决定性地一定出现在空间某一点 r 处(因而运动过程没有轨道),而是在空间各点都有出现的可能性。波函数 $\Psi(r, t)$ 的绝对值平方 $|\Psi(r, t)|^2$ 就正比于粒子在时刻 t 、在空间 r 点出现的几率。这就是说,物质波是几率波,波函数(波场的场量)本身并没有直接的物理意义,而是波的强度给出粒子在时刻 t 在空间各点出现的几率分布。因此,如果有大量的粒子处于完全相同的运动状态 $\Psi(r, t)$ 中,则统计的结果, $|\Psi(r, t)|^2$ 就给出空间中粒子数的密度分布。

这样的统计解释还可以由对粒子的空间坐标 r 这个力学量而言扩展到对粒子的动量、角动量、能量等所有其他力学量。一个以粒子坐标 r 为自变量的波函数 $\Psi(r, t)$ 在作了相应的表象变换后(详见第五章),可以变换为这个波函数以粒子的另外某力学量为自变量的函数(或矩阵)形式,就可以给出粒子在这个波函数所描述的运动状态下该力学量取各个可能值的几率分布。例如,归一化波函数 $\Psi(r, t)$ 的傅里叶变换为

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

而 $|c(p, t)|^2$ 就是粒子在同一运动状态下在时刻 t 动量 p 取各个可能值的几率分布。完全地描述体系一个运动状态的波函数在归一化后,给出粒子在这个运动状态下,在任一时刻 t 坐标、动量以及其他所有力学量取值的几率分布。

3. 波函数的归一化

按照波函数的统计解释,就要求粒子任一时刻 t 在空间各点出现的几率总和为 1,即要求波函数 $\Psi(r, t)$ 满足归一化条件。

如果粒子受外场约束,所处运动状态是束缚态,波函数满足边界条件

$$\Psi(r, t) \xrightarrow{|r| \rightarrow \infty} 0 \quad (1-4)$$

则波函数 $\Psi(r, t)$ 须满足的归一化条件是

$$\iiint_{\infty} |\Psi(r, t)|^2 d\tau = 1 \quad (1-5)$$

若 $\Psi(r, t)$ 不满足这个条件,须将它代之以 $N\Psi(r, t)$, N 称为归一化常数,通常取为正实数,等于

$$N = \left[\iiint_{\infty} |\Psi(r, t)|^2 d\tau \right]^{-1/2} \quad (1-6)$$

以使 $N\Psi(r, t)$ 满足归一化条件式(1-5)。 $N\Psi(r, t)$ 称为已归一化波函数。

如果粒子没有被外场束缚住,所处的运动状态是自由态,不遵从式(1-4)的边界条件,即粒子可以运动至无限远处(在 $|r| \rightarrow \infty$ 处粒子出现的几率不等于零),例如自由粒子处于动量有确定值 p 的运动状态,即平面波状态,波函数为

$$\Psi_p(r, t) = N e^{\frac{i}{\hbar}(p \cdot r - Et)}, E = \frac{p^2}{2m} \quad (1-7)$$

则波函数不可能满足式(1-5)的归一化条件。自由粒子平面波状态波函数 $\Psi_p(\mathbf{r}, t)$ 式(1-7)可有二种归一化方式。

(1) 归一化成 δ 函数

归一化表示式为

$$\iiint_{-\infty}^{\infty} \Psi_p^*(\mathbf{r}, t) \Psi_{p'}(\mathbf{r}, t) d\tau = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \quad (1-8)$$

得到已归一化的波函数为

$$\Psi_p(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)} \quad (1-9)$$

若是一维运动情况,则为

$$\Psi_p(x, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{i(px - Et)} \quad (1-10)$$

(2) 箱归一化

由于自由粒子在物理实际条件下,运动总是局域在有限的空间内,这个限制由仪器的有限几何尺寸及粒子的有限运动速度所决定。据此,设粒子的运动限制在边长为 L 的立方“箱子”内,最后可再取 $L \rightarrow \infty$ 。如图 1-1 所示。于是归一化表示式为

$$\int_{-L/2}^{L/2} \int_{-L/2}^{L/2} \int_{-L/2}^{L/2} |\Psi_p(\mathbf{r}, t)|^2 d\tau = 1 \quad (1-11)$$

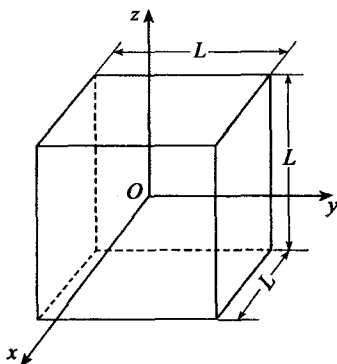


图1-1 平面波函数的“箱归一化”

得到已归一化的波函数为

$$\Psi_p(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(L)^{3/2}} e^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)} \quad (1-12)$$

若是一维运动情况,则为

$$\Psi_p(x, t) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i(px - Et)} \quad (1-13)$$

另外,为了保证自由粒子哈密顿算符 \hat{H} 的厄密性(详见第二章),需要波函数采取周期性边界条件,即

$$\Psi_p\left(-\frac{L}{2}, -\frac{L}{2}, -\frac{L}{2}, t\right) = \Psi_p\left(\frac{L}{2}, \frac{L}{2}, \frac{L}{2}, t\right) \quad (1-14)$$

这使得粒子动量 p 的取值量子化:

$$p_x = \frac{2\pi\hbar}{L}n_x, p_y = \frac{2\pi\hbar}{L}n_y, p_z = \frac{2\pi\hbar}{L}n_z$$

$$n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (1-15)$$

若 $L \rightarrow \infty$, 动量取值间隔 $\Delta p_{x,y,z} = \frac{h}{L} \rightarrow 0$, 粒子动量的取值重又变为连续。

这里强调指出:波函数实现归一化后,也还不是完全确定的,仍含有一个任意的位相因子 $e^{i\theta}$;因为通常总是将归一化常数取为正实数,故实际上是约定将此相角 δ 取为零,这并不影响粒子坐标 r 的取值几率分布 $|\Psi(r, t)|^2$ 。但是新近发现,若体系的动力学变化过程还伴随着有一个绝热变化过程(甚至不限于绝热变化过程),则体系运动状态的波函数中会出现一个几何位相因子 $e^{i\gamma}$,称为柏瑞位相(M. V. Berry, 1984),它被认为是量子力学发展中最近十余年来最重要的发现。它实际上不仅在量子力学,也包括在经典力学中,在许多方面都呈现出重要意义。

4. 量子态

微观体系的运动状态由相应一个波函数完全地描述,波函数作统计解释,这表明体系的运动状态是由相应的波函数给出粒子在任一时刻 t 的坐标、动量以及其他所有力学量取值的几率分布而完全确定的。这样按统计性方式(而非决定性地)来完全确定的微观体系运动状态亦称为量子态。

三、测不准关系

微观粒子运动具有波粒二象性。如果仍沿用经典力学的力学量如坐标和动量等概念来描述微观体系的运动状态,就只能作统计性的描述,而完全决定性的规律是不适用的。经典力学中,质点运动有轨道,在任一时刻坐标和动量都同时有确定值。但是,微观粒子的运动没有轨道,粒子的坐标和动量不可能同时有确定值,一般说来同时都没有确定值而各有一个不确定度。海森堡(W. K. Heisenberg)给出了在同一个维度上这两者不确定度 Δx 和 Δp 之间的关系为

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar \quad (1-16)$$

与普朗克常数 \hbar 有关。它称为海森堡测不准关系。这个关系式给出经典概念和图像描述波粒二象性粒子运动所适用的限度,只有在式中的普朗克常数 \hbar 可以视为零的情况下,经典力学才是完全适用的。否则,由经典力学讨论微观体系所得到的任何结果,都必须应用测不准关系作修正。

四、态叠加原理

体系如果既可能处于态 $\Psi_1(r, t)$ 中,同时又可能处于态 $\Psi_2(r, t)$ 、 $\Psi_3(r, t)$ ……中,则这个体系一定是处于由这些态叠加而成的态 $\Psi(r, t)$ 中:

$$\Psi(r, t) = c_1\Psi_1(r, t) + c_2\Psi_2(r, t) + c_3\Psi_3(r, t) + \dots \quad (1-17)$$

式中:诸叠加系数 c_1, c_2, c_3, \dots 是复数并且与时间无关;因而, $\Psi(r, t)$ 也是这个体系的一个可能运动状态。这就是态叠加原理。它体现出物质波作为一种波动必定遵从波的叠加原

理,又反映了物质波的统计解释。态 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 是体系的一个纯态,这个态的波函数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 的绝对值平方

$$|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = |c_1\Psi_1(\mathbf{r}, t) + c_2\Psi_2(\mathbf{r}, t) + c_3\Psi_3(\mathbf{r}, t) + \dots|^2 \quad (1-18)$$

决定粒子坐标的几率分布。但是,上式中会出现干涉项(式中的交叉项就是干涉项),表明体系在叠加态下会产生干涉效应,这是体系自己的一个可能态与自己的另外一个同时可能态之间的干涉;上两式又表明,态 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 的确定不是决定性的,体系在这个态下,是分别以一定的几率幅处于 $\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3, \dots$ 态中的。若伴之以力学量观测,则观测结果是统计性的。

五、量子力学的第二条假设:薛定谔方程

微观体系的任一运动状态的波函数 $\Psi(t)$ 满足薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t) = \hat{H} \Psi(t) \quad (1-19)$$

式中: \hat{H} 是这个体系的哈密顿算符。对于有经典对应的体系来说,算符 \hat{H} 系由相应经典体系的哈密顿函数中的坐标和动量代之以相应的算符而得到。例如单粒子在势场 $V(\mathbf{r})$ 中运动,则

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \quad (1-20)$$

于是这个体系的薛定谔方程写为

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (1-21)$$

1. 薛定谔方程

薛定谔方程(1-18)指明了相应的一个微观体系的任一运动状态波函数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 随时间 t 演化的动力学规律,反映了量子力学的因果律。只要已知一个体系在初始时刻 t_0 的状态波函数 $\Psi(\mathbf{r}, t_0)$, 方程就能给出这个体系在其后任一时刻 t 的状态波函数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 。自然,还需要给定问题的边界条件。对于束缚态,边界条件由式(1-4)表示。另外,波函数还必须满足有限性、单值性和连续性这三个标准条件。

2. 连续性方程和几率流密度

记粒子的坐标几率密度为 $\rho(\mathbf{r}, t)$, 有

$$\rho(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (1-22)$$

式中:体系运动状态的波函数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 设已归一化。设所讨论的体系是单粒子在势场中运动,则由薛定谔方程容易推导出连续性方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (1-23)$$

方程中

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) = \text{Re} \left(\Psi^* \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} \Psi \right) \quad (1-24)$$

是粒子的几率流密度。式(1-24)中, $\frac{\hat{\mathbf{p}}}{m}$ 表示粒子的速度,而 $\Psi^* \Psi$ 是粒子的坐标几率密度,故 $\mathbf{j} \sim \rho \mathbf{v}$ 确实表示粒子的几率流密度。若粒子带电荷 q , 则 $q\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ 表示粒子运动而产生的电流密度。