

普通高等教育“十五”国家级规划教材

量 子 力 学

张永德 著

科学出版社

北 京

内 容 简 介

本书集中讲述非相对论量子力学,内容新颖,阐述清晰,分析深入,不回避问题;包括量子力学的物理基础、Schrödinger 方程、一维问题、中心场束缚态问题、量子力学表象与表示、对称性分析及应用、电子自旋、定态微扰论、电磁作用分析及应用、势散射理论、含时问题与量子跃迁、量子信息论物理基础。

本书适合物理类专业教师及研究人员参考,同时,书中已针对不同学时,给出了三种不同的选用方案,也适合作为物理类本科生教材及研究生教学参考书.为便于教师教学,书中习题配有题解出版(《量子力学习题精解》,吴强,柳盛典编著)。

图书在版编目(CIP)数据

量子力学/张永德著. —北京:科学出版社,2002

普通高等教育“十五”国家级规划教材

ISBN 7-03-010021-2

I. 量… II. 张… III. 量子力学 IV. O413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2002)第 004330 号

责任编辑:鄢德平/责任校对:陈玉凤

责任印制:安春生/封面设计:黄华斌

科学出版社 出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2002 年 3 月第 一 版 开本:B5(720×1000)

2006 年 1 月第四次印刷 印张:28 1/2

印数:8 001—11 000 字数:537 000

定价: 36.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换〈环伟〉)

第四次印刷说明

借这次印刷的机会,再次作了仔细校正和局部改进.它们是:改正了第三次印刷中因版本略有变动所出现的印刷错误,以及以前未发现的个别错误和不当之处.改进了关于态叠加原理和前三个公设的阐述.为读者将来阅读原文方便,除附注外,书中外国人名已统一采用英文.

作 者

2005年12月5日

前 言

到 19 世纪末,经典物理学的两大支柱——牛顿力学和电磁波理论(包括光学)取得了辉煌的成就.经典物理学巨大成就的灿烂光芒,眩惑了人们的眼睛.原本对立的粒子和波这两种概念,被普适化、绝对化了.与此同时,牛顿力学和波动力学的描述方法也被普适化和绝对化了.仿佛物理学所研究的全部对象必定非此即彼.与此相应,拉普拉斯决定论也被普适化和绝对化起来,成了因果论的惟一正确形式,用 Einstein 的话来说就是:“无论如何,我确信上帝是不玩掷骰子的”。

当然,这句话并非 Einstein 观点的论据,只能说表达了他的信念.但至少到目前为止,我们可以说,这是一种混入了主观推测的信念,现实物理世界并非如此.正如 Bohr 所说,人们能有什么“根据”去肯定“上帝”是“不玩掷骰子”的呢?就凭经典物理学和拉普拉斯决定论的巨大成就吗?这显然是一种含有主观成分的外推、一种不可靠的根据.因为经典物理学(以及和它相伴的拉普拉斯决定论)在取得辉煌成就的同时,也有着极大的局限性.牛顿力学(包括后来建立的相对论力学)只局限于研究物体在其外在时空中的机械运动,并没有涉及物体的物质结构、物质的内禀属性;而光学(包括后来的电磁波理论)只局限于研究光的传导,并没有真正涉及光的产生和吸收、光和物质相互作用的机制.经典物理学一旦超出原先范畴,进入这些新领域,就显得捉襟见肘、漏洞百出.就在经典物理学处于巅峰的 19 世纪末,也已经发现许多无法用经典物理学理解的现象.比如, Becquerel 发现的放射性现象、黑体辐射中的紫外灾难、光电效应等等.虽然它们仅仅是当时经典物理学万里晴空中远在天边的几朵乌云,但预示着暴风雨即将来临。

话得说回来,人们经常习惯于根据已有知识和经验去思考新问题、理解新现象.尤其当现有理论已经取得辉煌成就的情况下,更是如此.也正因为这样,这时的理论也常常会转化成无形的“囚笼”,束缚或钝化人们的创造性思维.不幸的是,这种对思想的束缚或钝化作用经常是习惯性的、不自觉的,因而也就是不易挣脱的.所以,量子力学的初学者,在从经典物理学过渡到量子物理学的时候,必须善于剖析自己从宏观日常经验中积习起来的观念,善于从经典物理学这种“囚笼”中挣脱出来,依照新的实验事实所指引的方向,利用逻辑思维

前进.新的实验事实是医治人们物理思想僵化的特效药方;逻辑思维是扶助我们前进的惟一可靠工具.两者相结合,才是正确指引我们前进的灯塔,才是肯定、修正或否定新旧物理理论的惟一裁判,是肯定、修正或否定我们积习观念的惟一裁判.其中,实验检验又是最高和最后的裁判.

当今的量子理论已经发展成为庞大的理论群体.不夸张地说,量子理论是物理学家迄今为止所建立的最宏伟的物理理论.它博大精深、包罗万象,小至夸克和胶子的量子色动力学,大至宇宙的早期理论,无所不在,已经取得了前所未有的辉煌成就.

正如在经典物理学辉煌成就面前,不应当目眩神夺一样,在量子理论辉煌成就面前,也应保持清醒的头脑.目前的量子理论仍然不是人类追求的最终真理.从量子理论诞生时刻起,成功和困难就像人的躯体和影子那样,一直相伴相随:成功的躯体越长越高大、越雄伟,困难的阴影也愈来愈浓重、愈清晰. Dirac 在评论这些困难时说,人们期盼建立一个更基本的理论,而这将需要我们基本观念上的某种巨大的变革^①.

量子力学与其后继课程——高等量子力学、量子散射理论、有限自由度系统量子理论、量子统计、量子场论、固体量子场论、量子信息论等联系紧密、逻辑相承、几乎浑然一体.因此,常常遇见“打通”与后继课程的界限,简单地引入一些后继课程内容的做法.但本书取材仅限于非相对论量子力学范畴,只限于阐述这一范畴的基本原理、基本内容和重要应用.书中也常有进一步的分析讨论,那只是“就地”深入,并不涉及繁难的数学运算和进一步的理论阐述,尽量不用后继课程的内容.即便个别处采用了,也已显著减少了其数学的繁难程度.特别是,本书不涉及相对论量子力学.尽管它的数学形式优美,有些结果也很有用.我觉得,如其将这部分内容纳入量子力学,不如将它作为预备知识归入量子场论更为合适.这是由于相对论量子力学的前提假设中隐含着逻辑矛盾——微观粒子力学理论与相对论性能量的矛盾.微观粒子力学理论的前提是粒子数守恒,而相对论性能量却使粒子之间的转化成为可能——导致粒子数不再守恒.由于前提中内在的逻辑不自洽性,使得相对论量子力学变成一个不稳定的、过渡性的理论.只有继续向前,彻底贯彻量子逻辑,为了与相对论性高能量相匹配而解除粒子数定域守恒的限制,考虑粒子真正的(不算以产生、湮没算符表示状态改变的情况)产生、湮没和转化,走向量子场论,才能克服由这种前提矛盾造成的一些根本性的理论缺陷.舍去相对论量子力学有关内容之后,本书便维持了量子力学作为微观粒子的力学理论在逻辑上的自洽性.

^① P. A. M. Dirac, *Methods in Theoretical Physics*, included in “from a life of physics”, World Scientific, 1989.

自转入中国科学技术大学从教 20 多年以来,我一直从事近代量子理论方面的科研和教学工作,长期教授物理系本科生的量子力学以及理论物理专业研究生的各种后继量子理论课程,本书便是在这一科研和教学背景下,在所编写的量子力学讲义基础上,历经多次较大修改,最后定稿而成.

写这本书时,从内容选择和阐述侧重上我想尽力实现以下三点想法:一、偏重物理思想的阐述和论证、物理内涵的挖掘和剖析,以求得对量子力学原理有较好的领悟.与此同时,数学推导则力求清楚而简洁.前者比如,波粒二象性和量子力学一些基本特征之间的内在逻辑关联、对一维问题总结的四个定理、全同性原理内涵的剖析、核力的物理来源、开放系统对封闭系统的三方面发展等.后者比如,么正变换和 Dirac 符号的详细推算、磁场下原子谱线分裂的统一处理、直流交流和磁 Josephson 效应的统一叙述、Casimir 效应的简明推导、Lamb 移动的简明解释和推导、带自旋的 Born 近似等.二、尽量包容一些最新的进展.量子力学作为一门基础性的理论课程,老面貌的更新比较困难.本书根据近代文献和我个人的体会,尽可能以深入浅出的方式做这方面的工作.比如,相干态及有关问题、非惯性系量子力学、AB 效应及相关问题、中子干涉量度学介绍、量子 Zeno 效应及其存在性证明、含时振子求解、量子信息论物理基础等.三、叙述中注意做到封闭与开放相结合.在展示量子理论优美、力量和逻辑自洽性的同时,不回避问题,尽量随时指出问题的开放的一面,指出目前认识的边界所在,以便明了对该问题认识的局限性、处理方法的近似性,增进对量子理论内在困难的了解.这既有助于加深对现有内容的理解,又能活跃思想,尽量不使量子力学僵化成为新的教条,不成为束缚人们思维的新“囚笼”.比如,非相对论量子力学的局限性、无限深方阱问题的争论、Dirac 符号的局限性、Born 近似适用条件讨论、量子理论内在逻辑自洽性分析、封闭系统的局限性等.同时也指明部分有关文献,供使用者进一步参考.但限于传统教材内容以及本人能力和经验,真正做好这三点是困难的.书中在材料取舍、编排和叙述上的偏颇、不当甚至错误都会存在,在此敬请指正.

这是一本关于非相对论量子力学的参考书,也是一本教材.它既可以供有关专业的教师和研究生使用,也可以用于综合性大学物理系和相近各系本科生的教学,适合于 108 学时(周学时 6)的教学.本书在内容份量上约略超过一学期 76 学时传统教材的 30%左右.这样做基于两点考虑:其一,为教师备课和研究生辅导复习时拓宽思路之用;其二,为讲课教师提供适量多余的讲授和讨论的内容,视授课对象和教学方案作适当的选择,也为少数有余力的学生提供一点在量子力学层次上驰骋的场合.这些超过份量的章节均用“※”标记,按通常教学,略去不讲并不损及我们惯常对量子力学的传统理解.与此同时,作者已将全部内容分为三个部分,即:Ⅰ——基本内容;Ⅱ——进一步内容;

Ⅲ——开放系统问题.无“※”号的Ⅰ为 60 学时所必须的内容;无“※”号的Ⅰ加上Ⅱ是 76 学时所必须的内容,Ⅲ以及全部带“※”号的部分则是 108 学时的内容.这些教案可视情况选用.习题的份量也有所超过,可以选做其中一部分.应当指出,过去传统苏联教材的习题多偏重于基础知识的巩固、基本功的训练和数学技巧的演练.这当然是必要的,但仅有这些却是偏颇的.因此,从我校出版社出版的《美国物理试题与解答》的量子力学卷,选用了部分美国著名大学的量子力学试题.这些试题往往偏新颖、偏应用、偏物理.我认为,将两方面适当结合起来会更全面一些.部分习题是依据内容自拟的.

最后,我感谢全国高校量子力学研究会的许多同行好友:喀兴林、曾谨言、柯善哲、倪光炯、葛墨林等教授,从与他们的多次切磋琢磨中,颇多受益;裴寿镛教授还用本书初稿在北京师范大学试讲过.感谢潘建伟博士以及 Helmut Rauch 教授、Anton Zeilinger 教授,他们为我提供了不少近代量子理论方面的信息,从他们的杰出工作中,我学习到不少新知识,拓宽了思路,有助于本书内容的改进.在本书出版过程中,得到了柯善哲教授、科学出版社鄢德平编审以及周先意、刘万东、向守平等教授和杜江峰博士的热情支持.侯广、吴盛俊、周锦东以及张涵在打印稿中付出了辛勤的劳动,吴盛俊及吴强教授帮助编集了书中大部分习题,张涵在文字表达上提出不少建设性的意见,何晓辉帮助绘制书中的插图.没有这些宝贵帮助,这本书面世是不可能的.我在此向他们一并表示谢意.

张永德

2001.11.24

第三次印刷说明

这次印刷对全书作了全面的校订和修改.包括改正已发现的书写和印刷错误;改进了一些叙述,以便更加明确易懂.增加了氢原子电子云概率分布图形;按内容需要增添了少量习题,并部分调整了第七章的习题.第八章中增加了变分方法一节.最后,删去了讲述量子算法的附录 4 和 5,代以现在的附录 4.

修订过程中,刘乃乐博士提供了不少宝贵意见,吴建达同学绘制图形并对习题提出了很好的意见,科学出版社昌盛先生工作热忱并十分尊重作者的意见.我在此向他们表示诚挚的谢意.

作 者

2005 年 1 月 27 日

目 录

第一部分 基本内容

第一章 量子力学的物理基础	1
§ 1.1 实验基础	1
1. 第一组实验 —— 光的粒子性实验	1
2. 第二组实验 —— 粒子的波动性实验	4
§ 1.2 基本观念	9
1. 基本图像: de Broglie 关系与波粒二象性	9
2. de Broglie 波的初步分析	11
3. 基本特征: 概率幅描述、量子化现象、不确定性关系	12
§ 1.3 不确定性关系的讨论	15
1. 能量和时间的不确定性关系	16
2. 不确定性关系的进一步解释及某些应用	16
§ 1.4 理论体系的公设	19
1. 第一公设 —— 波函数公设	19
2. 第二公设 —— 算符公设	21
3. 第三公设 —— 测量公设(或期望值公设)	25
4. 第四公设 —— 微观体系动力学演化公设(或 Schrödinger 方程公设)	28
5. 第五公设 —— 全同性原理公设	29
* 6. 公设应用举例 —— 广义不确定性关系推导	29
习题	30
第二章 Schrödinger 方程的一般讨论	33
§ 2.1 Schrödinger 方程	33
§ 2.2 Schrödinger 方程基本性质讨论	34
1. 线性性质与态叠加原理	34
2. 概率流密度与概率的定域守恒	35
3. 稳定势场 Schrödinger 方程的一般解	36
4. 势场界面和奇点处波函数的性质	37

5. 能量平均值下限问题	38
6. 能谱分界点问题	38
7. 本征函数族完备性与能量可观测性问题	39
§ 2.3 力学量期望值的运动方程和对易子计算	39
1. 期望值的运动方程	39
2. 对易子和算符时间导数的计算	41
* 3. Hellmann-Feynman 定理和 Virial 定理	44
* § 2.4 Schrödinger 方程向经典力学的过渡	46
1. $\hbar \rightarrow 0$ 过渡方式	46
2. 期望值过渡方式及其局限性	47
习题	48
第三章 一维问题	52
§ 3.1 一维定态的一些特例	52
1. 一维方势阱问题, Landau 与 Pauli 的矛盾	52
2. 一维势垒散射问题	61
3. 一维谐振子问题	65
4. 一维线性势场问题	72
* 5. Kronig-Penney 势问题	76
* § 3.2 一维定态的一般讨论	82
1. 本征函数族完备性定理	82
2. 束缚态存在定理	83
3. 无简并定理	85
4. 零点定理	86
§ 3.3 一维 Gauss 型波包的自由演化	87
习题	88
第四章 中心场束缚态问题	92
§ 4.1 前言	92
§ 4.2 轨道角动量及其本征函数	94
§ 4.3 几个一般分析	98
1. m 量子数简并和离心势	98
2. 径向波函数 $r \rightarrow 0$ 时的边界条件	99
3. 粒子回转角动量及 Bohr 磁子	100
* 4. 径向解的完备性问题	102
§ 4.4 球方势阱问题	103
1. 束缚态 ($E < V_0$) 问题	104

2. 无限深球方势阱	105
* 3. 自由粒子球面波解	106
* 4. 非束缚态问题	107
§ 4.5 Coulomb 场 —— 氢原子问题	108
1. Schrödinger 方程及解	108
2. 讨论	111
§ 4.6 三维各向同性谐振子问题	114
1. Schrödinger 方程和解	114
2. 讨论	116
习题	118
第五章 量子力学的表象与表示	122
§ 5.1 幺正变换和反幺正变换	122
1. 幺正算符定义	122
2. 幺正算符的性质	123
3. 幺正变换	124
* 4. 反幺正变换	126
§ 5.2 量子力学的 Dirac 符号表示	127
1. Dirac 符号	127
2. Dirac 符号的一些应用	131
* 3. 关于 Dirac 符号的局限性	132
§ 5.3 表象的概念	133
1. 波函数的标记和分类	133
2. 量子力学的表象概念	134
3. 几种常用的表象	135
4. Dirac 符号下的表象变换	141
* § 5.4 Wigner 定理	143
1. Wigner 定理	143
2. 讨论	144
* § 5.5 量子力学的路径积分表示	145
1. 传播子与 Feynman 公设	145
2. 和 Schrödinger 方程的等价性	149
3. 传播子 $U(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}_0, t_0)$ 的再研究	151
4. 路径积分计算举例——自由粒子情况	152
5. 路径积分计算举例——简谐振子情况	155
* § 5.6 Fock 空间与相干态及相干态表象	159

1. 谐振子的 Fock 空间表示	159
2. 相干态	162
3. 相干态表象	166
* § 5.7 非惯性系量子力学	167
1. 等效原理	167
2. Schrödinger 方程的广义 Galileo 变换	168
3. COW 实验, 引力红移	169
习题	170
第六章 对称性分析和应用	175
§ 6.1 一般叙述	175
1. 对称性的含义	175
2. 量子力学中的对称性	175
3. 对称性与守恒律及守恒量	176
§ 6.2 时空对称性及其应用	177
1. 时间均匀性和能量守恒定律	178
2. 空间均匀性和动量守恒定律	180
3. 空间各向同性和角动量守恒	181
4. 空间反射对称性和宇称守恒	184
* 5. 时间反演对称性	187
* § 6.3 内禀对称性	188
1. 同位旋空间旋转对称性和同位旋守恒	188
2. 全同粒子置换对称性与全同性原理	189
习题	197
第七章 电子自旋角动量	200
§ 7.1 电子自旋角动量	200
1. 电子自旋的实验基础和其特点	200
2. 电子自旋态的表示法	201
3. 自旋算符与 Pauli 矩阵	202
4. 例算	204
5. $\frac{1}{2}$ 自旋态的极化矢量与投影算符	206
§ 7.2 自旋角动量与轨道角动量的耦合	208
1. \mathbf{S} 与 \mathbf{L} 的合成	208
2. 角动量的升降算符	209
3. 自旋-轨道耦合作用与碱金属原子光谱的双线结构	211

4. 耦合表象与无耦合表象基矢的相互展开	213
§ 7.3 两个 $\frac{\hbar}{2}$ 自旋角动量的耦合	217
1. 自旋单态和自旋三重态	217
2. 两套基矢——耦合基和无耦合基	218
3. 运算举例	219
4. 自旋交换算符和例算	220
习题	222
第八章 束缚定态的近似求解方法	226
§ 8.1 非简并态微扰论	226
1. 基本方程组	226
2. 一阶微扰论	227
3. 二阶微扰论	229
4. 例算: 光谱精细结构与超精细结构、van der Waals 力、Yukawa 势	230
§ 8.2 简并态微扰论	238
1. 简并态微扰论要旨	239
2. 简并态微扰论	239
3. 例算: 不对称的量子陀螺、电场的 Stark 效应、外磁场中的自旋谐振子	241
§ 8.3 变分方法	245
1. 变分极值定理	246
2. 用变分法求解氢的基态能量	247
3. 无限维 L_2 空间分立谱 H 完备性定理——Courant-Hilbert 定理	248
4. 讨论	251
习题	251

第二部分 进一步内容

第九章 电磁作用分析和重要应用	256
§ 9.1 电磁场中的 Schrödinger 方程	256
1. 最小电磁耦合原理及电磁场中的 Schrödinger 方程	256
2. 方程的某些考察	257
§ 9.2 均匀磁场中 Coulomb 场束缚电子的运动	259
1. 均匀磁场中类氢原子基本方程的考察	259
2. 基本方程的求解	261

3. 能级劈裂效应统一分析:正常 Zeeman 效应、反常 Zeeman 效应和 Paschen-Back效应	263
* § 9.3 均匀磁场下入射粒子束运动	268
1. 中子极化矢量在磁场中的进动	268
2. 中子的旋量叠加与旋量干涉, 中子干涉量度学 (interferometry)	268
3. 均匀磁场下入射自由电子的运动——Landau 能级	271
§ 9.4 Aharonov-Bohm (AB)效应	272
1. 磁 AB 效应	273
2. 向电磁 AB 效应的推广	274
3. 几点讨论	275
* § 9.5 超导现象的量子理论基础	277
1. 超导体中的流密度与 London 方程	277
2. Meissner 效应	278
3. 磁通量子化(及磁荷)	279
4. 超导 Josephson 结的 AB 效应	280
* § 9.6 电磁场真空态的能量和 Casimir 效应	283
1. 电磁场的真空态及其能量	283
2. Casimir 效应	284
* § 9.7 氢原子谱线的 Lamb 移动	286
1. Lamb 移动的物理根源	286
2. 电子位置涨落计算	287
习题	290
第十章 势散射理论	295
§ 10.1 一般描述	295
1. 散射(碰撞)实验的意义及分类	295
2. 基本描述方法 —— 微分散射截面	296
3. 入射波、散射波和散射振幅	296
§ 10.2 分波法 —— 分波与相移	298
1. 分波法的基本公式	298
2. 分波法的一些讨论	301
* 3. 光学定理	302
§ 10.3 Green 函数方法与 Born 近似	303
1. Green 函数方法与势散射基本积分方程	303
2. 一阶 Born 近似	305
* 3. Born 近似适用条件分析	306

4. 例算	307
§ 10.4 全同粒子散射	309
1. 全同性原理在散射问题上的应用	309
2. 例	310
* § 10.5 考虑自旋的散射	312
1. 散射分道的概念	312
2. 分道散射振幅计算 —— 带自旋的 Born 近似	312
3. 自旋权重平均	314
4. 例	317
习题	320

第三部分 开放系统问题

第十一章 含时问题与量子跃迁	323
§ 11.1 含时 Schrödinger 方程求解的一般讨论	323
1. 时间相关问题的一般分析	323
2. 含时系统初始衰变率的一个普遍结论	324
* 3. 衰变系统长期衰变规律的一个分析	325
* 4. 量子 Zeno 效应, 存在性的理论论证	327
* 5. 相互作用图像中的处理	329
* 6. 受迫振子计算	330
* 7. 变频振子计算	332
§ 11.2 时间相关微扰论与量子跃迁	334
1. 含时扰动及量子跃迁的概念	334
2. 量子跃迁系数基本方程组及其一阶近似	335
§ 11.3 几种常见含时微扰的一阶近似计算	337
1. 常微扰情况	337
2. 周期微扰情况	337
§ 11.4 不撤除的微扰情况	338
1. 不撤除微扰	338
2. 特例之一 —— 突然微扰	339
3. 特例之二 —— 绝热微扰	340
4. 突然微扰和绝热微扰的一个比较	341
§ 11.5 光场与物质的相互作用	342
1. 概论	342
2. 受激原子的量子跃迁	342

3. 电偶极辐射	344
* 4. 受激氢原子的光电效应	347
习题	349
* 第十二章 量子信息论的物理基础	352
§ 12.1 EPR 佯谬, Bell 不等式及空间非定域性	352
1. EPR 佯谬和量子理论的完备性	352
2. Bell 不等式	355
3. CHSH 不等式及其最大破坏	356
4. 量子理论非定域性的初步分析	358
§ 12.2 量子测量分析	360
1. 量子测量的正交投影模型——Von Neumann 模型	360
2. 广义测量与 POVM, Neumark 定理	362
3. 量子测量理论存在的问题	365
§ 12.3 两体量子系统状态描述	366
1. 两体的纯态与混态	366
2. 态的密度矩阵表示, Gleason 定理	367
3. Schmidt 分解	368
4. 纠缠态与纠缠度	370
5. 密度矩阵的演化, 超算符	375
6. 超算符的性质, Kraus 定理	377
§ 12.4 作为信息载体的量子态	378
1. 量子态的存贮 —— 量子位与量子存贮器	379
2. 量子态的非克隆定理	380
3. 量子态的操控	382
4. 量子网络的可分解定理	383
5. 量子态的超空间传送 (quantum teleportation and swapping)	386
6. 量子信息的衰减 —— 退相干	389
7. 单量子位信息衰减模式分析	390
习题	395
附录	400
一、Dirac δ 函数	400
二、时间反演算子	408
三、全同粒子体系的量子统计	416
四、从杨氏双缝到 which way 及 qubit	422
名词索引	434

第一部分 基本内容

第一章 量子力学的物理基础

§ 1.1 实验基础

从 19 世纪末到 20 世纪 30 年代做了一些著名实验. 这些实验或是奠定了量子力学的基本观念, 触发了从经典物理学向量子理论的跃变, 或是为这种跃变提供了最初的一批确认. 由于前面课程中常有介绍, 这里只简单的提一下.

1. 第一组实验 —— 光的粒子性实验

黑体辐射、光电效应、Compton 散射给出了能量离散、辐射场量子化的概念, 从实验上揭示了光的粒子性质.

19 世纪末, 黑体辐射谱已被实验物理学家很好地测定了, 但从经典物理学的观念出发却难以通盘地理解. 1894 年, Wien 从经典统计理论和黑体辐射经验规律出发, 给出了黑体辐射谱的公式. 考虑黑体空腔中单位体积的辐射场, 令其中频率在 $\nu \rightarrow \nu + d\nu$ 间的能量密度为 $dE_\nu = \epsilon(\nu)d\nu$, 该公式可以明确地写为

$$dE_\nu = \epsilon(\nu)d\nu = c_1 \nu^3 e^{-c_2 \nu \beta} d\nu \quad (1.1)$$

这里 c_1 、 c_2 是两个常系数, $\beta = 1/kT$. 这一公式在短波长(高频率)区间内与实验符合, 但在中、低频区, 特别是低频区与实验差别很大. 1900 年 Rayleigh、1905 年 Jeans 将腔中黑体辐射场看成是大量电磁波驻波振子的集合, 利用能量连续分布的经典观念和 Maxwell-Boltzmann 分布律, 导出了黑体辐射谱的另一个表达式——Rayleigh-Jeans 公式. 若记 $\epsilon(\nu) = N_\nu \bar{\epsilon}_\nu$, 这里 N_ν 是腔中辐射场单位体积内频率 ν 附近单位频率间隔内电磁驻波振子数目(自由度数

目), 简单计算可得 $N_\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}$ (推导见 § 9.7); 而 $\bar{\epsilon}_\nu$ 是频率为 ν 的驻波振子的平均能量, 由 M-B 分布律可得

$$\bar{\epsilon}_\nu = \frac{\int_0^\infty \epsilon e^{-\epsilon\beta} d\epsilon}{\int_0^\infty e^{-\epsilon\beta} d\epsilon} = \frac{1}{\beta} = kT$$

于是得到 Rayleigh-Jeans 公式为

$$dE_\nu = \epsilon(\nu) d\nu = \frac{8\pi kT\nu^2}{c^3} d\nu \quad (1.2)$$

(1.2) 式与 Wien 公式的情况正好相反, 它在低频部分与实验曲线符合得很好, 但在高频波段不但不符合, 而且出现黑体辐射能量密度随频率增大趋于无穷大的荒谬结果. 这就是著名的“紫外灾难”, 是经典物理学最早显露的困难之一.

1900 年 Planck 用一种崭新的观念来计算平均能量 $\bar{\epsilon}_\nu$ ^①. 他引入了“量子”的概念, 即, 假设黑体辐射空腔中振子的振动能量并不像经典理论所主张的那样和振幅平方成正比并呈连续变化, 而是和振子的频率 ν 成正比并且只能取离散值,

$$0, h\nu, 2h\nu, 3h\nu, \dots$$

这里的正比系数 h 就是后来所称的 Planck 常数. Planck 原来的详细推导是基于熵的观点. 下面将它按后来 Einstein 观点予以必要的简明化. 这时, 当腔中辐射场和温度为 T 的腔壁物质之间达到热平衡后, 交换的能量也将是一份份的. 由此, 按经典统计理论的 M-B 分布律, 与上述能级相对应的比例系数分别为

$$1, e^{-h\nu\beta}, e^{-2h\nu\beta}, e^{-3h\nu\beta}, \dots$$

将这些系数归一化 (除以这些系数的总和) 使它们变成权重系数, 就得到频率为 ν 的驻波振子的平均能量,

$$\bar{\epsilon}_\nu = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} nh\nu e^{-nh\nu\beta}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nh\nu\beta}} = -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln \left[\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nh\nu\beta} \right] = \frac{\partial}{\partial\beta} \ln(1 - e^{-h\nu\beta}) = \frac{h\nu}{e^{h\nu\beta} - 1}$$

^① M. Planck, Verh. Dtsch. Phys. Ges. Berlin **2**, 237 (1900); 或 M. Planck, Ann. der. Physik, **4**, 561 (1901). 原推导是基于熵的观点, 很复杂. 这里已按原来 Einstein 观点予以简明化了.

将这个平均能量 $\bar{\epsilon}$ 乘以上面的自由度数目 N_ν , 就得到下面的 Planck 公式:

$$dE_\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{d\nu}{e^{h\nu/\beta} - 1} \quad (1.3)$$

显然, (1.3) 式符合已知的全部实验数据: 在高频和低频波段分别概括了 Wien 公式和 Rayleigh-Jeans 公式, 并且体现了关于辐射谱峰值位置的 Wien 位移定律. 这表明, 在解释辐射场与腔壁物质相互作用的实验规律时, 必须假定腔内电磁场和腔壁物质之间交换的能量是断续的、一份一份的. 即必须假定, 对所有频率相应的能量都是量子化的. 伴随(1.3)式的出现, 诞生了量子时代.

自 1887 年 Hertz 起, 到 1916 年 Millikan 为止, 光电效应的实验规律被逐步地揭示出来. 其中, 无法为经典物理学所理解的实验事实有: 反向遏止电压 (和逸出电子的最大动能成正比) 和入射光强无关; 反向遏止电压和入射光的频率呈线性关系; 电子逸出相对于光的照射而言几乎无时间延迟. 这三点难于理解是因为, 按经典观念, 入射光的电磁场强迫金属表面电子作振动. 入射光强度越大, 强迫振动的振幅也越大, 逸出电子的动能也应当越大. 于是反向遏止电压和入射光强度应当是正比关系, 而且和入射光的频率无关. 此外, 自光照射时起, 电子从受迫振动中积聚能量直至逸出金属表面需要一段时间, 因为电子运动区域的横断面积很小, 接收到的光能很有限, 电子积聚到能逸出金属表面那样的动能需要一定的时间. 然而, 实验却表明, 这个弛豫时间很短, 它不大于 10^{-9} s. 为了解决这些矛盾, 1905 年, Einstein 在 Planck 能量量子概念基础上, 再大胆地前进一步, 提出光量子概念, 并指出光量子 and 电子碰撞并被电子吸收从而导致电子的逸出. 他的光电效应方程是

$$h\nu = \Phi_0 + \frac{1}{2} m v_{\max}^2 \quad (1.4)$$

这里 Φ_0 是实验中所用金属的脱出功, 比如, Cs 的为 1.9eV, Pt 的为 6.3eV. 等式右边用了逸出电子的最大速度, 那是因为有些电子在从金属表面逸出的过程 (以及在空气传播的过程) 中, 可能因遭受碰撞而损失了部分动能. 这样一来, 不仅光场的能量是量子化的, 而且光场本身就是量子化的, 仿佛是一团“光子气”. 光电效应显示, 照射在金属表面的波场是一种微粒集合. 沿着这一思路前进, 人们甚至可以引入光子的“有效”质量 m^* , 即

$$m^* = \frac{\epsilon}{c} = \frac{h\nu}{c}$$

于是, 若在重力场中, 一个光子垂直向上飞行了 H 距离, 其频率要由原来的 ν_0 减小为 ν :

$$h\nu_0 = h\nu + \frac{h\nu}{c} gH$$

从而

$$\nu < \nu_0$$

这说明垂直向上飞行的光子,其频率会产生红移^①.这一现象在1960年由 R. V. Pound 和 G. A. Rebka Jr. 在哈佛大学校园的水塔上实验观测到了. Einstein 的光电方程被 Millikan 用 10 年时间的实验所证实.

在此稍后一点的时间(1923年),发现了 Compton 效应,更进一步证实了光量子的存在.在这个效应里,散射光的能量角分布完全遵从通常微粒碰撞所遵从的能量守恒和动量守恒定律.如图 1-1 所示,设初始电子是静止的,于是有

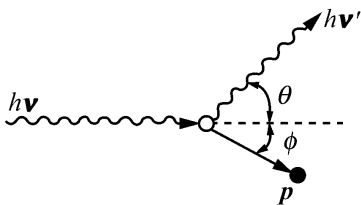


图 1-1

$$\begin{cases} m_0 c^2 + h\nu = mc^2 + h\nu' \\ \frac{h\nu}{c} = \frac{h\nu'}{c} + p \end{cases}$$

将矢量方程右边 $\frac{h\nu'}{c}$ 项移到左边,平方之后利用第一个方程以及 $p^2 c^2 = m^2 c^4 - m_0^2 c^4$,就得到

$$h\nu' = \frac{h\nu}{1 + \frac{h\nu}{m_0 c} (1 - \cos \theta)} \quad (1.5)$$

引入记号 $\lambda = \frac{h}{m_0 c}$,称为电子的 Compton 波长,等于 0.0242\AA .上式改写为

$$\lambda' - \lambda = \lambda_c (1 - \cos \theta) \quad (1.6)$$

这个公式已为实验所证实.可是这里推导中使用了光的粒子性以及散射光频率会改变(减小)等概念,这些都是经典物理学所无法理解的(比如说,经典观念就认为,电子在受迫振动下所发射的次波——散射光,其频率应和入射光的频率相同).

总之,这一组实验揭示了,作为波动场的光其实也具有粒子性质的一面.

2. 第二组实验——粒子的波动性实验

电子 Young 双缝实验、电子在晶体表面的衍射实验以及中子在晶体上的衍射实验表明,我们原先认为是粒子的这些微观客体,其实也具有波动的性

^① 这里,等式右边第二项在地球条件下比第一项小很多,所以作了一级近似计算.

质,有时也呈现出只有波才具有的干涉、衍射现象,从实验上揭示了微粒的波动性质.

1961年 Jönsson 用电子束做出了单缝、双缝衍射实验^①.由于电子的波长短,在这种实验中缝宽和缝距都要十分狭小,加之低能电子又容易被缝屏物质散射衰减,实验是很难做的. Jönsson 在铜膜上刻了五条缝宽为 $0.3\mu\text{m}$ 、缝长 $50\mu\text{m}$ 、缝距 $1\mu\text{m}$ 的狭缝,分别用单、双、三、四、五条缝做了衍射实验.实验中电子的加速电压为 50keV ,接收屏距离缝屏 35cm .下面我们对双缝实验作些初步的概念性分析^②.

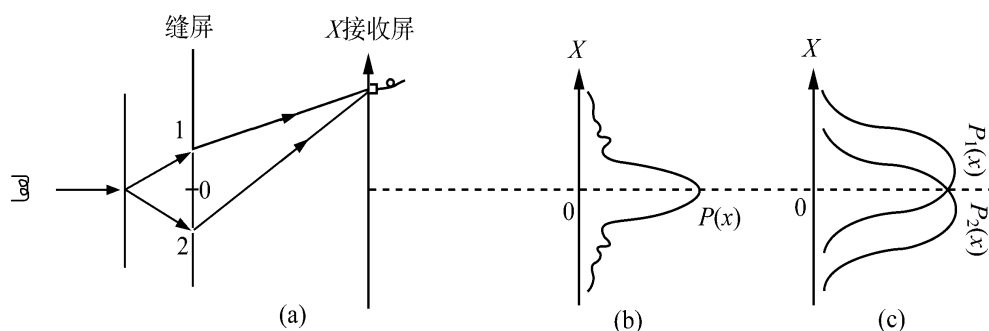


图 1-2

实验事实是,这时在接收屏 x 处探测到电子的概率 $P(x)$ 并不简单地等于两缝各自单独开启时的概率 $P_1(x)$ 、 $P_2(x)$ 之和,而是存在两缝相互影响的干涉项

$$P(x) = P_1(x) + P_2(x) + \text{干涉项}$$

这一干涉项可正可负,随 x 迅速变化,从而使 $P(x)$ 呈现明暗相间的干涉条纹.如果通过缝屏的是光波、声波,出现这种干涉项是很自然的.因为在 x 处的总波幅 $\psi(x)$ 是由孔 1、孔 2 同时传播过来的波幅 $\psi_1(x)$ 、 $\psi_2(x)$ 之和

$$\psi(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x)$$

而 $P_1(x) = |\psi_1(x)|^2$ 、 $P_2(x) = |\psi_2(x)|^2$, 并且

$$\begin{aligned} P(x) &= |\psi(x)|^2 = |\psi_1(x) + \psi_2(x)|^2 \\ &= P_1(x) + P_2(x) + 2\text{Re}(\psi_1^*(x)\psi_2(x)) \end{aligned} \quad (1.7)$$

^① C. Jönsson, Z. Physik **161**, 454(1961).

^② 电子 Young 双缝实验是最富于量子力学味道也是最奇特的实验之一.这个实验的各种翻版,直到现在仍不断出现;关于它的严格计算可见费曼,《量子力学与路径积分》;一个唯象计算可见,张永德,大学物理,第 11 卷,第 9 期,1992.

传到 x 点处两个波幅的叠加,造成了这种干涉现象.但问题现在是电子.从经典粒子的观念来理解,这个干涉项的存在令人十分困惑.每当人们在实验中探测到电子的时候,它总是有一定的能量、一定的电荷、有一个静止质量,特别是有一个局域的位置.正是这些物理特征给人们以电子是“粒子”的印象.何况,人们从未探测到电子的“一部分”.拿这些观念和实验事实去理解电子 Young 双缝实验中的干涉现象,觉得怎么都协调不起来.如果电子是以粒子的“身份”通过狭缝的话,不论通过的是哪条缝,总之是只能穿过其中的一条.这时另一条缝的存在与否对这个电子的这次穿过的行为并不产生影响.就是说,如果把电子理解为经典概念中的“粒子”,两条缝的作用就应当是相互独立、互不干扰的,干涉项并不存在,结果是两个单缝衍射强度的叠加.那有没有可能电子是以很复杂的经典方式两条缝都通过呢?比如,穿过缝 1 之后又绕回来倒穿过缝 2,接着再次穿过缝 1 出射到接收屏去,甚或多次绕双缝穿行后再出射到接收屏去的呢?但是,这样一来引起的疑问就更多了.比如,电子为什么会返回来再倒穿过另一条缝呢?到底电子要绕几圈呢?这样就能产生干涉花样吗?如何计算呢?这将必然陷入混乱和不可知论.并且,更不可说电子是以“经典粒子”的身份同时从两条缝通过(比如说,半个电子从缝 1,另半个则从缝 2 穿过去).这种图像显然和人们从未测到过部分电子这个事实相违背.因为,既然一个电子能剖开并部分地穿过一条缝,总应该能测到它的这个“部分”(比如,将探测器装在一缝上).至此,事情的复杂性还没完.因为,可以设想如下实验(判断路径(which way)实验的一种)^①:在一条缝后放置一个照明光源,若光源足够强,可以假定光子和电子的散射效率接近百分之百,于是穿过该缝出来的电子必定同时伴随有散射光子.探测有无散射光产生,原则上就可以判断该电子是从哪条缝过来的.结果很意外:每个电子都只穿过一条缝,从未观察到某个电子从两条缝同时穿过的情况,正如同从未观察到半个电子一样.总之,对这个实验的解释似乎陷入了两难的境地.

那么,电子到底是怎样穿过缝屏上这两条缝的呢?

正确答案已经包含在上面分析中了.总结上面的分析,若认为电子是经典的“粒子”,就不能同时穿过两条缝,便不会产生干涉项;若认为电子像某种经典“波”,就能同时穿过两条缝,产生干涉项.至此,可以明确地说,电子是以“自己独特”方式“同时”穿过两条缝的.这是基于实验事实分析所能得到的、无可回避的、惟一的、逻辑自洽的说法.这里所说的“自己独特”方式是因为,这种方式既根本不同于经典粒子通过方式,也不完全相同于经典波的通过方式.和经

^① R. P. Feynman, A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill Book Company, 1965.

典波的方式“不完全相同”是由于：电子可以在其传播途径上的任一点（包括在缝前、缝中、缝后、接收屏等各处）以一定的概率被探测到，而且一旦被探测到，它总是以一个完整的粒子的形象（一定质量、一定电荷、一个相当局域的空间位置）出现，特别是，从来没有实验在两个缝上同时发现同一个电子。这就是与经典波本质不同之处。正是基于这种理由，有人批评说这种“同时”的说法从实验观点来看缺乏实践意义。其实这恰好说明：以波的行为穿过双缝的电子，同时还具有粒子性的一面。这里强调指出，情况之所以如此诡异，正是由于测量严重干扰了电子原来的状态，使它发生了不可逆转的状态突变，表现出“波形象到粒子形象”的突变。就是说，正是对电子位置的测量，造就了电子的经典粒子的面貌！事实是，在位置测量之前，电子并不一定（！）以“粒子”的形象早就客观地存在着^①！所有判断路径实验都只表明：每次测量（对电子状态干扰）的结果确实表明电子以粒子的方式只从一条缝通过；但不能表明：作这类测量（对电子状态干扰）之前，电子在客观上就是以经典粒子的方式只从一条缝通过。这里人们不应当按宏观世界得到的习惯观念，将实验所得结果及图像错误地外推，用到做这些实验之前。正是这一类测量使本来是从两条缝“同时”穿过的电子状态发生突变，变为仅从一条缝穿过的状态。它们恰恰只表明，对电子位置的测量干扰并改变了电子的状态，成为造就电子是粒子这一事实的根本原因。

总之，在这个电子 Young 双缝实验中，电子穿过双缝时表现出它具有波的性质，而在位置测量中被抓住时，又表现出粒子的图像。这一切只能说明，作为微观客体的电子，它既具有经典粒子的性质，又具有经典波的性质。它显示什么样的图像依赖于人们如何观测——不同的实验将造成不同的干扰，产生不同的状态塌缩，同时也就给出不同的图像。事实上电子既不是经典的粒子，也不是经典的波。如果借用不恰当的经典语言来作经典类比，可以简单地说，电子具有波粒二象性（duality 或 dualism，这个问题后面还将进一步阐述）。这就是这个实验传出的最重要的信息。或者，更确切地说，这个实验表明，最重要的量是概率幅 $\psi(x)$ ；到达 x 点有两条可能的路径，相应于两个概率幅 $\psi_1(x)$ 、 $\psi_2(x)$ ，在 x 点找到电子的概率正是这两个概率幅之和的模平方。事实上，量子力学的所有干涉都来自（由所有路径提供的全体）相因子的等权叠加！

20 世纪 20 年代做成了几个出色的电子衍射实验。其中，1927 年 Davisson

^① 从后面测量理论知道，对状态 $\psi(x)$ 进行某个力学量的测量，实质是将 $\psi(x)$ 按该力学量的本征态进行展开，测得力学量的数值总只是本征值中的一个，它出现的概率是该展式相应项系数的模方。而该次测量完毕时， $\psi(x)$ 即突变（塌缩）为该本征态。

和 Germer 采用镍单晶做的电子衍射实验,显示了电子的波动性^①.这个实验可以示意如下:截取单晶的一个面作为表面,该表面形成 2 维平面点阵,画出其中的一维图像如图 1-3 所示.对垂直入射的一束电子,在和垂直方向夹角为 θ 的方向所测到的电子,按点阵衍射理论,一定沿多光束干涉极大的方向.比如,对第一级极大,应有(镍晶格 $d=2.15\text{\AA}$)

$$d\sin\theta = \lambda$$

比如,对 100eV 能量的入射电子,其 de Broglie 波长 $\lambda=1.23\text{\AA}$,就在由上式决定的 θ 方向探测到反射电子的峰值.这就能证明电子具有波的性质.

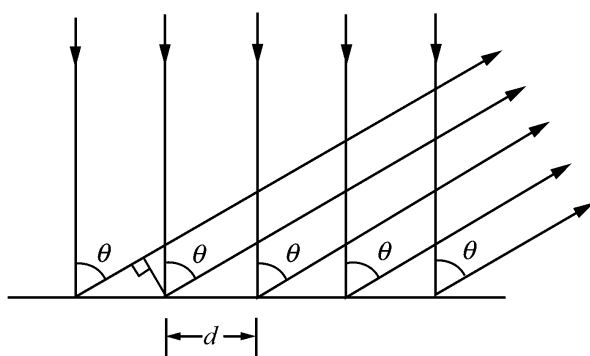


图 1-3

后来,又用 NaCl 晶体做了中子衍射实验.到 1969 年,曾用中性钾原子束做了单缝衍射实验^②,证明了量子理论的正确性.实验中所用的缝宽为 $23 \times 10^{-6} \text{ m}$.1975 年成功的实现了中子干涉实验^③,并继而建立了高精度的中子干涉量度学.20 世纪 90 年代,更出现了原子光学^④,这时的光栅已是电磁波的驻波.在此期间,又提出了多粒子的干涉现象^⑤.直至近来证实碳 -60 也有波动性的实验^⑥.

除上面两组关于波粒二象性的基础实验之外,1911 年 Rutherford 根据 α 粒子被金属箔散射的实验提出了原子的有核模型,特别是 1913 年 Bohr 建立了原子的初等量子理论,它们对量子力学的诞生起了直接的推动作用.Bohr

^① C. Davisson, L. H. Germer, The scattering of electrons by a single crystal of nickel, *Nature*, Vol.119, 558-560(1927).

^② *Am. J. Phys.*, **37**, 905(1969).

^③ H. Rauch, et. al., *Phys. Lett. A*, **54**, 425(1975).

^④ A. Zeilinger, et. al., *Nature*, **388**, 827(1997).

^⑤ D. Greenberger, et. al., *Nature*, **347**, 429(1990); *Physics Today* 46, 8(1993).

^⑥ M. Amdt, et. al., *Nature*, **401**, 680(1999).

理论要点有三,第一是定态概念,第二是定态之间的跃迁概念,第三是角动量量子化概念.后者表现为量子化条件.这里,定态概念主张原子的有核模型只对某些离散的能量 E_m ($m=1,2,\dots$) 才是稳定的,这是为了解决电子绕原子核转动时稳定存在而不辐射的问题.因为经典电动力学主张,带电粒子只要有加速度就会产生辐射而损失自己的能量,于是这种有核模型中电子的稳定转动是不可能的.至于定态之间跃迁的概念是为了解决原子光谱中的里兹组合定则

$$\omega_{mn} = (E_m - E_n)/\hbar \quad (1.8)$$

就是说,原子发光是由于原子从能量较高的定态向能量较低的定态的跃迁.最后,原子核外电子所具有的角动量量子化条件

$$J = m\hbar$$

进一步揭示了核外电子呈离散定态存在的事实,丰富了量子化的内容.而 Bohr 利用经典轨道概念将量子化条件表达为动量对坐标的回路积分的形式则是一种不成功的尝试,已被后来诞生的量子力学所否定.除此之外,Bohr 理论的定态及定态之间跃迁概念均被后来量子力学所吸纳并加以发展.

§ 1.2 基本观念

1. 基本图像: de Broglie 关系与波粒二象性

1905 年 Einstein 通过提出下列关系

$$E = h\nu = \hbar\omega, \quad \mathbf{p} = \frac{E}{c} \mathbf{e} = \frac{h}{\lambda} \mathbf{e} = \hbar\mathbf{k} \quad (1.9)$$

(这里 $\hbar = \frac{h}{2\pi}$) 引入光量子的概念.这在原先认为光是电磁波的图像上添加了粒子的图像,这已由上节第一组实验所证实.于是,若知道等式右边的波动参数 ω 和 k ,便可用这组关系求得它左边的量所相应的微粒子特性.经过 18 年之久,de Broglie 克服积习的约束,反过来理解这组关系,将上面这组关系从针对 $m=0$ 的情况推广到 $m \neq 0$ 的情况,提出原先是微粒的微观粒子也具有波动性^①,

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad \mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar} \quad (1.10)$$

^① Louis De Broglie, Waves and Quanta, Nature, Vol.112, 540 (1923).

就是说,若已知等式右边的粒子参数 E 和 \mathbf{p} ,便可由这组关系式求得该粒子所具有的波动特性.上面两组关系式的中间桥梁便是 Planck 常数 \hbar ,形象地写出便是

$$(E, \mathbf{p}) \overset{\hbar}{\leftrightarrow} (\omega, \mathbf{k})$$

公式(1.10)便是常说的 de Broglie 关系.其中关于波长的第二个公式已为上节第二组实验所证实,而关于频率的第一个公式则被原子光谱实验所证实.注意,这组 de Broglie 关系是物质世界的普遍规律.其中将两种图像联系起来的 Planck 常数 \hbar 数值很小,是波粒二象性可以显现出来的标度.假如在所研究问题中能够认为 $\hbar \rightarrow 0$,波和粒子便截然分开,波粒二象性的现象便可以忽略.比如,由宏观粒子的 (E, \mathbf{p}) ,利用(1.10)第二式便得到 $\lambda \rightarrow 0$,与此粒子相联系的波动性便可以忽略.于是可以说,经典力学是量子力学当 $\hbar \rightarrow 0$ 时的极限情况.当然,这里 $\hbar \rightarrow 0$ 是相对而言,并非真要(本来是常数的) \hbar 变小,而是要求研究对象的动量 p 足够大(从而波长 λ 足够短),以及运动涉及的空间尺度 l 足够大,使得

$$\hbar \ll pl$$

简单些说,可以按 Planck 常数 \hbar 在所研究的问题里能否忽略,决定波粒二象性是否表现出来,进而决定经典与量子的界线.于是,经典力学只不过是其研究对象的能量、动量以及运动的空间尺度如此之大,使得 \hbar 的作用可忽略的渐近情况下的力学.

综上所述,不论静止质量为零和不为零的微观物质,都普遍存在波粒二象性.这两种截然不同的属性通过 Planck 常数连结成为 de Broglie 关系,统一在所有微观物质上.对初学者而言,波粒二象性是理解微观物质普遍属性的基本图像,也是初学者理解量子力学的基本图像.

然而,这种波粒二象性的基本图像,使初学者常常感到迷惑和不习惯.产生迷惑和不习惯的原因是,他们所经历的全部宏观物理现象中 \hbar 都是可以忽略的,不存在这种二象性:波就是纯粹的波,粒子就是地道的粒子.于是,初学者常常会问:电子一会儿像波,一会儿又像粒子,那它到底是什么?为了回答这种问题,可以打个比方:某个人,今天早晨遇到某事时笑了,表现出一副笑面孔;但今天中午碰到另一件事时他哭了,表现出另一副截然不同的哭面孔.就这样他表现出了两副截然不同的面孔.人们能不能据此发问:他到底是怎样的面孔?显然不应当这样发问,因为这些都是这个人的面孔.人们只应当问:他在什么情况下会表现出笑面孔,而在什么情况下会表现出哭面孔.将这种论述“平移”到电子的波粒二象性问题上来,可以回答说:波性和粒子性都是电子所具有的属性,当它表现出两种属性的时候,人们不应当追问它“到底归属于”什

么属性,只应当追问:它在什么样实验条件下表现出类似于经典波的性质,在什么样实验条件下表现出类似于经典粒子的性质.电子既不是经典的波(波包),也不是经典的粒子(弹丸).只能说它有时像经典波,有时又像经典粒子.“像什么”这种提法的前题就是“不等同”.归根到底,电子就是电子本身!电子波粒二象性这种多少有些古怪的图像,是由于我们使用了经典类比的方法,用宏观世界经典物理学的语言描述微观世界客体运动时,所必然得到的一种并非贴切的图像.仿佛我们使用母语——中文词汇去理解英语词汇的情况.鉴于人们总是习惯用已有知识和经验去理解和描述新的东西,因此保留波粒二象性的图像还是有助于初学者的理解和形象思维.只是要注意,不要过分执着和拘泥.这里,正如 Young 双缝实验所启示的,根本性的东西是概率幅,是有关概率幅的计算的理论,而不是借助经典语言所得出的波粒二象性图像.

2. de Broglie 波的初步分析

对常用的非相对论电子、非相对论中子、光子,它们的 de Broglie 波波长和它们能量的关系式为

$$\begin{aligned}\lambda_e &= \frac{12.26}{\sqrt{E}} \\ \lambda_n &= \frac{0.286}{\sqrt{E}} \\ \lambda_\gamma &= \frac{1.241 \times 10^4}{E}\end{aligned}\quad (1.11)$$

这里 E (对 $m \neq 0$ 的粒子, E 为其动能)的单位为 eV, λ 的单位为 \AA .

对宏观物体,如上所述,其波动性可以忽略.例如,1g 小球,速度 $u = 1 \text{ m/s}$, 它的 de Broglie 波的波长为

$$\lambda = \frac{h}{m u} = 6.6 \times 10^{-31} \text{ m}$$

显然,这个长度,和小球本身尺度以及小球作宏观机械运动的空间尺度相比,完全可以忽略.从而,在研究小球作任何宏观机械运动时,与这个波长相联系的波动性质(也就是与小球运动相关的量子效应)完全可以忽略.

这里再说一下 de Broglie 波的群速度和相速度问题.对 $m = 0$ 和 $m \neq 0$ 两种情况,虽然 de Broglie 关系相同,但它们的相速度还是有差别的,

$$\begin{aligned}m \neq 0: \text{相速度 } V_{\text{相}} &= \lambda \nu = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = \frac{1}{2} u \\ m = 0: \text{相速度 } V_{\text{相}} &= \frac{\omega}{k} = c\end{aligned}\quad (1.12)$$

这里,对 $m \neq 0$ 情况,考虑到现在是非相对论的,并且对于静止粒子应当有 $V_{\text{相}} = 0$,所以 E 采用 $\frac{p^2}{2m}$ (而不是 mc^2) 代入.(1.12)式表明,对 $m=0$ 的粒子(例如光子),相速度是 c .而对 $m \neq 0$ 的粒子,相速度不等于粒子的运动速度 u .但可以证明,粒子 de Broglie 波波包的群速度等于粒子的运动速度

$$V_{\text{群}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)} = \frac{dE}{dp} = \frac{d}{dp} \frac{p^2}{2m} = u \quad (1.13)$$

依据群速度的这个结果,以前曾有人主张微观粒子本质上是 de Broglie 波的某种波包.但进一步考察表明,这会导致不能接受的结果而被否定(比如,电子的 de Broglie 波包会弥散而电子却是稳定的粒子.详见 § 3.3).

3. 基本特征:概率幅描述、量子化现象、不确定性关系

由微观粒子具有波粒二象性这一基本图像,可以派生出三个重要观念:描述方式的概率特征、物理量常常离散取值的量子化现象、不确定性关系式.它们共同构成量子力学的基本特征.

首先,由微观粒子的波粒二象性,可以导致量子力学的一个重要特征:在描述粒子运动中的概率观念,即概率幅或 de Broglie 波的概念.

再拿电子的 Young 双缝实验为例.假定电子源强度十分弱、实验时间很长,以致可以认为每次都是单个电子在行进,彼此之间相互独立.如果认定某个电子,当它穿过缝屏后到底在接收屏上哪一个位置处被观测到,是无法用实验预先确定的,也无法(至少在目前)从理论上以拉普拉斯决定论的方式准确预计.当这个电子穿过缝屏时,它的动量与穿缝之前相比究竟有多少改变,实验上也无法事先确定,并且理论上也无法以拉普拉斯决定论的方式事先计算.单个电子在穿过狭缝时的状态突变、电子在接收屏上被测到时的状态突变都是一种深邃的、事先无法预计的、不可逆转的变化.只有大量同一类型的突变所表现出的统计规律才是可以事先了解和准确预计的.实验以明确的方式表达了单次实验结果的不确定性.这种不确定性正体现了电子既是波又是粒子、既不是波又不是粒子的奇特秉性.这种情况迫使我们别无选择,只能采用相应的不确定性的描述方式,即采用概率幅、概率的观念.于是,以电子 Young 双缝实验为例(为书写简明,考虑一维情况),在接收屏上 x 处观测到电子(表现出粒子的面貌)的概率 $P(x)$ 是该处 de Broglie 波波场振幅的模方,而该处的振幅又是由(作为波源的)两条缝传播过来的波幅的叠加,所以

$$P(x) = |\psi_1(x) + \psi_2(x)|^2 = P_1(x) + P_2(x) + 2\text{Re}[\psi_1^*(x)\psi_2(x)]$$

由此可以看到,用 de Broglie 波这种具有相干叠加性的、“不确定性”突变

的、概率解释的描述方法,不仅能以统一的方式描述电子的波粒两种属性,而且和带有“不确定性”的双缝衍射实验事实相匹配.

众所周知,与一束匀速直线运动的粒子流相联系的应当是一个平面波.它们的形式是

$$e^{i(k \cdot r - \omega t)}$$

将 de Broglie 关系代入其中,便得到和这束粒子流相联系的 de Broglie 平面波

$$\psi(\mathbf{x}, t) = e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)} \quad (1.14)$$

这时,如果定义 $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ 为在 \mathbf{r} 处单位体积内找到这束匀速直线运动粒子的数目,则这种数目分布是空间均匀的.更一般地,我们来研究下面 de Broglie 波波包:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int \psi(\mathbf{p}) e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et)} d\mathbf{p} \quad (1.15a)$$

这里 \mathbf{p} 和 E 满足如下关系

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

取 $t=0$,于是 de Broglie 波波包成为

$$\psi(\mathbf{r}) = \int \psi(\mathbf{p}) e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{p} \quad (1.15b)$$

这里 $\psi(\mathbf{r})$ 是粒子在 \mathbf{r} 处的 de Broglie 波波幅,即概率幅.我们将正规点处(见下)的 $|\psi(\mathbf{r})|^2$ 理解为在 \mathbf{r} 处附近单位体积内找到粒子的概率,或说成是,粒子取坐标 \mathbf{r} 的概率.而 $|\psi(\mathbf{p})|^2$ 则理解成是粒子取动量 \mathbf{p} 的概率.

显然,用这样的方式去理解所引入的 de Broglie 波,是惟一能够统一描述微观粒子波粒二象性的方法: $\psi(\mathbf{r})$ 本身是波幅,可以叠加并产生干涉,体现微观粒子的波动性;一旦(以 $|\psi(\mathbf{r})|^2$ 概率)在 \mathbf{r} 处被观察到,却又是完整的粒子形象.但是,我们把这两种(从经典物理学看来)完全不同的秉性用如此方式统一起来描述的时候,已经付出了沉重的代价:放弃了经典物理学中惯用的拉普拉斯决定论,描述中引入了不确定性,引入了概率观念.显然,为了做到统一的、兼顾两种属性的描述,这种代价是必须付出的.总而言之,在描述方式上的这种不确定性和微观实验中表现出的不确定性是相互匹配的.

对于量子力学中的不确定性,即,实验测量中突变的不确定性和波函数概率描述中的不确定性,存在两种观点.第一种观点,这些不确定性的存在说明我们对微观世界事物了解得不完全.实验测量中的不确定性固然说明了实验方法上的局限和近似,描述方法中的不确定性更说明了理论的不完备,说明存在未知的“隐变数”,它们尚未被量子力学纳入理论框架中去.第二种观点,实

验中突变的不确定性,并非我们实验方法、实验仪器不完善造成的,而是微观客体固有的,它不能依靠改进实验方法提高实验精度来消除.正由于存在这种客观的、固有的不确定性,现有的包含与之相匹配的不确定性的理论描述是完备的,并非理论描述方式上的先天不足.就是说,与经典力学迥然不同,量子力学描述中的概率观念并不说明描述方式的不完备,而是客观现象本就如此.所谓的未知“隐变数”是不存在的,量子力学的描述方式是完备的.长期以来,两种观念争论不休.应当指出,到目前为止,实验事实虽然都支持量子力学,但却仍然未能否定隐变数的存在.但鉴于目前量子理论存在重大的困难,因此 Dirac 说:“它是到现在为止人们能够给出的最好的理论,然而不应当认为它能永远地存在下去.我认为很可能在将来某个时间,我们会得到一个改进了的量子力学,使其回到决定论,从而证明 Einstein 观点是正确的.但是这种重新返回到决定论,只有以放弃某些基本思想为代价才能办到,而这些基本思想我们现在认为是没有问题的.如果我们要重新引入决定论的观点,我们就应当以某种方式付出代价,这种方式是什么,现在还无法推测.”^①

其次,看看微观粒子的波动性质怎样导致微观粒子能量和状态的间断离散或量子化现象.

即使在经典物理学的领域,也存在一个重要的、普遍的、众所周知的事实.那就是,任何类型的波动,当它们展布或传播在无限空间中时,波参数可以取连续变化的数值;但是,一旦用某种方式将这些波局限在有限空间的时候,波场所取的波参数必将离散化,它们的频率和波长均要断续化、离散化.从 Fourier 频谱分析的观点来说,任意局域的波均是一个 Fourier 级数,而不是一个 Fourier 积分.或者说,任何波动方程其局域解的问题总都是一个本征值和本征函数的问题^②.

转到微观粒子情况.局域 de Broglie 波的波动性同样会造成频率和波长的断续性.而且还进一步,频率和波长的这种断续性又通过 de Broglie 关系转化为该粒子的能量和动量的断续性.因此可以说,任何局域化的 de Broglie 波必将伴随其能量的量子化.这正是粒子具有 de Broglie 波波动性的结果,是局域 de Broglie 波自相干涉(由边界反射)形成的.这正与经典物理学中从一维琴弦振动、二维鼓膜振动到三维微波腔中电磁波驻波等现象相对应的.

最后,看看微观粒子波动性质是怎样导致 Heisenberg 不确定性原理.

按照前面所说 $\psi(x)$ 和 $\psi(p)$ 的物理解释,可以定义一个微观粒子坐标 x 和动量 p (相对于任一选定值 x_0 、 p_0) 的测量均方根偏差

^① P. A. M. Dirac, 物理学的方向,科学出版社,1981年.

^② 就物理学中常见的一些波动方程来说,本征值是离散的或是部分离散的.