

清华物理丛书

张礼 主编

近代物理学进展

(第2版)

physics

清华大学出版社

近代物理学进展

(第2版)

主 编 张 礼

参 编	陈皓明	凌 勇	何元金	顾秉林
	赵永刚	谢毓章	熊家炯	朱嘉麟
	段文晖	龙桂鲁	李岩松	张培林
	吴念乐	赵 钧	李师群	黄 湖
	杜春光	吴国桢	阮 东	孙洪洲
	徐四大	陈泽民	王 青	庄鹏飞
	林郁正	李兴中		

清华大学出版社
北 京

内 容 简 介

本书分 29 个专题介绍近代物理学各方面的概念、方法、研究前沿和成果。内容包括近年来的重要研究方向,多数与诺贝尔奖有关,涉及凝聚态物理、原子分子物理与近代光学、核物理、粒子物理、天体物理与宇宙学等领域。论述侧重物理实质,并介绍近代物理的一些思想方法、研究方法和研究过程中的经验教训。

本书可作为高等院校理工科研究生或高年级本科生教材,也可供从事基础物理教学的教师作教学参考,对从事与物理学联系较多的各学科科技工作者也有参考价值。

版权所有,侵权必究。侵权举报电话:010-62782989 13701121933

图书在版编目(CIP)数据

近代物理学进展/张礼主编. —2 版. —北京:清华大学出版社, 2009.12
ISBN 978-7-302-19505-4

I. 近… II. 张… III. 物理学—进展—高等教育—教材 IV. O41

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2009)第 016507 号

责任编辑:朱红莲 赵从棉

责任校对:刘玉霞

责任印制:

出版发行:清华大学出版社

<http://www.tup.com.cn>

c-service@tup.tsinghua.edu.cn

社总机:010-62770175

投稿咨询:010-62772015

地址:北京清华大学学研大厦 A 座

邮编:100084

邮购热线:010-62786544

客户服务:010-62776969

印刷者:

装订者:

经销:全国新华书店

开本:185×260 印张:32.25 字数:779 千字

版次:2009 年 12 月第 2 版 印次:2009 年 12 月第 1 次印刷

印数:1~0000

定价: 元

本书如存在文字不清、漏印、缺页、倒页、脱页等印装质量问题,请与清华大学出版社出版部联系调换。
联系电话:010-62770177 转 3103 产品编号:019548-01

第 2 版 前 言

自本书第 1 版出版以来,各专题涉及的方向均有长足进展。此外,有不少方面的研究也引起物理学界的更多关注。例如基于液晶物理建立了生物膜理论,半导体低维物理的进展以及量子点和纳米管开辟的日益广阔的应用平台,量子信息学和量子计算研究的迅速发展,量子频标和光学频标对全球定位系统和宇航日益精确的服务等方面在近十年来给予人们深刻的印象。为此,我们对第 1 版的选题作了调整,有关专题都作了不同程度的增补与更新以反映当前的发展情况。此外,还增加了八个专题:半导体低维物理与应用;真实材料的量子理论;计算凝聚态物理;量子计算与量子信息;玻色-爱因斯坦凝聚;光子晶体;混沌与奇异吸引子;黑洞物理学;夸克胶子等离子体。望各方面专家和读者继续提出批评和改进意见。

作 者

2009 年 5 月

第 1 版 前 言

近代物理学的一些重大突破为基础科学、技术科学及工业生产带来了革命性的变化,并促成一系列新学科、新产业的形成与发展。在有关的基础科学和技术科学领域中的科技工作者如果能将物理学中新的成果和方法与本领域的研究结合起来,将会在工作中发挥更大的创造性。本书主要介绍近代物理学多方面的概念、方法、研究前沿和成果,内容多为近年来备受重视的研究方向,其中多数与诺贝尔物理奖有关。21 个专题涉及凝聚态物理、原子分子物理与近代光学、核物理、粒子物理、天体物理与宇宙学等领域。其中包括信息科学与微电子学的基础——半导体物理与人工微结构,光电子学与光子学的基础——激光物理与非线性光学,与新材料密切相关的超导、团簇、非晶态物理和液晶,检测表面 1~2 个原子层的扫描探针显微术,未来能源受控聚变的基础等离子物理等。此外,还包括一些基础研究性质的专题。本书开始对量子力学和量子统计作了简单介绍,这部分内容可作为理解各专题的理论基础。

本书各专题不过多涉及技术性细节,而重点揭示所研究问题的物理实质。为了解释研究进展中概念的形成、思路的发展,必须使用近代物理的语言,它因具有一定理论深度而区别于一些科普书籍。本书也不同于一般教材,它在理论上不作系统推导,不包括对实验装置、实验方法和数据处理的详细描述,而是在有限篇幅内对各专题勾画出一个较清晰的概貌。为了使读者了解在研究中选择正确道路和创新方法的重要性,在必要时介绍了研究过程的历史片断以及研究工作中的经验教训。希望通过专题的论述体现出重大发现中激动人心的创造性,以及重大突破对此后物理学及其他学科的巨大影响,从而认识到新概念、新规律的深刻智慧及力量。

为便于阅读,本书各专题是相对独立的,因而在叙述主线上的内容与其他章的内容会略有重叠。

本书可作为高等院校理工科研究生或高年级本科生教材,也可供从事基础物理教学的教师作教学参考。对那些所从事的研究与物理学联系较多的各学科科技工作者也有参考价值。

近代物理学在迅速发展,本书也需要跟踪变化,不断补充与完善。恳切希望各方面专家与读者提出批评和改进意见。

作 者

1997 年 1 月于清华园

目 录

1 量子力学基础概述	张 礼
1.1 物质的二象性,德布罗意假说及不确定关系	1
1.2 量子力学态和力学量,本征函数与本征值问题	3
1.3 态随时间的演化,定态	8
1.4 一维问题举例:势阱,势垒, α 衰变,量子相干	8
1.5 角动量本征态,氢原子	13
1.6 跃迁理论	15
1.7 周期势,能带	17
1.8 宏观水平的量子力学,约瑟夫森效应	19
1.9 量子力学理论架构的发展	21
参考文献	23
2 量子统计分布简介	张 礼
2.1 统计假设及玻耳兹曼因子	24
2.2 量子统计分布函数	27
2.3 低温下的固体比热	29
2.4 玻色-爱因斯坦凝聚及液氦 II 相	30
2.5 自由电子气	33
2.6 简并电子气的热容量	34
参考文献	35
3 扫描探针显微镜	陈皓明 凌 勇
3.1 引言	36
3.2 扫描隧道显微镜	39
3.3 扫描探针显微镜	46
3.4 单原子测量和控制	55
3.5 小结	57
参考文献	57
4 正电子湮没和穆斯堡尔谱学	何元金
4.1 正电子与正电子湮没谱学	59
4.2 正电子湮没技术的基本原理与实验方法	61
4.3 正电子湮没技术对固体缺陷的研究	63
4.4 正电子束与微孔固体的研究	65

4.5	慢正电子束·····	67
4.6	穆斯堡尔效应 ^[13] ·····	69
4.7	穆斯堡尔谱研究及应用·····	71
	参考文献 ·····	73
5	半导体微结构·····	何元金
5.1	晶体管的发现·····	74
5.2	半导体能带理论·····	75
5.3	半导体微结构:量子阱与超晶格 ·····	76
5.4	量子隧穿·····	79
5.5	半导体微结构光子存储·····	83
5.6	超晶格量子点高优值热电材料·····	84
	参考文献 ·····	85
6	团簇和纳米管·····	顾秉林
6.1	引言·····	87
6.2	团簇物理·····	88
6.3	富勒烯(C ₆₀) ·····	92
6.4	碳纳米管研究的进展·····	97
	参考文献·····	105
7	超导·····	顾秉林 赵永刚
7.1	引言 ·····	108
7.2	零电阻特征 ·····	109
7.3	磁性质:完全抗磁性和临界磁场 ·····	111
7.4	其他物理性质 ·····	112
7.5	伦敦方程 ·····	113
7.6	BCS 理论及其预见 ·····	114
7.7	金兹堡-朗道理论和磁通量子化 ·····	117
7.8	约瑟夫森效应 ·····	118
7.9	高 T _c 氧化物超导体 ·····	120
	参考文献·····	127
8	液晶物理学和生物膜泡弹性理论·····	谢毓章
8.1	引言 ·····	128
8.2	液晶相类别 ·····	129
8.3	指向矢和形变 ·····	130
8.4	单轴液晶连续体理论 ·····	131
8.5	层状 A 相和 C 相,铁电液晶 ·····	134

8.6	聚合物液晶	136
8.7	溶致液晶	137
8.8	生物膜泡弹性理论	137
8.9	形状方程式的一些已知特解	139
8.10	非轴对称膜泡	140
8.11	倾斜手性类脂双层	141
	参考文献	141
9	半导体低维物理与应用	熊家炯 朱嘉麟
9.1	半导体低维物理的开端——超晶格概念的提出与实现	142
9.2	超晶格、量子阱的主要物理特性及应用	144
9.3	零维系统——半导体量子点的物理特性及应用	150
9.4	低维系统中的新成员——纳米环	163
9.5	低维物理发展趋势与应用前景展望	166
	参考文献	168
10	真实材料的量子理论：计算凝聚态物理	段文晖
10.1	引言	170
10.2	密度泛函理论	171
10.3	第一原理计算方法	176
10.4	应用	178
	参考文献	181
11	量子霍尔效应	张 礼
11.1	经典霍尔效应	184
11.2	电子在均匀磁场中的运动,朗道能级	184
11.3	整数量子霍尔效应	185
11.4	分数量子霍尔效应	189
11.5	整数与分数量子霍尔效应的统一理解	191
11.6	量子霍尔效应的整体相图	194
11.7	磁通量子化	196
	参考文献	197
12	量子计算与量子信息	龙桂鲁 李岩松
12.1	计算与物理	198
12.2	量子力学的基本假定	198
12.3	量子信息学	200
12.4	量子计算机的基本结构	201
12.5	典型量子算法	205

12.6	量子计算机的实现方案	214
12.7	量子通信简介	217
12.8	展望	218
	参考文献	219
13	激光与非线性光学	张培林 吴念乐
13.1	激光器的发明与发展	221
13.2	激光的应用	224
13.3	激光光谱学	226
13.4	非线性光学	228
13.5	超快激光的获得及应用	230
	参考文献	236
14	原子钟(量子频标)	赵 钧
14.1	微波频标——现今原子钟的主要形式	237
14.2	微波频标的新发展	242
14.3	光学频标的进展	245
14.4	提高原子钟精度的意义	249
	参考文献	250
15	激光冷却与捕陷中性原子	李师群
15.1	激光冷却和捕陷原子研究的意义	251
15.2	激光冷却和捕陷中性原子研究的历史发展	252
15.3	激光冷却原子的物理机制	254
15.4	激光冷却原子的实验实现	258
15.5	原子阱	261
15.6	激光冷却和捕陷中性原子技术的应用	263
15.7	总结	274
	参考文献	274
16	玻色-爱因斯坦凝聚	张 礼
16.1	序参量,相位相干性	277
16.2	格罗斯-皮塔耶夫斯基方程,凝聚体的基态和集体激发态	281
16.3	费什巴赫共振及其应用	285
16.4	玻色-爱因斯坦凝聚实验研究和天体物理	287
16.5	双阱中的凝聚体,约瑟夫森效应	289
16.6	光学点阵中的冷玻色原子	292
16.7	亚稳态原子的 BEC	296
	参考文献	297

17 光子晶体导论	黄 湖 杜春光 李师群
17.1 引言	298
17.2 从电子到光子	298
17.3 光子晶体的基本性质: 一个简单例子	300
17.4 高维光子晶体的性质	301
17.5 光子晶体研究中的解析方法	302
17.6 光子晶体材料的制作技术	303
17.7 三维光子晶体制作的研究进展	303
17.8 光子晶体的应用	306
17.9 光子晶体波导器件	310
17.10 共轴光子晶体光纤	310
17.11 控制自发辐射	310
17.12 光子晶体中量子点的自发辐射	312
17.13 用于量子阱激光器的光子晶体腔	313
17.14 电磁场的反常传输效应及其应用	313
17.15 光子晶体材料中的量子光学效应	314
17.16 光子晶体中量子辐射的进一步探索	315
17.17 光子晶体中原子的量子相干效应	315
参考文献	316
18 混沌与奇异吸引子	吴国祯
18.1 何谓 Sierpinski 游戏	318
18.2 Sierpinski 点	319
18.3 Sierpinski 集合	319
18.4 Sierpinski 吸引子	320
18.5 分形与自相似	320
18.6 本征系数的分形	321
18.7 本征系数的自相似性	323
18.8 本征系数分形特征的意义	323
参考文献	324
19 量子力学系统的对称性	阮 东 孙洪洲
19.1 引言	325
19.2 对称性的定义	327
19.3 时空间对称性与守恒律	328
19.4 对称性与能级简并	330
19.5 动力学对称性	331
19.6 超对称性	337
附录	340

参考文献	341
20 基本粒子的发现与径迹探测器	徐四大
20.1 引言	342
20.2 第一代基本粒子	342
20.3 Λ 超子的发现与 Ω 超子的寻找	346
20.4 多丝正比室和新粒子的发现	354
20.5 硅微条探测器与顶夸克的发现	360
参考文献	364
21 电子深度非弹性散射及强子结构	张 礼
21.1 强子的结构观点	365
21.2 高能电子弹性散射	369
21.3 深度非弹性电子散射	370
21.4 夸克-部分子模型	373
21.5 核子自旋之谜及其他	374
参考文献	376
22 星体演化及脉冲双星引力研究	张 礼
22.1 星体演化概述	377
22.2 脉冲双星的发现	381
22.3 脉冲双星提供的引力研究	382
22.4 引力波探测——探索宇宙的新窗口	384
22.5 一个新的脉冲双星系统	385
参考文献	385
23 黑洞物理学	张 礼
23.1 历史发展简介	386
23.2 自由粒子在视界外的运动	390
23.3 旋转的黑洞	392
23.4 寻找黑洞	394
23.5 黑洞物理学的其他主要问题简介	399
参考文献	401
24 微波背景辐射、大爆炸和暴涨宇宙学	张 礼
24.1 哈勃定律及膨胀的宇宙	402
24.2 微波背景辐射	407
24.3 标准大爆炸模型	410
24.4 暴涨宇宙学	416

24.5	“宇宙背景辐射探索者”卫星的测量及其意义	420
24.6	宇宙背景辐射探测卫星及望远镜的测量及其意义	423
	参考文献	427
25	弱相互作用宇称不守恒	陈泽民
25.1	对称性和守恒定律	428
25.2	空间反演不变性和宇称守恒	428
25.3	弱作用宇称不守恒问题	431
25.4	CP 联合变换和 CPT 定理	434
25.5	弱作用和生物手性	435
	参考文献	436
26	电弱相互作用的统一	张礼王青
26.1	物理学中的统一	437
26.2	电磁学理论与局域规范不变性	437
26.3	杨振宁-米尔斯规范场	438
26.4	弱相互作用	439
26.5	对称性自发破缺	440
26.6	弱作用与电磁作用的统一	440
26.7	电弱统一理论的推论及实验验证	445
26.8	标准模型与新物理	446
26.9	进一步的统一: 大统一、超弦与 M 理论	448
	参考文献	450
27	夸克胶子等离子体	庄鹏飞
27.1	引言	451
27.2	夸克胶子等离子体的热力学性质	452
27.3	QCD 相变	453
27.4	相对论重离子碰撞	455
27.5	时空演化与集体现象	458
27.6	夸克胶子等离子体的信号	460
27.7	讨论	463
	参考文献	464
28	自由电子激光	林郁正
28.1	引言	465
28.2	自由电子激光的工作原理	467
28.3	自由电子激光的关键技术	471
28.4	自由电子激光发展趋势	476

28.5	自由电子激光的应用.....	480
28.6	结束语.....	482
	参考文献.....	483
29	等离子体物理与受控核聚变	李兴中
29.1	引言.....	485
29.2	劳逊判据和“得失相当”.....	486
29.3	磁约束途径.....	489
29.4	惯性约束途径.....	494
29.5	聚变物理——凝聚态中的核科学.....	496
29.6	国际热核实验反应堆.....	498
	参考文献.....	500

1 量子力学基础概述

1.1 物质的二象性,德布罗意假说及不确定关系

20 世纪 20 年代初,原子物理学的进展遇到了很大困难。尽管玻尔(N. Bohr)的氢原子光谱理论取得了辉煌成就,但同样的处理办法对于两个电子的原子系统——氦原子却无能为力,在理论上不能解释观测到的氦原子光谱。对原子与光的相互作用问题,如光的散射、吸收与色散也有类似的困难。在反复的探索中,有的物理学家开始放弃将原子当作几个电子围绕原子核按固定轨道运行的概念,而把原子当作一些谐振子的集合,这些振子的频率相当于原子光谱谱线的频率。用这样的体系去处理色散问题取得了成功。能否尝试一些新的概念与方法?能否创造新的原子力学体系以期能够从理论上给出实验上观测到的原子能级呢?

此外,光的二象性已经不容置疑。1916 年密立根(R. A. Millikan)从实验上确认了爱因斯坦光电效应公式中的 h 正是普朗克常数。1922 年康普顿效应的发现进一步证实了光的粒子性。将波和粒子这两种很不相同的性质结合在一种客体上会引起概念上的困难。

1924 年德布罗意(L. de Broglie)提出粒子具有波动性的假说。他的想法是企图建立适用于原子体系的新的力学。立论是:几何光学是波动光学的近似。几何光学的规律可以归结为费马的最小光程原理。经典力学的基本规律可以归结为最小作用原理。两者在数学形式上完全类似。经典力学是否也是一种“波动力学”的近似,而这种波动力学可否成为描述原子体系的工具?德布罗意认为粒子的波动性可以从光的粒子性与波动性的关系得到启发。光的动量 p (粒子性质)和波长 λ (波动的性质)可通过普朗克常数联系起来,即

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad (1.1)$$

光的波数 k 与波长的关系是

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (1.2)$$

因此,式(1.1)可写作

$$p = \hbar k \quad (1.3)$$

此处, $\hbar = h/2\pi$ 。德布罗意假定一个具有动量 p 的粒子伴随着波数为 k 的波, p 与 k 的关系也由式(1.3)给出。用于粒子的关系式(1.3)称为德布罗意关系。这个假定的提出在当时并没有实验依据,但这个假设还是能导出一些有意义的结果。将式(1.3)用于氢原子中定态轨道上的电子,并依据玻尔理论给出的动量用式(1.1)算出波长,就发现轨道周长正好是波长的整数倍。这样波就会首尾同相,保证了稳定的传播。

一些物理学家认真对待了德布罗意假设,进行了实验研究,在 1927 年就得到电子波动性质的肯定结果。戴维孙(C. J. Davidsson)和革末(L. H. Germer)以及汤姆孙(G. P. Thomson)分别进行了电子束在晶体上的衍射实验,证实了德布罗意关系。显示电子束波动性质的实验现在已经非常广泛。一些当年证实光的波动性质的经典实验都已能够用电子

重复,这些实验包括菲涅耳圆屏衍射,圆形障阴影中心的泊松亮点以及双缝、多缝衍射^[3~5]等。应该指出,用电子束代替光束来进行呈现波动性的经典实验曾被归为“想象中的实验(thought experiment)”范畴,这是在教科书中为了说明量子力学概念而设计的,在实际中是不可能实现的。实现的困难在于要显示出波动性,电子束能量必须相当单一,否则波长范围过大无法保证相干条件。为了保证足够的能量单一性,电子枪中射出的电子能量一般达100 eV,相当于波长 λ 为 $1\sim 2\text{\AA}$ ^①。产生干涉或衍射的体系必须有相比的大小,这是最初实验采用晶体的原因。使这些“想象中的实验”变成现实是实验技术巨大进展的见证。电子波动性最重要的实验应用之一是鲁斯卡(E. Ruska)发明的电子显微镜,它已成为许多实验室的常规设备。

粒子的波动性在质子、中子、氢原子和轻的分子束上都得到了证实。布洛克豪斯(B. N. Brockhouse)和舒尔(C. G. Shull)开创的中子衍射方法成为凝聚态物理和其他学科的有力实验研究工具,中子的菲涅耳衍射^[6]、单缝和双缝衍射实验都已经实现^[7]。在文献^[7]中描述的实验完全可以和“从第一原理出发的理论计算”相比较,并精确地实现了理论的结果。

粒子的波动性给传统的理论概念带来的冲击是巨大的。电子通过双缝的衍射本是用作“想象中的实验”^[1]以说明量子力学的概念的,现在已经实现^[8],图1.1是实验装置示意图。如果只开一个缝分别让电子从缝1和缝2通过,则在探测屏上积累的分布是 $P=P_1+P_2$ 。此处 $P_1=|\phi_1|^2$, $P_2=|\phi_2|^2$,而 ϕ_1 和 ϕ_2 分别代表电子从缝1和缝2通过的波。但如果同时开放两个缝使 ϕ_1 和 ϕ_2 得以发生干涉,则分布是 $P=|\phi_1+\phi_2|^2$ 。在真实实验中用静电双棱镜起双缝的作用,电子落在屏上,用位置灵敏探测器记录,可以显示个别电子在屏上积累的过程。实验用20 min在5个明亮条纹上共记录了70 000个电子。起初,电子落在屏幕上完全是随机的。随着落在屏上电子数目的增多,逐渐显示出条纹,到最后条纹完全清晰。在同一时刻双缝至屏幕之间的电子数目不会超过一个,而电子的波包长度为 $1\text{ }\mu\text{m}$,因此没有两个波包重叠的可能性。这些事实说明电子是一个一个落在屏上的,然而在通过双缝时是有干涉现象的:双缝同开和分别单开一缝结果又不一样。将电子理解为经典的粒子或经典的波都不能说明实验。干涉是通过两个缝的波之间进行的。难道一个电子能通过两个缝吗?费因曼(R. P. Feynman)在其物理学教程中建议,可以用光照狭缝,看电子从哪一个缝中通过。这样,光在电子上的散射改变了电子的状态,也就破坏了干涉条件,屏幕上呈现的就是非相干叠加 $|\phi_1|^2+|\phi_2|^2$,而没有干涉条纹了。这个“想象中”的建议也已被实现^[9]。由于在自由电子上光的散射截面太小,实验采用了原子束干涉。纳米制造工艺制成的光栅是

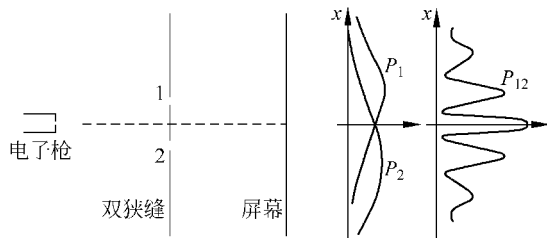


图1.1 电子双缝衍射“想象中的实验”装置

① $1\text{\AA}=10^{-10}\text{ m}$ 。

原子干涉仪的核心。用调谐好频率的激光光源照射原子产生激发,探测原子退激发出的光子可以提供原子路径的信息。实验明确地证明,装置是否提供原子路径的确定信息是干涉条件是否破坏的前提。费因曼在书中指出:“我们选择一个现象来考察,它是不可能、绝对不可能用经典的途径来解释的。它包括了量子力学的核心概念。实际上它包含了量子力学的唯一奥秘。”玻尔在总结物质的二象性时提出了自己的并协原理:在量子物理中波和粒子两种性质统一在一个客体之中。一个方面(但同时就排除另一方面)在特定环境中起作用,而两个方面共同组成客体的完全认识。

和二象性密切相关,也属量子力学基础概念的是不确定关系。如何用波来描述电子,以显示其在空间的位置呢?可以用各种波长的波叠成波包。如果要叠成空间范围小(位置比较确定)的波包,就需用波长范围大的波(动量更不确定)来叠加。如果采用波长范围小(动量比较确定)的波,就只能叠出空间范围大(位置更不确定)的波包。叠加在数学上是用傅里叶分解进行的,它给出

$$\Delta x \Delta k \sim 1$$

此处, Δx 代表波包的宽度, Δk 代表波数的范围。用德布罗意关系 $p = \hbar k$, 上式可变为

$$\Delta x \Delta p \sim \hbar \quad (1.4)$$

这就是海森伯(W. Heisenberg)不确定关系。它告诉我们,运用轨道概念要受到这个关系的制约。初次接触量子力学,不易接受这个关系,觉得它把很简单、很直观的东西搞得不确定了。贝特(H. A. Bethe)对学生讲过:“许多人相信不确定原理把一切搞得不确定了。实际上正好相反,如果没有量子力学和这个原理,在物质的性质和行为上就不可能有任何确定性,所以它实际上是确定性原则。”

此外,在量子力学中还有另一个不确定关系,那就是能量和时间的不确定性关系:

$$\Delta E \Delta t \sim \hbar \quad (1.5)$$

在实际应用上,它和式(1.4)是很类似的。例如,绝对单色的振动必须是从来就振动、直到永远的。在时间上限制振动,即要求它有始有终,它就只能是一定频率段的叠加。应该指出,式(1.4)在量子力学框架内是可以推导的。在三维空间中,式(1.4)中的 p 应理解为 p_x , 这里 x 和 p_x 是一对哈密顿共轭力学量。但式(1.5)不是如此,因为时间 t 在量子力学中是参量而不是力学量。

德布罗意波描述的是自由粒子(能量、动量都是确定的)的状态。但在实际中更重要的是有势能的情况,这就要求求出描述有势能的一般情况下的动力学方程并求解。海森伯和薛定谔(E. Schrödinger)从不同的出发点用不同的方法进行研究,得到完全相同的结果。海森伯用矩阵代表力学量,薛定谔用微分方程本征函数和本征值方法。这在物理学中是一个很突出的事例:一方面说明问题解决的时机已经成熟了;另一方面也说明一个问题的解决往往有不同途径,而它们都是等价的。

以下按照薛定谔的体系简述量子力学基础。

1.2 量子力学态和力学量,本征函数与本征值问题

为什么氢原子中的束缚电子只能位于一系列分立的能量状态上? 如何确定这些状态? 经典物理学中也有不少分立状态的例子,例如,弦与膜的振动,弹性体或空气柱的振动,谐振

腔中的电磁振动等。现以谐振腔中的电磁振动为例。谐振腔形状尺寸一经确定,其中可能存在的电磁振动属于一系列分立模式,频率各不相同。要得出这些模式,必须求解满足腔边界条件的电磁波动方程,这类问题称为本征函数与本征值问题。不同的模式称为本征模式,模式的频率称为本征值,它通过几个整数表示;相应的场强度 $\mathbf{B}, \mathbf{E}$ 作为坐标函数,称为本征函数。微分方程可以形式地写作

$$\hat{S}\left(x, \frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x) = S\psi(x) \quad (1.6)$$

$\hat{S}$ 是一个包括变量 x 和对 x 求微商操作的算符。要求解 ψ 满足边界条件,就导致右方的数 S 只能取一系列特定值,可以分立,可以连续。以 S_n 记这些值,这就是本征值;相应的解 ψ_n 就是本征函数。薛定谔受到德布罗意工作的启发,致力于寻找决定原子体系力学的方程,希望通过方程的本征解得出本征能量。这种方程属于第一原理,是不能从其他原理推导出来的,只能靠物理学的直觉和提出合适的物理要求去探索。如果“猜”得正确,它应给出与实际相符合的结果。

从自由粒子的德布罗意波开始,描述它的函数可以写作

$$\Psi = Ae^{i(kx - \omega t)} \quad (1.7)$$

此处, k 和 ω 分别代表波数和角频率, A 是常数振幅。先考虑波的空间部分,有

$$\psi = Ae^{ikx} = Ae^{i\frac{p}{\hbar}x} \quad (1.8)$$

粒子的动能是

$$T = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \quad (1.9)$$

它可以看作是用算符

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad (1.10)$$

作用于 ψ 而得来,即有

$$\hat{T}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi \quad (1.11)$$

这样波函数 ψ 就是方程

$$\hat{T}\psi = E\psi \quad (1.12)$$

的解,本征值 $\hbar^2 k^2 / 2m$ 是连续的。这里没有附加的边界条件,解是在全空间成立的。如果有势能,在三维空间总能量就可以写作

$$\hat{H} = \hat{T} + V = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x, y, z) \quad (1.13)$$

此处算符 $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$, 于是动力学方程可以猜作

$$\hat{H}\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x, y, z)\right)\psi = E\psi \quad (1.14)$$

这就是薛定谔能量本征方程。用来解氢原子问题时,只要将 V 写作

$$V = -\frac{Ze^2}{r} \quad (1.15)$$

代入方程即可。式中, V 是电子在电荷为 $Z|e|$ 的原子核场中的库仑势能。这里边界条件