



普通高等教育“十五”国家级规划教材

量子力学教程

曾谨言 著

 科学出版社
www.sciencep.com

内 容 简 介

本书可作为高等院校物理及有关专业本科生的量子力学课程(64学时)教材.讲课内容如下(括号内为估计的授课学时):1.波函数与Schrödinger方程(7);2.一维势场中的粒子(6);3.力学量用算符表达(6);4.力学量随时间的演化与对称性(5);5.中心力场(6);6.电磁场中粒子的运动(3);7.量子力学的矩阵形式与表象变换(4);8.自旋(6);9.力学量本征值问题的代数解法(4);10.微扰论(5);11.量子跃迁(6);12.其他近似方法(6).为便于读者更深入掌握有关内容,部分章节中安排了一些例题、练习题和思考题(用小号字排出).每章末附有适量的习题,供读者选做.

图书在版编目(CIP)数据

量子力学教程/曾谨言著. —北京:科学出版社,2003.2

(普通高等教育“十五”国家级规划教材)

ISBN 7-03-010982-1

I.量… II.曾… III.量子力学-高等学校-教材 IV.O413.1

中国版本图书馆CIP数据核字(2002)第096281号

责任编辑:张邦固/责任校对:柏连海

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>

源海印刷有限责任公司印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2003年2月第 一 版 开本: B5 (720×1000)

2003年2月第一次印刷 印张: 18

印数: 1—5 000 字数: 322 000

定价:25.00元

(如有印装质量问题,我社负责调换〈环伟〉)

序 言

12年前,作者所著《量子力学导论》出版以来,已为国内很多高等院校采用为基本教材(72学时).3年前,作者应聘任清华大学兼职教授,为基础科学班讲授量子力学课(4×16学时).根据这些年教学实践的经验,为了更好地贯彻启发式教学和更符合读者的认识规律,并为适应当前教改的实际需要(适当缩短课堂授课时间),作者在基础科学班的教学中对授课内容的选择和安排,做了较大变动.此外,鉴于过去十几年中,量子力学的实验和理论研究的前沿领域出现了令人瞩目的进展,*Nature*, *Science*, *Phys. Rev. Lett.* 等国际重要学术刊物上发表了一系列重要报告.为及时把一些最重要的成果反映到教材中来,作者在基础科学班的教学中,对量子力学教学内容做了一些修订.一方面把原来教材中确属比较次要的内容删去,同时对于一些确属基础性的重要新内容(例如,纠缠态, C_{60} 波粒二象性实验,等)做简要介绍.最后形成了这个《量子力学教程》(64学时).最近又被列选为“十五”国家级规划教材,由科学出版社出版.

为贯彻培养创新人才的方针,在北京大学和清华大学多年的教学中,作者总是鼓励同学们要自己去钻研问题,并勇于提出自己的看法.为贯彻因材施教,还对考试方式做了一些尝试性改革,对于在学习过程中,能提出确有创见的同学给予免试.可喜的是,有的同学在本科阶段就做出了一些有价值的工作,发表在国内外学术刊物上.作者深信韩愈在《师说》中所言:“弟子不必不如师,师不必贤于弟子.”在过去的3年中,很多同学对教材内容提出了许多很有见地的意见.特别要感谢胡盛穗、郑维喆、王雪同学对教材修改,提出了一个系统的《建议》。阮曼奇、张家良、魏薇、俞佳、李梅、陈裕、周琦、郑琛、续光宇、彭颖、李倩等同学也对教材内容的修订,提了很多很宝贵的意见.作者在此表示深切感谢.作者还真诚欢迎采用本书作为基本教材的老师和同学们,对教材内容的进一步修订提出建议,以共同提高我国的量子力学教学水平.

应该提到,本书是作为量子力学入门的基础教材,有了这个扎实的基础,同学们可以较顺利地进入其它现代物理领域和相关交叉学科课程的学习.但对于有志在量子理论方面深造,或打算攻读硕士和博士学位的同学,还需选读不同程度或不同侧重的量子力学著作.

勤劳智慧的中华民族在历史上曾经对人类文明做出过光辉的贡献。作者深信,在未来几代人的努力下,我们伟大的祖国在 21 世纪必将对人类的科学文化做出伟大贡献。

曾谨言

2002 年 11 月
于北京大学物理学院
清华大学物理系

量子物理学百年回顾*

相对论和量子力学的提出,是20世纪物理学的两个划时代的里程碑. Einstein 提出的狭义相对论,改变了 Newton 力学中的绝对时空观,指明了 Newton 力学的适用范围,即只适用于速度 v 远小于光速的物质的运动($v/c \ll 1$, $c = 2.998 \times 10^8$ m/s, 是真空中光速). 量子力学则涉及物质运动形式和规律的根本变革. 20 世纪前的经典物理学(经典力学, 电动力学, 热力学与统计物理学, 等), 只适用于描述一般宏观条件下物质的运动, 而对于微观世界(原子和亚原子世界)和一定条件下的某些宏观现象(例如, 极低温下的超导、超流、Bose-Einstein 凝聚等), 则只有在量子力学的基础上才能说明. 量子物理学一百年的历史证明, 它是历史上最成功、并为实验精确检验了的一个理论^{①-③}. 量子物理学对说明极为广泛的许多自然现象, 取得了前所未有的成功^②. 物质属性及其微观结构这个古老而根本的问题, 只有在量子力学的基础上, 才能在原则上得以阐明. 例如, 物体为什么有导体、半导体和绝缘体之分? 又如, 元素周期律的本质是什么? 原子与原子是怎样结合成分子的(化学键的本质)? 所有涉及物质属性和微观结构的诸多近代学科, 无不以量子力学作为其理论基础. 量子物理学还引发了极为广泛的新技术上的应用. 据估计, 基于量子力学发展起来的高科技产业(例如, 激光器、半导体芯片和计算机、电视、电子通讯、电子显微镜、核磁共振成像、核能发电等等), 其产值在发达国家国民生产总值中目前已超过 30%^①. 可以说, 没有量子力学和相对论的建立, 就没有人类的现代物质文明.

历史的经验值得注意. 在量子物理学提出一百年后, 对它走过的历程做一个简要回顾, 不仅可以加深我们对量子物理学的理解, 并对物理学的进一步发展, 可得到有益的启示.

在 19 世纪末, 物理学家中普遍存在一种乐观情绪, 认为对复杂纷纭的物理现

* 《量子物理学百年回顾》适合于读者自学阅读. 初次阅读时, 只要求了解其梗概. 在学习本课程中或在学完本课程之后再重温此文, 也许有助于更深入理解量子力学. 读者还可参阅

① M. Tegmark & J. A. Wheeler, *Scientific American*, **284**(2001), 68~75, *100 Years of Quantum Mysteries*.

② A. Zeilinger, *Nature*, **408**(2000), 639~641, *The Quantum Centennial*.

③ D. Kleppner & R. Jackiw, *Science*, **289**(2000), 893~898, *One Hundred Years of Quantum Physics*.

象的本质的认识已经完成. 他们陶醉于 17 世纪建立起来的力学体系, 19 世纪建立起来的电动力学以及热力学和统计物理学. J. C. Maxwell 于 1871 年在剑桥大学就职演说中提到: “在几年中, 所有重要的物理常数将被近似估计出来……给科学界人士留下的只是提高这些常数的观测值的精度.”^① 据统计, 在 1890~1900 年期间, 充陈物理学期刊的是: 原子光谱(各种元素的光谱线波长数据)以及物质各种属性的测量结果, 如黏性(viscosity), 弹性(elasticity), 电导率(electric conductivity), 热导率(thermal conductivity), 膨胀系数(coefficient of expansion), 折射系数(refraction coefficient)和热弹系数(thermoelastic coefficient)等. 值得注意, 这些描述本质上是经验性的.

然而自然科学总是在不断地发展. 在充满喜悦的气氛中, 一些敏锐的物理学家已逐渐认识到经典物理学中潜伏着的危机. 20 世纪伊始, W. Thomson (Kelvin 勋爵)就指出^④: 经典物理学的上空悬浮着两团乌云. 第一团乌云涉及电动力学中的“以太”(aether). 当时人们认为电磁场依托于一种固态介质, 即“以太”, 电磁场描述的是“以太”的应力. 但是, 为什么天体能无摩擦地穿行于“以太”之中? 为什么人们无法通过实验测出“以太”本身的运动速度^⑤? 第二团乌云则涉及物体的比热, 即观测到的物体比热总是低于经典物理学中能量均分定理给出的值. 例如, 固体比热(固体被看成由许多原子组成, 诸原子在各自的平衡位置附近作小振动), 按经典物理学中的能量均分定理, 应为 $3R$ ($R = 8.314510 \pm 8.4 \times 10^{-6} \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ 是气体常数), 而实验观测值总是低于此值 ($3R$ 只是高温极限值, 即 Dulong-Petit 值). 又例如双原子分子(具有三个平动自由度, 两个转动自由度, 还有一个振动自由度, 包含动能项和势能项), 按能量均分定理, 比热应为 $\frac{7}{2}R$. 但在常温下, 其观测值为 $\frac{5}{2}R$, 而当温度 $T \rightarrow 0\text{K}$ 时, 则趋于零. 看来这些问题都涉及在温度不是很高的情况下体系的部分自由度被冻结的问题. 这个谜团只有在后来建立起来的量子物理学中才能阐明. 这些现象在本质上是涉及物质体系的能量量子化.

任何重大科学理论的提出, 都有其历史必然性. 在时机成熟时(实验技术水平, 实验资料的积累, 理论的准备等), 就会应运而生. 但科学发展的进程往往是错综复杂的. 通向真理的道路往往是曲折的. 究竟通过怎样的道路, 以及在什么问题首先被突破和被谁突破, 则往往具有一定的偶然性和机遇.

*

*

*

^④ W. Thomson, *Phil. Mag.* 2(1901), 1, *19th Century Clouds over the Dynamical Theory of Heat and Light*.

^⑤ 对于第一个问题的回答是: 电磁场本身就是物质存在的一种形式. 作为实物的(material)“以太”是不存在的. 对后一问题的阐明, 则由 A. Einstein 的狭义相对论(1905)给出.

量子理论的突破,首先出现在黑体辐射能量密度随频率的分布规律上.1900年,M. Planck(1858~1947)有机会看到黑体辐射能量密度在红外波段(低频区)的精密测量结果,了解到 Wein 半经验公式在低频区与观测有明显偏离,他提出了一个两参数公式(后来被称为 Planck 公式)

$$E(\nu)d\nu = \frac{c_1\nu^3 d\nu}{e^{c_2\nu/T} - 1}, \quad (1)$$

式中 $E(\nu)d\nu$ 表示在频率范围 $(\nu, \nu + d\nu)$ 和单位体积中的黑体辐射能量, c_1 与 c_2 是两个参数. Planck 公式在全波段都与观测极为符合(图 1). 在高频区, Planck 公式就化为 Wien 公式

$$E(\nu)d\nu = c_1\nu^3 e^{-c_2\nu/T} d\nu, \quad (2)$$

两者都与观测结果很吻合. 但在低频区($e^{c_2\nu/T} - 1 \approx c_2\nu/T$), Planck 公式化为

$$E(\nu)d\nu = \frac{c_1}{c_2} T\nu^2 d\nu, \quad (3)$$

它比 Wien 公式有较大改进. 应当提到, J. W. Rayleigh(1900)以及 J. H. Jeans(1905)根据经典电动力学和统计物理理论曾经得出一个黑体辐射公式

$$E(\nu)d\nu = \frac{8\pi kT}{c^3} \nu^2 d\nu. \quad (4)$$

A. Einstein 首先注意到 Planck 公式的低频极限式(3)与 Rayleigh-Jeans 公式(4)相同($c_1/c_2 = 8\pi k/c^3$, k 为 Boltzmann 常数). 但 Rayleigh-Jeans 公式在高频极限是发散的,与实验尖锐矛盾,历史上称为紫外灾难(ultra-violet catastrophe). 如果黑体辐射能量密度真的像 Rayleigh-Jeans 分布那样,人的眼睛盯着看炉子内的热物质时,紫外线就会使眼睛变瞎^①.

Planck 提出的如此简单一个公式,能在全波段与观测结果如此惊人地符合,很难说是偶然的. 实验物理学家们相信这里必定蕴藏着一个非常重要,但尚未被人们揭示出来的科学原理. 经过近两个月的探索, Planck 发现^②, 如作如下假定,则可以从理论上导出他的黑体辐射公式(1). 这假定是:对于一定频率 ν 的辐射,物体只能以 $h\nu$ 为单位吸收或发射它, h 是一个普适常数(后来人们称之为 Planck 常数). 换言之,物体吸收或发射电磁辐射,只能以“量子”(quantum)的方式进行,每个“量子”的能量为 $\epsilon = h\nu$, 称为“作用量子”(quantum of action). 从经典力学来看,能量不连续的概念是绝对不允许的. 所以尽管从这个量子假设可以导出与实验观测极为符合的 Planck 公式,在相当长一段时间中 Planck 的工作并未引起人们的重视.

① M. Planck, *Ann. der Physik*, 4(1901), 553. 黑体辐射公式为 $E(\nu) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}$, 与式(1)比较,参数 $c_1 = 8\pi h/c^3$, $c_2 = h/k$, k 为 Boltzmann 常数.

首先注意到量子假设有可能解决经典物理学所碰到的其他困难的是年轻的 A. Einstein(1879~1955). 他(1905)试图用量子假设去说明光电效应中碰到的疑难,提出了光量子(light quantum)概念^⑦. 他认为辐射场就是由光量子组成. 每一个光量子的能量 E 与辐射的频率 ν 的关系是

$$E = h\nu. \quad (5)$$

他还根据他同年提出的狭义相对论中给出的光的动量和能量的关系 $p = E/c$, 提出光量子的动量 p 与辐射的波长 $\lambda (= c/\nu)$ 有下列关系

$$p = h/\lambda. \quad (6)$$

采用光量子概念之后,光电效应中出现的疑难随即迎刃而解. 由于对光电效应的研究和数学物理理论的卓越贡献, Einstein 获得 1921 年 Nobel 物理学奖. 在此之前, Planck 由于对基本作用量子的突出贡献, 获 1918 年 Nobel 奖. Einstein 以及 P. J. W. Debye(1907)还进一步把能量不连续的概念应用于固体中原子的振动, 成功地解决了当温度 $T \rightarrow 0\text{K}$ 时, 固体比热趋于零的现象. 到此, Planck 提出的能量不连续的概念才逐渐引起物理学家的注意.

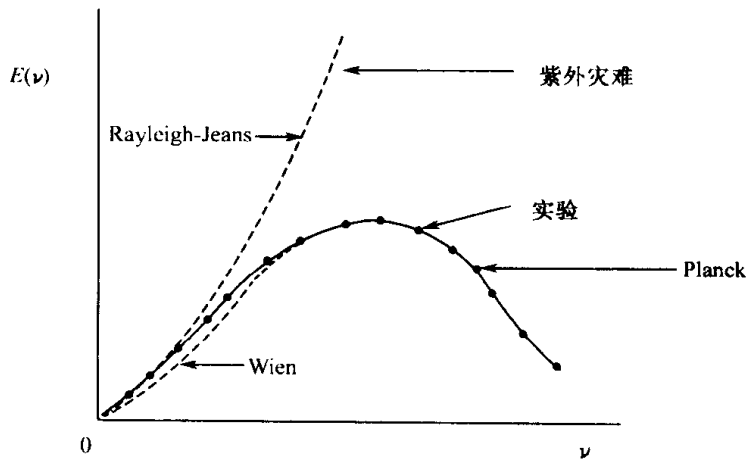


图 1 黑体辐射能量密度 $E(\nu)$ 随频率 ν 的变化

* * *

量子理论第一个突破来自辐射(radiation, 包括光)的实验和经典理论的矛盾. 它的第二个突破则来自物质(matter, 即实物粒子)及其与辐射的相互作用的实验与经典理论的矛盾^③.

J. J. Thomson(1896)发现电子后,曾经提出过如下原子模型:正电荷均匀分布于原子中(原子半径 $\sim 10^{-10}\text{m}$),而电子则以某种规则排列镶嵌其中. 1911 年 E.

⑦ A. Einstein, *Ann. der Physik*, **17**(1905), 132

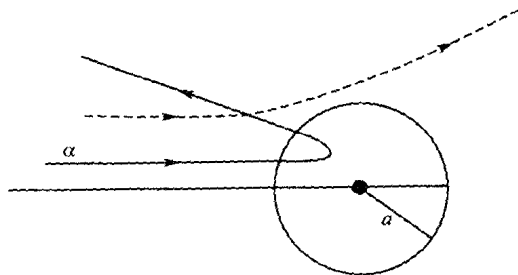


图2 Rutherford的 α 粒子对原子的散射

Rutherford 根据 α 粒子对原子散射实验中出现的大角度偏转现象(见图 2, Thomson 模型对此完全无法解释),提出了原子的“有核模型”:原子的正电荷以及几乎全部的质量都集中在原子中心很小的区域中(半径 $< 10^{-14}\text{m}$),形成原子核,而电子则围绕原子核旋转(类似行星绕太阳旋转).此模型可以很好地解释 α 粒子的大角度偏转,但却遇到了如下两大难题:

(1) 原子的稳定性问题.电子围绕原子核旋转的运动是加速运动.按照经典电动力学,电子将不断辐射能量而减速,轨道半径会不断缩小,最后将掉到原子核上去,原子随之塌缩(其寿命估算为 $\tau \sim 10^{-12}\text{s}$)^①,并相应发射出一个很宽的连续辐射谱,这与观测到的原子的线状光谱矛盾.此外,Rutherford 模型原子对于外界粒子的碰撞也是很不稳定的.但现实世界表明,原子稳定地存在于自然界.矛盾尖锐地摆在人们面前,如何解决呢?

(2) 原子的大小问题.19 世纪统计物理学的估算,原子的大小约为 10^{-10}m .在 Thomson 模型中,根据电子的空间排列构形的稳定性,可以找到一个合理的特征长度.而在经典物理的框架中来考虑 Rutherford 模型,却找不到一个合理的特征长度.根据电子质量 m_e 和电荷 e ,在经典电动力学中可以找到一个特征长度,即 $r_c = e^2/m_e c^2$ (经典电子半径) $\approx 2.8 \times 10^{-15}\text{m} \ll 10^{-10}\text{m}$,完全不适合用以表征原子大小.何况原子中电子的速度 $v \ll c$,光速 c 不应出现在原子的特征长度中.

此时,丹麦年轻物理学家 N. Bohr(1885~1962)有机会(1912)来到 Rutherford 的实验室,深深为这些矛盾所吸引.他深刻地认识到,在原子世界中必须背离经典电动力学,应该采用新的观念.他一开始就深信作用量子(quantum of action) h 是解决原子结构问题的关键.首先,把 h 引进 Rutherford 模型中,按照量纲分析,即可找到一个合理的特征长度

$$a = h/2\pi m_e v = \hbar/m_e v \approx 0.53 \times 10^{-10}\text{m} \quad (7)$$

(后来人们称之为 Bohr 半径).在解决原子的稳定性问题时,Bohr 有机会(1913 年初)了解到原子线状光谱的规律(氢原子光谱的 Balmer 线系,光谱的组合规则等),

发现了原子光谱与原子结构之间的本质联系,终于提出了他的原子的量子论^⑧. 这理论包括了下列两个极为重要的概念(假定),它们是对大量实验事实的深刻概括:

(1)原子能够,而且只能够稳定地存在于与离散的能量(E_1, E_2, \dots)相应的一系列的状态中. 这些状态称为定态(stationary state). 因此,原子能量的任何变化,包括吸收或发射电磁辐射,都只能在两个定态之间以跃迁(transition)的方式进行.

(2)原子在两个定态(分别属于能级 E_n 和 E_m , 设 $E_n > E_m$)跃迁时,发射或吸收的电磁辐射的频率 ν_{mn} 由下式给出

$$\nu_{mn} = (E_n - E_m)/h \quad (\text{频率条件}). \quad (8)$$

简言之,Bohr 量子论的核心思想有两条:一是原子的具有离散能量的定态概念,一是两个定态之间的量子跃迁概念和频率条件.

如果说原子能量量子化概念还可以从 Planck-Einstein 的光量子论中找到某种启示,定态和量子跃迁概念及频率条件则是 Bohr 很了不起的创见,是他对原子稳定性和原子线状光谱规律作了深入分析后概括出来的. 按照经典电动力学,具有特征频率 ν_c 的荷电体系,所发射出的电磁辐射的频率应为 $n\nu_c$ ($n = 1, 2, 3, \dots$),即总是特征频率的整数倍. Bohr 的重要贡献在于把原子线状光谱与原子在两个定态之间的量子跃迁联系起来,即把原子辐射的频率与两个定态的能量之差联系起来. 这就抓住了原子光谱的组合规则的本质. 组合规则(波数 $\tilde{\nu} = 1/\lambda = \nu/c$)

$$\tilde{\nu}_{mn} = T_m - T_n \quad (9)$$

正是频率条件(8)的反映. 把光谱项 T_n 与原子的分立的定态能量 E_n 联系起来, $T_n = -E_n/hc$, 其物理意义就十分清楚了.

当然,仅仅根据 Bohr 的两条基本假定,还不能把原子的分立能级定量地确定下来. Bohr 处理这个问题的指导思想是对应原理(correspondence principle),即大量子数极限下,量子体系的行为应该趋于与经典体系相同. 他根据对应原理的思想,求出了氢原子的能级公式,并导出了角动量量子化条件.

Bohr 的量子论首先打开了人们认识原子结构的大门,取得了很大成功,但它的局限性和存在的问题也逐渐为人们认识到. 首先,Bohr 理论虽然成功地说明了氢原子光谱的规律性,对于更复杂的原子(例如氦原子)的光谱,就完全无能为力. 光谱学中,除了谱线的波长(波数)之外,还有一个重要的观测量,即谱线的(相对)强度,Bohr 理论未能提供处理它的系统方法. 其次,Bohr 理论还只能处理周期运动,而不能处理非束缚态(例如散射)问题. 从理论体系来讲,能量量子化概念与经典力学是不相容的,多少带有人为的性质,其物理本质还不清楚. 这一切都推动早期量子论的进一步发展. 量子力学就是在克服早期量子论的困难和局限性中建立起来的.

^⑧ N. Bohr, *Phil. Mag.* **26**(1913), 1, 471, 857, *On the Theory of Atomic Constitution*.

*

*

*

在 Planck-Einstein 的光量子论(光具有波动粒子两重性, $E = h\nu$, $p = h/\lambda$)和 Bohr 的原子论的启发之下,法国物理学家 L. de Broglie(1892~1987)仔细分析了光的微粒说与波动说的发展历史,并注意到几何光学与经典粒子力学的相似性,根据类比的方法,他设想实物(静质量 $m \neq 0$ 的)粒子也具有波动性,即和光一样,也具有波动粒子两重性.这两方面必有类似的关系相联系,而 Planck 常数必定出现在其中^⑨.他假定,与一定能量 E 和动量 p 的实物粒子相联系的波(他称为“物质波”, matter wave)的频率和波长分别为

$$\nu = E/h, \quad \lambda = h/p. \quad (10)$$

他提出这个假定的动机,一方面是企图把作为物质存在的两种形式(光和 $m \neq 0$ 的实物粒子)统一起来,另一方面是为了更深入地理解微观粒子能量的不连续性,以克服 Bohr 理论带有人为性质的缺陷. de Broglie 把原子定态(stationary state)与驻波(stationary wave)联系起来,即把束缚运动实物粒子的能量量子化与有限空间中驻波的波长(或频率)的分立性联系起来.例如,长度为 L 的两端固定的弦振动的驻波波长为 $\lambda = 2L/n$, $n = 1, 2, 3, \dots$. 虽然从尔后建立起来的量子力学来看,这种联系还有不确切之处,能处理的问题也很有限,但它的物理图像是很有启发性的.例如,氢原子中作稳定的圆周运动的电子所相应的驻波的形状如图 3 所示.绕原子核传播一周之后,驻波应光滑地衔接起来,这就要求圆周长是波长的整数倍,

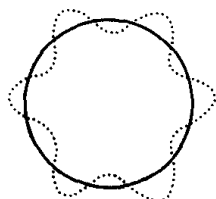


图 3

$$2\pi r = n\lambda, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (11)$$

r 是圆轨道半径.用 $\lambda = 2\pi r/n$ 代入 de Broglie 关系式(10),可求出粒子动量 $p = nh/2\pi r = n\hbar/r$,因而角动量

$$J = rp = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (12)$$

这正是 Bohr 的角动量量子化条件.这样,根据驻波条件就很自然地得出了角动量量子化条件,从而可以说明了粒子能量的离散性.

物质波假设提出之后,人们自然会问:实物粒子既然是波,那么,为什么人们在过去长期的实践中把它们看成经典粒子,并没有犯什么错误?为说明这一点,追溯一下人类对于光的本性的认识的历史是有启发的.在 17 世纪,Newton 的光的微粒说占统治地位.到 19 世纪,由于光的干涉和衍射实验成功,光的波动性才为人们确认.但只当光学仪器的特征长度与光波长可相比拟的情况下,干涉和衍射现象才会显示出来.例如,对比一下光的针孔成像和圆孔衍射实验的关系是有趣的.针孔成

^⑨ L. de Broglie, *Comptes Rendus*, 177(1923), 507; *Nature*, 112(1923), 540.

像可用光的直线传播来说明,即用几何光学来处理是恰当的.这是由于“针孔”的半径(例如 0.1mm)比可见波长(400~700nm)仍然大得多的缘故.如把针孔半径 a 不断缩小,当 a 接近于光波长 λ 时,针孔成像将不复存在,而代之以圆孔衍射图像.此时用几何光学来描述就很不恰当,而必须代之以波动光学.对于 de Broglie 的物质波,情况也类似.由于 h 是一个很小的量,从宏观的尺度来看,物质粒子的波长一般是非常短的,其波动性并未显示出来^⑩.但到了原子世界中,物质粒子的波动性就会表现出来.此时如仍用经典粒子力学去处理就不恰当,而必须代之以一种新的波动力学.

实物粒子的波动性的直接实验证实是 1927 年才实现的. Davisson 和 Germer^⑪ 用一束具有一定能量和动量的电子射向金属镍单晶表面,观测到了电子衍射的现象,并证实了 de Broglie 关系 $\lambda = h/p$ 是正确的.后来,无数的事实都表明,不仅是电子,而且质子,中子,原子,分子等都具有波动性.波动性是实物粒子普遍具有的.特别是最近(1999),观测到 C_{60} 分子束的衍射^⑫, C_{60} 是迄今已观测到波粒二象性的质量最重和结构最复杂的实物粒子.

* * *

奥地利年轻物理学家 Schrödinger(1887~1961)注意到了 de Broglie 的工作,他在苏黎士做了一个报告,介绍了物质波的思想. P. Debye 对他提出:“You speak about waves, but where is the wave equation?”^⑬不久(1926年初),Schrödinger 就提出了一个波动方程^⑭(后来人们称之为 Schrödinger 方程),它是含波动函数对空间坐标的二阶微商的偏微分方程. Schrödinger 把原子的离散能级与微分方程在一定的边条件下的本征值问题联系在一起,成功地说明了氢原子、谐振子等的能级和光谱规律.与此几乎同时,但稍早几个月,Heisenberg(1901~1976)与 Born 和 Jordon 建立了矩阵力学^⑮. 矩阵力学的提出,与 Bohr 的量子论有很密切的关系,特别是

^⑩ 宏观世界中,处于热平衡下的实物粒子,总是具有一定的热运动能量.对于非相对论情况,粒子能量 $E = p^2/2m$. 如用 $E \approx kT$ 来估算粒子的热运动能量,则 $p \approx 1/\sqrt{2mkT}$;因而 $\lambda \approx h/\sqrt{2mkT} \propto 1/\sqrt{mT}$,与温度 T 和粒子质量 m 有关.由此可以理解,为什么只有在极低温下,才有可能观测到宏观量子态,例如,金属超导态,超流态和 BEC(Bose-Einstein 凝聚体).可参阅 *Nature*, **416**(2002), 3月14日出版的一期上关于 BEC 的一系列综述文献.

^⑪ C. J. Davisson & L. H. Germer, *Nature*, **119**(1927), 558.

^⑫ M. Arndt et al., *Nature*, **401**(1999), 680.

^⑬ E. Schrödinger, *Ann. der Physik*, **79**(1926), 36, 489; **80**(1926), 437; **81**(1926), 109.

^⑭ W. Heisenberg, *Zeit. Physik*, **33**(1925), 879.

M. Born, P. Jordon, *Zeit. Physik*, **34**(1925), 858.

M. Born, W. Heisenberg, P. Jordon, *Zeit. Physik*, **35**(1926), 557.

Bohr 的对应原理思想对 Heisenberg 有重要影响. Heisenberg 特别强调,任何物理理论中,只应出现可以观测的物理量(例如光谱线的波长(波数),光谱项,量子数,谱线强度等).它一方面继承了 Bohr 量子论中合理的内核,例如原子的离散能级和定态、量子跃迁和频率条件等概念,但同时又摒弃了一些没有实验根据的传统概念,例如粒子轨道运动的概念.在矩阵力学中,赋予每一个物理量(例如粒子的坐标、动量、能量等)以一个矩阵,它们的代数运算规则与经典物理量不同,两个量的乘积一般不满足交换律.量子体系的有经典对应的各力学量(矩阵或算符)之间的关系(矩阵方程或算符方程),形式上与经典力学相似,但运算规则不同.矩阵力学成功地解决了谐振子、转子、氢原子等的分立能级、光谱线频率和强度等问题,引起物理学界普遍重视.但当时的物理学家对于矩阵代数很陌生,接受矩阵力学是不大容易的.庆幸的是, Schrödinger 的波动力学也几乎同时提了出来,它的核心是波动方程,这是所有物理学家都熟悉的数学工具.对这一点,物理学家(特别是老一辈物理学家)特别感到欣慰.不久 Schrödinger 就发现了矩阵力学和波动力学之间的联系,它们只是用了不同的数学语言来表述,而在实际上是完全等价的^⑮.紧接着 Dirac 和 Jordan 提出一种称为变换理论的更普遍的形式^⑯,他们指出矩阵力学和波动力学只不过是量子力学规律的无限多种表达形式中的两种.后来,人们统称之为量子力学.

量子力学提出后,它不仅成功地阐明了原子结构问题,而且打通了理解尺度较大的分子和固体、液体和气体物理,以及更小尺度的原子核物理的道路.例如, Heitler 和 London 对氢分子结合机制的研究,开辟了理解原子之间作用力(化学键)的道路,物理和化学两个领域的分界线实际上已经消失. Bloch 的能带论的提出,阐明了固体有金属、半导体和绝缘体之分. Heisenberg 对金属电子相互作用的研究,说明了某些元素的强磁性. Gamow 用粒子的势垒隧穿(tunnelling)概念,说明了 α 衰变的机制,这一点对后来核能的利用有重要意义.在这短短几年中的一系列发现,标志着物理学历史上一个空前成就的时期,被公认为是物理学的一个英雄时代.参加过这一阶段工作的 Condon 这样描述当时令人眼花缭乱的情景,“事情以这样快的步伐发生,以致所有物理学家,不论年长的或年轻的,都患了极度的精神上的消化不良症”^⑰.

众所周知, Schrödinger 波动方程是关于实物粒子波动的非相对论性理论.

^⑮ E. Schrödinger, *Ann. der Physik*, **79**(1926), 734.

^⑯ P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc. (London)*, **A112**(1926), 661.

P. Jordan, *Zeit. Physik*, **37**(1926), 383; **38**(1926), 513.

P. A. M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*, 4th. ed., (1958).

^⑰ P. Robertson, *The Early Years, The Niels Bohr Institute, 1921~1930*. Akademisk Forlag, 1979. 中译本,《玻尔研究所的早年岁月》,杨福家,卓益忠,曾谨言译,科学出版社,(1985).

Dirac(1902~1984)在1927年关于电磁场量子化的工作^⑧对此作了补充.这样,涉及非相对论性的实物粒子与电磁场作用的所有问题,原则上都可以解决.量子理论往纵深发展的很重要一步,是Dirac于1928年提出的相对论性波动方程(Dirac方程)^⑨.这个方程的主要成果之一,是对氢原子光谱的精细结构和电子的自旋的本质给予了满意的描述.另一个重大成果是预言反物质的存在,并为后来实验所证实.在Dirac上述两项工作的基础上,在20世纪30年代诞生了量子场论,构成了量子力学发展的另一个大领域.关于量子场论及以后粒子物理的发展的概括情况,可在文献[3]中找到,将不在本文中讲述.关于非相对性量子力学理论的后期进展中,还应提到R. P. Feynman(1918~1988)在20世纪40年代的路径积分(path integral)理论^⑩的工作.量子力学与经典力学的密切关系,在路径积分中展现得格外清楚.如果说Heisenberg的矩阵力学是经典正则力学的量子对应,Schrödinger的波动力学则与经典力学中的Jacobi-Hamilton方程有密切的关系.概括起来,它们都与经典力学的Hamilton形式有渊源关系.与此不同,Feynman的路径积分理论则与经典力学的Lagrange形式有密切关系,其突出的优点是易于推广到相对论情况,所以在量子场论中有广泛的应用.

*

*

*

尽管量子力学在提出后的短短几年中,取得如此辉煌的成就,令人欢欣鼓舞;但是关于量子力学的诠释及适用范围,却出现了激烈的争论^⑪.特别是Schrödinger方程中的“波函数”的物理含义是什么?M. Born通过对散射实验中粒子的角分布的分析,提出了“波函数的概率诠释”^⑫.它得到了无数实验的支持.Bohr相信,“量子理论诠释的关键在于,必须把彼此矛盾的波动与粒子这两种描述协调起来”.他认为,“波粒二象性(wave-particle duality)是辐射(radiation)和实物粒子(material particle)都具有的内禀的和不可避免的性质”.“波动与粒子描述是两个理想的经典概念,各自有其适用范围.在特定的物理现象的实验探索中,辐射与实物都可展现其波动性或粒子性.但这两种理想的描绘中的任何单独一方,都不能对所研究的现象给出完整的说明”.为了表达这种彼此不相容,而为了完整描述又都是必要的逻辑关系,Bohr提出了“互补性原理”(complementarity principle).Heisenberg则沿着另一种思路来考虑,他把问题简单反过来问:量子理论本身决定什么东西能被实验观测到?经过计算,他得出如下惊人的结论:“正如人们能从数学表达看出那

⑧ P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc. (London)*, A114(1927), 243, 710.

⑨ P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc. (London)*, A117(1928), 610.

⑩ R. P. Feynman, *Rev. Mod. Phys.*, 20(1948), 367.

⑪ M. Born, *Zeit. Physik*, 38(1926), 803.

样,……人们无法同时知道一个粒子的坐标和动量。”即测量坐标或动量的任何实验,必然导致对其共轭变量的信息的不确定性.两个变量的不确定度之乘积不能小于由 Planck 常数给出的一个量.特别是对于一个实物粒子的正则坐标 q 和正则动量 p ,它们的不确定度满足

$$\Delta q \Delta p \geq \hbar/2. \quad (13)$$

这个关系给出了在微观世界中应用经典粒子的坐标和动量概念时应受到的限制,后来人们称之为 Heisenberg 不确定度关系(uncertainty relation),它展示了量子力学和经典力学规律的本质上的差异.

Einstein 对波函数的概率诠释持反对意见,他倾向于决定论性的(deterministic)描述.他有一句广泛被人们引用的名言

“*I can't believe that God plays dice.*”

Schrödinger 也极其反对“概率波”观点.他倾向于认为:波函数本身代表一个实在的物理上的可观测量,一个粒子可以想像为一个物质波包.在 1927 年 Solvey 会议之后,以 Bohr 和 Heisenberg 为代表的观点^{②③}(Copenhagen 诠释)成为量子力学的正统诠释.Copenhagen 诠释的关键是波函数的统计诠释,它的两个理论支柱就是 Bohr 的互补性原理和 Heisenberg 的不确定度关系.以 Einstein 和 Schrödinger 为代表的另一方,针对 Copenhagen 诠释提出了很尖锐的批评.这集中反映在两篇著名的文献中,后来被称为 Schrödinger 猫佯谬^④和 EPR(Einstein-Podolsky-Rosen)佯谬^⑤.Schrödinger 猫佯谬一文中,首次提出“纠缠态”(entangled state)一词(指多粒子体系或多自由度体系的一种不能表示为直积形式的叠加态),并用一个假想试验来说明,把叠加波函数的概率诠释应用于宏观世界,会得出何等荒谬的结论.他对量子力学规律是否适用于宏观世界,提出质疑.EPR 一文则针对波函数的概率诠释,以叠加态来说明“波函数对物理实在的描述是不完备的”,并坚持定域实在论(local realism)的观点,用纠缠态来说明“量子力学对物理实在的描述是不自治的”.后来,Bohm 用两个自旋为 1/2 的粒子的自旋纠缠态,把 EPR 佯谬更为简明地表述出来^⑥.

在 20 世纪 60 年代中期,这场争论有一个很大转折.Bell 基于定域实在论和存在隐变量(hidden variable)的观点,分析了自旋单态下的两个自旋为 1/2 的粒子,对于这两个粒子的自旋沿不同方向的投影的关联,他得出了一个著名的不等式

② W. Heisenberg, *Zeit. Physik*, **43**(1927), 172.

③ N. Bohr, *Nature*, **121**(1928), 580; *Phys. Rev.* **48**(1935), 696.

④ E. Schrödinger, *Naturwissenschaften*, **23**(1935), 807.

⑤ A. Einstein, B. Podolsky & N. Rosen, *Phys. Rev.*, **47**(1935), 777.

⑥ D. Bohm, *Quantum Theory*, Constable, London, (1954).

(Bell 不等式)^⑦. 根据这个不等式, 可以在实验上检验究竟是正统量子力学正确, 还是定域实在论正确. A. Aspect 等人的实验观测^⑧以及后来所有有关实验都证明, 量子力学的预言是正确的, 而定域实在论给出的不等式和隐变量的观点与实验相悖.

“All modern experiments confirm the quantum predictions with unprecedented precision, and ... a local realistic explanation of nature is not possible.”^⑨

针对 Schrödinger 提出的“量子力学规律对于宏观世界是否适用”的问题, 相继出现了一系列理论和实验工作. Zurek 与 Zeh^⑩等提出用退相干(decoherence)的机制, 来说明为什么在宏观世界中实际上观测不到 Schrödinger 猫所处的那种纠缠态. 他们认为, 只当体系与世界其他部分完全隔绝的情况下, 其量子态的相干叠加性才能得以保持. 事实上, 宏观体系不可避免与周围环境相互作用, 在一般条件下, 宏观体系将非常快速地失去其量子态的相干叠加性. 近年来, 实验工作者还做了一系列有价值的工作, 相继在介观尺度^⑪和宏观尺度^⑫上实现了 Schrödinger 猫态(cat-like state).

但应该指出, 尽管在量子力学基本理论诠释的长期争论中, Einstein 和 Schrödinger 并没有占上风, 但人们公认, 是他们首先认识到量子力学的深层次含义. Einstein 首先认识到量子物理^⑬

“would lead to a major change in our view of the world, particularly by giving randomness a new and much more fundamental role than before.”

EPR 佯谬的争论促进了人们对于宏观量子叠加态, 特别是纠缠态, 进行了大量实验上和理论上的研究, 并由此孕育着一门新兴学科——量子信息论(quantum information theory)的诞生, 它涉及量子计算(quantum computation), 量子密码学(quantum cryptography), 量子远程传态(quantum teleportation), 量子对策论(quantum game theory), 等.

与任何一门自然科学一样, 我们应该把量子力学看成一门还在发展中的学科. 除了量子信息论领域之外, 量子力学正逐步渗透到生命科学领域, 其前景实在难以

⑦ S. J. Bell, *Physics*, 1(1965), 195; *Rev. Mod. Phys.*, 38(1966), 447.

⑧ A. Aspect, P. Grangier and G. Roger, *Phys. Rev. Lett.*, 47(1981), 460; 49(1982), 1804.

⑩ H. D. Zeh, *Foundation of Physics*, 1(1970), 69;

W. H. Zurek, *Phys. Today*, 44(Oct. 1991), 36.

⑪ C. Monroc, et al., *Science*, 272(1996), 1131.

⑫ J. R. Friedman, et al., *Nature*, 406(2000), 43;

C. H. Van der Wal, et al., *Science*, 290(2000), 773.

预测。尽管迄今所有实验都肯定了量子力学的正确性,但这只表明:它在人类迄今实践所及的领域是正确的。量子力学并非绝对真理,量子力学并没有,也不可能,关闭人们进一步认识自然界的道路。量子力学与广义相对论之间的矛盾并未解决^②。量子力学理论的争论,或许是一个更深层次的争论的一部分。在进一步探索中,人们对自然界中物质存在的形式和运动规律的认识,也许还有更根本性的变革。

^② 例如,见 G. Amelino-Camelia, *Nature*, 408(2000), 661~664. *Quantum Theory's Last Challenge*.