

量子力学简明教程

LIANGZI LIXUE JIANMING JIAOCHENG

张 韬 祖宁宁 主编

HEUP 哈尔滨工程大学出版社

量子力学简明教程

张 韬 祖宁宁 主编



HEUP 哈尔滨工程大学出版社

内 容 简 介

本书系统地讲解了量子力学的基本原理和相关的近代物理的实验现象。全书共9章,内容包括绪论、波函数与 Schrödinger 方程、一维定态问题、算符理论、中心力场问题、表象变换、角动量理论、多粒子体系和全同性原理、微扰理论。

本书可供物理及相关专业的教师及学生使用。

图书在版编目(CIP)数据

量子力学简明教程/张韬,祖宁宁主编. —哈尔滨:哈尔滨工程大学出版社, 2018.3

ISBN 978 - 7 - 5661 - 1857 - 8

I. ①量… II. ①张… ②祖… III. ①量子力学 - 高等学校 - 教材 IV. ①O413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2018)第 045219 号

责任编辑:雷 霞

封面设计:博鑫设计

出版发行 哈尔滨工程大学出版社

社 址 哈尔滨市南岗区南通大街 145 号

邮政编码 150001

发行电话 0451 - 82519328

传 真 0451 - 82519699

经 销 新华书店

印 刷 北京中石油彩色印刷有限责任公司

开 本 787mm × 1 092mm 1/16

印 张 12.5

字 数 300 千字

版 次 2018 年 3 月第 1 版

印 次 2018 年 3 月第 1 次印刷

定 价 45.00 元

<http://www.hrbeupress.com>

E-mail:heupress@hrbeu.edu.cn

前 言

量子力学是高等学校物理及相关专业(物理学、应用物理、光电信息科学与工程等)必修的专业基础课程。目前,国内外已经出版了很多关于量子力学的优秀教材和参考书。近些年,随着我国高等院校专业设置的改革,专业分工更加精细,这就要求相关的理科和工科专业学生均要系统地学习量子力学的基本知识和基本原理。

编者在多年的量子力学课程教学中发现,由于各个专业学时压缩,物理及相关专业学生的数学物理基础薄弱和近代物理知识匮乏,制约了量子力学课程的教学。

编者根据所在教学单位的学生的前导课程的学习情况,对量子力学的课程教学进行了一些尝试性的改革。在量子力学课程教学中,注重对与量子力学相关的近代实验的讲解,阐明经典物理在解释量子现象时所遇到的困难,同时借助于量子力学的基本原理对量子现象给出合理的说明,加深学生对量子力学中基本原理的理解。另外,量子力学的课程教学需要学生系统地掌握数学物理方法,但因学时的限制,学生的数学物理基础往往相对薄弱,因此,在量子力学教学中,注重对量子力学的基本原理和基本概念的讲解,偏重物理思想的阐明和物理内涵的剖析。在必须要用到公式推导时,尽量避免烦琐的公式推导过程,力求公式推导过程清楚而简洁。基于近些年的教学经验,根据学生的认知能力和学习特点,编者编写了这本量子力学教材。

本书系统地讲解了量子力学的基本原理和相关的近代物理的实验现象。全书共9章,内容包括绪论、波函数与 Schrödinger 方程、一维定态问题、算符理论、中心力场问题、表象变换、角动量理论、多粒子体系和全同性原理、微扰理论。其中第1,2,3,4,7章由齐齐哈尔大学张韬编写,第5,6,8,9章由齐齐哈尔大学祖宁宁编写。本书可供相关专业的教师和本科生使用,讲授全部内容大致需要64学时。

考虑到与物理相关专业的培养方案和知识体系的要求,本书并未包括初等量子力学的全部内容,对一些内容做了适当的取舍,例如,电磁场中粒子的运动、散射理论和双原子分子本征问题的求解等,这些内容将留在后续的专业课程中做讲解,以避免相关课程的教学内容出现重复。

由于编者经验不足,书中的缺点和错误在所难免,恳请广大读者指正,以便今后再版修订。

编 者

2017年12月

目 录

第1章 绪论	1
1.1 黑体辐射	1
1.2 光电效应	3
1.3 Compton 效应	4
1.4 原子的线性光谱及稳定性	5
1.5 de-Broglie 物质波	6
第2章 波函数与 Schrödinger 方程	9
2.1 波函数的统计诠释	9
2.2 Schrödinger 方程	14
2.3 态叠加原理	17
2.4 力学量的平均值	17
2.5 定态 Schrödinger 方程	24
2.6 定态 Schrödinger 方程的一般性讨论	27
第3章 一维定态问题	31
3.1 一维定态问题的一般性讨论	31
3.2 一维方位势	36
3.3 δ 势阱	51
3.4 一维线性谐振子	53
第4章 算符理论	59
4.1 用算符表示力学量	59
4.2 力学量算符的对易关系	66
4.3 力学量算符的本征问题	69
4.4 坐标算符和动量算符的本征问题	73
4.5 轨道角动量算符的本征问题	79
4.6 对易算符的共同本征函数问题	83
4.7 不对易算符的不确定度关系	90
4.8 力学量随时间的演化	99
第5章 中心力场问题	111
5.1 粒子在中心力场中运动的一般性质	111

5.2 氢原子的本征问题	113
第6章 表象变换	118
6.1 Hilbert 空间中态矢和算符的表示	118
6.2 两种连续基底的表象	122
6.3 离散基底的表象	127
6.4 幺正变换	140
第7章 角动量理论	146
7.1 角动量一般理论	146
7.2 电子的自旋角动量	152
第8章 多粒子体系和全同性原理	168
8.1 全同性原理	168
8.2 全同粒子体系波函数的性质	171
8.3 双电子体系的自旋波函数	173
第9章 微扰理论	180
9.1 非简并的微扰理论	180
9.2 简并的微扰理论	185
参考文献	191

第 1 章 绪 论

19 世纪末,经典物理学已经发展得相当完善,它以经典电磁理论的建立为标志,包括经典力学、经典电动力学、热力学与统计物理学等,其基本学术思想适用于研究宏观或低速运动物体的物理规律。经典物理学几乎可以解释一切当时已知的物理问题,即使是现在,我们遇到的大部分物理问题都可以用经典物理学解决,特别是化学、生物学等领域内,存在着大量的经典近似。

然而自然科学总是在不断的发展。一些敏锐的物理学家逐渐认识到经典物理学中潜伏着的危机——某些物理实验规律用经典物理学的理论无法得到解释,例如:黑体辐射、光电效应、原子的线状光谱、原子的稳定性,等等。严酷的现实逼迫物理学家们不得不寻求新的思路,建立全新的理论来摆脱所面临的困境。1900 年,Plank 的量子假说解释了黑体辐射公式,为量子理论的建立迈出了关键的一步;在此基础上,1905 年,Einstein 的光量子假说正确解释了光电效应;1913 年 Bohr 的旧量子论解释了原子光谱;1923 年 de-Broglie 提出物质波假设,等等。在这样一批优秀物理学家前赴后继的努力之下,终于建立起了量子理论的科学大厦。

1.1 黑 体 辐 射

如果一个物体在任何温度下,对任何波长的电磁波都完全吸收,而不反射与透射,则称这种物体为绝对黑体,简称黑体。实际上,这种绝对黑体是不存在的,某些实际物体只能在一定条件下可近似地看成绝对黑体。例如,一个开有一个小口的任意形状的空腔就是一个近似的绝对黑体。

实验证明,当腔壁和腔内的辐射场在某一热力学温度下达到热平衡(单位时间内腔壁的原子向腔内的辐射场发射的总能量等于原子从辐射场吸收的能量)时,腔内的电磁辐射能量密度随频率的分布是确定的(每一频率都有相对应的能量密度),且这种能量密度随频率的分布只取决于腔壁的温度,与腔壁的形状和材料无关。若用 $\rho(\nu, T)$ 表示单位体积内单位频率间隔内的能量(单色能量密度),则 $\rho(\nu, T)$ 的实验曲线如图 1.1.1 所示。

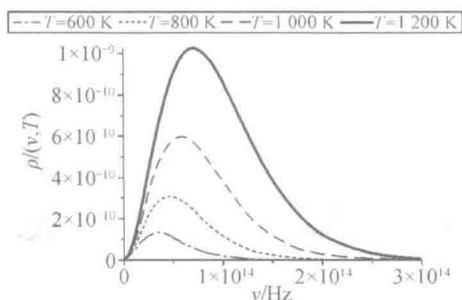


图 1.1.1 黑体辐射实验曲线

经典物理学对黑体辐射实验规律的解释主要致力于理论推导的能量密度 $\rho(\nu, T)$ 公式曲线与实验曲线之间相互吻合, 然而经典物理学家们的所有尝试都失败了。维恩 (W. Wien) 从热力学普遍理论考虑以及分析实验数据, 得出半经验公式: $\rho(\nu, T) d\nu = C_1 \nu^3 e^{-\frac{C_2 \nu}{T}} d\nu$, 其中 C_1 和 C_2 是两个经验参数。W. Wien 公式的理论曲线与黑体辐射的实验曲线在长波波段 (即低频波段) 有明显偏离; 瑞利和金斯 (J. W. Rayleigh 和 Jeans) 根据经典电动力学和统计物理理论得出公式 $\rho(\nu, T) d\nu = \frac{8\pi}{3} kT \nu^2 d\nu$, 其中 c 为光速, $k = 1.38 \times 10^{-23}$ 为 Boltzmann 常数。此公式在低频部分与实验曲线比较吻合, 但当 $\nu \rightarrow \infty$ 时, $\rho(\nu, T) \rightarrow \infty$ 是发散的, 与实验明显不符, 这在物理学史上称为“紫外发散困难”, 如图 1.1.2 所示。

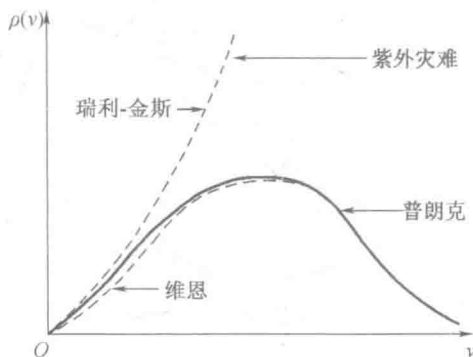


图 1.1.2 黑体辐射实验曲线与理论曲线的对比

普朗克 (Plank) 在维恩公式和瑞利 - 金斯公式的基础上, 提出了著名的普朗克量子假说: 对于一定频率 ν 的辐射, 物体只能以 $h\nu$ 为能量单位吸收或发射它, h 是一个普适常数。换句话说, 物体吸收或发射电磁辐射时, 只能以量子的方式进行, 每个量子的能量为 $\varepsilon = h\nu$, 其中 ν 为电磁波的频率, 物体在吸收或发射电磁波时, 只能以能量 ε 的整数倍来实现, 即 $\varepsilon, 2\varepsilon, 3\varepsilon, \dots$ 。在此基础上, 普朗克导出了含有一个全新常数 h 的黑体辐射公式, 即普朗克公式:

$$\rho_\nu d\nu = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right) - 1} d\nu \quad (1.1.1)$$

式中的 h 就是著名的普朗克常数:

$$h = 6.626\,075\,5 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

普朗克公式在高频区域与维恩公式一致,在低频区域与瑞利-金斯公式一致,弥补了前两个公式的不足。所以,由普朗克公式得到的结果在全频段与黑体辐射观测值惊人地吻合。

1.2 光电效应

在光的作用下,电子从金属表面逸出现象,称为光电效应。自 1887 年 Hertz 起,到 1904 年 Milikan 为止,光电效应的实验规律被逐步揭露出来。光电效应实验存在三大特点:存在遏止频率 $\nu_{\min}$ 、光电子的动能与入射光强无关、光的照射和光电子的逸出之间不存在时间延迟。

经典物理学认为按照光的电磁波理论,光电效应的物理机制是照射在金属上的光波使金属中的电子做受迫振动,当电子动能积累到足以克服金属对电子的束缚能时,电子可逸出,则按照经典理论得到如下结论:只要光足够强,任何频率的入射光都能打出光电子,不应存在遏止频率 $\nu_{\min}$;打出光电子的动能与入射光强成正比,与入射光频率无关;入射光照射和光电子逸出之间要有时间延迟。

1905 年 Einstein 提出光量子假设:电磁场本身是由“量子”组成的并且在真空中以光速传播,Einstein 称这种“量子”为光量子或光子。一个光子的能量为

$$E = h\nu = \hbar\omega \quad (1.2.1)$$

式中 h ——普朗克常数, $\hbar = \frac{h}{2\pi}$;

ν ——光的频率;

ω ——光的圆频率, $\omega = 2\pi\nu$ 。

按照 Einstein 的观点,当先射到金属表面上时,能量为 $h\nu$ 的光子被电子所吸收,电子把这能量的一部分用来克服金属表面对它的吸力,另一部分就是电子离开金属表面后的动能,这个能量关系可以写为

$$\frac{1}{2}m_e v_m^2 = h\nu - W_0 \quad (1.2.2)$$

式中 m_e ——电子的质量;

v_m ——电子脱出金属表面后的速度;

W_0 ——金属对电子的束缚能。

如果电子所吸收的光子的能量 $h\nu$ 小于 W_0 ,则电子不能脱出金属表面,因而没有光电子产生。光的频率决定光子的能量,光的强度只决定光子的数目,光子多,产生的光电子也多。这样,经典理论所不能解释的光电效应就得到了说明。式(1.2.2)称为 Einstein 光电效应方程。

Einstein 认为,光子不但具有确定的能量,而且具有动量。按照相对论,光子能量 E 和动量 p 之间的关系是

$$E = cp \quad (1.2.3)$$

将式(1.2.3)代入式(1.2.1)得到光子的动量是

$$p = \frac{h\nu}{c} \mathbf{n} = \frac{h}{\lambda} \mathbf{n} = \hbar \mathbf{k} \quad (1.2.4)$$

式中 $\mathbf{n}$ ——沿光子运动方向的单位矢量;

λ ——波长;

$\mathbf{k}$ ——光的波矢量, $\mathbf{k} = \frac{2\pi\nu}{c} \mathbf{n} = \frac{2\pi}{\lambda} \mathbf{n}$ 。

1.3 Compton 效应

X 射线被轻元素如白蜡、石墨中的电子散射后出现的效应,称为 Compton 效应。该效应有如下两个特点:首先,在散射光中,除了原来 X 光的波长 λ_0 外,增加了一个波长为 λ 的 X 光,且 $\lambda > \lambda_0$;其次,波长增量 $\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0$,随散射角增大而增大。如图 1.3.1 所示。

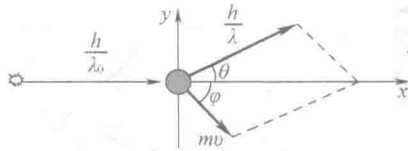


图 1.3.1 Compton 效应示意图

Compton 把这种现象看成 X 射线的光子与电子碰撞而产生的,成功地解释了实验结果。假设在碰撞过程中能量与动量是守恒的,由于反冲,电子带走一部分能量与动量,因而散射出去的光子的能量与动量都相应减小,即 X 射线频率变小而波长增大。

相对于 X 射线束中的光子能量,电子在轻原子中的束缚能很小,在碰撞前电子可视为静止。考虑到能量守恒定律,光子与电子的碰撞只能发生在一个平面中。记碰撞前、后光子的波长分别为 λ 和 λ_0 ,电子的静质量为 m_e ,被光子碰撞后的速度为 v ,碰撞过程中能量守恒,即

$$\frac{hc}{\lambda_0} + m_e c^2 = \frac{hc}{\lambda} + mc^2 \quad (1.3.1)$$

动量守恒:

$$\frac{h}{\lambda_0} = \frac{h}{\lambda} \cos \theta + mv \cos \varphi \quad (1.3.2)$$

$$0 = \frac{h}{\lambda} \sin \theta + mv \sin \varphi \quad (1.3.3)$$

根据

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (1.3.4)$$

得到康普顿散射公式:

$$\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0 = \frac{h}{m_0 c} (1 - \cos \theta) = \frac{2h}{m_0 c} \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (1.3.5)$$

1.4 原子的线性光谱及稳定性

1911年, E. Rutherford 根据 α 粒子对原子散射实验中出现的大角度偏转现象提出了原子的“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 $< 10^{-14}$), 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。

按照经典电动力学, 电子围绕原子核旋转的运动是加速运动, 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, 并相应发射出一个很宽连续辐射谱。但是在实验上观测到的原子光谱却是线状结构。此外, Rutherford 模型原子对于外界粒子的碰撞也是很很不稳定的。但现实世界表明, 原子稳定地存在于自然界。经典理论再次与实验事实发生了矛盾。

1913年, Bohr 提出氢原子的量子理论(旧量子论), 包括:

(1) 定态假设。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) 跃迁假设。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:

$$\nu_{mn} = \frac{E_n}{h} - \frac{E_m}{h} \quad (1.4.1)$$

(3) 角动量量子化假设。为了确定电子运动的可能轨道, Bohr 提出了量子化条件: 在量子理论中, 角动量必须是 $\hbar$ 的整数倍, 即

$$J = n\hbar \quad (1.4.2)$$

简言之, Bohr 旧量子论的核心思想有两条: 一是原子具有离散能量的定态概念; 二是两个定态之间的量子跃迁概念和频率条件。

Bohr 的氢原子理论较好地解释了原子大小问题、原子的稳定性问题以及氢原子的线状光谱问题。但该理论也有很大的局限性, 它只能解释氢原子光谱问题, 不能解释氦原子及其他更复杂原子的光谱问题。此外, 该理论无法解释氢原子光谱谱线的强度问题。

1.5 de-Broglie 物质波

Plank 的量子论、Einstein 的光量子论以及 Compton 效应都可以归结为一个结论:我们传统意义上认为是电磁波的“光”实际上也具有“粒子性”,即光具有“波粒二象性”。

de-Broglie 受到启发:我们传统意义上认为是“粒子”的微观粒子,是不是也具有波粒二象性?而我们过去对微观粒子的研究恰恰犯了与对光的研究相反的错误,只注重微观粒子的“粒子性”,而忽略了它们的“波动性”。

1923 年 de-Broglie 提出微观粒子也具有波粒二象性的假说。他认为 19 世纪在对光的研究上,重视了光的“波动性”而忽略了光的“粒子性”,但在对实体的研究上,则可能发生了相反的情况,即过分重视实体的粒子性而忽略了实体的波动性。因此,他提出凡是具有能量 E 和动量 p 的微观粒子,必然有一种波动和这个粒子相对应,这种波动称为物质波。表示粒子“粒子性”的物理量(能量 E 和动量 p)和表示粒子“波动性”的物理量(频率 ν 和波长 λ)之间的关系与 Einstein 光子关系式具有相同的形式,称为 de-Broglie 关系式,即

$$\begin{cases} E = h\nu = \hbar\omega \\ p = \frac{h}{\lambda} n = \hbar k \end{cases} \quad (1.5.1)$$

式中 E ——微观粒子的能量;

p ——微观粒子的动量;

ν ——微观粒子对应物质波的频率;

ω ——物质波圆频率;

λ ——物质波波长;

$k = \frac{2\pi}{\lambda} n = kn$ ——物质波波矢量;

$k = \frac{2\pi}{\lambda}$ ——物质波波数;

n ——物质波波矢量方向(或粒子动量方向)上的单位矢。

在非相对论情况下,考虑质量为 m_0 的自由状态微观粒子,由于没有外场,

$$\begin{cases} E = E_k = \frac{p^2}{2m_0} = h\nu = \hbar\omega \\ p = m_0 v_{\text{粒子}} = \frac{h}{\lambda} n = \hbar k \end{cases} \quad (1.5.2)$$

则 de-Broglie 波长为

$$\lambda_{\text{de}} = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_0 E}} \quad (1.5.3)$$

1927 年, Davisson 和 Germer 把电子束正入射到镍单晶上,观察散射电子束的强度和散射角之间的关系。实验装置如图 1.5.1 所示。

电子束由电子枪发出,被晶体散射;散射的电子束由法拉第圆筒收集,法拉第圆筒可以转动以调节散射角 θ ,散射电子束的强度由与法拉第圆筒相连接的电流计读出。Davisson 和 Germer 发现,散射电子束的强度随散射角 θ 而改变,当 θ 取某些确定值时,强度有最大值。这种现象与 X 射线的衍射现象相同,充分说明了电子具有波动性。

1927 年, J. J. Thomson 的电子衍射实验,使电子通过单晶粉末,出现衍射图像,这一衍射图像反映了电子的波动性。正像 X 射线照到单晶粉末压成的金箔上那样,产生了电子衍射的圆形衍射环,如图 1.5.2 所示。

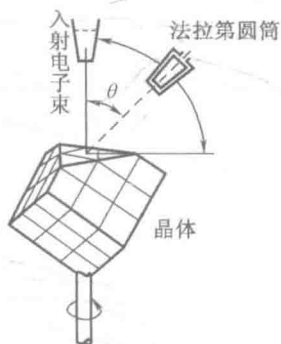


图 1.5.1 电子衍射实验

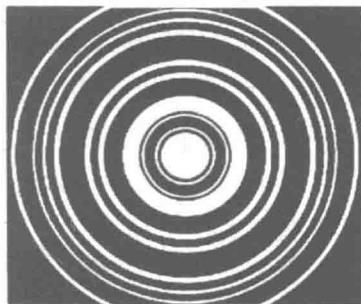


图 1.5.2 电子衍射图像

电子的波动性还可以用与光的双狭缝衍射相当的实验来显示,即电子的双狭缝衍射实验。如图 1.5.3 所示, S 为电子源,让电子束通过 A 屏上的双狭缝,用计数器在 B 屏上各点接收电子。如果电子具有波动性,以 E_1 和 E_2 分别表示穿过狭缝 S_1 和 S_2 到达 P 点的电子物质波,则有

$$E_1 = E_0 \cos(\omega t), E_2 = E_0 \cos\left(\omega t + \frac{2\pi d}{\lambda} \sin \theta\right) \quad (1.5.4)$$

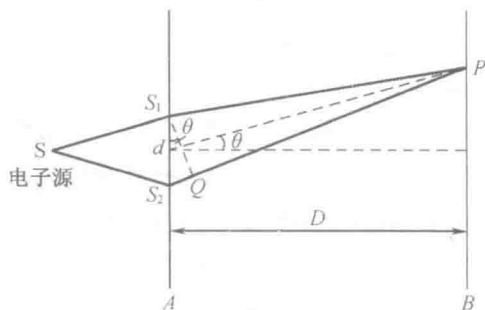


图 1.5.3 电子的双狭缝衍射实验

在 P 点总的物质波叠加为

$$E = E_1 + E_2 = 2E_0 \cos\left(\frac{\pi d}{\lambda} \sin \theta\right) \cos\left(\omega t + \frac{\pi d}{\lambda} \sin \theta\right) \quad (1.5.5)$$

则 P 点电子束的强度为

$$I = 4I_0 \cos^2\left(\frac{\pi d}{\lambda} \sin \theta\right) \quad (1.5.6)$$

在

$$\sin \theta = \frac{n\lambda}{d}, n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (1.5.7)$$

处,电子束的强度为极大值。实验中由式(1.5.7)计算出来的 λ 与式(1.5.3)给出的电子的 de-Broglie 波长完全一致。

按照 de-Broglie 物质波假设,任何一种微观粒子都有一种物质波与之相对应,下面考虑一种特殊的 de-Broglie 物质波——非相对论下自由粒子所对应的 de-Broglie 物质波。对于自由粒子来说, E 和 $\mathbf{p}$ 都是常数,这就意味着它所对应的物质波的圆频率 ω 和波矢量 $\mathbf{k}$ 也是常量,根据波动理论,圆频率 ω 和波矢量 $\mathbf{k}$ 为常量的波应该是无限空间内的平面波,这种波称为 de-Broglie 平面波,其波函数可写为

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = A \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$$

将上式写为复数形式:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = A e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}$$

将式(1.5.2)代入上式有

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = A e^{i\left(\frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{\hbar} - \frac{E}{\hbar} t\right)} = A e^{i\frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{\hbar}} e^{-i\frac{E}{\hbar} t}$$

上式称为 de-Broglie 平面波的波函数。

第2章 波函数与 Schrödinger 方程

量子力学基本原理的建立有诸种等效的表达形式(波动力学和矩阵力学),其中较为直观的是波动力学形式。本章将采用波动力学的形式建立对微观粒子运动状态的描述和运动规律的基本原理。这些基本原理最初是以假设的形式提出的,而后,以它和它的推论结果与实验事实的一致性而得到证实,并被确认为是正确的原理。

2.1 波函数的统计诠释

de-Broglie 物质波到底是什么波,有什么物理意义,这一点在 de-Broglie 物质波假设中并没有涉及。本节我们主要阐述微观粒子的波粒二象性中的“波动性”到底是什么波的问题。

2.1.1 经典理论的“粒子性”与“波动性”

经典力学谈到一粒子时,总是意味着这样一个客体:具有一定的质量、电荷等属性,具有“颗粒性”或“原子性”,当我们在空间发现这个粒子时,它总是作为单个的整体而存在。同时,粒子在每一个时刻都有确定的位置和速度,并且在空间中沿着轨道方程所描述的轨道运动。

经典物理里面的波动一定对应着一种物理量在时空上双重周期性地变化,例如:水波、声波、弹性波、电磁波等;波动的叠加主要体现为叠加后波的强度并不等于参加叠加的每个波动的各自强度的简单相加,叠加后的强度存在“相干项”,在空间呈强弱分布。

2.1.2 量子理论的“粒子性”与“波动性”

如果我们仍然沿用经典物理学中对“粒子性”和“波动性”的理解,那么微观粒子波粒二象性的矛盾是永远无法解决的。我们之所以觉得微观粒子的“粒子性”和“波动性”是相互矛盾的,归根结底是我们对“什么是粒子性”“什么是波动性”的理解有偏差。

微观粒子既有“粒子性”,又有“波动性”,但这里的“粒子性”和“波动性”并不是我们在经典物理里所理解的那种“粒子性”和“波动性”,而是量子力学中的“粒子性”和“波动性”。量子力学中所谓的“粒子性”,其实质是继承了经典物理关于粒子的“颗粒性”或“原子性”,即我们在空间找到这个粒子时,它总是作为单个整体而存在的,这个整体具有一定的质量和电荷等属性,这就是量子力学所谓的“粒子性”。没有任何的实验证据支持我们认为电子等微观粒子具有确定的位置并沿确定的轨道运动。

量子力学中所谓的“波动性”,其实质是继承了经典理论中关于波动具有“相干叠加性”的观点,即“波动”最本质的东西在于出现干涉、衍射等相干叠加现象,只要出现相干叠加,

就可以说具有“波动性”。量子力学中的“波动”并不像经典物理里那样一定要对应一个实实在在的、可观测的物理量在时间和空间上呈现出周期性的分布。

按照以上量子力学对“粒子性”和“波动性”的理解,二者完全是不矛盾的,是完全可以统一的,即微观粒子具有波粒二象性。

2.1.3 波函数的统计诠释

1. 电子的双狭缝(或双孔)实验

如图 2.1.1 所示,一把电子枪(用电流加热的钨丝)发射电子,假设所有被发射的电子都带有相同的能量打在开有小孔 1 和 2 的衍射屏上,在屏幕上安置可移动电子探测器得到电子的衍射图样。当遮蔽孔 2,让电子单独通过孔 1 时,得到图中 P_1 的电子分布曲线;当遮蔽孔 1,让电子单独通过孔 2 时,得到图中 P_2 的电子分布曲线;当孔 1 和 2 同时开放时,得到 P_{12} 的电子分布曲线,曲线 P_{12} 呈现出强弱分布的干涉图样,按照量子力学的观点,这是“波动性”的特征,是典型的波动干涉。

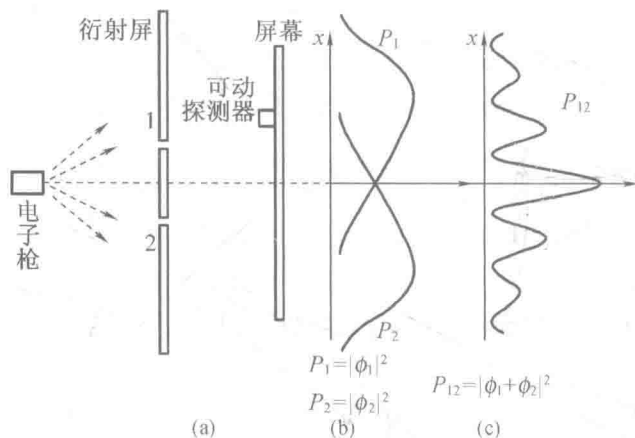


图 2.1.1 电子的双狭缝衍射实验

设单独通过小孔 1 的物质波在屏幕上的函数为 $\phi_1(x, t)$, 单独通过小孔 2 的物质波在屏幕上的函数为 $\phi_2(x, t)$, 电子的分布曲线对应物质波的强度:

$$P_1 = |\phi_1(x, t)|^2, P_2 = |\phi_2(x, t)|^2 \quad (2.1.1)$$

当小孔 1 和 2 同时开放时,屏幕上的物质波函数为

$$\phi(x, t) = \phi_1(x, t) + \phi_2(x, t) \quad (2.1.2)$$

$$P_{12} = |\phi(x, t)|^2 = |\phi_1(x, t) + \phi_2(x, t)|^2 \neq P_1 + P_2 \quad (2.1.3)$$

按照统计学规律:

$$P_1 = \frac{\text{单独开放小孔 1 时屏幕上 } x \text{ 点处一次性捕获的电子数目}}{\text{电子枪一次性发射的电子总数目}}$$

$$P_2 = \frac{\text{单独开放小孔 2 时屏幕上 } x \text{ 点处一次性捕获的电子数目}}{\text{电子枪一次性发射的电子总数目}}$$

$$P_{12} = \frac{\text{同时开放小孔 1 和 2 时屏幕上 } x \text{ 点处一次性捕获的电子数目}}{\text{电子枪一次性发射的电子总数目}}$$

综合分析可知:

P_1 = 单独开放小孔 1 时电子在屏幕上 x 点附近出现的概率

P_2 = 单独开放小孔 2 时电子在屏幕上 x 点附近出现的概率

P_{12} = 同时开放小孔 1 和 2 时电子在屏幕上 x 点附近出现的概率

因此,得出结论:微观粒子所对应的 de-Broglie 波的波动函数的模的平方对应于该微观粒子在空间某点附近出现的概率。

2. 波函数的引入

按照量子力学的观点,微观粒子具有波动性,通常用 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 来描述单个微观粒子所对应的物质波,并称这个函数为波函数。波函数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 一般为复函数,例如在 1.5.2 节中的自由粒子,其波函数为 $\Psi(\mathbf{r}, t) = Ae^{i(\frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{\hbar} - \frac{E}{\hbar}t)}$ 。

3. Born 对波函数的统计诠释

1927 年, Born 给出了波函数的统计诠释:微观粒子的状态由它的波函数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 完全描述, $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 在 t 时刻空间点 $\mathbf{r}$ 处的强度 $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \Psi(\mathbf{r}, t) \cdot \Psi^*(\mathbf{r}, t)$, 与该时刻在该点找到该粒子的概率成正比。

在经典力学中我们说确定一个质点的状态,就意味着我们知道了这个质点的确切位置和确切速度,这样能确切地推断出下一个时刻这个质点应向什么方向运动,这样我们才能说知道了这个质点所处的“状态”。但在量子力学中的“状态”指的是微观粒子的量子状态,这个量子状态由粒子的波函数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 来描述,而波函数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 的强度 $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ 反映了该粒子的坐标的概率分布情况。在量子力学中所谓的“知道了一个粒子的状态”是指知道了这个粒子的空间坐标的概率分布情况,这里只是知道了“概率”分布情况,并没有确切知道这个粒子一定在什么位置。Born 对波函数的诠释实现了从经典物理的决定论到量子物理的概率论的飞跃。

这里要注意的是: $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ 是实数,是可以测量的,表示坐标概率分布,而波函数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 是复数,是不能够测量的。

2.1.4 单个粒子波函数的基本性质

设某个粒子的波函数用 $\Phi(\mathbf{r}, t) = \Phi(x, y, z, t)$ 表示,在 t 时刻空间点 $\mathbf{r}$ 附近 $dv = dx dy dz$ 体积元内找到这个粒子的概率为 $dW(\mathbf{r}, t)$, 则

$$dW(\mathbf{r}, t) = C |\Phi(\mathbf{r}, t)|^2 dx dy dz = C |\Phi(\mathbf{r}, t)|^2 dv \quad (2.1.4)$$

式中 C 为比例常数。

定义概率密度: $w(\mathbf{r}, t) = \frac{W(\mathbf{r}, t)}{dv}$ 表示在 t 时刻空间点 $\mathbf{r}$ 附近单位体积元内找到该粒子的概率。则

$$w(\mathbf{r}, t) = \frac{W(\mathbf{r}, t)}{dv} = C |\Phi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (2.1.5)$$

这里 $w(\mathbf{r}, t)$ 实际上是坐标概率密度。

1. 单值性

在 $w(\mathbf{r}, t) = C |\Phi(\mathbf{r}, t)|^2$ 式中,由于在空间某点处找到该粒子的概率是唯一的(某一时