

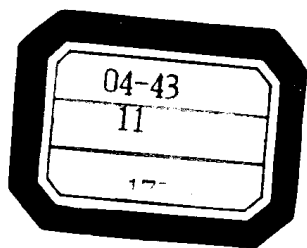


普通高等教育“九五”国家教委重点教材

张 礼 主编

近代物理学进展

清华大学出版社



1751504

近代物理学进展

主 编	张 礼			
参 编	陈皓明	何元金	顾秉林	熊家炯
	谢毓章	张培林	赵 钧	李师群
	孙洪洲	林郁正	李兴中	徐四大
	陈泽民			

清华大学出版社



北师大图书 B1369846

(京)新登字 158 号

内 容 提 要

本书分 21 个专题介绍了近代物理学多方面的概念、方法以及研究前沿和成果。内容包括近年来备受重视的研究方向,多数与诺贝尔物理奖有关,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。在论述中不着重于技术性细节而着重于物理实质,并介绍近代物理学中一些思想方法、研究方法和研究过程中的经验教训。

本书可作高等院校理工科研究生教材,也可供从事基础物理教学的教师参考,对从事与物理学关系密切的各学科科技工作者也很有参考价值。

图书在版编目(CIP)数据

近代物理学进展/张礼主编. —北京:清华大学出版社,1997

ISBN 7-302-02521-5

I. 近… II. 张… III. 物理学-进展 IV. 041

中国版本图书馆 CIP 数据核字(97)第 10280 号

出版者:清华大学出版社(北京清华大学校内,邮编 100084)

印刷者:清华大学印刷厂

发行者:新华书店总店北京科技发行所

开 本:787×1092 1/16 印张:21.75 字数:542 千字

版 次:1997 年 8 月第 1 版 1997 年 8 月第 1 次印刷

书 号:ISBN 7-302-02521-5/O·183

印 数:0001~3000

定 价:22.50 元

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它学科的巨大影响,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它章的内容会略有重叠。

本书可作为高等院校理工科研究生教材,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学科的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	8
1.5 角动量本征态,氢原子.....	11
1.6 跃迁理论	14
1.7 周期势,能带.....	16
参考文献.....	18
2 量子统计分布简介	张 礼
2.1 经典统计分布函数	19
2.2 量子统计分布函数	20
2.3 低温下固体比热	23
2.4 玻色-爱因斯坦凝聚及液氦 He I 相	24
2.5 自由电子气	27
参考文献.....	28
3 中子散射及应用	陈皓明
3.1 引言	29
3.2 中子衍射原理和实验方法	31
3.3 中子非弹性散射	34
3.4 中子散射的应用	38
3.5 小结	39
参考文献.....	39
4 扫描探针显微术	陈皓明
4.1 引言	41
4.2 扫描隧道显微镜	44
4.3 扫描探针显微术	49
4.4 扫描近场光学显微镜	51
4.5 单原子测量和控制	54
参考文献.....	55

5 正电子湮没技术及穆斯堡尔效应	何元金
5.1 什么是正电子	56
5.2 正电子的预言与发现	57
5.3 正电子湮没谱学的形成和发展	58
5.4 正电子湮没技术的基本原理与实验方法	58
5.5 正电子湮没技术在材料科学研究中的应用	60
5.6 穆斯堡尔效应	62
参考文献	66
6 晶体管效应与半导体微结构	何元金
6.1 晶体管的发现	67
6.2 半导体能带理论	68
6.3 半导体物理	70
6.4 半导体激光器	75
6.5 半导体微结构: 量子阱与超晶格	77
6.6 量子隧穿	81
参考文献	84
7 团簇	顾秉林
7.1 引言	85
7.2 团簇物理	85
7.3 富勒烯—— C_{60}	89
7.4 碳纳米管研究的进展	95
参考文献	103
8 超导	顾秉林
8.1 引言	104
8.2 零电阻特征	105
8.3 磁性质: 完全抗磁性和临界磁场	107
8.4 其它物理性质	109
8.5 伦敦方程	111
8.6 BCS 理论及其预见	112
8.7 金兹堡-朗道理论和磁通量子化	116
8.8 约瑟夫森效应	117
8.9 高 T_c 氧化物超导体	120
8.10 高 T_c 铜氧化物超导体的结构特性、缺陷及超导电性	123
8.11 高 T_c 铜氧化物超导体的物理性质	130
8.12 应用	141

参考文献	143
9 非晶态固体的物理特性与应用..... 熊家炯	
9.1 什么是非晶态固体.....	144
9.2 由原子集合体凝聚而成固体.....	144
9.3 关于玻璃化转变.....	145
9.4 非晶态固体的制备.....	146
9.5 非晶态固体结构的描述与检测.....	147
9.6 非晶态固体的电子态与能带模型.....	148
9.7 非晶态固体的光学与电学性质.....	153
9.8 非晶态固体的应用.....	156
9.9 关于无序势场中电子运动的研究进展.....	158
参考文献	159
10 液晶物理概述	谢毓章
10.1 引言.....	160
10.2 液晶相类别.....	161
10.3 指向矢和形变.....	162
10.4 单轴液晶连续体理论.....	164
10.5 层状 A 相和 C 相,铁电液晶	167
10.6 聚合物液晶.....	168
10.7 溶致液晶和生物膜.....	170
10.8 结束语.....	171
参考文献.....	172
11 激光与非线性光学	张培林
11.1 激光器的发明与发展.....	173
11.2 激光的应用.....	175
11.3 激光光谱学.....	177
11.4 非线性光学.....	179
参考文献.....	181
12 原子钟(量子频标)	赵 钧
12.1 时间标准的发展历史.....	182
12.2 几种实用原子钟的工作原理.....	183
12.3 原子钟发展的新形式.....	189
12.4 原子钟的应用及提高精度的意义.....	193
参考文献.....	195

13 激光冷却和捕陷中性原子	李师群
13.1 激光冷却和捕陷原子研究的意义	196
13.2 激光冷却和捕陷原子研究的历史发展	197
13.3 激光冷却原子的物理机制	198
13.4 激光冷却原子的实验实现	203
13.5 原子阱	206
13.6 碱金属原子气体玻色-爱因斯坦凝聚的实现	208
参考文献	210
14 量子霍尔效应	张 礼
14.1 经典霍尔效应	211
14.2 电子在均匀磁场中的运动,朗道能级	211
14.3 整数量子霍尔效应	212
14.4 分数量子霍尔效应	216
14.5 整数与分数量子霍尔效应的统一理解	218
14.6 量子霍尔效应的整体相图	221
14.7 磁通量子化	222
参考文献	223
15 原子核的动力学对称	孙洪洲
15.1 引言	224
15.2 动力学对称	225
15.3 原子核集体运动的几何模型	227
15.4 原子核集体运动的代数模型——相互作用玻色子模型	231
参考文献	235
16 自由电子激光	林郁正
16.1 引言	236
16.2 自由电子激光的工作原理	237
16.3 自由电子激光的关键技术	241
16.4 自由电子激光发展趋势	243
16.5 自由电子激光的应用	244
16.6 结束语	246
参考文献	247
17 等离子体物理与受控核聚变	李兴中
17.1 引言	248
17.2 劳逊判据和“得失相当”	249
17.3 磁约束途径	251

17.4	惯性约束途径	256
17.5	国际合作和中国的努力	259
17.6	近期展望	260
	参考文献	260
18	基本粒子的发现与径迹探测器	徐四大
18.1	引言	261
18.2	第一代基本粒子	261
18.3	Λ 超子的发现与 Ω 超子的寻找	265
18.4	多丝正比室和新粒子的发现	273
18.5	硅微条探测器与顶夸克的发现	280
	参考文献	284
19	电子深度非弹性散射及强子结构	张 礼
19.1	强子的结构观点	285
19.2	高能电子弹性散射	288
19.3	深度非弹性电子散射	290
19.4	夸克-部分子模型	291
19.5	新的探索	292
	参考文献	293
20	星体演化及脉冲双星引力研究	张 礼
20.1	星体演化概述	295
20.2	脉冲双星的发现	299
20.3	脉冲双星提供的引力研究	300
	参考文献	302
21	弱电相互作用的统一	张 礼
21.1	物理学中的统一	303
21.2	电磁学理论与局域规范不变性	303
21.3	杨振宁-米尔斯规范场	304
21.4	弱相互作用	305
21.5	对称性自发破缺	306
21.6	弱作用与电磁作用的统一	306
21.7	弱电统一理论的推论及实验验证	310
21.8	标准模型、大统一以及超弦	312
	参考文献	313

22 微波背景辐射、大爆炸及暴涨宇宙学	张 礼
22.1 哈勃定律及膨胀的宇宙.....	314
22.2 微波背景辐射.....	317
22.3 标准大爆炸模型.....	319
22.4 暴涨宇宙学.....	323
22.5 “宇宙背景辐射探索者”卫星的测量及其意义.....	327
参考文献.....	330
23 弱相互作用宇称不守恒	陈泽民
23.1 对称性和守恒定律.....	331
23.2 空间反演不变性和宇称守恒.....	331
23.3 弱作用宇称不守恒问题.....	335
23.4 CP 联合变换和 CPT 定理.....	337
参考文献.....	338

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 年代初原子物理学的进展遇到了很大困难。尽管玻尔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却取得了成功。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。如何将波和粒子这两种很不相同的性质结合在一种客体上引起概念上的困难。

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。二者在数学形式上完全类似。是否经典力学也是一种“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 (波动性质)可通过普朗克常数连系起来,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致一些有意义的结果。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范围现在已经非常广泛。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^[3,4,5]。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一些“实验”。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 100eV,相当于波长 λ 约为 $1\sim 2\text{Å}$ 。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。电子波动性的最重要的实际应用之一是鲁斯卡发明的电子显微镜,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、氦原子和轻的分子束上都得到证实。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它学科的有力实验研究工具(本书第 3 章对此有专门论述),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 是示意的实验装置。

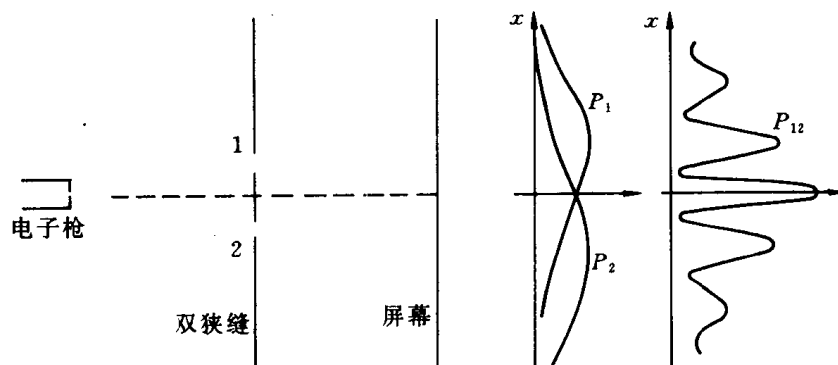


图 1.1 电子双缝衍射“想象中实验”装置

如果只开一个缝分别让电子从缝 1, 然后从缝 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 20min 在 5 个明亮条纹上共计录了 70 000 个电子。起初电子落在屏幕上完全是随机的。随着落在屏上的电子数目增多,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 $1\mu\text{m}$,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? 费因曼在他的物理学教程中建议,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就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他的并协原理: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

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

这就是海森堡不确定关系。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、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,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。海森堡和薛定谔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。海森堡用矩阵代表力学量,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。不同的模式称本征模式,模式的频率称本征值,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,称之为本征函数。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,是不能从其它原理推导出来的。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

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

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

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

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 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 就是电子在电荷为 $Z|e|$ 的原子核场中的库仑势能。这里边界条件是：波函数 ψ 应该是单值、连续且当 r 增大时应足够快地趋向于 0。边界条件实际上是与波函数意义有关的物理要求，将在下面讨论。薛定谔求解了库仑势式(1.15)的方程(1.14)，得到了氢原子能级和相应的波函数(将在 1.5 节中介绍他的结果)。薛定谔的一系列论文，也就是他的量子力学奠基之作，总标题是“作为本征值问题的量子化”。最后还要强调，方程(1.14)本身是第一原理，是“写”出来的。本节的叙述从自由粒子波函数式(1.7)到薛定谔方程仅是通过一个特殊情况进行推广，使人们觉得方程写出并非突如其来而已。方程的正确性是通过许多本征问题的解决得到与实验符合的结果而确立的。

波函数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 的物理意义是什么？这是个经过相当时期的争论后才解决的问题。博恩(M. Born)的诠释是： Ψ 是复函数，它的模的平方乘以在 $\mathbf{r}$ 处的体积元 d^3r 给出粒子在这个体积元内出现的几率。 $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ 是时间 t 、坐标 $\mathbf{r}$ 处的几率密度。要求粒子在全空间存在的几率为 1，应有

$$\int |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r = 1 \quad (1.16)$$

这是波函数的归一化条件。博恩是在处理散射问题时提出这个诠释的。为什么涉及几率？原因是微观过程(包括散射过程在内)本身是几率性的。在 1.1 节中提到的电子双缝衍射，以单个电子而论，它是按一定几率分布随机地落在探测屏上的。散射过程也是一样，一个电子在势场中散射也是按照一定几率随机分布飞往某一个方向的。

波函数不仅给出某一个状态的几率密度，实际上它给出这个状态的所有物理性质。或者说它提供这个状态的全部信息。在量子力学中一个体系是由其哈密顿量所表征的。如类氢原子中的电子，其哈密顿量就由(1.14)、(1.15)式给出。这个体系可以存在于一系列状态，例如氢原子处于某一个能级。这个状态的一切性质由它的波函数所完全描述。对这个状态进行任何测量，其结果完全可以通过波函数给出。例如粒子所在的位置 $\mathbf{r}$ ，根据上述波函数的诠释就应有

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int \mathbf{r} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r \quad (1.17)$$

此处 $\langle \rangle$ 表示期望值(平均值)。势能 $V(\mathbf{r})$ 的期望值为

$$\langle V \rangle = \int V(\mathbf{r}) |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r \quad (1.18)$$

动能 T 的期望值可以从平面波情况尝试推广。从平面波波函数(1.7)及动能算符(1.10)有

$$\begin{aligned} \langle T \rangle &= \int \Psi^* \hat{T} \Psi d^3r \\ &= \int \Psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \Psi d^3r \end{aligned} \quad (1.19)$$

此式可推广为对任何波函数成立。从此可以引入量子力学另一个基本原理：力学量在量子力学中以算符表示。从自由粒子具有确定动量的德布罗意波函数出发，如要本征方程

$$\hat{p} e^{i\frac{p}{\hbar}x} = p e^{i\frac{p}{\hbar}x}$$

成立，动量算符 $\hat{p}_x$ 的形式应为

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (1.20)$$

表 1-1 列出一些力学量及相应的算符。

表 1.1 力学量及相应的算符

力 学 量	符 号	算 符
位置坐标	$\hat{x}$	x
动量分量	p_x	$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$
势能	$\hat{V}(r)$	$V(r)$
动能	$\hat{T}$	$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$
角动量分量	$\hat{L}_x = x \hat{p}_y - y \hat{p}_x$	$-i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$

对于以归一化波函数 Ψ 代表的状态,任何力学量 Q (以算符 $\hat{Q}$ 代表)的期望值都可以用

$$\langle Q \rangle = \int \Psi^* \hat{Q} \Psi d^3r \quad (1.21)$$

计算。在这个意义上,一个状态的全部物理性质都由其波函数完全描述。如何保证力学量的期望值一定是实数? 这就要求代表力学量的算符满足以下条件(ψ 及 ϕ 为任意函数):

$$\int \psi^* \hat{Q} \phi d^3r = \int \phi (\hat{Q} \psi)^* d^3r \quad (1.22)$$

满足(1.22)条件的算符称厄密算符。

总结以上内容,态与力学量是量子力学的两个基础概念。态是由波函数描述的,力学量由算符描述。给定任何状态,任一个力学量的期望值都通过相应算符作用于波函数上按式(1.21)计算得到。一个体系的能量本征态是薛定谔方程(1.14)的解。

以上介绍了能量和动量本征值问题,进而推广到任何力学量的本征方程,有

$$\hat{Q} \phi_n = Q_n \phi_n \quad (1.23)$$

式左方 $\hat{Q}$ 是算符,满足边界条件的方程的解通常要求参数 Q_n 具有特定数值, Q_n 与 ϕ_n 就是算符 $\hat{Q}$ 的本征值及相应的本征函数。量子力学测量理论的基本假定是,对力学量 Q 进行测量,所得结果必然是本征值中的一个。

一个本征问题的全部本征函数集组成正交归一的完备集。“正交归一”性质定义为

$$\int \phi_m^*(r) \phi_n(r) d^3r = \delta_{mn} \quad (1.24)$$

其中

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 1, & m=n \\ 0, & m \neq n \end{cases}$$

δ_{mn} 称为克朗尼克尔符号(Kronecker symbol)。“完备”是指一个任意波函数可以展开为这个集合中的本征函数的线性组合,即

$$\Psi(r, t) = \sum_n c_n(t) \phi_n(r) \quad (1.25)$$

将双方乘以 $\phi_m^*(r)$ 并对 r 积分,得

$$\int \phi_m^*(r) \Psi(r, t) d^3r = \sum_n c_n(t) \delta_{mn} = c_m(t) \quad (1.26)$$

式(1.26)决定展开式(1.25)中的系数。展开式(1.25)称为本征函数展开。在量子力学中它有重要的意义。设某体系处于状态 $\Psi(r, t)$, 对这个状态进行力学量 $\hat{Q}$ 的测量, 问测得 Q_n 的几率是多少。将波函数利用 $\hat{Q}$ 的本征函数展开, $\hat{Q}$ 的期望值是

$$\begin{aligned}\langle Q \rangle &= \int \psi^* \hat{Q} \psi d^3r = \sum_{m,n} c_m^* c_n \int \phi_m^* \hat{Q} \phi_n d^3r \\ &= \sum_{m,n} c_m^* c_n Q_n \delta_{mn} = \sum_n |c_n|^2 Q_n\end{aligned}\quad (1.27)$$

由此可见 $|c_n|^2$ 即是测量得到 Q_n 的几率。如对 $\hat{Q}$ 的本征态 ϕ_n 进行力学量 Q 的测量, 所得的结果一定是 Q_n (具有确定值)。

算符的一个特点是不对易性。考虑 $\frac{\partial}{\partial x}x\psi$ 和 $x\frac{\partial}{\partial x}\psi$ 。前者是先将 x 作用于 ψ 然后再将 $\frac{\partial}{\partial x}$ 作用于其结果, 后者是将算符作用的次序颠倒。由于 $\frac{\partial}{\partial x}x\psi = \psi + x\frac{\partial}{\partial x}\psi$, 或 $\left(\frac{\partial}{\partial x}x - x\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi = \psi$, 可写出算符恒等式:

$$\left[x, \frac{\partial}{\partial x}\right] \equiv x \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}x = -1$$

用式(1.20) $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, 由上式可得以下算符对易关系:

$$[x, p_x] = i\hbar \quad (1.28)$$

类似地, 有

$$[y, p_y] = [z, p_z] = i\hbar \quad (1.29)$$

并容易验证

$$[x, p_y] = [x, p_z] = 0 \quad (1.30)$$

等等。从量子力学基本原理和对易关系(1.28)可以严格推导出

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1.31)$$

这是不确定关系的确切表达式。

如果两个算符 $\hat{Q}$ 及 $\hat{R}$ 的对易关系是

$$[\hat{Q}, \hat{R}] = 0$$

则他们被称为对易。两个互相对易的算符具有一项重要性质: 它们具有共同的本征函数。即存在这样一种状态, 在此态中两个对易的力学量同时具有确定值。逆命题也成立: 如两个算符具有同时本征函数, 它们必然对易。下面证明这个逆命题。算符 $\hat{Q}, \hat{R}$ 具有同时本征函数, 即

$$\hat{Q}\psi = q\psi, \quad \hat{R}\psi = r\psi$$

将算符 $\hat{R}$ 与 $\hat{Q}$ 分别作用于以上二式, 即有

$$\hat{R}\hat{Q}\psi = \hat{R}q\psi = q\hat{R}\psi = qr\psi$$

$$\hat{Q}\hat{R}\psi = \hat{Q}r\psi = r\hat{Q}\psi = rq\psi$$

在以上运算中普通数(有时称“c数”) q 和 r 和算符 $\hat{Q}, \hat{R}$ 是可以对易的。以上二式比较, 得