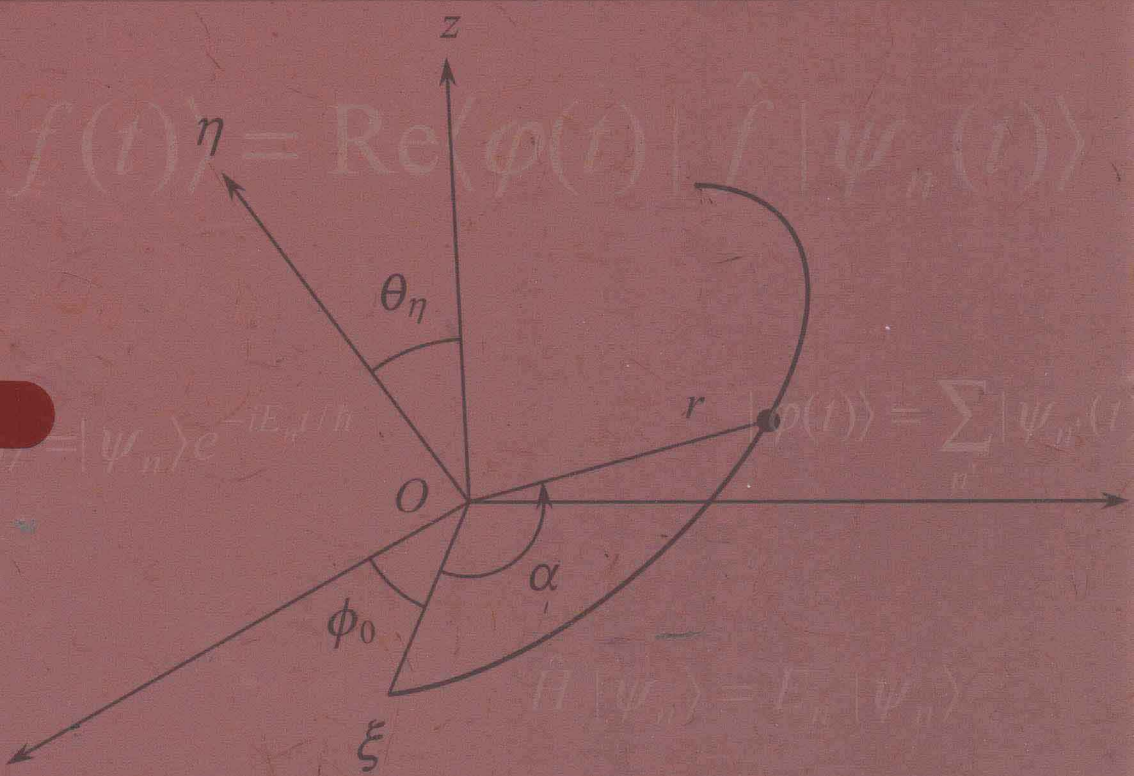


完全性量子力学

黄湘友 著



科学出版社

完全性量子力学

黄湘友 著

科学出版社

北 京



内 容 简 介

量子力学是现代物理学的基础,它的应用极其广泛和成功。由于无法直接观测原子内部电子运动情况,物理学家们对量子力学一直处于知其然而不知其所以然的状态,这就出现了所谓量子力学的解释问题。量子力学物理解释包含的问题很多:量子力学是否是完备的理论;如何理解波粒二象性;波函数的统计解释;不确定性原理;并协原理;量子力学描述的是单个粒子的运动规律,还是由大量单粒子组成的纯粹系综的规律;在测量过程中是否存在仪器对客体之间的不可控制的相互作用;在量子力学中的因果性和机率等。还有测量时是否有波包坍缩的问题;测量时力学量取值的假设问题;如何解释薛定谔猫态佯谬问题;量子力学中是否能引进隐变数问题;贝尔不等式及实验检验问题;EPR 问题和纠缠态问题;Ehrenfest 定理的有效性和量子力学与经典力学的关系问题。对这些问题的回答主要有两派观点。一派以玻尔为代表,认为微观粒子微小,仪器和测量的干扰不能忽略,应当用不同于经典物理的思维来理解量子力学。另一派以爱因斯坦为代表,认为现有量子力学还不是一种完全的理论,不能描述单个粒子而只能描述粒子系综。本书严格证明,当用量子力学方法描述大质量的经典粒子时,其结果仍是几率性的。这说明量子力学确实不是完全性理论。另一方面如果修改一下粒子状态的定义,则量子力学就成为完全性理论了。

本书适合理论物理专业研究生和科研工作者参考,也可供广大物理学爱好者阅读。

图书在版编目(CIP)数据

完全性量子力学/黄湘友著. —北京:科学出版社,2013. 10

ISBN 978-7-03-038874-2

I. ①完… II. ①黄… III. ①完全性-量子力学 IV. ①O413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 243994 号

责任编辑:钱 俊/责任校对:邹慧卿

责任印制:赵德静/封面设计:迷底书装

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>

骏杰印刷厂印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2013 年 10 月第 一 版 开本:720×1000 1/16

2013 年 10 月第一次印刷 印张:11

字数:206 000

定价:48.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换)

评价量子力学的精彩感言

物理学家们陷入了矩阵力学和波动力学的迷雾,陷进了数学运算之中。他们可以保证结论的正确性,但同时却不理解这些结论后面的物理现实。

——卢瑟福

报纸上曾说只有十二个人懂相对论。我不相信曾有过这种情形。但另一方面,我认为没有人懂量子力学倒是实事求是的说法。

——费曼

如果量子力学是所说的这种样子,我宁愿去当个赌场雇员或做个补鞋匠也不当物理学家。

——爱因斯坦

我认为也许最终会证明爱因斯坦是对的,因为我们不应当把现今的量子力学形式看作是最终的形式。量子力学只是目前使用的最佳理论,但我们不应当设想它会长治久安地存在下去。我认为十分可能在将来的某个时候有一种改进了的量子力学,在这种量子力学中决定论又重放异彩并由此证明爱因斯坦观点的正确性。

——狄拉克

亲爱的读者,当你认真地看了本书的部分内容时,你会有一种清新之感。你会感到物理学的美和量子力学的美。当你看到量子力学中各种长期争论不清的问题都被一个服从因果律的公式解剖得一清二楚时,你一定会叹服狄拉克预言的远见卓识。

——本书作者(黄湘友,北京大学物理学院)

前言

量子力学的面世如果从提出光量子概念的时日算起,迄今已有一百多年了。光量子概念催生了玻尔的氢原子模型,得出了氢原子线状光谱的计算公式。这工作在物理学史上具有划时代意义。德布罗意则由玻尔的氢原子模型和光量子概念想到实物粒子可能具有波动性,并提出了自由粒子的能量与频率、动量与波长的德布罗意关系。德布罗意假设被实验证实后,不久就催生出了薛定谔方程。当薛定谔用他的波动方程求出了氢原子的定态解,得到分立且精确的能量本征值和角动量本征值时,才真正开启了量子力学的新时代。此后波函数用来表示粒子的状态,薛定谔方程就是粒子状态的运动方程。纵观量子力学的所有成就,最核心的基础就是波函数和薛定谔方程。

从实验技术来说,我们至今仍无法直接观察原子中电子的运动情况。我们仍需靠光谱和激光等技术对它们作间接测量。一百年前,物理学家们就靠着光谱等实验资料,靠着经典物理学中点粒子的哈密顿方程,靠着介质和电磁场的波动方程以及统计力学知识,用假设、试验和比较的方法创建了今天的量子力学。按照爱因斯坦的说法,量子力学是在左手不知道右手干什么的条件下建立起来的。因此量子力学从一开始就有点先天不足,存在知其然而不知其所以然的问题。它除了讲述物理之外还要讲些认识论方面的问题,这就是所谓的量子力学解释问题。物理学家们为这问题争论了上百年至今仍未平息。下面以粒子通过狭缝的衍射为例来说明量子力学解释所要回答的问题。

设垂直放置的一块光阑为 xy 平面,上面有一条沿 y 轴的狭缝。有动量为 p 的自由粒子沿 z 轴方向由左向右运动。在光阑右侧较远处有一块与 xy 平面平行的感光屏或计数器阵列用来记录粒子。在光阑左侧,粒子由德布罗意波描述。在光阑右侧,粒子的波函数可用光学中的基尔霍夫定律算出。当粒子一个一个地通过狭缝到达感光屏时,它们的落点是无规律的。当通过狭缝的粒子数很多后感光屏上的落点记录显示出清晰的衍射条纹,这些条纹与波函数的模数平方表达的几率分布一致。如果粒子成束地通过狭缝,则衍射条纹很快就显现出来。所有通过狭缝到达感光屏的这些粒子,我们称之为经历相同制备条件的粒子系综。

现在的第一个问题是参与实验的粒子与波函数是什么关系。这问题的看法五花八门,这里只介绍几位量子力学创始人的观点。薛定谔设想单个粒子应由一个最小波包函数描述。但小波包的动量和能量很不确定,而且波包还随时间扩展。

德布罗意设想单个粒子应由薛定谔方程的双重解来描述,一个是普通解,另一个是奇点解。这设想在数学上就寸步难行。玻尔认为,一个波函数描述的对象是一个粒子加经典的测量仪器,粒子在自由空间以及通过狭缝后都是一个波,当它到达接收屏时才立即坍缩为一个点粒子。换句话说,粒子的表现要看仪器而定,当你要测它的波动性时它就是个波,当你要测它的粒子性时它就是个粒子。爱因斯坦认为,一个波函数不描述单个粒子而描述经历同样制备条件的粒子系综。量子力学解释的另一重要问题是单个粒子在接收屏上落点不确定性的原因是什么。玻尔认为,这种不确定性是测量仪器对微观粒子不可控制的干扰引起的。爱因斯坦则认为,这种不确定性是由于一个波函数描述单个粒子的不完全性引起的,还有一些未知要素(称为隐参数)没有进入到波函数中来。

虽然量子力学解释方案出现不少,但能长期引起关注的方案就这两种。由爱因斯坦首倡的解释称为统计系综解释。这种解释没有矛盾,但想找隐参数的努力一直没有成功。有些研究工作甚至证明,在现有量子力学的框架内不可能引进隐参数。以玻尔为首的解称为哥本哈根解释。这种解释经不起推敲或者说存在佯谬。例如测量时波函数的坍缩就没有道理,它不符合相对论也不遵从薛定谔方程。再例如把粒子落点的不确定性归因于仪器的干扰也没有道理,为什么在无规干扰下粒子的能量始终保持确定的本征值而衍射条纹也极其清晰。由于微观粒子的实验和应用都以粒子系综为基础,单个粒子的力学解释在目前还无关大局。许多教量子力学的老师或编教材的作者只好默认历史,把这一解释当作正统解释来面对学生。

本书作者认识到解决量子力学解释问题还是要靠逻辑的力量。普通量子力学的软肋是量子力学和经典力学的关系还没有搞清楚。本书第2章一方面将指出传统的量子力学经典极限研究中的缺陷,另一方面将证明用波函数描述单个经典粒子时其落点的不确定性依然存在。这说明粒子落点的不确定性不是来自仪器的干扰,而是来自对粒子状态定义的缺陷。本书中将指出,爱因斯坦等人的 EPR 文章关于量子力学不完全性的推论以及贝尔探讨定域隐参数的不等式都受到不完全理论的局限,触不到现有量子理论不完全性的要害。经典极限的透彻研究才有力地表明,量子力学的统计系综解释才是正确的。这研究也表明,要完善量子力学就必须修改粒子状态的定义。另一方面,如果用一对互补的波函数来定义一个粒子的状态,则隐参数很自然地进入到波函数中,几乎所有长期争论不清的问题都迎刃而解。这就从充分性方面说明修改粒子状态的合理性。例如在上述衍射实验中,描述入射粒子状态的波函数之一是德布罗意波,另一个波函数是个小波包。这两个波函数相乘决定粒子质心位置。在入射区这质心作匀速直线运动。在衍射区,表示状态的一个波函数是衍射波,另一个波函数仍是小波包。它们相乘决定粒子质心难以到达暗条纹区域。每个衍射粒子在荧光屏上的落点由它通过狭缝时的质心

位置决定。对质心位置求平均就得出衍射条纹。这部分内容将出现在本书第5章。

用两个波函数一起来表示粒子状态的方法通常称为双波量子理论。如同数学上有些问题在实数范围内无法解决但在复数领域就能轻易解决一样,量子力学解释和隐参数等问题在现有量子力学框架内无法解决但在双波量子理论中就能被轻易解决。双波函数方法很有成效。这成效不亚于实数变复数给数学带来的变化。本书介绍这方法对量子力学中各类问题的应用。这方法既兼容经典力学,又兼容普通量子力学。这方法驱散了笼罩在量子力学上的哥本哈根之雾,使量子力学回到了简洁、明了、和谐以及符合因果决定论的轨道上来。这方法是纯粹的物理数学方法,不需要任何哲学性地教人如何思考的说教。对量子力学认识论感兴趣的读者可参看本书最后一节的总结。作者欢迎有见解或有问题的读者随时联系, Email: xiang@pku.edu.cn。

本课题从1988年至2000年一直得到国家自然科学基金资助。

作 者
2013年8月

物理常数表

物理量	数值	单位
普朗克常数 h	$6.6260755(40) \times 10^{-34}$	$\text{J} \cdot \text{s}$
$\hbar = h/2\pi$	$1.05457266(63) \times 10^{-34}$	$\text{J} \cdot \text{s}$
真空中光速 c	2.99792458×10^8	$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$
阿伏伽德罗常量 N_A	$6.0221367(36) \times 10^{23}$	mol^{-1}
玻尔兹曼常量 k	$1.380658(12) \times 10^{-23}$	$\text{J} \cdot \text{K}^{-1}$
电子电荷 e	$1.60217733 \times 10^{-19}$	C
电子质量 m_e	$9.1093897 \times 10^{-31}$	kg
质子质量 m_p	$1.6726231 \times 10^{-27}$	kg
中子质量 m_n	$1.6749286 \times 10^{-27}$	kg
电子半径 r_e	$2.81794092(38) \times 10^{-15}$	m
玻尔半径 a_0	$0.529177249(24) \times 10^{-10}$	m
玻尔磁子 μ_B	$5.78838263(52) \times 10^{-11}$	$\text{MeV} \cdot \text{T}^{-1}$
真空介电常量 ε_0	$8.854187818 \times 10^{-12}$	$\text{F} \cdot \text{m}^{-1}$
真空磁导率 μ_0	$4\pi \times 10^{-7}$	$\text{H} \cdot \text{m}^{-1}$
里德伯常数 R	1.0973731534×10^7	m^{-1}

目 录

前言

第 1 章 普通量子力学基础	1
1.1 德布罗意波	1
1.2 波粒二象性	3
1.3 薛定谔方程	5
1.4 波函数	7
1.5 动量空间波函数和动量算符	8
1.6 厄米算符和本征函数	10
1.7 可观测量和它的可能值	12
1.8 普通量子力学的基本假设	13
1.9 线性简谐振子	14
1.10 简谐振子相干态	18
1.11 几个重要关系式	19
1.12 角动量算符和它的本征函数	24
1.13 氢原子	27
第 2 章 普通量子力学的经典极限问题	33
2.1 量子力学的分布函数表示	34
2.2 经典粒子纯系综	36
2.3 自由粒子系统的经典极限	39
2.4 简谐振子系统的经典极限	42
2.5 傅里叶变换下信号宽度的变化	46
2.6 不确定关系的物理解释	47
第 3 章 双波理论基础和初步应用	50
3.1 双波理论的基本假设和性质	51
3.2 双波理论的经典极限	53
3.3 自由粒子	55
3.4 猫态的双波解答	58
3.5 无限深势阱中的粒子	61

3.6	均匀势场中的粒子	63
3.7	均匀磁场中的带电粒子	65
3.8	简谐振子	68
3.9	测量假设问题	70
3.10	量子性根源猜想	73
第4章	氢原子的双波描述	76
4.1	氢原子的经典极限	76
4.2	一维氢原子	81
4.3	三维氢原子	86
4.4	准经典态时电子的运动	89
4.5	斯塔克效应	96
第5章	粒子散射、衍射、势垒贯穿和出入质谱仪	98
5.1	库仑散射	98
5.2	粒子单缝衍射	103
5.3	势垒贯穿中渡越时间计算	108
5.4	带电粒子在质谱仪中的运动	113
第6章	二能级体系	120
6.1	自旋在恒磁场中的表现	120
6.2	电子自旋共振	122
6.3	原子与光子互作用的简单模型	124
6.4	二能级原子应用	126
第7章	辐射场及其与原子的相互作用	133
7.1	LC 回路的量子化	133
7.2	辐射场的量子化	136
7.3	原子发射的半经典理论	140
7.4	由零点场计算兰姆移动	146
第8章	EPR 问题和纠缠态	150
8.1	EPR 问题的双波解答	150
8.2	贝尔基中的纠缠问题	152
8.3	问题回顾和结论	154
参考文献		158
物理常数表		163

第 1 章 普通量子力学基础

历史学家们都把量子力学的起点定在 1900 年。这一年普朗克发表了黑体辐射中能量随频率分布的著名公式。在该公式的推导中,普朗克提出了这样一条假设:频率为 ν 的电磁辐射,其能量取值不能任意而只能取由公式 $E_n = nh\nu$ ($n=0, 1, 2, \dots$) 确定的一些分立数值。从此一个称为普朗克常量的新的物理常数 h 进入了物理学。1905 年爱因斯坦进一步提出光量子假设:光是由光量子组成的,频率为 ν 的光中每一个光子具有 $h\nu$ 的能量和在传播方向有 $p = h/\lambda = h\nu/c$ 的动量。 c 是真空中光速, λ 是相应的波长。应用光量子概念,爱因斯坦简洁而成功地解释了光电效应。光子概念后来又为康普顿效应(1922)进一步证实,并逐渐被人们普遍接受。另外,玻尔在 1913 年把力学量取不连续值的想法用到了氢原子上,成功地解释了氢原子的稳定性和它的线状光谱。玻尔假定氢原子中的电子只能处在角动量为 $r p = nh/2\pi$ ($n=1, 2, \dots$) 的一些分立的轨道上,用经典力学可算出处在这些轨道上的电子能量 E_n 。当电子由某一轨道 n 跃迁到另一轨道 n' 时放出或吸收一个频率为 $\nu = (E_n - E_{n'})/h$ 的光子。1924 年德布罗意提出实物粒子也应具有波动性的假设。这一假设不久后(1927)也被实验所证实。与这些新假设的出现相伴随,理论方面的工作也日新月异。量子力学发展初期,它有两种不同的数学表述,即海森伯的矩阵力学(1925)和薛定谔的波动力学(1926)。不久,薛定谔证明矩阵力学和波动力学完全等价,即这两种不同的数学形式反映了同一种力学规律^[1]。接着,玻恩对波函数提出了统计解释。以后经过诺依曼和狄拉克等的工作,量子力学在短时间内迅速发展成一门条理清楚,数学严谨的力学理论。在量子力学发展中作出突出贡献的人几乎全都是些当时的年轻科学家。他们在不同的地方,从不同的角度探讨这一理论。在短短几年的时间内,那些形式不同的理论便殊途同归,融为一体。近百年来,量子力学的应用领域不断扩大。虽然围绕它的解释问题一直争论不休,但它的基本原理则早已立足并一直沿用至今。本章扼要介绍普通量子力学的基本原理。下面几章先对这些基本原理做一番去粗取精、去伪存真的工作,然后把普通量子力学改造成为完全性理论。

1.1 德布罗意波

随着光量子概念进入到物理学中,人们对光与物质相互作用的特点已有了较清楚的认识。光与物质间总是以光量子的形式一份一份地交换能量和动量。物质

吸收光实际上是一个一个地吸收光子。物质发光也是一个一个地放出光子。光散射则可看成物质吸收一个光量子的同时放出另一个光子。光的这种性质称为光的粒子性。1924年,德布罗意提出了像电子这样的微粒也可能具有波动性的假设。他把粒子和波通过下面的关系联系起来。粒子的能量 E 和动量 p 与波的频率 ν 和波长 λ 之间的关系,有着光子和光波间的同样关系形式

$$E = h\nu = \hbar\omega, \quad p = \hbar n/\lambda = \hbar k \quad (1.1)$$

式中, $\hbar = h/2\pi$, $\omega = 2\pi\nu$ 。 n 是沿粒子运动方向的单位矢量, $k = 2\pi n/\lambda$ 称为波矢。式(1.1)称为德布罗意关系式。

自由粒子的能量和动量都是常量,按德布罗意关系式算得的频率和波长也是常量。因此,与自由粒子相联系的德布罗意波应是个平面波。波数为 k ,角频率为 ω 的平面波的复数形式为

$$\psi(\mathbf{r}, t) = A e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \quad (1.2)$$

在经典理论中平面波由正弦或余弦函数表示,有时采用复数写法也只是为了数学上的方便。在本章的1.3节中将会看到,量子力学中描写自由粒子的平面波则必须使用复数形式。

设自由粒子的动能为 E 且粒子速度远小于光速,则 $E = p^2/2m$ 。由式(1.1)可知,德布罗意波长为

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} \quad (1.3)$$

m 是粒子的质量。

考虑一个被电压 V 加速的电子,它的动能 $E = eV$, e 是电子的电量。将 h, e, m 的数值(见书末的常数表)代入后可得

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2meV}} \approx \frac{1.225}{\sqrt{V}} \text{ nm}$$

由此可知,用150V的电压所加速的电子,德布罗意波长为0.1nm。当 $V = 10^4 \text{ V}$ 时, $\lambda = 0.0122 \text{ nm}$,这德布罗意波长在数量级上相当于(或略小于)晶体中的原子间距,它比宏观线度要短得多。这说明电子的波动性为什么长期未被发现。

德布罗意假设的正确性在1927年为 C. Davisson 和 L. H. Germer 所做的电子束在镍单晶上的散射实验所证实。被镍单晶散射的电子,它们的运动表现出很强的方向选择性。这现象与 X 射线的衍射现象相同。这是电子具有波动性的直接证据。由衍射理论和镍晶体的晶格常数,对照实验数据可定出电子的德布罗意波长,其数值与德布罗意公式计算得到的结果一致。

现在,实验室中已常用电子和中子的波动性来研究物质的结构和其他性质。实验上已可获得能量很低(因而波长较长)的中子流。当它们通过细小狭缝或栅

格时可产生明显的衍射效应。各种证据说明,德布罗意波从一个方面描述了物质的基本属性,通常被当成粒子的物体在适当条件下呈现出波动的性质。

1.2 波粒二象性

我们刚才已介绍过电子、中子等实物粒子波动性的实验证明,但这种介绍还不够全面。在粒子的衍射实验中,波动性在衍射过程中表现出来,而波的强度正比于各方向上被散射粒子的平均数。在探测这些参与衍射实验的电子或中子的时候,我们发现它们总保持为一个一个的点粒子形态,始终保持着与原来相同的质量和电荷。对光子来说,它的作用是可用来解释光电效应和康普顿效应这类物理现象。但光被狭缝和 X 射线被晶体的衍射这类现象,则必须用光的电磁波理论来解释。光和实物粒子既有波动性又有粒子性的事实称为波粒二象性。

图 1.1 为光的双缝干涉实验示意图。图 1.2 则是 A. Tonomura 所做的电子双缝衍射启发性实验的装置和实验结果^[2]。

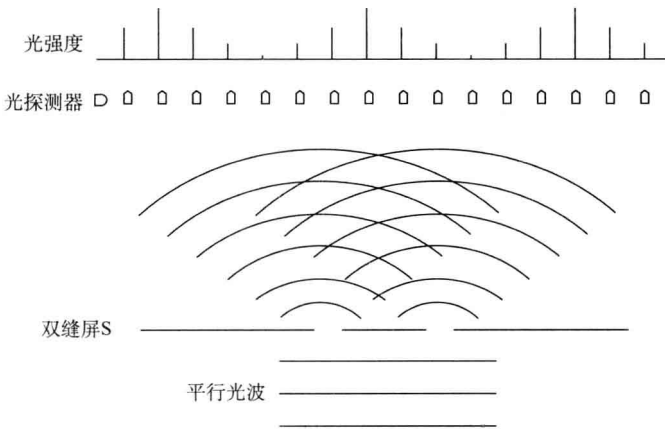


图 1.1 光的双缝干涉实验示意图(光探测器是一列光子计数器)

在图 1.1 中一平行光束通过双缝后被一组光探测器接收。光探测器离开缝的距离远大于两缝之间的距离。每个探测器都足够灵敏,用它们可记录单个光子的到达。光探测器是利用光电效应工作的光电倍增管。一个光子到达光阴极时可打出一个电子,这电子经过若干次级电极的倍增在阳极输出一个窄而高的脉冲电流。按这种方式使用的光电倍增管称为单光子探测器。在实验的开始阶段,光子显得是无规则地到达各个探测器。仅当各探测器都接收了很多个光子后,它们各自记录下的光子总数与波动理论给出的该处光强成正比。这光强就是通过两狭缝的光波在该处相干叠加形成的。再者,各探测器记录的光子数形成的分布与入射光强

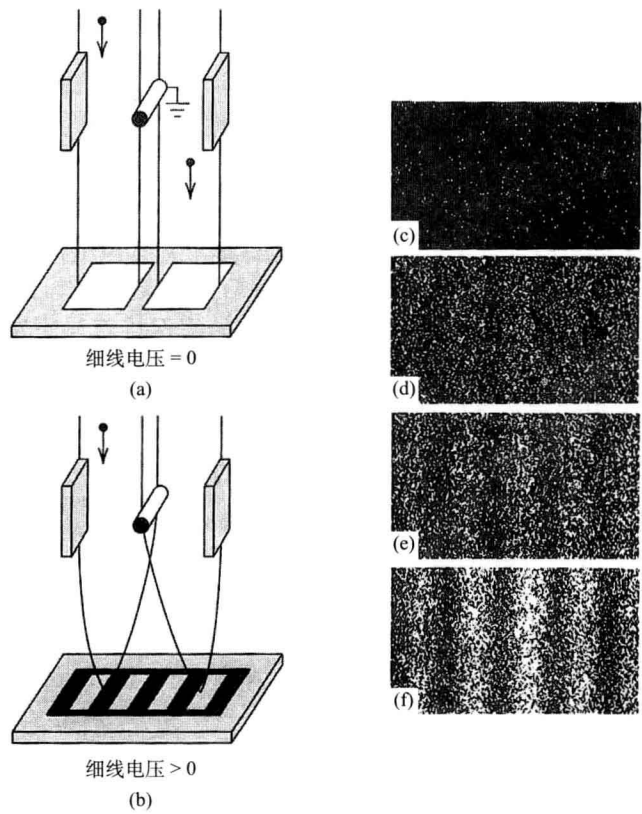


图 1.2 图(a)细线接地,向下运动的电子在接收屏上显示出细线的投影;图(b)细线接正电压,电子不再直线向下运动,屏上接收的电子说不清来自细线的哪一边,出现干涉条纹;右边照片显示电子数不同时的条纹结果,(c) 100,(d) 3000,(e) 20000,(f) 70000

度无关。当入射光较强时各探测器记录的光子几乎同时到达。同一短时间内各探测器记录下的光子数形成一个分布,这分布表现出光的双缝干涉所特有的图案。当入射光很弱时,每一时刻只有一个光子到达某一探测器,经过相当长的“曝光”时间,当各探测器都记录到总数很大的光子后,在同一段长时间内各探测器记录到的总光子数显示出与前者相同的空间分布图案。为了解释这些结果,光的波动模式和粒子模式都要使用。光在探测时表现为一个个具有一定能量的光子,而干涉条纹的形成又意味着光以经典波的形式通过双缝。如果每个狭缝上都添加一个快门装置,在做实验时轮流快速交替打开缝上的快门,但在任一时刻只有一个快门打开,记录结果显示干涉图案被破坏了。这说明干涉图案的形成有赖于两个狭缝同时打开。我们不能说一个光子从一个狭缝通过而另一个狭缝的开或关对它没有影响。有人可能试图把干涉现象归因于分别通过两狭缝的光子之间的相互叠加作

用。但是当光很弱致使光子在时间上一个一个分离地到达探测器时,只要双缝同时打开,累计下来的光子数分布就形成干涉条纹。总之,干涉现象只能用波动理论才能解释。

图 1.2 则是具体的实验装置和实验结果。在两块接地的平行板之间有一根表面绝缘的细金属丝(直径 $1\mu\text{m}$)。速度相同的电子一个一个地在平行板间垂直通过。这装置称为电子双棱镜。当这细丝接地时,电子经过细丝两边到达探测器。在探测器接收到很多电子后,接收屏上显示出细丝的投影。当这细丝接到正电压上时,在它两边通行的电子受电场力的作用会向另一边偏折,这电子双棱镜等价地起着双缝的作用。

当接收到的电子很多后干涉图案才清楚展现出来。这说明实物粒子也具有波粒二象性,而且这性质为单个粒子自己所固有。对波粒二象性的全面解释是量子力学解释中有争议的问题之一,在后面的章节中我们还将回到这一问题上来。

1.3 薛定谔方程

各种形式的波中平面波具有最简单的形式。当平面波通过狭缝后,波的形式变得极其复杂以至于我们很难精确地把它写出来。在经典理论中,原则上我们可借助波动方程和狭缝处的边界条件来计算衍射波,如果不能得出精确解就求近似解。对于德布罗意波,当它通过狭缝或被晶体衍射后的衍射波表达式也必须借助波动方程和边界条件来给出。还有,当粒子在势场中作变速运动时,我们希望有方法能写出与这粒子相联系的波。这些问题将由薛定谔波动方程解决。

首先参照经典波动理论来寻求德布罗意波满足的方程^[3]。一维情况下的经典波动方程为

$$\frac{\partial^2 A(x,t)}{\partial x^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 A(x,t)}{\partial t^2} \quad (1.4)$$

$$A(x,t) = A_0 \exp[i(kx - \omega t)] \quad (1.5)$$

而且有

$$\omega = ck \quad (1.6)$$

容易看出支配物质波的运动方程不能取式(1.4)的形式,因为式(1.6)与德布罗意关系式(1.1)合在一起要求能量和动量保持线性关系

$$E = cp \quad (1.7)$$

这不同于非相对论自由粒子能量和动量间应有的抛物线关系

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad (1.8)$$

因此,对物质波我们必须寻求一个不同于式(1.4)的波动方程。实验上已经证明,德布罗意波的假设是正确的,表示式(1.5)应当也是新的波动方程的解。

如果式(1.8)和式(1.1)能同时满足,这就要求波的频率与波矢的平方成正比,这条件意味着新的波动方程应当含有对 x 的二阶导数和对 t 的一阶导数。为此我们考查下面的方程

$$\frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} = \alpha \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} \quad (1.9)$$

其中, α 为常数。 $\psi(x, t)$ 称为波函数,其意义在下一节解说。我们要求 $\psi(x, t)$ 有形式如式(1.5)的平面波解,则由式(1.9)有

$$-k^2 = -i\alpha\omega \quad (1.10)$$

为了使式(1.1)和式(1.8)同时得到满足,必须取 $\alpha = -i2m/\hbar$ 。将这一数值代入方程(1.9),略加整理便得到描述自由粒子波动性的波动方程

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad (1.11)$$

反过来,当 ψ 取式(1.5)的平面波形式时,由德布罗意公式(1.1)和波动方程(1.11)得出

$$E\psi = \frac{p^2}{2m}\psi \quad (1.12)$$

这是自由粒子应具有合理结果。从这结果可知,在恒等式(1.12)中用 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ 代换

E , 用 $\pm i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ 代换 p 就得出波动方程(1.11)。当一个粒子在势场 $V(x, t)$ 的作用下运动时,它的总能量是动能与势能之和,方程(1.12)这时推广为

$$E\psi = \left(\frac{p^2}{2m} + V \right) \psi$$

按照刚才所说的代换规则,由这式子可写出比式(1.11)更普遍化的波动方程

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \right] \psi(x, t) \quad (1.13)$$

这方程称为一维薛定谔方程。三维空间中的薛定谔方程与这方程十分类似,以后用到时再把它写出来。

当 $V(x)$ 与时间无关时方程(1.13)可以简化,我们寻求 $\psi = U(x)e^{-iEt/\hbar}$ 形式的特解,由方程(1.13)得出 $U(x)$ 满足的方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} U(x) + V(x)U(x) = EU(x) \quad (1.14)$$

此方程称为定态薛定谔方程,它有着非常广泛的应用。

我们从自由粒子波粒二象性的有限实验知识出发,用综合推理的方法得出与势场 V 中的粒子相联系的波所满足的波动方程。这样推得的波动方程在开始阶段还只是一种猜想和假设,只有当它的结果和实验事实广泛一致的时候,它才能取得物理定律的地位。近百年来,薛定谔方程在原子物理、固体物理、化学、原子核和基本粒子理论等领域都取得了巨大成功。可以说它是量子力学基础中最值得信赖的一条基本假设。

1.4 波 函 数

现在来考查出现在薛定谔方程中的波函数 $\psi(x, t)$ 的物理意义。经典波动方程是实数方程,它的解是表示各点处的电场、压强、位移等的实数物理量。有时使用复数形式的解仅是为了数学上的方便,有物理意义的结果由波的实部或虚部表示。薛定谔方程是个复数方程,波函数本质上应是复数,它的实部和虚部合在一起才能满足薛定谔方程。因此无法直接把复数的波函数与体系的物理量联系在一起。

我们已叙述过电子在晶体上的衍射实验。虽然单个电子的衍射行为是没有规律和不可预期的,但当大量电子被接收记录下来后,在观察屏上便出现规则的衍射图形。这图形上的强度分布正比于衍射波在各点的强度。这就是说单位时间内到达某一观察点的电子数目正比于该点处衍射波的模值的平方。令 $\rho(x, t) dx dt$ 是粒子出现在区间 $[x, x+dx]$ 和 $[t, t+dt]$ 中的几率,则有

$$\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2 \quad (1.15)$$

因此,如果已知一个物理体系的波函数,就可算出在某一点附近发现一个粒子的几率。几率性或统计性是普通量子力学的一大特点。经典力学可允许连续追踪一个粒子的位置,量子力学则完全丧失了这种能力,它只允许我们对粒子位置作几率性的预测。如何理解量子力学中的统计性是量子力学解释中的困难问题之一。

方程(1.15)意味着实际使用的波函数还要满足一附加条件:在任一时刻粒子一定在空间某一点,在整个空间中找到这个粒子的几率应当为 1。因此有

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1 \quad (1.16)$$

由方程(1.14)可知,如果 ψ 是薛定谔方程的一个解,则 $c\psi$ 也是方程的解。因此我们可选择常数 c 使条件式(1.16)得到满足。满足条件式(1.16)的波函数称为归一化波函数。在归一化中,常数 c 的相位无关紧要,因为归一化的波函数乘一个形为 $\exp[i\alpha]$ 的相因子后(α 为实数)仍是个归一化的波函数。

在解薛定谔方程中选取波函数的时候,还应当注意到有意义的波函数必须满足下列条件: