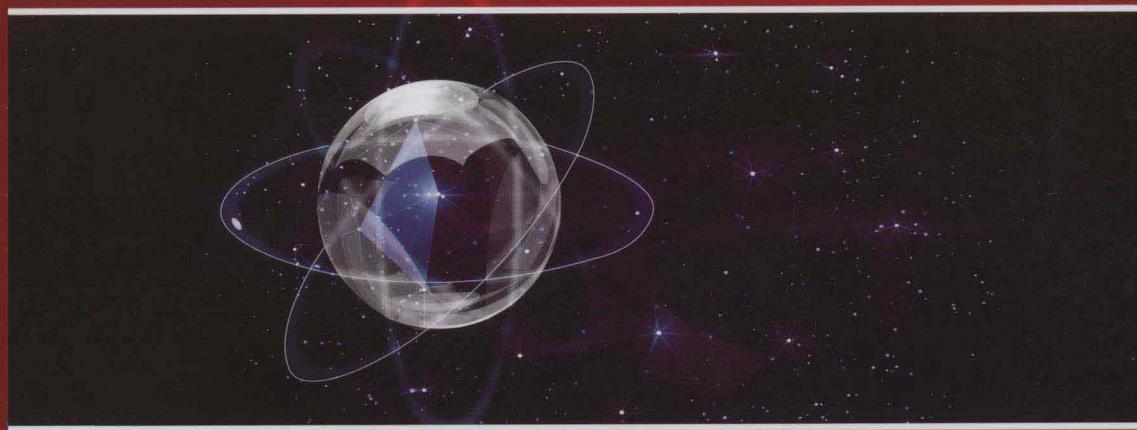




“十二五”普通高等教育本科国家级规划教材

# 量子力学教程 (第三版)

曾谨言 著



科学出版社

“十二五”普通高等教育本科国家级规划教材

# 量子力学教程

(第三版)

曾谨言 著



科学出版社

北京

## 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):波函数与 Schrödinger 方程(7)、一维势场中的粒子(6)、力学量用算符表达(6)、力学量随时间的演化与对称性(5)、中心力场(6)、电磁场中粒子的运动(3)、量子力学的矩阵形式与表象变换(4)、自旋(6)、力学量本征值问题的代数解法(4)、微扰论(5)、量子跃迁(6)、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。—3 版。—北京:科学出版社,2014.1

“十二五”普通高等教育本科国家级规划教材

ISBN 978-7-03-039242-8

I. ①量… II. ①曾… 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(2013)第 288457 号

责任编辑:窦京涛/责任校对:刘亚琦

责任印制:阎 磊/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>

安 春 印 刷 厂 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:720×1000 B5

2014 年 1 月第 三 版 印张:18 3/4

2014 年 1 月第十五次印刷 字数:378 000

印数:64 001—72 000

**定 价:29.00 元**

(如有印装质量问题,我社负责调换)

## 序 言

本书的前身《量子力学导论》(北京大学出版社,1991)是根据作者在北京大学30年的教学经验写成的。在20世纪90年代,该书为国内很多高校采用为量子力学基本教材。20世纪80年代以来,量子力学理论和实验出现了令人瞩目的进展。为了把一些最重要的成果反映到教材中,作者根据在北京大学和清华大学(基础科学班)多年教学经验,于2003年将该书改写为《量子力学教程》。2008年,第二版问世,并作为教育部普通高等教育“十一五”国家级规划教材,由科学出版社出版。到目前,本书已普遍为国内高校选用为量子力学教材。2013年被评选为“十二五”普通高等教育本科国家级规划教材。本书各版的修订过程中,采纳了很多读者和同行专家的宝贵建议,特此表示诚挚感谢。

根据作者在北京大学和清华大学多年的教学经验,对于如何进行量子力学教学和培养创新性人才,有下面几点体会供同行参考。量子力学是一门比较成熟,但还在发展中的学科。教师在教学中应尽量贯彻启发式的教学,不要只满足于传授知识,而应注重培养学生如何思考问题、提出问题和解决问题的能力。我在丹麦哥本哈根玻尔研究所工作期间,我国派遣了很多高中生到哥本哈根大学留学,他们很用功,选课很多。有一次,A. Bohr 对我谈及此事,他说:中国留学生选课比丹麦最优秀的学生选课要多得多,这并不好。高校学生不应该满足于读很多书,而应该学会“how to think”。

学生选修一门课,学习的是间接知识。自然科学中任何一个新概念和原理,总是在旧的概念和原理与新的实验现象的矛盾中诞生的。教师讲课不必完全按照历史的发展线索讲,但在可能的情况下,应引导学生自己去思考,自己去设想一个解决问题的方案。在此过程中,即使学生错了,也不要紧,他可以由此得到极为宝贵的独立工作能力的锻炼。如果设想出来的方案与历史上解决此问题的方案不一样,那就更好,在科学史上殊途同归的事例是屡见不鲜的。对于这样的学生,就应格外鼓励。对于能够对书本或老师的讲法提出不同观点的学生,应该予以重视。“尽信书,不如无书”,对待前人的知识遗产,既不可轻率否定,也不可盲目相信。如果学生能指出书本或老师的讲法有缺点或错误,而经过分析以后,证明学生是正确的,就应该格外鼓励。我的做法是给予免试。韩愈在《师说》一文中说过:“弟子不必不如师,师不必贤于弟子”;“道之所存,师之所存也”。教与学是一个双向关系,教师可以在与学生讨论中学到很多东西。我多年的经验表明,在与同学讨论中学

到了很多东西。应该在教学过程中提倡讨论的风气。Heisenberg 说过：“Science is rotted in conversation”。本书各版的修订过程中，就反映了同学们提出的很多宝贵意见。

\*

\*

\*

近年来，量子力学前沿领域出现了一些大家比较关注的问题，特别是涉及纠缠和不确定度关系的议论。下面简单介绍一下有关的情况。

1927 年，Heisenberg 提出不确定性原理(uncertainty principle)<sup>①</sup>，是科学史中的一个重大里程碑。经典力学中，一个粒子在同一时刻的坐标和动量具有确定值，粒子的运动状态用相空间(正则坐标与正则动量空间)中的一个点来描述。而在量子力学中，按照不确定性原理，一个粒子在同一时刻的坐标和动量不具有确定值。或者说，一个粒子的坐标和动量不具有共同本征态，表现在量子态用 Hilbert 空间中的一个矢量，而不是用相空间中的一个点来描述。这标志量子力学与经典力学的本质差异。

不确定性原理的数学表达式，即不确定度关系(uncertainty relation)。在量子力学教材中通常表述如下：对于任意两个可观测量  $A$  和  $B$ ，

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |[A, B]| \equiv \frac{1}{2} |C| \quad (1)$$

式中  $\Delta X = \sqrt{\langle \psi | X^2 | \psi \rangle - \langle \psi | X | \psi \rangle^2}$  是标准误差(方均根偏差)， $X = (A, B)$ ， $\langle C \rangle = \langle \psi | C | \psi \rangle$ ， $C = [A, B]/i$ 。不确定度关系(1)及其证明，首先由 Robertson<sup>②</sup>、Kennard<sup>③</sup>、Weyl<sup>④</sup>等给出(参见 3.3.1 节)。在量子力学教材中，不确定度关系(1)是基于波函数的统计诠释和 Schwartz 不等式而得出的。它给出在量子态  $|\psi\rangle$  下，两个可观测量  $A$  和  $B$  的测量值的不确定度(标准误差)的乘积所受到的限制。上述不确定度关系(1)不涉及具体的测量，是给定的量子态  $|\psi\rangle$  所固有的<sup>⑤</sup>，已经在众多实验中得到验证<sup>⑥</sup>，是没有争议的。特别是对于单个粒子的坐标和动量， $A = x$ ， $B = p_x$ ， $C = \hbar$  是一个非零的普适常量，所以在任何量子态下，一个粒子的坐标和动量在原则上就不能同时具有确定值。这就是不确定性原理的一个重要论断。

Schrödinger 很早就指出<sup>⑦</sup>，与不确定度关系(1)的平方相应的表示式的右

<sup>①</sup> W. Heisenberg, Zeit. Physik. **43** (1927) 172；英译本见 Quantum Theory and Measurement, J. A. Wheeler & W. H. Zurek 编主 (Princeton University Press, NJ, 1984) 62.

<sup>②</sup> H. P. Robertson, Phys. Rev. **34**(1929) 163.

<sup>③</sup> E. H. Kennard, Zeit. Phys. **44**(1927) 326.

<sup>④</sup> H. Weyl, Gruppentheorie und quantenmechanik, Hirzel, Leipzig, 1928.

<sup>⑤</sup> J. Erhart, S. Sponar, G. Sulyok, G. Badurek, M. Ozawa and Y. Hasegawa, Nature Physics. **8** (2012) 185.

<sup>⑥</sup> O. Nairz, M. Arndt, & A. Zeilinger, Phys. Rev. **A65**(2002) 以及所引文献。

<sup>⑦</sup> E. Schrödinger, Sitz. Preuss. Akad. Wiss. **14** (1930) 296-303；英译本见: arXiv : quant-ph/9903100 v2 (2000).

侧,还应加上一项正定的协变项

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq \left| \frac{1}{2} \langle \psi | AB - BA | \psi \rangle \right|^2 + \frac{1}{4} [\langle \psi | AB + BA | \psi \rangle - 4 \langle \psi | A | \psi \rangle \langle \psi | B | \psi \rangle]^2 \quad (2)$$

在一般情况下,Schrödinger 给出的不确定度关系(2)给出的  $(\Delta A)^2 (\Delta B)^2$ , 大于不确定度关系(1)给出的限制.

应该指出,Heisenberg 原来讨论的是测量误差-干扰关系(measurement error-disturbance)

$$\epsilon(A)\eta(B) \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle| \quad (3)$$

其中  $\epsilon(A)$  是可观测量  $A$  的测量误差,  $\eta(B)$  反映可观测量  $B$  受到的测量仪器的干扰(包括反冲等). 我国老一辈物理学家王竹溪先生把 Heisenberg 原来讨论的关系翻译为测不准关系,是有根据的. 文献<sup>⑧</sup>早已指出,测量误差-干扰关系(3)在形式上不完全正确的. 后来 Ozawa<sup>⑨</sup> 把测量误差-干扰关系(3)修订为

$$\epsilon(A)\eta(B) + \epsilon(A)\Delta B + \eta(B)\Delta A \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle| \quad (4)$$

基于所谓“弱测量”(weak measurement),文献<sup>⑩⑪</sup>给出了测量误差-干扰关系(3)的实验验证. 由此,引发很多议论. 有人认为,应该对量子力学教材中有关部分进行修改. 也有人对 Ozawa 的测量误差-干扰关系(4)提出质疑<sup>⑫</sup>. 近期,C. Branciard<sup>⑬</sup>基于近似联合测量(approximate joint-measurement),提出如下 error-tradeoff relation

$$\Delta B^2 \epsilon_A^2 + \Delta A^2 \epsilon_B^2 + 2 \sqrt{\Delta A^2 \Delta B^2 - \frac{1}{4} C_{AB}^2 \epsilon_A \epsilon_B} \geq \frac{1}{4} C_{AB}^2 \quad (5)$$

式中  $\Delta A$  与  $\Delta B$  是标准偏差,  $\epsilon_A$  与  $\epsilon_B$  是测量误差的方均根偏差. 文献<sup>⑭</sup>还讨论了关系式(3),(4),(5)或类似的关系式之间的联系. 我们认为,不妨把关系式(3),(4),(5)或类似的关系式都简称为测不准关系.

应当指出,测量误差-干扰关系(测不准关系)与不确定度关系的含义并不相同,不可混为一谈. 更不可把测量误差-干扰关系与不确定度原理混为一谈. 测量误差-干扰关系(测不准关系)的修订,不会动摇不确定性原理的普适性和量子力学理论的基础.

<sup>⑧</sup> L. E Ballentine, Rev. Mod. Phys. **42**(1970) 358.

<sup>⑨</sup> M. Ozawa, Phys. Rev. **A67**(2003) 042105; Phys. Lett. **A320**(2004) 367.

<sup>⑩</sup> L. A. Rozema, A. Darabi, D. H. Mahler, A. Hayat, Y. Soudagar, and A. M. Steinberg, Phys. Rev. Lett. **109**(2012) 100404.

<sup>⑪</sup> R. Cowen, Nature **498** (2013) 419; P. Busch, P. Lahti & R. F. Werner, arxiv. /1306. 1565 (2013).

<sup>⑫</sup> C. Branciard, PNAS **100**(2013) 6742-6727.

在 Heisenberg 提出不确定性原理 8 年之后, Schrödinger 猫态佯谬一文<sup>⑩</sup>提出“纠缠”(entanglement)概念, 对量子力学正统理论是否适用于宏观世界提出质疑。同年稍早, EPR 佯谬<sup>⑪</sup>对量子力学正统理论的完备性提出质疑。该文借助二粒子(无自旋)的纠缠态, 展示出量子力学的非局域关联(non-local correlation)。在尔后长达几十年时间中, EPR 佯谬与 Schrödinger 猫态佯谬一直成为量子力学争论的课题。但迄今所有实验观测都与基于局域实在论(local realism)而建立起来 Bell 不等式(CHSH 不等式)相矛盾, 而与量子力学的预期一致<sup>⑫⑬⑭</sup>。现今人们已经普遍认同, 纠缠是一个非常基本但又很奇特的概念<sup>⑮</sup>。我们很惊奇地发现, 在如此长时期内, Heisenberg 的不确定性原理与 Schrödinger 的纠缠两个概念之间的密切关系, 似未引起人们的广泛注意<sup>⑯</sup>。

关键点是要搞清纠缠的确切含义(以下限于讨论纯态的纠缠)。纠缠的一种流行的看法是: “与波动-粒子二象性属于单个粒子性质相反, 量子纠缠至少涉及两个粒子”。例如, Aspect<sup>⑰</sup>一文提到:

“In contrast to wave-particle duality, which is a one-particle feature, entanglement involves at least two particles”。

另一种看法是: “纠缠并不一定涉及两个粒子, 而只涉及(至少)两个彼此对易的可观测量(observables)”<sup>⑱⑲⑳</sup>。例如, V. Vedral<sup>⑳</sup>提到:

“What exactly is entanglement? After all is said and done, it takes (at least) two to tangle, although these two need not be particles. To study entanglement, two or more subsystems need to be identified, together with the appropriate degrees of freedom that might be entangled. These subsystems are technically known as modes. Most formally, entanglement is the degree of correlation between observables pertaining to different modes that exceeds any correlation allowed by the laws of classical physics.”

现今, 只涉及单个粒子的两个彼此对易的可观测量的纠缠态已经在很多实验

<sup>⑩</sup> E. Schrödinger , Naturwissenschaften, **23**(1935) 807.

<sup>⑪</sup> A. Einstein, B. Podolsky, & N. Rosen , Phys. Rev. **47**(1935) 777.

<sup>⑫</sup> J. Bell, Physics **1**(1964) 195.

<sup>⑬</sup> J. F. Clauser, M. A. Horne, A. Shimony, R. A. Holt, Phys. Rev. Lett. **23**(1969) 880.

<sup>⑭</sup> A . Aspect, Nature **398**(1999) 189; S. Gröblacher, et al. , Nature **446**(2007) 871.

<sup>⑮</sup> P. Knight, Nature **395**(1998) 52.

<sup>⑯</sup> M. Q. Ruan & J. Y. Zeng, Chin. Phys. Lett. **20**(2003) 1420

<sup>⑰</sup> A. Aspect, Nature **446**(2007) 866.

<sup>⑱</sup> Y. Hasegawa, R. Loidl, G. Badurek, M. Baron, H. Rauch, Nature **425**(2003) 45.

<sup>⑲</sup> V. Vedral, Nature **453**(2008) 1004.

室中被制备出来。例如，在 Dürr 等<sup>②</sup>的实验中，制备了一个原子的动量与它的内部电子态的纠缠态。在 C. Monroe 等<sup>③</sup>实验中，制备出在 Paul 阵中的一个<sup>9</sup>Be<sup>+</sup>的内部态（电子激发态）与其质心运动（即离子的空间运动）的纠缠态。

我们认为，后一种看法更全面一些。一般而言，量子纠缠涉及至少两个可对易可观测量。这两个可观测量，既可属于同一个粒子，也可属于两个粒子。按照这种看法，纠缠与非局域性并不完全等同<sup>④</sup>。

为确切起见，谈及一个纠缠态，必须指明，它是什么样的两个（或多个）对易的可观测量的同时测量结果之间的关联<sup>⑤</sup>。例如，对易的两个可观测量 A 和 B 的纠缠态，有如下两个特点<sup>⑥</sup>：

- (a) 测量之前，A 和 B 都不具有确定的值（即不是 A 和 B 的共同本征态）。
- (b) A 和 B 的同时测量值之间有确切的关联（几率性的）。

可以注意到，不确定度关系主要强调：涉及不同自由度的两个不对易的可观测量，不能同时具有确定值，或者说它们不具有共同本征态[满足  $\langle \psi | C | \psi \rangle = 0$  的特殊的量子态  $|\psi\rangle$  除外]。如果两个可观测量属于不同度，就一定是对易的，就不涉及不确定度关系。而纠缠则是涉及不同自由度的两个（或多个）对易的可观测量的共同测量之间的关联。所以，纠缠与不确定度关系可能有一定联系，是可以理解的。

为此，我们必须讨论多自由度或多粒子体系。一个多自由度或多粒子体系的量子纯态，可以用一组对易的可观测量完全集的共同本征态来完全确定<sup>⑦</sup>。一组可对易的可观测量原则上是可以共同测定的。在实验上，相当于进行一组完备可观测量的测量，用以完全确定地制备体系的一个纯态。

设  $(A_1, A_2, \dots)$  构成体系的一组 CSCO，其共同本征态记为  $\{ |A'_1, A'_2, \dots\rangle\}$ 。同样，设  $(B_1, B_2, \dots)$  构成体系的另一组 CSCO，其共同本征态记为  $\{ |B'_1, B'_2, \dots\rangle\}$ 。定义厄米对易式矩阵  $C = C^\dagger$ ，其矩阵元素为  $C_{\alpha\beta} \equiv [A_\alpha, B_\beta]/i$ ，用以描述  $(A_1, A_2, \dots)$  中的任何一个量与  $(B_1, B_2, \dots)$  中任何一个量的对易关系。考虑到不确定度关系的普遍性， $A_\alpha$  与  $B_\beta$  的测量不确定度也应满足如下不确定度关系

$$\Delta A_\alpha \Delta B_\beta \geq \frac{1}{2} |\langle [A_\alpha, B_\beta] \rangle| = \frac{1}{2} |C_{\alpha\beta}| \quad (6)$$

下面我们考虑，在 CSCO( $A_1, A_2, \dots$ ) 的给定的共同本征态下，彼此对易的各可观测量  $(B_1, B_2, \dots)$  的同时测量值之间的关联。我们试探性地给出如下一个纯态的纠缠判据<sup>⑧</sup>：

<sup>②</sup> S. Dürr, T. Nonn & G. Rempe, Nature **395**(1998) 33.

<sup>③</sup> C. Monroe, D. M. Meekhof, B. E. King, D. J. Wineland, Science **272**(1996) 1131.

<sup>④</sup> N. Brunner, N. Gisin & V. Scarani, New Journal of Physics **7**(2005) 88.

<sup>⑤</sup> A. Mair, A. Vaziri, G. Weihs & A. Zeilinger, Nature **412**(2001) 313.

<sup>⑥</sup> P. A. M. Dirac, The Principles of Quantum Mechanics, 4th. ed., 1958, Oxford University Press; Cohen-Tanoudji, et al., Quantum Mechanics, vol. 1, p. 144; 或见本书 3.3.3 节

<sup>⑦</sup> J. Y. Zeng, Y. A. Lei, S. Y. Pei & X. C. Zeng, arXiv: //1306.3325 (2013).

(a) 设矩阵  $C$  的每一行  $i$  ( $i=1, 2, \dots$ ), 至少有一个矩阵元素  $C_{ij}$  ( $j=1, 2, \dots$ ) 不为零, 或者说, 矩阵  $C$  的每一行的所有元素不全为零.

(b) 对于所有  $\{|\psi\rangle = |A'_1, A'_2, \dots\rangle\}, \langle\psi|C|\psi\rangle$  不完全为 0.

如果条件(a)和(b)都满足, 则在量子态  $\{|\psi\rangle = |A'_1, A'_2, \dots\rangle\}$  态下, 对  $(B_1, B_2, \dots)$  进行完备测量时, 它们的同时测量结果是彼此关联的(几率性), 即  $\{|\psi\rangle = |A'_1, A'_2, \dots\rangle\}$  是  $(B_1, B_2, \dots)$  的纠缠态.

如果条件(a)满足, 而条件(b)不满足, 则不能判定所有的量子态  $\{ |A'_1, A'_2, \dots\rangle\}$  都是或都不是  $(B_1, B_2, \dots)$  的纠缠态.

读者不难用常见的纠缠态来进行验证(参见本书 8.5.4 节).

\*

\*

\*

与任何一个自然科学理论一样, 量子力学是在不断发展中的一门学科, 而且充满争议. 从积极的角度来看待过去长时期有关量子力学理论的争论, C. Teche<sup>②</sup> 说:

"The paradoxes of the past are about to the technology of the future." 的确, 在过去的 20 多年中, 量子信息理论和技术、量子态工程、纳米材料学科等领域都有了长足的进展. 在 20 世纪即将结束之际, P. Davis 写道<sup>③</sup>:

"The 19<sup>th</sup> century was known as the *machine age*, the twentieth century will go down in history as the *information age*. I believe that the twenty-first century will be the *quantum age*."

对此, 有人持不同看法, 认为 21 世纪将是生物学的世纪. 我们认为, 这两种说法都有一定道理. 不同学科领域的进展是互相影响和互相渗透的. 显然, 如果没有 20 世纪物理学的进展, 如光谱学、显微镜、X 射线与核磁共振等技术, 现代生物学和医学的进展就难以理解. 物理学研究的是自然界最基本的, 但相对说来又是比较简单的规律. 生物学与医学的规律要复杂得多, 它的发展与化学和物理学等基础学科的进展密切相关. 可以期望, 在 21 世纪, 这些领域都会有出乎人们意料之外的进展. 对于我们中华民族的伟大复兴, 这是一个难得的机遇, 寄希望于我国广大的年轻科学工作者.

② C. Teche, Science 290(2001) 20.

③ 参见 T. Hey & P. Walters, The New Quantum Universe. Cambridge University Press, 2003, page xi. 中文译本, 雷奕安译,《新量子世界》,湖南科技出版社,2005.

## 第二版序言

《量子力学教程》(第一版)(科学出版社,2003年)出版以来,已为国内很多高等院校采用为教材或主要参考书。还有不少高校(由于出版信息不畅通)仍在使用本书的前身——《量子力学导论》(北京大学出版社,1991年)。根据多年以来使用本教材的众多读者和教师反映的情况和提出的宝贵建议,作者对第一版的少部分内容做了修改。

(1)关于角动量代数,按照钱伯初教授的建议,改用大家惯用的讲法(Dirac)。对于角动量代数的Schwinger讲法有兴趣的读者,可以参阅《量子力学》(现代物理学丛书),卷Ⅰ相应的章节。

(2)鉴于能级有简并的量子体系的力学量完全集(CSCO),特别是守恒量完全集(CSCCO),在应用量子力学处理实际问题中的重要性,在本书3.3.3节中做了较详细的分析。

(3)对于三个(或多个)量子比特的纠缠态(GHZ态)的某些实验观测,量子力学正统理论与局域实在论(local realism)有完全相反的确切预期(perfect prediction)。近年来的实验观测结果都与量子力学正统理论一致而与局域实在论尖锐矛盾。所以在8.4节讲述两个量子比特的纠缠态(Bell基)之后,简单介绍了三量子比特的GHZ态及相应的CSCO。

本教材各章之后所给出的习题,在孙婷雅编《量子力学教程习题剖析》(科学出版社,2004年)中给出了详细解答。希望增强用量子力学处理具体问题能力的读者,可以参阅钱伯初与曾谨言编著的《量子力学习题精选与剖析》(科学出版社)。对于有志报考研究生或出国留学深造的读者,还可以选读《量子力学》(现代物理学丛书),卷Ⅰ和卷Ⅱ。

曾谨言

2007年8月

于北京大学物理学院

## 第一版序言

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( $4 \times 16$ 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“十一五”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.为贯彻因才施教,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,有的同学在本科生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、郑维皓、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他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更  
重大贡献.

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( $v/c \ll 1, c = 2.998 \times 10^8 \text{ m/s}$ , 是真空中的光速). 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(如经典力学、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(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<sup>①~③</sup>. 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<sup>②</sup>. 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(如激光器、半导体芯片、计算机、电视、电子通信、电子显微镜、核磁共振成像、核能发电等),其产值在发达国家国民生产总值中目前已超过 30%<sup>①</sup>. 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

\* 《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.

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.

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。”<sup>①</sup>据统计，在1890～1900年期间，充斥物理学期刊的是：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<sup>②</sup>：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<sup>③</sup>？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  $3R$  ( $R = 8.314\ 510 \pm 8.4 \times 10^{-6} \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$  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，以及在什么问题上首先被突破和被谁突破，则往往具有一定的偶然性和机遇。

★

★

★

① 见 xi 页注①。

② W. Thomson, Phil. Mag. 2(1901) 1, 19<sup>th</sup> Century Clouds over the Dynamical Theory of Heat and Light.

③ 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

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

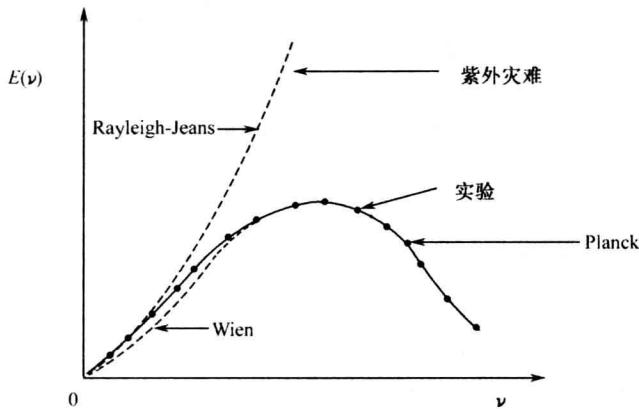


图 1 黑体辐射能量密度  $E(\nu)$  随频率  $\nu$  的变化示意图

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

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

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<sup>①</sup>。

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,

<sup>①</sup> 见 xi 页注①。

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<sup>①</sup>,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  $\nu$  的辐射,物体只能以  $h\nu$  为单位吸收或发射它,  $h$  是一个普适常量(后来人们称之为 Planck 常量)。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。

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<sup>②</sup>。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  $\nu$  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  $T \rightarrow 0K$  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。

\*

\*

\*

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<sup>③</sup>。

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  $\sim 10^{-10} m$ ),而电子则以某种规则排列镶嵌其中。1911 年 E. Rutherford 根据  $\alpha$  粒子对原子散射实验中出现的大角度偏转现象(图 2, Thomson

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

<sup>②</sup> A. Einstein, Ann. der Physik 17(1905) 132.

<sup>③</sup> 见 xi 页注③。

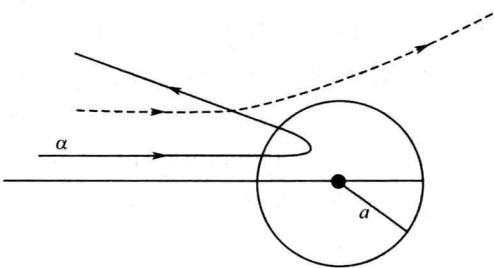


图 2 Rutherford 的  $\alpha$  粒子对原子的散射

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  $\alpha$  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 $\tau\sim 10^{-12}\text{ s}$ )<sup>①</sup>,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 $10^{-10}\text{ m}$ . 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 $r_c=e^2/m_ec^2$ (经典电子半径) $\approx 2.8\times 10^{-15}\text{ m} \ll 10^{-10}\text{ m}$ ,完全不适合用于表征原子大小. 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

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

(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),

<sup>①</sup> 见 xi 页注①.