

1.1 总论

量子力学研究的是微观世界物质粒子的运动规律,是物理科学中最重要的一个分支。量子力学的研究对象不仅涉及原子、分子、凝聚态物质,而且包括原子核和基本粒子等。量子力学在化学、材料学和生物学等学科以及许多近代科学技术中也得到了广泛的应用。它与相对论一起被认为是现代物理学的两大基本支柱。量子力学已经取得了惊人的成功,至今还没有发现一个量子力学的理论预言是错误的。当今全球经济的大约三分之一依赖于以量子力学为基础而发展起来的学科,例如半导体物理学、原子物理学、固体物理学、量子光学、核物理学和粒子物理学,甚至于包含化学、生物学和宇宙学等。量子力学的发展对哲学、文学和艺术也都产生了重要的影响(即对社会科学和人文精神也有重要的影响),对现代社会产生了巨大的影响。

19 世纪末,人们在生产实践中发现旧有的经典物理学理论无法解释微观体系的一些实验事实。于是,经过物理学家们的努力,在 20 世纪初(主要是 20 世纪 20 年代)创立了量子力学,解释了经典物理不能解释的现象。量子力学的创立从根本上改变了人类对物质结构及其相互作用的理解。现在,除了需要透过广义相对论理论进行描写的引力,迄今所有的基本相互作用都可以在目前的量子力学(量子场论)框架内描述。

量子力学是同 20 世纪一起来到人间的。奇妙的是,量子力学甚至有一

个大家都相当公认的诞生日,那就是:1900年12月14日。这一天,德国伟大的物理学家普朗克在柏林德国科学院物理学年会上宣布了他的伟大发现——能量量子化假说,标志着量子论的诞生。量子论给我们提供了新的关于自然界的表述方法和思考方法。它能很好地解释原子结构、原子光谱的规律性、化学元素的性质、光的吸收与辐射等。人们将“量子”的发现称为人类科学和思想领域的一场伟大的革命。继普朗克发现量子之后,量子力学的发展远远超出了任何一个最能幻想的科幻小说家的想象。

量子力学的发展主要可以分为两个阶段,即1900—1925年的旧量子论时期和1925年以后的量子力学理论的正式创立和完善阶段。

1. 关于正统的量子力学理论创立之前的旧量子论时期(1900—1925年)

旧量子论主要包括普朗克的量子假说、爱因斯坦的光量子理论和玻尔的原子理论。关于旧量子论的创立,普朗克有非常特殊的贡献,取得了具有划时代意义的突破——第一个窥见了“量子”。人们在研究黑体辐射时,发现维恩公式只能在短波范围内成立,而瑞利公式只能在长波范围适用,这两个公式当时各自独立地在各自的频率区域内成立。1900年10月,普朗克“无意”中凑出了一个公式,它很自然地在短波区域趋于维恩公式,而在长波区域趋于瑞利公式。1900年10月19日,普朗克在柏林物理学会的会议上提出了他得到的公式。这个公式被发现与实验数据符合得非常好。普朗克非常清楚这个公式背后一定隐藏着重要的“东西”,这最终导致了上面提到的1900年12月14日量子假说理论的诞生。所谓的“量子”,就是指辐射能量的释放和吸收都不是连续的,而是一小份一小份地进行。普朗克就把这每一小份能量叫作一个“量子”。

1905年,爱因斯坦引进光量子的概念,并给出了光子的能量、动量与辐射的频率和波长的关系,成功解释了光电效应。此外,爱因斯坦又提出固体的振动能量也是量子化的,从而解释了低温下固体比热的问题。可以看到,爱因斯坦对早期量子理论的发展起到了举足轻重的作用。1913年,玻尔在卢瑟福有核原子模型的基础上建立起原子的量子理论,按照这个理论,电子只能在分立的轨道上运动。玻尔是旧量子论时代的领袖人物,团结和鼓励了一大批在量子力学领域取得辉煌成就的年轻人。在人们认识到光具有波

动和微粒的二象性之后,1923年法国物理学家德布罗意提出了物质波这一概念。认为一切微观实物粒子均伴随着一个波,这就是所谓的德布罗意波,这最终帮助了量子力学波动力学形式的诞生。旧量子论是同普朗克、爱因斯坦、玻尔以及索末菲等的名字紧紧联系在一起的。更加具体的讨论会在后续的章节中展开。

2. 关于正统的量子力学理论的创立

1925年,德国物理学家海森伯,建立了量子力学的第一个数学描述——矩阵力学。1926年,奥地利科学家薛定谔提出了描述物质波连续时空演化的偏微分方程——薛定谔方程,从而给出了量子力学的另一个数学描述——波动力学。1948年前后,费曼还创立了量子力学的第三种形式——路径积分形式。历史上,上述正统的量子力学理论的发展来自两条路线(后来费曼的路径积分形式除外):一条是从普朗克的量子论到玻尔的原子结构的量子论,再到爱因斯坦的辐射量子论,最后到海森伯的矩阵力学;另一条是从普朗克的量子论到爱因斯坦的光的波粒二象性,再到德布罗意的电子的波粒二象性,最后到薛定谔的波动力学。矩阵力学和波动力学都是逻辑上完备的量子力学体系,二者早被证明是等价的,只是数学形式上不同而已。

量子力学正统理论的发展(1925年开始)是同海森伯、薛定谔、玻恩、约尔丹、泡利、狄拉克以及德布罗意等的名字紧紧联系在一起的(这里只列出代表性人物,当然还有其他人),他们完成了把旧量子论转变成一种真正的量子理论这一艰苦的工作。20世纪20年代的物理学风起云涌,重大理论突破不断出现,很快就建立了量子力学比较完善的理论体系。这也使得后来的许多聪明人只能作为“旁观者”而叹息那个激动人心的大发现的时代已经一去不复返了。

当我们从经典力学过渡到量子力学时,我们所关心的最重要的物理量也发生了变化。在经典力学中,最重要的是系统的受力情况,而在量子力学中,受力已经不再重要(甚至无用了),重要的是系统的能量和动量。我们在量子力学中处理的不再是质点的运动轨迹,而是在位形空间和时间中变化的波函数(请参考第4章的思考题,可以更加深入理解波函数和位形空间的

意义)。正统量子力学体系的核心是薛定谔方程及其波函数的概念(波动力学体系)。1926年夏,薛定谔写出薛定谔方程之后,玻恩提出了对波函数的正确解释,即概率解释。可见,有趣的是,尽管波函数早已被写在了薛定谔方程当中,但是薛定谔本人当时却并不清楚波函数的含义,他甚至极力反对玻恩对波函数进行的正确的概率解释。从薛定谔方程诞生以来,差不多一个世纪过去了。虽然量子力学的内容被极大地丰富了,但是最基本的量子力学原理和概念都没有变化。量子力学是严谨的和实事求是的,而且量子力学总还在进步着,尽管有时候是艰难和缓慢的。有人统计过,截至1960年,以薛定谔方程为基础的论文就已经超过了10万篇(到现在,已经远远大于这个数),可见它是处理物质的电子和结构问题的强大的数学工具。

量子力学最重要的方面是它所揭示的叠加性、随机性和非定域性。在量子力学中,所处理的状态被称为量子态。而量子态都是叠加态,即它一定包含两个或两个以上的本征态。所谓本征态,是指拥有某个确定物理量的值的一种经典的状态,它已不再具有不确定性(一个量子态经过被测量而转化或“跃迁”到本征态上)。另外,在量子力学中讨论波的叠加时,都是指波函数的叠加。而波函数本身并不直接对应着物理实在,只有它的平方才对应着一种概率。可见量子力学中态的叠加性与经典物理学中若干波的叠加是完全不同的;关于随机性,即在量子力学中占支配地位的是统计确定性。在微观世界里,我们已经无法预言一个微粒的运动,微观世界的规律存在随机性。例如,没有人能够预见一个放射性原子何时会衰变。一个体系中如果不存在某种随机性,那它就不可能是一个量子力学体系(就没有了量子效应)。道理就是:如果没有了随机性,则体系所有的部分都是确定的,而这正是经典物理学涵盖的范畴;关于非定域性,就像在量子力学中存在着一种“怪异”的现象,就是有一种跨空间、瞬间影响个体双方的量子纠缠存在,也就是爱因斯坦所说的“鬼魅的超距作用”。所以,对于初学量子力学的人来说,笔者认为,理解整个量子力学体系的核心主要是理解两点:①量子力学的第二个基本假设(参见4.5节)。理解这一点,对于理解“叠加性”有根本意义上的重要性,对理解整个量子力学的数学框架也有重要帮助。②对于一个微观系统来说,只有其中的某个部分具有真正完全的随机性(或者系统

本来就含有量子非定域关联的子部分),这样的系统才可能拥有量子效应。这一点可以这样来理解:假如系统中所有的部分都没有随机性,那就是说,构成系统的所有部件都是确定性的,这样的系统便是经典系统(再次提了一遍)。至于量子力学的非定域性,虽然它非常重要而必须了解它,但是真正的理解可能还存在困难(世界上也可能还没有人真正理解它)。

量子力学中最重要的概念是什么?关于这样的问题,至今仍有不同的答案。玻尔一直认为,量子力学中最本质的概念应该是他的互补原理。海森伯早期则认为,最重要的概念是他提出的测不准关系以及矩阵力学中出现的非零的对易关系。狄拉克早期也认为,最重要的是“力学量不遵守乘法交换律的假设”。但是到了晚年,狄拉克认识到波函数及其概率解释的概念才是量子力学中最基本的。海森伯到了晚年也认为,量子力学中态(即波函数)的定义,是对自然现象的描述所做出的一个巨大变革。费曼则一贯主张波函数是量子力学中最基础的概念。看来,量子力学大师们都还比较倾向于认为“态”或“波函数”及其概率解释是最重要的概念。

量子力学同任何一门物理学分支一样,既包含了一套如何开展计算的数学方法,又包含着把计算结果同经验事实相联系起来的规则。这些内容对于需要读懂量子力学课程的学生来说,是必须掌握的基本内容。此外,量子力学还有另一方面的内容,就是对量子力学本身的解释的问题。量子力学作为人类高度智慧的结晶,有着非常深刻的含义,对它的解释有的还非常难以理解,或充满着争议。也就是说,大多数的书籍对于量子力学的数学框架的叙述是大同小异的,但是对于一些基本概念,不同的书则可能各不相同,莫衷一是。在这本薄薄的书中,我们“坚决地”建议读者暂时不要去深入思考量子力学中一些还有争议的问题。当需要讨论这方面的问题时,本书中我们尽量采用哥本哈根学派对量子力学的正统解释。

量子物理学是目前关于自然界的最基本的理论。虽然人类在20世纪20年代就创立了量子力学,然而至今仍无法真正理解这个理论的真谛。似乎连20世纪最伟大的科学家们也都没有真正理解它,一直在为之争论不休。当然,我们相信,越是困难或越有挑战性的问题就越能激起人类的好奇心。对于每一个对自然界充满好奇的现代人来说,不理解量子力学就无法

理解我们身边的世界,就不能真正成为一个有理性的、思想健全的人。本书是关于量子力学基础知识的书籍,其目的就是要帮助有好奇心的现代人比较容易地进入量子力学的世界。然后,在此基础上,学习更高等的量子力学(有兴趣的话)。

微观世界如此之小,人类不可能直观地体验。我们只能通过各种实验方法间接地测量,再用抽象的数学手段想象似地加以描绘。因此,我们没有理由要求微观世界遵循我们常见的宏观规律,也没有理由用理解日常现象的方式去理解微观的量子世界。为了大家能够很快地了解量子力学的发展进程,在本书的附录 A 中,我们给出了量子力学发展史比较具体的年表。这部分内容主要参考了参考书目[3],即金尚年老师的《量子力学的物理基础和哲学背景》。

1.2 量子

什么是“量子”?量子这个词是从拉丁文 quantum 而来的,原意是数量。在物理中,“量子”最早是在 1900 年由普朗克在处理黑体辐射时引进的,表示辐射能量的释放和吸收都是不连续的,而是一小份、一小份地进行。普朗克把这每一小份能量叫作一个量子,能量值就只能取这个最小能量元的整数倍(而不能是半个量子的能量)。量子是现代物理学中非常重要的基本概念,研究表明,不仅能量表现出这种不连续的分立化(即所谓的量子化)性质,其他的物理量,诸如角动量、自旋、电荷等,也都表现出这种不连续的量子化现象。量子化现象主要表现在微观世界。这与以牛顿力学为代表的经典物理学有着根本区别,牛顿物理学的特征是它有连续性。

普朗克的量子概念第一次向人们揭示了微观自然过程的非连续本性,或称量子本性。或者说,量子才是这个世界的本质所在,我们看到的所谓“连续的”世界,其实背后是量子化的(请参见书末思考题的答案)。1905 年是所谓的物理奇迹年,这一年爱因斯坦除了发现狭义相对论,还提出了光量子的假说,进一步发展了普朗克关于量子的概念。爱因斯坦认为,光波本身是由一个个不连续的、不可分割的能量量子组成的。利用这一假说,爱因斯

坦成功解释了光电效应的实验事实。其实量子的概念不只是在光波的发射和吸收时才有意义,正如上面提到的,很多物理量都表现出不连续的量子化现象。

1.3 经典物理学和量子力学

什么是经典物理学?这是经常会提到的,也会经常地把经典物理学的结果与量子力学的结果做对比。所以,需要稍稍详细一点解释一下什么是经典物理学。

经典物理学主要由伽利略(1564—1642年)和牛顿(1643—1727年)等于17世纪创立,经过18世纪在各个方向上的拓展,到19世纪得到了全面和系统的发展而达到了辉煌的顶点。到19世纪末,已建成了一个包括力学、热学、声学、光学、电学等学科在内的、宏伟完整的理论体系。特别是它的三大支柱——经典力学、经典电磁学、经典热力学和统计力学已非常成熟和完善,理论的表述和结构也已十分严谨和“完美”,对人类的科学认识也产生了深远的影响。

经典物理学的发展离不开一个伟大的人物,那就是牛顿。他的运动定律描述了万物是如何运动的,他的万有引力定律把行星的运动和地球表面上物体的运动统一了起来。他还发明了微积分,这是一个强有力的数学工具,在物理学的各个分支都大量运用了微积分。虽然微积分成了数学的一个分支,但是数学对物理的重要性却是不言而喻的。牛顿在光学领域也做出了巨大贡献。

经典物理学的各个主要分支包括:

(1) 经典力学。它包含了牛顿三大定律,但主要是以牛顿第二定律的运动方程为基础。在宏观世界和低速状态下,它可以很好地描述物体是如何运动的,可以说明当物体连接在一起时会发生什么,比如建筑或桥梁。经典力学在自然科学和工程技术中有着极其广泛和重要的应用。

(2) 经典电磁学。这是主要研究电磁力,研究磁场和电场的学科。麦克斯韦对电磁理论有里程碑式的贡献,他提出了描述电磁场的麦克斯韦

方程组,并发现了光就是电磁波。当量子效应可以忽略时,麦克斯韦理论能够非常完美地描述电磁现象。电磁学对人类文明的贡献是巨大的。

(3) 经典热力学和统计力学。热力学是研究热现象中物态转变和能量转换规律的学科,以热力学三个定律为基础,研究平衡系统各宏观性质之间的相互关系,揭示变化过程的方向和限度,它不涉及粒子的微观性质。热力学包含了熵的概念,描述了系统的有序和无序,以及告诉我们不同能量类型的不同用处。统计力学根据对物质微观结构及微观粒子相互作用的认识,用概率统计的方法,对由大量粒子组成的宏观物体的物理性质及宏观规律做出微观解释。

(4) 光学。它主要研究光的现象、性质与应用。例如解释光的反射、折射和衍射的原理等。光在棱镜中的折射以及透镜是如何聚焦光线的,这对于望远镜、显微镜和照相机的制作都很重要。望远镜的发明使我们能够观测宇宙中不同的天体,这促使了宇宙学和天体物理学的诞生。光不需要通过任何介质,可以在真空中传播。

(5) 流体力学。它是研究流体(包括液体、气体和等离子体)是如何流动的科学。利用流体力学可以计算出飞机机翼产生的升力是多少,以及汽车的空气动力学是怎么运作的。研究流体力学是出了名的难,因为在微观尺度,分子的运动是非常复杂和快速的,而这就需要复杂的混沌理论等。

以上这些就是经典物理学的主要内容了。一直到 19 世纪末,我们对宇宙的理解都是基于以上这些物理学的分支。在这个时期,物理学家认为宇宙中所有东西的运作像时钟那般准确,取得某一时刻宇宙的完整信息,原则上(哲学意义上)就能够得到宇宙在未来和过去任意时刻的情况,这就是所谓的拉普拉斯决定性。

什么是量子力学? 回答这个问题是本书的任务。在总论中已经指出,量子力学的研究对象涉及原子、分子、凝聚态物质,而且包括原子核和基本粒子等,研究的是微观世界物质粒子的运动规律。量子力学是世界目前已知的最正确的物理理论,而经典物理原则上来说都是近似成立的。至此,我们对量子力学的认识暂且就到此为止。

1.4 什么时候必须用到量子力学

到底什么时候才会用到量子力学呢？很显然，我们在造桥、挖隧道、建房子以及绝大多数宏观的日常行为中都用不到量子力学。在这些情况下，牛顿力学已经够用了！专业一点地说，通过对体系的受力分析，再使用位置、轨迹、速度（以及速度的轨迹）、加速度等这些经典力学的概念，就可以非常好地描述像造桥和建房子这些日常行为了。换句话说，在绝大多数的宏观领域中使用量子力学是完全没有必要的，牛顿力学是量子力学在宏观尺度下非常好的近似。

在日常的宏观尺度下用不到量子力学，所以有些人可能会认为，量子力学与我们的日常生活相距很远。当然，这是完全错误的。我们当今生活的很多“特征”都与量子力学有着密不可分的紧密关系。例如：我们用的手机、互联网、计算机、电视机等以及大量使用了计算机的各行各业（如银行），这些都与量子力学有着密切的联系。没有量子力学，就不会有这些现代人越来越离不开的东西。

笼统地说，量子力学是在微观世界的领域中起作用的！主要是在原子、亚原子（如原子核和基本粒子）、分子和材料的微观领域里起决定性的作用。当然，宏观的量子效应也是存在的，如超导、超流、约瑟夫森效应以及量子霍尔效应等。通常来说，宏观的量子效应都是非常重要的，发现或者只是帮助理解宏观的量子效应通常都是可以获诺贝尔奖的。此外，固体和液体等凝聚态物质的宏观性质也是由原子之间微观的相互作用细节决定的：我们周围的物质大都可以看成是由原子构成的，而原子-原子之间的相互作用力使得原子们“凝聚”起来，从而使物质得以形成。如果这样看，似乎我们只需“力”的概念就可以理解物质的构成了。但是实际上，如何理解和描述这些原子-原子之间的相互作用，从而理解原子们凝聚起来的本质，就恰恰必须用到量子力学。这方面，经典力学是完全不能胜任的！要解释清楚原子之间的相互作用，讲清楚物质形成的原动力，没有量子力学是完全无法想象的。

力、位置、运动轨迹、速度以及加速度等这些经典力学的概念已经根深蒂固地存在于我们的脑子里，我们对日常的许多宏观物质的运动都习惯于用这些概念来分析。例如，在讨论汽车的运动时，通常可以使用汽车在哪里（即位置）、速度是每小时多少千米、踩油门（加速度）、刹车（负加速度）等这些概念。这些概念确实可以非常精确地描述汽车的运动状态。而量子力学开始适用的时候，恰恰是像位置、运动轨迹、速度以及加速度等这些概念不再适用的时候。例如，已经提到的电子在原子中的运动。实验已经充分证明，电子在原子中运动，其位置、运动速度等概念已经不再是正确的，或者说，根本就无法测量出电子的位置和速度等这样经典的物理量。取而代之的是概率和平均值的说法，例如电子出现在空间某一点的概率有多大，速度的平均值有多大等。

那么，什么时候使用牛顿力学不会出问题呢？只要一个粒子的波动性表现得不明显，其粒子性远大于其波动性时，就是牛顿力学适用或近似适用的时候。当我们建一座大桥时，完全没有必要用量子力学，只要用牛顿力学就完全足够了。而且，也不是说，在微观世界里牛顿力学就完全不能用。我们知道，当尺度小到埃的量级时（即原子的尺度，1 埃 = 10^{-10} 米），微观粒子的波动性（或说量子效应）可能会相当明显。此时当然必须使用量子力学来处理。但是，并不是说尺度小于埃或远小于埃就必须用量子力学。对于原子核（尺度在 0.0001 埃）的运动这种非常微观的事情，其实牛顿力学方程还是近似适用的。其原因在于，原子核的质量是相对较大的，其波动性的一面不是很明显。有一门所谓的“经典分子动力学”的学问，就是将原子核的运动用经典的牛顿方程组来描述的。

有一种“通用的”说法，可以用来说明什么时候应该使用量子力学，那就是：当普朗克常量 h 起作用时就是应该使用量子力学的时候；当普朗克常量可以被略去不计时，就可以使用经典物理学。这种说法当然是准确的，只是听起来好像对我们理解量子的概念什么时候起作用并没有很大的帮助。另一个类似的说法是，当牛顿运动方程不能适用时就应该使用量子力学方程（这个说法对我们好像也没有什么帮助）。所以，有必要说明一下什么时候量子力学会过渡回经典力学？这就不得不谈到对应原理。关于对应原理