

# 量子信息基础

## 第一章：量子史话

授课人：林 星

浙江大学信息与电子工程学院



# C1-1 从经典物理到旧量子论

# 量子力学的影响力

---

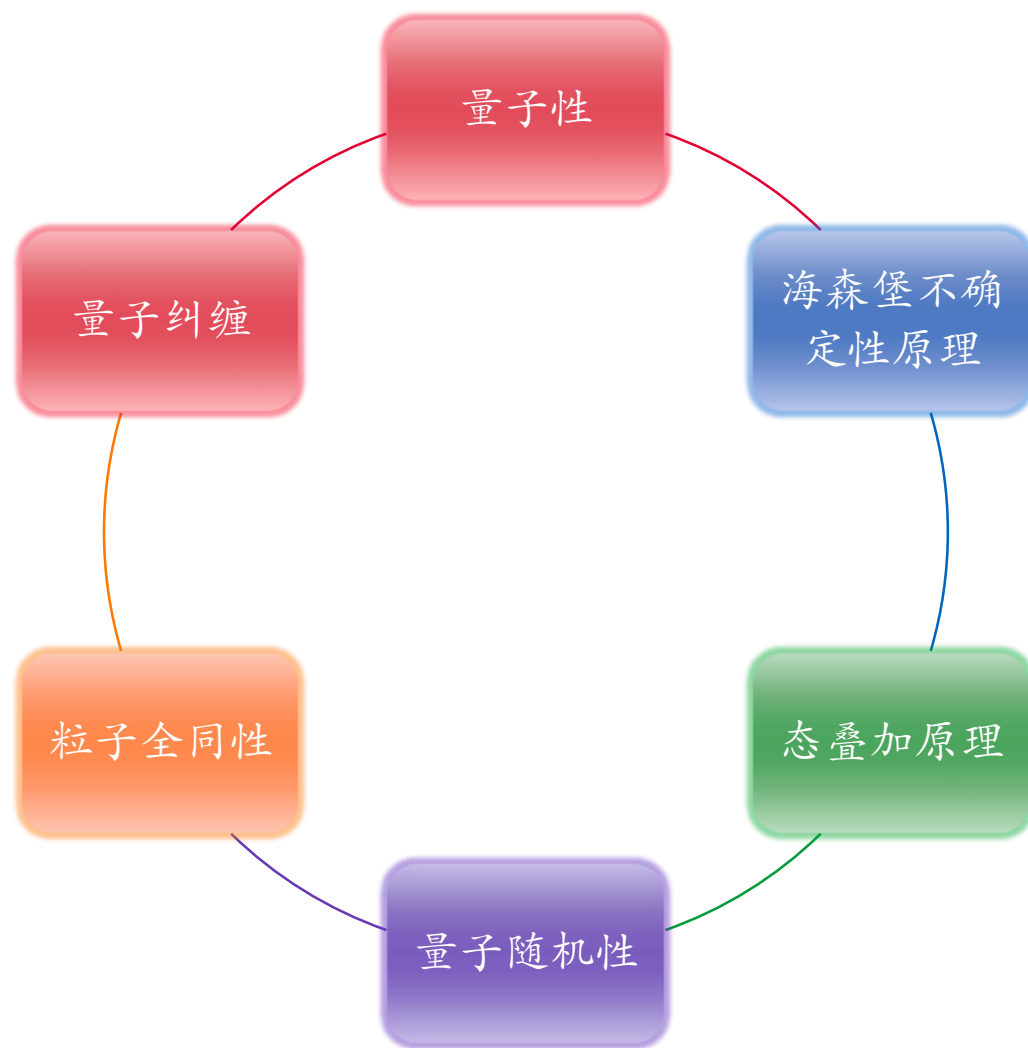
- 量子力学可能是人类有史以来设计**最成功**的理论。它可以精确地描述夸克、中微子、原子等微观粒子行为，在其基础上发展出高能物理的标准模型，至今仍是人类拥有的最为精确的基础理论之一。
- 量子力学预测了固态系统中的电子行为和统计特性。孕育出了激光器、微电子芯片、半导体太阳能电池、发光二极管、CCD等信息技术和能源技术。
- 量子力学解释了元素周期表的排列，发展出了量子化学。
- 量子力学解释了光合作用中的能量传递和DNA分子的稳定性，发展出了量子生物学。
- 对量子力学的深刻思辨推动了量子通信、量子测量、量子计算等前沿科技的发展。现在被称为**第二次量子革命**。

# 什么是量子力学

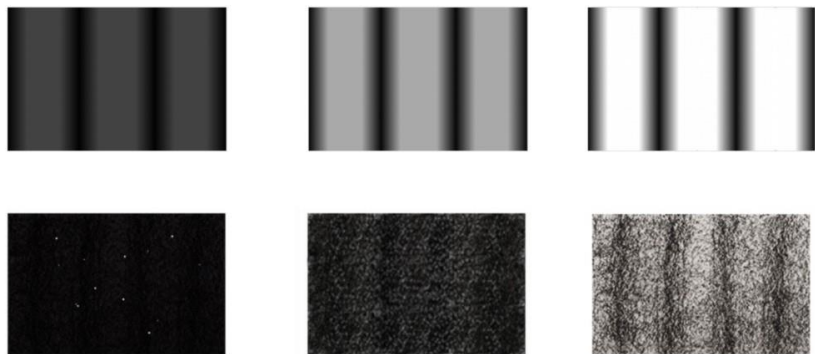
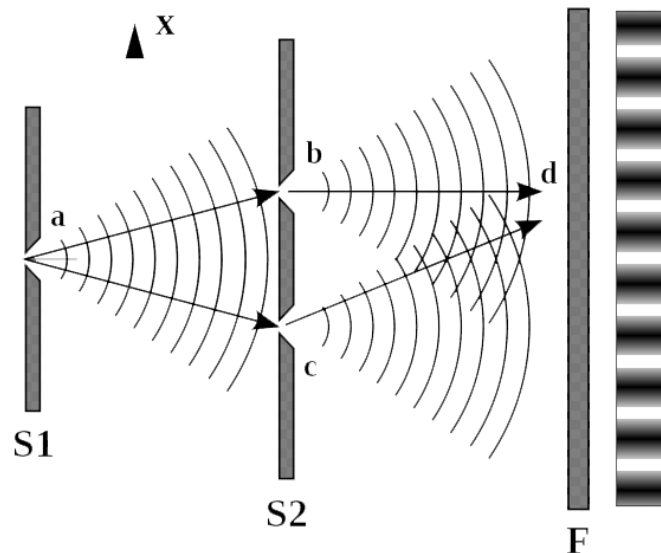
---

- 什么是量子？量子的英文quantum，源自拉丁文quantus，它的原义是多少。量子现在是一个物理专业名词，它是场的最小激发。
  - 电磁场-光子（1900年由M. Planck 发现）
  - 强相互作用-胶子（传递夸克间的相互作用）
  - 弱相互作用-W/Z玻色子
  - 引力场-引力子
- 什么是力学？描述物质受到其他物质/场的作用时，力学量发生变化的规律的科学。
  - 位置、动量、能量
  - 自旋
- 量子力学是研究微观粒子运动规律的物理学分支。本课程中涉及的微观粒子主要包括电子和光子（量子力学和量子电动力学）

# 量子力学的特征



# 波粒二象性



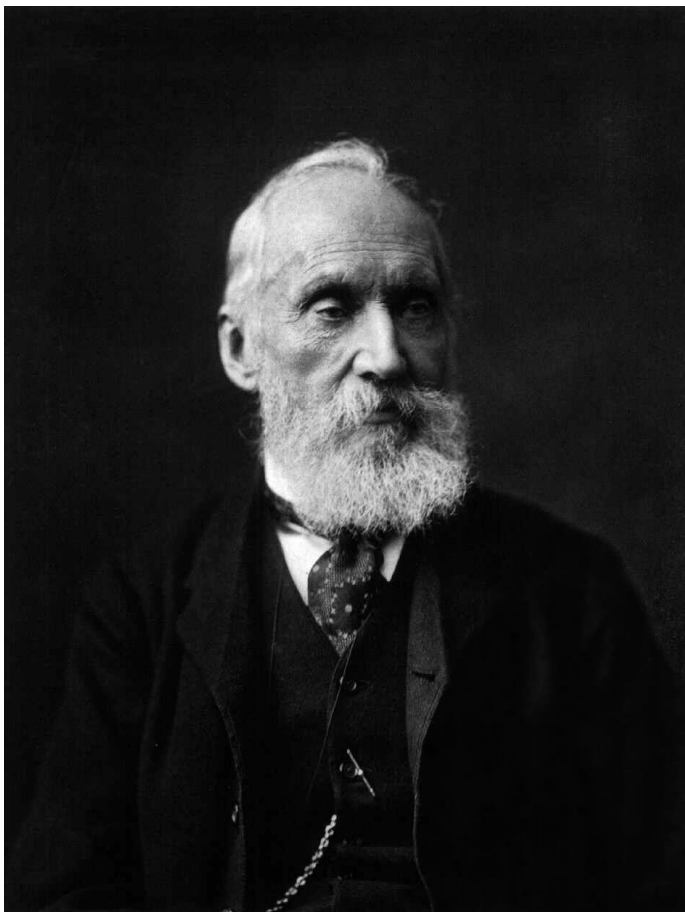
- 杨氏双缝实验：一种演示光子或电子等等微观物体的波动性与粒子性的实验。是一种“双路径实验”。最初的杨氏双缝实验是为了验证光子的波动性。
- 量子力学中的双缝实验验证了电子的波动性。而且这种波动体现出了“几率波”的特点。
- 双缝实验被反复验证，并衍生出了量子擦除实验等一系列新的版本。

# 经典物理学回顾—1900年之前

---

- 由牛顿(Isaac Newton, 1642-1727)建立的经典力学和麦克斯韦(James Clerk Maxwell, 1831-1879)建立的电动力学所构筑的经典物理体系几乎无懈可击，并由无数的实验所验证。
- 牛顿力学三定律支配了宏观物体的机械运动。万有引力定律可以精确地预测行星的运动规律，并帮助预言了海王星的存在。
- 麦克斯韦预言了光波是一种电磁波。赫兹在柏林的实验室验证了无线电波的存在。无线电波像光波一样存在反射和衍射，正如麦克斯韦所预言的一样。
- 简而言之，经典物理看起来极其强大、精确、完备，当时的物理学家甚至认为整座物理学大厦只剩下修修补补的工作了。
- 可事实并非如此。

# 经典物理大厦的“两朵乌云”



William Thomson

- 开尔文爵士 (Lord Kelvin, 1824-1907)曾在格拉斯哥大学说过，在牛顿学说的天空上飘着两朵乌云。
- 第一朵乌云： 迈克尔逊—莫雷实验。导致了相对论的诞生。
- 第二朵乌云： 比热问题。能量均分原理受到挑战，导致了量子理论的诞生。

The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, 2(7), 1-40 (1901)



# 填补小数点后六位的工作



- 迈克尔逊(Albert Michelson, 1852-1931)曾评论开尔文爵士的话，并终生为之后悔。
- “物理学剩下的事情就是填充小数点的后六位”
- 让我们看一下经典物理学的基本假设。最终都被证明是可疑的。

# 经典物理的基本假设

---

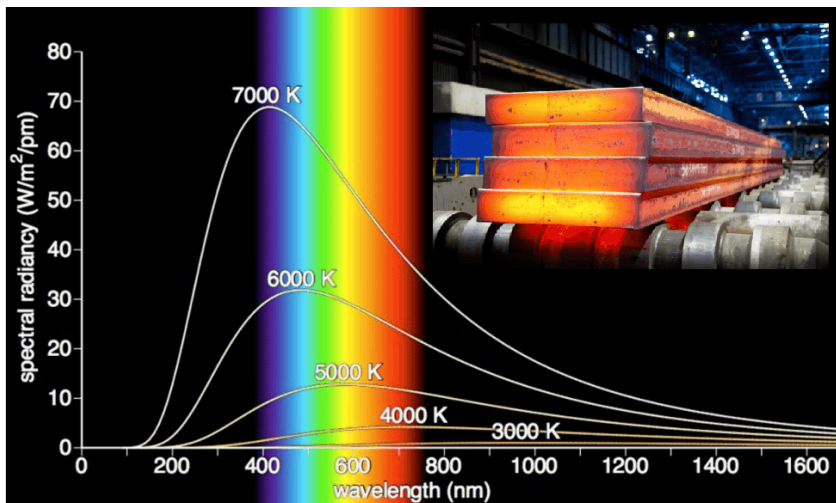
- 假设（机制）：整个宇宙就像一部巨大的机器，在绝对的时间和空间框架中，各种复杂运动都可以被理解成机器内部部件的简单运动。
- 假设（因果性）：牛顿学说暗示所有运动都有一个原因，如果一个物体呈现运动的状态，我们可以推测出运动的原因，这可以理解成简单的因和果的关系。
- 假设（决定论）：如果知道宇宙在某一时刻（比如当前）的状态，根据运动定律，我们可以确定以前和今后的宇宙状态。

# 三个关键实验

---

- 量子时代之前的三个实验，经典物理学无法解释：
  - a. 黑体辐射（导致普朗克的量子论）。
  - b. 光电效应（导致爱因斯坦的光量子学说）。
  - c. 原子光谱中的明亮线（导致玻尔-索末菲原子模型）。
- 每个实验都涉及到物质与辐射的相互作用。
- 三个实验分别成功地被普朗克、爱因斯坦和玻尔所解释。
- 上述三人的工作以1913年玻尔的原子模型为顶峰，统称为旧量子论。

# 黑体辐射 (Black-body Radiation, BBR)



<https://www.nuclear-power.com/nuclear-engineering/heat-transfer/radiation-heat-transfer/blackbody-radiation/>



<https://zhuanlan.zhihu.com/p/108237274>

- 当一个物体被加热，其辐射的电磁波谱包含非常宽的频率。
- 一个密闭加热炉（腔），从小孔中出射的光谱，称为黑体辐射谱。
- 黑体辐射谱的峰值频率随温度升高而提高。在19世纪末实验测量。

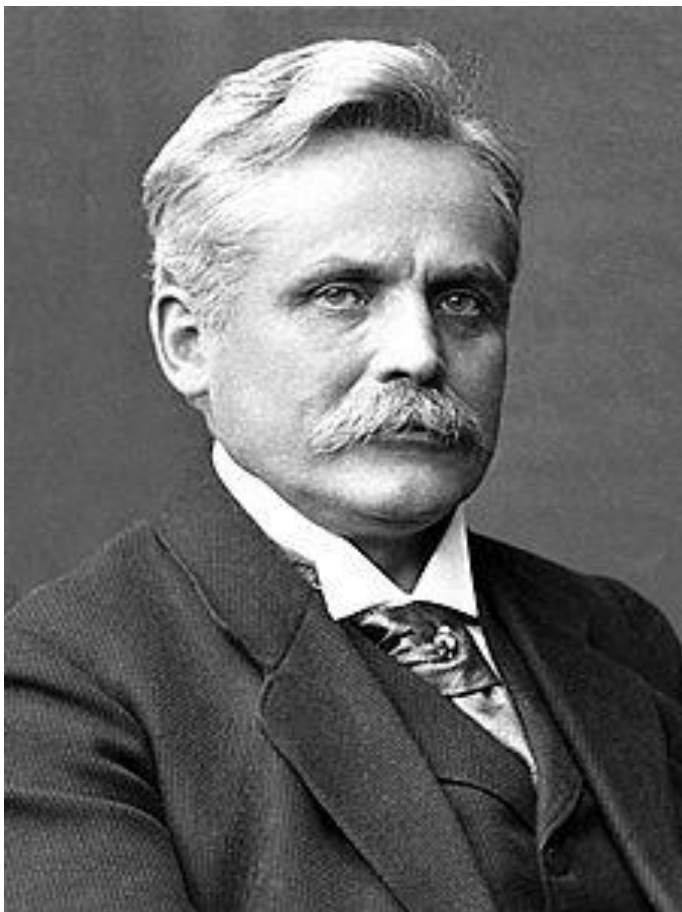
# 黑体的定义

---

- 黑体的定义：能够完全吸收落入其中的所有电磁波的物体。
  - a. 在腔内，辐射会被器壁吸收，并会被重新辐射，黑体达到一种热平衡状态。
  - b. 小孔出射的光是器壁的辐射光，而非反射光。
  - c. 辐射谱描绘了黑体的特征。
  - d. 在热平衡条件下，黑体辐射谱只取决于温度。
- 名称叫黑体，但在高温下，辐射光是可见的，比如800摄氏度下是红外光，不管黑体内部是什么物质（煤炭、玻璃或者金属）。

# 维恩 (Wilhelm Wien, 1864-1928)

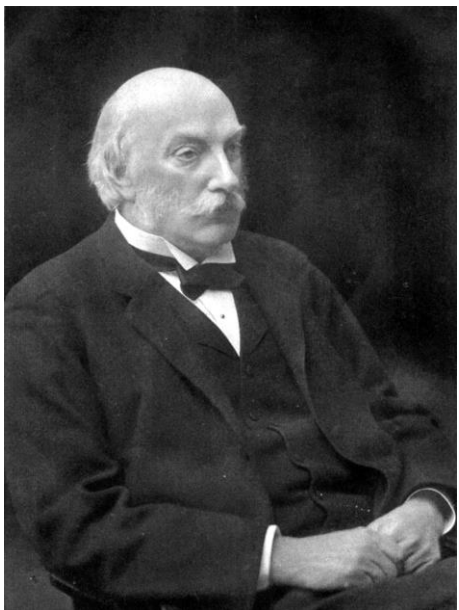
---



- 在1890年代，记录了黑体辐射的颜色分布（在红外和紫外间）。
- 实验得到了黑体辐射谱与温度 $T$ 的关系。
- 基于一些并不十分可靠的理论假设，维恩得到了黑体辐射谱的理论公式，但只在高频区与实验数据吻合。



# 瑞利(Lord Rayleigh, 1842-1919)和金斯(Sir James Jeans, 1877-1946)



John William Strutt



James Hopwood Jeans

- 瑞利和金斯得到了另外一个公式。
- 他们的公式在低频区与观测数据吻合得非常好。
- 理论预期高频区域的辐射特征令人震惊：用经典理论预测黑体辐射在紫外区将会出现无限大的辐射强度。
- 紫外灾难！

# 紫外灾难

---

- 物理学中的严重悖论：如果瑞利—金斯公式是正确的，则任何人坐在壁炉前都会非常危险。但他们的所用的方法在当时看来并没有什么缺陷。
- 他们所用的方法是将统计物理原理用于电磁波中，将气体分子运动的麦克斯韦分布和能量均分原理应用于黑体辐射中，亦即将所有辐射能量在各种可能的振动频率中均匀分配。
- 问题：并没有对振动模式的数目加以限制（频率无限高的光辐射都可以包含在腔中）。在温度升高时，对高频区的辐射预测会迅速升高。



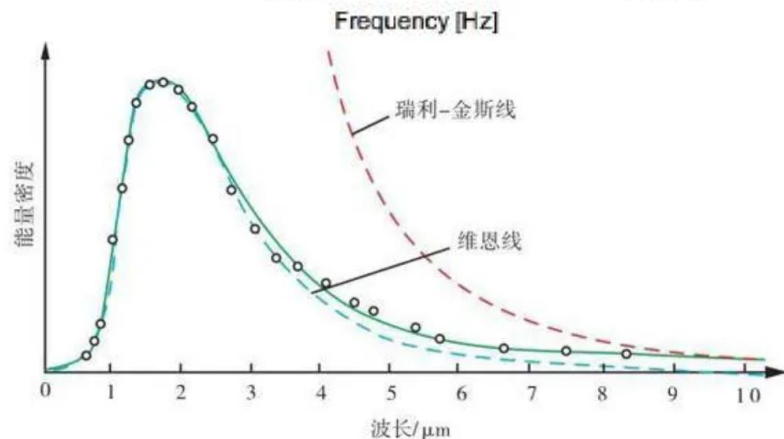
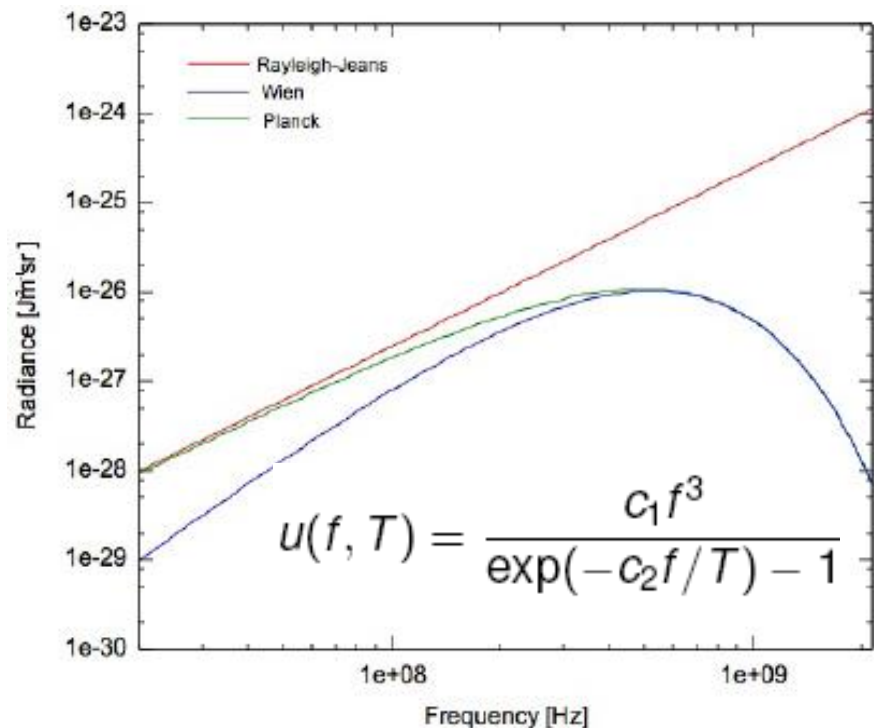
# 普朗克(Max Planck, 1858-1947)

---



- 慕尼黑大学物理学教授Philipp von Jolly曾告诫他不要学物理，因为“这个领域所有重要的事情都被发现了，剩下的就是修修补补的事情了”。普朗克回答说，他并不想发现什么新事物，只是想了解已知的基本规律，于1874年在慕尼黑开始了学习生涯。
- 1879年获得博士学位，先后在慕尼黑、基尔和柏林教书，主要精力在热力学方面。
- 1918年获诺贝尔奖。

# 黑体辐射公式



- 1900年，普朗克成功得到了黑体辐射公式，跟实验数据异常吻合。
- 在热力学方面做了一些假设，将谐振子的能量与它们的频率联系起来，最终得到了正确的公式并于1900年10月发表。其中 $u$ 是辐射能量， $f$ 是频率， $T$ 是温度， $c_1$ 和 $c_2$ 是两个常数。
- 普朗克得到了正确的辐射谱公式，但其背后的物理意义是什么？

# 普朗克的尝试

---

- 经过多次无效尝试后，普朗克极不情愿地求助于玻耳兹曼对热力学第二定律的统计学诠释，并应用了玻耳兹曼的三个熵的概念：
  - a. 玻耳兹曼计算熵的统计方程。
  - b. 玻耳兹曼给出的在平衡态熵必须极大的条件。
  - c. 玻耳兹曼计算热力学概率的方法。
- 普朗克将谐振子能量分为任意小但必须是有限的成分。
- 总能量为 $E = Ne$ ，其中 $N$ 是整数， $e$ 为能量的小量。
- 普朗克的想法， $N$ 趋于无穷大， $e$ 趋于无穷小时，通过极限来求 $E$ 的正确解。

# 能量的量子化

---

- 普朗克找到了辐射谱公式的理论基础，但是他必须假定能量是不连续的。
- 如果这是正确的话，意味着谐振子不能以连续的方式来吸收和辐射能量，必须以最小的、不可分的能量单元 $hf$ 为单位。普朗克将这个能量单位为能量子。
- 从理论上解释了为何经典理论在高频区失效。
- 普朗克提出能量量子化的概念可视为量子力学诞生的标志。

# 普朗克的立场

---

- 普朗克认为能量量子化的概念是“一种纯粹形式上的假设”，“一种数学上的假设，并不意味着物质与辐射间真正的能量交换”。
- 到1908年普朗克转向这样一种观点，能量量子化行为代表着一种经典物理学无法解释的物理现象。
- 在接下来的时间里，普朗克试图找到能量子的经典意义，但是毫无结果，以至于后来普朗克在量子理论的进一步发展中的不再有任何实质贡献。

# 光电效应



- 莱纳德(Philipp von Lenard, 1862-1947)，因在阴极射线方面的研究，1905年诺贝尔物理学奖获得者。
- 他试图将阴极射线（后被证实是电子流）聚焦于金属箔片。1899年，他将阴极射线换为光，做同样的实验，发现金属会有光致电子发射。
- 作为一个经典物理学者，他曾预期电子会从光束中获得动能，但是实验结果并不支持这一想法。

# 莱纳德的观察

---

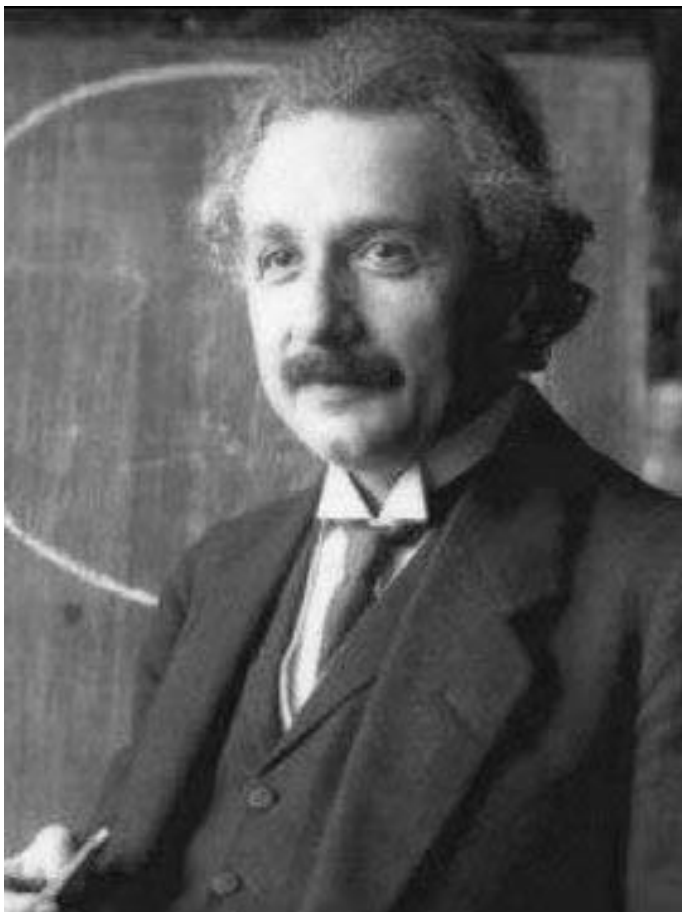
- 莱纳德有几个出人意料的观测结果：
  - a. 在1902年，他发现逸出电子的能量与入射光强无关，但与光频率有关。
  - b. 给定入射光的频率，金属逸出电子的束流与光强成正比。
  - c. 存在一个阈值光频率，只有高于此频率，才会有电子逸出，而与光强无关。

莱纳德在希特勒上台后加入了纳粹党籍，在多次在公开场合批判犹太人科学家爱因斯坦，宣扬希特勒的理论，推崇“雅利安物理学”。1945年二战结束后，盟军考虑到莱纳德年事已高，免除了对他的非纳粹化措施，但取消了他的海德堡大学终身教授名誉。莱纳德于1947年在德国梅塞尔豪森去世，他的遗产现存于慕尼黑的德意志博物馆。



# 爱因斯坦(Albert Einstein, 1879-1955)

---



- 此时爱因斯坦还只是瑞士伯尔尼专利局的一个职员。
- 1905年，爱因斯坦的奇迹之年，发表了5篇里程碑式的论文，永久性的改变了物理学。
  - a. 光电效应（1921年诺贝尔奖）。
  - b. 博士论文：分子大小的新测定。
  - c. 布朗运动。
  - d. 狭义相对论：论动体的电动力学。
  - e. 质能方程。

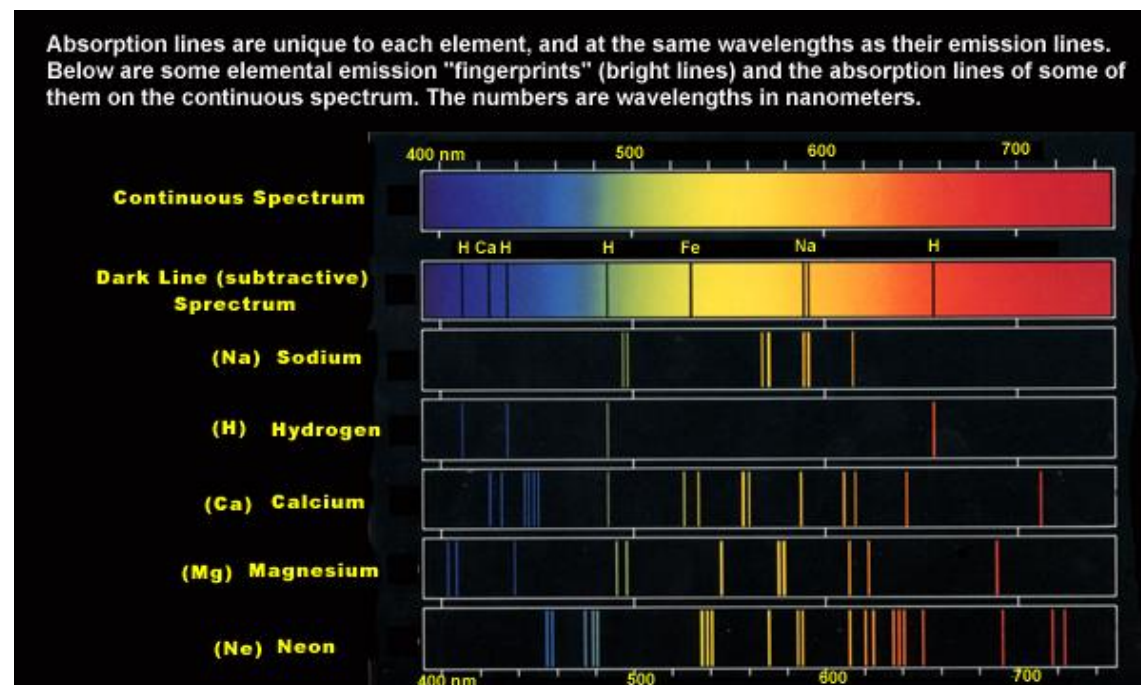
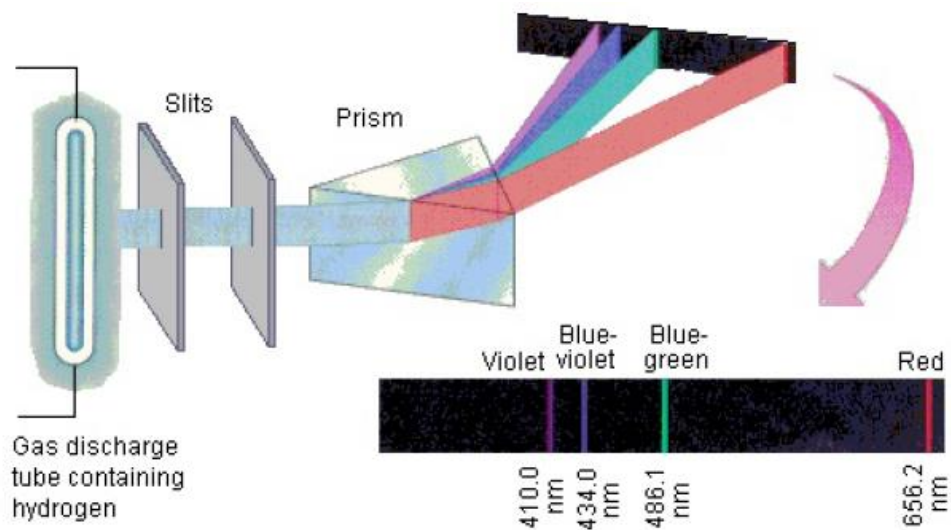


# 爱因斯坦对光电效应的解释 [Ann. Phys. 17 (1905) 132]

- 爱因斯坦的研究表明由莱纳德发现的这些令人困惑的光电效应其实是可以解释的，只要假定光是由粒子或者说光子组成的。
- “粒子和波的行为有本质的不同，光虽然被广泛认为是一种波，但在很多现象里，比如黑体辐射、荧光、和光致阴极辐射，光的行为更像粒子。”
- 设想一个光量子把其全部能量 $hf$ 传递给电子，电子到达金属表面会损失部分能量，这意味着最靠近金属表面的电子会有最高的能量，其动能为 $E_k = hf - P$ ，其中 $P$ 是逸出功。

# 光谱中的明亮线

- 炽热气体辐射的光谱与炽热固体辐射的光谱不同。不同的气体会会有不同的辐射谱。



# 弗朗和费(Joseph von Fraunhofer, 1787-1826)



- 1814年，弗朗和费发明了第一台分光光谱仪。谱线给出气体的精确信息。
- 他观察太阳光谱时，发现了无数条暗线，即夫琅和费线，在天文光谱学中非常重要。



# 巴耳末(Johann Jakob Balmer,1825-1898)



- 在数学上对观察到一些谱线数据进行了整理。
- 非常令人惊奇的，巴耳末公式非常精确的预测了4条氢的谱线。

$$f = R \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

- 其中 $R$ 是一个常数， $n_f$ 为2， $n_i$ 为3，4，5，和6。

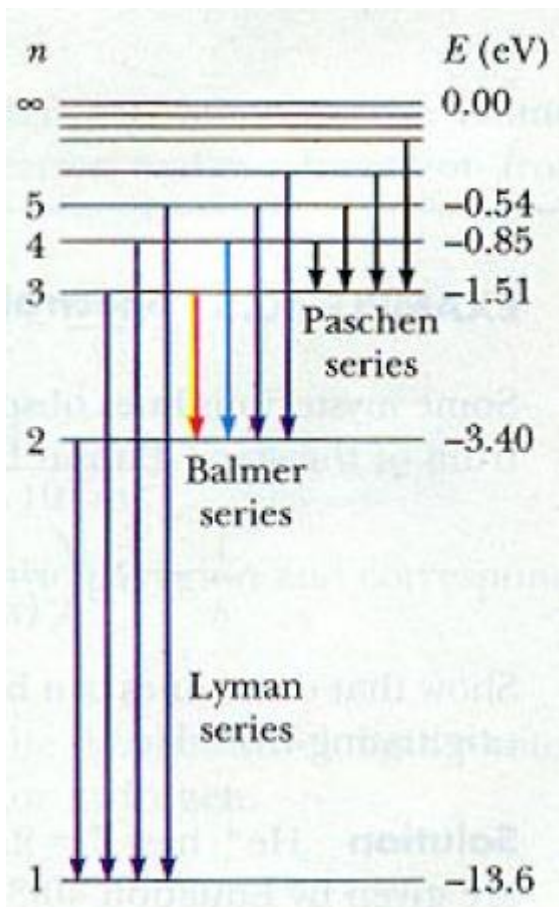
# 氢的辐射谱(巴耳末, 1885年)

Table: Compare the values for the frequencies (in  $10^6$  MHz) for  $n_f = 2$ :

Experimental values	From Balmer Formula	Value of $n_i$
457.170	457.171	3
617.190	617.181	4
691.228	691.242	5
731.493	731.473	6

这不是偶然！

# 巴耳末公式的氢谱线



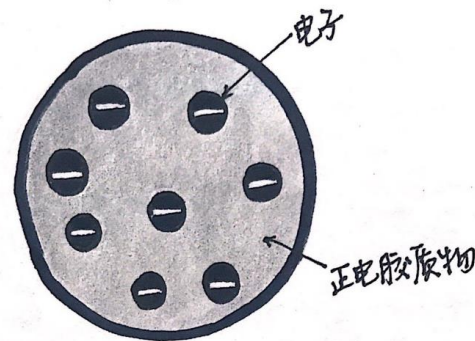
- 氢原子的辐射/吸收对应着**能级**的下降/上升。
- 氢原子的所有谱线对应着各种 $n_f$  和 $n_i$  的组合。
- 今后的关于原子的所有理论必须要兼容巴耳末公式。



# 汤姆逊(J. J. Thomson, 1856-1940)



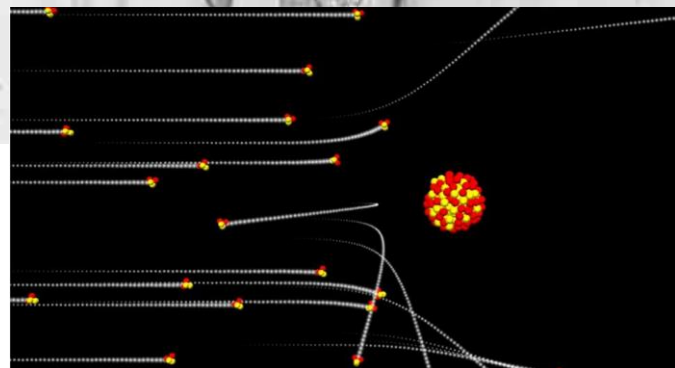
- 证明电子有一定的荷质比，是粒子而非阴极射线(1897)。
- 在19世纪的最后5年，其它一些射线也被证明更像粒子(如alpha射线，beta射线)。
- 下一步的问题是弄清楚这些粒子是如何构成原子的。
- 枣糕模型。



# 卢瑟福(Ernest Rutherford, 1871-1937)



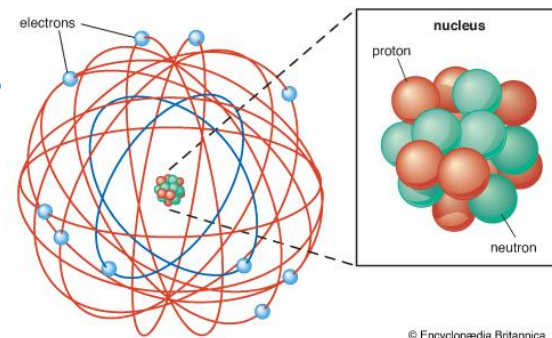
- 卢瑟福，汤姆逊的学生，1908年诺贝尔奖。
- 在1905年和他的学生一起做了一个非常重要的实验，用alpha粒子来轰击金箔。他们意识到这种轰击实验是分析原子内部结构的理想方法。
- 大部分alpha粒子都通过了金箔，而极少数粒子以很大的角度反弹回来。





# 卢瑟福的原子模型

- 原子几乎是空的，原子核在空间上只占了原子的十亿分之一。
- 这样产生了许多新问题：
  - a. 电子跟原子核的关系如何？
  - b. 原子核是如何构成的？原子核如何避免由于正电荷间的排斥引起的爆炸？
  - c. 电子为何不受电磁引力作用而落入原子核？
- 卢瑟福提出了原子的行星模型。但是电子围绕原子核运行，会有加速度，按照经典理论会辐射电磁波而失去能量。卢瑟福的模型是不稳定的！



# 玻尔(Niels Bohr,1885-1962)

---



- 量子物理的“祖父”，几乎同每个在量子力学方面有重大贡献的人都有过合作。
- 1911年，到英国剑桥大学，随时携带英语字典和狄更斯全集。
- 1912年转到曼彻斯特大学跟卢瑟福学习。
- 1922年诺贝尔奖（他的儿子1975年得诺贝尔奖）。

# 原子的构成

---

- 尝试解决卢瑟福模型的稳定性问题，推测原子存在一些特殊的稳定轨道，电子在这些轨道上运行而不会掉到原子核中。对玻尔来说，这很清楚，在原子内部经典物理并不适用！
- 这些轨道也许和爱因斯坦/普朗克的量子论之间有些联系（一定频率的光对应的能量子为 $E = hf$ ）。
- 当他在1913年早期了解到巴耳末公式，就有了重大突破，他的新的氢原子模型可以解释巴耳末公式。这标志这原子模型量子理论的诞生。

# 量子化角动量

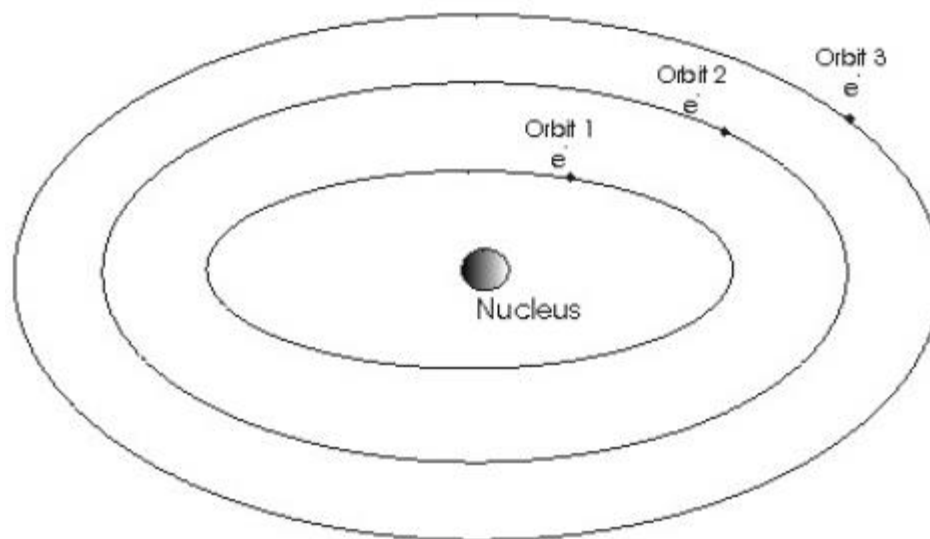
- 1912年，J. W. Nicholson (1881-1955)将电子的角动量量子化。Ehrenfest几乎在波尔同时提出了角动量量子化的条件。
- Nicholson认为普朗克常数是跟原子相联系的，电子的角动量只能以离散的方式增加或减少。 $m$ 为质量， $v$ 是切向速度， $R$ 是轨道半径。

$$L = mvR = \frac{nh}{2\pi}$$

- 在玻尔模型中，如果一电子从初始状态被激发，该电子只能跃迁到这样的一些轨道，这些轨道的角动量必须是 $h/2\pi$ 的整数倍。这是玻尔模型的最根本的假设，电子的轨道角动量必须是以普朗克常数为单位的！

# 玻尔的轨道量子化假定

- 玻尔的第一个假定。
- 量子轨道条件：原子存在一些特殊的轨道，即所谓的稳态轨道，电子在这些轨道运行不会辐射能量，这些轨道对应的角动量是量子化的：
$$L = mvR = \frac{nh}{2\pi}$$



# 玻尔轨道半径

---

- 玻尔结合经典物理和量子物理推导出来稳态电子轨道的半径：

$$r = \left( \frac{h^2}{4\pi^2 m q^2} \right) n^2,$$

- 这样有  $r_n = n^2 r_1$ ，其中  $r_1$  是玻尔半径，最小轨道半径，即氢原子处于基态时的半径。玻尔估算得到玻尔半径值为5.3 nm。

# 玻尔的第二个假定

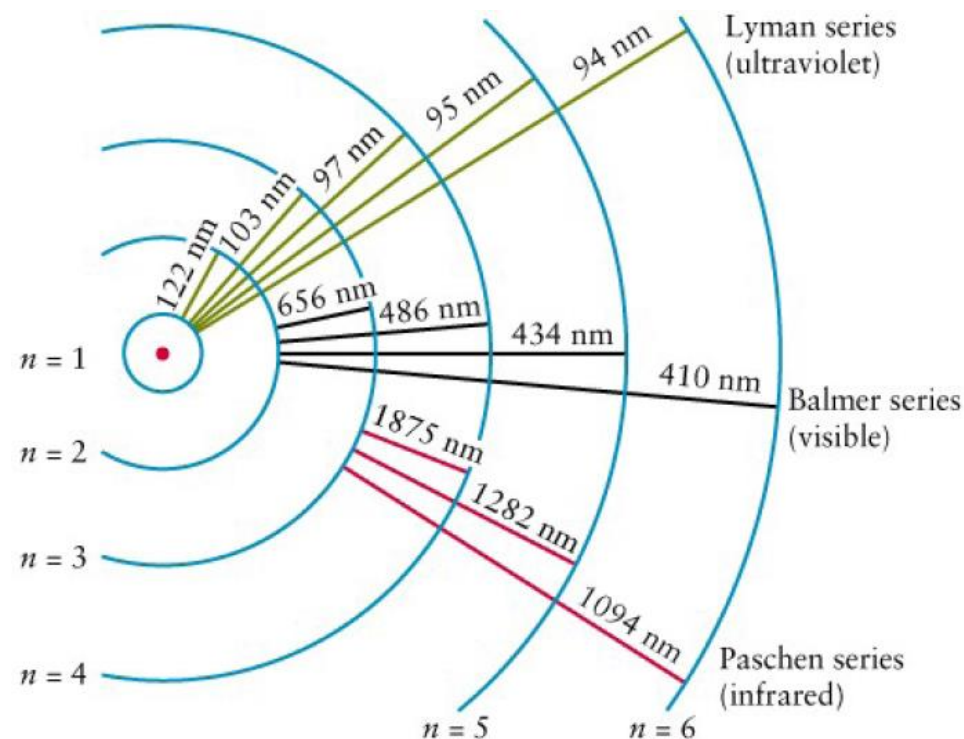
- 量子跃迁条件:  $hf = E_i - E_f$
- 电子在这些稳态之间的突然跃迁会吸收和辐射光，光的频率由普朗克/爱因斯坦关系决定:



# 玻尔推导出巴耳末公式

- 玻尔基于半经典、半量子的模型推导出来巴耳末的谱线公式：

$$f = \frac{2\pi^2 m q^4}{h^3} \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$





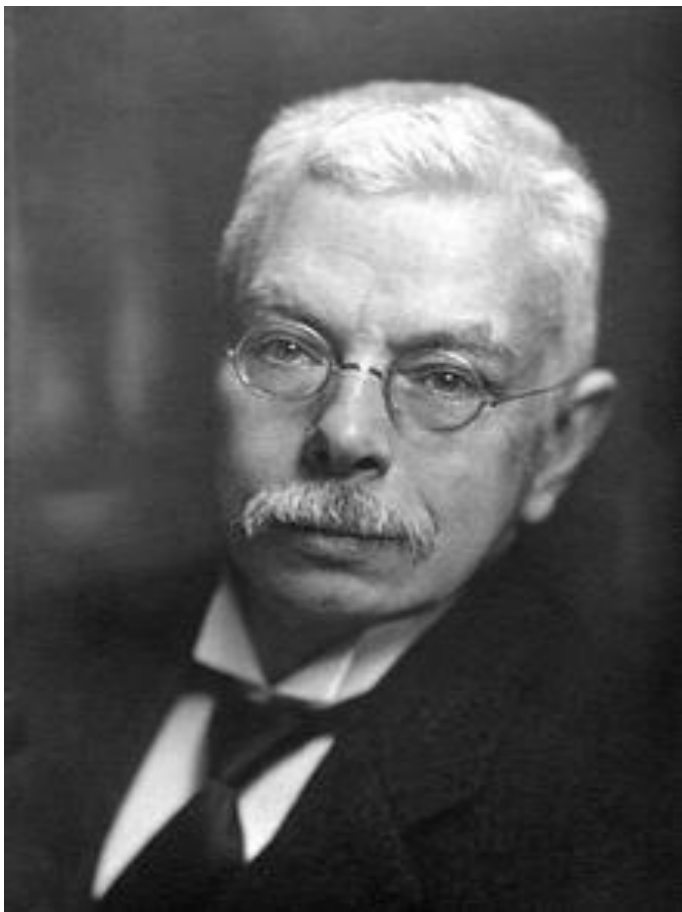
# 索末菲(Arnold Sommerfeld, 1868-1951)

---



- 慕尼黑大学的物理学家。
- 发现了更多的谱线。需要更复杂的原子模型。一个稳态轨道，固定的 $n$ 值，对应不同的椭圆形。意味着一个 $n$ 值对应的几个稍有不同的能量。
- 多重谱线出现。提出另一个量子数： $l$ 。

# 塞曼(Pieter Zeeman, 1865-1943)



- 1890年代：Zeeman将原子置于磁场中，发现会有新生的谱线。真正的原子理论必须解释这个Zeeman效应（洛伦兹解释了该效应，后二人于1902年共获诺贝尔奖）。
- 索末菲：轨道的取向非常重要，当有外场时，电子会从几种可能的取向中选取一个，这样就允许了不同的能量值。
- 实际上就是轨道角动量在磁场方向的投影，也是量子化的，磁量子数 $m$ 。

# 三个量子数： $n, l, m$

---

- 玻尔在他的模型中采纳了索末菲的计算：基于三个量子数的原子跃迁选择定则：
  - $n$ ：轨道的大小
  - $l$ ：轨道的形状
  - $m$ ：轨道角动量的指向
- 原子的每个分立的能量状态都被赋予一组量子数，这些状态之间的跃迁产生了各种谱线。
- 这个模型是否可以解释所有的谱线？不能。还需要引入另外一个量子数。

## 泡利(Wolfgang Pauli, 1900-1958)



- 1921年，在他拿到博士学位的两个个月后，发表了一篇237页的关于广义相对论的评论文章，爱因斯坦评论道：“如此成熟、宏大的著作，难以想象其作者才21岁”。
- 1924：不相容原理。
- 1924/5：电子自旋。
- 1927：泡利矩阵。
- 1930：预测中微子的存在。
- 1945：诺贝尔奖。
- 之后对量子场论作出了卓越的贡献。

# 反常塞曼效应和电子自旋

---

- 反常塞曼效应是指在弱磁场中的原子，由于磁场足够弱，因而自旋轨道耦合能量不能忽略。原子能级的精细结构因弱磁场的存在而进一步发生分裂，称为反常塞曼效应。
- 泡利假设电子内部有隐藏的自旋，产生额外的角动量，可以解释反常塞曼效应。这样就有第四个量子数，自旋量子数。
- 但关于电子自旋，并没有明确的物理图像。
- 电子自旋的角动量是原子轨道角动量 $h/2\pi$ 的一半，所以也叫做1/2自旋。

# 泡利不相容原理

---

- 为什么所有的电子不能同时处于基态？泡利的想法：每个量子态 $(n,l,m)$ 只能容纳不超过两个的电子，并且每个量子态都有排他性的轨道（空间量子化）。如果算上自旋量子态，就有了四个量子数。
- 泡利原理：每个量子态只能容纳一个电子，如果一个量子态满了，电子则按从低到高的次序填充下一个量子态。
- 这就解释了为什么不是所有的电子都挤到基态，也解释了每种元素的化学性质。泡利原理适用于所有原子中的所有电子，也适用于固体系统，这实际上为能带理论奠定了基础！



# 索尔维会议——布鲁塞尔1927





# 索尔维会议——布鲁塞尔1927

---

- 比利时企业家索尔维赞助召开的系列国际会议，出席者都是受邀请参加，并且要求每次会议都集中在某个特定议题。
- 前五次会议在1911年和1927年之间召开，在20世纪的物理学史占重要地位。
- 1927年的会议议题是量子理论，其中的9位参加者因在量子理论方面的贡献获得过或者之后获得诺贝尔奖。
- 29位参加者中的17位当时曾获得或将获得诺贝尔奖，其中包括居里夫人（两次获奖）。
- McEnvoy：“科学史上没有哪次会议像这次会议一样在如此短的时间阐明了如此多的问题”。
- 这次会议也开启了爱因斯坦(Albert Einstein, 1879-1955)和玻尔(Niels Bohr, 1885-1962)间史诗般的辩论。