

§ 5 量子物理基本原理

德布罗意提出的物质波的物理意义是什么呢？

他本人曾认为那种与粒子相联系的波是
引导粒子运动的“导波”，

并由此预言了电子的双缝干涉的实验结果。

对这种波的本质是什么，
他并没有给出明确的回答，
只是说它是虚拟的和非物质的。



在经典力学中，所谓“粒子”，
就意味着该客体既具有一定的质量和电荷等属性，
此即物质的“颗粒性”或“原子性”，
又具有一定的位置和一条确切的运动轨道，
即在每一时刻有一定的位置和速度(或动量)

所谓“波动”，
就意味着某种实在的物理量的空间分布
在作周期性的变化，
并呈现出干涉和衍射等反映相干叠加性的现象。

在经典概念下，
粒子性和波动性很难统一到一个客体上去。

近代物理实验已经表明，
不但电磁波，而且象电子这样的实物粒子，
都具有粒子性和波动性这两个方面的性质。



量子力学的创始人之一薛定谔在1926年曾说过，
电子的德布罗意波描述了电量在空间的连续分布。
他曾把电子波看成是电子的某种实际结构，
即三维空间中连续分布的某种物质波包，
波包的大小就是电子的大小，
波包的群速就是电子的运动速度。

按照这种看法，由于色散，
组成波包的不同频率成分的行进速度各不相同，
物质波包必然要扩散，在电子衍射时，
在空间不同方向上观测到的会是物质波包的一部分，
即电子的一部分。

显然，这些与现有的实验结果矛盾的。



与物质波包的看法相反，
有人认为电子的波动性来源于大量电子分布
在空间中所形成的疏密波。

这种看法也是与实验结果矛盾的。
电子可以产生与光波完全类似的双缝衍射图样。
而且，电子双缝衍射实验还表明，
即使入射电子流极其微弱，
以致电子几乎是一个一个地通过双缝，
短时间内底片上记录下来的只是
一些分布不规则的点子，
但是只要时间足够长，
底片上仍将呈现出有规律的衍射图样。
由此可见，单个电子就具有波动性。



电子既不是经典的粒子，也不是经典的波。

电子所呈现出来的粒子性，
只是具有所谓“颗粒性”或“原子性”，
即总是以具有一定的质量和电荷等属性的客体
出现在实验中，具有集中的能量和动量。
但并不与“粒子有确切的轨道”的概念有什么联系；

而电子呈现的波动性，
也只不过是波动性中最本质的东西——波的叠加性，
可以干涉、衍射、偏振，具有波长和波矢
但并不一定与某种实在的物理量在空间的波动
联系在一起。



波粒二象性指的是，
把微观粒子的“原子性”与波的“叠加性”统一起来。

就是说，在量子概念下，电子既是粒子，也是波。

普遍而言，量子粒子和量子波是同一的，
粒子的量子化必定具有波动性，
波的量子化必定具有粒子性。

在不同的实验条件下，
客体可以呈现出不同的性质。

在光的干涉和衍射实验中，主要呈现出波动性；
而在康普顿散射实验中，主要呈现出粒子性。





微观粒子在某些条件下表现出粒子性，在另一些条件下表现出波动性，而两种性质虽寓于同一客体体中，却不能同时表现出来。

少女？老妇？

两种图象不会同时出现在你的视觉中。☆

一 概率波

玻恩(M. Born)在1926年提出：
物质波描述了粒子在各处被发现的
概率。
这就是说，德布罗意波是概率波。

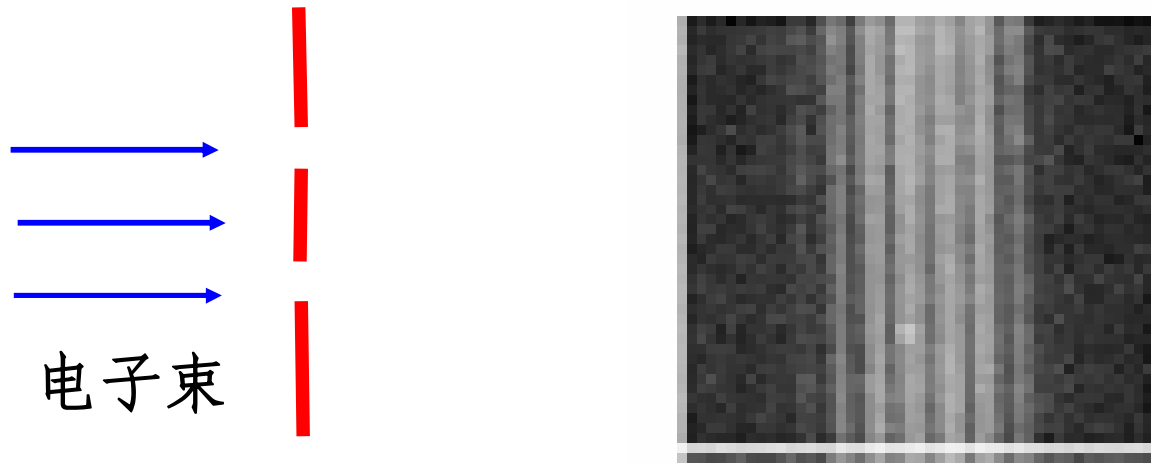


玻恩的概率波概念
可以用电子双缝衍射的实验结果来说明。

玻恩 (Max Born, 1882 – 1970)
1954年诺贝尔物理学奖



电子双缝衍射实验

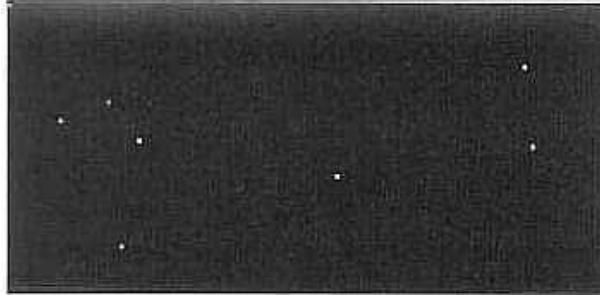


电子双缝衍射图样与光的双缝衍射图样完全一样，
显示不出粒子性，
更没有什么概率那样的不确定特征。

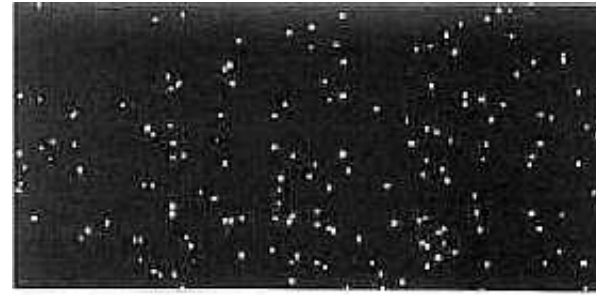
但这是用大量的电子(或光子)做出的实验结果。



一个一个电子依次入射双缝的衍射实验：



7个电子



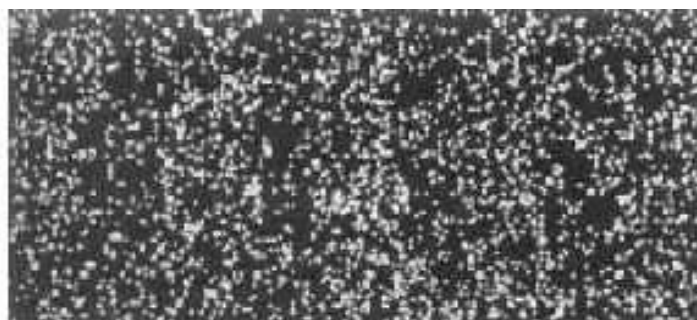
100个电子

这几幅图像说明电子确是粒子，
因为图像是由点组成的。

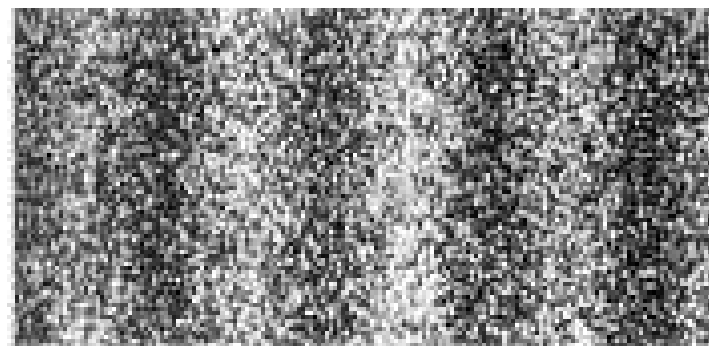
它们同时也说明，
电子的去向是完全不确定的，
一个电子到达何处完全是概率事件。



一个一个电子依次入射双缝的衍射实验：



3000



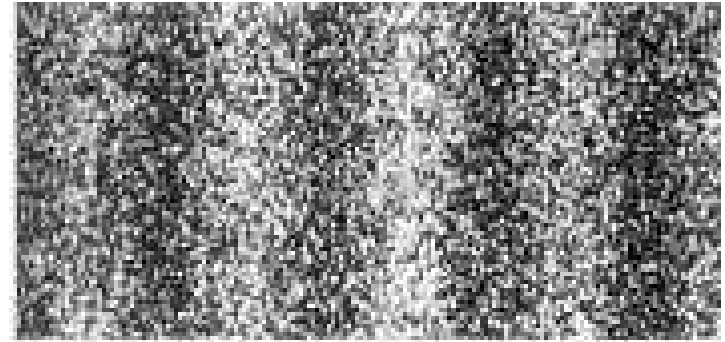
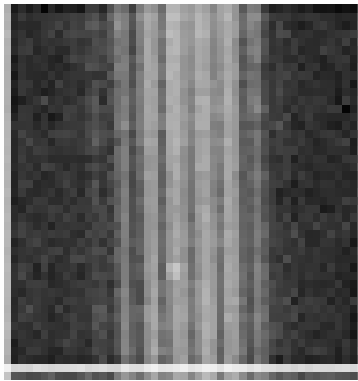
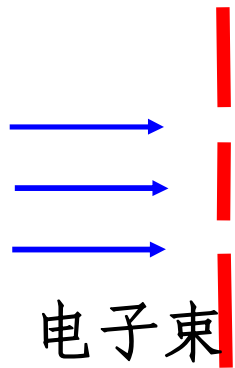
70000个电子



20000

随着入射电子总数的增多，
电子的堆积情况逐渐显示出了条纹，
最后就呈现明晰的衍射条纹，
这条纹与大量电子短时间内
通过双缝后形成的条纹一样。





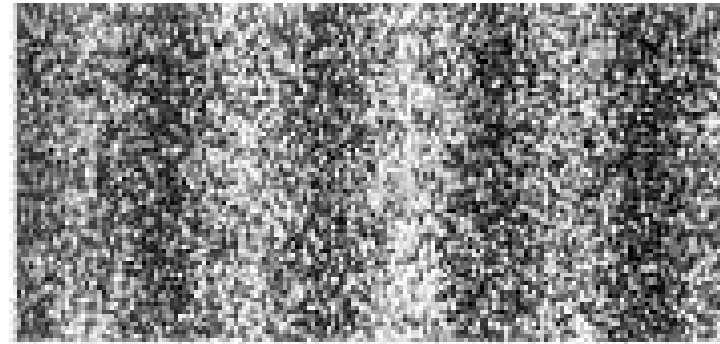
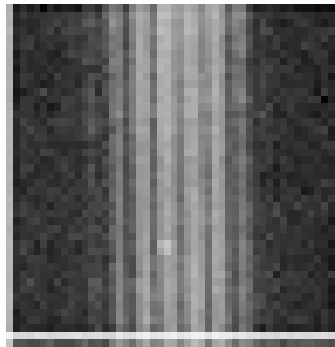
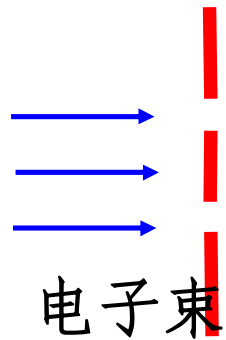
70000个电子

这些条纹把单个电子的概率行为完全淹没了。

底片上出现一个个的点子，
说明电子具有粒子性。

随着电子增多，逐渐形成衍射图样，
这来源于“一个电子”所具有的波动性，
而不是电子间相互作用的结果。





70000个电子

这又说明，尽管单个电子的去向是概率性的，但其概率在一定条件下还是有确定的规律的。这些就是玻恩概率波概念的核心。

德布罗意波并不像经典波那样是代表实在物理量的波动，
而是描述粒子
在空间的概率分布的“概率波”。



二 波函数及其统计解释

1、波函数

量子力学假定：

微观粒子的状态用波函数表示。

概率波波函数（一般为复数）：

一维 $\Psi(x, t)$ ， 三维 $\Psi(\vec{r}, t) = \Psi(x, y, z, t)$

在量子力学中，波函数是最重要的基本概念之一，它完全可以描述一个体系的量子态。

在经典物理学中，并没有与之对应的物理量。



2、波函数的统计解释

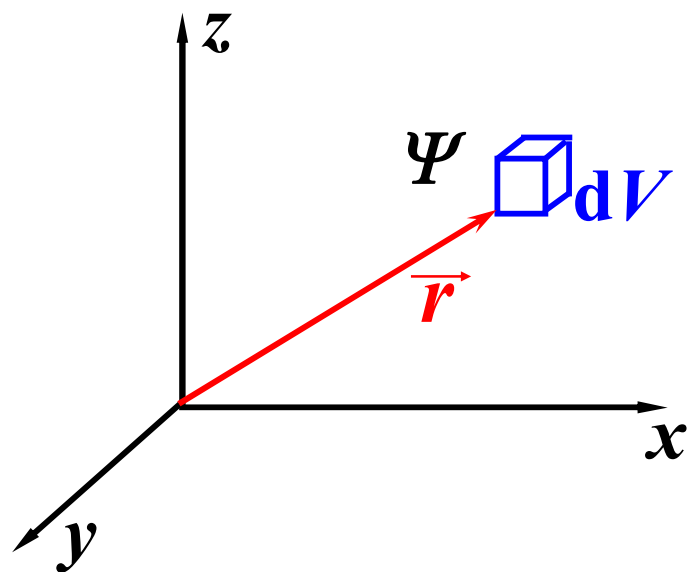
玻恩对 Ψ 的统计解释(1926)：
波函数 Ψ 是描述粒子在空间概率分布的
“**概率振幅**”。

其模方 $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \Psi(\vec{r}, t)^* \Psi(\vec{r}, t)$

称为 “**概率密度**”。

代表 t 时刻，在坐标 \vec{r} 附近单位体积
中发现一个粒子的概率。





在 t 时刻，在 \vec{r} 附近 dV
内发现粒子的概率为：

$$| \Psi(\vec{r}, t) |^2 dV$$

在空间 Ω 发现粒子的概率为：

$$\int_{\Omega} | \Psi(\vec{r}, t) |^2 dV$$



$\Psi(\vec{r}, t)$ 不同于经典波的波函数，

它无直接的 物理意义，

有意义的是 $|\Psi|^2$ 和波函数的相位。

对单个粒子： $|\Psi|^2$ 给出粒子概率密度分布；

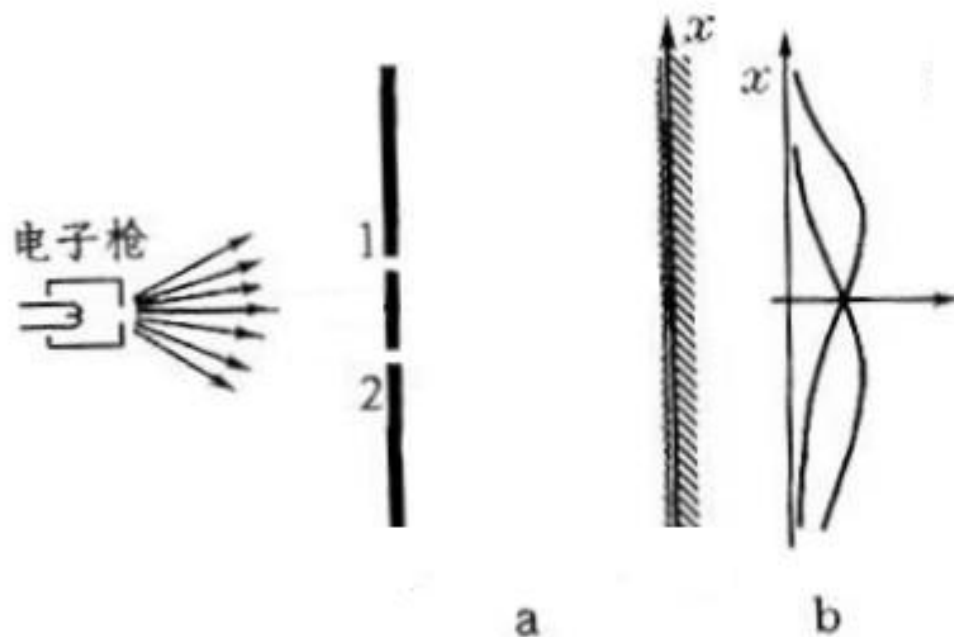
对大量粒子： $N |\Psi|^2$ 给出粒子数的分布；

概率波的概念正确地把物质粒子的
波动性和粒子性统一了起来，
已经为大量实验事实所证实。



3 用电子双缝衍射实验说明概率波的含义 ☆

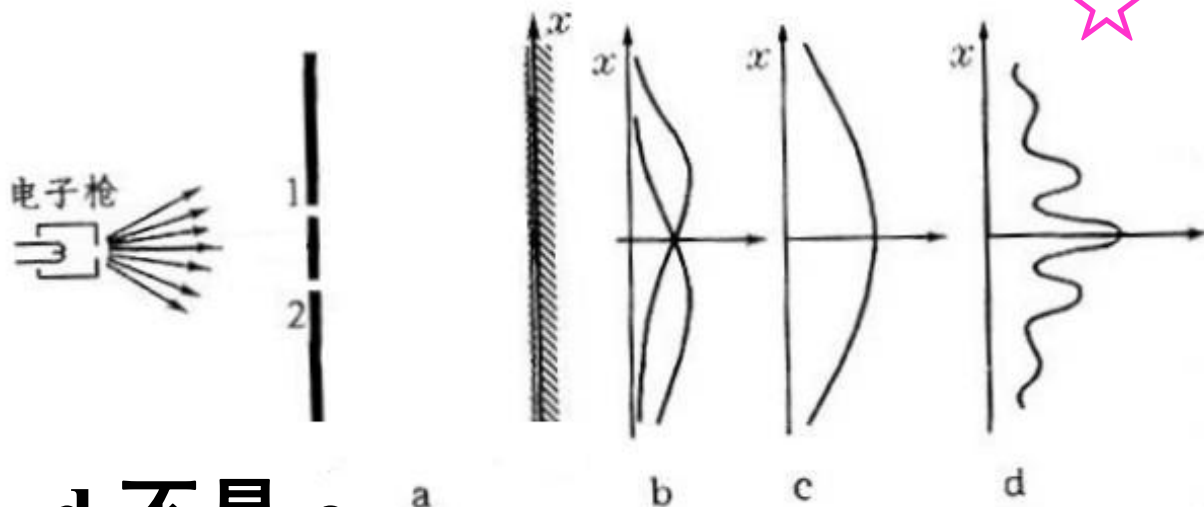
电子的状态用
波函数 Ψ 描述。



- 1、只开上缝时, 电子有一定的概率通过上缝,
其状态用 $\psi_1(x)$ 描述, 电子的概率分布为 $P_1 = |\Psi_1|^2$
- 只开下缝时, 电子有一定的概率通过下缝,
其状态用 $\psi_2(x)$ 描述, 电子的概率分布为 $P_2 = |\Psi_2|^2$

通过双缝后，
分布是 c 不是 d。

2、 双缝齐开时，
电子可通过上缝
也可通过下缝，是 d,不是 c



通过上、下缝各有一定的概率, ψ_1 、 ψ_2 都有。

总的概率幅为 $\Psi_{12} = \Psi_1 + \Psi_2$

总概率分布:

(出现了干涉)

$$\begin{aligned} P_{12} &= |\Psi_{12}|^2 = |\Psi_1 + \Psi_2|^2 \\ &= |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + \underbrace{\Psi_1^* \Psi_2 + \Psi_1 \Psi_2^*}_{\text{interference term}} \end{aligned}$$

$$P_{12} = |\Psi_{12}|^2 = |\Psi_1 + \Psi_2|^2 = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + \Psi_1^* \Psi_2 + \Psi_1 \Psi_2^* \\ \neq |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 = P_1 + P_2$$

可见，干涉是概率波的干涉，
是由于概率幅的线性叠加产生的。

即使只有一个电子，当双缝齐开时，
它的状态也要用 $\Psi_{12} = \Psi_1 + \Psi_2$ 来描述。

两部分概率幅的叠加就会产生干涉。

微观粒子的波动性，实质上就是概率幅的
相干叠加性。衍射图样是概率波的干涉结果。☆

4 统计解释对波函数提出的要求

1) 有限性: 在空间任何有限体积元 ΔV 中找到粒子的概率 $(\iiint_{\Delta V} |\Psi|^2 dV)$ 必须为有限值。

2) 单值性: 波函数应单值, 从而保证概率密度在任意时刻、任意位置都是确定的。

3) 连续性:

- 波函数连续, 保证概率密度连续。

- 对于势场连续点, 或势场不是无限大的间断点, 波函数的一阶导数连续。



归一化:

在空间各点的概率总和必须为1。

归一化条件:

$$\int_{\Omega} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV = 1, (\Omega - \text{全空间})$$

若
$$\int_{\Omega} |\Psi_A|^2 dV = \int_{\Omega} \Psi_A^* \Psi_A dV = A$$

则
$$\int_{\Omega} \left| \frac{1}{\sqrt{A}} \Psi_A \right|^2 dV = 1 \quad \frac{1}{\sqrt{A}} \text{—— 归一化因子}$$



在物理理论中引入概率概念在哲学上有重要的意义。

它意味着：

在已知给定条件下，不可能精确地预知结果，
只能预言某些可能的结果的概率。

这也就是说，不能给出唯一的肯定结果，
只能用统计方法给出结论。

这一理论是与经典物理的严格因果律直接矛盾的。

玻恩在1926年曾说过：

“粒子的运动遵守概率定律，
但概率本身还是受因果律支配的。”

这句话虽然以某种方式使因果律保持有效，
但概率概念的引入在人们了解自然的过程中
还是一个非常大的转变。

阅读

波函数本身“测不到，看不见”，
是一个很抽象的概念，
但是它的模方给我们展示了
粒子在空间分布的图像，
即粒子坐标的取值情况。

当测量粒子的某一力学量的取值时，
只要给定描述粒子状态的波函数，
按照量子力学给出的一套方法
就可以预言一次测量可能测到哪个值，
以及测到这个值的概率是多少。

阅读

尽管所有物理学家都承认，
由于量子力学预言的结果与实验异常精确地相符，
所以它是一个很成功的理论，
但是关于量子力学的哲学基础仍然有很大的争论。
哥本哈根学派，包括玻恩、海森伯等
坚持波函数的概率或统计解释，
认为它就表明了自然界的最终实质。

另一些人不同意这样的结论，
最主要的反对者是爱因斯坦。
他在1927年就说过：
“上帝并不是跟宇宙玩掷骰子游戏。”

阅读

德布罗意的话(1957年)更发人深思:

“不确定性是物理实质，这样的主张并不是完全站得住的。将来对物理实在的认识达到一个更深的层次时，我们可能对概率定律和量子力学作出新的解释，即它们是目前我们尚未发现的那些变量的完全确定的数值演变的结果。

我们现在开始用来击碎原子核并产生新粒子的强有力的方法，可能有一天向我们揭示关于这一更深层次的知识。阻止对量子力学目前的观点作进一步探索的尝试对科学发展来说是非常危险的。

而且它也背离了我们从科学史中得到的教训。

实际上，科学史告诉我们，已获得的知识常常是暂时的，在这些知识之外，肯定有更广阔的新领域有待探索。”

阅读



狄拉克(P. A. M. Dirac) (1902-1984)

1933年诺贝尔物理奖



量子力学大师狄拉克在1972年的一段话：
“在我看来，我们还没有量子力学的基本定律。
目前还在使用的定律需要作重要的修改，……。
当我们作出这样剧烈的修改后，
当然，我们用统计计算对理论作出物理解释的观念
可能会被彻底地改变。”

阅读

尽管对波恩的统计诠释是有争论的，
虽然至今所有实验都证实统计诠释是正确的，
但是关于量子力学根本问题的争论
不但推动了量子力学的发展，
而且还为量子信息论等新兴学科的诞生
奠定了基础。

阅读

三、 状态叠加原理

若体系具有一系列互异的可能状态(波函数):

$$\{ \Psi_1, \Psi_2 \cdots \}$$

则它们的线性组合: $\Psi = \sum_n C_n \Psi_n$,

也是该体系的一个可能的状态(波函数),

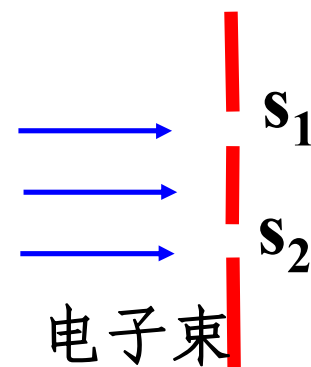
这里 C_n 为任意复常数。

$|C_n|^2$ 为该体系处于 Ψ_n 状态的概率。



以电子双缝衍射为例：

开 S_1 ，电子出现在屏 P 的波函数—— ψ_1



开 S_2 ，电子出现在屏 P 的波函数—— ψ_2

S_1, S_2 同时开，电子出现在屏 P 的波函数——

$$\Psi = C_1 \Psi_1 + C_2 \Psi_2$$

如果两个单缝相同，则 $C_1 = C_2$

$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$$



四、自由粒子的波函数

与自由粒子相联系的德布罗意波，是一个单色平面波。

沿 $+x$ 传播的单色平面波，波函数：

$$y(x, t) = A \cos(\omega t - kx)$$

复数形式可写成

$$y(x, t) = A e^{-i(\omega t - kx)}$$

微观粒子波函数一般是坐标和时间的复函数，因此采用复数形式的平面波表达式，只要把其中描述波动性的参量 ω 、 k 换成描述粒子性的参量 E 、 p 就可以了。

由德布罗意关系 $\nu = \frac{E}{h}, \lambda = \frac{h}{p}$, 得

$$\omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi E}{h} = \frac{E}{\hbar}$$
$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi p}{h} = \frac{p}{\hbar}$$

其中

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.05 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} = 6.58 \times 10^{-16} \text{ eV} \cdot \text{s}$$

自由粒子波函数: $\Psi(x, t) = A e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)}$

$$\Psi(x, t) = \Phi(x) e^{-\frac{i}{\hbar}Et}, \quad \Phi(x) = A e^{\frac{i}{\hbar}px} \text{ (空间因子)}$$

自由粒子波函数:

$$\Phi(x) = Ae^{\frac{i}{\hbar}px}$$

$p > 0$: 向右

$p < 0$: 向左

三维:

$$\Phi(\vec{r}) = Ae^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}$$

概率密度: $|\Phi|^2 = |A|^2 = \text{const.}$

空间位置完全不确定, 动量取确定值

$$\vec{p} = \text{const.}$$

【思考】自由粒子波函数能归一化吗?

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Phi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |A|^2 dx \rightarrow \infty$$

原因： $\Phi(x)$ 代表全空间理想平面波，而实际的自由粒子，例如由加速器引出的粒子束，只能分布在有限的空间内。若限定粒子只能出现在某一区间，则自由粒子波函数变成

$$\Phi(x) = \begin{cases} Ae^{\frac{i}{\hbar}px}, & |x| \leq L/2 \\ 0, & |x| > L/2 \end{cases}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Phi(x)|^2 dx = A^2 \int_{-L/2}^{L/2} dx = 1$$

$$A = \frac{1}{\sqrt{L}}$$

“归一化”的自由粒子波函数：

$$\Psi(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{L}} e^{\frac{i}{\hbar} px}, & |x| \leq L/2 \\ 0, & |x| > L/2 \end{cases}$$

这称为“箱归一化”，上式表示的就是自由粒子的“箱归一化”波函数。

为回到原来理想平面波的情况，只要在用箱归一化波函数所得结果中，令 $L \rightarrow \infty$ 就可以了。

