

第一章 量子力学的物理基础

§ 1.1, 最初的实验基础

第一组最初实验: 光的粒子性实验

A, 黑体辐射

B, 光电效应

C, *Compton* 散射

——按经典观念, 光被认为是纯粹波动性的东西, 但在特定实验条件下, 表现出具有粒子的性质: 能量分立化、粒子碰撞、光场量子化。

第二组最初实验: 粒子的波动性实验

A, 电子 *Young* 双缝实验

B, 电子在晶体表面衍射实验以

C, 中子在晶体上衍射实验

——按经典观念, 电子和原子被认为是粒子性的东西, 但在特定实验条件下, 表现出具有波动的性质: 相干叠加和相互干涉。

1, 第一组实验 —— 光的粒子性实验

A, 《黑体辐射谱问题》

Wien 经验公式 (1894) : 设黑体辐射场能量密度 $dE_\nu = \varepsilon(\nu)d\nu$,

$$dE_\nu = \varepsilon(\nu)d\nu = N_\nu \bar{\varepsilon}_\nu d\nu = c_1 \nu^3 e^{-c_2 \nu \beta} d\nu \quad (1.1)$$

$\beta = 1/kT$ 。这个能谱公式在高频短波区间内与实验符合, 但在中低频区, 特别是低频区与实验差别很大。

Rayleigh-Jeans 公式 (1900, Rayleigh; 1905, Jeans) :

用经典理论导出黑体辐射谱表达式: 将腔中黑体辐射场看成电磁波驻波振子集合, 按经典观念用 Maxwell - Boltzmann 能量连续分布平均。

令 $\varepsilon(\nu) = N_\nu \bar{\varepsilon}_\nu$, $\bar{\varepsilon}_\nu$ 是频率 ν 驻波振子平均能量, N_ν 是辐射场单位体积 (频率 ν 附近单位频率间隔) 内驻波振子一自由度的数目 $\frac{8\pi\nu^2}{c^3}$ 。

$$\left\{ \begin{array}{l} 0 \rightarrow L: \quad e^{ikx} \Big|_{x=0} = e^{ikx} \Big|_{x=L} \\ kL = 2n\pi \rightarrow k = \frac{2n\pi}{L} \rightarrow \Delta k = \frac{2\pi}{L} \end{array} \right.$$

在辐射场单位体积内, 波数 $\vec{k} \rightarrow \vec{k} + d^3k$ 内自由度数目 $\left(|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi\nu}{c} \right)$ 为

$$\left. \frac{2d^3k}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} \right|_{L=1} = \frac{2 \cdot 4\pi |\vec{k}|^2 d|\vec{k}|}{8\pi^3} = \frac{|\vec{k}|^2 d|\vec{k}|}{\pi^2} = \frac{8\pi\nu^2 d\nu}{c^3} \quad \left. \vphantom{\frac{2d^3k}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3}} \right\}$$

按 M-B 分布律, 驻波振子平均能量为

$$\bar{\varepsilon}_\nu = \frac{\int_0^\infty \varepsilon e^{-\varepsilon\beta} d\varepsilon}{\int_0^\infty e^{-\varepsilon\beta} d\varepsilon} = kT$$

由此, 按经典理论, $\bar{\varepsilon}_\nu$ 只与温度有关, 与驻波振子频率 ν 无关。再乘以自由度数目, 即得黑体辐射谱的 Rayleigh - Jeans 公式:

$$dE_\nu = \varepsilon(\nu)d\nu = \frac{8\pi kT\nu^2}{c^3} d\nu \quad (1.2)$$

Rayleigh-Jeans 公式与 Wien 公式正好相反: 低频部分与实验曲线符合很好, 但高频波段不但符合, 还出现黑体辐射能量密度随频率增大趋于无穷大的荒谬结果。这就是经典物理学中著名的“紫外灾难”, 是经典物理学最早显露的几个困难之一。

※ ※ ※

《 Planck 与能量量子概念，量子力学的诞生 》

1900 年 *Planck* 用一种崭新的观念来计算平均能量 $\bar{\varepsilon}_\nu$ 。他引入了“**能量子**”概念，他假设：

黑体辐射空腔中驻波振子的振动能量，并不象经典理论主张的和振幅平方成正比并呈连续变化，而是和振子频率 ν 成正比，并且只取分立值，

$$h\nu, 2h\nu, 3h\nu, \dots$$

与此相应，腔中辐射场和温度为 T 的腔壁物质之间达到热平衡后，交换的能量也是这样一份一份的。正比系数 h 后来称为 **Planck 常数**。由此，按经典统计理论 **M-B 分布律**，乘以对应的权重系数，

$$(e^{-h\nu\beta}, e^{-2h\nu\beta}, e^{-3h\nu\beta}, \dots) / \sum_{n=0}^{\infty} e^{-nh\nu\beta}$$

就得到频率 ν 驻波振子的平均能量，

$$\bar{\varepsilon}_\nu = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} nh\nu \exp[-nh\nu\beta]}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp[-nh\nu\beta]} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \exp[-nh\nu\beta] \right\} = \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \{1 - \exp[-h\nu\beta]\} = \frac{h\nu}{e^{h\nu\beta} - 1}$$

再乘以上面求得的自由度数目，即得著名的 **Planck 公式**

$$\varepsilon(\nu)d\nu = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \frac{d\nu}{e^{h\nu\beta} - 1} \quad (1.3)$$

(1.3)式在高频和低频波段分别概括了 *Wien* 公式和 *Rayleigh-Jeans* 公式，体现了关于辐射谱峰值位置的 *Wien* 位移定律。总之，此公式在全波段范围内与实验曲线十分符合。

这说明，在解释辐射场与腔壁物质相互作用的实验规律中，**必须假定：腔内电磁场所有驻波成份和腔壁物质交换的能量，在所有频率上都是断续成一份一份的，并与频率成正比。即交换能量都是量子化的。**

1900 年的 Planck 公式(1.3)，也就是“光量子”概念的提出，标志量子力学的诞生。

※ ※ ※

让我们事后猜测：这个结果是如何得到的 (……)。

$$\varepsilon(\nu)d\nu = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \frac{d\nu}{e^{h\nu\beta} - 1} = \frac{8\pi h \nu^3 d\nu}{c^3} \{e^{-h\nu\beta} + e^{-2h\nu\beta} + \dots + e^{-nh\nu\beta} + \dots\}$$

书本 (文献) 背后的，

书本 (文献) 之上的，

书本 (文献) 之外的。

※ ※ ※

B, 《光电效应问题》

自 1887 年 *Hertz* 起, 到 1916 年 *Millikan* 为止, 光电效应实验规律逐渐地被揭示出来。其中无法为经典物理学所理解的实验事实有:

反向遏止电压和入射光强无关;

反向遏止电压和入射光频率呈线性关系;

电子逸出相对于光照射几乎无时间延迟。

难于理解是因为, 按经典观念, 入射光的电磁场使金属表面电子作强迫振动。入射光强度越大, 强迫振动振幅也越大, 逸出电子的动能就越大。于是, 反向遏止电压和入射光强度应当呈线性关系, 而和入射光的频率无关。此外, 自光照射时起, 电子从受迫振动中积聚能量直至逸出金属表面, 需要一段时间, 因为电子运动区域的横断面积很小, 接受到的光能有限, 电子积聚到能逸出金属表面那样的动能需要一定的时间。然而, 实验却表明, 这个弛豫时间很短, 它不大于 10^{-9} 秒。

为解决这些矛盾, 1905 年 *Einstein* 在能量子概念基础上前进一步, 提出了

“能量子” → “光子”

按照 *Einstein* 意见, 光电效应显示, 不仅光场的能量是量子化的, 而且光场本身就是微粒化的, 仿佛一团“光子气”。投向金属表面的波场是一种微粒集合。光电效应的物理机制是: 光量子 and 电子碰撞并被电子吸收, 从而导致电子的逸出。他列出光电效应方程是

$$h\nu = \Phi_0 + \frac{1}{2}mv_{\max}^2 \quad (1.4)$$

Φ_0 是实验所用金属的脱出功, 比如对 Cs 为 1.9eV, Pt 为 6.3eV。等式右边用了逸出电子最大速度, 因为有些电子在从金属表面逸出的过程 (以及在空气传播的过程) 中, 可能遭受碰撞损失了部分动能。*Einstein* 的光电方程被 *Millikan* 用 10 年时间的实验所证实。

沿着这一思路前进, 甚至可以引入光子的“有效”质量 m^* , 即

$$m^* = \frac{\varepsilon}{c^2} = \frac{h\nu}{c^2}$$

于是, 若在重力场中, 一个光子垂直向上飞行了 H 距离, 其频率会从原来的 ν_0 减小为 ν :

$$h\nu_0 = h\nu + m^*gH = h\nu + \frac{h\nu}{c^2}gH \Rightarrow \nu < \nu_0$$

说明垂直向上飞行的光子, 其频率将产生红移¹! 这一现象 1960 年由 *R.V.Pound* 和 *G.A.Rebka Jr.* 在哈佛学校园水塔上实验观测所证实。

¹ 这里, 等式右边第二项在地球条件下比第一项小很多, 所以作了一级近似计算。

C, 《Compton 散射问题》

1923 年, 发现了 **Compton 效应**。更进一步证实了**光量子**的存在。在这个效应里, 散射光的能量角分布完全遵从通常**微粒碰撞所遵从的能量守恒和动量守恒定律**。设初始电子是静止的, 于是有**光作为微粒子与电子碰撞时的能能量守恒定律方程**:

$$\begin{cases} m_0 c^2 + h\nu = mc^2 + h\nu', \\ \frac{h\vec{\nu}}{c} = \frac{h\vec{\nu}'}{c} + \vec{p}. \end{cases}$$

求解这 5 个方程的方程组: 将第一个方程移项平方; 将第二个矢量方程组右边 $\frac{h\vec{\nu}'}{c}$ 项移到左边, 平方并用 $\vec{p}^2 c^2 = m^2 c^4 - m_0^2 c^4$ 。最后即得

$$\begin{cases} (h\nu)^2 + (h\nu')^2 - 2h^2\nu\nu' = m^2 c^4 + m_0^2 c^4 - 2mm_0 c^4 \\ (h\nu)^2 + (h\nu')^2 - 2h^2\nu\nu' \cos\theta = m^2 c^4 - m_0^2 c^4 \end{cases}$$

两个方程相减, 得

$$\begin{aligned} 2h^2\nu\nu'(1 - \cos\theta) &= 2mm_0 c^4 - 2m_0^2 c^4 = 2m_0 c^2 (mc^2 - m_0 c^2) \\ &= 2m_0 c^2 h(\nu - \nu') \end{aligned}$$

解出 $h\nu'$, 即得

$$h\nu' = \frac{h\nu}{1 + \frac{h\nu}{m_0 c^2} (1 - \cos\theta)} \quad (1.5)$$

引入记号 $\lambda_c = \frac{h}{m_0 c}$ 为电子 **Compton 波长** (0.0242 \AA), 上式改写成

$$\lambda' - \lambda = \lambda_c (1 - \cos\theta) \quad (1.6)$$

这个公式已为实验所证实。但是, 这里推导中使用了**光照射是粒子碰撞, 以及散射光频率会改变 (减小) 等概念**, 这些都是经典物理学认为光是波动场所无法理解的。比如, 按经典观念, 电子在受迫振动下发射的次波——散射光, 其频率和入射光的频率相同。

总之, 这一组实验揭示了:

作为波动场的光其实也具有粒子性质的一面。



2, 第二组实验——粒子的波动性实验：

A, 《电子的 Young 双缝实验》

Feynman 说：电子 Young 双缝实验是量子力学的核心。

1961 年 Jönsson, 电子束做出了单缝、双缝衍射实验。

电子波长很短, 缝宽和缝距都要十分狭小, 低能电子容易被缝屏物质散射衰减, 实验很难做。

Jönsson 在铜膜上刻了五条

缝宽为 $0.3\mu\text{m}$ 、缝长 $50\mu\text{m}$ 、缝距 $1\mu\text{m}$ 的狭缝,

分别用单、双、三、四、五条缝做了衍射实验。实验中电子的加速电压为 50keV , 接受屏距离缝屏 35cm 。

概念性分析¹:

实验事实是, 这时在接受屏 x 处探测到电子的概率 $P(x)$ 并不简单地等于两缝各自单独开启时的概率 $P_1(x)$ 、 $P_2(x)$ 之和, 而是存在两缝相互影响的干涉项

$$P(x) = P_1(x) + P_2(x) + \text{干涉}$$

这一干涉项可正可负, 随 x 迅速变化, 从而使 $P(x)$ 呈现明暗相间的干涉条纹。如果通过缝屏的是光波、声波, 出现这种干涉项是很自然的。因为在 x 处的总波幅 $\psi(x)$ 是由孔 1、孔 2 同时传播过来的波幅 $\psi_1(x)$ 、 $\psi_2(x)$ 之和

$$\psi(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x)$$

而 $P_1(x) = |\psi_1(x)|^2$ 、 $P_2(x) = |\psi_2(x)|^2$, 并且

$$\begin{aligned} P(x) &= |\psi(x)|^2 = |\psi_1(x) + \psi_2(x)|^2 \\ &= P_1(x) + P_2(x) + 2\text{Re}(\psi_1^*(x)\psi_2(x)) \end{aligned} \quad (1.7)$$

对光场这好理解, 但现在是电子, 从经典粒子的观念来理解, 这个干涉项的存在令人十分困惑。

▲探讨：将电子认作“弹丸”观念的来源：

人们每次实验测量, 总是想探测到 (“捉到”!!!) 电子。这时电子的“表现”必定是：有一定能量、有一个静止质量, 特别是有一个相当局域的位置！正是这些, 电子给人们以“粒子”的印象！

由此, 一般人就认为: **电子就是弹丸“粒子”, 其位置“客观上确定, 但不确知”！？但是, 按这种经典观念思考将会**

完全否定电子 Young 双缝实验的干涉现象！！！

从未观测到半个电子从缝 1, 半个从缝 2 同时穿过？

转圈反复穿过两条缝？。金庸小说的“匪夷所思”！

于是, 就出现了电子 Young 双缝实验解释的古怪事:

从两条缝之一穿过去——老师不敢说！

从两条缝同时穿过去——老师不愿意说！

¹ 电子 Young 双缝实验是最富于量子力学味道也是最奇特的实验之一。关于这个实验的各种翻版, 直到现在仍不断出现; 关于它的严格计算可见费曼, 量子力学与路径积分; 一个唯象计算可见: 张永德, 《大学物理》, 第 11 卷, 第 9 期, 1992。

到此，事情的复杂性还没完！

可以设想如下实验（“*which way*”实验的一种）²：在一条缝后放置一个照明光源，若光源足够强，以致可以假定光子和电子的散射效率接近百分之百，于是穿过该缝出来的电子必定同时伴随有散射光子。探测有无散射光产生，原则上就可以判断该电子是从哪条缝过来的。**结果很意外：每个电子都只穿过一条缝，从未观察到某个电子从两条缝同时穿过的情况，正如同从未观察到半个电子一样。**

总之，

对电子 Young 双缝实验的解释似乎陷入了两难的境地！

※ ※ ※

那么，电子到底是怎样穿过缝屏上这两条缝的呢？

正确答案：应当明确地说，

电子是以“自己独特”方式“同时”穿过两条缝的。

这是基于全部实验事实，经理智分析所能得到的、不可回避的、唯一逻辑自洽的说法！

这里所说“**自己独特**”方式是因为：这种方式既根本不同于经典粒子通过方式，也不完全等同于经典波的通过方式。和经典波的方式“不完全相同”是由于，电子可以在其传播途径上的任一点(包括在缝前、缝中、缝后、接受屏等各处)以一定的概率被探测到，而且一旦被探测到，它总是以一个完整的粒子的形象(一定质量、一定电荷、一个相当局域的空间位置)出现，特别是不可能有两个实验在两个缝上同时发现同一个电子。这就是与经典波本质不同之处！

有人正是基于这种理由批评“同时穿过”的说法，说“从实验观点来看缺乏实践意义”。其实，这恰好说明：以波的行为穿过双缝的电子，同时又具有粒子性的一面。

强调指出，情况之所以如此诡异，

正是由于测量！

测量严重干扰了电子原来的状态，使它发生了不可逆转的状态突变。正是对电子位置的测量，使原来从两条缝“同时”穿过的电子状态发生突变，塌缩（约化）成为仅从一条缝穿过的状态。

正是位置测量——造就了电子的经典粒子面貌！

² R.P.Feynman, A.R.Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill Book Company, 1965.

产生了“波形象到粒子形象”的突变！

这里，十分重要的是：

人们不应当按宏观世界得到的习惯观念，潜意识地认为，实验测量不会影响到被测物体的状态，于是将所得结果及图象有意无意地外推，用到做这些实验之前！

事实是，在测量位置之前，电子并不一定早就以“粒子”的形象客观地存在着³！

所有“*which way*”实验只表明，每次位置测量的结果，确实说明电子只从一条缝通过；但却并不能证明，作这类辨认测量之前，电子在客观上也是只从一条缝通过。

总之，微观客体的状态十分脆弱，极易遭受测量干扰！

所以，对电子怎样穿过双缝的问题不可以回答成“确定，但不确知。”这是尚未摆脱经典观念束缚的理解！

全部实验事实是，Young 双缝实验中，电子穿过双缝时表现出它具有波的性质，而在位置测量中被抓住时，又表现出粒子的图像。其实，电子既不是我们想象中的经典粒子，又不是我们想象中的经典波。对此人们时常借用不恰当的经典语言来作经典类比：电子具有波粒二象性(*duality* 或 *dualism*)。

电子究竟显示甚么样的图像依赖于人们如何观测

——不同的实验将造成不同的干扰，产生不同的状态塌缩，也就给出不同的图象！！！！

这就是 Young 双缝实验和（与之表观矛盾的）各类“*which way*”实验所传出的最重要的信息。

更确切地说，这些实验所传出的最重要信息是概率幅 $\psi(x)$ ：到达 x 点有两条可能的路径，相应于两个概率幅 $\psi_1(x)$ 、 $\psi_2(x)$ ，在 x 点找到电子的概率正是这两个概率幅之和的模平方。事实上，量子力学的所有干涉都来自（由所有路径提供的全体）相因子的等权叠加！

³ 从后面测量理论知道，对状态 $\psi(x)$ 进行某个力学量的测量，实质是将 $\psi(x)$ 按该力学量的本征态进行展开，测得力学量的数值总是本征值中的一个，出现的概率是该展式相应项系数的模方。而该次测量完毕时， $\psi(x)$ 即突变(塌缩)为该本征态。



B, 《电子衍射实验》。20 年代做了几个出色的**电子衍射实验**, 显示了电子波动性。

1927 年 *Davisson* 和 *Germer* 采用**镍单晶**做的**电子衍射实验**¹。

$$d \sin \theta = \lambda$$

对一定能量入射电子, 就具有一定的波长 λ , 能在上式决定的 θ 方向探测到反射电子峰值。这证明了电子具有波的性质。

C, *NaCl* 晶体的《中子衍射实验》。1969 年, **中性钾原子束的单缝衍射实验**², 实验缝宽为 23×10^{-6} 米。

1975 年实现《**中子干涉实验**³》, 并继而建立了高精密的**中子干涉量度学**。

上个世纪 90 年代, 《**原子光学**⁴》, 光栅是电磁波驻波。

多粒子干涉现象⁵。

《**碳-60 也有波动性实验**⁶》。

除上面关于波粒二象性的两组基础实验外, 1911 年 *Rutherford* 根据 α 粒子被金属箔散射的实验提出了原子的有核模型, 特别是 1913 年 *Bohr* 建立了原子的初等量子理论, 它们对量子力学的诞生起了直接的推动作用。



¹ *C. Davisson, L.H.Germer, The scattering of electrons by a single crystal of nickel, Nature, Vol.119, 558-560(1927).*

² *Am.J.Phys., 37, 905(1969).*

³ *H.Rauch, et.al., Phys. Lett., 54A(1975)425.*

⁴ *A. Zeilinger, et.al., Nature, 388(1997)827.*

⁵ *D. Greenberger, et.al., Nature, 347(1990)429; Physics Today 46, 8(1993)*

⁶ *M.Amdt, et.al., Nature, 401, 680(1999).*

§1.2 基本观念

1, 基本图像：de Broglie 关系与波粒二象性

1905 年 *Einstein* 通过提出下列关系

$$E = h\nu = \hbar\omega, \quad \vec{p} = \frac{E}{c} \vec{e} = \frac{h}{\lambda} \vec{e} = \hbar \vec{k} \quad (1.9)$$

($\hbar = \frac{h}{2\pi}$)，引入光子的概念。这在原先认为光是电磁波的图象上添加了粒子的图象，这已由上节

第一组实验所证实。于是，若知道等式右边的波动性参数 ω 和 k ，便可用这组关系求得它左边的量所相应的微粒子特性。

经过 18 年之久，*de Broglie* 克服积习的约束，逆过来理解这组关系，将上面这组关系从针对 $m = 0$ 的情况推广到 $m \neq 0$ 情况，提出原先是微粒的微观粒子也具有波动性¹，

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad \vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}, \quad (1.10)$$

就是说，若已知等式右边的粒子性参数 E 和 \vec{p} ，便可由这组关系式求得该粒子所具有的波动特性。

两组关系式的中间桥梁是 *Planck* 常数 \hbar ，形象写出来便是

$$(E, \vec{p}) \xleftrightarrow{\hbar} (\omega, \vec{k})$$

公式 (1.10) 便是常说的 de Broglie 关系。其中关于波长的第二个公式已为上节第二组实验所证实，而关于频率的第一个公式则被原子光谱实验所证实。

de Broglie 关系和光子的 *Einstein* 关系相结合，统一称为

“Einstein-de Broglie 关系”。

关系表明：微观物质普遍存在波粒二象性，两种截然不同图象通过 *Planck* 常数连结成 *de Broglie* 关系，统一在所有微观物质上。

波粒二象性是理解微观物质普遍属性的基本图
象，也是初学者理解量子力学的基本图象。

de Broglie 波长为

$$\lambda_{de} = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

※

※

※

¹ *Louis De Broglie, Waves and Quanta, Nature, Vol.112, 540 (1923).*

量子力学与经典力学的过渡

不严格地提法，按照在所研究问题里能否忽略 \hbar ，即取定 $\hbar \rightarrow 0$ 作为波粒二象性是否同时显现的标度，作为经典与量子的分界。

但确切说，决定波粒二象性是否同时表现，进而决定经典与量子的界线，其标准应当是相对的而不是绝对的：**假设在所研究问题中，相对于研究对象的 de Broglie 波长 λ_{de} 而言，运动空间尺度或原子间平均距离 l 足够大，以致有**

$$h \ll pl \quad \text{or} \quad \frac{\lambda_{de}}{l} = \frac{h}{mvl} \ll 1$$

于是可以相对地认为 $\lambda_{de} \rightarrow 0$ ，即，取 de Broglie 波极短波长近似。这时可以认为波动性效应消失，只剩下粒子性。于是，

经典力学只不过是其研究对象的能量、动量以及运动的空间尺度（或原子间的平均间距）如此之大，使得相对而言是 $\lambda_{de} \ll l$ 情况下的力学！即：

取 de Broglie 波极短波长近似 $\lambda_{de} \rightarrow 0$ ，QM 便过渡到 CM！

这种波粒二象性的基本图象，使初学者常常感到迷惑和不习惯。于是，初学者常常会问：电子一会儿象波，一会儿又象粒子，那它到底是什么？为了回答这种问题，可以打个比方：某个人，今天早晨遇到某事时笑了，表现出一付笑面孔；但今天中午碰到另一件事时他哭了，表现出另一付截然不同的哭面孔。就这样他表现出了两付截然不同的面孔。人们能不能据此发问：他到底是怎样的面孔？！显然不应当这样发问，因为这些都是这个人的面孔。人们只应当问：他在什么情况下会表现出笑面孔，而在什么情况下会表现出哭面孔。将这种论述“平移”到电子的波粒二象性问题上，可以回答说：

波性和粒子性都是电子所具有的属性，当它表现出两种属性的时候，人们不应当追问它“到底归属于”什么属性，只应当追问：在什么样实验条件下它表现出类似经典波的性质，在什么样实验条件下表现出类似经典粒子的性质。其实，电子既不是经典波(波包)，也不是经典粒子(弹丸)。只能说它有时象经典波，有时又象经典粒子。“象什么”这种提法的前题就是“不等同”。归根到底，电子就是电子本身！

电子波粒二象性这种有些古怪的图象，是由于我们使用了经典类比的方法，用宏观世界语言描述微观世界客体时所必然得到的一种并非贴切的图象。仿佛人们使用母语词汇去理解外语词汇的情况。鉴于人们总是习惯用已

有知识和经验去理解和描述新的东西，因此保留波粒二象性的图象还是有助于初学者的理解和形象思维，只是要注意不能过分执着和拘泥地使用这种图象。



2, *de Broglie* 波初步分析

非相对论电子、非相对论中子、光子 *de Broglie* 波长-能量关系

$$\begin{aligned}\lambda_e &= \frac{12.26}{\sqrt{E}} \\ \lambda_n &= \frac{0.286}{\sqrt{E}} \\ \lambda_\gamma &= \frac{1.241 \times 10^4}{E}\end{aligned}\quad (1.11)$$

$E \sim \text{eV}$ (对 $m \neq 0$ 的粒子, E 为其动能), $\lambda \sim \text{\AA}$ 。

宏观物体的波动性可以忽略。例如, 1 克小球, 速度 $v=1$ 米/秒, *de Broglie* 波的波长为

$$\lambda = \frac{h}{mv} = 6.6 \times 10^{-31} \text{ 米}$$

和小球本身尺度以及小球作宏观机械运动的空间尺度相比, 这个尺度完全可以忽略。从而, 在研究小球任何运动中, 与这个波长相联系的波动性质(也就是与小球运动相关的量子效应)完全可以忽略。

de Broglie 波的群速度和相速度:

$m=0$ 和 $m \neq 0$ 两种情况, 虽然 *de Broglie* 关系相同, 但它们的相速度有差别,

$$\begin{aligned}m \neq 0: \text{相速度 } V_{\text{相}} &= \lambda v = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = \frac{1}{2} u \\ m = 0: \text{相速度} &= \frac{\omega}{k} = c\end{aligned}\quad (1.12)$$

对 $m \neq 0$ 的粒子, 可以证明, 粒子 *de Broglie* 波波包的群速度等于粒子的运动速度

$$V_{\text{群}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)} = \frac{dE}{dp} = \frac{d}{dp} \frac{p^2}{2m} = v \quad (1.13)$$

依据群速度这个结果, 曾经有人主张微观粒子本质可能是 *de Broglie* 波的某种波包。但是, *de Broglie* 波的相速度不仅不等于粒子运动速度 v , 而且依赖于粒子能量。按 *de Broglie* 关系, 能量又关联于 *de Broglie* 的频率。于是,

***de Broglie* 相速度依赖于频率。于是, 即便在真空中, *de Broglie* 波传播也有色散。**

(这和电磁波在真空中无色散成鲜明对照!)于是,将电子看作不同频率组成的波包的主张被否定。因为,人们知道电子是稳定的粒子,而即便在真空中,自由运动时 *de Broglie* 波波包也会弥散。

※ ※ ※

3, 基本特征:

概率幅描述、量子化现象、不确定性关系

微观粒子波粒二象性的基本图象,派生出三个重要观念:

描述方式的概率特征;

物理量常常分立取值的量子化现象;

不确定性关系式。

它们共同构成量子力学的基本特征。

- 首先, “由微观粒子的波粒二象性,可以导致量子力学描述粒子运动中的概率观念,即概率幅或 *de Broglie* 波的概念。”

以电子 *Young* 双缝实验为例。假定电子源强度十分弱、实验时间很长,以致可以认为每次实验都是单个电子在行进,彼此之间相互独立。认定某个电子,当它穿过缝屏后到底在接受屏上哪一个位置处被观测到,是无法用实验预先确定的,也无法(至少在目前)从理论上以拉普拉斯决定论的方式准确预计。当这个电子穿过缝屏时,它的动量与穿缝之前相比究竟有多少改变,实验无法事先确定,并且理论上也无法以拉普拉斯决定论的方式事先准确计算。单个电子在穿过狭缝时状态突变、在接受屏上被测到时的状态突变都是深邃的、事先无法预计的、不可逆转的变化。只有大量同一类型的突变所表现出的统计规律才是可以事先了解和准确预计的。**双缝实验明确表达了单次实验结果的不确定性。**

这种不确定性真正体现了:

电子既像波又像粒子、既不是波又不是粒子的奇特秉性。

这种情况迫使人们别无选择,只能采用相应的不确定性的描述方式,即采用**概率幅和概率的观念**。于是,以电子 *Young* 双缝实验为例(为书写简明,考虑一维情况),在接受屏上 x 处观测到电子(表现出粒子的面貌)的概率 $P(x)$ 是该处 *de Broglie* 波**波场振幅的模平方**,而该处振幅又是由(作为波源的)两条缝传播过来的**波幅的相干叠加**,所以

$$P(x) = |\psi_1(x) + \psi_2(x)|^2 = P_1(x) + P_2(x) + 2 \operatorname{Re}[\psi_1^*(x)\psi_2(x)]$$

由此看到,这种具有“不确定性”的、概率解释的、*de Broglie* 波振幅的描述方法,是唯一能够以统一方式描述电子的波粒两种属性,

并且和具有“不确定性”的双缝干涉实验事实相匹配的描述方法。

众所周知，与一束匀速直线运动的粒子流相联系的应当是一个平面波。它们的形式是

$$\exp\{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)\}$$

代入 *de Broglie* 关系，得到和此粒子流相联系的 *de Broglie* 平面波

$$\psi(\vec{r}, t) = \exp\{i(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)/\hbar\} \quad (1.14)$$

这时，如果定义 $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ 为在 \vec{r} 处单位体积内找到这束匀速直线运动粒子的数目，则这种数目分布是空间均匀的。更一般地，可以研究下面 *de Broglie* 波波包

$$\psi(\vec{r}, t) = \int \varphi(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)} d\vec{p} \quad (1.15a)$$

这里 \vec{p} 和 E 满足如下关系

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m}$$

取 $t=0$ ，于是 *de Broglie* 波包成为

$$\psi(\vec{r}) = \int \varphi(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} d\vec{p} \quad (1.15b)$$

这里 $\psi(\vec{r})$ 是粒子在 \vec{r} 处的 *de Broglie* 波波幅，即概率幅。将 $|\psi(\vec{r})|^2$ 理解为在 \vec{r} 处单位体积内找到粒子的概率，或说成粒子取坐标 \vec{r} 的概率。而 $|\varphi(\vec{p})|^2$ 就相应理解成是粒子取动量 \vec{p} 的概率。

总之，如此理解所引入的 *de Broglie* 波描述，是唯一能够统一描述微观粒子波粒二象性的方法：

$\psi(\vec{r})$ 本身是波幅，可以相干叠加、产生干涉，体现微观粒子的波动性；一旦(以 $|\psi(\vec{r})|^2$ 概率)在 \vec{r} 处被观察到，却又是 个完整的粒子形象。

在描述方式上的这种不确定性和微观实验观测中表现出的不确定性是相互完美匹配的。

但是，人们把这两种(从经典物理学看来)完全不同的秉性用如此方式统一起来描述的时候，将付出沉重的代价：**放弃了经典物理学中惯用的拉普拉斯决定论，描述中引入了不确定性，引入了概率观念。**显然，为了做到统一的、兼顾两种属性的描述，这种代价是必须付出的。

对于量子力学中的不确定性，即，实验测量中突变的不确定性和波函数概率描述中的不确定性，存在两种观点。

《第一种观点》 这些不确定性的存在说明人们对微观世界事物了解得不完全。实验测量中的不确定性固然说明了实验方法上的局限和近似，描述方法中的不确定性更说明了理论的不完备，说明存在未知的“隐变数”，它们尚未被量子力学纳入理论

框架中去。

《第二种观点》 实验中突变的不确定性，并非我们实验方法、实验仪器不完善造成的，而是微观客体固有的，它不能依靠改进实验方法提高实验精度来消除。与经典力学迥然不同，量子力学描述中的概率观念并不说明描述方式的不完备，而是客观现象本就如此。未知的“隐变数”是不存在的，量子力学描述方式是完备的。

长期以来，两种观念争论不休。应当指出，到目前为止，实验事实一直在支持着量子力学，认为量子力学的描述是完备的。但是，鉴于目前量子理论还存在重大的困难，因此 Dirac 说：

“它是到现在为止人们能够给出的最好的理论，然而不应当认为它能永远地存在下去。我认为很可能在将来的某个时间，我们会得到一个改进了的量子力学，使其回到决定论，从而证明 Einstein 的观点是正确的。但是这种重新返回到决定论，只有以放弃某些基本思想为代价才能办到，而这些基本思想我们现在认为是没有问题的。如果我们要重新引入决定论的观点，我们就应当以某种方式付出代价，这种方式是什么，现在还无法推测。”¹

关于量子力学实验中不确定性的两种争论，可以形象的表述为

“上帝是否玩掷骰子？”

● **其次，“看看微观粒子的波动性质怎样导致微观粒子能**

量和状态的离散化或量子化现象”。

即使在经典物理学的领域，**任何类型的波动，当它们展布或传播在无限空间中时，波参数可以取连续变化的数值；但是，**

一旦用某种方式将这些波局限在有限空间的时候，波场所取的波参数必将离散化，它们的频率和波长均要断续化、离散化。

从富里叶频谱分析的观点来说，任意局域的波均是一个富里叶级数，而不是一个富里叶积分。这与经典物理学中从一维琴弦振动、二维鼓膜振动、三维微波腔中电磁波驻波等现象相对应。

所以，任何波动方程其局域解的问题总都是一个本征值和本征函数的问题²。

转到微观粒子情况。局域 *de Broglie* 波的波动性同样会造成频率和波长的断续性。而且还进一步，

频率和波长的这种断续性又通过 *de Broglie* 关系转化为该粒子

¹ P.A.M. Dirac, 物理学的方向，科学出版社，1981年。

² 就物理学中常见的一些波动方程来说，本征值是分立的或是部分分立的。

的能量和动量的断续性。因此可以说，任何局域化的 *de Broglie* 波未必伴随其动量的量子化，但必伴随其能量的量子化。

这正是粒子具有 *de Broglie* 波波动性的结果，是

局域 *de Broglie* 波自相干涉(由边界反射)形成的。

※ ※ ※

● **最后，“微观粒子波动性必定导致不确定性关系”。**

按照前面所说 $\psi(x)$ 和 $\varphi(p)$ 的物理解释，可以定义一个微观粒子坐标 x 和动量 p (相对于任一选定值 x_0 、 p_0) 的测量均方根偏差

$$(\Delta x)^2 = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} (x - x_0)^2 |\psi(x)|^2 dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx} \quad (1.16)$$

$$(\Delta p)^2 = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} (p - p_0)^2 (\varphi(p))^2 dp}{\int_{-\infty}^{+\infty} (\varphi(p))^2 dp} \quad (1.17)$$

注意 $\psi(x)$ 和 $\varphi(p)$ 是富里叶变换对，按富里叶积分变换带宽定理³即得

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1.18)$$

这说明，不论粒子的 *de Broglie* 波波包的形状如何，它的动量均方根偏差与坐标均方根偏差的乘积不小于 $\frac{\hbar}{2}$ 。其实，由带宽定理可以知道，

任何种类的波动(弹性波、光波、.....)都存在类似关系式。这是对波动过程进行富里叶分析所得的基本结论之一。显然，这种不能同时测准是原则性的。于是，

不论微观粒子处于何种状态，客观上它的坐标和动量不能同时具有确切数值，当然也就不能在同一实验中将它俩同时测准。

换句话说，不存在能同时测准微观粒子位置和动量的实验方案，也并非任何实验方案欠

³ 富里叶变换的《带宽定理》：若 $f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} F(y) e^{ixy} dy$ ， $F(y) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ixy} dx$ ，

$$\text{并定义 } (\Delta x)^2 = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} (x - x_0)^2 |f(x)|^2 dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 dx}, \quad (\Delta y)^2 = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} (y - y_0)^2 |F(y)|^2 dy}{\int_{-\infty}^{+\infty} |F(y)|^2 dy},$$

这里 x_0 ， y_0 为任意固定值，则有

$$\Delta x \cdot \Delta y \geq \frac{1}{2}.$$

周到、实验技术欠精密所带来的实验误差。

总而言之，

物理上，不确定性关系源于微观粒子的波动性，更准确些说，源于微观粒子的波粒二象性。

显然，随着所研究问题向宏观领域趋近， \hbar 作用逐渐减小，就从 x 、 p 不能同时测准“约略”成为“能同时测准”了。

※ ※ ※

§1.3 不确定性关系的讨论

1, 既然不确定性关系的物理根源是微观粒子波动性。因此它也就是一个普遍成立的关系式。在任何量子物理实验中，都能分析出这一不确定性关系。

前面的关系式还可以改变一下形式。设电子沿 x 方向运动，由于粒子在 x 方向的位置有一个不确定量，用光照射的办法确定其位置时，发生散射的时间也就有一个不确定量，

$$\Delta t = \frac{\Delta x}{v_x}$$

这里 v_x 是散射前粒子的速度。显然，这也是用显微镜观察粒子时观测时间的不确定量。

另一方面，粒子的能量 $E = \frac{1}{2m} p_x^2$ ，所以和 Δp_x 相应的粒子能量的不确定量为

$$\Delta E = v_x \Delta p_x$$

两者相乘，可得

$$\boxed{\Delta E \cdot \Delta t \approx \hbar} \quad (1.19)$$

(1.19)式有不同的解释或者称作应用。

首先，将观测时间不确定量看作**观测的持续时间**，那么，测量粒子能量 E 的不确定量和观测持续时间之间存在这种不确定性关系。换句话说，对测量过程分析表明，为了精确测量能量(精确度达到 ΔE)，要求测量所花费的时间至少为

$$\Delta t \approx \frac{\hbar}{\Delta E}$$

其次，如果针对的是一个不稳定的半衰期为 τ 的能级，它必有一个能级宽度 Γ 。两者之间也应满足此处的不确定性关系

$$\Gamma \cdot \tau \approx \hbar$$

再三，如果把 *Fourier* 频谱分析的观点用于持续时间间隔为 Δt 的波包，就启发人们对此关系再作出一种解释：对只在短时间间隔 Δt 内持续的任何不稳定现象，其能量必有一个不确定量(或，所含频率必有一个宽度)，使两者之间满足上面不确定性关系⁴。

⁴ 这两种解释参见：E. 费米，《量子力学》，西安交通大学出版社，1984年。

2, 不确定性关系的进一步解释及某些应用

首先强调, 不确定关系不仅对量子系综测量, 即作为统计规律成立; 而且对单个微观粒子的单次实验, 也必定成立。

例如原子退激发发射电磁波包的实验。表面上看, 可以将不确定性关系解释为原子系综统计涨落结果, 似乎不必要求适用于单个原子。设想大量原子被频率在 ω 附近持续时间为 τ 的光波包照射, 振幅为

$$A(t) = \int_{\omega-\Delta\omega/2}^{\omega+\Delta\omega/2} f(\omega) e^{i\omega t} d\omega$$

频谱分析支持将这束光看作以频率 ω 为中心的大量不同波长光子的集合。显然, 频谱宽度和波包持续时间之间满足 $\Delta E \cdot \Delta t \approx \hbar$ 。

然而, 如果对每个波包都进行时间延迟实验, 分析表明, 统计的不确定性完全来自每一个波包的不确定性! 实验方案是每个电磁波包经过分束器分束后, 通过不同路径经受不同的延时, 再会聚叠加, 测量它们各自的空间相干长度 δl

$$\delta E \cdot \delta t = \delta E \cdot \frac{\delta l}{c}$$

假如单个原子也遵守不确定性关系, 则每个衰变辐射都只是波包, 相干长度都不会十分长。程差大了将使符合计数明显下降; 如果不确定性关系只对原子系综适用, 每个原子都是确定的。则不同原子的能级高低虽有不同, 但每个原子上下两个能级的各自宽度都为零。不确定性较小, 不同波包的频率虽有差别, 但各自都是很好的平面波, 相干长度都很长。加大程差不会明显减少符合计数。

实验证实, 单个衰变辐射的电磁波包也遵守不确定性关系! 这是当然的。因为, 波动性直接根源于每个单个粒子, 而不是它们的集体行为!

其次, 这两个不确定性关系在能量尺度与空间尺度关联上的应用。

1, 原子物理和凝聚态物理涉及的尺度为 $\overset{\circ}{A} \sim 10^{-8} \text{ cm}$,

$$\frac{p^2}{2m_e} \approx \frac{\hbar^2 c^2}{2m_e c^2 \lambda^2} = \frac{(6.58 \times 10^{-22} \text{ MeV} \cdot \text{s})^2 \times (3 \times 10^{10} \text{ cm/s})^2}{2 \times 0.511 \text{ MeV} \times (10^{-8} \text{ cm})^2} = 3.8 \text{ eV} \sim \overset{\circ}{A}$$

\therefore 原子尺度 $\sim \overset{\circ}{A} \leftrightarrow$ 相应能量范围 $(1-10) \text{ eV}$

2, 原子核物理涉及的尺度为 10^{-13} cm ,

$$\begin{aligned} \frac{p^2}{2m_n} &\approx \frac{\hbar^2 c^2}{2m_n c^2 (3.3 \text{ Fermi})^2} = \frac{(1.973 \times 10^{-11} \text{ MeV} \cdot \text{cm})^2}{2 \times 940 \text{ MeV} \cdot (3.3 \times 10^{-13} \text{ cm})^2} \\ &= 2 \text{ MeV} \sim 3.3 \text{ Fermi} \end{aligned}$$

\therefore 原子核尺度 $(1-6.5) \text{ Fermi} \leftrightarrow$ 相应能量范围 $(0.5-20) \text{ MeV}$

3, 粒子物理、高能物理涉及的尺度 $\leq 10^{-14} \text{ cm}$ 。

这时粒子已很接近于光速，所以有

$$\Delta E \approx \Delta p \cdot c \approx \frac{\hbar c}{2\Delta x} \geq \frac{1.973 \times 10^{-11} \text{ MeV} \cdot \text{cm}}{2 \times 10^{-14} \text{ cm}} \geq 1 \text{ GeV}$$

\therefore 高能物理尺度 $\leq 10^{-14} \text{ cm}$ \leftrightarrow 相应能量范围 $\geq 1 \text{ GeV}$

※ ※ ※

§1.4 理论体系的公设

1, 第一公设——波函数公设

“微观粒子的量子状态总可以用波函数 $\psi(\vec{r}, t)$ 作完全的描述。波函数是粒子坐标和时间的复值函数，模平方 $\rho(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2$ 称为概率密度，即，在波函数定义域内体积元 dV 中找到粒子的概率为

$$dp(\vec{r}, t) = \psi^*(\vec{r}, t) \cdot \psi(\vec{r}, t) dV \quad (1.19a)$$

ψ^* 为 ψ 复数共轭。在定义域内 $\psi(\vec{r}, t)$ (除可数个点、线、面外) 处处单值、连续、可微；在定义域内任意部分区域上平方可积。而且，如果 ψ_1 和 ψ_2 是波函数，则它们的任意复系数 (归一化) 线性叠加

$$\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2, \quad |c_1|^2 + |c_2|^2 = 1 \quad (1.19b)$$

也是波函数。”

这个波函数公设可细分为四点内容：

- 1) 任意量子状态必可用波函数描述；
- 2) 波函数的诠释——概率幅，波函数的模平方是概率密度；
- 3) 对波函数的数学性质有相应的要求；
- 4) 描述量子状态的波函数 (也即量子状态) 服从叠加原理。

比如，经典物理中有自由粒子的匀速直线运动，在量子理论中有动量为确定值的微观粒子状态与之对应。完全描述这种微观粒子状态的波函数是平面 *de Broglie* 波

$$\psi(\vec{r}, t) = A \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (\vec{p} \cdot \vec{r} - Et) \right\} \quad (1.20)$$

这里 A 为某个常数。确切些说，这个波函数描述了动量为 \vec{p} 的无尽的粒子流，在这个束流中单位体积内平均有 $\psi^* \psi = |A|^2$ 个粒子存在。但最好不用 (1.20) 式代表动量为定值的单个粒子波函数。因为，

这样一来，由于在全空间肯定能找到这个粒子，也就有如下归一化条件

$$\int_{\text{全空}} |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV = 1 \quad (1.21)$$

若要表达式 (1.20) 在全空间积分收敛，指数前面的归一化系数 A 将为零。物理上这当然是合理的，因为

这时在任意地方的单位体积里找到这一个粒子的概率几乎是零。但这却使得数学上无法写出这个波函数了。所以，代表一个粒子，最好不要用平面波⁵，而用波包概念，它们是一些展布在有限区域，从而模平方积分收敛，可归一化的波函数。这里强调指出，**从实验测量观点来看，并未要求概率密度 $|\psi(\vec{r}t)|^2$ 处处有限，而只要求它在任意体积 M 上积分值有限：**

$$\int_{[M]} |\psi(\vec{r}t)|^2 dV = \text{单值、有限} \quad (1.22)$$

因为，任何测量粒子位置的实验，无论其精确度多高，也不可能精确到一个几何点。所以，把“ $\psi(\vec{r}, t)$ 处处有限”作为一个普遍性条件，其实是非物理的人为苛求。比如说，就球坐标原点附近情况而言，实验测量只要求到(1.22)式。就是说，按实验测量观点，波函数 $\psi(\vec{r}, t)$ 在 $r=0$ 点可以发散，只要它的发散满足下面**边界条件**

$$\boxed{\psi(\vec{r}t) \xrightarrow{r \rightarrow 0} \infty \quad \text{应慢于 } r^{-3/2}。} \quad (1.23)$$

这就是从实验测量观点出发所得的物理的要求。这个问题在第四章中还将谈到。

用以下积分来定义两个波函数的复数内积，

$$(\varphi, \psi) = \int \varphi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d\vec{r} \quad (1.24)$$

符号“*”表示取复数共轭。结合下面测量公设可知，它的物理意义是：**当微观粒子处在 ψ 态时，找到它处在 φ 态的概率幅。**

最后指出，公设中的

态叠加原理是对整个量子理论都成立的普遍原理。

总之，状态公设假定，微观粒子所有量子状态的总和构成一个赋有范数(1.24)式的扩大了的 *Hilbert* 空间。

※ ※ ※

2, 第二公设——算符公设

“任一可观测量 A 可以用相应的线性厄米算符 \hat{A} 表示。这些算符作用于波函数。在这种由力学量 A 到算符 \hat{A} 的很多对应规则中，基本规则是坐标 x 和动量 p 向它们算符 \hat{x} 、 \hat{p} 的对应。这个对应要求满足如下基本对易规则

$$\boxed{\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar。} \quad (1.24)$$

关于这个公设解释以下几点：

第一，一个算符 \hat{A} 为线性的，是指对任意复常数 c_1 、 c_2 ，总有

$$\hat{A}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\hat{A}\psi_1 + c_2\hat{A}\psi_2$$

\hat{A} 的厄米共轭算符记为 \hat{A}^+ 。这个新算符由它在全体态中的内积

⁵ 当然，如果引入 δ -函数，将平面波归一化成为 δ 函数，在数学运算上也是可行的。并且实际大多数情况也是这样做的。所以，这里的说法并不意味着放弃使用平面波。事实上，由于它的理想化和简单，会给数学描述(例如散射理论中)带来简化。而由它带来的问题可以用一些人为办法予以补救。

来定义：对任意两个态 φ 和 ψ ，按下面等式，左边新算符 \hat{A}^+ 的内积由已有定义的右边量来确定：

$$\begin{aligned} (\hat{A}^+ \varphi, \psi) &\equiv (\varphi, \hat{A} \psi) \quad \text{or} \\ (\psi, \hat{A}^+ \varphi) &\equiv (\varphi, \hat{A} \psi)^* \Rightarrow \int \psi^*(\vec{r}) \hat{A}^+ \varphi(\vec{r}) d\vec{r} = \left[\int \varphi^*(\vec{r}) \hat{A} \psi(\vec{r}) d\vec{r} \right]^* \\ &= \int (\hat{A} \psi(\vec{r}))^* \varphi(\vec{r}) d\vec{r} \end{aligned} \quad (1.25)$$

因此算符 \hat{A}^+ 是确定的。因为，一个算符是 *Hilbert* 空间状态函数的某种映射，如果它对全空间任意两个函数的内积都被确定，其映射作用也就被完全确定，算符本身也就被明确定义了。这类似于三维空间中确定某个未知矩阵的情况。

第二，如果 $\hat{A}^+ = \hat{A}$ ，就称算符 \hat{A} 为自共轭算符（也就是量子力学中常称作的厄米算符⁶）。这时应有

$$\boxed{\int \psi^*(\vec{r}) \hat{A} \varphi(\vec{r}) d\vec{r} = \left[\int \varphi^*(\vec{r}) \hat{A} \psi(\vec{r}) d\vec{r} \right]^*}$$

当然，以上表述均对 φ, ψ 为波函数（一类要求明确的函数）而言。可以证明，

厄米算符的本征值均为实数，而且对应不同本征值的本征函数相互正交。

证明： 设 ψ_1 和 ψ_2 分别是厄米算符 \hat{A} 的对应本征值为 a_1 和 a_2 的本征函数，即有本征方程

$$\hat{A} \psi_1(\vec{r}) = a_1 \psi_1(\vec{r}), \quad \hat{A} \psi_2(\vec{r}) = a_2 \psi_2(\vec{r})$$

对它们分别左乘以 $\psi_2^*(\vec{r})$ 和 $\psi_1^*(\vec{r})$ 并积分，得

$$\begin{aligned} \int \psi_2^*(\vec{r}) \hat{A} \psi_1(\vec{r}) d\vec{r} &= a_1 \int \psi_2^*(\vec{r}) \psi_1(\vec{r}) d\vec{r} \\ \int \psi_1^*(\vec{r}) \hat{A} \psi_2(\vec{r}) d\vec{r} &= a_2 \int \psi_1^*(\vec{r}) \psi_2(\vec{r}) d\vec{r} \end{aligned}$$

另一方面，由 \hat{A} 的厄米性可得

$$\int \psi_2^*(\vec{r}) \hat{A} \psi_1(\vec{r}) d\vec{r} = \left[\int \psi_1^*(\vec{r}) \hat{A} \psi_2(\vec{r}) d\vec{r} \right]^*$$

将上面两个等式代入此式，得

$$(a_1 - a_2^*) \int \psi_2^*(\vec{r}) \psi_1(\vec{r}) d\vec{r} = 0$$

如果取 $\psi_2(\vec{r})$ 为 $\psi_1(\vec{r})$ ，由于 $\int |\psi_1(\vec{r})|^2 d\vec{r} \neq 0$ ，得 $a_1 = a_1^*$ ，即 \hat{A} 的本征值都是实数；如果 $a_1 \neq a_2$ ，这导致

⁶ 为免除数学方面的混乱，这里指出：物理上的厄米算符 ($A^+ = A$) 是数学中的自伴算符 (self-adjoint operator)，而不是数学中的厄米算符 (又名对称算符 —— symmetric operator)，后者是可以有 $A^+ \neq A$ 的。数学的自伴算符必为对称算符，反之不一定。一个算符是否为自伴的，除它本身性质以外，还与它的定义域有关系。详见 J.M. Domingos, et.al., *Foundations of Physics*, vol. 14, No. 2, 147 (1984)。

$$\int \psi_2^*(\vec{r}) \psi_1(\vec{r}) d\vec{r} = 0 \quad (1.26)$$

说明分属于不同本征值的 $\psi_1(\vec{r})$ 和 $\psi_2(\vec{r})$ 是互为正交的。接着，将这些 ψ_i 归一化，便可得到正交归一的函数族。一般说来，厄米算符本征函数族不见得一定是完备的⁷。这里完备性是指：使用该函数族可以对任一物理的波函数作展开。本征函数族是完备的厄米算符所对应的力学量称为可观测的力学量⁸。

第三，按公设从力学量到厄米算符的对应。首先，经典物理学中所有力学量均转化为对应的厄米算符，只有时间这个量除外，不存在“时间算符”！其次，关于 \hat{x} 和 \hat{p} 的对易子可如下理解。按 $\psi(\vec{r})$ 的概率解释，力学量坐标的平均值应为

$$|\bar{r}| \equiv \frac{\int \hat{r} |\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r}}{\int |\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r}} = \frac{\int \vec{r} |\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r}}{\int |\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r}} \quad (1.27)$$

可以看到，由于状态波函数 $\psi(\vec{r})$ 已经用坐标 \vec{r} 的函数描述，坐标算符 \hat{r} 就可以直接取为 \vec{r} ⁹。这时，算符 \hat{p} 的表示式又如何呢？以一维 *de Broglie* 平面波的波函数为例，它是动量算符的本征函数，对应本征值为 p 。写出它的本征方程，

$$\hat{p} e^{\frac{i}{\hbar}(p \cdot x - Et)} = p e^{\frac{i}{\hbar}(p \cdot x - Et)}$$

由此可以看出，算符 \hat{p}_x 表达式可以取作

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \quad (1.28)$$

⁷ 可以证明，如果一个线性算符 $\hat{\Omega}$ 能满足某一有限阶代数方程

$$\hat{\Omega}^n + \alpha_1 \hat{\Omega}^{n-1} + \dots + \alpha_n = 0,$$

这里 $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ 为常系数，则 $\hat{\Omega}$ 的本征函数族必是完备的。参见狄拉克，量子力学原理，第二章。

⁸ 这里预先指出，一维定态 *Schrödinger* 方程(包括它在任意中心场下径向方程)可归入 *Sturm-Liouville* 型方程。方程本征函数的完备性可以严格证明(柯朗、希伯特，〈数学物理方法(I)〉，钱敏、郭敦仁译，科学出版社，1958年，第328、262、225页。或见吴大猷，〈量子力学(甲部)〉，科学出版社，1984年，第86页)。从而，对一维特殊情况，可以说系统能量是可观测测量。但对于一般系统，能量是否为可观测测量(即系统 *Hamiltonian* 是否为自伴算符，也即其本征态是否为完备集)，这种证明十分困难，只能作为假设(参见狄拉克〈量子力学原理〉，科学出版社，1965年，第36页)。李政道对此问题叙述有进展，参见§2.2相应注记。张永德〈高等量子力学〉[附录C]有更进一步进展和详细专题阐述。

⁹ 由于 $\psi(\vec{r})$ 并非 \hat{r} 的本征函数，无法对它写出本征方程。但若把 $\delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$ 作为某种实际的、十分局域于 \vec{r}_0 点的粒子波函数的理想化表示，则可对它写出坐标算符 \hat{r} 本征方程如下：

$$\hat{r} \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) = \vec{r}_0 \delta(\vec{r} - \vec{r}_0)。$$

在 \hat{x} 、 \hat{p} 的这种表示下，它们之间的对易关系为

$$[\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x} \cdot \hat{p} - \hat{p} \cdot \hat{x} = x \cdot \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} - \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \cdot x = i\hbar$$

显然，三维空间的另两维 y 、 z 自由度也有类似计算。从而，就三维空间来说，

$$\hat{\mathbf{r}} = \{\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}\}, \quad \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla。$$

由此，非相对论的动能算符、势能算符等均可以用这两个算符的函数去构造。列表如下：

非相对论动能算符	$\hat{T} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$	(1.29)
势能算符	$\hat{V} = \hat{V}(\hat{\mathbf{r}})$	
角动量算符	$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \hat{\mathbf{r}} \times \nabla$	
粒子密度算符	$\hat{\rho} = \delta(\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{r}}')$	
粒子流密度算符	$\hat{\mathbf{j}} = \frac{1}{2} \left[\delta(\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{r}}') \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} + \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} \delta(\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{r}}') \right]$	

系统总能量算符： $\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ ； *Hamiltonian* 算符： $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$

在球坐标中，角动量算符的各个分量分别为

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) = i\hbar \left(\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \\ \hat{L}_y &= -i\hbar \left(\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \\ \hat{L}_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi} \end{aligned} \quad (1.30)$$

则动能算符和角动量平方算符分别为

$$\begin{cases} \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\hat{L}^2}{2m r^2} \\ L^2 = -\hbar^2 \nabla_{(\theta, \varphi)}^2 \end{cases} \quad (1.31)$$

这里

$$\Delta = \left(\Delta_r + \frac{1}{r^2} \nabla_{(\theta, \varphi)}^2 \right) ; \quad \begin{cases} \Delta_r = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r \\ \nabla_{(\theta, \varphi)}^2 = \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right) \end{cases}$$

关于粒子密度算符和粒子流密度算符的说明以及其余注意事项参见第二章。

第四，关于动量算符厄米性问题。按定义，算符 $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$ 为厄米算符的充要条件是下面积分等式成立

$$\int \psi^* \left(-i\hbar \frac{d\varphi}{dx} \right) dx = \left\{ \int \varphi^* \left(-i\hbar \frac{d\psi}{dx} \right) dx \right\}^*$$

这里 $\varphi(x)$ 、 $\psi(x)$ 是两个任意波函数。注意此式右边分部积分之后为

$$\int i\hbar \frac{d\psi^*}{dx} \varphi dx = i\hbar \psi^* \varphi \Big|_{\text{下限}}^{\text{上限}} + \int \psi^* \left(-i\hbar \frac{d\varphi}{dx} \right) dx$$

这说明，**仅当分部积分项为零时， \hat{p}_x 的厄米性才能被保证！**就束缚态而言，当 $x \rightarrow \pm\infty$ 时， $\psi(x)$ 和 $\varphi(x)$ 均趋于零， \hat{p}_x 的厄米性不会出现。至于有限区间 $[a, b]$ 情况， \hat{p}_x 的厄米性只在满足周期边界条件的函数族中才被保证，这时分部积分出来的两项之和仍为零¹⁰。

※ ※ ※

3, 第三公设——测量公设 (期望值公设)

“一个微观粒子体系处于波函数 $\psi(x)$ 的状态，若对其测量可观测力学量 \hat{A} 的数值，则相当与将 $\psi(x)$ 按 \hat{A} 的本征函数族 $\{\psi_n(\vec{r})\}$ 展开，

$$\begin{cases} \psi(\vec{r}) = \sum_n c_n \psi_n(\vec{r}) \\ \hat{A} \psi_n(\vec{r}) = a_n \psi_n(\vec{r}) \end{cases}$$

这里 $\psi_n(\vec{r})$ 是 \hat{A} 的本征值为 a_n 的本征函数。被测态 ψ_n 的展开系数 c_n 一般为复数。公设认为，单次测量所得 \hat{A} 的数值必为 \hat{A} 的本征值之一；多次测量所得 \hat{A} 的期望值为

$$\bar{A}_\psi = \frac{\int \psi^*(\vec{r}) \hat{A} \psi(\vec{r}) d\vec{r}}{\int \psi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d\vec{r}} = \frac{\sum_n |c_n|^2 a_n}{\sum_n |c_n|^2} \quad (1.32)$$

如 $\psi(\vec{r})$ 是归一的，则为

$$\bar{A}_\psi = \int \psi^*(\vec{r}) \hat{A} \psi(\vec{r}) d\vec{r} = \sum_n |c_n|^2 a_n。$$

除第一公设之外，这是又一个直接将量子力学理论计算与实验观测联系起来的公设。它和波函数公设共同构成了量子力学关于实验观测的理论基础。

解释以下 6 点：

第一， 这里期望值是指对大量相同的态 $\psi(\vec{r})$ (它们组成所谓量子系综) 作多次观测的平均结果。注意区分两种情况：

对量子系综进行的 **“多次测量平均结果”**；

¹⁰ 如前面注解中所说，一个算符的厄米性也与它的定义域有关。为避免不确定性，本书规定动量算符 $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$ 定义域为 $(-\infty, +\infty)$ 。这与 Hilbert 空间态矢内积区间、概率归一范围、Schrödinger 方程定义域等相一致，尽管粒子的运动可以是局域的。

对单个量子态进行的“单次测量结果”。

第二，如果归一化的 $\psi(\vec{r})$ 不是算符 \hat{A} 的本征函数，只要 \hat{A} 是可观察力学量（ \hat{A} 的本征函数构成完备集），则一定可以用 \hat{A} 的本征函数族 $\{\psi_n(\vec{r})\}$ 来展开 $\psi(\vec{r})$ ：

$$\psi(\vec{r}) = \sum_n \alpha_n \psi_n(\vec{r})$$

而期望值 \bar{A}_ψ 则是实数本征值 a_n 的加权平均，加权系数等于 $\psi(\vec{r})$ 的展开系数模平方 $|\alpha_n|^2$ 。注意，单次测量测得 A 的数值不可能是本征值以外的数值，这和经典物理学测量情况截然不同；测到该力学量为某个本征值的概率，是被测波函数展开式中相应系数的模平方 $|\alpha_n|^2$ 。注意，作为决定概率权重的这些系数（随被测态的演化）可能随时间变化。

第三，力学量的观测值总应当是实数。全部物理测量实验结果（包括量子力学实验结果）都应当是实数。所以要求对任一波函数 $\psi(\vec{r})$ ， \bar{A}_ψ 均为实数。事实上这是被保证了。因为 \hat{A} 是厄米算符，于是有

$$\int \psi^*(\vec{r}) \hat{A} \psi(\vec{r}) d\vec{r} = \left\{ \int \psi^*(\vec{r}) \hat{A} \psi(\vec{r}) d\vec{r} \right\}^*$$

至于单次测量，其结果必是 \hat{A} 的本征值之一，显然也总是实数。

第四，每次测量并读出结果之后，态 $\psi(\vec{r})$ 即受严重干扰，并且总是向该次测量所得本征值的本征态突变（塌缩）过去，使得波函数过滤（约化）到它的一个成分（一个分枝）上：

$$\begin{aligned} \hat{r}: \psi(\vec{r}) &= \int \psi(\vec{r}') \delta(\vec{r} - \vec{r}') d\vec{r}' \Rightarrow \left\{ \delta(\vec{r} - \vec{r}'), |\psi(\vec{r}')|^2 \right\} \\ \hat{p}: \psi(\vec{r}) &= \int \varphi(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} d\vec{p} \Rightarrow \left\{ e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}}, |\varphi(\vec{p})|^2 \right\} \end{aligned}$$

这种由单次测量造成的塌缩称为“**第一类波包塌缩**”。除非 $\psi(\vec{r})$ 已是该被测力学量的某一本征态，否则在单次测量后被测态 $\psi(\vec{r})$ 究竟向哪个本征态突变，就象测得的本征值一样，是不能事先预言的。这种突变总是

随机的、不可逆的、斩断相干性的、非局域的。

状态塌缩过程是一个极其深邃的、尚未了解的过程。表观上表现出是粒子状态的突变，实质上是体系演化时空的塌缩！

第五，概括起来说，对态 $\psi(\vec{r})$ 进行力学量 A 的每一次完整测量的全过程一般分为A、B、C三个阶段：

- A, “**分解纠缠**”
- B, “**波函数塌缩**”
- C, “**初态制备**”

实验常常对由大量相同量子态所组成的量子系综进行重复性的某种测量并读出结果。这种重复测量将制备出一个**混态**。因为不同塌缩所得到的不同 $\varphi_i(x)$ 之间没有任何位相关联，是非相干的。这个混态也称做**纯态系综**——不同纯态的一个系列：纯态 $\varphi_1(x)$ 出现概率为 p_1 ，纯态 $\varphi_2(x)$ 出现概率为 p_2 ，等等。

现在可以解释公设二中所提的可观察力学量的说法了。假如力学量 \hat{A} 是一个可以用实验来观测的量，那么对任给(满足物理条件)的一个状态 $\psi(\vec{r})$ ，都应当可以对它进行关于 \hat{A} 取值的测量。由于测量就意味着本征函数的展开，这等价于要求(任意被测态) $\psi(\vec{r})$ 必定能用 \hat{A} 的本征函数族展开，也即要求 \hat{A} 的本征函数族是完备的。这说明：

数学上算符 \hat{A} 本征函数族的完备性和物理实验上力学量 A 的可观测性这两者之间是等价的。反过来也可以说，如果某个厄米算符的本征函数族不具有完备性，原则上它就不是一个可观测的量，至少就某些不能被展开的态而言是这样。

对一般系统的任一力学量，相应算符的本征函数族是否完备很难证明(结合前面脚注)。因此，力学量是否为一个可观测测量，有的时候只是一个基于物理直觉的假设和信念。

第六，可以证明如下重要结论：两个力学量 A 和 B 对任何态都可以同时观测的充要条件是它们相应算符彼此对易，即

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$$

这里，零算符的含义是它作用到任何波函数上结果都为零。

条件必要性证明：

若对任何状态都能同时测定 A 、 B ，根据上面所说，必存在 \hat{A} 、 \hat{B} 的共同本征函数 ψ_{ab} 。因为，这时测量之后，原先的波函数必以某一概率向 \hat{A} 、 \hat{B} 的某个共同本征函数 ψ_{ab} 塌缩。于是就有

$$[\hat{A}, \hat{B}]\psi_{ab} = (ab - ba)\psi_{ab} = 0$$

ψ_{ab} 是 \hat{A} 、 \hat{B} 的某一共同本征态。因 \hat{A} 、 \hat{B} 是可观测物理量，所以 $\{\psi_{ab}\}$ 序列完备，任一波函数总可按 $\{\psi_{ab}\}$ 展开，于是对任给波函数 ψ ，有

$$[\hat{A}, \hat{B}]\psi = [\hat{A}, \hat{B}]\sum_{ab}\alpha_{ab}\psi_{ab} = \sum_{ab}\alpha_{ab}[\hat{A}, \hat{B}]\psi_{ab} = 0$$

从而得到

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0$$

条件充分性证明：

如果 $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ 。假定 \hat{A} 、 \hat{B} 中有一个是非简并的——对应每一个本征值只存在一个本征态。比如 \hat{A} 是这样，取 \hat{A} 一个本征态 ψ_a ，有

$$0 = [\hat{A}, \hat{B}] \psi_a = \hat{A} \hat{B} \psi_a - \hat{B} \hat{A} \psi_a = \hat{A} \hat{B} \psi_a - \hat{B} a \psi_a$$

也即

$$\hat{A}(\hat{B} \psi_a) = a(\hat{B} \psi_a)$$

这就是说， $\hat{B} \psi_a$ 也是 \hat{A} 的本征值为 a 的本征态。按假定 \hat{A} 的这个本征态不简并，因此 $\hat{B} \psi_a$ 和 ψ_a 必定只相差一个常系数。即有

$$\hat{B} \psi_a = b \psi_a$$

说明 ψ_a 也是 B 的(本征值为 b 的)本征态。就是说，力学量 A 、 B 可以同时观测。对于有简并的情况，结论依然如此，这在以后论述。

反过来说，如果 \hat{A} 和 \hat{B} 不对易，它俩就“不能同时测量”。具体含意是：它俩不具有共同的本征函数“族”，但不等于没有个别的态，在这个态中 A 和 B 客观上各自都有确定的数值(比如零本征值——见本章结尾述叙)。

以上六点简要概括了量子测量的基本内容。

※ ※ ※

4, 第四公设——微观体系动力学演化公设 ——Schrödinger 方程公设

“一个微观粒子体系的状态波函数满足如下 Schrödinger 方程

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}t)}{\partial t} = \hat{H}(\vec{r}, \hat{p}) \psi(\vec{r}t) = \hat{H}(\vec{r}, -i\hbar \nabla) \psi(\vec{r}t) \quad (1.34)$$

这里 \hat{H} 为体系的 Hamilton 算符，又称为体系的 Hamiltonian,

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}). \quad (1.35)$$

这里强调指出，如果说，“测量公设”中所涉及的状态坍缩是不可预测的、不可逆的、斩断相干性的、非局域的，因而完全不符合经典观念的因果律的话，那么，在本公设中完全规定了状态波函数随空间和时间的变化规则。这里不但保持着相干性，而且不存在任何不可预测、不可逆的成分。就是说，波函数演化完全遵循经典观念下的因果律。这两方面，

态演化中的决定论形式；

态测量坍缩中的随机形式

有机结合就是微观世界新的因果律——量子力学的因果律。

复习：2—1—3—5

※ ※ ※

5, 量子力学第五个公设——全同性原理公设