

量子力学基本原理

徐德之

量子力学的出现,是物理学的一次革命。它不仅使人们对物质的运动规律有了进一步的认识,并且使人们深刻地认识到物理理论不是绝对的;而是相对的、有一定的局限性。经典力学和经典电磁学只能描写物质运动规律的一个方面,而量子理论则描写了物质运动规律的另一方面。它们既有联系,又有质的不同。这里,我们简要地谈谈量子力学的几条基本原理。

一、波粒二象性及波函数的几率解释

微观世界的波粒二象性是物质的普遍性质,但人们对电磁场是先认识其波动性后认识其粒子性;而对其它的物质则是先认识其粒子性,后认识其波动性。

二象性首先是在研究黑体辐射时发现的。为了解释黑体辐射中电磁场的能量随频率的分布,普朗克于1900年提出:频率为 ν 的电磁场的能量只能是 $h\nu$ 的整数倍。这实际上表明我们通常认为是一种波的电磁场物质是一份份的。但普朗克没有明确地提出这是粒子,直到1905年爱因斯坦才提出光子的概念。当时人们发现一束紫外线射到一块金属板上时,能使金属板放出电子,这就是光电效应。根据光的波动理论,光的能量与其强度成正比,所以发射出来的电子的能量应随光的强度增强而直线上升,但实验却发现:电子的能量只与光的频率成正比,光的强度只影响发射出的电子数目。为了解决这种理论和实验的矛盾,爱因斯坦提出光是一种微粒流,他称此微粒为光子。光子具有能量 $h\nu$ 和动量 h/λ ,其中 ν 、 λ 分别为光的频率和波长。这样,光电效应可解释为一个光子和一个电子的碰撞。光子的能量只与其频率有关,所以发射出来的电子的能量也只与光的频率有关。光强增加只表示光子数目增多,并不表示光子的能量增大,所以只使与光子碰撞的电子数目增多,从而使发射出来的电子数目增多,但其能量则不变。定量的计算结果也与实验相符。后来的康普顿散射也证明了光的粒子性。只有把此散射看成光子和电子的碰撞,才能解释光在散射前后频率的改变。

二象性也表现于经典粒子的波动性上。1911年卢瑟福提出的原子模型表明电子在原子核外绕核作周期运动。由经典理论可知,电子将不断放出电磁波,从而使其能量逐渐减小,轨道半径越来越小,最后将掉到核中去,这显然是与事实不符的。事实上,电子并不总在放射电磁波,只有当它受到激发后才会放射,并且放射出的电磁波的频率不是连续分布的。为了解释这种

现象,波尔于1913年曾唯象地提出了一条量子假设,他认为电子只能在几条分立的轨道上运动,当它在确定的轨道上运动时,不放出电磁波,只当它从一条轨道跃迁到另一条能量较低的轨道上时才会放出电磁波。显然,这样的假设没有从本质上来解释这些现象。直到1924年德布罗意才解决了这个问题。他认为既然光有粒子性,那么在粒子物理的研究中,也许人们过分地强调了它们的粒子性而忽略了它们的波动性。他大胆地提出粒子也具有波动性。自由粒子的能动量与波动的频率、波长之间的关系也为 $E = h\nu$ 、 $P = h/\lambda$,这称为德布罗意假设。原子中电子的轨道实际上是驻波,所以能量不会向外放出。不同的驻波有不同的能量,所以电子从一条轨道转到另一条轨道时要放出多余的能量。直至1927年,粒子的波动性为戴维逊和盖末的实验所证实。

这个实验是这样的:将一束电子投射到一块镍单

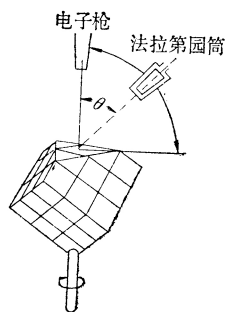


图 1

晶体上,测量散射电子的强度与散射角之间的关系(见图1)。如果电子具有波动性,则和光一样,会在单晶体上发生衍射,使散射强度有峰谷交替的现象。实验上发现了这种干涉现象,并且峰谷的位置和波动理论预言的完全一致。这充分证明了电子的波动性。对其它的微观粒子也发现了这种波动性。

由此我们可以看到从波粒二象性上来说,电磁场和通常的实物是没有什么区别的,所不同的是认识上有先后,对电磁场,我们先认识其波动性,后认识其粒子性;而对通常的实物则相反。粒子性和波动性不过是物质在不同场合中的不同表现。我们不妨通过一个例子来体会这点。设想有一个圆柱体,从侧面看,它是长方形的,但从上面看,它却是圆形的。显然,长方形和圆形是完全不同的,但它们通过三维空间联系起来而成为一个圆柱体。联系物质的波动性和粒子性的,则是德布罗意假设及波函数的几率解释。

既然通常的实物粒子也具有波动性,那么我们也象电磁场那样用一个波来描写它。有确定频率和波长的一个波是平面波(见图2)。一个自由粒子有确定的能量和动量,根据德布罗意假设,它就有确定的频率

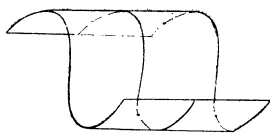


图 2

和波长,所以它也可用平面波来描写。此平面波称德布罗意波。但一个非自由运动的粒子没有确定的动量,也就没有确定的波长,所以要用一个一般的函数来描写它,此函数称为波函数。但

我们怎样来解释此波函数呢？它和什么测量值有关呢？首先我们想到的是或许粒子本身就是一个波。但实验告诉我们并非如此。在电子衍射实验中，如果将电子束强度减得很弱，使得只有几个电子射向晶体，这时照相底片上只显出零星的点，没有干涉花纹，可见单个电子并不显示波动性。那么是不是和水波一样是由大量粒子集合在一起而发生波动的呢？实验也否定了这种解释。在上面的实验中，如果将电子一个个地发射出去，当积累了相当长的时间后，也会得到同样的干涉花纹。因此我们可以说，干涉花纹是由于电子出现于各处的机会（我们称几率）不同而形成的。几率大的地方强度大。波函数正描写了这种几率分布。在波动理论中，某处波幅的绝对值的平方表示此波在该处的强度，所以我们应该将（归一化的）波函数的绝对值平方解释成粒子的几率分布。

波动的一个性质就是可以叠加，因而波函数也是可以叠加的。如果波函数 ψ_1 及 ψ_2 是粒子的两个可能的状态，则将它们以一定比例叠加以后的状态

$$\psi = a_1\psi_1 + a_2\psi_2$$

也是粒子的可能状态。这就是态的叠加原理。

二、测不准原理

粒子波动性的另一结果就是测不准原理。在经典力学中，一个粒子的位置和它的动量是可以同时测准的，其它力学量是位置和动量的函数，因此也都可以同时测准。但在量子力学中由于粒子的状态是用波函数来描写的，所以位置和动量就不能同时有确定的值。从自由粒子状态最易看清这一点。一个有确定动量的自由粒子状态是用平面波来描写的。此波函数的绝对值平方是常数，这表示在此状态下，粒子在空间每一点上出现的几率是一样的，可见我们无法确定其位置。当粒子处于一般的状态时，它可能既没有确定的位置，又没有确定的动量。位置的不确定性 Δx 和动量的不确定性 Δp 成反比。从理论计算可得 $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar$ 。这个关系称测不准关系。我们必须强调，它是粒子的波动性和波函数的几率解释的结果，是微观粒子的固有性质，而与测量是无关的。

三、量子力学中的力学量和对易关系

在经典力学中，力学量完全确定了粒子的状态。但在量子理论中，粒子的状态是用波函数来描写的。在给定的状态中，有些力学量的值是可以确定的，但有些则是无法确定的。那么力学量在量子力学中处于什么地位呢？我们怎样来描写它们呢？

以动量为例。当粒子处于某一状态时，虽然可能没有确定的动量值，但进行很多次测量时，可以得到确定的平均动量值 $\sum_i \rho(\mathbf{p}_i) \mathbf{p}_i$ 。其中 $\rho(\mathbf{p}_i)$ 为测到动量为 $\mathbf{p}_i$ 的几率。前面我们用 $\psi(\mathbf{r})$ 来描写粒子的状态， $|\psi(\mathbf{r})|^2$ 表示粒子在 $\mathbf{r}$ 处的几率。1但我们也可用粒子

处于动量为 $\mathbf{p}$ 时的几率来描写粒子的状态，这时粒子的波函数可写为 $\varphi(\mathbf{p})$ 。这类似于对一个函数，我们可以用直角坐标来描写它，也可用极坐标来描写它。不过我们这里称为坐标表象和动量表象。当然我们还可有能量表象、角动量表象等等。我们可以得到在不同的表象中的表达式，这些表达式已不是一个数了，而是表示一种运算，我们称之为算符。所以在量子力学中，力学量是用算符来描写的。它在不同的表象中表示不同的运算方式。

两个力学量在同一个表象中表示为两种运算方式。一般来说，这两种运算次序不是一定可交换的，存在一种交换关系，称为坐标和动量的对易式。不同的力学量有不同的对易式。当这两种运算次序可交换时，我们称此两力学量可对易。力学量的算符性和对易关系，也是粒子的波动性及波函数的几率解释的结果。

四、微观粒子的运动方程

量子力学理论主要解决两大类问题，一类是定态问题，即在与时间无关的势场中的粒子的状态和在与时间无关的相互作用下粒子体系的状态问题；另一类是跃迁问题，即在与时间有关的相互作用下，粒子或粒子系从一个状态跃迁到另一个状态的几率问题。在与时间无关的势场中，粒子的状态所满足的方程为

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{1}{2m} \nabla^2 + v(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}, t)$$

它称为薛定谔方程。这个方程不是严格推导出来的，它的正确与否，要由实验来检验。而事实上当用此方程来计算许多微观物理现象时，的确和实验符合得很好。对多粒子体系我们也可建立相应的薛定谔方程。但薛定谔方程只能描写自旋为零的非相对论粒子的运动。对自旋为零的相对论粒子的运动，要用克莱-高登方程来描写，而对自旋为 $1/2$ 的相对论粒子的运动，要用狄拉克方程来描写，这里不一一叙述了。

五、全同性原理和泡利不相容原理

当一个体系有几个粒子时，它的波函数应是这几个粒子变量的函数。如在坐标表象中，两个粒子波函数为 $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ 。当两个粒子不一样时，我们可以指定 $\mathbf{r}_1$ 是某一粒子的坐标， $\mathbf{r}_2$ 是另一个粒子的坐标。但当两个粒子一样时，由于微观粒子不是用轨道来描写的，我们无法跟踪它，所以不管哪个粒子处于 $\mathbf{r}_1$ （或 $\mathbf{r}_2$ ）上，对我们来说是没有区别的。所以 $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ 和 $\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$ 表示同一个状态，它们只能差一个常数，即 $\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = \eta \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ ，当然还应有 $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \eta \psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$ 。把两个式子结合起来得 $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \eta^2 \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ ，可见有 $\eta = \pm 1$ 。这表示将两个粒子的坐标交换时，波函数或者不变，或者只改变符号。当 $\eta = 1$ 时，称此波函数为全对称波函数；当 $\eta = -1$ 时，称它为全反对称波函数。这条原理称全同性原理。实验发现自旋为 $\hbar$ 整数倍的

粒子(称玻色子)的波函数是全对称的;自旋为 $\frac{h}{2}$ 的半整数倍的粒子(称费米子)的波函数是全反对称的。

费米子还要服从泡利不相容原理,即在一个状态上不能有两个全同的费米子。设一个费米子处于 ψ_1 态上,另一个费米子处于 ψ_2 态上,则根据全同原理, $\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2)$ 及 $\psi_1(\mathbf{r}_2)\psi_2(\mathbf{r}_1)$ 都描写此双费米子体系。又根据态叠加原理,它们的线性叠加也描写此双费米子体系。但根据全同性原理此体系的波函数应是全反对称的,显然如果两个费米子处于同一个态上,即 $\psi_1 = \psi_2$,则此波函数为零。这表示在一个状态上不能有两个全同的费米子。正因为有泡利不相容原理,所以原子中的电子必定分布于各条能级上,而不会都集中在最低能级上。

以上所述就是量子力学中的基本假设和原理,它们构成了量子力学的基础。在此基础上建立起来的,而其中最根本的则是波粒二象性及波函数的几率解释。