

## 第1章、绪论

量子力学 (Quantum Mechanics: QM)

量子物理学 (Quantum Physics: QP)

什么是“量子”？什么是“量子力学”？

为什么要学习量子力学？学习量子力学有什么用？

安东尼《新量子世界》：

“19 世纪是机械时代，  
20 世纪是信息时代，  
21 世纪是量子时代。”

曾谨言《量子力学教程》：

“没有量子力学和相对论的建立，就没有人类的现代物质文明。”

“量子力学极大地改变了人们的生活方式和工作方式。”

吉姆·艾尔-哈利利《神秘的量子生命：量子生物学时代的到来》

# 引言

## 没有量子力学， 就不会有生命

在整个科学领域，量子力学是最具影响力的重要理论。没有量子力学，我们就无法解释世界是如何运转的，比如：知更鸟长途迁徙时是如何通过微弱的地球磁场感知方向的？小丑鱼是如何找到回家之路的？光合作用中能量的传递效率为什么那么高？对所有这些问题的解答，都离不开量子力学，离不开量子隧穿、量子相干性和量子纠缠。

### 量子力学研究什么？

一般的说法是：量子力学是研究**微观物体**运动状态和运动规律的科学。但严格来说，量子力学**既适用于微观物体，也适用于宏观物体；小到基本粒子，大到整个宇宙**。在早期，量子效应只在微观过程表现出来，而现在，人们已在介观、宏观、甚至宇观世界发现许多量子效应。

与量子物理相对应，以前的物理称为 Classical Physics，中文一般称为经典物理学或古典物理学。

### 量子力学有哪些特点？怎样学习量子力学？

概念抽象（“荒诞”）、违背直觉（常识、经验）；

理论性强、计算复杂；要求手脑并用（记笔记、做习题）

本章内容：

## 1.1 量子力学的地位及作用

### 1.1.1 量子力学在物理课程中的位置

### 1.1.2 量子力学在物理学各分支学科中的应用

### 1.1.3 量子力学在其他一级学科中的应用

## 1.2 量子力学发展大事记

## 1.3 经典物理的困难和量子论的诞生

### 1.3.1 黑体辐射

### 1.3.2 光电效应

### 1.3.3 玻尔的原子理论

## 1.1 量子力学的地位及作用

### 1.1.1 量子力学在物理课程中的位置

（大学课程三段论）：公共基础课、专业基础课、专业课

#### 第一阶段专业基础课：

- 高等数学（数学分析、线性代数等）
- 普通物理（General Physics）（大学物理）
  - 力学： 机械运动
  - 热学： 热运动
  - 电磁学： 电磁现象；电磁运动
  - 光学： 可见光波段的电磁现象；电磁运动
  - 原子物理学 或 近代物理导论

(原子、分子、原子核、基本粒子、狭义相对论等的简介)

## 第二阶段专业基础课:

- 数学物理方法 (复变函数、数学物理方程、特殊函数)
- 四大力学
  - 理论力学 (经典力学): 机械运动
  - (经典) 电动力学: 电磁运动 (包括光)
  - 热力学与 (经典) 统计物理学(统计力学): 热运动
  - 量子力学
  - .....

### 1.1.2 量子力学在物理学各分支学科中的应用

- 物理学包括的二级学科 (专业)
  - 理论物理
  - 基本粒子物理
  - 原子核物理
  - 等离子体物理
  - 原子与分子物理
  - 凝聚态 (固态、液态) 物理
  - 声学
  - 光学
- 量子力学的后续课程 (用到量子力学)  
(不同的二级学科要求不同的后续课程)
  - 量子电动力学

- 量子统计力学
- 量子场论
- 量子光学-----激光
- 量子声学
- 原子分子物理（结构和光谱）
- 原子核物理-----原子能、核能
- 基本粒子物理
- 凝聚态物理：固态、液态
- 固体物理-----材料科学
  - 导体（金属）
  - 半导体—晶体管—集成电路（芯片）-----计算机
  - 绝缘体（电介质）
- .....

### 1.1.3 量子力学在其他一级学科中的应用

- 量子**化学**：化学键、化学反应动力学
- 量子**生物学**、分子生物学
- 量子**宇宙学**、量子引力理论
- **量子信息学（量子信息处理）**
  - 量子计算
  - 量子通信（墨子号量子实验卫星）
  - 量子密码学
- **量子操控（量子调控）**

补：

1、量子+（冠以“量子”的课程和学科）

量子力学（量子物理）

量子电动力学

量子统计力学

量子场论

量子光学---激光

量子电子学

量子声学

量子化学：化学键、化学反应动力学

量子生物学、分子生物学

量子宇宙学、量子引力理论

量子信息学（量子信息处理）：

量子计算

量子模拟

量子通信（墨子号量子实验卫星）

量子密码学

量子成像

量子计量（量子精密测量）、

量子检测

量子传感

量子雷达

量子材料

量子物质

量子科学、量子技术、量子工程、

量子操控（量子调控）

2、为什么有这么多冠以“量子”的学科？为什么“量子”的研究这么热？原因：奇特的量子效应！

3、有哪些量子效应？

## 1.2 量子力学发展大事记

（括号中为获得诺贝尔物理学奖的年份，前面为获得成果的年份）

1900 (1918)，普朗克（Planck，德），黑体辐射，**能量量子化**： $E = h\nu$ 。

（先有实验结果，后有理论解释）

1905 (1921)，爱因斯坦（Einstein，德），光电效应，光量子-光子，

**光的波粒二象性。**

$$E = h\nu, \quad p = \frac{h}{\lambda} \quad (p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda})。$$

（先有实验结果，后有理论解释）

爱因斯坦在解释光电效应实验时只用到公式  $E = h\nu$ 。反映光子具有动量的公式  $p = \frac{h}{\lambda}$  被后来的康普顿  $x$  射线散射实验证实。（1923 实验，

1927 获奖)

1913 (1922), 玻尔 (N.Bohr, 丹麦), 原子光谱和原子结构,

定态、量子跃迁及频率条件:  $\nu_{mn} = (E_m - E_n)/h$ 。

(先有实验结果, 后有理论解释)

以上为所谓的早期量子论或旧量子论 (old quantum theory)。其共同特点是: 为了解释已有的实验结果, 提出了新的假设、概念、理论。其后量子论的发展是理论走在实验的前面。主要沿两种思路发展, 一种思路由海森堡 (W.Heisenberg) + 波恩 (M.Born) + 约尔旦 (P.Jordan) 开创, 建立量子力学的矩阵形式 (矩阵力学); 另一种思路由德布罗意 (L.de Broglie)、薛定谔 (E.Schrodinger) 开创, 建立量子力学的波动形式 (波动力学), 最后, 两种形式由狄拉克 (P.A.Dirac) 统一, 证明矩阵力学和波动力学都只是量子力学普遍形式的两种具体形式。

1923 (1929), 德布罗意 (法), 物质粒子的波动性, 物质波,

实物粒子的波粒二象性。

$$\nu = E/h, \quad \lambda = h/p$$

(先有理论假设, 后有实验证实)

戴维逊 (C.J.Davisson) 和革末 (L.H.Germer)、汤姆逊 (G.P.Thomson) 从实验上证实了电子的波动性。 (1927 实验, 1937 获奖)

1926 (1933), 薛定谔 (奥地利), 波函数  $\psi(\vec{r}, t)$ ,

波动方程-薛定谔方程, 波动力学。

1926 (1954), 波恩 (德), 波函数的统计诠释:  $|\psi(\vec{r}, t)|^2$  概率密度,

$$\int d\vec{r} |\psi(\vec{r}, t)|^2 = 1。$$

1925(1932), 海森堡 (德), 矩阵力学; 不确定性原理。

海森堡建立矩阵力学的出发点是, 认为只有实验上可观测到的物理量才是有意义的, 才应该在理论中出现。当时, 人们在集中研究原子光谱问题, 而在原子光谱问题中, 只有光谱频率是可观测到的物理量, 人们根据实验规律总结出, 频率等于两个光谱项之差, 即  $\nu_{mn} = T_m - T_n$  具有两个下标, 可对应于矩阵元, 从而建立了矩阵力学。一般来说, 矩阵的乘法不一定满足交换率, 即  $AB \neq BA$ 。

1926 (1933), 狄拉克 (英), QM 的变换理论、表象理论、态矢量  $|\psi\rangle$

1927, 狄拉克, 电磁场的量子化

1928, 狄拉克, 相对论性波动方程、相对论性量子力学

至此, 量子力学的基本理论架构已建立 (注: 1942 年费曼: R.Feynman 提出了量子力学的另一种形式-路径积分, 1965 年获奖), 并获得广泛的应用。值得指出的是, 量子力学的建立起源于关于光的研究 (黑体辐射、光电效应), 但在量子力学建立之后, 最初却主要用于研究原子、分子、固体等所谓实物粒子, 直到 1960 年前后才开始用于研究光学问题, 导致了量子光学、激光的发展。

还值得指出, 尽管量子力学在应用方面取得了辉煌的成就, 但直到目前为止, 关于量子力学的基本解释一直存在争论。起初的争论集中在物体到底是粒子还是波? 后来的争论主要是因对哥本哈根学派的概率诠释和波函数塌缩不满意而提出另外的诠释, 主要有多世界诠释 (埃佛莱特: H.Everett III)、隐变量理论 (玻姆: D.Bohm) 等。

## 物体到底是粒子还是波？

现在的回答是：“粒子性”和“波动性”都是经典物理中的概念，一个经典物体不可能同时具有“粒子性”和“波动性”。而微观物体既具有经典意义上的“粒子性”，也具有经典意义上的“波动性”，即具有波-粒二象性。只不过在有些情况下呈现“粒子性”，在另一些情况下呈现“波动性”，即**观测结果取决于观测方式！**或者说，**观测方式决定了观测结果！** 下图是什么？



根据量子力学的观点，没有“客观”、“真相”、“本来”、。。。

推荐书籍:

[1] **曹天元**，《量子物理史话-上帝掷骰子吗？》，2008，辽宁教育出版社。论及：历史上光的波动性与粒子性之争、普朗克的黑体辐射、爱因斯坦的光电效应-光的波粒二象性、玻尔的原子理论和互补原理、海森堡的矩阵力学和不确定性原理、德布罗意关于实物粒子的波粒二象性假设、薛定谔的波动力学、量子力学的**哥本哈根诠释**（**概率解释**、**波函数塌缩**）、爱因斯坦-玻尔关于量子力学的论战、**EPR 佯谬**、薛定谔猫、量子纠缠态、隐变量理论（玻姆：**D.Bohm**）、贝尔（**S.J.Bell**）

不等式、退相干理论（H.D.Zeh; W.H.Zurek）、量子力学的多世界诠释（埃佛莱特：H.Everett III）、量子力学的费曼（R.P.Feynman）路径积分形式，.....。

[2] 安东尼等著，雷奕安译，《新量子世界》，2006，湖南科学技术出版社。除了论及量子力学的一些基本概念外，还论及量子力学的在现代科技中的应用，例如：电子显微镜、隧道扫描显微镜、核反应与核能、从晶体管到计算机、超流与超导、原子的激光冷却与囚禁、玻色-爱因斯坦凝聚、贝尔不等式与 EPR 佯谬、量子力学的多世界诠释、退相干理论、量子工程与纳米技术、量子信息（量子计算、量子通信、量子密码）、狄拉克与反粒子、费曼图与虚粒子、量子宇宙学、霍金辐射与黑洞、.....、量子物理与科幻小说。

[3] 吉姆.艾尔-哈利利：《神秘的量子生命：量子生物学时代的到来》（2014 年著，2016 年译）

# 引言

## 没有量子力学， 就不会有生命

在整个科学领域，量子力学是最具影响力的重要理论。没有量子力学，我们就无法解释世界是如何运转的，比如：知更鸟长途迁徙时是如何通过微弱的地球磁场感知方向的？小丑鱼是如何找到回家之路的？光合作用中能量的传递效率为什么那么高？对所有这些问题的解答，都离不开量子力学，离不开量子隧穿、量子相干性和量子纠缠。

### 1.3 经典物理的困难和量子论的诞生

在 19 世纪末（189x 年），经典物理（经典力学-牛顿力学、经典电磁学-麦可斯韦理论、热力学和经典统计物理学）的理论框架已经相当完善，并取得了巨大成就，以致人们认为物理学理论已相当成熟，不会再有什么新的发现。然而，正如 1900 年 4 月 27 日开尔文男爵所讲（大意）“在物理学阳光灿烂的天空上漂浮着**两朵小乌云**”，其中一朵“乌云”与迈克耳逊-莫雷实验有关，导致了后来**相对论**的建立；另一朵“乌云”与黑体辐射实验有关，导致了后来**量子论**的诞生。这里我们只讨论后者。

#### 1.3.1 黑体辐射

##### A、热辐射

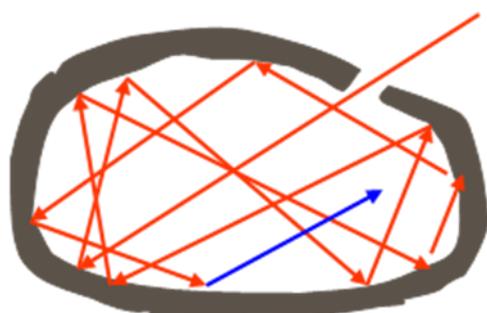
物体由于**温度**不等于零而辐射（发射）电磁场的过程称为**热辐射** (thermal radiation)。热辐射电磁场的能量密度（或强度）相对波长（或频率）有一个分布，称为**光谱**。温度不同，光谱形状也不同。

一般来说，物体在辐射电磁波的同时也吸收电磁波。当物体辐射的能量等于在同一时间内所吸收的能量时，热辐射过程达到平衡，称为**平衡热辐射**。

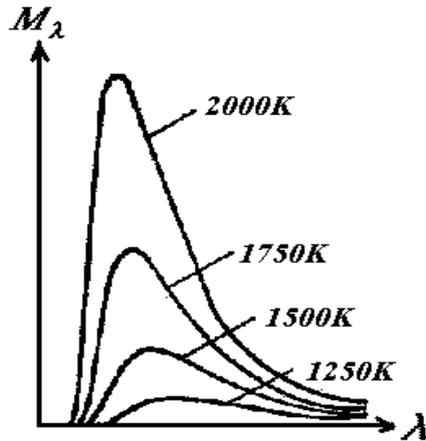
## B、黑体和黑体辐射的基本规律

上面谈到，一般来说，物体在辐射电磁波的同时也吸收电磁波。但是，不同的物体辐射和吸收电磁波的能力是不同的。如果一个物体能够完全吸收照射到它上面的各种波长的电磁波，则该物体称为**绝对黑体**（简称**黑体**）。

当然，绝对的黑体是不存在的，它只是一个**理想模型**。开小孔的空腔可近似看作黑体。



黑体辐射**光谱**的**实验规律**如下图所示：



可见，温度不同，光谱形状也不同。

可是，怎样从理论上解释这种实验规律呢？这困惑了物理学家很长的时间，最终导致了量子论的诞生。

1894 年，德国物理学家维恩（W.Wein）根据实验数据分析提出了一个**经验公式（维恩公式）**：

$$\rho_{\nu}(T) \equiv \rho(\nu, T) = c_1 \nu^3 e^{-c_2 \frac{\nu}{T}}$$

其中  $\rho_{\nu}(T)$  为电磁波的能量密度， $c_1$  和  $c_2$  为经验常数。可见，电磁波的能量密度只是频率  $\nu$  和温度  $T$  的函数。这个公式只在**高频**部分与实验曲线相符。

后来，瑞利（J.W.S.Reyleigh）和金斯（J.H.Jeans）根据**经典电动力学**和**经典统计物理学**导出了一个**理论公式（瑞利—金斯公式）**：

$$\rho_{\nu}(T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} k_B T \propto \nu^2 T$$

其中  $c$  为真空中的光速， $k_B$  为**玻尔兹曼（Boltzmann）常数**。这个公式只能解释**低频**部分的实验曲线，而在高频部分与实验曲线相差甚远。由公式  $\rho_{\nu} \propto \nu^2$  可以看出，在高频部分， $\rho_{\nu}$  是发散的，称为**紫外灾难**！

1900年10月19日，普朗克基于维恩公式和瑞利—金斯公式“**凑出了**”一个黑体辐射公式：

$$\rho_{\nu}(T) = c_1 \frac{\nu^3}{e^{\frac{c_2 \nu}{T}} - 1}$$

研究发现，这个“**凑出来**”的公式与实验结果完全相符！那么，这个公式背后反映的物理原理是什么呢？经过近两个月的思考，普朗克大胆地假设，物体在发射和吸收电磁场的能量时，只能以某个最小能量单元的整数倍进行（而不能以任意的连续值进行），这种思想称为**能量量子化**，这个最小能量单元称为**能量量子**，其值正比于电磁场的频率，即

$$E = h\nu$$

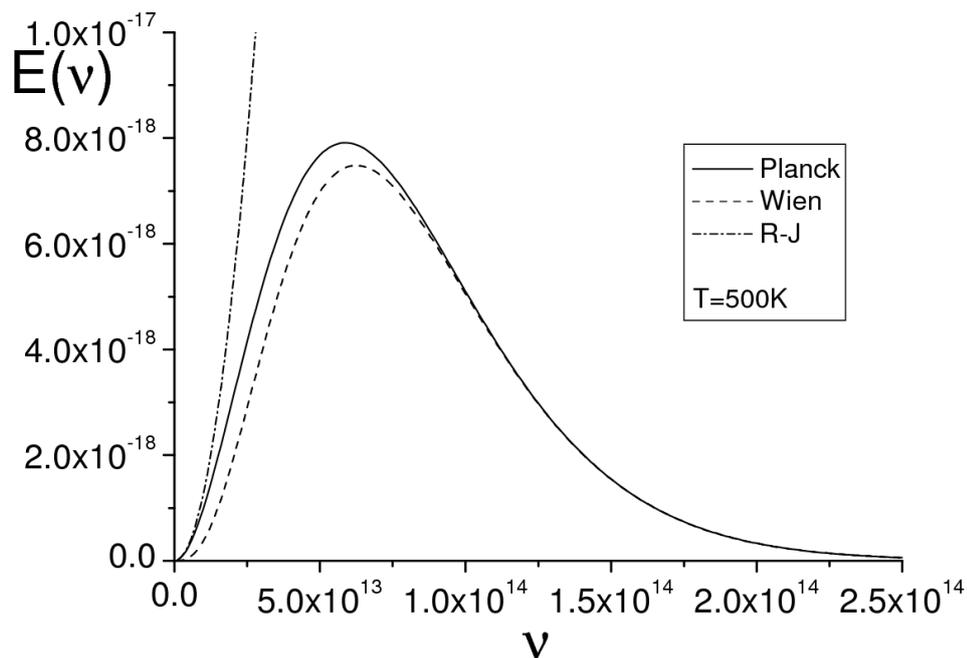
其中 $h$ 为常数( $h \approx 6.626 \times 10^{-34} J \cdot s$ )，后来称为**普朗克常数**。在这个假设的基础上，1900年12月14日普朗克提出了下列理论公式：

$$\rho_{\nu}(T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1} \propto \frac{h\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}$$

这就是著名的**普朗克黑体辐射公式**。在这个公式中不存在经验常数。

普朗克因引进能量量子化的概念并成功地解释了黑体辐射的实验规律而荣获1918年获诺贝尔物理学奖。并被公认为**量子论之父**。1900年被确定为量子论的诞生年。

普朗克公式在高频极限和低频极限下分别过渡到维恩公式和瑞利—金斯公式。这三个公式的比较如下图所示。



### 1.3.2 光电效应

简单来说，**光电效应**指的是，当光照射到金属上时，会有电子逸出现象。当外电路接通，会形成电流。在光电效应实验中有几种现象无法用经典理论来解释：

- (1) 光能否打出电子与光的强度（指**经典定义**，正比于光振幅的平方： $I \propto |\vec{E}|^2$ ）无关，只与光的频率有关，且存在一个**阈值（临界）频率**；
- (2) 一旦光的频率大于阈值频率，则电子马上逸出，不需要时间积累能量，与光的强度无关；
- (3) 逸出电子的动能与光的频率成正比，而与光的强度无关。

我们知道，金属对其中的电子有一定的束缚力，电子只有获得一定的能量（称为**逸出功**）才能从金属中逸出。当光照射到金属上时，

电子可从光中获得能量从金属中逸出。然而我们知道，**根据经典电磁理论，光的能量正比于光的强度，而与频率无关**。由此推出的结论是，光能否打出电子应与光的强度有关，而与光的频率无关，这与上述实验现象（1）相矛盾。另外，根据经典电磁理论，既然光的能量正比于光的强度，可以设想，当光比较强时，打出电子需要较短的时间；而当光比较弱时，打出电子需要较长的时间，这与上述实验现象（2）相矛盾。还有，根据经典电磁理论，逸出电子的动能应与光的强度有关，而与光的频率无关，这与上述实验现象（3）相矛盾。

爱因斯坦从普朗克的能量量子化得到启发，他假设光由所谓的“**光子**”（最初称为“**光量子**”）组成，每个光子的能量为  $E = h\nu$ （注意：这一假设与经典电磁理论完全不相容！）。据此，爱因斯坦成功地解释了光电效应实验，并因此获得 1921 年诺贝尔物理学奖。

设金属的逸出功为  $W$ ，逸出电子的动能为  $E_k$ ，光子的能量为  $E = h\nu$ ，爱因斯坦提出了如下的**光电效应公式**：

$$E_k = h\nu - W$$

即电子吸收一个光子的能量  $h\nu$  后，一部分用来克服金属的逸出功  $W$ ，剩下的即为电子的动能为  $E_k$ 。显然，只有当光的频率满足  $h\nu \geq W$  时，才有  $E_k \geq 0$ ，即才有电子逸出。 $\nu_T = W/h$  称为阈值频率。这就解释了实验现象（1）；一旦光的频率大于阈值频率，即  $\nu > \nu_T = W/h$ ，则电子马上逸出，不需要时间积累，这就解释了实验现象（2）；另外，从上式可见， $E_k \propto \nu$ ，这就解释了实验现象（3）。

总之，光能否打出电子，只与光的频率有关，而与**经典意义**上的

光的强度（正比于光振幅平方： $I_c \propto |E|^2$ ）无关。我们可定义**量子意义**上光的强度（简称**量子光强**）如下：设单位时间通过单位面积的光子数为 $n$ ，对频率为 $\nu$ 的光，每个光子的能量为 $h\nu$ ，则量子光强为 $I_Q = nh\nu$ 。当光的频率一定且大于阈值频率时，则量子光强越强（对应 $n$ 越大），则打出的电子数越多，在外电路中形成的电流越大。

### 1.3.3 玻尔的氢原子理论

1913年之前，人们对原子的了解包括：（1）原子的**行星模型**是正确的（由卢瑟福的 $\alpha$ 粒子散射实验所证实）；（2）原子是稳定存在的；（3）原子的光谱是**线状光谱**（离散光谱）。然而，经典理论不能解释这几点。根据**经典电动力学**，**带电粒子作加速运动**时要辐射电磁波。在原子的行星模型中，电子绕原子核旋转（加速运动），因此要辐射电磁波，从而损失其能量，进而减小旋转半径，最终电子落到原子核，带负电的电子与带正电的原子核相中和，使原子不能稳定存在。而我们知道在自然界原子是稳定存在的。另一方面，当电子绕原子核旋转-辐射电磁波-损失能量时，旋转半径不断**连续**减小，旋转频率不断**连续**加快，这样，其辐射电磁波的频率应该是**连续**变化的，而实验发现原子辐射电磁波的频率是离散变化的。为了解释原子的稳定存在和原子的离散光谱，1913年玻尔提出了他的原子理论，它基于下面两条基本假设：

（1）**定态**假设和**量子化条件**：在原子中，电子只能在一系列半径不连续变化的圆轨道上运动，其**角动量是量子化的**，设角动量为 $L$ ，

则  $L = n\hbar \left( \hbar = \frac{h}{2\pi}, n = 1, 2, 3, \dots \right)$ 。这些轨道对应确定的能量（即电子在这些轨道上运动时，虽然有加速度，但不辐射电磁波，这与经典电动力学完全不相容！），这些轨道对应的状态称为**定态**。

(2) **量子跃迁及频率条件**：当电子从一个定态  $E_m$  “跃迁”到另一个定态  $E_n$  时发射或吸收电磁波，其频率满足

$$\nu_{mn} = \frac{|E_m - E_n|}{h}$$

上述两条基本假设成功地保证了原子的稳定存在和离散光谱。基于上述两条基本假设，结合经典理论，玻尔导出了氢原子的定态半径和能量的表达式，计算了氢原子发射或吸收电磁波的频率，其结果与实验非常符合。

根据假设 (1) 的量子化条件公式  $L = n\hbar$  和经典物理中的公式

$$E = \frac{1}{2} m_e v^2 - \frac{e^2}{r}, \quad m_e \frac{v^2}{r} = \frac{e^2}{r^2} \quad (\text{向心力})$$

可导出氢原子的量子化**轨道半径**和定态**能级公式**（作为练习）

$$r_n = n^2 \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = n^2 r_1 \quad (n = 1, 2, 3, \dots), \quad r_1 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$$

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{m_e e^4}{2\hbar^2} = \frac{1}{n^2} E_1 \quad (n = 1, 2, 3, \dots), \quad E_1 = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2}$$

将常数 ( $m_e, e, \hbar$ ) 的值代入，可求得  $r_1 = 0.529 \times 10^{-10} m$ （**玻尔半径**），

$E_1 = -13.6 eV$ （**基态能量**）。

根据假设 (2) 可导出早先从实验上总结出来的氢原子的光谱公式

-**巴尔末公式**：  $\nu_{mn} = T_m - T_n$

$$\boxed{\nu_{mn} = \frac{E_m - E_n}{h} = \frac{E_1}{h} \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) = R_\infty c \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \begin{matrix} (n=1, 2, 3, \dots) \\ m > n \end{matrix}}$$

其中  $R_\infty$  称为**里德伯 (Rydberg) 常数**。

玻尔因提出上述氢原子理论而获得 1922 年诺奖。

但是必须指出，尽管玻尔的氢原子理论获得了很大的成功，但也存在严重的缺陷：

(1) 它只能用于氢原子和单电子离子，对稍微复杂一点的原子和离子就无能为力；

(2) 即使对氢原子和单电子离子，它也只能计算发射或吸收的电磁波的频率，而不能计算强度。这表明还需要建立更完善的理论。