

一念非凡之薛定谔*

量子力学是本征值问题

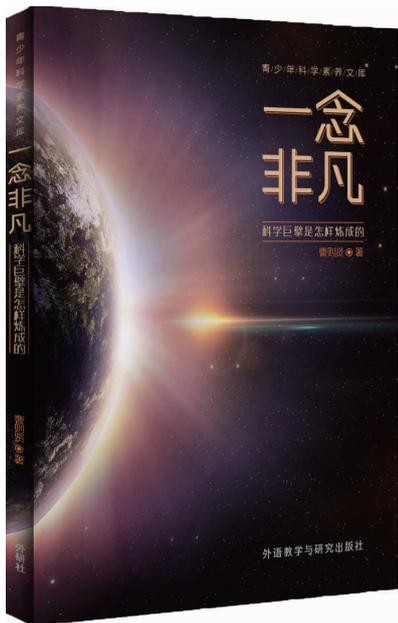
曹则贤[†]

(中国科学院物理研究所 北京 100190)

2015-10-14收到

† email: zxcao@iphy.ac.cn

DOI: 10.7693/wl20160206



量子力学是二十世纪物理学的两大支柱之一。如果论起对人类社会的影响，量子力学比另一支柱——相对论——要大得多。有了量子力学，我们理解了原子的光谱，它的影响之一是让我们能将整个可观宇宙纳入我们的研究范围；我们理解了固体的导电性，它的影响之一是让我们有了半导体的概念从而使人类进入了信息时代。对于今天的物理系学生来说，掌握量子力学知识是起码的要求¹⁾。量子力学的基本方程是薛定谔方程， $i\hbar\partial\Psi/\partial t = H\Psi$ 。

这个方程，就是左边一项右边一项，按照西方的表达，外观上具有欺骗性的简单(deceitful simplicity)，但它却是最重要的物理学方程之一。

薛定谔(Erwin Schrödinger, 1887—1961)，奥地利维也纳人。他1906—1910年在维也纳大学学习，1914年通过授课资格考评²⁾，1921年才在波兰一所大学获得教授职位，同年转往苏黎世大学，1927年起接替柏林大学普朗克的位置。同那几位与他齐名的、同时代的德语国家物理教授相比，薛定谔可以说是大器晚成。他1925年底得到确立其地位的薛定谔方程时已是38岁。

1925年底，法国青年德布罗意(Louis de Broglie)的博士论文，其中提出了物质波的概念，传到了苏黎世工业大学的德拜(Peter Debye)教授手里。德布罗意物质波的概念基于对当时物理学的综合：(1)光的波动性是被确立的，但人们又不得不接受它具有粒子性的说法。爱因斯坦就是用光能量量子的概念解释了光电效应，其中的一个假设就是光的能量量子是一个一个地被吸收的；(2)以前性质不太清楚的阴极射线被发现具有动量，可以被电磁场

偏转，是一种带负电的粒子，如今被称为电子。德布罗意作了一个大胆的假设：既然光分明是波那样的东西竟然还具有粒子性，那现在我们觉得是粒子的东西，比如电子，不会也表现出波动行为吧？这一观点就是所谓的物质的波粒二象性³⁾。参照光的频率 ν 和波长 λ 同光的能量量子之能量 E 和动量 p 之间的关系，德布罗意猜测若电子等粒子也是波的话，其频率和波长应该分别是 $\nu = E/h$ ； $\lambda = h/p$ ，这里 h 是普朗克常数。德拜教授拿到这样的博士论文和如此简单的公式不知是什么表情，他的说得出口的评论是如果认定电子等粒子是波的话，怎么着也该给凑个波动方程吧？那时候，机械波和电磁波的方程可已经是被人们研究透了的。德拜把论文交给了当时在那里访问的薛定谔手里，希望他仔细看看，下次讨论会上能给大家讲讲。

但是，薛定谔当真了，他要给物质波找到一个波动方程。确切地说，是为电子找到一个波动的方程。

薛定谔那时38岁，同其他的科学巨擘相比，他已经很老而且毫无建树。当时在量子力学领域声名鹊

* 本文摘自《一念非凡——科学巨擘是怎样炼成的》一书，外语教学与研究出版社，2016。

1) 中学生其实也能理解足够多的量子力学知识，如果有合适的《量子力学一少年版》的话。

2) 德语国家的一种学术制度。获得博士学位者可以申请做Habilitation，独立开展一段时间的工作和教学，经考核通过后获得授课资格，可以聘为私俸讲师(Privatdozent)。此人此时可以把自己的头衔写为Habil. Dr.，已有教授资格，只需要等待合适的职位空缺。

3) 波粒二象性并不象我们在中文语境中理解的那样具有戏剧性的对立。在对光和粒子的描述中，ray(射线)的概念都是重要的当事者，电子在被命名为电子以前就是被称为阴极射线的，而光的射线被当作粒子流不妨碍牛顿谈论光的波长。

起的海森堡是1901年出生的，而1928年给出电子的相对论量子力学方程的狄拉克是1902年出生的。就在1925年秋，薛定谔写下了一段感慨，多少能让我们看到他内心的焦躁：“我，38岁，早过了伟大理论学家作出重大发现的年纪，占着爱因斯坦曾占过的教席，我是谁？我从哪里来？我要到哪里去？”落笔不久，他的辉煌时刻就来了。1925年圣诞来临前，薛定谔带着德拜的问题去了学校附近山中的疗养院，一周后他带着他的量子力学方程下山了。1926年，薛定谔分四部分发表了“作为本征值问题的量子力学”一文，为量子力学奠定了基础，也奠定了他在物理学史上的地位。

薛定谔是如何得到他的量子力学方程的，从文献中的资料不易再现当初完整的过程。薛定谔一开始是从相对论出发的，毕竟那时关于电子的相对论理论是已经有了的，且电子的行为必定是相对论性的，但是这条路薛定谔没走通。他转而回到经典力学。他要解的形式是知道的，波的表达形式在物理学家眼里就是函数 $\Psi(x, t) = \psi_0 e^{i(kx - \omega t)}$ ，或者干脆写成 $\Psi(x, t) = \psi_0 e^{2\pi i(x/\lambda - \nu t)}$ 。把德布罗意的关系带入波函数的表达式，波函数就变成了 $\Psi(x, t) = \psi_0 e^{i(px - Et)/\hbar}$ 的样子，带入一般的经典力学里弦的振动方程就得到了后来被称为薛定谔方程的波动方程 $i\hbar \partial \Psi / \partial t = H \Psi$ ，这里的 H 是哈密顿量，为系统的动能与势能之和。熟悉经典力学的薛定谔对哈密顿量 H 可亲切了。至于这里的函数 Ψ 在描述电子的行为时是什么东西，薛定谔不知道⁴⁾。薛

定谔把他这个方程应用于氢原子问题，他发现只要要求波函数 Ψ 是有界的，就能得到电子在氢原子中的能量是三个量子(整数)数 (n, l, m) 的函数， $E_{n, l, m} = -E_0/n^2$ 。这个能量公式再现了玻尔原子模型给出的氢原子中电子的能量公式，能解释氢气的谱线。目光敏锐的读者已经注意到，公式 $E_{n, l, m} = -E_0/n^2$ 的右侧项没有出现 (l, m) ，考虑在电磁场中的情形它们就出现了——这意思是说薛定谔的方程能解释谱线的斯塔克现象(谱线在电场下的分裂)和塞曼现象(谱线在磁场下的分裂)。薛定谔方程太伟大了，它几乎就是量子力学的标志(图1)，是少数几个值得刻到墓碑上的公式。当然了，它也是初学量子力学者遇到的第一头拦路虎。薛定谔有理由为自己感到骄傲了。

然而薛定谔到底是怎样构造他的量子力学方程的？笔者从一些支离破碎的信息中拼凑的一个过程也许更合理一些，至少从科学思想演化的角度来说它是连贯的。薛定谔在从狭义相对论出发的初步尝试失败以后，转向了玻尔兹曼的熵公式 $S = k \log W$ 。作为维也纳人和维也纳大学的学生，他对这个公式太熟悉了。这个公式中的 W 在德语中是当作几率(Wahrscheinlichkeit)的首字母来理解的⁵⁾，但它也是波(Welle)这个词的首字母。要得到波的方程不就是要得到关于 W 的方程，这不现成的就是一个 W 的方程嘛。所以要把 $S = k \log W$ 写成 W 是主角的形式， $W = e^{S/k}$ 。不过这指数函数中的变量需要加上虚数因子 i 才能表示波动，记得欧拉公式 $e^{ix} = \cos x + i \sin x$



图1 维也纳大学摆放的薛定谔的大理石胸像，上面刻有公式 $i\hbar \psi = H\psi$

吧，正弦函数和余弦函数是物理学家们表示波的不二法门⁶⁾。此外，要描述量子力学，那得和量子力学有关系，那就把玻尔兹曼常数 k 换成普朗克常数 h 吧。于是，描述波 W 的函数就成了 $W = e^{iS/\hbar}$ ($\hbar = h/2\pi$) 的样子。作为优秀的物理学家，薛定谔当然明白在物理里用的函数中的变量必须是无量纲的数，普朗克常数的量纲是作用量的量纲，则那个 S 的量纲也应该是作用量的量纲。 S 原来是熵，现在在薛定谔的眼里是个量纲为作用量的一个量。薛定谔太熟悉经典力学了，他知道经典力学里作正则变换的时候引入过一个量纲为作用量的函数 S ，而且还有 S 该满足的方程，Hamilton—Jacobi 方程， $\partial S / \partial t + H = 0$ 。把 $W = e^{iS/\hbar}$ 带入 Hamilton—Jacobi 方程 $\partial S / \partial t + H = 0$ ，就得到了 $i\hbar \partial W / \partial t = HW$ 。当然啦，用 W 表示波似乎还有经典力学的土气，换个希腊字母 Ψ 表示量子力学

4) 这个函数 Ψ 被称为量子力学的波函数。它的意义到底是什么，很长时期都是一个争论的话题，现在还有人在争论。现在的标准解释是这个复函数的模平方代表粒子出现的几率密度。

5) 公式 $S = k \log W$ 中的 W 若作为经典几率理解，严格地应该写成 $S = -k \log W$ 。使用微观状态数的熵公式有时也写成 $S = k \log \Omega$ 的形式。

6) 这难免不是限制物理学的一个因素。

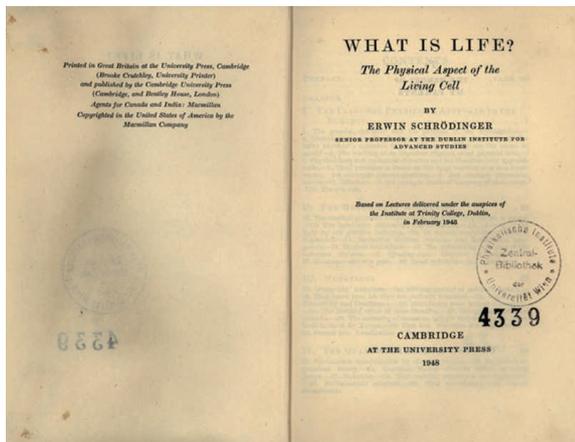


图2 薛定谔的塑造了生命科学的小册子《什么是生命》

的波吧(薛定谔写过一本叫《自然与希腊人》的书,而且会希腊语),这样就得到了量子力学的薛定谔方程 $i\hbar\partial\Psi/\partial t = H\Psi$ 。 H 的意义也改变了,在经典力学里它是一个量,在量子力学中它是算符(operator),因此薛定谔方程也可写成 $i\hbar\partial\Psi/\partial t = \hat{H}\Psi$ 的样子。理解薛定谔方程的产生过程需要跟得上思想的跳跃,别不习

惯,物理学就是这么构造出来的。薛定谔方程应用的巨大成功使得人们不再去纠缠其构造是否合理。

薛定谔方程虽然是量子力学的基本方程,成千上万的人修习过量子力学,但是却鲜有人读懂了薛定谔1926年那篇奠基性论文的题目“作为本征值问题的量子力学”。1987年终于有一个人读懂了,那人把麦克斯韦方程组改造成了薛定谔方程那样的本征值问题,于是有了光子晶体的概念。

薛定谔不只是一个单纯的物理学家,他还是一个了不起的文化学者,对人与自然的关系有深刻的思考。1943年薛定谔在都柏林的六个讲座集成了一本小册子《什么是生

命》(图2)。薛定谔从物理的角度思考生命的本质,他认为生命区别于无生命的存在一定是其中存在着承载和表达信息的东西,而这个信息载体的结构一定是准周期的(aperiodic)——完全无序和晶体那般地有序都意味着承载信息能力的不足。后续的科学发现证明了薛定谔的思想之深刻,DNA螺旋结构的发现获得了1962年的诺贝尔生理或医学奖,准周期结构的研究获得了2011年的诺贝尔化学奖。

参考文献

- [1] Moore W. Schrödinger: life and thought. Cambridge University Press, 1989
- [2] Farmelo G. It Must be Beautiful: Great Equations of Modern Science. Granta, 2003
- [3] Schrödinger E. What is life? Cambridge University Press, 1948

读者和编者

订阅《物理》得好礼

——超值回馈《岁月留痕——<物理>四十年集萃》

部特推出优惠订阅活动:向编辑部连续订阅2年《物理》杂志,将获赠《岁月留痕——<物理>四十年集萃》一本(该书收录了从1972年到2012年在《物理》发表的40篇文章,476页精美印刷,定价68元,值得收藏)。

希望读者们爱上《物理》!

订阅方式(编辑部直接订阅优惠价180元/年)

(1) 邮局汇款

收款人地址:北京603信箱,100190

收款人姓名:《物理》编辑部

(2) 银行汇款

开户行:农行北京科院南路支行

为答谢广大读者长期以来的关爱和支持,《物理》编辑

户名:中国科学院物理研究所

帐号:112 501 010 400 056 99

(请注明《物理》编辑部)

咨询电话:010-82649266; 82649277

Email: physics@iphy.ac.cn

