

什么是量子力学?

曹则贤[†]

(中国科学院物理研究所 北京 100190)

2020-01-19 收到

[†] email: zxcao@iphy.ac.cn

DOI: 10.7693/wl20200204

What is quantum mechanics?

CAO Ze-Xian[†]

(Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

摘要 1900~1928 年间是物理学史上最激动人心的时代，一群天才，主要是年轻人，在不到三十年的时间里构造了崭新的量子力学体系，从而改变了物理学的面貌，也彻底地改变了人类社会的面貌。本文将系统地解释什么是量子(quantum)、什么是力学(mechanics)，在对量子力学创建过程的回顾中讲述构成量子力学的具体内容，然后会介绍几例量子力学带来的新技术。量子力学从来都不是什么革命，它只是经典物理学自然的、逻辑的延续。量子力学一如物理学的其它分支，都是人类思想智慧的结晶。量子力学，还有相对论，这些百多年前的头脑风暴，今天应该成为受教育者的知识标配。

关键词

(能量、作用量、相空间)量子，量子化，黑体辐射，光谱线，玻尔模型，跃迁，量子化条件，矩阵力学，波动力学，波函数，量子数，自旋，群论，相对论量子力学，反粒子

Abstract Quantum mechanics was constructed in the period of 1900~1928 by a school of well-educated geniuses, some are only youngsters in their twenties. The quantum theory, though still being far from complete, has since essentially changed physics, consequently our world. In this article, after verbally explaining the meaning of quantum and mechanics, the theory of quantum mechanics will be presented with regard to the details of its construction, and concluded with some exemplary applications. To the current author, quantum mechanics is in no sense a revolution, rather it is simply a natural extension of classical mechanics. Quantum mechanics, and also the contemporary theory of relativity, should be the knowledge default for students of today.

Keywords quantum, quantization, black-body radiation, spectral lines, Bohr model, jump, quantization condition, matrix mechanics, wave mechanics, wave function, quantum numbers, spin, group theory, relativistic quantum mechanics, antiparticle

1900~1928 年间是物理学史上最激动人心的时代，一群天才，主要是年轻人，在不到三十年的时间里构造了崭新的量子力学体系。若将 1900 年普朗克得到黑体辐射谱的数学表达作为量子力学诞生的标志，则量子力学至今已诞生 120 年了。量子力学不仅改变了物理学的面貌，也彻底地改变了人类社会的面貌。量子力学是人

类思想智慧的结晶，百多年前它是天才头脑风暴的产物，在今天它应该成为受教育者的知识标配。本文将在对量子力学创建过程的回顾中系统讲述构成量子力学的具体内容。文章的大致章节安排如下：

- (1) Quantum 与 mechanics 释义
- (2) 量子意味什么?

- (3) 量子力学是如何创立的?
- (4) 量子力学的辉煌成就
- (5) 如何学习量子力学?

1 Quantum与mechanics释义

Quantum mechanics, 量子力学, 其中的 quantum 来自拉丁语形容词“多少”的中性形式。拉丁语形容词“多少”的阳性、中性、阴性形式分别是 quantus, quantum, quanta。在拉丁语系的现代语言中, 比如意大利语, quantum 的同源词都明显是意思, 比如 Quanto costano (这东西多少钱)? Quanti anni hai (你有几个岁, 即贵庚几何)? 如今英文的 quantity, quantitate, quantitative 都源于 quantum, 和数量有关, 是定量、量化的意思。实际上, 在英语中 quantum 这个词的原形也一直被当作“数量”在用, 比如见于 quantum of rainfall (降雨量)。在著名的007系列中, 有一集为 quantum of solace, 被翻译成了“量子危机”。其实这里的 quantum 不可以作“量子”解。Quantum of solace 是舒适度、安全度的意思。过去的江湖人士、而今的特工或者明星到了任何地方, 都要本能地迅速评估出环境的安全度或者舒适度, 电影 Quantum of solace 要反映的就是特工007的这种本领。在和量子力学有关的西语语境中, quantum (quant) 被当成名词单数, 而 quanta (quanten) 被当成名词复数用, 偶尔也有用 quantal 的。

那么 quantum mechanics 中的 mechanics 是什么意思呢? Mechanic 是个希腊语词, 与机械、工程有关, 比如希腊语的工程师是 μηχανικός (mechanikos), 照相机是 φωτογραφική μηχανή (photografee mechane)。弓箭、抛石机是人类最早的机械, 机械手表可说是机械制造的巅峰。Mechanics, mechanism, 正确的理解是机巧、道理、机制, how it goes, 类似汉语的“道”。十九世纪人们用机械观来理解遇到的各种物理现象, 故有热的机械观 (the mechanics of heat), 电的机械观 (the mechanics of electricity), 原子的机

械观 (the mechanics of atom)。Mechanics 被汉译为力学是错译, 英语的力学是 theory of force, 德语为 die Kraftslehre, 但是力的概念在1894年已经被赫兹踢出了物理学, 后来的物理学基本不再拿力来说事情。Analytical mechanics (分析力学), statistical mechanics (统计力学), 都不是力学, 如果说 analytical mechanics 还偶尔有 force 这个概念出现的话, 在 statistical mechanics 就根本没有力的踪影。至于把热功转换的学问, thermodynamics (dynamis, 功、能力、威力), 给理解为热—力学, 将之连同 electrodynamics (电—动力学) 一起都归于所谓的四大“力”学, 其害不浅。Quantum Mechanics, 字面上大约可以理解关于小物理量世界的道, 日本人把它翻译成量子力学。

2 量子意味着什么?

当我们将量子, quantum, 的概念引入科学时, 我们看中或者说试图赋予它什么特性呢? 一个事物之最小构成单元就是 quantum, 它具有完整性、不可分辨性。沙丁鱼群的 quantum 就是一条一条的沙丁鱼。谈论量子问题要关注两个词, atom 和 integer, 不要把它们简单地按照英汉字典理解成“原子”和“整数”, 而是应该按照拉丁语字面理解为不可分 (a-tom) 和不相连 (in-teger)。Atom 和 integer 就体现了量子的精神, 这种精神在日常生活中就有应用。试举一例。春秋时期, 齐景公麾下有三个猛士公孙接、田开疆、古冶子, 因居功自傲得罪了相国晏婴 (“晏子过而趋, 三子者不起”), 结果 “一朝被谗言, 二桃杀三士。”为什么二桃能杀三士呢? 因为桃在被 “计功而食” 的语境中就有了不可分的特性 (atomicity), 两个桃子



图1 二桃杀三士, 选自《南阳汉画像石精萃》

三个人分，只好争抢。三个猛士因争抢引起了羞辱感，结果全自杀身亡，这完全是着了人家的量子计谋(图1)。量子(quantum)，不可分性(atomicity)或者分立的特性(discreteness)，相对应的是连续、弥散的分布。尊重分立性的存在，也是古老的生活智慧。人民解放军有一位将军皮定均中将，据传他就规定他的部队里“吃鸡蛋必须以煮鸡蛋的形式发到士兵手里，不许做成鸡蛋汤、炒鸡蛋。”煮鸡蛋体现的是一个一个鸡蛋的分立存在，忽略鸡蛋个头上的差别，则吃到了就是吃到了，一点不含糊。与之相对，炒鸡蛋、鸡蛋汤语境下的鸡蛋是搅合到一起的，鸡蛋失去了其量子特征，则就有了很大的可含糊的余地：“二斤鸡蛋炒两个辣椒和二斤辣椒炒两个鸡蛋，都是辣椒炒鸡蛋。”一般教科书中将经典物理放到量子物理的对立面上，暗示经典物理不关注 discreteness 的问题，恕笔者不敢苟同。

量子是存在的最小单元，涉及不可分和分立性，则当我们谈论由少数几个单元组成的体系时，要抱着一种谨慎的态度，因为这里要用到不同的处理方式或者哲学。比如我国2018年GDP总量约是93万亿元，以人民币的量子来表示，就是9300万亿分，是一个16位数。我们说增长率是6.6%，这个数值单纯从算术的角度来看是合理的；其实就是说增长率为6.612724568932%也行。但是，若我们说某单位工资额比去年同比涨了6.61%就可能不是很科学，因为工资可能就是分几档涨的，其中就不含6.61%这一档。此外，涨工资更多的是关系到个人的事情，含糊的、近似的平均涨6.61%的说法数学上没大毛病但也不科学。一个极端的例子是，若提到谁家的人口增长，比如说老马家的人口去年增长了6%，虽然百分比后面都没有小数点，它也显得不是人话。对于家庭这种由少数几个量子(人)组成的体系，说清楚马王家到底几口人添了几个孩子才恰当。大家这感觉到了吧，量子的概念及关联的思维不是多么邪乎，它就存在于我们的日常生活中。

找到或者定义了一个物理量的量子，就是量

子化。量子力学里量子化了什么物理量呢？首先被量子化了的是能量，具体地，先被量子化的是分子的动能。到了1913年前后，为了给氢原子中电子的能量取分立的值找个借口，有了角动量或者作用量(action)的量子化，作用量的量子为普朗克常数 h 。1924年，玻色(Satyendra Nath Bose, 1894—1974)假设相空间的体积是量子化的，其量子为 h^3 。能量、作用量、相空间三者的量子化，是量子力学的三个里程碑。注意，作用量，角动量以及对应一个广义坐标的相空间体积都具有相同的量纲。

3 量子力学是如何创立的？

量子这个概念，最先走进科学，见于黎曼1854年的论文Über die Hypothesen, welche der Geometrie zu Grunde liegen (论作为几何学基础的几个假设)。在这篇论文中，黎曼提出了流形的概念，奠定了微分几何(广义相对论的数学基础啊)，还第一次将量子(Quanta)用于科学：“流形之通过某些特征或者边界相区分的部分称为Quanta(图2)。Quanta之量的比较依其性质或者是通过计数得来的分立量，或者是通过测量得来的连续量。”量子化见于几何，不稀奇。晶体的几何量子就是它的单胞(unit cell)，截角八面体、平行六面体都可以是三维空间的全同量子。

物理意义上的第一个量子概念是能量量子，确切说是分子动能的量子化，出现在玻尔兹曼(Ludwig Boltzmann, 1844—1906)1877年的论文里。为了得到气体的麦克斯韦分布， $f(v)d^3v = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} d^3v$ ，玻尔兹曼引入了能量单元(Energieelement)的假设。一个由 n 个粒子组成的体系，每个粒子具有的动能是能量单位 ϵ 的

Bestimmte, durch ein Merkmal oder eine Grenze unterschiedene Theile einer Mannigfaltigkeit heissen **Quanta**. Ihre Vergleichung der Quantität nach geschieht bei den discreten Grössen durch Zählung, bei den stetigen durch Messung. Das Messen besteht in einem Aufeinanderlegen der zu vergleichenden Grössen; zum Messen wird also ein Mittel erfordert, die eine Grösse als Masstab für die andere fortzutragen. Fehlt dieses, so kann man zwei

图2 黎曼1854年的论文截图

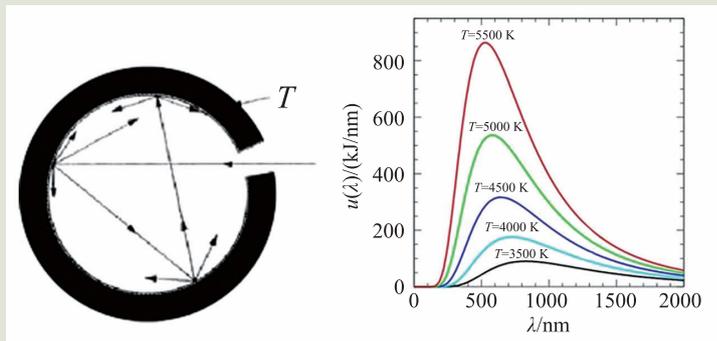


图3 黑体辐射示意图及实验得到的谱分布

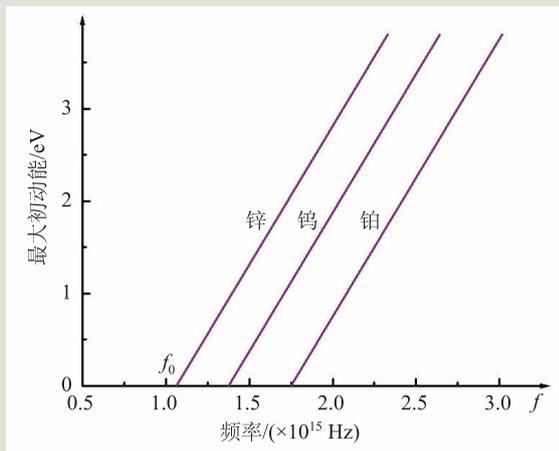


图4 几种不同金属作为电极的光电效应实验结果

0, 1, 2... p 倍, 则总能量一定的前提下平衡态时粒子数随能量的分布是什么样子的? 这个问题等价于在约束 $n_0+n_1+\dots+n_p=n$, 和 $[0 \cdot n_0+1 \cdot n_1+\dots+p \cdot n_p]e=E$ 下求状态数 $W = \frac{n!}{n_0!n_1!\dots n_p!}$ 的最大值。利用拉格朗日乘法, 可得结果为 $n_p \propto e^{-pe/kT}$, 这正是上述的麦克斯韦分布^[1]。但是, 玻尔兹曼在得到这个分布函数后, 在随后的求平均动能、最可几速率等操作中, 又把能量当成了连续的物理量加以处理, 这样他就相当于把自己引入的革命性的概念随手给掐死了。能量是连续的, 在十九世纪末期是一个物理学家头脑中根深蒂固的观念。当然了, 玻尔兹曼随手掐死了他自己引入的革命性概念, 也是因为他这样做时没遇到任何数学或物理上的困难。

到了1900年, 为了拟合黑体辐射的实验结果(图3), 即找出空腔中光的能量体积密度随频率的

分布, 柏林大学的热力学老师普朗克(Max Planck, 1858—1947)大胆地从热力学着手来解决这个问题。普朗克主要是在维恩工作的基础上往前摸索的。他从熵概念出发, 假设 $\frac{\partial^2 S}{\partial U_v^2} = -\frac{k}{U_v(h\nu + U_v)}$, 也即 $\frac{\partial(1/T)}{\partial U_v} = -\frac{k}{U_v(h\nu + U_v)}$, 解得平均能量 U_v 为 $U_v = \frac{h\nu}{\exp(h\nu/kT) - 1}$, 则能量体积密度为 $e_v = \frac{4\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{\exp(h\nu/kT) - 1}$, 该函数可以

给出图3中的曲线, 同实验结果符合得非常好^[2]。几天以后, Ferdinand Kurlbaum (1857—1927)计算得到其中的常数 $h=6.55 \times 10^{-34}$ Js。

这个瞎凑的公式的巨大成功带来了极大的困惑。于是, 普朗克另辟蹊径, 另行从统计物理的角度着手。普朗克假设 $P=U_v/h\nu$ 是个整数(原文中提到, 不是整数就取近似整数。普朗克一点也不激进), 这 P 个能量单元来自 N 个频率为 ν 的谐振子, 则平衡态对应 $W = \frac{(P+N-1)!}{P!(N-1)!}$ 取最大值。利用普朗克首先写成如下形式的玻尔兹曼熵公式 $S=k \log W$, 得 $S = Nk \left[\left(1 + \frac{U_v}{h\nu}\right) \ln \left(1 + \frac{U_v}{h\nu}\right) - \frac{U_v}{h\nu} \ln \frac{U_v}{h\nu} \right]$, 进一步地可得 $U_v = \frac{h\nu}{\exp(h\nu/kT) - 1}$, 同热力学途径得到的结果一模一样。这样普朗克就从两种不同路径得到了黑体辐射公式, 这个公式从此就叫普朗克规律(Planck's Gesetz), 他现在必须认真对待他的假设了^[3, 4]。 $P=U_v/h\nu$ 是整数, 这意味着 $h\nu$ 是光的能量单元? 光的能量真有单元, 还和频率成正比, 啥意思啊? 普朗克觉得很难接受。附带说一句, 黑体辐射公式还有爱因斯坦、玻色、泡利、德拜等人的不同推导, 笔者将另文专门介绍^[5]。

1905年, 爱因斯坦(Albert Einstein, 1879—1955)利用辐射具有基本能量单元 $h\nu$ 的假说, 成功地解释了光电效应的实验结果^[6]。爱因斯坦进一步假设固体吸收光也是按照吸收整个能量单位方式进行的, 这样, 出射的光电子动能为

$E_{\text{kin}} = h\nu - \phi$ ，就能很好地解释光电效应的测量结果(图4)。至此，光有能量单位一事尘埃落定。后来，爱因斯坦还提出光的能量单元还有动量单元 $h\nu/c$ 。

量子力学的另一个源起是光谱学的研究。氢气的液化温度为 20.28 K，这使得氢是倒数第二个被液化的气体。有了液化氢就有了纯净的氢气。氢气放电的光谱那时可见四条线，波长分别为 6562.10, 4860.74, 4340.10 和 4101.2 Å。这四个波长包含什么秘密呢？1885 年，瑞士一中学数学老师巴尔莫 (Johann Balmer, 1825—1898) 发现这四个数是 3645.6 的 9/5, 16/12, 25/21 和 36/32 倍。写成公式就是正比于 $\lambda \propto \frac{n^2}{n^2 - 2^2}$, $n=3, 4, 5, 6$ 。那么， $n=7$ 呢？将 $n=7$ 代进去，果然在计算所得波长处发现有第五条谱线。这说明氢的光谱线还真是有规律的，可是从这个表达式能看出什么名堂呢？里兹 (Walther Ritz, 1878—1909) 建议把公式 $\lambda \propto \frac{n^2}{n^2 - 2^2}$ 倒过来，写成 $\frac{1}{\lambda} \propto \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}$ 的形式。这引导人们猜测也许公式 $\frac{1}{\lambda} \propto \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}$, $n=1, 2, 3, 4, \dots, m > n$ ，对应的波长处都有谱线，实验发现果然如此。那么如何解释这个公式 $\frac{1}{\lambda} \propto \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}$ 给出的氢原子谱线的规律呢？

1913 年，玻尔 (Niels Bohr, 1885—1962) 提出了氢原子的行星模型，他认为氢原子中电子以平方反比力被质子所束缚，电子如同行星一样有固定的运行轨道。光是电子从高能轨道向低能轨道跳跃 (jump, Sprung) 后发出的，跃迁解释了公式 $\frac{1}{\lambda} \propto \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}$ 里的减号。可是，行星体系的能量是连续的，为什么在氢原子体系里变成了 $E_n = \epsilon_0 - C/n^2$ 的形式。玻尔假设电子的轨道角动量是量子化的， $\oint p dx = nh$ ，在这个前提下去解平方反比力下的两

体问题，得 $E_n = -\frac{2\pi^2 m Z^2 e^4}{h^2 n^2} \propto -\frac{1}{n^2}$ ，于是氢原子光谱线的频率或者谱线位置问题得到完美解决^[7]。

然而，关于光谱线，除了位置以外，谱线的特征还包括亮度、宽度、精细结构、简并度等诸多因素。12 年后的 1925 年，在哥廷恩给玻恩 (Max Born, 1882—1970) 当助手的海森堡 (Werner Heisenberg, 1901—1976) 试图回答谱线的强度问题，遂引出了矩阵力学。注意，放光过程，跃迁，和两个轨道有关系，那谱线强度也应该和两个轨道有关系吧？如果把一组轨道的能量先横排，然后竖着排，考察它们之间的能量跃迁，这自然引入一个矩阵的形象。海森堡试着从轨道的傅里叶展开中引入谱线的频率，将之表示为两项之差的方式。如果认定谱线是来自振荡的话，其强度应该是和振幅的平方成正比。海森堡将他的这一套思想试着在谐振子上寻找思路，得到了 $x(0)$ 和 $p(0)$ 的表达式

$$\sqrt{2} x(0) = \sqrt{h/2\pi} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} \\ & 0 & \sqrt{3} & 0 \\ & & & 0 & \dots \end{pmatrix},$$

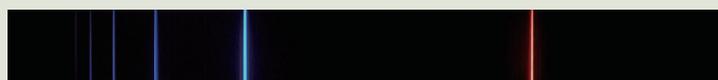


图5 氢光谱照片

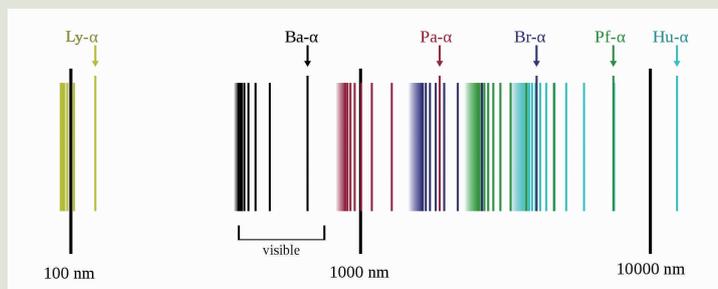


图6 氢光谱的全谱示意图

$$\sqrt{2} p(0) = \sqrt{\hbar/2\pi} \begin{pmatrix} 0 & i\sqrt{1} & 0 & 0 \\ -i\sqrt{1} & 0 & i\sqrt{2} & 0 \\ 0 & -i\sqrt{2} & 0 & i\sqrt{3} \\ & 0 & -i\sqrt{3} & 0 \\ & & & 0 & \dots \end{pmatrix}.$$

然后呢，然后海森堡也不知道怎么好了，就把结果写了下来，放到玻恩教授的办公桌上，自己度假去了。玻恩教授认出海森堡写成的东西是数学里的矩阵。玻恩计算矩阵形式的 xp ，发现 $xp - px = i\hbar I$ ，这是有别于玻尔量子化条件的量子化条件。注意，爱因斯坦认为处理辐射强度问题应该用经典的跃迁几率的概念替代振幅的概念。也许不算巧合的是，从 A 经许多不同的 B 到达 C 的过程，经典概率的算法就是矩阵的乘法！玻恩将海森堡的这些内容整理后以海森堡的名义发表。玻恩的助手约当 (Pascual Jordan, 1902—1980) 发现如接受 $xp - px = i\hbar I$ ，则这意味着 $p \mapsto -i\hbar \partial_x$ ，即动量是关于坐标的微分算符。这个 $p \mapsto -i\hbar \partial_x$ 是量子力学关键的一步。后来，玻恩和约当一起发了一篇文章，玻恩和约当、海森堡又一起发了一篇文章，这就是关于量子力学的一种形式，矩阵力学，的三部曲^[8-10]。同时期，英国的狄拉克 (P. A. M. Dirac, 1902—1984) 独立地发展了跃迁概率理论^[11]。

在另外的方向上，康普顿 (Arthur Compton, 1892—1962) 1923 年研究 X-射线的电子散射，发现散射后散射角越大，X-射线变得越长。康普顿接受光的量子有能量 $\varepsilon = h\nu$ 和动量 $p = h\nu/c = h/\lambda$ 的说法，利用经典的弹球碰撞模型，求得散射后 X 射线波长同散射角之间的关系，即康普顿散射公式 $\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta)$ 。这算是确认了光有能量单元和动量单元，是光有粒子性的一个强有力证据。

1923 年，德布罗意 (Louis de Broglie, 1892—1987) 提出了物质波的概念，电子这样的粒子也是波，粒子的波长为 $\lambda = h/p$ ，频率 $\nu = E/h$ ^[12]。德布罗意的博士论文传到德国，爱因斯坦表示说“很有意思”，德拜 (Peter Debye, 1884—1966) 嘟囔了

一句“总该有个波动方程吧？”而薛定谔 (Erwin Schrödinger, 1887—1961)，他早就对经典力学—经典光学之间的类比有深刻研究 (证据见于薛定谔的多本笔记)，很快就领会了德布罗意论文的内容。薛定谔于 1925 年圣诞节上了一个滑雪场，在那里待了一周，得到了著名的薛定谔方程 $-i\hbar \partial \psi / \partial t = H \psi$ 。他将这个方程应用到了氢原子上，得到方程形式为

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\} \psi - \frac{e^2}{r} \psi = E \psi,$$

复杂得吓人，其解

$$\psi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi) = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0} \right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n \cdot (n+\ell)!}} e^{-\rho/2} L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(\rho) Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)$$

样子也很吓人，而得到的量子化的能量为 $E_{n\ell m} \propto -1/n^2$ ，与玻尔的结果看起来完全相同。但是，这个能量表达式与玻尔的结果相比有质的飞跃，这里的能量是三个变量或曰量子数， (n, ℓ, m) 的函数。这样，量子力学就有了第二种形式，波动力学。薛定谔的文章题目为量子化是本征值问题 (Quantisierung als Eigenwertproblem)，题目大有深意。文章分为四部分，发表于 1926 年^[13]。

到了 1926 年，光的粒子性算是确立了，于是化学家路易 (Gilbert N. Lewis) 造了 photon (光子) 一词。1927 年，戴维森 (Clinton Davisson, 1881—1958) 和革末 (Lester Halbert Germer, 1896—1971) 用电子束轰击 Ni 晶体。玻恩认识到那花样是晶体对波的散射的结果。至此，电子具有波动性质得到确认。

那么，薛定谔方程 $-i\hbar \partial \psi / \partial t = H \psi$ 的主角，波函数 ψ ，的物理意义是什么？按照薛定谔的说法， $e\psi^* \psi$ 是电子的电荷在空间中的分布，而玻恩指出电子是粒子， $\psi^* \psi d\tau$ 是电子在空间体积元 $d\tau$ 出现的几率，这就是波函数的几率诠释。这个诠释同波函数作为矢量的性质是相关的，这也是波函数也称为波矢的原因。对波函数有许多不负责任的诠释。

1924 年，泡利 (Wolfgang Pauli, 1900—1958)

根据许多实验，包括银原子束在不均匀磁场中的偏转，推断电子还存在一个二值的自由度，并提出了“不相容原理”，指向了电子自旋这一内禀自由度。泡利矩阵是描写自旋角动量的数学工具。1927年，泡利针对薛定谔方程给出了 $H = \frac{1}{2m} [\sigma \cdot (p - qA)]^2 + q\phi$ 形式的哈密顿量，包含电子同电磁场的相互作用，将这个哈密顿量用之于薛定谔方程 $-i\hbar \partial \psi / \partial t = H\psi$ ，则必须要求波函数是二分量的， $\psi = \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix}$ 。这个意义下的薛定谔方程也称为泡利方程^[14]。泡利还于1930年预言了中微子的存在。加入了自旋，原子中电子的状态可以用四个量子数， $(n, \ell, m; m_s)$ ，来表征。

在这段时期，英国的狄拉克在量子力学创立方面不断取得进展。他发展了跃迁概率理论，从经典泊松括号得到了对应量子化条件的一般意义下的两个算符之间的对易式， $uv - vu = i\hbar[u, v]$ 。他还想得到了相对论版的量子力学^[12]。从相对论质能关系 $E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$ 出发得到的克莱因—戈登方程 $(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2})\psi = m^2 c^2 \psi$ ，后来发现只能描述自旋为0的粒子，不适用于电子。于是，狄拉克尝试把二次型 $E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$ 降解到线性的层次，即尝试做因式分解 $x^2 + y^2 = (\alpha x + \beta y)^2$ 。狄拉克发现若 $\alpha^2 = \beta^2 = 1$ ， $\alpha\beta + \beta\alpha = 0$ ，则完成所需的因式分解。对于二次型 $E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$ ，这样的分解要求 α, β 至少是 4×4 的反对称矩阵。狄拉克构造了这样的矩阵，写出了相对论量子力学方程 $i\hbar \gamma^\mu \partial_\mu \psi - mc\psi = 0$ ，这里的波函数 ψ 是四分量的，

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}。狄拉克为了解释他的量子力学方程的$$

解，不得已于1931年提出了反电子的概念，反电子随于1932年被发现。

关于量子力学的创立，维格纳(Eugene Wigner, 1902—1995)这个人也是要提的，他和外尔(Hermann Weyl, 1885—1955)一起将群论引入了量子力

学，有了群论的量子力学才能理解光谱的各种特征，包括谱线在电场下和磁场下的分裂(Stark效应，Zeeman效应)。1922~1925年间，维格纳在其博士论文中首次提到分子的激发态有能量展宽 $\Delta\epsilon$ ，它同平均寿命 Δt 通过关系式 $\Delta\epsilon \cdot \Delta t \sim \hbar$ 相联系，而海森堡提出 $\Delta x \cdot \Delta p \sim \hbar$ 的不确定性关系是在1927年。当然了，笔者再次强调，不存在什么不确定性原理所宣称的那些问题，比如什么粒子位置测量得越准确、动量就越不准确的浑话。如果大家拿一维方势阱和谐振子的精确解计算一下的话，容易发现位置和动量的不确定性是正相关的！

外尔首先是个数学家，业余时间对量子力学和相对论都做出了奠基性的工作，还创立了规范场论。据信是外尔帮助薛定谔求解了氢原子的薛定谔方程的。外尔这样的数学家做的物理才更像物理。

1924年，印度人玻色(Satyendra Nath Bose, 1894—1974)在假设相空间具有体积单元 h^3 的前

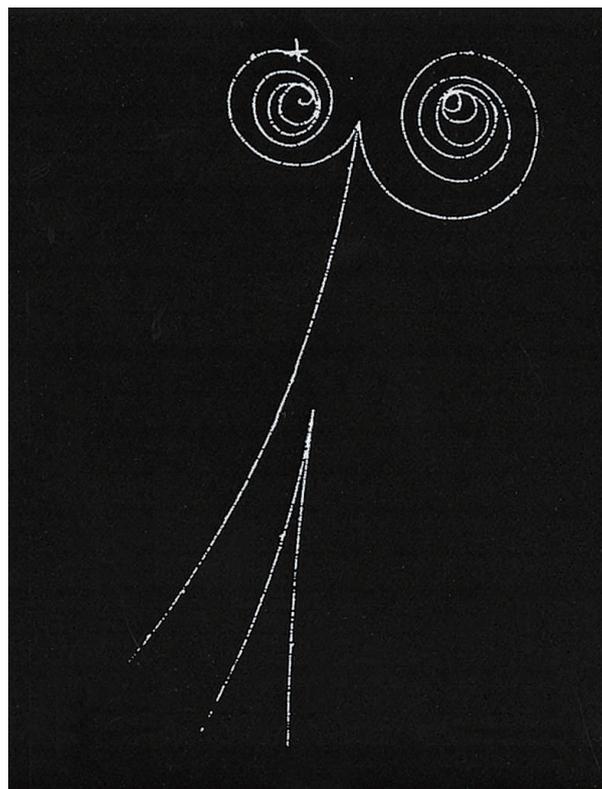


图7 γ 光子轰击原子核产生电子—正电子对过程的气泡室内粒子径迹照片

提下也得出了黑体辐射公式。爱因斯坦接着玻色的工作发展起了玻色—爱因斯坦统计。自旋为整数的粒子都满足玻色—爱因斯坦统计，被称为玻色子。玻色 1924 年的两篇德语论文^[15, 16]都是爱因斯坦翻译的，这是科学史上难得的一段佳话。玻色的量子化让量子化又回到了几何。

1926 年，冯·诺依曼(John von Neumann, 1903—1957)指出，算符的本征态张成一个矢量空间并名之为希尔伯特空间，量子态可以看成希尔伯特空间中的一个矢量；1932 年，冯·诺依曼撰写了《量子力学的数学基础》一书。在这本书里，冯·诺依曼建议把测量理解为坍缩过程，一个处于叠加态的体系，当对它进行测量时，会坍缩到待测量体系的一个本征态，测量结果为对应的本征值。这个测量原理是大有问题的，首先这个说法没有根据。其次，所谓的测量是个相互作用过程，比这个简单的坍缩要表达的意思复杂的多。退一步说，即便测量真的是坍缩到待测物理量的本征态上，许多物理问题就没有，比如关于位置的，完备集表示，自然也就没有作为算符本征值的位置测量。

关于量子力学还有个关键的人物，索末菲(Arnold Sommerfeld, 1868—1951)。索末菲和玻恩一样，是导师的大老师级的人物，泡利、海森堡、德拜(Peter Debye)、贝特(Hans Bethe)、鲍林(Linus Pauling)这些诺奖得主皆出自其门下。索末菲认为玻尔模型把电子限制在一个平面内，简化得太狠了些，电子是在整个三维空间内绕原子核运动的。三维空间内绕一点的运动可由距离 r 和两个角坐标，倾角 θ 和方位角 ϕ ，来描述。倾角 θ 和方位角 ϕ 分别引入了第二和第三量子数。1916 年索末菲引入三维的量子化模型， $H = \frac{p_r^2}{2m_e} + \frac{\ell^2}{2m_e r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ ，量子化的条件为 $\oint p dx = kh$ ，解出的能量形式为 $E \propto -\frac{1}{(\ell+k)^2}$ 。也就是说，玻尔模型里的那个 n ，是这里的 k 。索末菲的工作是旧量子力学的关键。

至此，我们有了波函数一分量的薛定谔方

程、波函数二分量的泡利方程和波函数四分量的狄拉克方程，以及克莱因—戈登方程，有了能量量子化 ($h\nu$)，作用量量子化 (h)，和相空间量子化 (h^3)，量子力学的大框架就算有了。相空间量子化让统计意义的量子力学走向了量子统计。还有一个值得注意的问题是量子力学把物理量当作算符，而两算符之间的对易关系决定了其在量子力学中的角色。笔者斗胆提出，量子力学中算符的对易关系可分为三重。第一重，两算符对易， $[A, B]=0$ ，这样的一对算符有共同的本征态。量子力学一个任务是找一组相互对易算符的共同本征态作为解的完备集。第二重，对易，但对易子为常数，比如量子化条件， $[x, p]=i\hbar$ 。不对易的算符没有共同本征态，但这个关系不足以确定本征态。类似 x ， p 这样的没有共同本征态的一对算符让海森堡于 1927 年一通发挥，遂有了所谓的不确定性原理，然后又有更不负责任的人给发挥得神乎其神。其实，关系 $[x, p]=i\hbar$ 与傅里叶分析有关，其带来的算符之均方差的关系，Robertson 于 1929—1930 年有严格的数学研究，不可以乱加诠释的。第三重是类似 $[J, J]=i\hbar J$ ，这个和李代数有关。这个对易关系是一个更强的约束，实际上它已经能确定下来自己的表示了，与经典或者量子无关。有兴趣的读者请仔细思考一下角动量的表示问题。

至此，如果要问什么是量子力学，我们可以说量子力学就是由量子力学方程及伴随的概念、观念所构成的一个物理理论体系。量子力学是一个集体智慧的结晶，是人类发展史上罕见的头脑风暴爆发。因为对发展量子力学的贡献而获得诺贝尔物理学奖者包括普朗克(1918)，爱因斯坦(1922 年获得 1921 年度的)，玻尔(1922)，康普顿(1927)，德布罗意(1929)，海森堡(1932)，薛定谔与狄拉克(1933)，泡利(1945)，玻恩(1954)，等等。其中，爱因斯坦获得的是 1921 年空缺的，玻恩则迟至 1954 年才终于获奖，而偏偏这两位才是奠定量子力学的关键人物。人世间的事儿啊，想来令人唏嘘。

回顾一下量子力学的创立过程，发现它就是一个猜的过程。构造量子力学，或者说构造近代物理，这是一门艺术。用玻恩的话说，是猜出正确公式的艺术(The art of guessing correct formulae)。当然应该看到，猜的人对经典力学有深刻的理解。在1930年以前构造量子力学过程中用到的所有物理，都是经典物理。有人会问，量子力学客观吗，量子力学正确吗？关于客观性，我觉得这是个伪问题。人类的物理学，取决于人这种存在自身的物理及其与环境间的相互作用，必然打上人的烙印，而且是特定时代的人的烙印。古希腊智者色诺芬说，“如果牛有上帝，牛的上帝一定长有犄角。”可以想象，螃蟹设计的汽车，注定是横行的。怎么可以要求我们人类创造的量子力学是客观的呢？它一定或多或少地带上了人类的烙印。

4 量子力学的辉煌成就

量子力学正确不正确？这个问题不好回答，但是我们转而问量子力学给我们带来了什么新的关于自然的认知。试举几例。其一，将薛定谔方程用于晶体，周期势场下薛定谔方程的解告诉我们什么是导体，什么是绝缘体。于是有了半导体的概念。半导体可以有n-型和p-型两种载流子，电导率可以在十几个数量级范围内变化，可以制成不同的结，由此才有了电子学和我们的信息化社会！其二，量子力学导出的氢原子能量是四个量子数 $(n\ell m; m_s)$ 的函数。 m_s 只取 $(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$ 两个值，而对于给定的自然数 $n, \ell = 0, 1, \dots, n-1$ ， $m = -\ell, -\ell+1, \dots, \ell-1, \ell$ 。这样，对于给定的 n ，四个量子数 $(n\ell m; m_s)$ 的组合共有 $2n^2$ 种可能。 $2n^2 = 2, 8, 18, 32 \dots$ ，看到2, 8, 18, 32 (= 18 + 14)人们会想起元素周期表。量子力学解释了元素周期表就该长成那个样子。其三，普朗克分布律是量子力学的缘起，1917年，爱因斯坦利用辐射~物质相互作用处于热平衡的模型重新得到了普朗克分布^[17]，在这个工作中提出了受激辐

射的概念。受激辐射是激光的概念基础。1960年，人类制造出了激光器。激光器在今天可说是无处不在。

5 如何学习量子力学？

量子力学是约一百年前一伙儿天才们的头脑风暴的产出，它和相对论几乎同步发展起来。量子力学和相对论是现代物理的两大支柱，实际上它们都首先是关于光与电子的学问。量子力学和相对论，从前是天才们的创造物，如今应该是受教育者的知识标配，至少该是中学生的知识标配。那么，如何学习量子力学呢？笔者个人的建议是，如果你关注创造史，从量子力学构造的历史着手学习，可以读读Mehra的*The historical development of quantum theory*；如果你关注量子的哲学，可以读读Jammer的*The philosophy of quantum mechanics*；如果你打算研究一下量子力学创立者的工作手册，可以读读Dirac的*The principles of quantum mechanics*；如果你关注量子力学的数学，可以读读Von Neumann的*Mathematical foundations of quantum mechanics*；如果你关注量子力学新论，可以读读Weinberg的*Lectures on quantum mechanics*；如果你只关注习题集，可以读读Flügge的*Practical quantum mechanics*；如果你只想读一本最浅显的入门书，不妨读读作者的《量子力学—少年版》^[18]。但是，不管怎样，如果你真想了解一点量子力学的话，请读由物理学家撰写的关于量子力学的严肃读物。子不语怪力乱神，切记！

坊间有云：量子力学要量力而学，这是说量子力学很难学。笔者想说的是，首先量子力学不难学；其次，再难学也要学不是。我必须再次强调，量子力学是一门严肃的学问，是经典物理的自然延续。人们学习量子力学的困难主要在于没有认真学过经典物理。在学习量子力学之前，如下的预备知识应该是学过或者至少听说过的，这包括但不限于普通力学，分析力学，经典光学，电磁学，流体力学，热力学，原子物理，场论，



微弱信号检测 半个世纪的骄傲

Model 7210
多通道锁相放大器

全球唯一
通道之最



Model 197 光学斩波器



生产商: 阿美特克商贸(上海)有限公司北京分公司
电话: 010-85262111-10 传真: 010-85262141-10
Email: info@ametek.cn
网址: www.signalrecovery.com.cn

中国代理商: 北京三尼阳光科技发展有限公司
电话: 010-65202180/81 传真: 010-65202182
Email: sales@sunnytek.net
网址: www.sunnytek.net

相对论……微积分, 变分法, 常微分方程, 数理方程, 复分析, 概率论, 傅里叶分析, 线性代数, 群论, 不变量理论, 等等。一句话, 量子力学“说难学, 也好学。人家咋着咱咋着!” 跟随严肃的学者, 使用严肃的教科书, 没人会被量子力学拒之门外。

参考文献

注: 本文涉及的所有法文和德文的量子力学基础论文, 网上都有英文译本, 有兴趣的读者不妨对照阅读, 从中参悟读大家原文的好处。

- [1] Boltzmann L. Über die Beziehung zwischen dem zweiten Hauptsatz der mechanischen Wärmetheorie und der Wahrscheinlichkeitsrechnung respektive den Sätzen über das Wärmegleichgewicht. Sitzungsberichte der Kaiserlichen Akademie der Wissenschaften in Wien, Mathematisch-Naturwissenschaftliche Classe, 1877, Abt. II, 76:373
- [2] Planck M. Über eine Verbesserung der Wien'schen Spektralgleichungen. Deutsche physikalische Gesellschaft, Verhandlungen, 1900, 2:202
- [3] Planck M. Zur Theorie des Gesetzes der Energieverteilung im Normalspectrum. Deutsche physikalische Gesellschaft, Verhandlungen, 1900, 2:237
- [4] Planck M. Über das Gesetz der Energieverteilung im Normalspectrum. Annalen der Physik, 1901, 4:553
- [5] 曹则贤. 黑体辐射公式的多种推导及其在近代物理构建中的作用. 物理 (审稿中)
- [6] Einstein A. Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt. Annalen der Physik, 1905, 17:132
- [7] Niels B. On the Constitution of Atoms and Molecules, Part I. Philosophical Magazine, 1913, 26 (151):1-24; Part II, Systems Containing Only a Single Nucleus. Philosophical Magazine, 1913, 26 (153):476-502; Part III, Systems Containing Several Nuclei. Philosophical Magazine, 1913, 26 (155):857-875
- [8] Heisenberg W. Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen. Z. Physik, 1925, 33:879
- [9] Born M, Jordan P. Zur Quantenmechanik. Z. Physik, 1925, 34:858
- [10] Born M, Heisenberg W, Jordan P. Zur Quantenmechanik II. Z. Physik, 1926, 35:557
- [11] Dirac P A M. The principles of mechanics, 1st edition. The Clarendon Press, 1930
- [12] de Broglie L. Recherches sur la théorie des quanta. Ann. de Physique, 1925, 3(10):22
- [13] Schrödinger E. Quantisierung als Eigenwertproblem, Erste Mitteilung: Ann. Phys., 1926, 79:361; Zweite Mitteilung: Ann. Phys., 1926, 79:489; Dritte Mitteilung: Ann. Phys., 1926, 80:437; Vierte Mitteilung: Ann. Phys., 1926, 81:109
- [14] Pauli W. Zur Quantenmechanik des magnetischen Elektrons. Z. Physik, 1927, 43:601
- [15] Bose S N. Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese. Z. Physik, 1924, 26:178
- [16] Bose S N. Wärmegleichgewicht im Strahlungsfeld bei Anwesenheit von Materie. Z. Physik, 1924, 27:384
- [17] Einstein A. Zur Quantentheorie der Strahlung. Physikalische Zeitschrift, 1917, 18:121
- [18] 曹则贤. 量子力学—少年版. 中国科学技术大学出版社, 2016