

结构化学小班讨论介绍 ——态叠加原理

朱月香*, 厉建龙

北京大学化学与分子工程学院, 北京 100871

摘要: 简要介绍了结构小班讨论课中关于主题文献“态叠加原理”的讨论情况及讨论过程中需要注意的问题。

关键词: 态叠加原理; 结构化学; 小班讨论

中图分类号: G64; O641

Introduction to Small-Class Discussion in Structural Chemistry: The Principle of Superposition

ZHU Yuexiang*, LI Jianlong

College of Chemistry and Molecular Engineering, Peking University, Beijing 100871, P. R. China.

Abstract: Small-class discussion on the principle of superposition in structural chemistry is briefly introduced and problems to which attention should be paid to are proposed.

Key Words: The principle of superposition; Structural chemistry; Small-class discussion

“小班课教学”是世界一流大学广泛采用的一种教学模式, 北京大学从 2012 年起开始实施大班授课和小班研讨相结合的“小班课教学”, 国内其他院校也不同程度地引入小班教学模式^[1-3]。北京大学化学与分子工程学院结构化学基础课从 2013 年在大班授课的基础上, 分成小班上讨论课和模型实习课。对每一次文献讨论, 我们都会给一个导读, 并提出几个思考题供学生参考。前文^[4]简要介绍了结构化学小班课教学的基本情况, 本文介绍量子力学部分的一次讨论课——态叠加原理。

态叠加原理是量子力学的一个基本原理, 在量子力学理论体系中占有非常重要的地位, 但对于态叠加原理的表述及理解却一直存在争议^[5-7]。在我们所使用的教材^[8]中, 态叠加原理作为量子力学基本假设 IV 介绍:

如果 ψ_1 、 ψ_2 、 $\cdots$ 、 ψ_n 是某微观体系的可能状态, 则其线性组合 ψ 也是该体系的可能状态。

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \cdots + c_n\psi_n = \sum_i c_i\psi_i$$

式中 c_1 、 c_2 、 $\cdots$ 、 c_n 为任意常数, 称为线性组合系数。随后提到杂化轨道就是原子轨道的线性组合, 并介绍了物理量平均值的计算公式。

为帮助大家更好地理解态叠加原理及其在化学中的应用, 我们选择了量子力学的经典之作——狄拉克的《The Principles of Quantum Mechanics》^[9]一书中“The Principle of Superposition”一章作为讨论文献在小班课上讨论。

1 文献内容概要及导读

文献内容概要：首先以经典理论无法解释的几个实验现象，即原子稳定性、原子光谱频率之间的联系，以及比热的实验数据、光电效应作为切入点提出引入量子理论的必要性，并在此基础上提出“绝对尺寸”的概念；之后详细说明了如何用量子力学的观点来解释单个光子的偏振和干涉现象，提出态叠加导致的观测结果的不确定性；最后介绍了处理量子力学问题的数学工具。

文献导读：本文献为量子力学创始人之一狄拉克所著《The Principles of Quantum Mechanics》的第一章。该书为量子力学领域的经典著作之一，推荐对量子力学感兴趣的学生通读该书。态叠加原理这一章首先以经典理论无法解释的几个实验现象(原子稳定性、原子光谱频率之间的联系，以及比热的实验数据)作为切入点提出引入量子理论的必要性(源于历史原因，量子力学创始人采用“Quantum Mechanics”这一名词，即“非连续力学”(尤其是指能量存在不连续现象)，用以区别于体系中物理量连续可变的牛顿力学)。之后详细说明了如何用量子力学的观点来解释单个光子的偏振和干涉现象，提出引入“态叠加原则”的必要性以及基于“态叠加原则”所理解的实验观测结果的不确定性，并进而导出了文献的核心内容：“量子力学认为所有量子态都是希尔伯特(Hilbert)空间中的一个矢量”这一理念(也就是数学上如何表达“态叠加原则/原理”)。希尔伯特空间是数学上主要为量子力学抽象出来的，以任意厄米算符本征态为基矢所构成的矢量空间。通常本征态有无穷多个，所以这个空间是无穷多维的。这个空间中的矢量具有类似于三维空间中矢量的性质：其中任一矢量总可以展开成该矢量在各基矢(坐标轴)上分量的和(数学上就是用一个多项式/级数求和表示一个矢量)。实际体系的薛定谔方程几乎都是不能求解的(或者说不能直接求解的)，而这种利用多项式/级数求和的方式来近似表达量子态的方法就成了求解实际体系波函数的主要方法。从另外的角度看，波函数平方本身的物理含意为几率，这要求波函数是平方可积的；而同时波函数还要能表示为无穷多项的多项式，这两个要求放到一起可以看到波函数是数学上很特别的一类函数。无穷多项级数的求和通常是无法计算的，除非这个级数是收敛的。如果级数收敛，那么仅取级数中的主要几项的和就可以很准确地代表这个级数和了。这样，不可解 Schrodinger 方程的解就可以很好地表达出来了。这一思路是量子力学中求解实际体系波函数的核心思路之一。量子化学计算主要是基于这种思路的计算。文献最后介绍了一种描述量子态/矢量的简洁数学工具“左矢(bra)和右矢(ket)”及其相应运算法则。

思考题：(1) 如何用量子理论解释单个光子的偏振？(2) 如何用量子理论解释单个光子的干涉？(3) 实验上如何实现态叠加？(4) 本征态波函数叠加后还是本征态吗？(5) Hilbert 空间中的矢量与我们熟悉的三维空间中的矢量有何异同？

2 学生讨论情况简介

每年选修结构化学课的学生有 160–190 人，分成 10 个小班上讨论课，每个小班学生分成 10 个组，每组 1–2 人。态叠加原理这篇文献由两组学生主讲，每组学生讨论时间为 40 min。大部分主讲学生除了阅读老师提供的文献外，还会自己找一些相关参考书和文献，进一步加深对所讨论问题的理解。两组的主讲内容一般是把文献分成前后两部分，各讲一部分；也有的是一组主要介绍概念，另一组主要介绍相关实验；思考题穿插在相关部分讨论。

讨论课前主讲的学生都认真准备了 PPT 课件并与小班课老师进行了讨论，有的学生的课件用的是英文。表 1 是几个代表性主讲课件的大纲。

在这几年的教学中我们发现，绝大部分学生认为此次讨论的主题文献内容与课堂内容很匹配，难度也很合适。尽管学生基础不同，兴趣也有很大差别，但对于导读提到的思考题都能充分讨论，加深了对态叠加原理的理解，达到了我们开设讨论课的目的。然而，不同学生对文献的讨论深度和广度差别非常大，有的学生还介绍了贝尔不等式及相关实验，量子鼓，多粒子的量子纠缠，量子计算机等。

表 1 讨论课件实例

实例	A 组提纲	B 组提纲
1	什么是态 态的观测 态叠加的数学表达	态叠加原理的相关实验 对于叠加态的理解 本征态波函数的叠加 Hilbert 空间矢量
2	Introduction Mathematic formulation Discussion Application Summary	导言 光子的偏振和干涉 态叠加原理的一般化描述 关于该原理的争议
3	态的含义与测量诠释 单光子偏振与干涉 纠缠态 量子计算机	态叠加原理与不确定性 本征态波函数的叠加 狄拉克符号及矩阵表示

由于量子力学中还有很多问题没有解决,对于态叠加原理的解释也存在很多争议,在讨论过程中我们注意引导学生区分实验事实与解释。实验是可信的,但解释不一定正确。不要陷入争议,而是要了解各种解释的优缺点,了解存在的问题,把学习的重点放在态叠加原理在化学上的应用方面。

致谢: 感谢结构化学教学组全体成员,感谢北京大学 2013–2017 年期间选修结构化学课程的学生。

参 考 文 献

- [1] 张庶,李恩竹. 教育教学论坛, **2016**, 6, 143.
- [2] 郭祥群. 大学化学, **2016**, 31 (3), 11.
- [3] 张荣兰, 杨维兴, 王骊丽, 申烨华, 赵建社. 大学化学, **2016**, 31 (3), 23.
- [4] 朱月香, 来鲁华. 大学化学, **2017**, 32 (7), 8.
- [5] 刘汉平, 杨富民, 陈冰泉. 大学物理, **2005**, 24 (1), 18.
- [6] 关洪. 大学物理, **2007**, 26 (1), 7.
- [7] 黄正国, 徐梅芳. 大学化学, **2010**, 25 (2), 65.
- [8] 周公度, 段连运. 结构化学基础. 第 4 版. 北京: 北京大学出版社, 2008.
- [9] Dirac, P. A. M. *The Principles of Quantum Mechanics*, 4th ed.; Oxford University Press: New York, 1958.