

“十二五”国家重点图书出版规划项目

高等量子力学



$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = (c\hat{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}} + m_0 c^2 \hat{\beta} + \hat{V}) |\Psi(t)\rangle$$

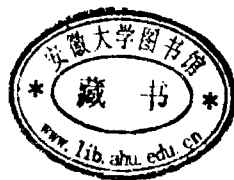
井孝功 郑仰东 编著

哈尔滨工业大学出版社

“十二五”国家重点图书出版规划项目

高等量子力学

井孝功 郑仰东 编著



哈尔滨工业大学出版社

内 容 简 介

本书是在现有高等量子力学教学大纲界定的范围之内编写而成的,内容包括:量子力学纲要,量子力学的形式理论,定态的递推与迭代解法,量子多体理论,量子体系的对称性与守恒量,量子散射理论,相对论性量子力学和量子信息学基础等。在所介绍的内容上,力求做到简明实用、重点突出和前后呼应;在讲述的方法上,尽量做到由浅入深、循序渐进与平稳过渡;在总体结构的编排上,努力做到层次分明、条理清晰和环环相扣。书中纳入了作者的近 30 篇教学研究论文的相关成果。

本书是物理系各专业研究生学位课程教材,也可以作为相关专业科技人员的参考书。

图书在版编目(CIP)数据

高等量子力学/井孝功,郑仰东编著. —哈尔滨:
哈尔滨工业大学出版社,2012.12
ISBN 978-7-5603-3769-2

I. ①高… II. ①井…②郑… III. ①量子力学-高等学校-教材 IV. ①O 413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2012)第 196254 号

策划编辑 张秀华 杨桦 许雅莹
责任编辑 张秀华
封面设计 卞秉利
出版发行 哈尔滨工业大学出版社
社 址 哈尔滨市南岗区复华四道街 10 号 邮编 150006
传 真 0451-86414749
网 址 <http://hitpress.hit.edu.cn>
印 刷 哈尔滨工业大学印刷厂
开 本 787mm×960mm 1/16 印张 21 字数 450 千字
版 次 2012 年 12 月第 1 版 2012 年 12 月第 1 次印刷
书 号 ISBN 978-7-5603-3769-2
定 价 40.00 元

(如因印装质量问题影响阅读,我社负责调换)

前 言

众所周知,相对论与量子论是20世纪的两个最伟大的科学发现,相对论解决了高速运动客体的问题,量子论解决了微观和介观客体的问题,它们为物理学乃至整个自然科学的发展奠定了坚实的理论基础。在能源、激光、超导与材料等领域,量子论已经取得了令人瞩目的实用效果。

量子论的数学架构就是量子力学,所谓高等量子力学是对量子力学内容的深化与拓展。高等量子力学属于基础理论范畴,通常被选作物理系硕士研究生的学位课程。

本书是在原有的《高等量子力学导论》的基础上重新编著的,在讲授的内容与方法上都做了相当大的改进。内容包括:量子力学纲要,量子力学的形式理论,定态的递推与迭代解法,量子多体理论,量子体系的对称性与守恒量,量子散射理论,相对论性量子力学和量子信息学基础等。讲授书中的全部内容大约需要54学时,如果将带“*”的章节作为自学的内容,则可以用36学时完成讲授。

本书的教学理念是,对教师与学生的要求分为如下三个层次:基本的要求是传承知识,即掌握教学大纲所要求的相关内容,了解该领域的最新动态;更高的要求是提升能力,即有意识锻炼逻辑思维的能力、善于创新的能力;最高的要求是培养兴趣,即在不断提出问题和解决问题的过程中,增强自信心,从而产生深入学习和研究的动力。

本书有如下特点:

(1)注意到读者的量子力学基础知识参差不齐的实际情况,在第1章中,对量子力学的基本内容进行了简要的归纳与总结,目的是尽量使读者能站在同一起点上。在后面的章节中,在引入新的概念与理论之前,也会对已经学过的内容进行必要的回顾,尽力做到由浅入深、循序渐进与平稳过渡。

(2) 书中纳入了作者多年的教学与科研成果(近 30 篇关于量子论的教学研究论文),例如,微扰论的递推形式,变分法的迭代形式,透射系数的递推计算,常用基底下算符矩阵元的计算,格林函数方法,含时量子体系的对称性与守恒量等,它们都属于对基础理论的创新,且具有相当高的实际应用价值。

(3) 在全书的整体结构上,尽量做到层次分明、条理清晰和前呼后应。对许多公式和定理的推导过程做了较大改进,例如,利用散射算符的矩阵元公式证明光学定理,利用三个 D 函数的积分公式证明维格纳-埃克特定理,利用李普曼-许温格方程导出玻恩近似的散射截面等。

(4) 高等量子力学是物理系各专业(例如,粒子物理与原子核物理、凝聚态物理和光学)的公共学位课,书中的内容尽量兼顾了各专业的需求。为保证教学内容的先进性,增加了诸如量子信息学等当今热点内容。

《高等量子力学导论》正式出版之前,曾在两届硕士研究生中试用过,出版之后又为九届学生进行了讲授,学生指出了其中的一些疏漏,提出了一些有益的建议,作者在此表示感谢。另外,长期以来哈尔滨工业大学出版社对作者一直给予大力支持,在此谨表示谢意。

量子理论是一门博大精深的学问,涉及的知识面实在是太广泛了,而且随着理论与实验的发展,不断有新的内容出现。虽然作者长期从事量子理论领域的教学和科研工作,但是所涉猎的内容毕竟还是有限的,所以本书只是对高等量子力学的基础理论与方法的简要介绍,更深入的内容将在相关专业的课程中讲授。

由于作者的水平有限,书中一定有诸多不当之处,恳请读者批评指正。

编著者 井孝功 郑仰东

2012 年 10 月 1 日

于哈尔滨工业大学

目 录

第 1 章* 量子力学纲要	1
1.1 量子力学概述	1
1.1.1 量子论的实验基础与理论假说	1
1.1.2 量子论的 3 次飞跃	4
1.1.3 量子力学的 5 个基本原理	4
1.2 波函数	5
1.2.1 波函数的物理内涵	5
1.2.2 波函数应满足的条件	6
1.2.3 具有特殊性质的波函数	7
1.2.4 状态叠加原理与展开假设	8
1.3 算 符	9
1.3.1 量子力学中的算符	9
1.3.2 算符的对易关系	11
1.3.3 对称性与守恒量	11
1.3.4 两个力学量的取值	12
1.3.5 算符随时间的变化	12
1.3.6 算符的矩阵表示	13
1.4 薛定谔方程	14
1.4.1 薛定谔方程与定态薛定谔方程	14
1.4.2 定态薛定谔方程的常见解析解	15
1.4.3 定态薛定谔方程的严格求解方法	16
1.4.4 定态薛定谔方程的近似解法	18
习题 1	19
第 2 章 量子力学的形式理论	23
2.1 表象与狄拉克符号	23
2.1.1 状态的表象	23
2.1.2 算符的表象	28

2.1.3	狄拉克符号	32
2.1.4	投影算符	35
2.1.5	表象变换	37
2.2	绘景与时间演化算符	40
2.2.1	绘景	40
2.2.2	薛定谔绘景	40
2.2.3	海森伯绘景	41
2.2.4	相互作用绘景	42
2.2.5	时间演化算符	43
2.2.6	时间演化算符满足的方程	44
2.2.7	时间演化算符的应用举例	45
2.3	线谐振子的相干态	50
2.3.1	降算符的本征态	50
2.3.2	相干态的性质	51
2.3.3	相干态是最小不确定态	53
2.3.4	基态与其他相干态的关系	54
2.3.5*	相干态表象	54
2.3.6	压缩态	57
2.4	纯态、混合态与密度算符	59
2.4.1	纯态与混合态	59
2.4.2	密度算符的定义	60
2.4.3	密度算符的性质	62
2.4.4	约化密度算符	63
2.4.5	密度算符的运动方程	64
2.4.6	应用举例	64
2.5	路径积分与格林函数	68
2.5.1	传播函数	68
2.5.2	路径积分	69
2.5.3	格林函数	72
习题 2		73
第 3 章	定态的递推与迭代解法	77
3.1	无简并微扰论公式及其递推形式	77
3.1.1	定态微扰论	77

3.1.2 汤川公式·····	78
3.1.3 维格纳公式·····	81
3.1.4 戈德斯通公式·····	83
3.1.5 薛定谔公式·····	83
3.2 简并微扰论公式及其递推形式·····	86
3.2.1 能量的一级修正·····	86
3.2.2 能量的高级修正·····	87
3.2.3 关于微扰论的讨论·····	89
3.3* 微扰论递推公式应用举例·····	91
3.3.1 在理论推导中的应用举例·····	91
3.3.2 在数值计算中的应用举例·····	96
3.3.3 关于微扰论的再讨论·····	99
3.4 变分法·····	100
3.4.1 变分法·····	100
3.4.2 线性变分法·····	102
3.4.3 氦原子的基态·····	104
3.5 最陡下降法·····	105
3.5.1 无简并基态的最陡下降法·····	106
3.5.2* H_0 表象下的无简并基态的最陡下降法·····	108
3.5.3 无简并激发态的最陡下降法·····	110
3.5.4* H_0 表象下的无简并激发态的最陡下降法·····	110
3.6 透射系数的递推计算·····	112
3.6.1 计算透射系数的递推公式·····	112
3.6.2 谐振隧穿现象·····	113
3.6.3 周期位与能带结构·····	115
3.6.4 电流-电压曲线·····	117
3.7* 常用算符矩阵元的计算·····	119
3.7.1 坐标矩阵元的计算公式·····	119
3.7.2 坐标矩阵元的递推关系·····	123
3.7.3 三角函数矩阵元的计算公式·····	126
习题3·····	127
第4章 量子多体理论·····	131
4.1 全同性原理·····	131

4.1.1 量子多体理论概述	131
4.1.2 量子多体理论的基本问题	132
4.1.3 全同性原理	133
4.1.4 泡利不相容原理	136
4.2 二次量子化表示	139
4.2.1 福克空间	139
4.2.2 产生算符与湮没算符	141
4.2.3 力学量算符的二次量子化表示	146
4.2.4 相互作用绘景中 H_0 表象下的产生湮没算符	150
4.3 哈特里-福克单粒子位	151
4.3.1 单粒子位	151
4.3.2 绍勒斯波函数	152
4.3.3 哈特里-福克单粒子位	154
4.4 威克定理	156
4.4.1 用编时积表示时间演化算符	156
4.4.2 编时积、正规乘积和收缩	158
4.4.3 威克定理	161
4.5 格林函数方法	165
4.5.1 格林函数的定义	166
4.5.2 物理量在满壳基态上的平均值	167
4.5.3 跃迁概率幅和转移反应矩阵元	168
4.5.4 格林函数的莱曼表示	170
4.5.5 单粒格林函数满足的方程	171
4.5.6 单粒本征方程	175
习题 4	176
第 5 章 量子体系的对称性与守恒量	180
5.1 对称性与守恒量	180
5.1.1 不含时量子体系	180
5.1.2 含时量子体系	183
5.2 空间平移与时间平移	186
5.2.1 空间平移不变性与动量守恒	186
5.2.2 时间平移不变性与能量守恒	187
5.3 空间反演与时间反演	188

5.3.1 空间反演与宇称	188
5.3.2 宇称守恒	189
5.3.3 弱相互作用与宇称不守恒	190
5.3.4 时间反演	191
5.4* 角动量态矢耦合系数	193
5.4.1 CG 系数和 $3j$ 符号	193
5.4.2 U 系数和 $6j$ 符号	195
5.4.3 广义拉卡系数和 $9j$ 符号	197
5.5 空间转动	198
5.5.1 空间转动不变性与角动量守恒	198
5.5.2 转动算符的其他表示	200
5.5.3 转动算符的矩阵形式(D 函数)	201
5.5.4 D 函数的积分公式	203
5.6 维格纳-埃克特定理	206
5.6.1 标量算符	206
5.6.2 不可约张量算符	207
5.6.3 维格纳-埃克特定理	207
5.6.4 维格纳-埃克特定理的应用	209
5.7* 受迫振子的对称性与守恒量	210
5.7.1 含时守恒量	210
5.7.2 受迫振子的含时守恒量	211
5.7.3 含时的对称变换算符	212
5.7.4 线谐振子体系的含时守恒量	213
习题 5	214
第 6 章 量子散射理论	216
6.1 散射现象的描述	216
6.1.1 量子散射概述	216
6.1.2 散射截面	217
6.1.3 弹性势散射	218
6.2 李普曼-许温格方程	220
6.2.1 李普曼-许温格方程	220
6.2.2 格林函数	222
6.2.3 无穷远处的波函数	223

6.3 光学定理	224
6.3.1 跃迁算符	224
6.3.2 摩勒算符	225
6.3.3 散射算符	226
6.3.4 光学定理	227
6.4 玻恩近似	229
6.4.1 玻恩近似方程的建立	229
6.4.2 玻恩近似方程的求解	230
6.4.3 散射振幅与散射截面	231
6.4.4 有限深球方位势与汤川势	233
6.5 分波法	234
6.5.1 自由运动的渐近解	235
6.5.2 中心力场中的渐近解	235
6.5.3 无穷远处的边界条件	237
6.5.4 散射振幅与散射截面	238
6.5.5 利用分波法证明光学定理	239
6.6 球方位势散射	240
6.6.1 球方势阱散射	240
6.6.2 球方势垒散射	241
习题6	243
第7章 相对性论量子力学	246
7.1 克莱因-戈尔登方程	246
7.1.1 克莱因-戈尔登方程的建立	246
7.1.2 负能量和负概率问题	247
7.1.3 克莱因-戈尔登方程的非相对论极限	249
7.1.4 电磁场中的克莱因-戈尔登方程	250
7.2 狄拉克方程	251
7.2.1 狄拉克方程	251
7.2.2 $\hat{\alpha}$ 和 $\hat{\beta}$ 的矩阵形式	252
7.2.3 连续性方程	254
7.2.4 狄拉克粒子的自旋	255
7.3 自由狄拉克粒子的能量本征解	256
7.3.1 自由电子的狄拉克方程	257

7.3.2	自由电子的能量本征值	257
7.3.3	自由电子的能量本征波函数	258
7.3.4	空穴理论	260
7.4	中心力场中的狄拉克方程	261
7.4.1	中心力场中的守恒量算符	261
7.4.2	守恒量算符的本征值	263
7.4.3	中心力场中的径向方程	264
7.5	相对论性氢原子的能谱	267
7.5.1	库仑场中的径向方程	267
7.5.2	氢原子的束缚态能谱	268
7.5.3	氢原子能谱的精细结构	271
习题 7		273
第 8 章*	量子信息学基础	277
8.1	信息学简介	277
8.1.1	经典信息学	277
8.1.2	量子信息学	280
8.2	量子计算机的构成	281
8.2.1	量子位	281
8.2.2	量子门	284
8.2.3	量子并行运算	286
8.3	量子纠缠态	287
8.3.1	复合体系纯态的施密特分解	287
8.3.2	量子纠缠态	289
8.3.3	薛定谔猫态	291
8.3.4	相干与退相干	291
8.3.5	EPR 佯谬与非定域性	295
8.3.6	隐变量理论与贝尔不等式	296
8.4	大数的因子分解	299
8.4.1	大数的因子分解	299
8.4.2	因子分解的经典算法	299
8.4.3	因子分解的量子算法	301
8.5	数据库的搜索	302
8.5.1	未加整理的数据库搜索	302

8.5.2 格罗维尔量子搜索	303
8.5.3 格罗维尔量子搜索举例	305
8.6 量子对策论	306
8.6.1 对策论	306
8.6.2 两人翻硬币游戏	307
8.6.3 量子博弈	308
8.6.4 量子囚徒怪圈	309
8.7 量子通信	310
8.7.1 经典通信模型	310
8.7.2 量子通信模型	311
习题8	314
参考文献	317
索引	319

第 1 章* 量子力学纲要

相对论与量子论是 20 世纪的两个最重大的科学发现,量子论的数学架构就是量子力学。量子力学是建立在 5 个基本原理基础上的,它的正确性已由诸多的实验结果所证实。波函数、算符和薛定谔(Schrödinger)方程是量子力学的 3 个基本要素,本章将对它们做简要回顾和归纳总结。关于本章涉及的基本概念的引入和重要结论的论证,可参阅井孝功与赵永芳编著的《量子力学》(修订本),哈尔滨工业大学出版社,2012 年。

1.1 量子力学概述

本节介绍量子力学的创建过程,主要内容为:量子论的实验基础与理论假说;量子论的 3 个飞跃;量子力学的 5 个基本原理。

1.1.1 量子论的实验基础与理论假说

实验结果是理论的出发点和归宿,量子理论的创建过程正是这一基本原则的具体写照,黑体辐射、光电效应与原子光谱的实验结果分别导致了能量子假说、光量子假说及玻尔(Bohr)旧量子论的建立。

1. 黑体辐射和能量子假说

(1) 实验背景

为了深入地研究辐射频率(或波长)与温度的关系,人们设计了一个在任何温度下能吸收所有光(电磁辐射)而无反射的物体,通常称之为黑体。实验结果表明,黑体辐射满足如下的唯象公式。

维恩(Wien)位移公式

$$\lambda_{\max} T = \alpha \quad (1.1.1)$$

式中, $\lambda_{\max}$ 为最强光的波长; T 为绝对温度; α 为实常数,其数值已由实验结果给出。若不再重新说明,则后面符号的含意保持不变(下同)。

斯特藩(Stefan) - 玻尔兹曼(Boltzmann)定律

$$\rho = \beta T^4 \quad (1.1.2)$$

式中, ρ 为单位体积的能量; β 为实常数,其数值已由实验结果给出。

杜龙(Dulong) - 佩替(Petit)定律

$$C_V = 3N_A k_B = 3R = 24.9 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \quad (1.1.3)$$

式中, C_V 为固体比热; $R = 8.314 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ 为摩尔 (Molar) 气体常数; $N_A = 6.022 \text{ } 136 \text{ } 7 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ 为阿伏伽德罗 (Avogadro) 常数; $k_B = 1.380 \text{ } 658 \times 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$ 为玻尔兹曼常数, 它是热力学与统计物理学的标志性常数。

上式表明, 固体的比热是一个与温度无关的常数。在室温和高温下, 上式与实验结果相符, 但是, 在低温时的实验结果是, 比热与温度的 3 次方成正比, 即

$$C_V = \gamma T^3 \quad (T \rightarrow 0) \quad (1.1.4)$$

式中, γ 为实常数, 其数值已由实验结果给出。特别是, 当 $T = 0$ 时, $C_V = 0$ 。

(2) 能量密度的唯象公式

为了解释上述实验结果, 人们给出了如下的能量密度的唯象公式。

维恩的唯象公式

$$\rho_\nu d\nu = c_1 e^{-c_2 \nu T^{-1}} \nu^3 d\nu \quad (1.1.5)$$

式中, ν 为频率; ρ_ν 为能量密度 (即单位体积单位频率的能量); c_1 与 c_2 为待定常数。

维恩公式只是在高频情况下与实验结果相符。

瑞利 (Rayleigh) - 金斯 (Jeans) 的唯象公式

$$\rho_\nu d\nu = 8\pi k_B T c^{-3} \nu^2 d\nu \quad (1.1.6)$$

式中, $c = 2.997 \text{ } 924 \text{ } 58 \times 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 为真空中的光速, 它是相对论的标志性常数。

瑞利 - 金斯公式只是在低频情况下与实验结果相符。

普朗克 (Planck) 的唯象公式

$$\rho_\nu d\nu = c_1 (e^{c_2 \nu T^{-1}} - 1)^{-1} \nu^3 d\nu \quad (1.1.7)$$

对上式分别取高频和低频近似, 可以得到维恩公式与瑞利 - 金斯公式, 所以, 普朗克的唯象公式在全频段与实验结果相符。

(3) 普朗克的能量子假说

为了能从理论上导出式 (1.1.7), 普朗克假设: 对于一定频率 ν 的辐射, 物体只能以 $h\nu$ 为能量单位吸收或发射它, 此即普朗克的能量子假说。其中的 $h = 6.626 \text{ } 075 \text{ } 5 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ 是一个普适常数, 称之为普朗克常数, 它是量子论的标志性常数。能量子假说也可以理解为, 物体吸收或发射电磁波时, 只能以量子的方式进行, 每个量子的能量为 $\varepsilon = h\nu$, 说得再具体一些, 物体在吸收或发射电磁波时, 只能以能量 ε 的整数倍来实现, 即

$$E_n = n\varepsilon = nh\nu \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (1.1.8)$$

(4) 能量密度的理论公式

利用能量子假说可以导出普朗克能量密度的理论公式

$$\rho_\nu d\nu = 8\pi h c^{-3} [e^{h\nu(k_B T)^{-1}} - 1]^{-1} \nu^3 d\nu \quad (1.1.9)$$

应该特别说明的是, 上式中已不含有任何待定参数, 故称之为理论公式。

利用式 (1.1.9) 可以导出式 (1.1.1)、(1.1.2)、(1.1.4) 中常数的理论数值, 详见并

孝功与赵永芳编著的《量子力学》(修订本)之例题 1.2 与 1.3, 它们分别为

$$\alpha = 2.897\,7 \times 10^{-3} \text{ m} \cdot \text{K} \quad (1.1.10)$$

$$\beta = 7.565\,902 \times 10^{-12} \text{ J} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{K}^{-4} \quad (1.1.11)$$

$$\gamma = 2.4\pi^4 T_D^{-3} N_A k_B \quad (1.1.12)$$

式中, $T_D = \hbar \omega_D k_B^{-1}$ 为德拜(Debye)温度; $\hbar = (2\pi)^{-1} h$; $\omega_D = (6\pi^2 N_A V^{-1})^{1/3} C$ 为振动频率上限; C 是一个与纵波和横波速度相关的数。

α 、 β 、 γ 的理论数值与实验结果相当接近, 说明能量子假说经受住了实验的检验。

2. 光电效应和光量子假说

(1) 实验背景

光电效应的实验现象是, 当用紫外光照射到某些金属(例如, 钠)的表面上时, 立刻就会有电子的发射, 于是在电路中有电流通过。

(2) 爱因斯坦光量子假说之一

爱因斯坦(Einstein)假设光是由光量子(简称光子)组成的, 每个光子的能量 ε 与辐射频率 ν 的关系是

$$\varepsilon = h\nu \quad (1.1.13)$$

由动能 $T = h\nu - W_0$ 可知, 只有当光子的频率 ν 不小于阈值 $\nu_0 = W_0/h$ 时, 才有光电子的发射。式中, T 为光电子的动能; W_0 为脱出功。

爱因斯坦的光量子假说不但正确地解释了单光子光电效应, 而且预言了双光子光电效应乃至多光子光电效应的存在。

(3) 爱因斯坦光量子假说之二

爱因斯坦假设光量子的动量与波长的关系为

$$p = h/\lambda \quad (1.1.14)$$

利用上述关系式可以解释 X 光被电子散射实验, 即康普顿(Compton)散射公式

$$\lambda' - \lambda = 4\pi\hbar(m_0c)^{-1} \sin^2(\theta/2) \quad (1.1.15)$$

式中, λ 、 λ' 分别为入射与散射的 X 光的波长; m_0 为电子的静止质量; θ 为散射光与入射光传播方向的夹角, 称为散射角。

3. 原子光谱和旧量子论

(1) 实验背景

实验发现, 原子光谱是由一条条断续的光谱线构成的, 即所谓的线状光谱。

(2) 玻尔的旧量子论

原子在能量分别为 E_n 和 E_m 两个定态之间跃迁时, 发射或吸收的电磁辐射的频率 ν 满足关系式 $h\nu = E_n - E_m$, 光谱项为

$$T(n) = -E_n/h \quad (1.1.16)$$

由于玻尔的量子假说仍然保留了经典物理学中轨道的概念, 故被称之为旧量子论。

1.1.2 量子论的3次飞跃

在量子论的建立过程中,经历了如下3次具有历史意义的飞跃。

1. 普朗克的量子假说

$$\varepsilon = h\nu, \quad E_n = n\varepsilon \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (1.1.17)$$

2. 德布罗意的物质波假说

德布罗意(de Broglie)物质波假说:包括光子在内所有粒子在运动中都既表现出粒子的行为也表现出波动的行为,此即运动粒子的波粒二象性。换句话说,具有能量 E 和动量 p 的粒子与具有角频率 $\omega = 2\pi\nu$ 和波矢量 k 的物质波相对应,普朗克常数 h 是联系两者的纽带,即

$$E = \hbar\omega, \quad p = \hbar k \quad (1.1.18)$$

此即德布罗意物质波假说的数学形式。

3. 薛定谔方程与玻恩的概率波解释

描述体系状态的波函数 $\Psi(r, t)$ 随时间的变化满足薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r, t) = \hat{H}(r, t) \Psi(r, t) \quad (1.1.19)$$

式中

$$\hat{H}(r, t) = (2\mu)^{-1} \hat{p}^2 + V(r, t) \quad (1.1.20)$$

为哈密顿(Hamilton)算符,其中的 $\hat{p}$ 为动量算符; μ 为粒子的质量; $V(r, t)$ 为位势。

玻恩(Born)认为,不论是德布罗意的物质波,还是薛定谔方程中的波函数所描述的波,都不是什么实在物理量的波动,只不过是描述粒子在空间的概率分布的概率波而已。此即玻恩对体系波函数的概率波解释。

1.1.3 量子力学的5个基本原理

1. 波函数的概率波解释

体系的状态用波函数 $\Psi(r, t)$ 来描述, $|\Psi(r, t)|^2$ 表示 t 时刻在 r 附近发现粒子的概率密度。

2. 状态叠加原理

若体系具有一系列可能的状态 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi_3\rangle, \dots, |\psi_n\rangle$, 则这些状态的任意线性组合

$$|\psi\rangle = c_1 |\psi_1\rangle + c_2 |\psi_2\rangle + c_3 |\psi_3\rangle + \dots + c_n |\psi_n\rangle = \sum_{m=1}^n c_m |\psi_m\rangle \quad (1.1.21)$$

也一定是该体系的一个可能的状态,其中 $c_1, c_2, c_3, \dots, c_n$ 为任意复常数。此即状态叠加原理。