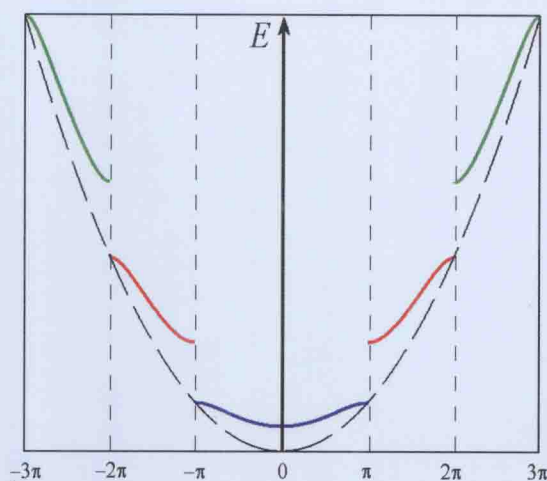


量子力学 II

Quantum Mechanics II

〔德〕顾 樵 (Qiao GU) 著



科学出版社

量子力学Ⅱ

Quantum Mechanics II

〔德〕顾樵 (Qiao GU) 著



科学出版社

内 容 简 介

本书是一部内容丰富、贯通中西的综合性量子力学专著,根据作者 20 多年来在德国和中国开设量子力学讲座和相关研究成果提炼而成。全书共 17 章,划分为六个层次:背景知识,基本理论,基本理论问题的新解法,重要专题讨论,扩展到其他学科,联系到最新进展和前沿课题。全书注重自身理论体系的科学性、严谨性、完整性与实用性。将中国传统教材与国外先进教学内容相结合;将量子力学的纵向演化与知识现状相结合;将基本理论问题与相应的解法相结合;将概念性表述与专题讨论相结合;将应用实践与其他学科相结合;将基础性知识与最新进展和前沿课题相结合。既为教学所用,又适应科研需要。附有大量不同类型的综合性例题,便于不同层次读者从中学习和掌握分析问题、解决问题的思路与方法。量子力学 I 为前 8 章,量子力学 II 为第 9~第 17 章。

本书适合作物理学和相关理工科专业的本科生和研究生的教材,可供高等院校教师和科研院所技术人员在理论研究与工程技术中使用,也可供具有一定物理学及数学基础的自学者自修,还可供在国外学习的本科生、研究生及访问学者参考。

图书在版编目(CIP)数据

量子力学 II = Quantum Mechanics II (德)顾樵著. —北京:科学出版社, 2014. 6

ISBN 978-7-03-040972-0

I. ①量… II. ①顾… III. ①量子力学 IV. ①O413. 1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2014)第 121817 号

责任编辑:刘凤娟 / 责任校对:胡小洁

责任印制:钱玉芬 / 封面设计:耕 者

科 学 出 版 社 出 版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

北京佳信达欣艺术印刷有限公司 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2014 年 6 月第 一 版 开本:720×1000 1/16

2014 年 6 月第一次印刷 印张:20 插页:1

字数:381 000

定价:88.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换)



物理学教授 顾樵博士

前 言

量子力学是描述微观粒子(分子、原子、原子核、基本粒子等)运动规律的理论,它是在量子假设和实验事实的基础上建立起来的。与牛顿力学、麦克斯韦电动力学、爱因斯坦相对论力学的建立方式迥然不同,由于量子理论的复杂性,它不是由一个人而是由多个国家的一群人建立、发展和完善起来的。量子力学的创立,作为多方智慧的融合与结晶,是人类科学发展史上最有魅力、最激动人心的篇章之一。它是一部最有标新立异、最具奇思妙想、最富诗情画意的科学思想史;也是一门严格、自洽、完整、实用的物理学理论。那么,人类的创造力如何超越自身的想象力,从而铸就这一空前辉煌的科学丰碑?

量子论的哲学思想有悖传统的思维方式,它的基本观点至今没有渗透到大众的意识中去,这给它蒙上了一道神秘的面纱,使许多人望而却步。我作为一介学习、研究、应用量子理论长达30年之久的“老兵”,面对量子力学的“神奇莫测”曾无数次陷于“迷惑”之中(玻尔语:“If you are not confused by quantum physics then you haven't really understand it.”);当然也常常因为领悟到它的奥妙与精彩而兴奋不已。我愿意带着自己的感受,与广大读者一起,一步步地踏入量子力学这座神秘而流光溢彩的科学殿堂,去领略和欣赏由众多大师精心雕琢而成的那一件件具有艺术美感的科学瑰宝。

量子力学的起源可以追溯到1900年。这一年德国物理学家马克思·普朗克提出了“量子”概念并建立了著名的黑体辐射公式,这标志着一个新的物理学时代的开始。一个多世纪以来,量子理论已经开辟了极为广阔的科学天地,固体物理学、量子统计力学、量子场论、量子电动力学、量子色动力学、量子电子学、量子光学、量子信息学、量子化学、量子生物学等应运而生。再看看周围的世界,伴随我们这一代人的成长,高科技产业层出不穷:电子显微镜、半导体、激光器、电视、电子计算机、电子通信、光纤通信、超导材料和各种新型材料、核磁共振成像等。它们的出现和应用已经极大地推进了人类的物质文明和精神文明。而所有这一切,无一不同量子力学相联系!

20多年前我来到德国,一直从事生物光子学(属于量子生物学)的研究、应用与开发。由于自身理论物理的学术背景以及研究所的工作需要,也经常开设一些学术讲座,主讲数学物理方法和量子力学。对于所使用的外文教材,作为一个注重严密逻辑推理的中国教授,我感到系统性与缜密性不足。因此,我总是按照自己认定的内容与方式授课,与学生手中的教材大相径庭。

近年来,我常回中国讲学。除了介绍国外科学前沿与高新技术,也讲授数学物理方法和量子力学等基础课程。所用的通常是中文教材,面对母语颇感亲切。但对于一个熟谙西方治学方法的学者,又觉得欠缺灵活性与实用性。所以我的授课依然与学生的课本不相配合。而且不提供课件。学生给我发邮件诉求:“说句真心话,听顾老师的课是一种享受,您讲课太棒了!不知您能否把课件上传,这样我们复习就可以节约一些时间。”问题还是没有称心如意的教材。许多学生以及听课教师问我为什么不出版自己的教材。我的想法是,有写教材的时间,不如去钻研重要的生物光子学课题。

但是,这样的想法随着听课人数的不断增加发生了改变,授课与课本不相配合产生的负面作用越来越明显,学生普遍感到压力很大。于是,我渐渐萌生了写书的念头。就在这时,我发现不少学生已经设法将我的课件复制下来并传到网上。这说明学生们对课件的喜爱,但孰不知其中很多原创内容尚未公开发表。这个情况使写书的念头突然间上升为一种冲动。其实,平心而论,作为一名定居海外多年的学者,在讲学和研究之余,能为祖国留下几本教科书,以飨众多中国读者,也是一件很有意义的事情。

成书后的《量子力学 I》和《量子力学 II》是一套综合性专著。按内容分成 17 章,但就知识结构而言可以划分为以下六个层次:

(1) 背景知识。在综述经典物理学(特别注重对量子力学直接有用的知识)的基础上,讲述量子力学的背景知识(附以真实有趣的历史故事),涉及量子概念与黑体辐射、光电效应与康普顿散射、原子结构与玻尔理论、物质波(波粒二象性)与波动力学。

(2) 基本理论。包括波函数与薛定谔方程,一维束缚态的性质,一维无限深势阱,势垒贯穿,线性谐振子,力学量的算符表示,类氢离子(氢原子),厄米算符(对易关系和测不准原理),表象变换与矩阵力学表述,微扰论,光的吸收与发射,散射问题,全同粒子与自旋,二次量子化等。

(3) 基本理论问题的新解法。例如,利用德布罗意关系和亥姆霍兹方程推导定态薛定谔方程,用哈密顿算符的本征方程导出薛定谔方程的形式解,用驻波条件计算一维无限深势阱的本征能量,用傅里叶变换法求解 δ 势阱中的束缚态(包括双 δ 势阱和三重 δ 势阱),用薛定谔方程的数值解论证谐振子的量子化条件,谐振子问题的算符代数法及本征函数的合流超几何函数表示,类氢离子径向本征函数的合流超几何函数表示,用傅里叶变换法推导测不准关系,用格林函数法求解薛定谔方程进而讨论散射问题的玻恩近似,用算符代数法讨论角动量问题(导出角量子数取整数和半整数两种情况)。

(4) 重要专题讨论。例如,自由粒子波包(包括自由粒子波包的箱归一化处理),原子核的 α 衰变,量子共振腔,电子流的加速,双势阱模型(中央势垒取低能和高能两种情况),普薛耳-特勒势(复指标连带勒让德函数、束缚态和无反射势),双

曲正切势(超几何函数和反射系数),惰性气体分子的伦纳德-琼斯势,双原子分子的莫尔斯势与振动能级,普薛耳-特勒势阱(束缚态和极限行为),谐振子高斯波包的周期性振荡,无限深球形势阱(黎卡提-贝塞尔函数),碱金属原子的能级和波函数,密度算符与力学量的平均值,动量波函数(自由粒子的动量波函数、一维无限深势阱的动量波函数、基态氢原子的动量波函数等),利用能量-时间测不准关系讨论激光的相干性,卢瑟福散射的经典与量子理论,无损耗传输线与单模辐射场的量子化,氢原子能级的精细结构(狄拉克方程和相对论量子力学微扰论)。

(5) 扩展到其他学科。例如,分子物理学(克拉策分子势及分子的振动-转动能级),激光物理(光放大机制和激光的量子特性),固体物理(电子气模型和能带论),量子统计力学(玻尔兹曼统计、费米-狄拉克统计、玻色-爱因斯坦统计、化学势与费米能级、光子统计与热辐射、声子与德拜模型、库珀对与超导现象等),半导体物理(载流子、导带、价带、有效质量、迁移率等),量子光学(光子数态、混沌态、相干态、压缩态、非经典光等)和量子信息学。

(6) 联系到最新进展和前沿课题。例如,超大分子的波动性,有机物的着色机制(共轭链系统中的 π 电子),扫描隧道显微镜和原子力显微镜,双势阱中的周期性势垒贯穿(振荡频率为 10^{14} Hz的光学钟),中微子振荡(一般双态问题),哈密顿替代法(微扰论),合作自发发射(超荧光和超辐射),光子晶体(光在周期性介质中的传播、色散曲线、光子晶体光纤),石墨烯(具有完美晶格结构的二维材料、能带结构、零带隙半导体、奇异的量子效应),薛定谔猫态(相干态之间的量子干涉),量子纠缠态(一个体系的微观状态与宏观状态的耦合),量子退相干,杰恩斯-卡明斯模型(单模辐射场与单个二能级原子的相互作用)和穿衣态,腔 QED 和量子计算机,反物质及应用(肿瘤的诊断和治疗、反物质燃料、反物质武器等)。

学习量子力学有一个潜在性问题,即所谓培养“量子空间想象力”。中学学习立体几何的时候,老师经常说培养“空间想象力”。它指的是由一个几何体的数学描述想象它的三维构象。什么是“量子空间想象力”?量子世界是看不见的,在没有量子力学知识的情况下去想象量子世界,一定会下意识地沿袭经典物理学的思路。这样你无法想象下列现象:

- 量子体系的能量不是连续而是分立变化的,基态的能量是非零的,在基态之下没有状态存在;

- 微观粒子在运动中可以贯穿高能量的势垒,出现透射现象;

- 谐振子可以出现在振幅以外的区域;

- 氢原子中的电子可能出现在空间的任何位置(不限于玻尔轨道);

- 电子不但有轨道角动量,还有自旋角动量,而自旋角动量在空间任何方向上的投影只能取两个值,即 $\pm \frac{1}{2}\hbar$;

.....

这些经典物理学中不可思议的“奇怪”现象正是量子理论的自然结果。这些知识和理念需要在求解各种量子体系中不断积累,与此同时,一种“量子空间想象力”就在逐渐培养之中。当你认真求解和深入讨论四、五个典型的量子体系之后,你的量子空间想象力就在潜移默化中产生了。你就会努力想象一个微观体系在那个看不见的量子空间所展示的种种特性。

可见,求解量子体系(特别是求解薛定谔方程)是至关重要的。毫无疑问,这中间要用到大量的数学知识。求解物理问题就像工匠干活一样,得心应手的工具可以使操作变得很简单。求解一个量子体系如果没有专用的数学工具而仅凭数学分析之类,就像用螺丝刀装卸汽车轮胎一样。所以学习量子力学之前(或与此同时)必须学习和掌握相关的数学知识。顺便说,本人编著的《数学物理方法》(科学出版社,2012年1月出版,2014年2月第三次印刷)正是这套《量子力学 I》和《量子力学 II》的数学基础。这两本书可谓姊妹篇,内容上密切相关,写作风格也保持一致。当然还有许多优秀的专著可供参考,如柯朗和希尔伯特的专著《数学物理方法》(中译本,科学出版社,2011年出版)。

与通常的量子力学教科书不同,本书作为一部综合性专著所涉及的内容相当广泛,本科教学中可根据课时和需要加以取舍。书中所述知识绝非一个学期就可以完全掌握,需要长期反复思考与练习,所以本书对硕士生和博士生同样有用。另外,本人根据自己的经历深深感到,即使是从事相关教学、科研或工程技术多年的专业人员,也常常需要查阅量子力学的基础性知识。所以既为教学所用,又适应科研需要,是本书的宗旨。书中列出大量例题,读者可从中感受和领会解决实际问题的思路与方法。却没有像普通教科书那样附上练习题。实际上授课老师寻找一些练习题布置给学生(或者学生自找练习题)并非一件难事。

本专著物理论述及数学推导简明、直观、详尽、易懂,可以作为各类人员的自学教材及参考书。

在多年的学术讲座和授课中,国内外不少学生、听课教师和其他听课人员提出许多有意义的问题,使本书内容日臻丰富,在此向他们致谢。另外,作者感谢与 Fritz A. Popp 教授的有益讨论,与他在德国国际生物物理研究所多年的学术合作使我受益匪浅。本人自 1977 年读大学以来,在 30 多年的科学生涯中一直受到妻子张爱华的全力支持和悉心关照,谨此表示由衷的感谢。

顾樵

Prof. Dr. Qiao GU (Chief Scientist)

gu-qiao@gmx.de

International Institute of Quantum Biology

Haßloch, Germany

20 March 2014

目 录

第 9 章 测不准原理	319
9.1 力学量在任意态中的平均值	319
9.1.1 分立谱:概率幅	319
9.1.2 连续谱:动量波函数	322
9.2 狄拉克符号	326
9.2.1 态矢量的狄拉克符号表示	326
9.2.2 本征矢的完备性关系式	328
9.2.3 应用:典型例题	330
9.3 密度算符与平均值	333
9.3.1 算符的迹	333
9.3.2 平均值的密度算符表示	334
9.4 算符的对易关系	336
9.4.1 算符的对易关系	336
9.4.2 算符对易的物理意义	340
9.5 测不准原理	341
9.5.1 一般性推导	341
9.5.2 矢量模型:狄拉克符号	344
9.5.3 数学方法:傅里叶变换	345
9.5.4 物理现象:电子单缝衍射	347
9.5.5 几何图像:势阱中的小球	347
9.6 测不准原理的应用	348
9.6.1 自由粒子	348
9.6.2 一维无限深势阱	349
9.6.3 谐振子	351
9.6.4 氢原子	354
9.6.5 含时情况:自由粒子波包	357
9.6.6 一个实例:库珀对与超导现象	357
9.7 量子体系的演化与守恒量	359
9.7.1 期待值的演化	360
9.7.2 守恒量	360
9.8 能量-时间测不准关系	361

9.8.1 一个简单的推导方法	361
9.8.2 作为一般性测不准关系的推论	362
9.8.3 从相对论推导测不准关系	363
9.8.4 一个例子:纠缠态中的测不准关系	365
第 10 章 表象与矩阵力学	367
10.1 连续谱表象	367
10.1.1 坐标表象	367
10.1.2 动量表象	367
10.2 分立谱 Q 表象	368
10.2.1 态在 Q 表象的表示:列矢量	368
10.2.2 算符在 Q 表象的表示:矩阵	370
10.3 数态表象与相干态	372
10.3.1 数态表象	372
10.3.2 任意态在数态表象的波函数	373
10.3.3 相干态在数态表象的波函数	375
10.3.4 相干态的基本性质	377
10.4 矩阵力学表述	378
10.4.1 本征矢的正交性关系式	378
10.4.2 本征矢的完备性关系式	380
10.4.3 平均值公式	381
10.4.4 本征方程	382
10.4.5 薛定谔方程	383
10.5 表象变换	384
10.5.1 波函数的变换	384
10.5.2 幺正变换	386
10.5.3 算符的变换	386
10.5.4 幺正变换的性质和物理意义	387
10.6 泡利矩阵	388
10.6.1 基本性质	388
10.6.2 本征态:自旋向上和自旋向下	391
10.6.3 泡利矩阵中的表象变换	395
10.6.4 二能级原子:哈密顿算符和跃迁算符	396
10.6.5 双态问题:中微子振荡	397
第 11 章 微扰论	401
11.1 基本概念	401
11.2 定态微扰论	402

11.2.1 微扰论方程	402
11.2.2 能量和波函数的一级近似	403
11.2.3 能量的二级修正	404
11.2.4 典型例题	406
11.3 简并微扰论	417
11.3.1 简并微扰论	417
11.3.2 氢原子的斯塔克效应	418
11.4 哈密顿替代法	422
11.4.1 哈密顿替代法	422
11.4.2 应用举例	423
11.5 含时微扰论	425
11.5.1 含时微扰论方程	425
11.5.2 量子跃迁	427
第 12 章 原子与光场相互作用	433
12.1 偶极近似下的哈密顿算符	433
12.2 原子与光场相互作用	434
12.2.1 吸收	434
12.2.2 受激发射	434
12.2.3 自发发射	435
12.3 爱因斯坦方程	435
12.3.1 非相干微扰光场	435
12.3.2 爱因斯坦方程	437
12.3.3 选择定则	440
12.3.4 跃迁速率	442
12.4 激光	443
12.4.1 激光产生的物理机制	443
12.4.2 激光的量子特性	445
12.5 自发发射与合作自发发射	447
12.5.1 自发发射: 荧光	447
12.5.2 合作自发发射: 超荧光和超辐射	448
第 13 章 散射	451
13.1 经典散射理论	451
13.1.1 刚性球散射	451
13.1.2 一般情况: 散射截面	453
13.1.3 卢瑟福散射	454
13.2 量子散射理论	456

13.3 分波法	458
13.3.1 理论表述	458
13.3.2 量子刚性球散射	461
13.4 玻恩近似	463
13.4.1 薛定谔方程:格林函数法	463
13.4.2 一般性结果	465
13.4.3 玻恩近似	466
13.4.4 应用举例	466
第 14 章 角动量与自旋	469
14.1 角动量:算符代数法	469
14.1.1 角动量算符与球谐函数	469
14.1.2 升阶算符和降阶算符	469
14.1.3 本征态和本征值	471
14.1.4 典型例题	474
14.2 自旋	475
14.2.1 氢原子的轨道磁矩	476
14.2.2 自旋和自旋 $1/2$	477
14.2.3 施特恩-格拉赫实验	479
14.2.4 自旋态的矢量表示	482
14.3 角动量的组合与耦合	485
14.3.1 自旋-自旋组合:三重态和单态	485
14.3.2 自旋-轨道耦合:能级精细结构	488
14.4 塞曼效应	491
14.4.1 强磁场情况	492
14.4.2 弱磁场情况	494
第 15 章 全同粒子与固体	496
15.1 全同粒子的不可区分性	496
15.2 二粒子体系	497
15.2.1 二粒子体系	497
15.2.2 体系的本征函数	498
15.2.3 玻色子与费米子	500
15.3 固体的量子理论	501
15.3.1 固体中的电子:两种模型	502
15.3.2 自由电子气模型	502
15.3.3 能带形成的机制	504
15.3.4 克勒尼希-彭尼模型	505

15.3.5 能带论	507
15.3.6 绝缘体、导体、半导体	515
15.3.7 光子晶体	517
15.4 量子统计力学	519
15.4.1 三粒子体系	519
15.4.2 N 粒子体系	521
15.4.3 最概然布居数	523
15.4.4 参数的物理意义	526
15.4.5 量子统计分布与平均粒子数	527
15.5 量子统计力学的应用	528
15.5.1 化学势与费米能级	528
15.5.2 黑体辐射与平均光子数	529
15.5.3 晶格振动、声子与德拜模型	530
15.6 石墨烯	535
15.6.1 石墨烯:碳原子网	535
15.6.2 石墨烯的能带结构	537
15.6.3 奇特的量子效应	539
15.6.4 石墨烯的狄拉克方程	540
第 16 章 辐射场的量子态	542
16.1 辐射场的量子化	542
16.1.1 无损耗传输线的量子化	543
16.1.2 单模辐射场的量子化	544
16.1.3 电场算符及其正交分量	546
16.2 光子数态	547
16.3 混沌态	548
16.4 相干态	549
16.4.1 平移算符	550
16.4.2 非正交性	552
16.4.3 完备性	552
16.4.4 在坐标表象的波函数	553
16.5 压缩态	554
16.5.1 压缩态	554
16.5.2 非经典光	555
16.5.3 双光子相干态	556
16.5.4 压缩态的物理图像	558
16.6 薛定谔猫态	559

16.6.1	薛定谔猫态	559
16.6.2	偶相干态和奇相干态	564
16.7	薛定谔猫态的相干性	566
16.7.1	薛定谔猫态的退相干	566
16.7.2	用位相调制维持相干性	566
16.7.3	猫态的量子统计性质	568
16.7.4	位相调制的实验方案	569
16.8	杰恩斯-卡明斯模型:穿衣态	570
16.8.1	JCM 的精确解	570
16.8.2	含时 JCM 体系的一般解	573
16.9	JCM 体系的量子统计性质	574
16.9.1	一般性结果	574
16.9.2	真空态	575
16.9.3	相干态	576
16.10	腔 QED 和量子计算机	579
16.10.1	腔 QED	579
16.10.2	量子计算机	581
第 17 章	相对论量子力学与反物质	583
17.1	非相对论量子力学	583
17.2	克莱因-戈尔登方程	584
17.3	狄拉克相对论方程	585
17.3.1	狄拉克方程	585
17.3.2	平面波解	586
17.3.3	连续性方程	587
17.4	狄拉克方程的应用:中心势场问题	588
17.4.1	中心势场问题	588
17.4.2	氢原子能级的精细结构	590
17.5	负能量与正电子	593
17.5.1	负能量诠释与正电子预言	593
17.5.2	正电子的发现	594
17.6	反物质	595
17.6.1	正负电子对湮没	595
17.6.2	反质子	596
17.6.3	自然界的 γ 射线爆	597
17.6.4	反物质	598
17.7	反物质的应用	598

17.7.1 肿瘤的诊断和治疗	598
17.7.2 反物质燃料	600
17.7.3 反物质武器	600
17.8 宇宙的对称性	601
索引	602

量子力学 I

第 1 章 量子力学基础	1
第 2 章 波函数与薛定谔方程	56
第 3 章 一维势场模型	99
第 4 章 一维势场模型的应用	151
第 5 章 量子谐振子	196
第 6 章 谐振子模型的应用	232
第 7 章 力学量的算符表示	252
第 8 章 三维空间的量子力学	272

第 9 章 测不准原理

我们在第 7 章曾引进量子力学的一个基本假设,即力学量的算符表示。其基本含义是,如果量子力学体系的某个力学量用算符 $\hat{F}$ 表示,那么当这个体系处于 $\hat{F}$ 的本征态 ψ 时,这个力学量有确定值,它就是本征方程 $\hat{F}\psi = \lambda\psi$ 中的本征值 λ 。不过这个假设还不能完全解决量子力学的问题。如果体系不是处于 $\hat{F}$ 的本征态 ψ ,而是处于一个任意态,这时算符 $\hat{F}$ 所表示的力学量是否还有确定值?该力学量的取值与 $\hat{F}$ 的本征值之间有怎样的关系?这些问题更具一般性。为了从根本上解决这些问题,本章从厄米算符本征函数的正交性和完备性出发,讨论力学量在任意态中的平均值,并随之引入概率幅(分立谱)和动量波函数(连续谱)的重要概念。之后我们介绍量子力学的狄拉克符号表述,并在狄拉克符号的意义上定义密度算符,进而利用密度算符给出量子力学平均值的一般表达式。然后我们一般性地讨论算符的对易关系和两个力学量同时有确定值的条件。在上述讨论基础上,最后我们进入本章的核心问题——测不准原理。我们将从不同的角度论述这一量子力学最重要的原理,并介绍它在一些典型体系中的应用。

9.1 力学量在任意态中的平均值

9.1.1 分立谱:概率幅

我们在 7.2 节讨论了厄米算符本征函数的正交性和完备性。我们已经知道,若 $\psi_1(x), \psi_2(x), \dots, \psi_n(x), \dots$ 是厄米算符 $\hat{F}$ 的归一化本征函数,相应的本征值为 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n, \dots$ 它们满足本征方程 $\hat{F}\psi_n(x) = \lambda_n\psi_n(x)$,则本征函数服从正交性关系式

$$\int \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx = \delta_{nm} \quad (9.1.1)$$

而任一连续函数 $f(x)$ 可以按本征函数集 $\{\psi_n(x)\}$ 展开为

$$f(x) = \sum_n c_n \psi_n(x) \quad (9.1.2)$$

其中,展开系数

$$c_n = \int \psi_n^*(x) f(x) dx \quad (9.1.3)$$

是复常数。

现在我们考查展开系数 c_n 的物理意义。设 $f(x)$ 已经归一化,利用 $\psi_n(x)$ 的正

交性关系式(9.1.1), 我们有

$$\begin{aligned}
 1 &= \int f^*(x) f(x) dx = \int \sum_m c_m^* \psi_m^*(x) \sum_n c_n \psi_n(x) dx \\
 &= \sum_m \sum_n c_m^* c_n \int \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx \\
 &= \sum_m \sum_n c_m^* c_n \delta_{mn} \\
 &= \sum_n |c_n|^2
 \end{aligned} \tag{9.1.4}$$

由这个结果可以看出, $|c_n|^2$ 具有概率的意义。先考虑一个特殊情况, 如果 $f(x)$ 是算符 $\hat{F}$ 的某一个本征态, 如 $f(x) = \psi_N(x)$, 则式(9.1.4)右边的求和中除 $|c_N|^2 = 1$ 外, 其余都等于零。根据第7章的假设, 在这种情况下测量力学量 F , 必定得到确定的结果 λ_N 。一般情况下, $|c_n|^2$ 表示在任意态 $f(x)$ 中发现本征态 $\psi_n(x)$ 的概率(体系处于本征态 $\psi_1(x), \psi_2(x), \dots, \psi_n(x), \dots$ 的概率之和为 1)。换言之, $|c_n|^2$ 表示在 $f(x)$ 态中测量力学量 F 得到本征值 λ_n 的概率。由此, c_n 通常被称为“概率幅”(probability amplitude), 这是量子力学中一个非常重要而有趣的概念。

基于上述讨论, 我们引进有关力学量算符表示的另一个基本假设: 量子力学中表示力学量的算符 $\hat{F}$ 是厄米算符, 它们的本征函数构成完备集。当体系处于任意波函数 $f(x)$ 所描述的状态时, 力学量 F 没有确定的数值, 而是有一系列可能的值, 这些值就是算符 $\hat{F}$ 的本征值 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n, \dots$ 。测量力学量 F 得到本征值 λ_n 的概率是 $|c_n|^2$ 。这样一来, 力学量 F 在任意态 $f(x)$ 中的平均值便是

$$\langle F \rangle = \sum_n \lambda_n |c_n|^2 \tag{9.1.5}$$

它具有统计平均的形式。这样的平均值表示式我们之前遇到过, 一个典型的例子就是式(2.3.10)。现在我们一般性地证明: 式(9.1.5)所示的统计平均值可以简化为式(2.1.32)所示的期待值:

$$\langle \hat{F} \rangle = \int f^*(x) \hat{F} f(x) dx \tag{9.1.6}$$

事实上, 我们有

$$\begin{aligned}
 \int f^*(x) \hat{F} f(x) dx &= \int \sum_m c_m^* \psi_m^*(x) \hat{F} \sum_n c_n \psi_n(x) dx \\
 &= \sum_m \sum_n c_m^* c_n \lambda_n \int \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx \\
 &= \sum_m \sum_n c_m^* c_n \lambda_n \delta_{mn} \\
 &= \sum_n \lambda_n |c_n|^2
 \end{aligned} \tag{9.1.7}$$