高等量子理论

P.罗曼　著
张端明　等译

华中工学院出版社

高等量子理论

P. 罗曼 著

张端明　　雷式祖
曹　力　　邹婉珍　译

阮图南　马千乘等审校

华中工学院出版社

高等量子理论

P.罗　曼　著

张端明　雷式祖
曹　力　邹婉珍　译

阮图南　马千乘等　审校

责任编辑　孙加可

*

华中工学院出版社出版发行

(武昌喻家山)

新华书店湖北发行所经销

华中工学院出版社沔阳印刷厂印刷

*

开本：787×1092　1/16　印张：29.5　字数：698,000

1986年12月第一版　　1986年12月第一次印刷

印数：1—2,000

统一书号：13255-039　　定价：4.85 元

内 容 简 介

本书是量子理论领域中的一部经典著作，详尽地介绍了高等量子理论中的基本内容：公理化系统，相对论性量子力学，对称性原理等，其中对散射理论进行了特别精细的分析。

本书每章末尾附有小结、习题及参考文献，是需要量子理论基础知识较多的物理工作者的一本有价值的参考书。

译者前言

高等量子理论是现代理论中的一个重要领域.介绍这一领域的专著在国外虽已为数不少，但是国内尚属阙如。罗曼的“高等量子理论”一书是这方面的名著。其特点是取材翔实，物理概念清楚，叙述精当，循序渐进，材料自足，书中除介绍高等量子理论的基本内容：公理化系统，相对论性量子力学、对称性等以外，对于散射理论进行了极其详尽的分析。因此，本书不仅可以作为有关专业的研究生教材，而且对于对相对论性量子场论、粒子物理理论、原子核理论以及凝聚态理论等领域感兴趣的物理工作者都不失为一本很好的参考书。

近年来，由于量子理论的迅速发展，例如规范场理论、量子色动力学、弱电统一理论等的勃兴和广泛应用，等等，使得本书个别论述稍嫌陈旧。但是这无碍本书作为一本优秀的教科书和有价值参考书的地位。实际上，这些新方向的介绍并不属于一般高等量子理论书籍的任务。有兴趣的读者，不妨参阅有关文献。

原书附录篇幅过于庞大，我们已割爱删去。好在附录中绝大部分内容对于国内读者并不生疏，且在有关书籍不难查阅，因此删去影响并不大。

全书翻译工作分工如下：雷式祖译序言、第一章（除第八节）、第六章，曹力译第二章及第一章第八节，邹婉珍译第四章第四、五节，其余部分由张端明译出。

本书校对工作十分繁杂，在此仅向中国科技大学阮图南、马千秉同志致谢。

由于译者水平有限，疏误一定不少，敬请读者不吝赐教。

序

谁热恋实践而无科学指导，就像一个水手坐上没有舵和指南针的船，他将迷失方向。

L.达。芬奇

尽管量子理论的优秀教科书和专著已很多，我仍认为再写一本量子理论的教科书以满足理论物理研究生的需要是完全必要的。近十年来，我在欧洲、英国、美国讲授中级量子力学和高等量子理论的过程中，对于写这样一本书的迫切性有所认识，我认为，那怕它并不十分完善，但仍然便于引导学生从基础量子力学（一般学生已有的知识）系统地、循序渐进地了解量子理论的现代研究方法和概念。同时，我们还单独用一定篇幅来概括一般量子力学教科书中的基本概念和方法。

在说明了我们的目的之后，我感到对本书所采用的名字需作一些解释。“高等”这个含糊不清的形容词确是很难定义的。这里并不意味着我们的论述是“高级”的，也不是说当学生读完全书后就成为一个具有高深知识的学者。我所要说的意思是，这是一本所谓量子理论的高等学位教程，它将为学生以后研究真正高深的专门理论——相对性量子场论、基本粒子理论或多体问题打下基础。

另外，本书题目之所以采用量子理论而不采用量子力学，目的在于强调书中所处理的问题的普遍性，它不仅包括类似于力学系统那样的量子体系，而且包括微观世界的任何系统。由于很多原因虽然省略了相对性量子场论，但对于量子场问题仍给于了特别的注重。另一方面，本书包括相对性量子力学的基础（第二章和附录三），因为我认为在这个学习阶段初步熟悉未量子化的克莱因-戈登方程和狄喇克方程是完全必要的和可能的。

鉴于已有详细的目录，就不必再介绍本书的内容了。每章末还有一个简短的摘要，以使读者将所学习的知识系统化。

由于高等量子理论教程所包括的内容各个学校之间差异极大，因此，对所讨论的材料的选取并不是唯一的。由于类似的原因，本书亦包括一些较初级教程中所讨论的论题。因为某些熟悉和粗浅的论题用更严格和系统的方法处理对学生是大有益处的。

显然，一年时间是不能教完这本书的。因此，将本书作教材有两种使用方法：一些学校有整整两年时间来安排中级和高等量子理论的教学，它们可以平行上课或将专门的、高深的论题安排后一些。我们希望有这样课程设置的学校不断增加。而大多数大学只有一年时间安排此课程的学习，那么，教师可根据自已的爱好来选择专题，这里可以有多种选择方法。最后，有一些章节，如色散关系基础（第三章3-4，3-5c节；第四章4-4e、4-4f节）、有关多体问题（第四章4-6节）等，可以在上完高等量子理论的一般理论后，作为专题课程学习。

人们常说，不使用就不能完全理解，甚至有时还听说：“在使用中学习”，当然这是对的。但就我看来，这就把一个复杂的学习过程过份地简化了。在进入一个新大陆时，我们必须先熟悉其地域的全貌，绘一张地图，在开发这个区域之前，先了解它有什么资源。同样，我感到很多有志于科学研究的年轻人，他们对所研究的领域没有系统的了解，对基本概念和

方法没有充分领会，就过早地进入了应用。物理学不象农业、卫生管道工程或其他 工 程 技术，它不只是一种专业性的活动。过去，人们常把物理学称作“自然哲学”。它是人们渴望了解我们所居住的世界，不断地探索、钻研的人类思想奇迹的成果。在本书中我将努力表达物理学的这一特点。现在年轻学生往往为繁多的枝节问题迷失方向，我感到这对他们的进步实际上是有害的。经验证明，大多数学生很想了解什么叫做“理论体系”，而且只有当他们掌握理论体系后，才能独立工作，才能成为理论体系研究和应用方面的主人。

理论体系和研究应用之间有一座桥，这座桥梁就是各种难易程度不同的习题。由于这个原因，每章末我们都附上很多习题。这些问题是教材绝不可少的基本组成部分。若 时 间 允许，我们鼓励学生尽可能地多做这些习题。这些问题都是直截了当的，全都不超越本书的范围，解这些问题不必读其他参考书。有时，这些问题包括本书的一些细节、论题的延伸及一些新定理或新方法。

最后说明一下参考文献。这些参考文献是不齐全的，若将最重要的量子理论文献写出将会自成一卷。因此，我限制自己每章末只给出很短的文献目录，包括流行的教科书、专著及评论，以便读者补充原有知识和进一步阅读。在一些情况下，为了简洁起见略去了一些证明和讨论，在参考文献中我们将引入附注说明。

若本书的一些部分能帮助读者解决理解上的困难和扩大他们的视野，那么我们的目的就算达到了。我欢迎任何评论、纠正错误甚至包括印刷错误。

感谢我的同事和学生帮助澄清了一些观点。感谢美国空军科学研究所给予我写本书的长时间的支持和恩准减少我的研究工作。还特别要感谢我的妻子柯杜娜（Cordula）在我写此书岁月中对我的理解和支持。

P. 罗曼

麻省. 波士顿

1964年5月

目　　录

第一部分　量子理论的框架

第一章　量子系统的描述 ……………………………………………（ 1 ）

1—1　物理可观测量 ……………………………………………（ 1 ）

1—2　量子系统的状态 ……………………………………………（ 7 ）

1—3　期待值和几率 ……………………………………………（ 15 ）

1—4　各种进一步的讨论 ……………………………………………（ 18 ）

1—4a　海森堡测不准关系 ……………………………………………（ 18 ）

1—4b　超选择定则 ……………………………………………（ 20 ）

1—4c　正则变换 ……………………………………………（ 22 ）

1—4d　许温格作用量原理和量子化规则 ……………………………………………（ 25 ）

1—5　量子系统的动力学演化 ……………………………………………（ 27 ）

1—5a　薛定谔图象 ……………………………………………（ 27 ）

1—5b　海森堡图象 ……………………………………………（ 31 ）

1—5c　相互作用图象 ……………………………………………（ 34 ）

1—6　全同粒子系统 ……………………………………………（ 38 ）

1—7　二次量子化 ……………………………………………（ 44 ）

1—7a　玻色子系统 ……………………………………………（ 46 ）

1—7b　费米子系统 ……………………………………………（ 53 ）

1—7c　运动方程 ……………………………………………（ 56 ）

1—7d　粒子间的相互作用 ……………………………………………（ 57 ）

1—7e　许温格作用量原理和场的量子化 ……………………………………………（ 62 ）

1—8　密度矩阵 ……………………………………………（ 65 ）

1—8a　密度矩阵的普遍性质 ……………………………………………（ 66 ）

1—8b　效率矩阵和信息函数 ……………………………………………（ 73 ）

1—8c　一个直观的例子 ……………………………………………（ 75 ）

第一章　小结

习　　题

参考文献

第二章　相对论性量子力学基础 ……………………………………………（ 87 ）

2—1　克莱因-戈登方程 ……………………………………………（ 88 ）

2—2　狄拉克方程 ……………………………………………（ 91 ）

2—2a　狄拉克方程的推导 ……………………………………………（ 91 ）

2—2b　平面波解 ……………………………………………（ 93 ）

2—2c　空穴理论 ……………………………………………（ 96 ）

2—2d　连续性方程 ……………………………………………（ 97 ）

2—2e　与电磁场的相互作用 ……………………………………………（ 98 ）

2—2f　福尔狄-乌尔楚和辛尼-图切克变换 ……………………………………………（100）

第二章　小结

习　　题

参考文献

第二部分　碰撞理论及有关课题

第三章　势散射 ……………………………………………………………………（109）
3—1　基本概念 ……………………………………………………………………（110）
3—2　势散射的积分方程 ……………………………………………………………（113）
3—2a　玻恩近似 ……………………………………………………………………（117）
3—2b　全格林函数 …………………………………………………………………（119）
3—3　分波法 ………………………………………………………………………（120）
3—3a　数学准备 ……………………………………………………………………（120）
3—3b　分波分析 ……………………………………………………………………（122）
3—3c　相移和截面的计算……………………………………………………………（124）
3—3d　若干定理及其推广 ……………………………………………………………（129）
3—3d_1　相移符号…………………………………………………………………（130）
3—3d_2　光学定理和"幺正性" ………………………………………………………（131）
3—3d_3　散射长度和有效范围…………………………………………………………（131）
3—3d_4　散射共振…………………………………………………………………（138）
3—3d_5　对吸引方形势阱的散射………………………………………………………（142）
3—3d_7　非弹性散射………………………………………………………………（146）
3—4　色散关系 ……………………………………………………………………（149）
3—4a　克拉玛斯-克洛宁色散关系……………………………………………………（150）
3—4b　数学技巧 ……………………………………………………………………（152）
3—4c　势散射的色散关系 ……………………………………………………………（156）
3—4d　势散射的曼德尔斯塔姆表示 ……………………………………………………（165）
3—4e　分波振幅的色散关系 …………………………………………………………（172）
3—4f　雷吉极点 ……………………………………………………………………（180）
3—5　势散射理论的含时方法 ………………………………………………………（183）
3—5a　跃迁几率和截面的计算 ………………………………………………………（185）
3—5a_1　狄拉克含时微扰理论 ………………………………………………………（186）
3—5a_2　散射截面的计算 …………………………………………………………（189）
3—5b　含时格林函数 ………………………………………………………………（191）
3—5b_1　非微扰格林函数 …………………………………………………………（191）
3—5b_2　全含时格林函数 …………………………………………………………（194）
3—5c　因果性和色散关系 ……………………………………………………………（196）
3—5c_1　数学定理 ………………………………………………………………（196）
3—5c_2　对物理过程的应用…………………………………………………………（199）
3—5c_3　因果性和位势散射 …………………………………………………………（200）
第三章　小结
习　　题
参考文献
第四章　碰撞现象的普遍（形式）理论 ……………………………………………（209）
4—1　S矩阵和T矩阵的定义 ………………………………………………………（209）
4—2　非含时公式化中的S矩阵 ……………………………………………………（212）
4—2a　薛定谔（李普曼-许温格方程）方程的形式解…………………………………（212）
4—2b　入态和出态的性质 ……………………………………………………………（215）

4—2c 非含时方法中S和T矩阵的计算 …… (222)
4—2d 一个例子：势散射 …… (226)
4—3 含时公式化中的S矩阵 …… (228)
4—3a 相互作用图象中时间的演化 …… (229)
4—3a$_1$ 戴逊微扰理论 …… (230)
4—3b S矩阵的确定 …… (232)
4—3b$_1$ 穆勒波算符 …… (234)
4—3b$_2$ S的非含时定义与含时定义的等价性 …… (239)
4—3b$_3$ 海森堡图象中的S矩阵 …… (241)
4—4 对有关问题进一步的讨论 …… (247)
4—4a S的幺正性及有关问题 …… (248)
4—4b 绝热假设 …… (252)
4—4c 能级移动和重正化 …… (254)
4—4d 角动量表象中的S矩阵和乔斯特函数 …… (256)
4—4e S矩阵的解析延拓和束缚态 …… (261)
4—4f 在二次量子化框架中S矩阵的计算 …… (266)
4—4g 复杂的碰撞；末态相互作用 …… (275)
4—5 传播子和格林函数算符 …… (280)
4—5a S矩阵的图形表示 …… (280)
4—5b 真正传播子和S矩阵的封闭形式 …… (282)
4—5c 费曼积分方程方法的某些应用 …… (285)
4—5c$_1$ 束缚态问题 …… (286)
4—5c$_2$ 两体问题 …… (287)
4—5c$_3$ 非相对论贝特-沙彪特方程 …… (290)
4—5d 预解式法 …… (291)
4—5d$_1$ 分立能级和本征函数的计算 …… (292)
4—5d$_2$ 对于势散射的应用 …… (296)
4—6 对多体问题的某些应用 …… (300)
4—6a 非含时方法 …… (306)
4—6a$_1$ 休根荷尔兹图 …… (306)
4—6a$_2$ 与体积有关部分的分离 …… (315)
4—6a$_3$ 微扰基态 …… (317)
4—6a$_4$ 微扰激发态 …… (323)
4—6b 格林函数（传播子）方法 …… (332)
4—6b$_1$ 单粒子传播子的基本性质和解析行为 …… (333)
4—6b$_2$ 单粒子传播子的基本物理应用 …… (341)
4—6b$_3$ 传播子微扰计算中的费曼图技巧 …… (346)
4—6b$_4$ 双粒子传播子 …… (358)
第四章 小结
习 题
参考文献

第三部分 量子理论中的对称性和不变性

第五章 对称变换和守恒律 …… (369)
5—1 有关量子系统对称性的一般概念 …… (370)

5—2　守恒律和不变性 ……………………………………………………………………（374）
5—3　对称性和相关守恒律示例 ……………………………………………………………（378）
5—3a　空间平移和动量守恒 ……………………………………………………………（378）
5—3b　时间平移和能量守恒 ……………………………………………………………（379）
5—3c　旋转不变性和角动量守恒……………………………………………………………（380）
5—3d　空间反射不变性和宇称守恒……………………………………………………………（388）
5—3e　时间反演不变性及某些结果……………………………………………………………（394）
5—3f　同位旋空间旋转对称性和同位旋守恒……………………………………………………………（399）
5—3f_1　同位旋方案的推广 ……………………………………………………………（407）
第五章　小结
习　　题
参考文献
第六章　量子理论中群论方法的某些直接应用 ……………………………………（415）
6—1　本征态的分类和对称群的表示……………………………………………………………（415）
6—1a　耦合系统和乘积表示的可约性 ……………………………………………………………（420）
6—2　矩阵元的计算和对称性的结果……………………………………………………………（425）
6—2a　不可约张量算符……………………………………………………………（426）
6—2a_1　维格勒-爱卡脱定理 ……………………………………………………………（430）
6—2a_2　示例：多道散射……………………………………………………………（433）
6—3　群论方法对于稳定束缚态微扰的一些应用 ……………………………………………………………（435）
6—3a　一些例子 ……………………………………………………………（440）
6—3a_1　核的库仑能 ……………………………………………………………（440）
6—3a_2　严格库仑相互作用下的原子能级……………………………………………………………（441）
6—3a_3　存在自旋-轨道耦合的原子能级 ……………………………………………………………（444）
6—4　群论方法对选择定则的一些应用 ……………………………………………………………（448）
6—4a　一些实例：原子光谱 ……………………………………………………………（451）
第六章　小结
习　　题
参考文献

第一部分　量子理论的框架

第一章　量子系统的描述

量子理论是一门自洽的物理学科，旨在对支配微观世界行为的基本定律给以适当的描述。它讨论基本粒子、原子核、原子、分子以及可能描述更大一些的原子系统，如晶体的性质和它发生的变化。

宏观世界的现象，即具有复杂结构的、大而重的广延体的现象，都是对大量基本的微观现象取平均的结果。因此，当我们只观测宏观现象时，微观世界的很多性质就不会显示出来。宏观规律是把微观规律应用于巨大数目的单个过程的近似结果。因此，微观物理定律—量子理论必须建立在一组公理（或假设）的基础上，而不能从宏观世界的规律导出（例如，它不能从牛顿（Newton）运动方程和麦克斯韦（Maxwell）方程导出）。能够确立和检验这些公理的只能是与微观现象直接相关的实验。这些微观世界基本规律的发现和发展，在经过反复试验和失败后，大约是在1900～1930年间完成的。

我们假定读者早已熟悉量子理论的最重要特点和最基本的应用，并已能完成量子力学的各种计算。因此，在第一章里我们只致力于给出一个扼要、而又足够深刻的作为量子理论坚实基础的完整的理论框架。我们相信，对量子理论这座宏伟大厦的最清楚和透彻的理解，多少要通过概念和基本定律的公理化表述才能获得。虽然，这些概念和基本定律的这种或那种形式，读者早已有所接触。我们并不认为下面所给出的“假设”是“不可约的”或“完备的”（这里用了公理化的术语）。但是，我们希望通过这一章使读者对于量子理论的结构有一个较透彻的理解。对于在数学上和物理上更严格的处理，读者可参阅参考文献中所列出的经典著作。

线性代数提供了阐述量子理论框架的最合适的数学语言。

1—1　物理可观测量

在任何物理理论中，最基本、最重要的量是物理系统的可观测量。这些客观存在的量至少在原则上可以用某种适当的仪器测得。因此，用量子力学的语言来陈述我们的第一条基本假设是：

假设 I　所有的可观测物理量都与厄米算符相对应．可观测物理量的测量值，只能是它所对应算符的各种本征值．

为了理解这一公理的内容，让我们回想经典（宏观）物理学的情形，在那里某系统物理上的可观测量是一些基本变量的函数。在经典物理学中，可观测物理量的测量值就是所对应

函数所取的数值。而对量子理论来说，可观测量与作用在系统的态上的算符相关。〔关于量子力学系统的态，将在后面的假设Ⅲ(a)和Ⅲ(b)中引进并加以说明〕因此，在量子力学中，可观测量与测量过程的关系比经典力学更为密切。这一点将在后面详细讨论。

为了使算符对应于一物理可观测量，它必须是厄米的。正是这个性质才保证了该算符所有的本征值是实数。而按假设Ⅰ的第二部分，如果我们想使算符的本征值与可能的测量值相等，这一点确实是完全必需的。(所有的物理测量得到的都是实数)而且，我们还必须限制于考虑本征态构成完备集合的有界的厄米算符，以后我们假设对应于可观测物理量的算符都满足这些条件*。

假设Ⅰ已概括了量子物理学最显著的特征，即一般可观测物理量不能取任意值。因为可观测值联系着算符的本征值，测量值的某种谱才是允许出现的。事实上，一个算符的本征值谱一般是不连续的，或至少它含有分立部分。因此，假设Ⅰ表达了量子能级这一实验事实。

现在的问题是如何找出可观测物理量所对应的算符。假设Ⅱ(a)和Ⅱ(b)解决了这一问题：

假设Ⅱ(a) 任何经典物理量都必须看作由正则共轭变量对构成的．它对应的量子力学算符，可由经典正则变量代之以对应的量子力学算符来得到．:†

弄清楚什么是正则共轭变量是很重要的。众所周知，经典物理学可以建立在变分原理上。为了简单起见，如果我们只限于讨论力学的质点系‡，将广义坐标（自由度）记作为 q_i ($i=1,2,\cdots,N$)。则我们定义一个拉格朗日函数（Lagrangian）$L=L(q_i,\dot{q}_i,t)$和作用量积分：

$$W=\int_{t_1}^{t_2}L(q_i,\dot{q}_i,t)dt \tag{1-1}$$

以使得对q_i在边界条件当t_1和t_2时刻$\delta q_i=0$下的变分问题

$$\delta_{q_i}W=0 \tag{1-2}$$

得到运动方程（见图1-1a）。大家知道，这个问题的解由欧拉-拉格朗日(Euler-Lagrange)方程

$$\frac{\partial L}{\partial q_i}-\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}=0 \tag{1-3}$$

得出。

现在我们实施更一般的变分。除q_i外，时间t亦改变，包括"路径"的两端点t_1和t_2。

---

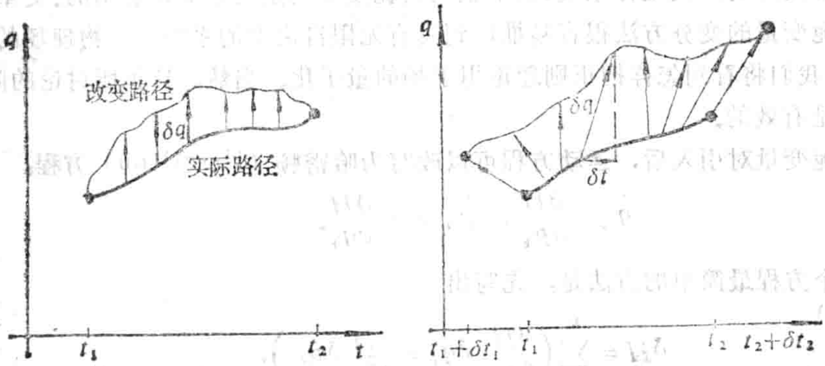
* 另一方面，并不是每一个有界厄米算符都表示可观测物理量，这将在1—4b节中联系超选择原理讨论．

: 若描述的系统需要包括没有经典对应的变量（如自旋和同位旋），当然假设Ⅱ(a)无效．在这种情况下，必须依靠特殊的方法或利用对称性和守恒定律来找到这个算符的表示．在后面的章节里，将举例说明这一点．

† 在一些情况下，将经典正则变量换成对应的算符，从而得到经典可观测量的量子类比时，必须特别注意所得结果的厄米性．例如，pq那样的项就是非厄米的，因为p和q不对易．在这种情况下，首先必须将经典表示式换写成对正则变数是对称的形式．上例中我们必须用$\frac{1}{2}(pq+qp)$来代替pq，在经典理论中，$\frac{1}{2}(pq+qp)$和pq是相等的．这样，当我们将p、q看成算符时，尽管p和q不对易，但我们仍可用对称化的方法构成厄米项．

‡ 关于场，即系统具有无限多自由度的情况，可参见1—7节，特别是1—7e。

换句话说，进行如下变换（见图1-1b）：



(a) (b)

图 1-1

$$q_i(t)\to q_i'(t)=q_i(t)+\delta q_i,\quad t\to t'=t+\delta t,$$

δq_i和δt是任意的和互相独立的，我们定义

$$\delta W\equiv\int_{t_1+\delta t_1}^{t_2+\delta t_2}L(q_i+\delta q_i,\ \dot{q}_i+\delta\dot{q}_i,t+\delta t)d(t+\delta t)-\int_{t_1}^{t_2}L(q_i,\dot{q}_i,t)\,dt.$$

则不难证明，当保留一阶项时，W的广义变分得出：

$$\delta W=\int_{t_1}^{t_2}\sum_{i=}^{N}\left(\frac{\partial L}{\partial q_i}-\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial\dot{q}_i}\right)\delta q_i\,\delta t+\left[\sum_{i=1}^{N}p_i\,\mathscr{S}q_i-H\delta t\right]_{t_1}^{t_2}\tag{1-4}$$

这里我们用记号$\mathscr{S}q_i$表示在端点坐标的全变分，即：

$$\mathscr{S}q_i=q_i'(t+\delta t)-q_i(t)=q_i'(t)-q_i(t)+\dot{q}_i\delta t=\delta q_i+\dot{q}_i\delta t\tag{1-5}$$

为简单起见，我们定义：

$$p_i\equiv\frac{\partial L}{\partial\dot{q}_i}\tag{1-5a}$$

$$H\equiv\sum_{i=1}p_i\dot{q}_i-L\tag{1-5b}$$

公式(1-4)的第一项由于运动方程(1-3)而等于零，因此：

$$\delta W=\left[\sum_{i=1}^{N}p_i\,\mathscr{S}q_i-H\delta t\right]_{t_1}^{t_2}\tag{1-6}$$

现在，利用作用量积分的广义变分来定义正则共轭变量对。我们称（1-6）式中的任意变量变分的系数为它的正则共轭变量。因此对应广义坐标q_i的正则共轭变量是p_i（由1-5a式定义），而与时间t正则共轭的变量是函数$-H$，（由式1-5b定义）这里H称为哈密顿函数。

若力学系统是保守系统，并取$q_i=x_i$，x_i是普通的笛卡儿坐标，则不难得到

$$p_i=m\dot{x}_i,\quad H=\sum_{i=1}^{N}\frac{p_i^2}{2m}+V(x_i)$$

其中m是质点的质量，V是势能。若我们选取适当的角变量为广义坐标，则其正则共轭变量

是角动量的分量.

对于较难处理的广义坐标系统，以上正则共轭变量的定义是非常有用的。更重要的是这种引入正则共轭变量的变分方法很容易推广到具有无限自由度的系统——物理场的系统中去。在1-7节中，我们将看到怎样把正则理论用于场的量子化。当然，这里所讨论的问题，对质点系和场都是有效的。

正则共轭变量对引入后，运动方程可以改写为哈密顿（Hamilton）方程：

$$\dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k}, \quad \dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k}. \tag{1-7}$$

导出这个方程最简单的方法是，先写出

$$\delta H = \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\partial H}{\partial q_i}\delta q_i + \frac{\partial H}{\partial p_i}\delta p_i\right),$$

然后用定义(1-5b)和应用运动方程(1-3)，计算δH的显示表达式，最后令 δp_i和 δq_i 的系数相等即得出哈密顿正则方程.

为了以后的应用，我们现在指出，作用量积分的广义变分δW具有一个有趣的性质。若令

$$F(t) \equiv \sum_{i=1}^{N} p_i \mathscr{S} q_i - H\delta t, \tag{1-8}$$

则可将(1-6)写成

$$\delta W = F(t_2) - F(t_1) \tag{1-9}$$

这里F可看成是无限小变换的生成元，它在作用量积分中产生改变δW。为了说明这一点，首先回忆*具有生成元F的正则变换的情形，任意物理量$\Omega = \Omega(q_k, p_k)$的变化由下式给出：

$$\delta\Omega = [\Omega, F]_p \tag{1-10}$$

这里的泊松（Poisson）括号$[\cdots]_p$定义为

$$[A, B] \equiv \sum_{k=1}^{N}\left(\frac{\partial A}{\partial q_k}\frac{\partial B}{\partial p_k} - \frac{\partial A}{\partial p_k}\frac{\partial B}{\partial q_k}\right) \tag{1-11}$$

现在考虑在此系统中改变q，但t保持不变，即考虑以下变分：

$$q_i \to q_i + \delta q_i, \quad p_i \to p_i, \quad t \to t$$

因为现在$\delta t = 0$，有$\mathscr{S} q = \delta q$，则$F = \sum p_l \delta q_l$，由此可得：

$$[q_i, F]_p = [q_i, \sum_{l=1}^{N} p_l \delta q_l]_p = \delta q_i,$$

$$[p_i, F]_p = [p_i, \sum_{l=1}^{N} p_l \delta q_l]_p = 0,$$

若F是生成元，当然该是这样的结果。再考虑此系统纯粹由于其本身随时间的演化而引起的变分，即$t \to t + \delta t$，但$\mathscr{S} q = \mathscr{S} p = 0$，这时$F = -H\delta t$。同样利用正则方程(1-7)得：

$$[q_i, F]_p = [q_i, -H\delta t]_p = -\frac{\partial H}{\partial p_i}\delta t = -\dot{q}_i \delta t,$$

$$[p_i, F]_p = [p_i, -H\delta t]_p = \frac{\partial H}{\partial q_i}\delta t = -\dot{p}_i \delta t.$$

---

*关于正则变换，读者可参阅H. Goldstein, Classical Mechanics, Addison-Wesley出版有限公司，1959，p 237.

这确实分别是δq_i和δp_i的变化，因为在一般情况下：

$$\bar{\delta} q_i = \delta q_i + \dot{q}_i \delta t,\quad \bar{\delta} p_i = \delta p_i + \dot{p}_i \delta t,$$

这里已令端点固定，$\bar{\delta} p = \bar{\delta} q = 0$，所以得

$$\delta q_i = -\dot{q}_i \delta t,\quad \delta p = -\dot{p}_i \delta t \tag{1-12}$$

由此可得对于所有的变化，无论是因位移还是因随时间发展所引起的变化，F确实是生成元。特别是后一种情形，$F=-H\delta t$是正则生成元。

F的另一个有趣性质是它与守恒定律有关。对系统实行变分，但保持系统不变。这样的变分称为对称变换。这意味着运动方程不改变其形式。如前面所说，作用量积分W的限制性变分导出运动方程，在对称变分下系统保持不变就要求W保持不变，即$\delta W=0$。若F是对称变换的生成元，则由(1-9)式可得$F(t_2)=F(t_1)$。因为t_1和t_2是任意时间，这就意味着

$$\frac{\partial F}{\partial t} = 0 \tag{1-13}$$

即对称变换的生成元是运动常数，它是一个守恒量。在本书第三部分里，将使用这一重要定理（参见5-2节）。

在后面的章节里，我们将使用到前面所讲的概念*，特别是1-4c节、1-5a，b及1-7e节。

现在再回到原主题并提出下述问题，从假设Ⅱ(a)中我们已知道，如何从基本的正则共轭可观测量算符出发，来构造可观测物理量所对应的算符。然而这些基本算符又如何表征呢？回答如下：

假设Ⅱ(b) 对于所有基本的正则共轭算符对，下列海森堡对易关系成立†：

$$[q_i, q_k] = 0 \tag{1-14a}$$

$$[p_i, p_k] = 0 \tag{1-14b}$$

$$[p_i, q_k] = \frac{\hbar}{i}\delta_{ik} \tag{1-14c}$$

这里$[A,B]=AB-BA$表示A和B的对易子。$\hbar \equiv \frac{h}{2\pi} = 1.0544\times 10^{-27}$尔格秒。

假设Ⅱ(b)称为量子化公理。它指出‡，在质点量子力学中，即对于有限自由度的系统，任何算符若与所有满足(1-14)式的q_i和p_i对易，则它一定是恒等算符的倍数，而且每一个算符都可以表示成q_i和p_i的函数。换言之，用变量对q_i和p_i来描述力学系统是完全的，这正是假设Ⅱ(a)已约定了的。而且V. 纽曼（Von Neumann）曾证明，对于质点量子力学，算符代数(1-14)完全确定q_i和p_i算符集合至“幺正等价”。即若算符集合满足$[p_i, q_k]=$

---

* 正则形式的进一步详细讨论，特别是将它量子化，可参见*R. Weiss, Proc. Roy. Soc.* 15.6,192 (1936). *H. de Witt, Proc. Roy. Soc.* 19.5, 365 (1948) 以及*Rroc. Cambridge Phil. Soc.* 4.6, 3.(1950)

†当然，这里所给出的对易关系是认为力学系统具有有限自由度，对于（相对论性）场，这些对易关系有经过推广和修改的类似形式．这里面关键的是在基本正则变量之间存在一种特别的代数关系，即假定存在一种封闭的算符代数．对量子化规则更深刻的探讨参见1—4d节．

‡ *J. Von. Neumann, Math. Ann.* 10.4,507 (1931). 自然这公理只适用于有经典类比的系统，即没有内部自由度（如自旋）的系统。与此相反，算符代数则推广到包括有内部自由度的情形。

$(\hbar/i)\delta_{ik}$等等，而另一集合满足$[p'_i, q'_i] = \left(\frac{\hbar}{i}\right)\delta_{ik}$，则它们必然由一个幺正变换联系起来：

$$q'_i = Uq_iU^{-1},\quad p'_i = Up_iU^{-1}.$$

但要注意这对无限自由度的系统（场）不成立†。

这样，对易关系(1-14)唯一地确定了基本正则算符，从而根据假设Ⅱ(a)亦完全确定其他任何可观测量的算符。对于如何明显地表示出可观测物理量所对应的算符这一问题将在1—2节中讨论。

为了说明假设Ⅱ(a)和Ⅱ(b)的应用，在此讨论一下粒子的角动量。用笛卡儿坐标$q_i(i=x,y,z)$及它们的正则共轭动量p_i所表出的经典角动量分量为：

$$\begin{aligned} L_x &= q_y p_z - q_z p_y, \\ L_y &= q_z p_x - q_x p_z, \\ L_z &= q_x p_y - q_y p_x. \end{aligned} \tag{1-15a}$$

在量子理论中，我们必须认为这里的q_i和p_i均为算符，并满足(1-14)式所给出的对易关系。由此不难得出L的分量所满足的代数：

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= i\hbar L_z, \\ [L_y, L_z] &= i\hbar L_x, \\ [L_z, L_x] &= i\hbar L_y. \end{aligned} \tag{1-15b}$$

这些关系完全规定了L算符的性质，即角动量的量子特征。特别是从基本量子理论中*，大家知道关系式(1-15b)完全确定L的本征值谱。$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$的本征值是

$$L^{2\prime}:\hbar l(l+1), \tag{1-16a}$$

这里l是任意正整数（或半整数）。若l固定，则在由(1-16a)确定的角动量量子态中，L_z分量还可以取本征值：

$$L'_z:-\hbar l, \hbar(-l+1), \cdots, \hbar(l-1), \hbar l. \tag{1-16b}$$

再者，关系式(1-15b)也确定了所熟悉的角动量加法规则。由此我们看到，只需运用假设Ⅱ(a)和Ⅱ(b)，就能确定角动量的一切量子力学特性。

为了简化一些复杂对易子的计算，在此确立一些有用的规则。若q和p是正则共轭变量满足对易关系(1-14)，则由归纳法不难得到：

$$[p^n, q] = n\frac{\hbar}{i}p^{n-1},\quad [q^n, p] = -n\frac{\hbar}{i}q^{n-1} \tag{1-17}$$

进一步，因为任意可观测量$\Omega(q,p)$都可以表示为q和p的幂级数，利用(1-17)得到

$$[\Omega(q,p), q] = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Omega}{\partial p},\quad [\Omega(q,p), p] = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Omega}{\partial q} \tag{1-18}$$

† 最简单的讨论参见：*R. Haag "Canonical Commutation Relations in Field Theory"*《*Lecture in Theoretical Physics*》*Vol* Ⅱ.（1961）

* 例如参见*P. A. M. Dirac*《量子力学原理》第三版§35、36.