●理论物理学专题丛书

量子力学专题分析

（下）

●曾谨言

高等教育出版社

理论物理学专题丛书

量子力学专题分析

（下）

曾谨言

高等教育出版社

(京)112 号

图书在版编目(CIP)数据

量子力学专题分析(下)/曾谨言编.—北京:高等教育出版社,1999
(理论物理学专题丛书)
ISBN 7-04-006873-7

Ⅰ.量…　Ⅱ.曾…　Ⅲ.量子力学　Ⅳ.0413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(98)第 20166 号

出版发行	高等教育出版社		
社　　址	北京市东城区沙滩后街 55 号	**邮政编码**	100009
电　　话	010—64054588	**传　　真**	010—64014048
网　　址	http://www.hep.edu.cn		
经　　销	新华书店北京发行所		
印　　刷	国防工业出版社印刷厂		
开　　本	850×1168　1/32	**版　　次**	1999 年 6 月第 1 版
印　　张	8.25	**印　　次**	1999 年 6 月第 1 次印刷
字　　数	210 000	**定　　价**	8.30 元

凡购买高等教育出版社图书,如有缺页、倒页、脱页等
质量问题,请在所购图书销售部门联系调换。

内容简介

本书内容大致可分为两类：一类涉及量子力学基本概念和原理，而在一般教材中很少谈及；另一类涉及量子力学在各前沿领域中的应用和新进展．本书前三章涉及量子力学中的相位问题，包括 Lewis 相、Berry 相、AA 相、AB 效应、Landau 能级和重力相移等．第 4 章介绍超对称量子力学方法．第 5 章讲述中心力场中的径向 Schrödinger 方程的因式分解和四类升、降算符．第 6 章介绍谐振子相干态．第 7 章讲述密度矩阵．全同粒子体系波函数的置换对称性是否是量子力学一条基本原理，将于第 8 章中讨论．第 9 章讨论一维势阱的透射振幅的极点与束缚能级的关系．

本书可作为高等学校物理类专业本科生、研究生和教师的教学参考书，以弥补一般教材的不足．本书也是科研工作者的一本有用的参考书．

序　言

《量子力学专题分析》(上)于1990年问世以来,受到各界读者欢迎,认为这种类型的教材对于提高目前国内高校的量子力学教学水平很有帮助.很多读者建议,其它几门理论物理课最好也能出版类似的专题分析.据悉,高教出版社也计划组织出版电动力学、统计物理等专题分析.还有一些读者来函,希望本书下册能尽快出版.但迟至今日,才得以脱稿.主要原因是写这类教材,不仅需要实际的教学经验,还要求作者在与该学科有关的前沿领域有较长期的科研经历,否则很难做到合适的选材和中肯的分析.

与上册相似,书中内容大致可分为两类:一类涉及量子力学基本概念和原理的问题,而在一般教材中很少谈及.另一类则涉及量子力学在各前沿领域中的应用和新进展.这些内容对于基础理论课教材的现代化和培养跨世纪人材是很必要的.

本书前三章内容都涉及概率波幅中的相位.Dirac曾经指出,相位是导致原子世界中一切干涉现象的根源,其涵义至深,且隐晦难解.应该说,一般教材中对相位的阐述是相当肤浅的.例如,关于相位不定性(phase uncertainty)问题以及含时力学量的本征态的相位不定性与自然界中量子态(包括相位)随时间的演化规律的关系,并不是很多人都很清楚.关于相位相干性消失(decoherence)问题的研究,仍处于初期阶段.这是介观物理中特别关注的问题,也涉及量子力学与经典力学的关系这个根本问题.电磁场矢势 $\boldsymbol{A}$ 和标势 φ,在经典电动力学中只是作为计算电磁场强度的方便的数学工具而引进的.带电粒子受力(Lorentz力)只依赖于电磁场强度,所以人们认为 $\boldsymbol{A}$ 和 φ 本身并无什么物理实在性.在量子力学中则不然.它在基本方程(Schrödinger方程)和波函数的相位中都不可

避免地出现矢势和标势.在 Feynman 路径积分理论中,传播子的相位也不可避免地出现 $\boldsymbol{A}$ 和 φ. 矢势 $\boldsymbol{A}$ 的物理实在性已通过它对相移的影响所产生的干涉现象得以证实(AB 效应).重力势所导致的相移,也已在干涉实验中被证实.事实上,近年来量子力学在各前沿领域中的新进展,大多涉及相位问题.

第 4、5 两章涉及超对称量子力学方法.但与量子场论中讲述超对称性的侧重点不同,第 4 章中只是把它作为非相对论量子力学中求解一维体系的能量本征值问题的方法来介绍,实际上是 Schrödinger 处理谐振子的因式分解法的推广.第 5 章系统介绍中心力场中径向 Schrödinger 方程的因式分解的新进展.分析表明,只当中心力场为各向同性谐振子势和 Coulomb 势时,径向 Schrödinger 方程才能进行因式分解,并导出能量和角动量的升、降算符.这两种中心势都具有除了几何对称性(空间旋转)之外的动力学对称性,这就导致能级进一步简并,因而可以引进四类升、降算符.值得注意,在经典力学中有一条著名的定理——Bertrand 定理:只当中心力遵守平方反比律或 Hooke 定律时,粒子束缚运动轨道才是闭合的.分析表明,径向 Schrödinger 方程的因式分解与经典粒子轨道的闭合性有密切的关系.

第 6 章介绍相干态,它是一种特殊的非定态.当初 Schrödinger 引进谐振子相干态,原本是为了探讨量子力学与经典力学的关系.20 世纪 60 年代后,相干态在量子光学中得到广泛应用和发展.在这里,相干态作为光子数不确定的一种特殊的态,有极大方便之处.近年来在原子和分子的 Rydberg 态研究中也很关注相干态问题.

第 7 章介绍密度矩阵.这里涉及完备测量和不完备测量概念,即纯态和混合态问题.这有助于更深入理解量子态概念,也有助于澄清量子力学中长期争论的一些问题,例如 EPR 佯谬和 Bell 不等式.

全同粒子体系的波函数的置换对称性,是不是量子力学的一

条基本原理？有人认为是，多数人认为它只是微观粒子的一种内禀对称性(全同性)所得出的一个推论，但论证并不很令人满意．第8章将分析这个问题，并着重指出全同性是一种可观测量，并与态的量子化密切相关．

通常量子力学教材中，散射问题和束缚态能量本征值问题往往分开讨论．实则两者密切相关．束缚能级的位置总是散射振幅在正虚 k 轴上的极点所在．第9章以许多常见的一维势阱为例，分析其透射振幅的极点，并与束缚定态能级的计算比较．这是初学者极有益的练习，有助于深入理解束缚定态．

* * *

相对论和量子力学是20世纪物理学两个最伟大的成就．就对人类近代物质文明的影响来讲，后者甚至超过前者．几乎没有哪一门近代物理学分支和与近代物理相关的边缘学科能离开量子力学这个理论基础．可以毫不夸张地说，没有量子力学的建立，就没有人类的近代物质文明．量子论的提出，快一百年了．量子力学体系的建立已历70余载．应该说它是一门比较成熟的学科．但也应该认识到，它还是一门在发展中的学科．即使在现今的理论框架下，也还有许多问题有待探明．何况量子力学在各前沿领域中的应用还正方兴未艾，有待开发的东西还层出不穷．本书所讨论的一些问题，只不过是其中很少的一部分．如果本书能引发青年学生、教师和科研工作者多去思考一下所碰到的量子力学问题，也许对发展这门学科有所裨益．物质世界是不可穷尽的．人们对它的认识也是没有止境的．

曾谨言
1996年8月于北京大学

责任编辑　李　昱
封面设计　张　楠
责任绘图　吴文信
版式设计　周顺银
责任校对　冯树秀　姜国平
责任印制　杨　明

目　　录

1 量子力学中的相位

杨振宁先生在纪念 Schrödinger 诞辰100周年的文章[1]中，一开头就引用了 Dirac 的一段重要的话：[2]

"问题在于，不对易性是否真是量子力学新概念的主体？我过去一直认为答案是肯定的．但最近我开始怀疑这一点．我想，从物理观点来说，不对易性可能并非唯一重要的观念，或许还存在某些更深层的观念，而且量子力学带来的一些通常的概念，或许还需要作某些更深刻的改变．"Dirac 进一步讨论了这个问题，并得出结

---

〔1〕 Yang C N. *Square root of minus one, Complex phases and Erwin Schrödinger*. In: Kilmister C W ed., Schrödinger Centenary Celebration of a Polymath. New York. Cambridge Univ. Press, 1987. 53～84. 中译文：唐贤民译，宁平治校．自然杂志，11(1)．这里给出的译文即根据此译文，但有个别修辞上的小改动．

〔2〕 Dirac P A M. Fields & Quanta, 1972(3): 139. 有关原文，如下：

"The question arises whether the noncommutation is really the main new idea of quantum mechanics. Previously I always thought it was but recently I have begun to doubt it and to think that maybe from the physical point of view, the noncommutation is not the only important idea and there is perhaps some deeper idea, some deeper change in our ordinary concepts which is brought about by quantum mechanics."

"So if one asks what is the main feature of quantum mechanics. I feel inclined now to say that it is not noncommutative algebra. It is the existence of probability amplitudes which underlie all atomic processes. Now a probability amplitude is related to experiment but only partially. The square of its modulus is something that we can observe. That is the probability which the experimental people get. But besides that there is a phase. a number of modulus unity which can modify without affecting the square of the modulus. And this phase is all important because it is the source of all interference phenomena but its physical significance is obscure. So the real genius of Heisenberg and Schrödinger, you might say, was to discover the existence of probability amplitudes containing this phase quantity which is very well hidden in nature and it is because it was so well hidden that people hadn't thought of quantum mechanics much earlier."

论:“所以,如果有人问,量子力学的主要特征是什么? 现在我倾向于说,量子力学的主要特征并不是不对易代数,而是概率幅的存在.后者是全部原子过程的基础.概率幅是与实验相联系的,但这只是问题的一部分.概率幅的模方是我们能观测的某种量,即实验者所测量到的概率,但除此以外还有相位,它是模为 1 的数,它的变化不影响模方.但这个相位是极其重要的,因为它是所有干涉现象的根源,而其物理含义是极其隐晦难解的.所以可以说,Heisenberg 与 Schrödinger 的真正天才在于他们发现了包含相位这个物理量的概率幅的存在.相位这个物理量很巧妙地隐藏在大自然中,正是由于它隐藏得如此巧妙,人们才未能更早建立起量子力学”.

杨振宁先生还提到,人们对于 Dirac 的见解也许有不同的看法,即究竟是引入不对易代数重要,还是引入包含相位的概率幅重要.但无论如何,对于物理学家描述自然来讲,两者都很重要则是毫无疑义的.

在通常量子力学教材中,对于引进算符和不对易代数来描述可观测量,都给予了足够的篇幅来详细阐述,而对于概率幅的相位,虽然也都提到,但从教学经验和效果来讲,初学者对于相位和态叠加原理的理解,总是不如对 Schrödinger 方程和算符运算那样具体,而且往往还有不同程度的误解.事实上,从 20 世纪 50 年代末以来,量子力学理论的一些重要进展,大多涉及相位问题.由此可见 Dirac 讲这一段话的深刻含义.很可能有些问题,人们对它们的理解还不十分清楚.下面就我们了解到的几个问题提出来和大家讨论,也许有助于更深入地理解这些问题.

1.1 含时不变量与 Lewis 相[3]

为了对比,先讨论 Hamilton 量不含时情况($\partial\hat{H}/\partial t=0$).此时,

[3] Lewis H R, Riesenfeld W B. J. Math. Phys., 1969, **10**: 1458.

$\hat{H}$ 本身就是守恒量(能量).能量本征值不随时间变化($\mathrm{d}E/\mathrm{d}t=0$).体系存在严格的定态.考虑体系的某力学量 $\hat{F}=\hat{F}^{\dagger}$,它随时间的变化遵守下列方程

$$\frac{\mathrm{d}\hat{F}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{F},\hat{H}]+\frac{\partial}{\partial t}\hat{F}. \tag{1}$$

如

$$\frac{\mathrm{d}\hat{F}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{F},\hat{H}]+\frac{\partial}{\partial t}\hat{F}=0, \tag{2}$$

则称 $\hat{F}$ 为体系的守恒量.通常人们感兴趣的守恒量是不含时的,即$\partial\hat{F}/\partial t=0$.此时,只要

$$[\hat{F},\hat{H}]=0, \tag{3}$$

则 $\hat{F}$ 为守恒量.这种不含时守恒量的特点是它与 $\hat{H}$ 对易,因而可以求它与 $\hat{H}$ 的共同本征态.

设$(\hat{H},\hat{F},\cdots)$构成体系的守恒量完全集,共同本征态记为$|n\nu\rangle$,ν 标记简并态,

$$\hat{H}|n\nu\rangle=E_n|n\nu\rangle. \tag{4}$$

体系状态随时间的演化$|\psi(t)\rangle$遵守 Schrödinger 方程,

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle=\hat{H}|\psi(t)\rangle. \tag{5}$$

设体系初态为

$$|\psi(0)\rangle=\sum_{n\nu}C_{n\nu}|n\nu\rangle,\ C_{n\nu}=\langle n\nu|\psi(0)\rangle, \tag{6}$$

则方程(5)的一般解可表示为

$$\begin{aligned}|\psi(t)\rangle&=\sum_{n\nu}C_{n\nu}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt/\hbar}|n\nu\rangle\\&=\sum_{n\nu}C_{n\nu}|n\nu,t\rangle,\end{aligned} \tag{7}$$

式中

$$|n\nu,t\rangle=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt/\hbar}|n\nu\rangle \tag{8}$$

是体系的一个定态波函数.注意,(7)式中 $C_{n\nu}$不依赖于 t,由初态决定(见(6)式).

在 $\hat{H}$ 不含时情况($\partial\hat{H}/\partial t=0$),对于含时不变量($\mathrm{d}\hat{F}/\mathrm{d}t=0$,但 $\partial\hat{F}/\partial t\neq0$),有$[\hat{F},\hat{H}]\neq0$. 能量本征态不可能为 $\hat{F}$ 的本征态,反之亦然. 所以含时守恒量及其本征态并无多大意义.

以下讨论 $\hat{H}(t)$含时的体系($\partial\hat{H}/\partial t\neq0$). 凡满足

$$\frac{\mathrm{d}\hat{I}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{I},\hat{H}]+\frac{\partial\hat{I}}{\partial t}=0,\hat{I}^{\dagger}=\hat{I}, \tag{9}$$

的力学量 $\hat{I}(t)$($\partial\hat{I}/\partial t\neq0$),称为含时不变量. 显然,$[\hat{I}(t),\hat{H}(t)]\neq0$. 它们不能有共同本征函数集. 但不妨假定体系存在包含 $\hat{I}(t)$ 在内的一组守恒量完全集(其中没有 $\hat{H}(t)$),其共同本征态记为 $|\lambda\kappa,t\rangle$,

$$\hat{I}(t)|\lambda\kappa,t\rangle=\lambda|\lambda\kappa,t\rangle, \tag{10}$$

κ 标记简并态. $|\lambda\kappa,t\rangle$满足正交归一化条件

$$\langle\lambda'\kappa',t|\lambda\kappa,t\rangle=\delta_{\lambda'\lambda}\delta_{\kappa'\kappa}. \tag{11}$$

容易证明:

(a) 本征值 λ 不随时间变化, $\mathrm{d}\lambda/\mathrm{d}t=0$.

(b) 一般说来,$|\lambda\kappa,t\rangle$不满足含时 Schrödinger 方程. 但$|\lambda\kappa,t\rangle$具有一个含时相位不定性. 可以经过一个含时相位变换后,使之满足含时 Schrödinger 方程.

证明如下:

(a) (10)式对 t 微商,得

$$\frac{\partial\hat{I}}{\partial t}|\lambda\kappa,t\rangle+\hat{I}\frac{\partial}{\partial t}|\lambda\kappa,t\rangle=\frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}t}|\lambda\kappa,t\rangle+\lambda\frac{\partial}{\partial t}|\lambda\kappa,t\rangle. \tag{12}$$

左乘$\langle\lambda\kappa,t|$,利用(10)式并注意 $\hat{I}^{\dagger}=\hat{I}$,$\lambda$ 为实数,得

$$\frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}t}=\langle\lambda\kappa,t|\frac{\partial\hat{I}}{\partial t}|\lambda\kappa,t\rangle. \tag{13}$$

其次,利用守恒量条件(9)式对$|\lambda\kappa,t\rangle$运算,得

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\hat{I}}{\partial t}|\lambda\kappa,t\rangle+\hat{I}\hat{H}|\lambda\kappa,t\rangle-\lambda\hat{H}|\lambda\kappa,t\rangle=0. \tag{14}$$

左乘$\langle\lambda'\kappa',t|$,得

$$i\hbar\langle\lambda'\kappa',t|\frac{\partial\hat{I}}{\partial t}|\lambda\kappa,t\rangle+(\lambda'-\lambda)\langle\lambda'\kappa',t|\hat{H}|\lambda\kappa,t\rangle=0. \quad (15)$$

对于 $\lambda'=\lambda$($\kappa'=\kappa$ 或$\kappa'\neq\kappa$,均可),得

$$\langle\lambda\kappa',t|\frac{\partial\hat{I}}{\partial t}|\lambda\kappa,t\rangle=0. \quad (16)$$

代入(13)式,得 $\mathrm{d}\lambda/\mathrm{d}t=0$.

(b) 考虑到 $\mathrm{d}\lambda/\mathrm{d}t=0$,(12)式化为

$$(\lambda-\hat{I})\frac{\partial}{\partial t}|\lambda\kappa,t\rangle=\frac{\partial\hat{I}}{\partial t}|\lambda\kappa,t\rangle.$$

左乘$\langle\lambda'\kappa',t|$,利用(15)式,得

$$i\hbar(\lambda-\lambda')\langle\lambda'\kappa',t|\frac{\partial}{\partial t}|\lambda\kappa,t\rangle=(\lambda-\lambda')\langle\lambda'\kappa',t|\hat{H}|\lambda\kappa,t\rangle. \quad (17)$$

因此,当 $\lambda'\neq\lambda$ 时($\kappa'=\kappa$ 或$\kappa'\neq\kappa$,均可),得

$$i\hbar\langle\lambda'\kappa',t|\frac{\partial}{\partial t}|\lambda\kappa,t\rangle=\langle\lambda'\kappa',t|\hat{H}|\lambda\kappa,t\rangle. \quad (18)$$

但注意,$\lambda'=\lambda$ 时,上式不一定成立,否则,根据$|\lambda\kappa,t\rangle$的完备性,就意味着$|\lambda\kappa,t\rangle$满足 Schrödinger 方程.所以,一般说来,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\lambda\kappa,t\rangle=\hat{H}|\lambda\kappa,t\rangle$$

并不成立.因此,即使利用$|\lambda\kappa,t\rangle$的完备性来展开体系任何一个态$|\psi(t)\rangle$,

$$|\psi(t)\rangle=\sum_{\lambda\kappa}a_{\lambda\kappa}(t)|\lambda\kappa,t\rangle, \quad (19)$$

展开系数 $a_{\lambda\kappa}(t)$必然依赖于 t,这与(7)式不同,因而对求解$|\psi(t)\rangle$并无优越性.

但$|\lambda\kappa,t\rangle$作为$\hat{I}(t)$的本征态,还有含时相位不定性.假设$\hat{I}(t)$不含有对 t 微商的算符,则$|\lambda\kappa,t\rangle$可以乘上一个含时相因子,即作如下含时相位变换,

$$|\lambda\kappa,t\rangle\rightarrow|\widetilde{\lambda\kappa},t\rangle=e^{i\alpha_{\lambda\kappa}(t)}|\lambda\kappa,t\rangle, \quad (20)$$

$|\widetilde{\lambda\kappa},t\rangle$与$|\lambda\kappa,t\rangle$一样,仍为$\hat{I}(t)$的本征态(本征值不变),正交归一性也保持不变.但此时,我们可以要求$|\widetilde{\lambda\kappa},t\rangle$满足 Schrödinger 方程,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\widetilde{\lambda\kappa},t\rangle=\hat{H}(t)|\widetilde{\lambda\kappa},t\rangle. \tag{21}$$

用(20)式代入,得

$$-\hbar\dot{\alpha}_{\lambda\kappa}|\lambda\kappa,t\rangle+i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\lambda\kappa,t\rangle=\hat{H}(t)|\lambda\kappa,t\rangle,$$

左乘$\langle\lambda\kappa',t|$,得

$$\hbar\dot{\alpha}_{\lambda\kappa}\delta_{\kappa\kappa'}=\langle\lambda\kappa',t|i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\hat{H}|\lambda\kappa,t\rangle. \tag{22}$$

为满足此式,要求$\kappa'\neq\kappa$时上式右边为0,即要求在λ给定的子空间中,可以把$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\hat{H}\right)$对角化,而这是可以做到的,因为$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\hat{H}\right)$为厄米算符.也就是说,总可以找到$\alpha_{\lambda\kappa}(t)$,使之满足

$$\hbar\dot{\alpha}_{\lambda\kappa}=\langle\lambda\kappa,t|i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\hat{H}(t)|\lambda\kappa,t\rangle. \tag{23}$$

对t积分,得

$$\alpha_{\lambda\kappa}(t)-\alpha_{\lambda\kappa}(0)=\int_0^t dt'\langle\lambda\kappa,t'|i\frac{\partial}{\partial t'}-\frac{\hat{H}(t')}{\hbar}|\lambda\kappa,t'\rangle. \tag{24}$$

$\alpha_{\lambda\kappa}(t)$称为 Lewis 相.

考虑到$|\widetilde{\lambda\kappa},t\rangle=e^{i\alpha_{\lambda\kappa}(t)}|\lambda\kappa,t\rangle$满足 Schrödinger 方程,并且是完备的,所以满足 Schrödinger 方程的任何态$|\psi(t)\rangle$总可以用它们来展开,展开系数不再依赖于时间,

$$|\psi(t)\rangle=\sum_{\lambda\kappa}C_{\lambda\kappa}e^{i\alpha_{\lambda\kappa}(t)}|\lambda\kappa,t\rangle, \tag{25}$$

$$C_{\lambda\kappa}=e^{-i\alpha_{\lambda\kappa}(0)}\langle\lambda\kappa,0|\psi(0)\rangle,$$

式中$\alpha_{\lambda\kappa}(t)$由(24)式给出.