高等学校教材

量子电子学

刘树杞　卢亚雄
张世昌　王昌标　编

天津科学技术出版社

责任编辑：宋淑萍

高等学校教材

量子电子学

刘树杞　卢亚雄
张世昌　王昌标　编

天津科学技术出版社
电子工业出版社　出版

天津市赤峰道130号

天津市武清县永兴印刷厂印刷

新华书店天津发行所发行

开本787×1092毫米　1/16　印张19　字数461 000

1990年10月第1版

1990年10月第1次印刷

印数：1－1 030

ISBN 7-5308-0838-9/G·211　定价：3.85元

出 版 说 明

根据国务院关于高等学校教材工作分工的规定，我部承担了全国高等学校、中等专业学校工科电子类专业教材的编审、出版的组织工作。由于各有关院校及参与编审工作的广大教师共同努力，有关出版社的紧密配合，从1978年至1985年，已编审、出版了两轮教材，正在陆续供给高等学校和中等专业学校教学使用。

为了使工科电子类专业教材能更好地适应“三个面向”的需要，贯彻“努力提高教材质量，逐步实现教材多样化，增加不同品种、不同层次、不同学术观点、不同风格、不同改革试验的教材”的精神，我部所属的七个高等学校教材编审委员会和两个中等专业学校教材编审委员会，在总结前两轮教材工作的基础上，结合教育形势的发展和教学改革的需要，制订了1986～1990年的“七五”（第三轮）教材编审出版规划。列入规划的教材、实验教材、教学参考书等有近400种选题。这批教材的评选推荐和编写工作由各编委会直接组织进行。

这批教材的书稿，是从通过教学实践、师生反映较好的讲义中经院校推荐，由编审委员会（小组）评选择优产生出来的。广大编审者、各编审委员会和有关出版社为保证教材的出版和提高教材的质量，作出了不懈的努力。

限于水平和经验，这批教材的编审、出版工作还会有缺点和不足之处，希望使用教材的单位，广大教师和同学积极提出批评建议，共同为不断提高工科电子类专业教材的质量而努力。

电子工业部教材办公室

目　　录

第一章　量子力学的基本理论

§1-1　经典力学中的哈密顿量

经典力学的原理可以用不同的数学形式表示，其中最为简单而最为人们所熟悉的形式建立在牛顿定理基础之上。为了深入了解量子力学理论与经典力学理论之间的联系，我们现在将牛顿的经典力学体系过渡到具有广泛意义的用哈密顿量（Hamiltonian）描述的体系。

在经典力学中，一个由N个粒子组成的物理系综，是用每个粒子在某一时刻t的位置坐标$\vec{r}_i$（$i=1,2,\cdots N$）及速度$\dot{\vec{r}}_i$，表征其状态的。对于质量为m_i的粒子，根据牛顿第二定律有：

$$m_i\ddot{\vec{r}}_i=\vec{F}_i \tag{1-1-1}$$

其中$\ddot{\vec{r}}_i$是该粒子的加速度，$\vec{F}_i$是该粒子所受作用力之矢量和。作用力应该包括系综内其它粒子对其施加的内部作用力和系综外部的作用力。内部作用力中，万有引力、电场力等满足作用力与反作用力原理：作用力与反作用力大小相等方向相反。如果所有的作用力都能表示为位势梯度的负值，则：

$$m_i\ddot{\vec{r}}_i=-\nabla_iV(\vec{r}_i) \tag{1-1-2}$$

这里$\nabla_iV(\vec{r}_i)$表示位势$V(\vec{r}_i)$的梯度。在直角坐标系中，上式写为：

$$\begin{cases} m_i\ddot{x}_i=-\partial V(\vec{r}_i)/\partial x \\ m_i\ddot{y}_i=-\partial V(\vec{r}_i)/\partial y \\ m_i\ddot{z}_i=-\partial V(\vec{r}_i)/\partial z \end{cases} \tag{1-1-3}$$

若在初始时刻t_0系综内各粒子的状态是确定的，其所受到的位势作用$V(\vec{r}_i)$也是确定的，那么，根据运动方程式（1-1-2），在t_0之后的任意时刻t，系综的状态可以预言，而且也是唯一确定的。

定义拉格朗日函数（Lagrangian）$L(\vec{r}_i,\ \dot{\vec{r}}_i,\ t)$为：

$$L(\vec{r}_i,\ \dot{\vec{r}}_i,\ t)=T-V=\frac{1}{2}\sum_i m_i\dot{\vec{r}}_i^2-V(\vec{r}_i) \tag{1-1-4}$$

其中T为系综的动能。根据式（1-1-2），立即有拉格朗日方程成立：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial\dot{\vec{r}}_i}-\frac{\partial L}{\partial\vec{r}_i}=0 \tag{1-1-5}$$

上式表明，拉格朗日方程的形式与坐标$\vec{r}_i$的选择无关，因此能够将该方程所描述的对象，扩展到较粒子系综更一般的物理系综去。为此，用广义坐标q_i及广义速度$\dot{q}_i$（$i=1,2,\cdots N$）取代$\vec{r}_i$及$\dot{\vec{r}}_i$，得到广义系综的拉格朗日函数$L(q_i,\ \dot{q}_i,\ t)$及拉格朗日方程：

$$L(q_i,\ \dot{q}_i,\ t)=\frac{1}{2}m_i\dot{q}_i^2-V(q_i) \tag{1-1-6}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L(q_i,\dot{q}_i,t)}{\partial\dot{q}_i}-\frac{\partial L(q_i,\dot{q}_i,t)}{\partial q_i}=0 \tag{1-1-7}$$

对于广义系综，拉格朗日函数是广义坐标q_i、广义速度$\dot{q}_i$及时间t的函数。将式（1-1-6）代入式（1-1-7），得到：

$$m_i\ddot{q}_i=\frac{-\partial V(q_i)}{\partial q_i}+\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial V(q_i)}{\partial \dot{q}_i} \tag{1-1-8}$$

上式规定了广义坐标q_i与广义势$V(q_i)$之间应该满足的关系。另外，式（1-1-7）中的时间微分可以写为：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial}{\partial t}+\sum_i^N\dot{q}_i\frac{\partial}{\partial q_i}+\sum_i^N\ddot{q}_i\frac{\partial}{\partial \dot{q}_i} \tag{1-1-9}$$

这样，一个N个粒子组成的系综，可以在N维广义坐标系中，用含有（$2N+1$）个变量（q_i，$\dot{q}_i$，t）的拉格朗日函数描述，其运动方程是广义坐标q_i的N个二阶微分方程。下面，将引入经典哈密顿量，将运动方程变换为($2N+1$)个一阶微分方程。

经典的哈密顿量或者哈密顿函数H的定义为：

$$H=\sum_i^N p_i\dot{q}_i-L(q_i,\dot{q}_i,t) \tag{1-1-10}$$

其中广义动量p_i为：

$$p_i=\partial L\ (q_i,\dot{q}_i,t)\ /\partial\dot{q}_i \tag{1-1-11}$$

若将式（1-1-6）中的广义坐标q_i具体为粒子的三维坐标x_i，y_i，z_i，可以看出，上式所定义的p_i就是第i个粒子的动量。因此，哈密顿量H是广义坐标q_i、广义动量p_i以及时间t的函数。它的时间微分为：

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t}=\sum_i^N\frac{\partial H}{\partial q_i}\frac{\mathrm{d}q_i}{\mathrm{d}t}+\sum_i^N\frac{\partial H}{\partial q_i}\cdot\frac{\mathrm{d}q_i}{\mathrm{d}t}+\frac{\partial H}{\partial t} \tag{1-1-12}$$

由式（1-1-10）及（1-1-11），可以得到：

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t}=\sum_i^N\dot{q}_i\frac{\mathrm{d}p_i}{\mathrm{d}t}-\sum_i^N\frac{\partial L}{\partial q_i}\frac{\mathrm{d}q_i}{\mathrm{d}t}-\frac{\partial L}{\partial t} \tag{1-1-13}$$

比较上两式后得出：

$$\begin{cases}\partial H/\partial q_i=-\partial L/\partial q_i\\ \partial H/\partial p_i=\dot{q}_i\\ \partial H/\partial t=-\partial L/\partial t\end{cases} \tag{1-1-14}$$

使用（1-1-14）的第一式与式（1-1-11），拉格朗日方程写为：

$$\frac{\mathrm{d}p_i}{\mathrm{d}t}=-\partial H/\partial q_i \tag{1-1-15}$$

通常将下列方程组

$$\begin{cases}\mathrm{d}q_i/\mathrm{d}t=\partial H/\partial p_i\\ \mathrm{d}p_i/\mathrm{d}t=-\partial H/\partial q_i\end{cases} \tag{1-1-16}$$

称为哈密顿-雅可比方程。满足这种形式方程组的一对变量，例如q_i和p_i，称为共轭变量。这样，系综的运动方程已变为式（1-1-16）所表示的$2N$个一阶微分方程。

当讨论的系综就是N个粒子组成的系综时，p_i就是粒子的动量：

$$\vec{p}_i=m_i\dot{\vec{r}}_i \tag{1-1-17}$$

按照拉格朗日函数及哈密顿量的定义，得到：

$$H=\sum_{i}^{N}\vec{p}_i^{\,2}/2m_i+V(\vec{r}_i) \tag{1-1-18}$$

因此，哈密顿量等于系综的动能与势能之和，它是系综的总能量。方程式（1-1-16）变为

$$\begin{cases} \mathrm{d}\vec{r}_i/\mathrm{d}t=\vec{p}_i/m_i \\ \mathrm{d}\vec{p}_i/\mathrm{d}t=-\nabla_i V(\vec{r}_i) \end{cases} \tag{1-1-19}$$

该方程组与牛顿方程式（1-1-2）完全一致。

现在考虑经典力学中某一物理量$\phi(q_i, p_i, t)$随时间t的变化率。对ϕ求导：

$$\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}t}=\sum_{i}^{N}\left\{\frac{\partial\phi}{\partial q_i}\frac{\mathrm{d}q_i}{\mathrm{d}t}+\frac{\partial\phi}{\partial p_i}\cdot\frac{\mathrm{d}\vec{p}_i}{\mathrm{d}t}\right\}+\frac{\partial\phi}{\partial t}$$

根据式（1-1-16），有

$$\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial\phi}{\partial t}+\sum_{i}^{N}\left\{\frac{\partial\phi}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i}-\frac{\partial\phi}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}\right\} \tag{1-1-20}$$

定义泊松括号$\{\phi, H\}$为：

$$\{\phi, H\}=\sum_{i}^{N}\left[\frac{\partial\phi}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i}-\frac{\partial\phi}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}\right] \tag{1-1-21}$$

方程式（1-1-20）写为：

$$\mathrm{d}\phi/\mathrm{d}t=\partial\phi/\partial t+\{\phi, H\} \tag{1-1-22}$$

显然，泊松括号对所有满足式（1-1-16）的共轭变量都成立。若上式中的物理量ϕ，就是哈密顿量H，不难得到

$$\mathrm{d}H/\mathrm{d}t=\partial H/\partial t$$

对于任何孤立的经典力学系综，当无外界作用时，总能量H不是时间t的显函数，所以

$$\mathrm{d}H/\mathrm{d}t=0；H=\text{常数} \tag{1-1-23}$$

这时的经典力学系统，是能量守恒的系统。

在式（1-1-21）中，若令$\phi=q_i$，$H=p_j$，我们得到另一个有意义的结果：

$$\{q_i, p_j\}=\delta_{ij} \tag{1-1-24}$$

δ_{ij}是δ函数，它等于：

$$\delta_{ij}=\begin{cases} 1 & (i=j) \\ 0 & (i\neq j) \end{cases} \tag{1-1-25}$$

在下面的讨论中，可以从这些关系式的量子化，得到量子力学中的互易关系。

使用哈密顿量的主要优点在于，所讨论的对象不再限于简单的粒子系综，而可以研究更复杂的对象。下面以质量为m，电荷为e的带电粒子在电磁场中的运动为例，说明这一问题。为此，先讨论电磁场的矢量位表示。

电磁场可以用电场强度$\vec{E}$（$\vec{r}$，t）以及磁感应强度$\vec{B}$（$\vec{r}$，t）描述，它们满足麦克斯韦方程组，在真空的情况下有：

$$\begin{cases} \nabla\times\vec{E}=-\partial\vec{B}/\partial t \\ \nabla\times\vec{B}=\mu_0\vec{j}+\varepsilon_0\mu_0\partial\vec{E}/\partial t \\ \nabla\cdot\vec{E}=\rho/\varepsilon_0 \\ \nabla\cdot\vec{B}=0 \end{cases} \tag{1-1-26}$$

式中，$\rho(\vec{r},t)$ 和$\vec{j}(\vec{r},t)$ 是电荷密度及电流密度；ε_0和μ_0是真空中的介电常数和磁导率。由于磁场的散度为零，因此它是有旋的，可以引入矢量位$\vec{A}(\vec{r},t)$，使

$$\vec{B}=\nabla\times\vec{A}(\vec{r},t)$$

这样，（1-1-26）方程组的第一式变为：

$$\nabla\times[\vec{E}+\partial\vec{A}/\partial t]=0$$

上式方括号内的物理量必然是梯度场，因而可以引入标量位$U(\vec{r},t)$，使

$$\vec{E}+\partial\vec{A}/\partial t=-\nabla U(\vec{r},t)$$

由此定义的一对矢量位$\vec{A}(\vec{r},t)$和标量位$U(\vec{r},t)$，称为电磁场的规范（gauge）。在该组规范下，电场与磁场表示为：

$$\begin{cases}\vec{E}=-\partial\vec{A}(\vec{r},t)/\partial t-\nabla U(\vec{r},t)\\ \vec{B}=\nabla\times\vec{A}(\vec{r},t)\end{cases}\tag{1-1-27}$$

但是，电磁场与规范并不是一一对应的关系，也就是说，一个确定的电磁场，对应着无穷多个满足式（1-1-27）的规范。若（$\vec{A}'$，U'）与（$\vec{A}$，U）是该电磁场的两个规范，它们之间满足以下的变换关系：

$$\begin{cases}\vec{A}'(\vec{r},t)=\vec{A}(\vec{r},t)+\nabla x(\vec{r},t)\\ U'(\vec{r},t)=U(\vec{r},t)-\partial x(\vec{r},t)/\partial t\end{cases}\tag{1-1-28}$$

其中$x(\vec{r},t)$是一个任意的标量函数。根据上式，有：

$$\begin{cases}\nabla\times\vec{A}'(\vec{r},t)=\nabla\times\vec{A}(\vec{r},t)\\ -\nabla U'(\vec{r},t)-\partial\vec{A}'(\vec{r},t)/\partial t=-\nabla U(\vec{r},t)-\partial\vec{A}(\vec{r},t)/\partial t\end{cases}$$

因此，满足式（1-1-28）的规范都对应着相同的电磁场。正因为这一点，我们可以任意选择一组规范以表示电磁场。

在式（1-1-27）所描述的电磁场作用下，一个带电粒子将受到场的洛仑兹力作用，作用力$\vec{F}$等于：

$$\vec{F}=e[\vec{E}+\dot{\vec{r}}\times\vec{B}]\tag{1-1-29}$$

其中$\dot{\vec{r}}$是粒子的运动速度。根据式（1-1-2），粒子的运动方程为：

$$m\ddot{\vec{r}}=e[\vec{E}(\vec{r},t)+\dot{\vec{r}}(\vec{r},t)\times\vec{B}(\vec{r},t)]\tag{1-1-30}$$

使用矢量位和标量位表示电磁场，则：

$$m\ddot{\vec{r}}=e\left[-\nabla U-\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}+\dot{\vec{r}}\times(\nabla\times\vec{A})\right]\tag{1-1-31}$$

实际上，上述带电粒子的运动方程完全可以从拉格朗日函数与哈密顿量求出。考虑到

$$\mathrm{d}\vec{A}/\mathrm{d}t=\partial\vec{A}/\partial t+(\dot{\vec{r}}\cdot\nabla)\vec{A}\tag{1-1-32}$$

根据矢量代数

$$\dot{\vec{r}}\times(\nabla\times\vec{A})=\nabla(\dot{\vec{r}}\cdot\vec{A})-(\dot{\vec{r}}\cdot\nabla)\vec{A}$$

式（1-1-31）可以写为：

$$m\ddot{\vec{r}}=e[-\nabla(U-\dot{\vec{r}}\cdot\vec{A})-\mathrm{d}\vec{A}/\mathrm{d}t]$$

令V为带电粒子系统的广义势：

$$V = eU - e\,\dot{\vec{r}}\cdot\vec{A} \tag{1-1-33}$$

因而

$$\vec{A} = -\partial V/\partial \dot{\vec{r}} \tag{1-1-34}$$

使用上式，式（1-1-31）可进一步写为：

$$m\ddot{\vec{r}} = -\nabla V + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial V}{\partial \dot{\vec{r}}}\right) \tag{1-1-35}$$

将上式与式（1-1-8）相比较，可以看出，带电粒子系统的广义势为V，而广义坐标就是粒子的坐标。因此，根据拉格朗日函数的定义式（1-1-6），带电粒子的拉格朗日函数$L(\vec{r},\dot{\vec{r}},t)$为：

$$L(\vec{r},\dot{\vec{r}},t) = \frac{1}{2}m\dot{\vec{r}}^2 + e\,\dot{\vec{r}}\vec{A}(\vec{r},t) - eU(\vec{r},t) \tag{1-1-36}$$

计算得到：

$$\partial L/\partial \dot{\vec{r}} = m\dot{\vec{r}} + e\vec{A}(\vec{r},t)$$

$$\partial L/\partial \vec{r} = e\,\dot{\vec{r}}\frac{\partial \vec{A}(\vec{r},t)}{\partial \vec{r}} - e\frac{\partial U(\vec{r},t)}{\partial \vec{r}}$$

根据式（1-1-7），拉格朗日方程为：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[m\dot{\vec{r}} + e\vec{A}(\vec{r},t)\right] - e\,\dot{\vec{r}}\frac{\partial \vec{A}}{\partial \vec{r}} + e\frac{\partial U}{\partial \vec{r}} = 0 \tag{1-1-37}$$

若使用公式（1-1-32），式（1-1-37）即可整理为与式（1-1-31）完全一致的形式。

利用式（1-1-11）与（1-1-36），可求出带电粒子的动量$\vec{p}$：

$$\vec{p} = \partial L/\partial \dot{\vec{r}} = m\dot{\vec{r}} + e\vec{A} \tag{1-1-38}$$

可以看出，在现在的情况下，共轭变量$\vec{p}$不再等于力学动量$m\dot{\vec{r}}$。另外，代表着系统总能量的哈密顿量H，等于：

$$\begin{aligned} H(\vec{r},\dot{\vec{r}},t) &= \vec{p}\cdot\dot{\vec{r}} - L(\vec{r},\dot{\vec{r}},t) \\ &= \frac{1}{2m}[\vec{p} - e\vec{A}]^2 + eU(\vec{r},t) \end{aligned} \tag{1-1-39}$$

这就是无自旋的带电粒子的哈密顿量的表达式。

要指出的是，式（1-1-39）中电场与磁场是以矢量位$\vec{A}(\vec{r},t)$及标量位$U(\vec{r},t)$的形式出现的。由于电磁场的规范不是唯一的，所以哈密顿量与规范选择有关。但是，既然电磁场的洛仑兹力是以场强$\vec{E}$和$\vec{B}$的形式表示的，在哈密顿量的力学体系中或者量子力学体系中，以哈密顿量出发讨论粒子的行为时，所得的结果应该是唯一的，因此，在不同规范下进行讨论所得到的结果应该是相同的，这就是“规范不变性”。所以，在不同规范下讨论问题，并不影响问题的物理本质。在以后的章节中，将采用库仑规范。在该规范中，标量位U为零，矢量位的散度为零：

$$\begin{cases} U(\vec{r},t) = 0 \\ \nabla\vec{A}(\vec{r},t) = 0 \end{cases} \tag{1-1-40}$$

电场强度与磁场强度简化为：

$$\begin{cases}\vec{E}(\vec{r},t)=-\partial\vec{A}(\vec{r},t)/\partial t\\ \vec{B}(\vec{r},t)=\nabla\times\vec{A}(\vec{r},t)\end{cases}\tag{1-1-41}$$

这样，有关的电磁场方程都能得到简化。

§1-2　量子力学的基本公设与结论

如前所述，在经典力学中，对于一个由N个粒子组成的物理系综，可用某时刻t每一个粒子的位置q_i及速度$\dot{q}_i(i=1,2,3,\cdots N)$表征其状态。若初始时刻$t_0$系综的状态是已知的，也就是说，系综中每个粒子的坐标、速度、能量，……等物理量是同时确定的，在作用力的作用下，粒子的运动状态将随时间变化，其变化规律遵循上节所讨论的哈密顿-雅可比方程。根据该方程，完全可以准确无误地预言t时刻（$t>t_0$）系综的状态，换句话说，该预言与t时刻进行测量所得到的结果是完全一致的；而且，系综的所有物理量（坐标、速度、动量、势能……）是同时确定的，测量其中一个物理量并不影响其它物理量的测量，测量的结果可以精确到任意所需要的准确度（该准确度仅仅由测量仪器所限制）。简言之，系综的状态是完全确定的。

随着科学技术的不断发展，以经典力学为理论依据不能解释一些新发现的微观现象，例如黑体辐射、光电效应、原子谱线以及固体在低温下的比热等等，从而揭示了经典力学体系的局限性。本世纪20年代，在光的波粒二象性的启示下，才建立起能解释这些微观现象的量子力学理论体系。

量子力学与经典力学方法之间存在着巨大的差异。经典力学建立在物理量的测量不相互影响的假设上。与此相反，量子力学是以测量过程会影响物理系统这一认识为基础的，原则上讲，不可能同时测准任意的两个量。正因为这一点，量子力学中对状态与物理量的描述、测量过程与结果的分析，都完全不同于经典力学。下面，我们将概括介绍量子力学处理问题的公设与方法，并且使用狄拉克（Dirac）符号。

第一个公设：在一个给定时间t，量子力学系统的状态是由属于状态矢量空间ε的一个矢量波函数$\varphi(t)$（态矢）所描述的。

在该公设下，首先要指出的是，矢量波函数满足线性叠加原理：属于矢量空间ε的任意多个矢量波函数的线性叠加，仍然是属于该空间的矢量波函数，它代表着另一个量子力学状态。该命题的逆定理也是成立的。因为状态矢量空间由若干个（有限或无限）线性独立的矢量（称为基矢）所描述，所以，一个矢量波函数$\varphi(t)$可以看成是这些基矢的线性叠加。

其次，波函数$\varphi(t)$具有矢量性质。其矢量性质在于，在某一具体的表象（Representation）下，该波函数的具体函数形式是矢量波函数在该表象下的投影。表象是可以选择的，它们可以是分立的，也可以是连续的。

在狄拉克符号中，用$|\varphi(t)\rangle$表示一个矢量波函数，称为右矢（ket），该矢量的共轭虚量，写为$\langle\varphi(t)|$，称为左矢（bra）。之所以称其为共轭虚量，是因为左矢与右矢是一对特殊的复量，不能将其分解为实部和虚部。左矢属于与ε空间不同的另一个矢量空间ε^*：

$$|\varphi(t)\rangle\in\varepsilon;\quad\langle\varphi(t)|\in\varepsilon^*$$

两个不同矢量空间的矢量不能相加，但是，左矢量与右矢量是一一对应的。若右矢为

$$|\varphi(t)\rangle = c_1|a\rangle + c_2|b\rangle$$

则与其对应的左矢为

$$\langle\varphi(t)| = c_1^*\langle a| + c_2^*\langle b| = (|\psi(t)\rangle)^+$$

式中$c^*_{1,2}$是复数$c_{1,2}$的共轭复数。

定义两个矢量波函数$|\varphi(t)\rangle$与$|\psi(t)\rangle$的内积是体积分

$$\langle\varphi(t)|\psi(t)\rangle = \int_V \varphi^*(t)\psi(t)\mathrm{d}V \tag{1-2-1}$$

在狄拉克符号中，该内积是用左矢与右矢的乘积表示的，而且有：

$$[\langle\varphi(t)|\psi(t)\rangle]^* = \langle\psi(t)|\varphi(t)\rangle \tag{1-2-2}$$

可以看出，狄拉克符号中，完整的括号〈　〉表示一个数量，不完整的括号表示一个矢量。

如果两个矢量的内积为零 (1-2-3)

$$\langle a|b\rangle = 0$$

那么，称右矢$|a\rangle$和右矢$|b\rangle$正交，或者说用该两个右矢表示的量子状态是正交的。

量子力学的第二个公设是：经典力学中一个可观察的物理量，用一个作用于状态矢量空间ε的算符A来表示。该算符A的本征矢量波函数，组成了该矢量空间ε的一组基矢。

对于一个经典物理量$\mathscr{A}$，其量子化原则是，在$\mathscr{A}$的经典力学的对称表达式$\mathscr{A}(\vec{r},\vec{p})$中，用坐标算符$\vec{R}$与动量算符$\vec{P}$分别取代经典的坐标变量$\vec{r}$和动量变量$\vec{p}$。由于算符作用于波函数的结果与作用的顺序有关，因此，经典力学中的关系式

$$(\mathscr{A}+\mathscr{B})^2 = \mathscr{A}^2 + 2\mathscr{A}\mathscr{B} + \mathscr{B}^2$$

在量子化时，必须写为对称的形式：

$$(A+B)^2 = A^2 + AB + BA + B^2$$

其中A和B是对应于经典物理量$\mathscr{A}$和$\mathscr{B}$的量子力学算符。

算符A作用于一个态矢能够得到另一个态矢：

$$A|\psi(t)\rangle = |\varphi(t)\rangle$$

当算符A作用于波函数$|u_n\rangle$ （$n=0,1,2,\cdots$）时，若有

$$A|u_n\rangle = a_n|u_n\rangle \tag{1-2-4}$$

那么，波函数$|u_n\rangle$是算符A的本征矢量波函数，a_n是该算符的本征值。一般而言，A的本征值和本征矢量波函数不只一个，本征值可能出现简并的情况；另外，本征值与本征矢量波函数还可能出现连续分布（连续谱）的情况。

本征矢量波函数满足正交归一化性质。对于分立谱（本征值不是连续取值）的情况，其表达式为：

$$\langle u_n|u_m\rangle = \delta_{nm} = \begin{cases} 1 & (m=n) \\ 0 & (m\neq n) \end{cases} \tag{1-2-5}$$

当一个算符A的本征矢量波函数组成矢量空间ε的一组基矢时，它应该满足完备性：

$$\sum_n |u_n\rangle\langle u_n| = 1 \tag{1-2-6}$$

这样，该空间的任一矢量波函数$|\varphi(t)\rangle$，按照线性叠加原理，可以展开成为这组基矢的线性叠加：

$$|\varphi(t)\rangle=\sum_n|u_n\rangle\langle u_n|\varphi(t)\rangle$$

$$=\sum_n\langle u_n|\varphi(t)\rangle|u_n\rangle=\sum_n c_n(t)|u_n\rangle \tag{1-2-7}$$

其中展开系数$c_n(t)$为：

$$c_n(t)=\langle u_n|\varphi(t)\rangle \tag{1-2-8}$$

对于连续谱的情况，本征矢量波函数W_α满足

$$A|W_\alpha\rangle=\alpha|W_\alpha\rangle \tag{1-2-9}$$

其中本征值α连续取值。连续谱情况下的正交归一化性质及完备性分别写为：

$$\langle W_{\alpha'}|W_\alpha\rangle=\delta(\alpha'-\alpha) \tag{1-2-10}$$

$$\int \mathrm{d}\alpha|W_\alpha\rangle\langle W_\alpha|=1 \tag{1-2-11}$$

而且，任意的一个矢量波函数$|\varphi(t)\rangle$，也可以展开为连续谱的基矢的线性叠加：

$$|\varphi(t)\rangle=\int \mathrm{d}\alpha c(\alpha)|W_\alpha\rangle \tag{1-2-12}$$

其中展开系数$c(\alpha)$为：

$$c(\alpha)=\langle W_\alpha|\varphi(t)\rangle \tag{1-2-13}$$

定义两个算符A与B之间的互易关系为：

$$[A,B]=AB-BA \tag{1-2-14}$$

当上式为零时，算符A与算符B互易；反之，A与B不互易。量子力学中已经证明，A与B互易时，它们具有相同的本征波函数：

$$\begin{cases}[A,B]=0\\ A|u_n\rangle=a_n|u_n\rangle;\ B|u_n\rangle=b_n|u_n\rangle\end{cases} \tag{1-2-15}$$

而且，该定理的逆定理也成立，也就是说，当两个算符具有相同的本征波函数时，它们之间互易。其实，算符之间的互易关系，反映了量子力学中相应的可观察物理量的关联关系。当算符互易时，相应的两个可观察物理量的测量互不影响；当两个算符非互易时，一个可观察物理量的测量必然影响另一个测量。因此，互易关系是算符之间最基本的关系。

第三个公设：量子力学中，对波函数为$|\varphi(t)\rangle$的系统进行物理量$\mathscr{A}$的测量，相当于用算符A作用于波函数，测量的结果，只能是算符A的本征值$a_n(n=0,1,2,\cdots)$；得到a_n(非简并值)作为测量结果的几率，等于相应的本征矢量波函数$|u_n\rangle$与系统矢量波函数$|\varphi(t)\rangle$内积绝对值的平方：

$$P(a_n)=|\langle u_n|\varphi(t)\rangle|^2 \tag{1-2-16}$$

对于连续谱，则：

$$P(\alpha)=|\langle W_\alpha|\varphi(t)\rangle|^2 \tag{1-2-17}$$

现在考虑一个量子力学系统，其状态用右矢$|\varphi(t)\rangle$表示。显然，它处在$|\varphi(t)\rangle$态的几率为1，因此，其矢量波函数满足归一化条件：

$$\langle\varphi(t)|\varphi(t)\rangle=1 \tag{1-2-18}$$

假设算符A的本征值是分立的，并且是非简并的，这样，本征值与本征态形成一一对应的关系：

$$A|u_n\rangle = a_n|u_n\rangle \tag{1-2-19}$$

$|u_n\rangle$组成了矢量空间的一组基矢，将所考虑的量子力学系统的矢量波函数$|\varphi(t)\rangle$展开成为$|u_n\rangle$的线性叠加：

$$\begin{cases} |\varphi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|u_n\rangle \\ c_n(t) = \langle u_n|\varphi(t)\rangle \end{cases} \tag{1-2-20}$$

上面的公设说明，对该系统进行$\mathscr{A}$的测量的结果，只能得到本征值a_n，而得到其中某一个本征值的几率为：

$$P(a_n) = |\langle u_n|\varphi(t)\rangle|^2 = |c_n|^2 \tag{1-2-21}$$

而所有几率之和应该为 1 ，所以归一化条件式（1-2-18）也可以写为：

$$\sum_n |c_n|^2 = 1 \tag{1-2-22}$$

上述结论表明，当量子力学系统处在A的某个本征态$|u_n\rangle$时，对该系统进行$\mathscr{A}$的测量，测量的结果必然是a_n，也就是说，得到a_n作为测量结果的几率为 1 。而当系统处在不是A的本征态的任意量子力学状态时，进行$\mathscr{A}$的测量，不能象经典力学那样得到一个确定的值，而只能给出测量结果的一系列可能值a_n（A算符的本征值）以及其相应出现的几率$P(a_n)$。这一点，是量子力学与经典力学的重要区别。

显然，当算符A对应于一个经典力学中的可观察物理量$\mathscr{A}$时，$\mathscr{A}$的测量结果应该是实数，所以A的本征值a_n是实数。用A^+表示算符A的伴随（共轭）算符，则：

$$\begin{cases} A|u_n\rangle = a_n|u_n\rangle \\ \langle u_n|A^+ = \langle u_n|a_n^* \end{cases} \tag{1-2-23}$$

对于厄米算符

$$A = A^+ \tag{1-2-24}$$

换句话说，厄米算符的本征值为实数，它对应着经典的可观察物理量。

若对量子力学系统进行$\mathscr{A}$的测量，那么，测量的平均值，等于所有可能的测量结果与该结果出现的几率乘积之和，将平均值（量子力学中称为期待值）记为$\langle A\rangle$，则：

$$\begin{aligned} \langle A\rangle &= \sum_n a_n P(a_n) = \sum_n a_n |\langle u_n|\varphi(t)\rangle|^2 \\ &= \sum_n \langle\varphi(t)|u_n\rangle a_n \langle u_n|\varphi(t)\rangle \\ &= \langle\varphi(t)|A|\varphi(t)\rangle \end{aligned} \tag{1-2-25}$$

其中使用了基矢的完备性式（1-2-6）。

量子力学中用均方根偏差来描述测量值与期待值之间的偏差。均方根偏差ΔA的定义为：

$$\Delta A = \sqrt{\langle(A-\langle A\rangle)^2\rangle} = \sqrt{\langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2} \tag{1-2-26}$$

测不准关系式规定了量子力学中两个测量的均方根偏差之间的关系。该关系可以叙述如下：若A、B、C是厄米算符，它们之间满足关系式：

$$[A,\ B] = iC \tag{1-2-27}$$

那么，对量子力学系统进行相应于A和B的测量，其均方根偏差的乘积满足以下的测不准关

系式：

$$\Delta A\cdot\Delta B\geqslant\langle C\rangle/2 \tag{1-2-28}$$

其中C也可以是数量。对于坐标算符X和动量算符P_x，它们之间的互易关系为：

$$[X,\ P_x]=\mathrm{i}\hbar \tag{1-2-29}$$

式中$\hbar=h/2\pi$，是归一化普朗克常数，则测不准关系式表示为：

$$\Delta X\cdot\Delta P_x\geqslant\hbar/2 \tag{1-2-30}$$

测不准关系式揭示了量子力学与经典力学的另一个重要区别。在经典力学中，进行第一个物理量的测量并不影响第二个物理量的测量，它们同时都是确定的。在量子力学中，一般而言，两个量测量之间是相互影响的，而测不准关系式正是规定了两个量测量的均方根偏差乘积的最小值。测不准关系可以这样理解：若两个算符A和B互易，它们必然具有相同的本征波函数；若A与B不互易，它们的本征波函数是不同的。在第一种情况下，若量子力学系统处在A算符的某个本征态$|u_n>$，该状态也必然是B算符的本征状态，式（1-2-15）成立。这时对系统进行$\mathscr{A}$的测量，得到$|u_n>$相应的本征值a_n为结果，几率为1；而进行$\mathscr{B}$的测量；得到B算符相应的本征值b_n为结果，几率也为1，这样，A和B的测量同时得到准确的结果。在更一般的第二种情况下，要么是系统处在其中一个算符的本征态的极端情况，要么是系统既不处在A的本征态也不处在B的本征态的情况。对于前面的极端情况，A和B算符的两个测量中，一个可以得到准确的值，另一个只能给出一系列可能的值及相应的几率；对于后面的情况，两个测量都只能给出可能的取值及相应的几率。因此，量子力学中两个测量一般是不相容的，测不准关系正是这个性质的数学描述。

量子力学的第四个公设是，量子力学系统的矢量波函数$|\varphi(t)\rangle$随时间的变化规律由薛定谔方程表示：

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\varphi(t)\rangle=H|\varphi(t)\rangle \tag{1-2-31}$$

其中

$$H=\vec{p}^2/2m+V(\vec{R}) \tag{1-2-32}$$

是系统的能量算符（哈密顿算符），$\vec{p}$是动量算符，$V(\vec{R})$是用坐标算符表示的势。可以看出，哈密顿算符是由经典的哈密顿函数量子化而得到。在坐标表象下，动量算符$\vec{p}$表示为对坐标的一次微分：

$$\vec{p}=-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vec{r}} \tag{1-2-33}$$

因此：

$$H=\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{R}) \tag{1-2-34}$$

其中

$$\nabla^2=\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2}+\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} \tag{1-2-35}$$

薛定谔方程规定了系统矢量波函数随时间t的变化规律。该规律也规定了算符期待值$\langle A\rangle$随时间的变化，考虑$\langle A\rangle$的时间导数：

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt}=\left\langle\frac{d\varphi(t)}{dt}|A|\varphi(t)\right\rangle+\left\langle\varphi(t)\left|\frac{\partial A}{\partial t}\right|\varphi(t)\right\rangle$$
$$+\left\langle\varphi(t)|A|\frac{d\varphi(t)}{dt}\right\rangle$$

对薛定谔方程两端取共轭，得到：

$$-i\hbar\frac{d}{dt}\langle\varphi(t)|=\langle\varphi(t)|H \qquad (1\text{-}2\text{-}36)$$

其中已经使用了哈密顿算符的厄米性质。将上式及薛定谔方程代入，则可得到期待值$\langle A\rangle$的运动方程：

$$d\langle A\rangle/dt=\langle\partial A/\partial t\rangle+(i\hbar)^{-1}\langle[A,\ H]\rangle \qquad (1\text{-}2\text{-}37)$$

可见，期待值$\langle A\rangle$是一个随时间t变化的量，其变化规律与经典力学式（1-1-22）类似，这是因为算符A本来就与经典量$\mathscr{A}$相对应。

下面研究坐标算符$\vec{R}$与动量算符$\vec{P}$的期待值的运动方程。容易证明下面两个互易关系式：

$$[A,BC]=B[A,C]+[A,B]C \qquad (1\text{-}2\text{-}38)$$

$$[A,f(A)]=0 \qquad (1\text{-}2\text{-}39)$$

其中A、B、C是算符，而$f(A)$是以A算符为变量的任意函数。因此，按照式（1-2-37），有：

$$d\langle\vec{P}\rangle/dt=\frac{1}{i\hbar}\langle[\vec{P},\ H]\rangle=\frac{1}{i\hbar}\langle[\vec{P},V(\vec{R})]\rangle$$

$$d\langle\vec{R}\rangle/dt=\frac{1}{i\hbar}\langle[\vec{R},\ H]\rangle=\frac{1}{i\hbar}\langle[\vec{R},\vec{P}^2/2m]\rangle$$

根据式（1-2-38）以及式（1-2-29），可以得到：

$$[\vec{R},\vec{P}^2/2m]=i\hbar\vec{P}/m \qquad (1\text{-}2\text{-}40)$$

$$[\vec{P},V(\vec{R})]=-i\hbar\nabla V(\vec{R}) \qquad (1\text{-}2\text{-}41)$$

最后得到Ehrenfest定理：

$$d\langle\vec{R}\rangle/dt=\langle\vec{P}\rangle/2m \qquad (1\text{-}2\text{-}42)$$

$$d\langle\vec{P}\rangle/dt=-\langle\nabla V(\vec{R})\rangle \qquad (1\text{-}2\text{-}43)$$

该定理与经典力学中的哈密顿-雅可比方程形式上类似。

综上所述，量子力学体系中，系统的状态是用矢量波函数描述的，物理量是用算符表征的。在一般的情况下，量子力学意义上的测量只能给出一系列可能的取值及其出现的几率。两个算符相应测量的不准确度，由测不准关系式所规定。量子力学系统的矢量波函数随时间的变化，服从薛定谔方程。

§1-3 图象与表象

上面已经讨论了量子力学中系统的矢量波函数和算符的期待值随时间的变化规律，它们满足：

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\varphi(t)\rangle=H|\varphi(t)\rangle \qquad (1\text{-}3\text{-}1)$$

$$\frac{\mathrm{d}\langle A\rangle}{\mathrm{d}t}=\left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle[A,H]\rangle \tag{1-3-2}$$

其中

$$\langle A\rangle=\langle\varphi(t)|A|\varphi(t)\rangle \tag{1-3-3}$$

从上面的公式可以看出，矢量波函数一般是时间的函数；而算符期待值随时间的变化，既来自矢量波函数随时间的变化，也来自算符本身的时间变化。一般而言，矢量波函数与算符都是时间的函数。

量子力学中，处理波函数与算符随时间的变化有三种主要的方式，分别称为薛定谔图象（Schrödinger picture）、海森伯图象（Heisenberg picture）以及相互作用图象（Interaction picture），简称S、H及I图象。在这三种图象中，矢量波函数与算符随时间变化规律的形式是不同的。下面分别讨论这三种图象。

一、薛定谔图象

在薛定谔图象中，微观系统的状态用矢量空间的一个矢量波函数$|\varphi(t)\rangle$表示，它是时间的函数，而可观察的经典力学量，用厄米算符表示，它们一般不是时间t的显函数。在S图象中，矢量波函数满足薛定谔方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\varphi(t)\rangle=H|\varphi(t)\rangle \tag{1-3-4}$$

当计算A的期待值时，对两个任意时刻t_0和t，期待值$\langle A\rangle$分别为：

$$\begin{cases}\langle A\rangle(t_0)=\langle\varphi(t_0)|A|\varphi(t_0)\rangle\\ \langle A\rangle(t)=\langle\varphi(t)|A|\varphi(t)\rangle\end{cases} \tag{1-3-5}$$

可见，期待值随时间t的变化，是因为系统状态随时间变化而引起的。因此，引入矢量波函数的时间变化因子——演化算符$U(t,t_0)$，使

$$|\varphi(t)\rangle=U(t,t_0)|\varphi(t_0)\rangle \tag{1-3-6}$$

显然，演化算符满足以下关系：

$$U(t_0,t_0)=1 \tag{1-3-7}$$

$$U(t_2,t_1)U(t_1,t_0)=U(t_2,t_0) \tag{1-3-8}$$

为了保证态矢$|\varphi(t)\rangle$的归一化性质不随时间改变，还应该有

$$U^{+}(t,t_0)U(t,t_0)=1 \tag{1-3-9}$$

因此，演化算符所代表的变换是幺正变换，即：

$$U^{+}(t,t_0)=U^{-1}(t,t_0) \tag{1-3-10}$$

将式（1-3-6）代入到薛定谔方程中去，注意到t_0已是所选定的初始时刻，$|\varphi(t_0)\rangle$不再是时间的函数，因此得到演化算符所满足的方程：

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U(t,t_0)=HU(t,t_0) \tag{1-3-11}$$

上式与薛定谔方程形式上类似。在哈密顿算符H随时间变化的形式确定以后，根据上式求出演化算符，从而可以求出t_0时刻以后的任意时刻t系统的矢量波函数。

当考虑的系统是一个孤立的无外界作用的能量守恒体系时，哈密顿算符不是时间t的函数，式（1-3-11）的解为以下形式：