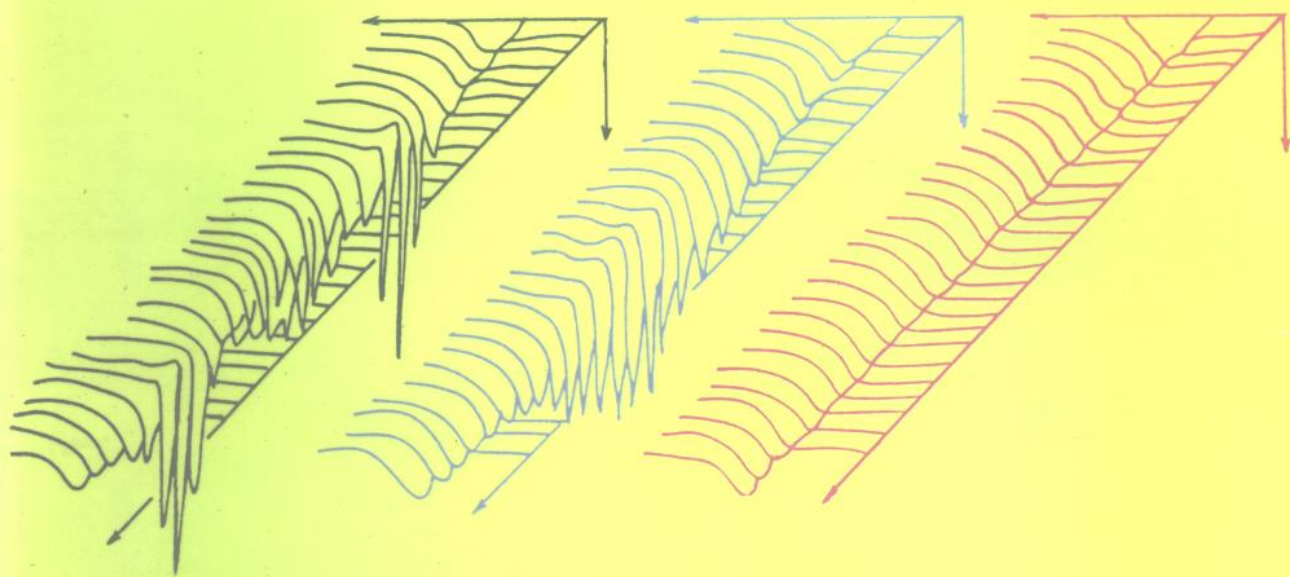


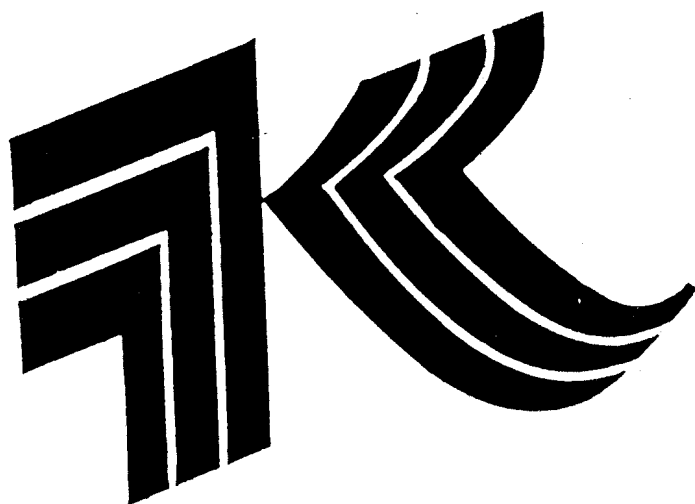


重庆出版社科学学术著作出版基金资助

非线性量子力学理论

● 庞小峰 著
● 重庆出版社





● 庞小峰 著
● 重庆出版社

非线性量子力学理论

(川)新登字 010 号

责任编辑 张镇海
封面设计 徐赞兴
技术设计 丹 英

庞小峰 著
非线性量子力学理论

重庆出版社出版、发行 (重庆长江二路 205 号)
新华书店经销 新都华兴印务有限公司印刷
开本 787×1092 1/16 印张 51.4 插页 13 字数 1235 千
1994 年 8 月第一版 1994 年 8 月第一版第一次印刷
印数: 1—1500

*

ISBN7-5366-2937-0/O · 19

定价:48 元

内 容 提 要

本书是在作者 80 年代初期所著《非线性量子理论问题》讲义的基础上,加进了最近几年发表的数十篇论文和最近十多年来国内外学者对非线性科学和非线性 Schrödinger 方程的研究成果撰写而成的。全书共 12 章 125 节,约 130 万字,全面、系统和深入地介绍了作者所提出的非线性量子力学理论的物理基础、理论内容及其在生物学、物理学和高分子等学科领域中的广泛运用。其中,第一章阐述了线性量子力学的成就及存在的问题;第二、三章研究了宏观量子效应的特点及其准粒子的运动规律;第四章阐述了作者提出的非线性量子力学的基本原理和理论;第五章主要研究了理论的自洽性、正确性,与线性量子力学的关系,及各种非线性量子力学方程的解及其特性;第六章介绍了此理论的数学基础;第七、八章全面系统地介绍了该理论在生物学中的运用和作者所发展的生物能量与信息传递的新理论及其运用;第九章介绍了新近发展的非线性自陷理论及其运用;第十章介绍了该理论在凝聚态物理的有关领域的运用;第十一章简述了非线性量子场论和非线性统计物理学的有关问题;第十二章讨论了与非线性量子力学方程有关的一些问题。为配合教学与科研工作的开展,每章后面附有大量参考文献。

本书可作为理科大学学生、研究生、教师和从事自然科学研究人员的参考书。

序

众所周知,由薛定谔、海森堡和狄拉克等人创立的量子力学是现代物理学的基础,它与其它科学交叉还形成了量子化学、量子生物学等分支学科,可以认为量子理论对包括物理学、化学、生物学、天文学等自然学科的发展有最深远的影响。然而,这一理论自身的矛盾性也是大家都知道的。当代最伟大的科学家爱因斯坦及一大批科学巨匠潜心钻研,乃至费尽毕生精力,致力于这些问题的研究,但终究没有得到解决。现在看来,必须把量子力学从线性层次推广到更高层次的非线性领域,也许是解决这一问题的可能的途径之一。

20世纪70年代以来,由于科学技术的迅速发展导致非线性科学出现了数量极多的研究工作。自此,庞小峰先生即潜心于微观客观的非线性规律的研究。80年代初,他认真研究宏观量子效应和其它非线性量子特征,并着重研究了非线性相互作用及孤立子运动的关系,独创性地提出了非线性量子力学的基本原理。经过十多年的刻苦钻研,他不仅将这一原理发展成为完善的理论,同时还将它运用于许多物理系统、生物系统、有机分子和高分子凝聚态物理领域中,创造性的解决了一系列过去难以解决的问题,取得了许多具有重大科学价值的成果。同时,非线性量子力学的这些基本原理。为解决线性量子力学中久已存在的困难迈出了重要的一步。这创造性的科学研究工作,不但显示了庞先生的胆略,还深刻展现了庞先生的才华。因此,重庆出版社决定出版庞小峰先生的著作《非线性量子力学理论》,对于非线性科学和量子力学的发展都是很有意义的,我为它的出版感到高兴。

本书的最大特点是选题的新颖性和内容的创造性,绝大部分原始工作出自于庞先生之手,是他多年研究工作的结晶;其次,本书涉及广泛的内容,其全面性和系统性也令人称道。总而言之,这是值得相关专业的广大科学工作者、教师、研究生和大学认真阅读的一本好书。

国家级有突出贡献的专家
国务院学位委员会学科评议组成员
有突出贡献的回国留学人员
国家高分子物理开放实验室学术委员会副主任
全国政协委员,博士导师,教授
全国凝聚态物理事业委员会副主任

吴大诚

一九九三年十一月二十九日

绪 论

所谓非线性量子力学就是研究具有量子特性的粒子(包括微观粒子)在非线性作用或场的作用下的运动规律和动力学特性。它是相对于薛定谔和海森堡等人创立的量子力学而得名的。后者是专门研究具有波-粒二象性的微观粒子在线性作用或线性场中的运动规律和特性的科学。故可称它为线性量子力学。非线性量子力学的概念最早始于德布罗依的著作,不过他称之为“非线性波动力学”。他在本世纪 50 年代建立这一理论的主要目的是想解决线性量子力学自身的矛盾和人们对它的认识的严重分歧。但其理论基础未能跳出线性量子力学的自身框架,因而没有获得成功。

线性量子力学要不要发展,它自身存在的矛盾要不要解决,以及非线性量子力学需不需要建立等问题,一直是摆在物理工作者面前的重要问题。我们都清楚,作为现代物理基础的线性量子力学在广泛的运用中取得了很大成就,解决了许多实际问题,如氢和类氢原子的光谱、兰姆移动等物理现象。但是理论自身所存在的严重问题也是众所周知的,致使科学家争论不休。其激烈程度,持续时间之长,也是科学史上绝无仅有的,并且毫无结果。看来,要在线性理论的框架内解决这一场争论和线性量子力学自身的矛盾,是不可能的,必须将理论推广到更高一个层次,即非线性领域中去。另外,最近一个时期来,包括宏观量子效应在内的一系列非线性量子物理现象在不同的物理体系,如超导体、铁磁体、光纤材料和生物系统等领域中相继发现,而线性量子力学在解决这些问题时显得无力。加之本世纪 60 年代末期以来,非线性偏微分数学理论的重大进展和孤立子理论的建立,为解决这些问题,最终也是为非线性量子力学理论的建立奠定了数学理论基础。从而使得非线性量子力学的建立不但显得相当必要,而且也是完全可能的。特别是,当前非线性科学发展十分快,如非线性振动、非线性牛顿力学、非线性流体力学、混沌学、协同学、分形与分维学等的建立和发展,使得非线性量子力学已到了应当建立,而且可能建立的时候了。

那么,又如何去建立这一新的理论体系呢?几十年的研究和争论表明:若沿着德布罗依等人的老路将不会成功,必须另起“炉灶”,开拓新路,起用新的观点和方法,才会达到目的。

在开初的研究中,我们始终抓住与微观量子效应的特性有迥然不同的、特殊的宏观量子效应的特性和本质。从此问题出发,深入、广泛地进行研究。研究结果表明:它是在体系的对称性自发破缺后,通过相变或突变形式形成了长程有序的相干态或准玻色凝聚态。因此宏观量子效应和非线性相互作用与孤立子运动紧密相关。在仔细、深入研究它们之间的关系及本质后,我们在 1981 年就大胆地提出了非线性量子力学的基本原理和理论。在此基础上,又系统地建立起了非线性量子力学一整套理论,并通过有说服力的论证,证明了这一理论本身是自洽的、正确的和合乎逻辑的。后来又将此理论推广、运用到其它非线性量子系统中,特别是最近几年,将

它运用到生命体系这个典型的非线性系统中去,建立了生物能量与信息传递的新理论,取得了可喜的成果,获得了一定的成功。至此,一方面发展了非线性量子力学理论,而另一方面又解决了生命体许多基本的、过去一直未能解决的一些重要问题,初步显示了非线性量子力学的正确性和生命力,并由此又发展了非线性“自陷”量子理论,它可以像线性量子力学一样,用来计算小分子、高分子和生物分子等的量子振动能级,这就更加深了我们对非线性量子力学理论的认识。

我们已对非线性量子力学问题研究了十多年,有关的文章发表了几十篇。还曾在全国许多专业会议上宣读过这些文章,也在多个国际专业学术会议(例如 ICNP, ICMP 和 IWSEN 等)上系统讲述和报告过这一理论及其有关问题。并于 1985 年编写过一本《非线性量子力学理论问题》的讲义在国内发行,还应邀到广州、南京、武汉、长沙、天津、昆明、湘潭和沈阳等地的一些大学与研究所作过专题讲述。现在出版的这本书稿,就是在这个讲义的基础上,听取了许多专家、教授、研究生、大学生的意见后,加进了其他研究者和我们最近几年的研究成果,对原稿作了适当的修改而成的。

现在建立的这一套新的非线性量子力学理论是跟线性量子力学迥然不同的。它是用来描述和研究与一般微观量子体系不同的宏观量子系统和非线性量子系统的规律和特征的科学,是研究微观客体等非线性作用和色散效应共同下自陷或突变为孤立子的运动规律和特征及相互作用的特点的科学。具体来讲,就是研究由非线性作用所导致的微观粒子的各类集体激发,自局域性激发和集体运动,如有序态、相干态、准玻色凝聚态、耗散结构状态、协同合作状态、自组织状态等的动力学规律和特征的新理论。它是量子力学在非线性的必然结果。它的建立,可能解决线性量子力学遗留给我们的一些问题。同时,也可能会推动非线性科学的发展。

本书分十二章,全面、系统、深入地介绍我们提出的非线性量子力学理论的出发点、途径与过程,理论的内容和它的一些运用。特别在最后五章中较系统地阐述了理论用于生物等系统的情况和解决的一些问题。

今天能出版《非线性量子力学》一书,是由于许多专家、教授、同仁和同学的支持、关心的结果。在此,我向这些友人表示由衷的感谢。作者对尊敬的钱伟长先生为本书的出版给予极大关心表示衷心的感谢;对有关专家、教授的评审和推荐表示万分感谢;对四川联合大学(四川大学)学报(自然科学版)编辑部王正富、张祖权、苟宗泽、程代荣和杜晓蓉等先生协助重庆出版社所作的编辑、排版工作,致以诚挚的谢意。

另外,由于非线性量子力学是一门新兴的学科,还正处在发展之中,许多问题还待进一步研究和讨论。我真诚希望与任何友人讨论这个问题,来推动这一理论的进一步发展。同时,书中有不妥或谬误的地方,敬请提出,我一定虚心接受,认真改进。

庞小峰

写于 1983 年 10 月 15 日

改于 1994 年 3 月 8 日

目 录

绪论	(1)
第一章 线性量子力学及其存在的问题	
§ 1.1 线性量子力学的基本假设	(1)
§ 1.2 线性量子力学的成功与存在的问题	(5)
§ 1.3 玻尔派与爱因斯坦派之间的大论战	(9)
§ 1.4 观点分歧和后人工作给我们的启迪	(11)
附录 1 关于量子测量问题的一些观点	(13)
参考文献	(16)
第二章 宏观量子效应	
§ 2.1 宏观量子效应现象	(18)
§ 2.2 宏观量子效应本质的分析	(25)
§ 2.3 宏观量子效应与微观量子效应	(33)
参考文献	(33)
第三章 宏观量子系统中的准粒子运动	
§ 3.1 超导体中超导电子的运动	(35)
§ 3.2 超导体中宏观量子效应的理论分析	(43)
§ 3.3 Josephson 效应与超导电子相位场的运动	(51)
§ 3.4 在非平衡情况下超导电子运动的特点	(60)
§ 3.5 量子超流液氦的运动特征与宏观量子效应	(66)
附录 2	(78)
参考文献	(81)
第四章 非线性量子力学的基本原理和理论	
§ 4.1 非线性量子力学的基本原理和几点推论	(83)
§ 4.2 非线性量子力学的基本理论	(87)
§ 4.3 非线性量子力学与其它非线性物理理论	(95)
§ 4.4 非线性量子力学中的几个问题与几点结论	(98)
参考文献	(99)

第五章 非线性量子力学与线性量子力学

§ 5.1 线性 Schrödinger 方程与非线性 Schrödinger 方程	(101)
§ 5.2 Schrödinger 孤立子的特点	(105)
§ 5.3 Schrödinger 孤立子形成条件的分析	(110)
§ 5.4 Schrödinger 孤立子稳定性的论证	(113)
§ 5.5 如何看待线性量子力学中的分歧	(115)
§ 5.6 相对论下的非线性量子力学方程	(119)
§ 5.7 有初始条件的非线性量子力学问题	(123)
§ 5.8 在小相关半径内具有随机初始条件的非线性 Schrödinger 方程的特点	(125)
§ 5.9 关于排斥型非线性 Schrödinger 方程的一些特点	(129)
§ 5.10 在电磁场作用和多体作用下的非线性 Schrödinger 方程的解	(132)
§ 5.11 具有外势作用的分立非线性 Schrödinger 方程的特性	(137)
§ 5.12 2 维和 3 维情况下孤立子的存在和稳定性	(144)
§ 5.13 关于 2 维和 3 维非线性 Schrödinger 方程的解法	(146)
§ 5.14 在驱动场作用下 3 维 Sine-Gordon 方程解的特性	(158)
§ 5.15 在外界驱动场作用下 ϕ^4 -场方程解的特点	(160)
§ 5.16 Schrödinger 和 Sine-Gordon 孤立子的相互作用	(162)
§ 5.17 Schrödinger 孤立子相互碰撞的特性	(166)
§ 5.18 几点结论	(172)
参考文献	(173)

第六章 非线性量子力学的数学基础

§ 6.1 反散射问题	(175)
§ 6.2 贝克隆(Bäcklund)变换	(179)
§ 6.3 守恒定律	(184)
§ 6.4 分立的非线性 Schrödinger 方程的 Bäcklund 变换和特点	(186)
§ 6.5 哈密顿形式和可积性	(190)
§ 6.6 非线性可积系统的一般特征及 NLSE 的矢量形式	(197)
§ 6.7 对于 $U(1,0)$ 模型中解的特性	(202)
§ 6.8 可积的 $U(0,1)$ 模型中解的特性	(205)
§ 6.9 在 $U(1,1)$ 模型中解的特性	(207)
§ 6.10 可积的 Sine-Gordon 系统与 ϕ^4 -场模型的特点	(210)
§ 6.11 可积系统的稳定性理论	(213)
§ 6.12 非线性 NLSE 方程的厄米对称空间和哈密顿结构的正则性	(217)
§ 6.13 非线性方程的 D 算符及其 N 个孤立子解	(227)
参考文献	(229)

第七章 生物能量与信息传递的理论

§ 7.1 生物能量与信息传递的 Davydov 理论	(233)
§ 7.2 生物能量与信息传递的新理论	(240)
§ 7.3 在 3 链蛋白质分子中的集体激发与孤立子运动	(251)
§ 7.4 新孤立子的量子力学特性	(259)
§ 7.5 新理论的自治性论证	(267)
§ 7.6 用非线性量子力学变分方法所得到的运动方程	(274)
§ 7.7 蛋白质分子集体激发的相干特性	(280)
§ 7.8 在非线性和相互作用下半量子理论孤立子的特点	(287)
§ 7.9 在全量子理论下非线性蛋白质分子中孤立子的特点	(307)
§ 7.10 在线性谐振下生成的孤立子的热稳定性	(325)
§ 7.11 在非线性和振动下激发孤立子的热稳定性	(341)
§ 7.12 蛋白质分子中孤立子的热力学特性	(348)
§ 7.13 蛋白质分子中孤立子的寿命大小	(352)
§ 7.14 在蛋白质分子中由孤立子引起的 Raman 散射特征	(363)
§ 7.15 在蛋白质分子中由孤立子引起的红外吸收特性	(369)
参考文献	(375)

第八章 新理论在生物学中的应用

§ 8.1 蛋白质分子中通过孤立子迁移电子的几率	(380)
§ 8.2 蛋白质分子中由孤立子输运电子的能力与速率	(395)
§ 8.3 由孤立子超声速运动引起的自发辐射现象	(402)
§ 8.4 肌肉收缩的分子与量子生物学理论	(408)
§ 8.5 被毒害的生物蛋白质分子孤立子性质的改变及生物疾病的起因	(415)
§ 8.6 DNA 分子中孤立子激发的简单模型及分形特性	(440)
§ 8.7 DNA 分子的动力学特性及孤立子运动的进一步研究	(450)
§ 8.8 DNA 的生物功能与孤立子运动	(459)
§ 8.9 DNA 分子的空间构象变化与混沌状态	(470)
§ 8.10 神经冲动信息传递的物理特性	(475)
§ 8.11 在生物自组织中的生物熵与生物信息的传递	(483)
参考文献	(493)

第九章 非线性量子自陷理论及其应用

§ 9.1 自陷概念和自陷方程的一般特点	(496)
§ 9.2 定态分立自陷方程的稳定解析解及近似解	(498)
§ 9.3 分子振动系统中非线性自陷方程的理论推导	(515)
§ 9.4 非线性量子自陷方程在水中的应用	(517)

§ 9.5 利用非线性量子自陷理论计算苯的振动能级	(524)
§ 9.6 高分子和蛋白质分子本征能级的计算	(536)
附录 3	(540)
参考文献	(542)

第十章 非线性量子力学理论在凝聚态物理中的应用

§ 10.1 声子系统和电荷密度波及自旋密度波	(544)
§ 10.2 在 1 维极化子系统中的孤立子激发	(549)
§ 10.3 在准 1 维铁磁体中的集体激发与孤立子运动	(554)
§ 10.4 在准 1 维 Heisenberg 反铁磁体中的局域性激发	(560)
§ 10.5 在准 1 维 Hubbard 模型中的孤立子激发	(569)
§ 10.6 在准 1 维分子晶体中的集体激发与孤立子运动	(573)
§ 10.7 聚乙炔的非线性特性和孤立子运动	(584)
§ 10.8 Peierls 模型中的量子化和孤立子电荷	(594)
§ 10.9 非线性光学介质中的孤立子运动与光纤孤立子通讯	(597)
§ 10.10 等离子体中的 Langmuir 孤立子	(617)
§ 10.11 电子-离子等离子体中非线性波的调制激发	(622)
§ 10.12 等离子体中离子声波的传递特性	(627)
§ 10.13 2 维电子气及量子霍尔效应	(632)
§ 10.14 非传播孤立波的特点及理论描述	(635)
§ 10.15 在 1 维无序非线性晶格中的非线性自局域态与孤立子的传播	(643)
§ 10.16 在非均匀介质中激发的 SG 孤立子的特点	(646)
§ 10.17 在非均匀晶格系统中激发的 ϕ^4 -孤立子的特征	(652)
参考文献	(659)

第十一章 非线性量子场论和非线性统计物理初步

§ 11.1 非 Abel 规范场的拓扑性孤立子	(665)
§ 11.2 关于非拓扑性孤立子	(682)
§ 11.3 在 2+1 和 3+1 维时空中 Sine-Gordon 方程的解及特征	(685)
§ 11.4 多维非线性 Klein-Gordon 方程的解及其关系	(690)
§ 11.5 1+1 维的实 ϕ^4 -场模型在有限温度时的特性	(698)
§ 11.6 1+1 维实标量场在有限温度时孤立子附近的量子涨落效应	(704)
§ 11.7 Self-dual Yang Mills 场方程与 Schrödinger 孤立子	(712)
§ 11.8 粒子的引力场所造成的非线性作用对其状态的影响	(715)
§ 11.9 非线性光子系统的特性	(718)
§ 11.10 非线性统计物理中的转换矩阵法和唯象方法	(720)
§ 11.11 关于 kink 孤立子气体的统计力学特征	(726)
§ 11.12 kink 孤立子气体的动力学结构因子	(728)

§ 11.13 铁磁系统中孤立子的结构因子与相关函数	(730)
§ 11.14 一个具体的非线性统计系统热力学函数的计算	(738)
参考文献	(741)

第十二章 与非线性量子力学方程有关的几个问题

§ 12.1 非线性 Schrödinger 方程的反散射解法	(743)
§ 12.2 SG 方程孤立子解的反散射解法	(749)
§ 12.3 具有自洽源两分量非线性 Schrödinger 方程的反散射解法	(752)
§ 12.4 关于非线性 Schrödinger 方程的变分方法	(757)
§ 12.5 具有空间周期外势场的非线性 Schrödinger 方程的特性	(763)
§ 12.6 非线性 Schrödinger 方程的量子化	(766)
§ 12.7 量子化 Sine-Gordon 方程的孤立子算符	(777)
§ 12.8 孤立子方程的一般微扰理论及其举例	(780)
§ 12.9 微扰非线性 Schrödinger 方程的两孤立子系统	(785)
§ 12.10 微扰 Sine-Gordon 方程的两孤立子的特点	(792)
§ 12.11 非线性量子力学方程的数值计算方法	(801)
§ 12.12 孤立子的相互作用及其稳定性的证明	(803)
§ 12.13 非线性 Schrödinger 的涡旋缺陷结构及其运动特点	(806)
§ 12.14 两个孤立子在 2 维平面上相互散射作用的特点	(811)
§ 12.15 广义非线性 Schrödinger 方程一些基本特性的讨论	(816)
参考文献	(821)

第一章 线性量子力学及其存在的问题

由于本书是研究非线性量子力学,很自然应把本世纪 20 年代由玻尔、德布罗依、薛定谔和海森堡以及玻恩等人建立的量子力学称为线性量子力学。在本章将研究有关它的一些问题,为我们的理论的提出作准备。

§ 1.1 线性量子力学的基本假设

线性量子力学理论是在以下几个基本假设的基础上发展起来的。这是由于线性量子力学需要解决,决定物理量的可能数值(确定可能值的谱)或本征谱;计算微观粒子在系统中具有这些数量的某一个值的几率大小和几率分布;确定系统对时间的变化规律或微观粒子运动的特点等等问题。归结起来,这些基本假设有:

(一) 描述微观粒子状态的数学量是希尔伯特空间中的态矢量 $|\psi\rangle$ 或 $\psi(\mathbf{r}, t)$, 它常称为波函数,它反映了微观粒子运动具有波动性的实验事实。如果 λ 是一个数,则 $|\psi\rangle$ 与 $\lambda|\psi\rangle$ 描述同一个状态,因此可通过取归一化 $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ 态矢量来描述状态。

(二) 一个物理系统的力学量如坐标 X , 动量 P 和能量 E 等相当于希尔伯特空间中的一个算符。可观察的力学量对应于厄米算符,它的本征矢构成希尔伯特空间中的基矢,由此可得,物理量所取的值是算符的本征值。厄米算符的本征值是实数;对应不同本征值的本征矢量是正交的;可对易的厄米算符的共同本征态构成了正交完备集 $\{\psi_L\}$, 任何矢量 $\psi(\mathbf{r}, t)$ 都可以向它展开即

$$\psi = \sum_L C(L) \psi_L(\mathbf{r}, t) \text{ 或 } |\psi(\mathbf{r}, t)\rangle = \sum_L \langle\psi_L|\psi\rangle |\psi_L\rangle \quad (1.1)$$

其中: $C(L) = \langle\psi_L|\psi\rangle$ 是 L 表象中的波函数。如果 L 的谱是连续的,则“ $\sum$ ”应改为积分:“ $\int dL \dots$ ”。这种谱的分解实际上是在把系统 $\psi(\mathbf{r}, t)$ 按亚系统分解,这是线性量子力学表象变换的基础。在状态 $\psi(\mathbf{r}, t)$ 中测得数量 L 等于某一值 L' 的几率为 $|C(L')|^2 = |\langle\psi_{L'}|\psi\rangle|^2$, 在连续谱的情况下则为 $|\langle\psi_{L'}|\psi\rangle|^2 dL$ 。那么,对于一个力学量的任何一次测量,其结果仅可能是相应算符的本征值之一,此时系统的状态处于相应的本征矢,这是一个对测量所作的重要假设。

(三) 物理量 A 在状态 $|\psi\rangle$ 中的平均值 $\langle A \rangle$ 为:

$$\langle A \rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle / \langle\psi|\psi\rangle \quad (1.2)$$

当 ψ 归一化(即 $\langle\psi|\psi\rangle = 1$) 时为: $\langle\psi|A|\psi\rangle = \langle A \rangle$, 这个平均值的决定可得到数量 A 的可能值。为

了找到这些可能值,就必须设法找到一个态矢,其中数量 A 只是一个确定数值,即在这个状态有 $(\Delta A)^2 = 0$ 。由此可导出算符 $\hat{A}$ 的本征方程为:

$$\hat{A}\phi_L = A\phi_L \quad (1.3)$$

进而可求出 $\hat{A}$ 的谱和相应的本征函数 ϕ_L , $\hat{A}$ 的本征值就是量 A 在实验上观察到的数值。 A 在任何其它态中可得到的一切可能值,不是别的,也正是在它自己的本征态上得到的数值,这反映了线性量子力学是描述微观系统运动的统计规律这一事实。

(四) 希尔伯特空间是线性空间,力学量所对应的是线性算符。它对应的本征矢满足线性叠加原理,即如果两个态 $|\phi_1\rangle$ 和 $|\phi_2\rangle$ 是粒子的两个状态,则它们的线性叠加为:

$$|\psi\rangle = C_1|\phi_1\rangle + C_2|\phi_2\rangle \quad (1.4)$$

也描述同一个粒子的状态(这里 C_1 和 C_2 是任意常数)。因此态的线性叠加原理是算符的线性特性的本质表现。这是我们把由它为基础建立起来的量子力学称为线性量子力学的原因之一。这一叠加原理不同于经典波的波叠加原理,它不导致几率和强度的改变。

(五) 对应原理。如果经典力学量 A 和 B 满足泊松括号:

$$\{A, B\} = \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_i} \right)$$

其中 q_i 和 p_i 是经典系统的广义坐标和广义动量,则在量子力学中,相应的算符 $\hat{A}, \hat{B}$ 满足下列对易关系:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) = -j\hbar\{A, B\} \quad \text{其中 } j = \sqrt{-1} \quad (1.5)$$

若 A, B 分别表示 q_i, p_i 时,则有:

$$[\hat{p}_i, \hat{q}_j] = -j\hbar\delta_{ij}, [\hat{q}_i, \hat{q}_j] = 0$$

等等的关系成立。这反映了微观系统的物理量所取的值是量子化的这一事实。也是“量子力学”名称得来的理由之一。由这一基本原理可得到海森堡测不准关系:

$$\overline{(\Delta A)^2} \overline{(\Delta B)^2} \geq \frac{|\hat{C}|^2}{4} \quad \text{或} \quad |\Delta x| |\Delta p| \geq \hbar/2 \quad (1.6)$$

其中: $j\hat{C} = [\hat{A}, \hat{B}]$ 。

(六) 微观系统的状态 $|\psi\rangle$ 随时间变化的规律是由薛定谔方程:

$$-\frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle \quad (1.7)$$

决定,这里 $\hat{H}$ 为系统的哈密顿算符, $\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}$, 这就是说,系统在任何时刻的状态是由体系的哈密顿量所决定。作为量子力学基本方程的(1.7)式是波函数 ψ 的线性方程,这是我们把这套量子力学称为线性量子力学的另一个原因。如果一个系统在 t_0 时刻的态矢为 $|\psi(t_0)\rangle$, 则它在 t 时刻的力学量和波矢量便可由么正运动算符 $U(t, t_0)$ 联系起来,即:

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (1.8)$$

其中有 $U(t_0, t_0) = 1$, $U^+ U = U U^+ = 1$ 。若令 $U(t, 0) = U(t)$, 则它的运动方程为:

$$-\frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial t} U(t) = \hat{H} U(t) \quad (1.9)$$

当 H 不显含时间 t 时, $U(t) = e^{-\frac{j}{\hbar} H t}$ 。若 H 显含时间时,则有:

$$U(t) = 1 + \frac{1}{j\hbar} \int_0^t dt_1 H(t_1) + \frac{1}{(j\hbar)^2} \int_0^t dt_1 H(t_1) \int_0^{t_1} dt_2 H(t_2) + \dots \quad (1.10)$$

这反映了微观规律的因果关系。

(七) 全同性原理。任何一对同样粒子 (k, j) 对换不会出现新的物理态, 即它满足 $P_{kj}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle, \lambda = \pm 1$, 因此全同粒子系统的波函数只能有两种: $\psi = \psi_s$ 对称态 ($\lambda = +1$) 和 $\psi = -\psi_s$ ($\lambda = -1$) 的反对称态存在, 并且这种性质不随时间而改变, 而由粒子的性质所决定。如果是玻色子则是完全对称态; 如果是费米子, 则是完全反对称态。

(八) 测量的假设。一般的量子力学都未谈过这个假设。为了形成一个自封闭的力学系统, 有人建议引入这个假设。但是测量是量子力学十分“头痛”和麻烦的问题, 在这个问题上争论很大。下面简单叙述一下。

在通常的量子力学理论的表述中, 我们应该明确: 在对某一个量子力学体系作测量时, 体系将跃迁到相应算符的本征态, 或者说由所谓纯粹状态转化为混合状态 (有的书又称为由纯粹系综转化为混合系综)。这一假说可以更具体地表示为: 如果人们对某一个量子力学体系的物理量 L 进行测量后, 此体系必定进入由该物理量相对应的某一线性、厄米算符 L 所决定的本征态之一, 亦即为 (1.3) 式。现改写为

$$L\psi_s = L_s\psi_s$$

这就是说, 任一个量子力学体系 ψ_s 在测量后, 就应有

$$\psi_s \xrightarrow{\text{测量}} \psi_{s_l} \quad (1.11)$$

关于 ψ_s 进入 ψ_{s_l} 的几率则是 $|C_{s_l}|^2$, 而 C_{s_l} 却由展开式

$$\psi_s = \sum_l C_{s_l} \psi_{s_l} \quad (1.12)$$

所决定, 这一假说便称为测量假说。有些文献又称为投影假说, 因为这种跃迁到本征态的过程, 就像是希尔伯特空间里的一个“投影”运算。这表明微观粒子体系在测量前和测量后的性质已有一个原则性的差别。在测量前, 波函数 ψ_s 可以展开为算符 L 的本征波函数的线性叠加, 亦即有 (1.1) 式。现写为:

$$\psi_s = \sum_l C_{s_l} \psi_{s_l} \quad l = 1, 2, 3, \dots$$

这里, 不同的本征态之间是“相关”的, 而在测量后, ψ 进入相应的本征态 ψ_{s_l} 。这时, 不同的本征态间将是“不相关”的, 即在进行具体计算中, 将不能再计算它们的相干项。人们常称具有相干性的物理状态为纯粹状态, 而不相关的物理状态便称为混合状态。当然, 如果测量时只对决定全部量子状态的量子数之一进行测量, 那么测量后进入的状态仅是部分相干的。

在实际的量子力学的计算中经常遇到的一个问题是, 所研究的对象是处在相关的状态, 还是处在不相关的状态, 例如在探讨级联跃迁过程时, 还常常要对中间态求和。这就遇到一个是先求和后平方还是先平方后求和的问题, 或可以这样讲, 未测量过的中间态是相关的, 测量过的则是不相关的。

有些人讲, 这一假说可以从线性量子力学的其他基本原理“推导”出来。就此, 有许多线性量子力学的奠基人对它进行过研究, 也有一些量子力学的教科书“给出”过这种推导, 但实际上这是不可能的, 因为它必须独立地引入线性量子力学体系内。而且, 线性量子力学如果缺少了这个假说, 那么在逻辑上就很难形成为自相封闭的系统, 例如, 在双缝衍射的实验中就会得到一系列矛盾的结果。我们知道, 在孔隙后面的衍射花样是由粒子所服从的薛定谔方程式以及相应的初始条件和边界条件所决定的; 障碍物上的单缝孔隙决定了孔隙后的照相底片拍摄的是

单缝衍射花样;障碍物上的双缝决定了图样是双缝衍射的花样,显然,双缝衍射花样并不是两个单缝衍射花样的简单叠加,这里存在“干涉”着的波。如果人们在双缝后面的某一孔隙邻近对飞行中粒子进行测量(如放置一云雾室),将使我们知道有某一粒子已飞过了这一单缝,而今后的粒子运动将以此测量结果作为初始条件,并以满足此边界条件的薛定谔方程式进行演化,于是,我们得到的是单缝衍射的花样。但如果在两个双缝的孔隙后面都分别放上一个云雾室,可以预期量子力学的计算结果将给出衍射花样,并且它是两个单缝衍射花样的叠加。然而,若在线性量子力学理论中不引进测量假说,即认为测量将不影响粒子的状态,那么线性量子力学将产生一个的理论上的矛盾,即线性量子力学将给出两个极不相同预言,一个是有干涉项在内的双缝衍射花样,另一个是两个单缝衍射花样的算术叠加。

为了消除理论上的这一矛盾,在线性量子力学中宁愿引入测量假说,宁愿假定粒子波函数在经过测量后进入本征态,也就是在许多教科书中称之为波包的收缩的现象。

对于这种波包的收缩的现象如何理解呢?有些人用统计知识的不完备性来解释。而线性量子力学中的波函数是一种描述几率的波函数,在线性量子力学预测中得到的都是未来概率的预测。

但量子力学中的几率诠释指的是 $|\Psi|^2$,而波包的收缩却是波函数 Ψ 。尽管在测量后人们需要根据新的知识做出新的预测,但是,只根据统计知识的不完备性并不能解释为什么测量后的双缝衍射花样要变成两个单缝衍射花样的叠加。如果波包的收缩是由于获得了新的“知识”,那么为什么“干涉项”竟然随这一知识而消失了呢。

为了解决这个问题,玻尔提出了仪器和微观粒子之间存在着不可控制的相互作用的假说,认为,在仪器和粒子相互作用时,会“不可控制”地在相应的本征态上产生某个任意的相角,正是这种任意的相角导致干涉项的消失。例如,对于双缝衍射的现象来讲,在缝隙 A 和 B 后的波函数可表示为两项的叠加,即

$$\Psi(X) = \Psi_A(X) + \Psi_B(X)$$

如果只有 A 或 B,那么某粒子到达坐标 X 的概率将分别是

$$P_A(X) = |\Psi_A(X)|^2 \quad P_B(X) = |\Psi_B(X)|^2$$

如果双缝 A 和 B 同时存在,就有

$$P(X) = |\Psi_A(X) + \Psi_B(X)|^2 = P_A(X) + P_B(X) + \Psi_A^*(X)\Psi_B(X) + \Psi_B^*(X)\Psi_A(X)$$

式中后面的两项便是标准的干涉项。玻尔认为,在测量后的波函数将引入一个任意的相位 α_A 和 α_B ,亦即有

$$\Psi(X) = \Psi_A(X)e^{i\alpha_A} + \Psi_B(X)e^{i\alpha_B}$$

这时,在坐标 X 上的概率就成为

$$P(X) = |\Psi_A|^2 + |\Psi_B|^2 + \Psi_A^*\Psi_B\exp[j(\alpha_B - \alpha_A)] + \Psi_B^*\Psi_A\exp[j(\alpha_A - \alpha_B)]$$

式中后两项仍是干涉项,但这时由于新引入的相角是“无规”和“不可控制”的,则便会使得这一干涉项的总的效应互相抵消,从而等于零。于是,在上述的斯忒恩和盖拉赫实验中,在测量后的波包(例如对于粒子在空间的位置进行测量)也会由于引入的某个“任意”的或“随机”的相角,而使干涉项消失。

怎样来解释仪器和粒子间不可控制的相互作用?有些人企图用测不准关系来加以解释。认为微观粒子之所以测不准,是由于在仪器和粒子间存在着某种“不可控制”的作用量子。将“不

可控制”的作用量子数和“不可控制”的“任意”相角相提并论或认为这一“不可控制”的相角是因测不准关系导致的结果。但由测不准关系，导不出“不可控制”的“任意”的相角的结果。相反，如果在测量后导致某种任意的相角，还要“破坏”已知的测不准关系。例如，某个局限在某一空间范围内的波包可以展开为一系列平面波的叠加，即

$$\Psi(X) = \int \varphi(P) e^{iPX/\hbar} \frac{dP}{(2\pi\hbar)^{1/2}}$$

如果对这一系统的动量进行测量，将是一系列相互无关的，无干涉作用的平面波，这就导致波包的解体。有关这个假设的发展我们放在本章附录中去叙述。

§ 1.2 线性量子力学的成功和存在的问题

在以上几个基本假定(或公理)的基础上，海森堡、薛定谔、玻恩和狄拉克等人建立起了反映微观客体(具有波-粒二象性特点)的运动规律和特性的线性量子力学理论。由这一理论可知，一旦我们知道微观粒子所处的外场情况，以及粒子初始时刻、初始位置的状况，便可由线性薛定谔方程，或狄拉克方程和 Klein-Gordon 方程，确定在任何时刻任何地点的状况、几率和特点等。也能够确定处于稳定状态的电子、原子、分子或大分子乃至固体等一切物体的能量状态、能级分布和能带结构，以及由它们决定的力学、电学、光学等特征。也可以用来研究微观粒子在外电磁场和光、声、热等场中的性质与特征。因此，线性量子力学在一定程度上的确反映了组成物体的微观粒子的运动规律，从而使它成为现代物理的理论基础和支柱。它在研究微观粒子如电子、声子、光子、激子、原子、分子和原子核以及基本粒子等的运动特征和由这些准粒子运动所决定的物质特性上取得了很大成就。在计算氢原子、氢分子、氦原子等许多原子、分子和一些化合物的光谱、原子或物质的磁性、半导体特征和光学特征上，都与实验吻合较好。同时量子力学理论已深入到物理学、化学、宇宙学和生物学等各个领域，得到了极其广泛的应用。它已被广泛应用在原子、分子、原子核、基本粒子、凝聚态物理、生物大分子和有机高分子等方面，极大地推进了这些学科的发展，产生了量子电动力学、量子场论、量子统计、量子固体理论、量子化学、量子生物学、量子宇宙学等新兴学科。现代实验已证明在用量子电动力学理论计算氢原子的兰姆移动、氢原子的超精细结构、电子的反常磁矩等值时与实验测得的值在 10^{-5} 数量级符合，说明量子电动力学是目前物理学中最成功的理论之一。

线性量子力学的成功看来是大家公认的，但人们就能这样简单地看待线性量子力学吗？几十年来以爱因斯坦为首的一大批科学家就持有相反的观点，他们认为现行量子力学是不完善的，也不是最终结论，这一方面的认识将在下一节讲。正如为线性量子力学作过很大贡献的狄拉克在 1975 年访问澳大利亚时，在新南威尔大学所作的《量子力学的发展》的讲演中就这样指出：“关于现在的量子力学，存在一些很大的困难”。他指的困难是带电粒子和电磁场相互作用的精确理论问题，把带电粒子的电荷看成是集中在一个点上，就会发现：点电荷的能量是无穷大，这个问题使物理学家困惑 40 多年，虽然有重整化理论的出现，始终没有取得任何实质性的进展，和爱因斯坦为之终生奋斗的统一场论的情况差不多。因此狄拉克最后说：“正是由于这些困难，我认为量子力学的基础还没有正确的建立起来，在当前这个基础上所进行的研究，在应