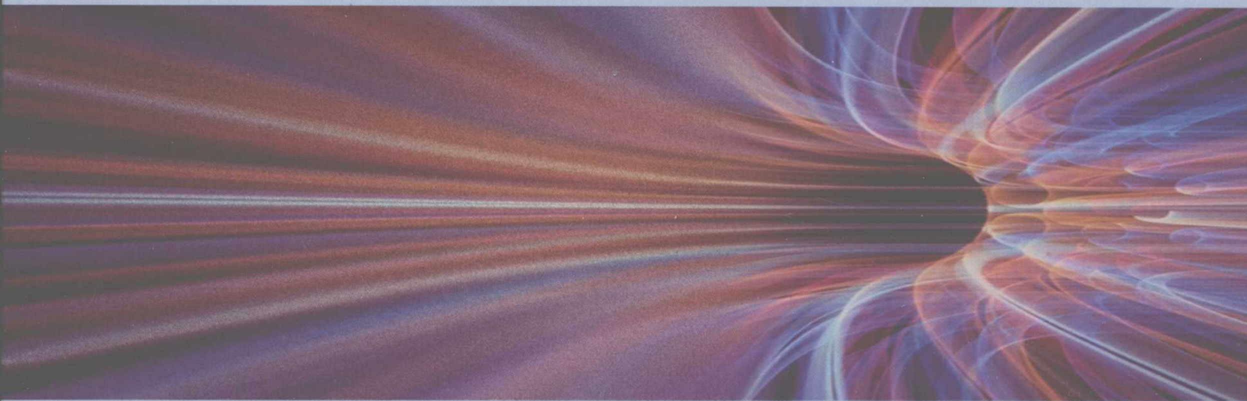
张鹏飞　阮图南　朱栋培　吴　强／编著

量子力学学习指导

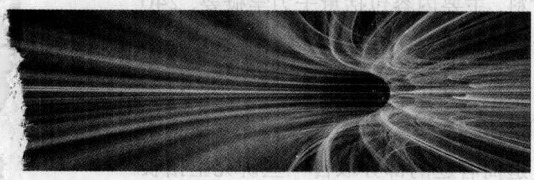
LIANGZI LIXUE XUEXI ZHIDAO



要理解这个世界上我们所见到的几乎所有现象背后，自然界真正如何运行，我们非违背常识不可。

——R. P. Feynman

中国科学技术大学出版社



张鹏飞　阮图南　朱栋培　吴　强／编著

量子力学学习指导

LIANGZI LIXUE XUEXI ZHIDAO

中国科学技术大学出版社

内 容 简 介

本书是作者在中国科学技术大学多年授课形成的教学材料，主要内容包括量子力学概要、240余道习题的解答和有关分析讨论、5 份模拟考试试卷和参考解答以及 101 道简答题. 书中对量子力学基本线索和基本内容作了概述，在曾谨言先生所著《量子力学导论》(1998 年，第 2 版) 以及《量子力学教程》(2003 年) 的全部习题 (部分题目略有改动) 基础上，另增加百余道习题. 增加的习题多数为作者自编，也有部分取自国内外相关资料. 101 道简答题的部分取自一些研究生招收单位的面试题. 本书可作为大学生学习量子力学或者准备研究生入学考试的参考材料.

图书在版编目 (CIP) 数据

量子力学学习指导 / 张鹏飞，阮图南，朱栋培，吴强编著 .— 合肥：中国科学技术大学出版社，2008. 5

ISBN 978-7-312-02196-1

I. 量… II. ①张… ②阮… ③朱… III. 量子力学—高等学校—教学参考资料 IV. O413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2008)第 006074 号

出版发行 中国科学技术大学出版社
安徽省合肥市金寨路 96 号，邮编：230026
网址：http://press.ustc.edu.cn

印　　刷 合肥学苑印务有限公司
经　　销 全国新华书店
开　　本 710 mm × 960 mm 1/16
印　　张 19.25
字　　数 397 千
版　　次 2008 年 5 月第 1 版
印　　次 2008 年 5 月第 1 次印刷
印　　数 1 — 3 000 册
定　　价 26.00 元

序

本书是中国科学技术大学近代物理系阮图南教授生前与他的学生和同事共同完成的. 阮图南教授亲自撰写了一部分书稿, 并指导了全书的编写. 一本书稿翻下来, 可看出它明显的特色: (1) 详细推演, 细致精到, 这是阮图南教授一贯的风格; (2) 本书产生于教学过程, 是教学相长的产物. 如作者前言所说, 作者在教学中与学生保持近距离的交流关系, 而这种交流丰富了本书的内容; (3) 富有启发, 许多题是从不同的角度给出不同的解答. 还有专门编写的简答题, 启发读者对于基本原理和基本概念的思考; (4) 针对性和实用性强. 相信本书一定会让读者受益.

量子力学与相对论并称近代物理学的两大支柱. 尽管量子论的诞生已逾百年, 量子力学的创立也已有 80 多年, 量子力学还在向前迅猛发展, 而且正向现代科学技术的各个领域加速渗透. 物理系本科教学中开设的这门专业基础课, 对于学生来说, 无论是为知识的学习和技能的训练, 认识的加深和见识的提高, 还是为后续课程和将来科研工作做准备, 都起到极其重要的作用.

我曾在中国科大倡导加强量子力学教学. 为此, 中国科大本科教学从 2004 年秋季学期开始, 增设 6 学分 120 学时的量子力学 (量子力学 A), 并由阮图南教授等几位教授承担教学. 物理类一半专业的本科学生要求必修量子力学 A, 而其余专业只要求修原来的 4 学分 80 学时的量子力学 (量子力学 B). 但往往是许多只要求修量子力学 B 的学生纷纷涌向量子力学 A 的课堂, 造成量子力学 A 课堂的教室爆满.

阮图南教授在理论物理学界以功底深厚著称. 在他七十高龄时, 还担任学校的量子力学课程讲座教授. 在课堂上, 他不厌其烦地给学生推演物理. 在教学中, 他特别注重培养学生的物理直观、数学技巧以及他们对知

识的领悟和灵活运用．他注重启发式教学，在学生灵活掌握基本物理规律的前提下加强基本能力的培养．在年轻教师的协助下，他充分调研国内外情况，重新全面审定课程体系和教学内容，并重新编写了量子力学讲义，待以后整理出版．

因为他兢兢业业的工作，阮图南教授在中国科大师生中享有崇高声望．愿中国科大物理学科涌现更多的像他那样学术造诣深厚、潜心教学的教师，这是中国科大物理向前持续发展和兴旺发达的根本．

本书出版之际，我很乐意写下上面的话．是为序．

杨国桢

中国科学技术大学理学院院长

中国物理学会理事长

中国科学院院士

2008 年 3 月

前　言

本书是我们在中国科学技术大学多年讲授量子力学形成的一个教学材料，可供大学生在初学本课程时或者复习考研时参考之用．它的主要内容包括量子力学概要、240余道习题的解答和有关分析讨论、5份模拟考试试卷和参考解答以及101道简答题．“概要”是参照本科教学要求，对量子力学基本线索和基本内容的一个概述，希望有助于读者建立量子力学总的图像，理清它的基本框架结构．240余道习题包括曾谨言先生所著《量子力学导论》(1998年，第2版)以及《量子力学教程》(2003年)的全部习题(部分题目略有改动)，另还有增加的百余道习题．增加的习题多数为我们自编，也有部分取自国内外相关资料并且是我们在教学中经常使用的习题．5份模拟考试试卷由我们自拟，难度与我校硕士研究生入学考试试题相当．101道简答题的相当一部分取自一些研究生招收单位的面试题．

“概要”的内容编排上，大部分参照曾谨言先生所著教材，也有少部分地方作了调整或者补充．曾先生所著教材历年来在国内量子力学教学中广泛采用，我们这样安排，也是为了尽可能让大多数同学方便．而“习题”的分类编排也大体根据其内容按照曾谨言先生《量子力学导论》的章节排列，且原来是《导论》中的题，各章均基本按照原书的顺序放在前头，其余的题放在后面．每道题(包括模拟考试题)的解答都尽量详尽．量子力学习题，只要你用心揣摩，往往会发现有多种解法，即所谓解无定法，“不管白猫黑猫，能抓到老鼠的都是好猫”．书中的很多习题正是有多种解法．一道题有多种解法时，我们一般也并不列出所有解法．除了少数题有特别巧妙的解法列出外，我们往往有意给出较繁的解法，这样做主要是为了利于大多数同学学习．同学懂了以后，自己会给出他最简单的解法．

量子力学是研究微观体系(如电子、原子、分子等)运动规律以及相关现象的基本理论，它与相对论并称近代物理学的两大支柱．从它诞生至今80多年来，量子力学不断取得辉煌成就，并且处在不断地丰富和发展中．

然而微观体系的现象或者行为与日常现象有质的差异，在以日常经验的观念看来往往显得极其怪异费解．量子力学以普朗克常量$\hbar$为表征，以波粒二象性为基本图像，而其状态的描述竟是借助于看不见摸不着的几率幅．它的语言，它的规则总让初学者感到陌生．

此外，有关量子物理基本概念和原理的诠释，80 多年来一直存在持续的争论. 量子物理堪称玄妙无比. N.Bohr 说过“假如一个人不为量子论感到困惑，那他就是没有明白量子论”. R.P.Feynman 又说“我想我可以放心地说，没有谁理解量子力学”.

那么，如何学好量子力学? 这是每一位初学者和教师都要面对且必须认真考虑的问题. 根据我们的经验，我们愿意在此提几条粗浅的建议，供读者参考.

1. 初学者应该有一个大的观念转变. 从经典力学的顶峰到量子力学的创立，是一次脱胎换骨，因此量子力学与经典力学有着显著的差异. 初学者应该本着科学的精神，了解并尊重产生新概念、新思想的历史背景及实验基础，还应当经常有意识地剖析自己在宏观世界日常经验中的观念，剖析经典物理学的观念. R.P.Feynman 说:“要理解这个世界上我们所见到的几乎所有现象背后，自然界真正如何运行，我们非违背常识不可”，尽管他喜欢讲常识，并重视基于常识的判断.

2. 遵循认识规律，注意循序渐进. 初学时主要是观念的转换，逐渐熟悉新的“语言”、符号，了解新的规则，再学习相关的计算方法，并尝试解决一些问题. 应多从简单的例子入手. 不妨一开始对量子力学作一远景式探视，心目中有了一个总的图像以后，再一步步踏入胜景. 碰到的疑难，不要期望全部解决. 有些可以通过思考，通过请教，与同学讨论等途径，而得到解决. 有一些疑难，学习现阶段还无法克服，不妨放一放，留待后面阶段学习来解决. 还有一些疑难或者争论，本身就是目前量子力学尚未解决的，可以作适当了解，知道目前知识达到的边界，也不妨留一两个在心头，准备在未来的岁月里寻求答案，但在初学阶段不宜在上面花费过多时间.

3. 理清基本线索和基本内容，掌握基本概念与原理. 做到“知其然、知其所以然”；以把握物理实质为原则，避免钻牛角尖. 量子力学远离日常熟悉的经验，有些初学者可能会长时间觉得不着边际，总感觉陌生费解. 如果发现自己在某个方面卡壳了，最好是去研究有关的物理实例. 对一些重要的例子，应反复“品尝”其中的“滋味”，多多琢磨. 切记对原理的领会与掌握应结合实例. 似是而非、似非而是的地方要特别小心，切忌轻信妄断. 不妨多问问自己“我真懂了没有?”. 不妨再选一本与所用教材风格不同的参考书，对有志于学的青年学生，我们推荐原汁原味的世界名著. 在一些概念、原理的阐述上，可以用参考书与所用教材相互比较、印证，这有助于加深理解、加深认识. 经过一定的学习、思考和总结，对一些概念、原理形成自己明确的认识之后，就应该勇敢地坚持自己的看法.

4. 不要让繁琐的数学演算成为学习和领会量子力学物理实质的障碍. 数学是物理学的工具，数学演算决不是量子力学的全部. 王竹溪先生也说 Dirac 的《量子力学原理》通篇都是讲物理. 须知 Young 双缝实验是量子力学的心脏，而两能级体系也可以展示量子力学的全部基本原理. 初学者还是应当多从简单的例子入手，把学习重点放在基本概念和原理的领悟与掌握上.

5. 关于听课、讨论和交流. 由于这门课程的性质，学生必须重视听课. 有的学生想自学，那他花的力气再大效果也不好，而且如果初学没学好，以后回过头再补可能

会更加困难. 教师应当当好引路者的角色, 把学生导向量子力学的实质、量子力学的核心. 教师还应当是一个高明的启发者, 能调动学生积极主动的思考. 为了取得好的听课效果, 学生课前最好要预习, 课堂上还应当记笔记, 记思路、要点和有特色的内容, 并且在课后认真复习、总结. 量子力学中似是而非、似非而是的地方不少, 这种地方需要反复讨论或者争论才能明白. 初学者应当多提问、多讨论、多琢磨.

6. 在相关原理和概念充分理解的基础上, 自己动手做一些习题. 量子力学除了要用心学, 学到脑子里, 还要学到手上. 学量子力学, 如果不去完成一定量的习题, 那就好比一个人只学习游泳的理论而自己从来不下水一样. 通过做习题, 就会了解如何运用所学知识, 对它的领会也会更加深入。做习题决不仅仅是想明白怎么做, 还要动手一步一步把它做出来. "想通了" 跟 "做出来" 是两码事. 思考可以跳跃, 有时也许会出错. 自己动手做的, 你只要一步一步都不含糊, 做完了一般都很有把握. 所以, 我们主张同学一定要自己动手做一些习题, 哪怕你时间不多, 因此只能做一部分. 平常学习中, 应在对所学知识作复习、总结的基础上做题, 这样就不会盲目. 做题时, 应当先看清题目, 明白题目的全部条件和要求, 再回忆学过的知识, 多方面思考, 不妨画画草图或者写写算式作辅助, 寻找解题思路. 想通了怎么解题以后, 开始一步一步, 遵从逻辑的顺序, 从题目的条件, 已知的概念、原理、事实, 到达结论. 题解完后, 最好再琢磨琢磨题目有没有更妙的解法? 它能否运用到一些特例? 它能否推广? 它有没有更深的物理意义? 等等.

7. 要学会欣赏量子力学的优美. Einstein 诗一般的语言 "这个世界可以由音乐的音符组成, 也可以由数学的公式组成" 令人引发对科学美的遐想. 可以说, 量子力学是科学美的典范. 她体系自洽和谐, 形式简洁优美, 这体现一种整体的美感. 在量子力学中还有许多俯拾可见的美, 如基本对易关系的简洁, 对称性, 狄拉克符号, 理论体系的数学形式, 在确定性丧失以后, 秩序、和谐、统一仍得以重建 …… 初学者在学习本课程一段时间后, 如果能够逐渐开始领略和欣赏量子力学的优美, 那他 (她) 就已经走出了对量子力学的 "讨厌" 或者 "苦恼", 从而会更加主动地学.

本书可供初学量子力学或者是复习考研的同学参考用, 主要目的是为了方便大家学习或者复习巩固. 当然我们最不希望同学图这样的 "方便", 只是简单地拿本书的习题解答部分来应付作业抄抄完事. 我们愿意在此再次提醒各位同学, 只有自己动手用心做一定数量的习题, 才能把量子力学学到手. 我们向同学建议, 当拿到一个习题时应当: (1) 自己先做, 把它完成; (2) 如果自己反复思考都不得要领, 那可以先查阅一下本书. 边看边思考, 想清楚解题要点后, 合上书, 仍是自己独立完成. 习题做完以后, 再翻开书看看, 把自己做的与书中的解法做做比较, 这样让你学得踏实, 等等. 我们希望本书给同学提供的不是思想的束缚, 也不是拐杖, 而是启发, 是灵感. 正如诗是做不完的一样, 量子力学习题的解法往往层出不穷. 我们期望, 同学们在自己用心做一些题以后, 会发现乐趣, 同时会给出一些更好的解法. 假若同学们发现了更多更好的解法, 而本书也就起到了抛砖引玉的作用, 这正是我们最希望看到的.

我们愿意告诉读者的是，本书本身是教学相长、教与学相辅相成的产物．我们是一支老中青结合的教学队伍，从资历最浅的学生所称的“张哥”，到当时学生所称的“阮爷爷”，都与学生保持一种近距离的交流关系．我们深深感到，学生与我们富有启发性的讨论、我们与学生的交流也让我们受益良多，充满乐趣．本书中一些题的解法 (特别有一些解法，还是我们意想不到的) 就直接取自同学的作业，还有些内容完全是在与同学的交流中产生的．我们同时深深体会到，量子力学的教学不应该只是讲授了什么东西，更重要的是要让学生进行主动地思考．量子力学本身还在向前迅猛发展，它是一个开放体系，它不是绝对真理．教师不要当成教条来讲授，学生也不要当成教条来学．通过质疑、交流、讨论、争论，学生得到的才是活的知识、真正的知识，才能真正领悟量子力学的精髓．

基于这种考虑，逐渐地，我们在教学中设计了一些简答题，见本书附录中列出的 101 道简答题．101 取英文里“多”的含义，其中相当一部分取自一些单位的招收研究生或者个别国外高校代表来华招生对申请者的面试题．我校一些学生参加了这种面试回来以后，便把这些题与我们交流．这种题我们几年间也收集了不少，它们在某种程度上反映了各研究生招收单位对学生量子力学掌握程度的要求，对教学 (相信对于同学的学习也一样) 大有参考价值．这些题，我们有意不给解答．我们希望同学们对这些题进行一些思考，用心琢磨之后，能够有所悟，有所得．

杨国桢院士曾在我校倡导加强量子力学教学．日前他在百忙中又为本书撰写了序言，对他的热忱支持我们在此表示由衷的感谢．王安民教授、尹民教授等人给予了热情的鼓励和帮助，沈惠川、陈慧平等教授提出了改进意见，部分引自英文内容的文字翻译得到了张光前教授的指点，中国科学技术大学出版社给予了大力支持，我们在此一并深致谢意．此外编者之一 (张) 还要衷心感谢张永德教授．张老师曾义务为年轻教师开设“量子力学疑难问题”系列讲座，此外他的著作和报告，特别是与年轻人面对面的交流，都让年轻人获益良多．

我们还特别感谢历年来我校少年班、理学院、化学院、地球科学学院等选修我们《量子力学》、《量子力学专题》课程的同学，感谢他们对量子力学的兴趣，感谢他们与我们富有启发性的讨论，感谢他们的各种意见．对历年来的助教王舸、葛红林、成斌、马小三、王安、刘键恒、邹冰、尹鹏程等人的工作也在此致以谢意．

虽然我们希望做到最好并且也尽了力，但限于我们的水平，估计本书不当之处还是在所难免．对此，我们恳请广大读者谅解．我们诚挚欢迎使用本书的教师或者学生通过下列联系方式

Email: zhpf@ustc.edu.cn, Tel: 0551-3606234

向我们提出宝贵的批评和建议．

编　者

2008 年 4 月于合肥

目 录

第0章 量子力学概要

本章是参照本科教学要求，关于非相对论量子力学的一个概述，涉及它的基本线索和基本内容. 希望有助于读者建立量子力学总的图像，理清它的基本框架结构，领会并把握其物理实质. 我们还希望在这里告诉读者学习量子力学哪些是最重要的，需要深入领会和牢固掌握的.

本章撰写以我们在中国科大多年讲授量子力学形成的授课讲义为基础. 在讲义的准备中，我们以教学所用的教材为主，同时参考了国内外众多的优秀教材和优秀成果，并吸收其精华. 现在再将授课讲义浓缩成这么一个“概要”. 可以说“概要”的撰写本身经历了从“薄”到“厚”，再从“厚”到“薄”的过程. 我们曾做过 120 学时、80 学时和 60 学时三种层次的讲授，撰写这个“概要”时我们心目中面向的仍是各个层次的选课学生. 一方面，这么短的篇幅不可能面面俱到，我们只希望阐述量子力学的核心内容；另一方面，读者总可以自己做些选择性的阅读. 希望“概要”对各个层次的选课学生都是适用的，能够对他们有所帮助.

0.1 量子论起源和量子力学物理基础

19 世纪后半叶，经典物理学发展到了顶峰，但是在黑体辐射、光电效应、原子光谱及低温下固体比热等问题面前，经典物理学遇到了挑战.

为了解决黑体辐射谱问题，M.Plank 从分别适用于高频和低频区域的 Wien 公式和 Rayleigh-Jeans 公式出发，在 1900 年 10 月得到了一个内插公式 (后来称为 Plank 公式)，它和实验惊人地吻合. Plank 进一步寻找此公式的物理解释，至 1900 年 12 月 14 日他在德国物理学会会议的报告中提出量子假说，即对于一定频率 ν 的辐射，物体只能以 $h\nu$ 为能量单位吸收或发射它，h 是一个普适常量，即后来所称的 Plank 常量. 目前的值 $6.6260693(11)\times10^{-34}\mathrm{Js}$，常用 $\hbar=\dfrac{h}{2\pi}=1.05457168(18)\times10^{-34}\mathrm{Js}=6.58211915(56)\times10^{-22}\mathrm{MeVs}$.

1905 年，A.Einstein 为了解释光电效应，进一步将量子假说向前发展，提出光量子的概念，认为光 (电磁辐射) 是由光量子组成的，每个光量子的能量与辐射频率满

足 $E = h\nu = \hbar\omega$. 1916 年他又提出光量子的动量与辐射波长满足 $\boldsymbol{p} = \frac{h}{\lambda}\boldsymbol{e} = \hbar\boldsymbol{k}$. 这两个关系式被称为 Einstein 关系，为光电效应、Compton 散射等实验所支持.

1913 年 N.Bohr 为了解决 Rutherford 原子模型的稳定性问题，建立了原子的初等量子理论. 其要点是：(1) 定态概念；(2) 定态之间的跃迁概念；(3) 角动量量子化概念. 这些概念在后来建立的量子力学框架中也都是完全正确的. 但是 Bohr 理论，包括后来 Sommerfeld 进一步发展的相空间积分的形式，在图像上是根本错误的. 至于它们为什么还能得到大致正确的结果，则是因为在问题中引入了 Plank 作用量子. 量子力学本身也正是因为早期量子论的不足，而建立起来并逐步得到完善的.

1923 年，de Broglie 从 Einstein 关系做逆向思考，提出原先是微粒的微观粒子也具有波动性. 他提出了后来所称的 de Broglie 关系式 $\omega = \frac{E}{\hbar}$, $\boldsymbol{k} = \frac{\boldsymbol{p}}{\hbar}$. de Broglie 关系式为电子 Young 双缝实验、C.J.Davisson、L.H.Germer 和 G.P.Thomson 的电子衍射实验以及后来完成的中子衍射实验等支持.

Einstein 关系、de Broglie 关系合称为“Einstein-de Broglie 关系”，这使得描述粒子性和波动性的两组力学量通过 Plank 常量而联系起来. 与运动粒子相联系的波称为物质波或 de Broglie 波. 波粒二象性是微观粒子 (不论静止质量为零如光子，或者不为零如电子、质子等) 运动的基本图像.

在波粒二象性的基础上，E. Schrödinger、M. Born、W. Heisenberg、W. Pauli、P.A.M. Dirac 从不同的角度出发，在 1925 年前后构建了量子力学完整的理论框架. Heisenberg 等人创立矩阵力学形式，Schrödinger 提出波动力学形式，Born 提出了波函数几率解释，Schrödinger 本人又证明了波动力学、矩阵力学的等价性. 后来，R. P. Feynman 又发展了等效的路径积分表述形式.

作为研究微观体系运动规律以及相关现象的基本理论，量子力学具有三大基本特征：几率幅描述、量子化现象、不确定关系. 其理论基础是五条基本假设：波函数假设、运动方程假设、算符假设、测量假设、微观粒子全同性假设.

0.2　波函数与 Schrödinger 方程

研究一个对象需要明确如何对它进行描述. 微观体系的状态用波函数描述，这就是量子力学五大基本假设的第一条. 具体地说有以下三方面内容：(1) 微观体系的状态由波函数完全描述，而波函数一般是时间和空间的复函数；(2) 波函数的统计解释. 波函数称为几率振幅，它在某点复数模的平方与在该点找到粒子的几率密度成正比；(3) 态叠加原理. 设 ψ_1、ψ_2 是体系的状态，那么它们的线性叠加

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2,$$

也是体系的一个态，其中 c_1、c_2 是任意的复数常数.

我们对 Young 双缝实验做一细致分析，可知波函数的统计解释几乎是为了与微观粒子波粒二象性协调的惟一选择. 这种几率完全不同于经典统计物理的几率，这里是粒子的本性. 由于是相对几率，将波函数乘以一个任意的非零复常数仍描述量子体系的同一个状态，这与经典的波动不同. 尽管如此，常将波函数作归一化. 对某一波函数 $\psi(\boldsymbol{x},t)$ 在全空间作积分 $\int \mathrm{d}\tau\,|\psi(\boldsymbol{x},t)|^2$，结果记为 N^2 称为波函数的模平方；而 N 为正实数称为波函数的模或称模长. 若模长 $N=1$ 则称 $\psi(\boldsymbol{x},t)$ 已归一化. 否则令 $\psi_1(\boldsymbol{x},t)=\psi(\boldsymbol{x},t)/N$，则 $\psi_1(\boldsymbol{x},t)$ 与 $\psi(\boldsymbol{x},t)$ 描述同一个态，且 $\psi_1(\boldsymbol{x},t)$ 是归一化的.

波函数 ψ 作为时间和空间的复函数，一般可表示为 $\psi=\sqrt{\rho}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}$，其中 ρ 为几率密度，ϕ 称为相位，而 ρ、ϕ 一般也是时间和空间的实函数. 一个波函数即使已归一化，它仍然有一个整体相位因子不能确定，称为相位不定性. 因为将已归一的波函数乘以模为 1 的一个常数，则它的归一性及其他性质都不变. 这就是说波函数的整体相位没有物理意义，但决不能因此而轻视波函数相位的作用. P.A.M.Dirac 说: “这个相位是极其重要的，因为它是干涉现象的根源，而其物理含义是极其隐晦难解的 ……”

另一方面，也有些波函数不能 (有限地) 归一，例如平面波、散射态波函数或者更一般的，连续本征值的本征态波函数等. 不可归一化波函数的复数模平方代表“相对几率密度”. 为了方便，常采用 $\delta-$ 函数归一.

态叠加原理是关于量子体系态空间的限制，并不能从中得出运动方程是线性的要求.

已知体系的一个波函数 $\psi(\boldsymbol{x})$，则可作如下 Fourier 变换

$$\varphi(\boldsymbol{p})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}/\hbar}\psi(\boldsymbol{x}), \tag{0.1}$$

其反变换是

$$\psi(\boldsymbol{x})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{p}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}/\hbar}\varphi(\boldsymbol{p}), \tag{0.2}$$

通过对衍射实验的分析，上述 $\varphi(\boldsymbol{p})$ 表示动量分布几率振幅，而 $|\varphi(\boldsymbol{p})|^2$ 表示动量几率分布. $\varphi(\boldsymbol{p})$ 具有与坐标空间波函数 $\psi(\boldsymbol{x})$ 对等的意义，故把 $\varphi(\boldsymbol{p})$ 称为动量表象 (representation) 波函数，而 $\psi(\boldsymbol{x})$ 为坐标表象波函数.

根据波函数的几率解释. 假设有某个量是坐标的函数 $F(\boldsymbol{x})$，它在波函数 $\psi(\boldsymbol{x})$ 描述的状态下的期望值为

$$\overline{F}=\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\psi^*(\boldsymbol{x})F(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x}). \tag{0.3}$$

而动量的函数 $G(\boldsymbol{p})$ 在波函数 $\psi(\boldsymbol{x})$ 描述的状态下的期望值，可以通过动量几率分布计算，为 $\overline{G}=\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{p}\varphi^*(\boldsymbol{p})G(\boldsymbol{p})\varphi(\boldsymbol{p})$，利用 (0.1) 式知，可定义动量算符 $\hat{\boldsymbol{p}}=-\mathrm{i}\hbar\nabla$，而使动量函数的期望值可以直接利用坐标表象波函数计算

$$\overline{G}=\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\psi^*(\boldsymbol{x})G(-\mathrm{i}\hbar\nabla)\psi(\boldsymbol{x}). \tag{0.4}$$

对体系的两个波函数 φ 和 ψ, 如下定义其内积 (inner product 或者 scalar product)

$$(\varphi,\psi)=\int\varphi^*(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x})\mathrm{d}^3\boldsymbol{x}, \tag{0.5}$$

其中符号 "*" 表示取复数共轭. 结合测量假设可知, 内积 (φ,ψ) 的物理意义是: 当微观粒子处在 ψ 态时, 找到它处在 φ 态的几率幅. 内积满足 Schwarz 不等式[①], 若 ψ、φ 均已归一化, 则是 $|(\psi,\varphi)|\leqslant 1$. 这也与其物理意义一致.

在明确了微观体系的状态用波函数描述以后, 很自然要问体系的状态随时间的变化规律如何. 量子力学第二基本假设认为, 微观体系的状态随时间的演化由 Schrödinger 方程决定. 质量为 μ 的粒子在势场 $V(\boldsymbol{x},t)$ 中运动, 其波函数随时间的变化满足如下由 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=H\psi, \tag{0.6}$$

其中 $H=-\dfrac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(\boldsymbol{x},t)$ 为 Hamilton 量. 由于方程关于时间的微分是一阶的, 若给定初始条件, 方程的解就是惟一确定的. 从 Schrödinger 方程可得到如下几率守恒关系

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{J}=0, \tag{0.7}$$

其中 $\rho(\boldsymbol{x},t)=\psi^*(\boldsymbol{x},t)\psi(\boldsymbol{x},t)$ 为 t 时刻在空间点 $\boldsymbol{x}$ 处的几率密度, $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x},t)=\dfrac{\mathrm{i}\hbar}{2\mu}(\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi)$ 则为该点处的几率流密度.

根据波函数的几率解释, 波函数一般应满足: 单值性和平方可积性. 单值性指波函数复数模平方而言, 平方可积性指对空间任意区域以及全空间而言。而波函数及其导数的连续性, 要根据体系所处势场的性质来分析。

当 Hamilton 量不显含时间 (即满足 $\dfrac{\partial H}{\partial t}=0$) 时, 系统称为非含时系统. 此时 Schrödinger 方程可以分离变量求解. 方程存在定态解 $\psi(\boldsymbol{x},t)=\psi(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar}$, 而 $\psi(\boldsymbol{x})$ 满足定态 Schrödinger 方程

$$H\psi=\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi+V(\boldsymbol{x})\right]\psi=E\psi. \tag{0.8}$$

定态 Schrödinger 方程也就是 Hamilton 量的本征方程, 它又称能量本征方程. 求解定态 Schrödinger 方程确定本征值、本征函数, 往往需要结合边界条件 (含自然边界条件)、波函数条件等.

在定态下, 体系具有确定的能量, 几率、几率流、不含时的物理量的期望值等均不随时间变化. 定态只对于非含时系统存在.

由 (0.8) 式可见定态 Schrödinger 方程联系了 V、μ、$\hbar$、ψ、E 等量, 于是问题可以有不同提法, 给定了几个量就可以求出别的量来. 例如 V、$\mu\to\psi$, ψ、$\mu\to V$, ψ_1、$\psi_2\to E_1-E_2$, ψ、$V\to\mu$, 等.

① 见题 2.11.

当 Hamilton 量不显含时间时，若已知 $t=0$ 时刻初态 $\psi(0)$，此后任意 t 时刻的状态可写成

$$\psi(t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}\psi(0)=U(t)\psi(0), \tag{0.9}$$

其中 $U(t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}$ 称为该系统的时间演化算符，满足幺正性．上式可见，t 时刻的波函数由初始波函数确定．非含时系统的时间演化问题，通常还将初态按照定态展开

$$\psi(0)=\sum_E c_E\psi_E, \tag{0.10}$$

其中 $c_E=(\psi_E,\psi(0))$，这里假设 ψ_E 已归一化；若初态 $\psi(0)$ 给定，则 c_E 也就完全确定．而 t 时刻的状态为

$$\psi(t)=\sum_E c_E\psi_E\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar}. \tag{0.11}$$

前面指出 Schrödinger 方程关于时间的微分是一阶的，故若 t_0 时刻的波函数 $\psi(\boldsymbol{x},t_0)$ 给定，则以后任何 t 时刻的波函数 $\psi(\boldsymbol{x},t)$ 完全确定．这一事实在上面分别用时间演化算符和演化定态的叠加两种形式表述．另外，它还可如下用传播函数的形式表示

$$\psi(\boldsymbol{x},t)=\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}_0 G(\boldsymbol{x},t;\boldsymbol{x}_0,t_0)\psi(\boldsymbol{x},t_0), \tag{0.12}$$

其中传播函数 $G(\boldsymbol{x},t;\boldsymbol{x}_0,t_0)$ 如下给出

$$G(\boldsymbol{x},t;\boldsymbol{x}_0,t_0)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{p}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H(t-t_0)/\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0)/\hbar}. \tag{0.13}$$

如对自由粒子，可完成上式的积分而得到

$$G(\boldsymbol{x},t;\boldsymbol{x}_0,t_0)=\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar}\frac{1}{t-t_0}\right)^{3/2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}m}{2\hbar}\frac{(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0)^2}{t-t_0}}\theta(t-t_0). \tag{0.14}$$

0.3 一维定态问题

一维问题数学上处理较简单，容易得到严格解，而量子力学体系的特征，都可以在一维问题中展示．此外，一维问题是处理各种复杂问题的基础．关于一维定态问题，有几个一般定理：(1) 定态解的复数共轭必定也是同一能量的定态解．(2) 对于具有空间反射不变性的势函数，若 $\psi_n(x)$ 是定态解，则 $\psi_n(-x)$ 也是同一能量的定态解．(3) 势函数的有限跃变点处，波函数及其导数必定连续．(4) 无简并定理．若一维势 $V(x)$ 在有限 x 处无奇点，则对应全部束缚定态波函数都是不简并的．就是说，这类一维问题的分立能级无简并．(5) 节点交错定理．如将一维问题 (规则势函数) 的分立谱波函数 $\psi_n(x)$ 按其能量本征值递增顺序编号，则对应第 $n+1$ 个能级 E_n 的本征函数 $\psi_n(x)$，在其定义域内有限 x 值处共有 n 个节点 (即零点)．其中，基态无节点．(6) 宇称交错定理．对于具有空间反射不变性的规则势函数，基态为偶宇称，第一激发态为奇宇称，第二激发态为偶宇称，依此按照能量本征值递增顺序，奇、偶宇称交错出现．

一维无限深方势阱的势函数为

$$V(x)=\begin{cases}0, & 0<x<a,\\ \infty, & x\leqslant 0, x\geqslant a,\end{cases}$$

能量本征值为 $E_n=\dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}$，其中 $n=1,2,\cdots$. 坐标表象下的能量本征函数为

$$\psi_n=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi x}{a}, & 0<x<a,\\ 0, & x\leqslant 0, x\geqslant a.\end{cases}\tag{0.15}$$

动量波函数为关于动量的连续函数 (见题 3.4), 这是量子力学非定域效应的一个例子.

质量为 μ 的粒子在谐振子势场

$$V=\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2$$

中运动，其能量本征值为 $E_n=(n+1/2)\hbar\omega$，其中 $n=0,1,2,\cdots$. 相应的，其能量本征函数为

$$\psi_n=N_n\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}\mathrm{H}_n(\alpha x),\tag{0.16}$$

其中 $\alpha=\sqrt{\mu\omega/\hbar}$ 具有长度倒数的量纲，归一化系数 $N_n=\left(\alpha/\sqrt{\pi}2^nn!\right)^{1/2}$，而 H_n 为 Hermite 多项式，如下给出

$$\mathrm{H}_n(x)=(-1)^n\mathrm{e}^{x^2}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\mathrm{e}^{-x^2}.$$

即 $\mathrm{H}_1(x)=1$，$\mathrm{H}_2(x)=2x$ 等. 能量本征函数 ψ_n 的宇称性质 $\psi_n(-x)=(-1)^n\psi_n(x)$. 其中基态无节点，必为偶宇称态，又是最小不确定态. 此外，谐振子问题也可在动量表象中求解.

除了求解束缚态以外，还有一类问题即一维散射问题. 束缚定态的能量本征值一般由方程结合边界条件、波函数连接条件确定，是分立的，而且束缚态本身满足平方可积条件，一定是可归一的. 散射态则一定不可归一，其能量本征值是连续的 (取决于入射粒子). 设粒子从势垒左边入射，其波函数 ψ 的渐近行为如下给出

$$\psi(x)=\begin{cases}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1x}+r\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1x}, & x\to-\infty,\\ s\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_2x}, & x\to\infty,\end{cases}\tag{0.17}$$

其中 k_1、k_2 分别为入射波、透射波的波矢，反射振幅 r、透射振幅 s 根据具体的势函数求解. 透射系数、反射系数分别为

$$R=\left|\frac{j_r}{j_i}\right|=|r|^2,\quad S=\left|\frac{j_s}{j_i}\right|=|s|^2\frac{k_2}{k_1}.\tag{0.18}$$

能量小于势垒高度的粒子仍可以以一定几率透射，称为隧道效应. Gamov 就是利用隧道效应解释了放射性核素的 α 衰变. 对于如下方势垒

$$V=\begin{cases}V_0, & 0<x<a,\\ 0, & x\leqslant 0,\ x\geqslant a.\end{cases}$$

当 $a\sqrt{2\mu(V_0-E)} \gg \hbar$ 时，透射系数为

$$T = \exp\left\{-\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2\mu(V_0-E)}\right\}.$$

此式是扫描隧道显微镜的工作原理.

$\delta-$ 势的势函数为 $V(x)=\gamma\delta(x)$，其中 γ 为一常数量. 根据波函数的几率解释以及波函数满足的 Schrödinger 方程，$x=0$ 处波函数连接条件为波函数连续，而波函数导数满足

$$\psi'(0^+)-\psi'(0^-)=\frac{2\mu\gamma}{\hbar^2}\psi(0).$$

δ 势阱 (γ 为负) 存在惟一的一个束缚态. $\delta-$ 势问题的求解也可在动量表象中进行. 另外，如果求解 δ 势的散射问题，则可知其透射振幅在 k 复平面正虚轴上的极点对应于 δ 势阱的束缚态. 其实，束缚态在散射振幅的极点里，这是一个普遍的事实.

0.4 力学量用算符表达与表象理论

Heisenberg 等人创立矩阵力学时对力学量引入了算符. 我们求力学量的平均值时也引入了算符. 波函数是对体系状态的完全描述，所描述的态的性质也是由它在力学量算符作用下的行为所反映. 算符代表对态 (波函数) 的一种运算，是量子力学中又一基本元素.

对于算符的乘积，一般存在谁先谁后的次序问题. 例如对于算符 A、B，一般 $AB\neq BA$，其差别 $[A,B]=AB-BA$ 称为对易式 (commutator). 对易式是量子力学中一种常见的计算. 对易式满足的基本恒等式

$$\begin{aligned}
&[A,B+C]=[A,B]+[A,C],\\
&[A,BC]=B[A,B]+[A,B]C,\\
&[AB,C]=A[B,C]+[A,C]B,\\
&[A,[B,C]]+[B,[C,A]]+[C,[A,B]]=0.
\end{aligned}$$

最后一个等式称为 Jacobi 恒等式.

一个算符 A 若对任意的态 ψ_1、ψ_2 和任意的复数 c_1、c_2，满足

$$A(c_1\psi_1+c_2\psi_2)=c_1A\psi_1+c_2A\psi_2,$$

则称其为线性算符. 一个算符若它的 Hermite 共轭等于本身，则称为 Hermite 算符. Hermite 算符 A 满足 $A^\dagger=A$，即对于任意的态 ψ 和 ϕ 均有

$$(\varphi,A\psi)=(A\varphi,\psi).$$

由此可知 Hermite 算符的平均值是实数. 算符的本征态 (eigenstate) 指的是在该态下算符取确定值的状态，而这个确定的值称为本征值 (eigenvalue). 因此 Hermite 算符的本征值必是实数. 反过来，若一个算符在任意态下的期望值都是实数或者只有实的本