高等学校教学用书·理论物理基础系列教程

6

量子力学（下）

〔日〕中嶋貞雄 著

金重铁 等译

王锡绂 校

北京师范大学出版社

高等学校教学用书

理论物理基础系列教程

第六册

量子力学（下）

〔日〕中嶋貞雄　著

金重铁　译

王锡绂　校

北京师范大学出版社

高等学校教学用书
理论物理基础系列教程
第 六 册

量子力学（下）

〔日〕中嶋貞雄 著
金重铁 译
王锡绂 校

北京师范大学出版社出版
新华书店总店科技发行所发行
北京通县燕山印刷厂印刷

开本：850×1168 1/32 印张：6.75 字数：165 千
1989年4月第1版 1989年4月第1次印刷
印数：1—2 000

ISBN 7-303-00432-7/O·93
定价：1.70元

理论物理基础系列教程

（共10册）

1 力学

2 分析力学

3 电磁学（上）

4 电磁学（下）

5 量子力学（上）

6 量子力学（下）

7 热力学与统计力学

8 弹性体与流体

9 相对论

10 物理用教学

目　　录

第八章　量子力学的基本原理

微观力学系统的量子状态用波函数表示，如果已知波函数就可以把有关全部物理量的统计信息得出来．阐述为此所必要的基本原理乃是本章的目的．

在编写本书时考虑到了下述情况，即对于在原子物理学课程中或以其他方式学过本书上册内容的读者以及只想了解量子力学的抽象结构的读者，可以直接从这一章开始学习．

§8-1　量子力学状态与波函数

首先简略地将在上册最后一章（第七章）中阐述的量子力学基本思考方法作一概括．在这里虽然是选电子作为微观力学系统的代表来阐述，但取代电子而选用正电子或是中子，下面的一般论述也依然通用．

量子力学与经典力学的根本差异之一，表现在所谓力学系统的**状态**这一概念上．在经典力学的粒子情况，基本的物理量是粒子的位置和动量．能量、角动量以及其它所有的物理量都可表为位置和动量的函数，只要给出位置和动量就可定出所有物理量的值．就是说，在经典力学中粒子的状态以位置与动量来决定．

与此相反，在量子力学中力学系统的状态用波函数表示．取电子为例，与经典力学的粒子一样，对于电子也可研究其位置和动量，且可分别进行测定．虽然在这个意义上电子可以看作是粒子，但为说明电子在另一方面显示的波动性，有必要认为电子的状态以波函数表示．

波函数Ψ一般是空间坐标x, y, z和时间t的的函数．但在本章中为使数式尽量简单明了，而考察电子限制在x轴上运动，Ψ是x与t的函数的情况．再者假定c是不等于0的复常数，则$c\Psi$与Ψ表示同一状态．就是说，波函数具有常数因子的任意性．

如果$c=0$，则$c\Psi$在任何地方都等于0($\Psi\equiv 0$)，不存在对应于这种函数的状态．实际上，若电子处于以Ψ表示的状态，在t时刻测定电子的位置，测定值处于x与$x+dx$之间的几率一般比例于

$$|\Psi(x,t)|^2 dx \tag{8.1}$$

如果到处Ψ为0，这个存在的几率也就变成0．

叠加原理　在量子力学中即使确定了表示电子状态的Ψ，在测定物理量的时候所得的测定值一般也是不确定的．更正确地说，准备很多个处在用同一Ψ表示的状态中的电子样品，例如对各样品测定其位置，则每个样品得到不同的测定值（这种样品的全体叫作**系综**）．理论上能作到的预言仅是得到各种测定值的几率．

因为这个几率可以用Ψ表示，所以在所求的物理量是位置时，由公式（8.1）给出．一般物理量情况下的公式在 §8-3中说明．

这样，虽然Ψ是关于物理量的统计信息承担者**几率幅**这一抽象的量，但是，它称作波函数是因为在经典理论中作为波动特征的叠加原理（§1-5）对Ψ也合适的缘故．就是说，Ψ_1,Ψ_2各为表示量子状态的波函数，c_1，c_2是复常数时，其线性组合

$$\boxed{\Psi=c_1\Psi_1+c_2\Psi_2} \tag{8.2}$$

也是表示量子状态的波函数（Ψ到处为0的情况除外）．

例题1　试就 §6-7习题1的波函数

$$\Psi_k(x,t)=e^{i(kx-\omega_k t)}, \quad \omega_k=\frac{\hbar}{2m}k^2$$

应其叠加 $\Psi(x,t)=\Psi_k(x,t)+\Psi_{-k}(x,t)$

比较 $|\Psi_k|^2$ 与 $|\Psi|^2$.

［解］ 设θ为实数，因为 $e^{i\theta}=\cos\theta+i\sin\theta$, $|e^{i\theta}|^2=\cos^2\theta+\sin^2\theta=1$，所以 $|\Psi_k|^2=1$，另一方面

$$\Psi=e^{-i\omega_k t}(e^{ikx}+e^{-ikx})=2e^{-i\omega_k t}\cos kx$$

$$|\Psi|^2=4\cos^2 kx=2+2\cos 2kx$$

最右侧的第一项是 $|\Psi_k|^2$ 与 $|\Psi_{-k}|^2$ 的和，第二项表示 Ψ_k 与 Ψ_{-k} 的干涉效应（ §7-2）.

一般由n个波函数$\Psi_1,\Psi_2,\cdots\Psi_n$及$n$个复常数$c_1,c_2,\cdots c_n$，所组成的线性组合

$$\Psi=c_1\Psi_1+c_2\Psi_2+\cdots+c_n\Psi_n \tag{8.3}$$

也是表示量子状态的波函数．如前所述，除去Ψ在各处为0（$\Psi\equiv0$）的情况．若$\Psi\equiv0$只在$c_1=c_2=\cdots c_n=0$的情况下成立，则n个波函数$\Psi_1,\Psi_2\cdots\Psi_n$称为互相**独立的**．$n$个波函数中的任何一个都不能表示为其余的$n-1$个波函数的叠加．

例题2 当三个波函数Ψ_1,Ψ_2,Ψ_3互相独立时，试指出Ψ_3不能表示为Ψ_1,Ψ_2的叠加．

［解］ 令b_1、b_2为复常数，若写成$\Psi_3=b_1\Psi_1+b_2\Psi_2$，在(8.3)中$n=3$，$c_1=b_1$，$c_2=b_2$，$c_3=-1$ 时可使其成立，就违反三个波函数是互相独立的假定．

§8-2 物理量与算符

下面暂时着眼于特定时刻的，例如$t=0$时刻的波函数，因而将波函数看成是x的函数．将它写成$\Psi(x,0)=\Psi(x)$的形式．

力学系的状态以波函数表示，另一方面，量子力学的物理量以算符表示．算符作用在任意波函数上，而将它变换为另一（同时刻的，但一般是表示其它状态的）波函数．

着眼于以算符A表示的物理量，将A作用在波函数ψ上而得到的波函数写作$A\psi$. 若A是表示位置的算符，则$A\psi$是坐标x乘在ψ上的函数$x\psi$. 若A是表示动量的算符，则$A\psi$是$\frac{\hbar}{i}(\partial\psi/\partial x)$(§7-5). 其中$\hbar$是普朗克常数$h$除以$2\pi$. 在一般物理量的情况下，将在经典力学中那个物理量的表达式写成位置x及动量p_x的函数，并象

$$x \to x\times, \quad p_x \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \tag{8.4}$$

那样用算符置换即可. 这时，严密地说，有必要定义算符的和与积.

算符的和 两算符A与B之和$A+B$用下式定义:

$$(A+B)\psi = A\psi + B\psi \tag{8.5}$$

左侧是将和$A+B$作用在波函数ψ上而得到的波函数. 因为右侧等于$B\psi+A\psi$，所以$A+B=B+A$，这点要注意.

算符与常数之积 常数c与算符A的积cA以

$$(cA)\psi = c(A\psi) \tag{8.6}$$

定义之. 左侧是将积cA作用在ψ上得到的波函数，右侧是波函数$A\psi$的c倍.

算符之积 算符A与算符B的积AB以

$$(AB)\psi = A(B\psi) \tag{8.7}$$

定义之. 左侧是将积AB作用在ψ上得到的波函数，右侧是先将B作用在ψ上得到波函数$\chi=B\psi$，再将A作用于其上而得的波函数$A\chi$. 和数的情况一样，同一算符的积写成$AA=A^2, AAA=AA^2=A^2A=A^3\cdots$等.

例题1 写出表示简谐振子能量的算符.

[解] 根据(3.13)，在经典力学中简谐振子的哈密顿函数为

$$H = \frac{1}{2m}p_x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

根据(8.4)p_x^2与动量算符的平方相对应，写成将它作用在波函数ψ上的形式

$$\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)^2\psi=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)=-\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$$

同理x^2对应着位置算符的平方，将它作用在ψ上则成为$x\times(x\times\psi)=x^2\psi$. 因此表示简谐振子能量的量子力学算符为

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2 \tag{8.8}$$

一般说来表示力学系统能量的算符称作哈密顿算符，用和经典力学相同的记号H表示. 在想使它和经典力学的哈密顿函数明显地区别开的情况下，有时写成$\hat{H}$或$\mathscr{H}$.

算符的不可对易性 虽然已作稍许严密的叙述，但在处理算符时没有过度神经质的必要. 几乎可以和处理普通数一样，只是有一个不可忘记的规则，那就是相乘的顺序不可任意变更. 一般算符之积AB不等于变更顺序之积BA. 这叫作算符的**不可对易性**. 如果例外地$BA=AB$，则称作两算符A与B**可对易**.

考察两个算符A与B是否可对易时，可以计算AB与BA之差. 这个差称作A和B的**对易子**，写成

$$\boxed{[A,B]=AB-BA} \tag{8.9}$$

例题2 选(8.9)中的A作为动量算符，B作为位置算符，试计算其对易子.

[**解**] 设ψ为任意的波函数，则

$$(AB-BA)\psi=AB\psi-BA\psi$$

取$A=\left(\frac{\hbar}{i}\right)\left(\partial/\partial x\right)$，$B=x\times$，则

$$AB\psi=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}(x\psi)=\frac{\hbar}{i}x\frac{\partial\psi}{\partial x}+\frac{\hbar}{i}\psi$$

$$BA\psi = x\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) = \frac{\hbar}{i}x\frac{\partial\psi}{\partial x}$$

$$(AB-BA)\psi = \frac{\hbar}{i}\psi$$

因为ψ是任意的，所以

$$\boxed{\left[x, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right] = \frac{\hbar}{i}} \tag{8.10}$$

将它称作位置与动量的**对易关系**.

由此可以明瞭，作为最基本的物理量，位置与动量的算符是不可对易的，量子力学算符的不可对易性都来源于（8.10）.表示不可对易程度的是普朗克常数，若设$\hbar=0$，则位置算符与动量算符就成为可对易了．这就是也可以认为非对易性是因为普朗克常数不为零而产生的.

线性算符　表示物理量的算符的又一个特征就是**线性**．所谓算符A是线性的，就意味着当在（8.2）形式的线性组合上作用时，等于由将A作用在Ψ_1, Ψ_2上而构成线性组合．就是说

$$A(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) = c_1A\Psi_1 + c_2A\Psi_2 \tag{8.11}$$

以动量算符为例，则

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) = c_1\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi_1}{\partial x} + c_2\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi_2}{\partial x}$$

对于位置算符也是同样的．因为两个线性算符A, B的和$A+B$，积AB也是线性算符，所以位置算符，动量算符或相乘或相加而得到的所有算符也都是线性的．作为例子可举简谐振子的哈密顿算符（8.8）.

例题3　试证明两个线性算符A，B之积是线性的.

［解］　$$BA(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) = B(c_1A\Psi_1 + c_2A\Psi_2) = c_1BA\Psi_1 + c_2BA\Psi_2$$

若使用将（8.11）中的Ψ_1, Ψ_2以$A\Psi_1, A\Psi_2$置换的式子，则可将

上式右侧第一行变为第二行.

习　　题

1. 试就三个算符A, B, C证明下列对易关系.

$$[A,BC]=[A,B]C+B[A,C]$$

$$[AB,C]=A[B,C]+[A,C]B$$

2. 利用上题导出如下的对易关系.

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2},x\right]=2\frac{\partial}{\partial x}$$

§8-3　物理量的观测值与算符的本征值

考察一个以线性算符A表示的物理量. 测定这个物理量，设测得观测值为a. 算符A与a之间有什么关系呢？回答是观测值a是算符A的本征值.

一般说来，当线性算符作用于波函数α上得到的波函数$A\alpha$等于原来的α乘以常数a时，常数a就是算符A的**本征值**，而函数α称作属于本征值a的**本征函数**.

$$A\alpha=a\alpha \tag{8.12}$$

但，α到处为零的情况除外. 就是说，设α是表示量子状态的波函数，将它叫作属于本征值a的**本征状态**.

设c是不为零的常数，如 §8-1所述，$c\alpha$表示与α相同的状态. 因此$c\alpha$也是属于相同本征值a的本征函数. 事实上这一点可以利用算符A是线性的，作如下证实.

$$A(c\alpha)=cA\alpha=ca\alpha=a(c\alpha)$$

总之，本征函数只是常数因子具有任意性，无论哪个都表示同一本征状态。若给α加上归一化条件

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\alpha(x)|^2dx=1 \tag{8.13}$$

则本征函数所具有的这个任意性就受到限制．尽管如此，b为任意实数时，还剩有**相因子**e^{ib}程度的任意性．这是因为若α已经归一化，注意到$|e^{ib}|^2=1$，则$e^{ib}\alpha$也是归一化的．

若想知道在测量以线性算符表示的物理量时能够得到什么样的本征值，则可通过本征值方程（8.12）而求得本征值a．一般地本征值有无限多个，有的呈跳跃值（**分立本征值**），有的是连续分布的（**连续本征值**）．

例题1 设电子的运动限定在x轴上长度为L的区间$-\frac{L}{2}<x<\frac{L}{2}$内，波函数满足周期的边界条件$\psi(-L/2)=\psi(L/2)$．试求动量算符的本征值及归一化的本征函数．

［解］ 设C、k为常数，则

$$\psi_k(x)=Ce^{ikx}$$

是属于动量算符的本征值为$p_x=\hbar k$的本征函数．

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi_k(x)=C\hbar ke^{ikx}=\hbar k\psi_k(x)$$

因为周期的边界条件意味着x增加L之时波函数就返回原有值

$$e^{ik(x+L)}=e^{ikx}e^{ikL}=e^{ikx},\quad e^{ikL}=1$$

满足此式的k取如下的跳跃值．

$$k=\frac{2\pi}{L}n \qquad (n=0,\pm1,\pm2,\pm3,\cdots) \tag{8.14}$$

与此相对应，动量算符的本征值$p_x=\hbar k$也取跳跃值（分立本征值）．**量子数**n每增加1，动量算符的本征值增加

$$\varDelta p_k=\frac{2\pi}{L}\hbar \tag{8.15}$$

在$L\to\infty$的极限时，p_x就成为取任意实数值（连续本征值）．

因为（8.14）是实数所以$|e^{ikx}|^2=1$，ψ_k的归一化条件如下

$$1=\int_{-L/2}^{L/2}|\psi_k|^2dx=|C|^2\int_{-L/2}^{L/2}dx=|C|^2L$$

若b为任意实数，满足上式的C由$C=e^{ib}/\sqrt{L}$给出．作为最简单的答案选取$b=0$，则得到归一化的本征函数

$$\psi_k(x)=\frac{1}{L^{\frac{1}{2}}}e^{ikx} \tag{8.16}$$

设表示物理量的线性算符A具有分立本征值$a_1, a_2, \cdots, a_n, \cdots$，则将属于第$n$个本征值$a_n$的归一化本征函数写成$\alpha_n(x)$．

$$\boxed{A\alpha_n=a_n\alpha_n} \tag{8.17}$$

测量以A表示的物理量时的观测值和本征值的关系由如下基本原理给出．

基本原理Ⅰ　力学系统处于用第m个本征函数表示的状态时，测量以算符A表示的物理量，则作为观测值确切地得到本征值a_m．就是说，可以认为以A表示的物理量在此本征状态下具有确定值a_m．

例如，(8.16)表示动量具有确定值$\hbar k$的状态．

基本原理Ⅱ　力学系统处于以一般的波函数ψ表示的状态时，若测量以A表示的物理量，则作为观测值也得到本征值$a_1, a_2, \cdots a_n, \cdots$中的某一个．但不可能确切地预言得到那一个本征值，量子力学只给出作为测定值而得到第n个本征值a_n的几率w_n．

基本原理Ⅲ　这个几率由如下公式给出．

$$\boxed{w_n=|\langle\alpha_n|\psi\rangle|^2} \tag{8.18}$$

但，无论是表示力学系状态的ψ还是本征函数α_n都是归

一化的．再者将α复共轭写为α^*，而导入符号

$$\langle \alpha_n | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \alpha_n^*(x)\psi(x)dx \tag{8.19}$$

（参考下节）．

因为将第m个归一化本征函数α_m选为Ⅱ中的ψ也是可以的，另一方面根据Ⅰ，这时的w_n如果$n=m$，则它应该等于1，如果$n \neq m$则它应该等于0．就是说，为使Ⅰ与Ⅱ不相矛盾而要求本征函数必须满足如下条件：

$$\langle \alpha_n | \alpha_m \rangle = \delta_{mn} = \begin{cases} 1 & (m=n) \\ 0 & (m \neq n) \end{cases} \tag{8.20}$$

$m=n$的情况，不外乎是本征函数的归一化条件．

$$\int_{-\infty}^{\infty} \alpha_m^* \alpha_m dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\alpha_m|^2 dx = 1$$

在$m \neq n$的情况下，有

$$\int_{-\infty}^{\infty} \alpha_m^* \alpha_m dx = 0 \tag{8.21}$$

这称为本征函数的**正交条件**．为什么这样称谓呢，其道理在下节中说明．

例题2　对在有限区间内动量算符的本征函数(8.16)而言，试证实正交归一性相当于(8.20)．

[解]　(8.16)的归一化问题已由例题1表示．在$k \neq k'$的情况下：

$$\langle \psi_k | \psi_{k'} \rangle = \int_{-L/2}^{L/2} \psi_k^*(x)\psi_{k'}(x)dx$$

$$= L^{-1}\int_{-L/2}^{L/2} e^{i(k'-k)x}dx$$

将(8.14)及$k'=2\pi n'/L$代入，进行积分，则

$$\langle \psi_k | \psi_{k'} \rangle = \frac{1}{2\pi i(n'-n)}[e^{i\pi(n'-n)} - e^{-i\pi(n'-n)}]$$