




PPU

北京大学物理学丛书
The Series of Advanced Physics
of Peking University

量子力学原理

王正行



北京大学出版社 PEKING UNIVERSITY PRESS

图书在版编目(CIP)数据

量子力学原理/王正行编著. —北京:北京大学出版社,2003.5
(北京大学物理学丛书)

ISBN 7-301-06226-5

I. 量… II. 王… III. 量子力学 IV. O413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2003)第 015447 号

书 名: 量子力学原理

著作责任者: 王正行

责任编辑: 顾卫宇

标准书号: ISBN 7-301-06226-5/O·0562

出版发行: 北京大学出版社

地 址: 北京市海淀区中关村 北京大学校内 100871

网 址: <http://cbs.pku.edu.cn> 电子信箱: zpup@pup.pku.edu.cn

电 话: 邮购部 62757515 发行部 62750672 编辑部 62752021

排 版 者: 高新特激光照排中心 62637627

印 刷 者: 北京大学印刷厂

经 销 者: 新华书店

850 毫米×1168 毫米 32 开本 9.75 印张 252 千字

2003 年 5 月第 1 版 2003 年 5 月第 1 次印刷

定 价: 20.00 元

未经许可,不得以任何方式复制或抄袭本书之部分或全部内容。

版权所有,翻版必究

《北京大学物理学丛书》 编委会名单

主任：高崇寿

副主任：(按姓氏笔画排,下同):

刘寄星 秦旦华 聂玉昕

阎守胜 黄涛

编委：邹英华 邹振隆 宋菲君 吴崇试

林纯镇 俞允强 夏建白 曾谨言

韩汝珊 解思深 瞿定

常务编委：周月梅

内 容 简 介

本书主要讲述量子力学基本原理. 第一章从物理上阐述量子力学的基本原理, 着重讲清数学结构与物理原理的联系, 以及物理原理与经验事实的联系, 把测不准原理作为一条最基本的物理原理, 强调了观测量的测量和测不准的概念在量子力学中的重要性. 第二章表象理论, 给出了广义坐标表象和 Pauli-Podolsky 量子化规则. 第三章讨论基本观测量和对称性, 给出了不能把时间作为算符来处理的 Pauli 定理的证明. 第四章讨论各种常用的动力学模型, 其中宏观模型和非厄米的 Hamilton 算符是一般量子力学书籍中不易找到的. 第五章 Dirac 方程作为第四章的继续, 讨论一种相对论性的动力学模型, 从无质量的 Weyl 方程开始, 以一种更物理的方式来引入 Dirac 方程. 鉴于中微子在粒子理论中的重要性, 这里对 Weyl 方程的物理作了较详细的讨论. 第六章形式散射理论没有做非相对论近似, 结果对于相对论性高能散射过程也适用. 第七章二次量子化理论, 着重讨论了二次量子化与场的量子化的关系. 第八章讨论场的量子化, 强调了量子场论是量子力学运用于具有无限自由度系统的结果, 并根据微观因果性原理讨论了自旋与统计的关系和场的定域性问题.

本书可供对于量子力学的物理原理和理论结构有兴趣的读者参考, 可以用作研究生、高年级本科生高等量子力学课程的教材或者一般本科生量子力学课程的参考书.

前 言

物理学是自然科学的基础,是探讨物质结构和运动基本规律的前沿学科.几十年来,在生产技术发展的要求和推动下,人们对物理现象和物理学规律的探索研究不断取得新的突破.物理学的各分支学科有着突飞猛进的发展,丰富了人们对物质世界物理运动基本规律的认识和掌握,促进了许多和物理学紧密相关的交叉学科和技术学科的进步.物理学的发展是许多新兴学科、交叉学科和新技术学科产生、成长和发展的基础和前导.

为适应现代化建设的需要,为推动国内物理学的研究、提高物理教学水平,我们决定推出《北京大学物理学丛书》,请在物理学前沿进行科学研究和教学工作的著名物理学家和教授对现代物理学各分支领域的前沿发展做系统、全面的介绍,为广大物理学工作者和物理系的学生进一步开展物理学各分支领域的探索研究和学习,开展与物理学紧密相关的交叉学科和技术学科的研究和学习提供研究参考书、教学参考书和教材.

本丛书分两个层次.第一个层次是物理系本科生的基础课教材,这一教材系列,将在几十年来几代教师,特别是在北京大学教师的教学实践和教学经验积累的基础上,力求深入浅出、删繁就简,以适于全国大多数院校的物理系使用.它既吸收以往经典的物理教材的精华,尽可

能系统地、完整地、准确地讲解有关的物理学基本知识、基本概念、基本规律、基本方法；同时又注入科技发展的新观点和方法，介绍物理学的现代发展，使学生不仅能掌握物理学的基础知识，还能了解本学科的前沿课题和研究动向，提高学生的科学素质。第二个层次是研究生教材、研究生教学参考书和专题学术著作。这一系列将集中于一些发展迅速、已有开拓性进展、国际上活跃的学科方向和专题，介绍该学科方向的基本内容，力求充分反映该学科方向国内外前沿最新进展和研究成果。学术专著首先着眼于物理学的各分支学科，然后再扩展到与物理学紧密相关的交叉学科。

愿这套丛书的出版既能使国内著名物理学家和教授有机会将他们的累累硕果奉献给广大读者，又能对物理的教学和科学研究起到促进和推动作用。

《北京大学物理学丛书》编辑委员会

1997年3月

燕山苍苍，海水泱泱，
先生之风，山高水长。

——谨以本书纪念王竹溪先生

自 序

记得在给 82 级本科生讲量子力学时,有位学生问我:“老师,你为什么照着书讲?”这真是个很好的问题,因为它反映了对于量子力学的讲授和理解现状.大学物理系的学生恐怕都知道这样一句话:学会了用量子力学解题,不一定就懂得了量子力学.而在老师当中则流传着另一句话:你教你的量子力学,我教我的量子力学,每个人都可以有他自己的量子力学.当然这句话说得有点过头,不过在实际上关于量子力学讲法的版本也确实太多,而许多对量子力学原理解释上的争论在最后也都是不了了之.到图书馆里去看看理论物理的教材和参考书,无论是国外还是国内的,都数量子力学的种类多.比较一下,对于具体问题的讲法,比如角动量、谐振子、氢原子、分波法、Born 近似、微扰论,等等,都各有特色.而对于基本原理的讲法,也是见仁见智各有千秋.

对基本原理讲法上的差别,在一定程度上体现了作者对基本原理理解的差别.这种理解上的差别,则在很大程度上取决于作者理性思维的不同模式、风格与偏爱.从形式上说,量子力学就是提出了一些基本假设,然后进行逻辑推理和数学演绎,最后得到了与实验观测一致的结果.对许多人来说,推理和演绎的结果与实验观测一致,这就足够了.对具体问题的解法和其中的技巧更能吸引他们的关注.可是这并不能使我满足.这些基本假设的物理基础和提出这些基本假设的想法和方式更能引起我的兴趣.为什么能够用线性空间的矢量来表示量子态?为什么不用测量值而要用一个算符来表示观测量?为什么观测量的测得值等于算符的本征值?观测量平均值的公式是怎么想出来的?为什么动量算符可以表示成

对坐标的偏微商? 等等, 等等. 可以告诉我这是需要先验地接受的基本假设, 可以告诉我所有的实验测量都证实了这些基本假设, 可以告诉我这个理论的逻辑体系是多么严密和完美, 等等, 等等, 可是我仍然有这些问题.

感谢王竹溪先生, 我和徐至展跟他做研究生时, 他让我们花了一年的时间研读 Dirac 的《量子力学原理》. 在这一年里, 他每个星期花一个下午解答和讨论我们的问题. 一个星期里, 我把一个一个的问题写成小纸条夹在 Dirac 的书里. 在那一个下午, 我又把那些纸条一个一个地从书里抽去. 特别是, “Dirac 的书完全是讲物理, 不是讲数学”, 先生一语点破我的谜团, 给了我读懂 Dirac 的书的钥匙. 我终于从 Dirac 的书里, 从先生那里, 找到了问题的答案, 获得了满足.

我在本科三年级已经学过一遍量子力学, 在这以后的课程几乎都在用量子力学, 到五、六年级又学了高等量子力学、量子场论和量子场论中的泛函分析这三门课. 研究生的入学考试科目就有高等量子力学和量子场论. 到了研究生一年级又要我念量子力学, 刚开始我真不理解. 一年下来, 我才懂得了它对我的意义, 感觉到对量子力学的理解爬上了一个新的台阶. 只有像先生这样伴随着量子力学的诞生和发展学习量子力学、与 Dirac 为好朋友而把握了量子力学精髓的大物理学家, 才能高屋建瓴地给我们做出这个使我终生受益的安排.

在那一年的时间里, 我们在先生指导下几乎是逐句逐段地读 Dirac 的书. 一次在讨论量子化条件时, 先生指出 Dirac 的书只给出了 Descartes 平直坐标中的结果, 而先生早年在西南联大讲授量子力学时, 曾着力讨论过曲线坐标中的量子化问题. 严格地说, 只在平直坐标中表述的理论, 还不是完整的普遍理论. 所以这实在是量子力学中一个极重要的基本问题 (见本书第二章 § 2.5, 第四章 § 4.5). 在 1978 年庐山全国物理学年会上, 杨振宁先生在演讲中也提到听先生讲过这个问题, 并且说, 他当年听课的笔记本是自

己用茅草纸订成的,一直保存着,经常翻阅,获益匪浅.前些年国内对这个问题热了一阵,我写了篇文章寄给 *American Journal of Physics* 发表,引起国外一些同行的兴趣,因此还结识了苏格兰圣安德鲁斯大学研究量子力学基础的温奇亢先生,而我的兴趣就是来源于 40 多年前先生的这一席议论.

我跟先生做研究生的前一年,在美国通用电器公司获得工程师职位不久的北欧青年 Giaever 业余时间听量子力学课,到公司实验室做实验验证量子力学的隧道效应,发现了超导体的隧道效应. Bardeen 提出了一个解释这种效应的物理模型,芝加哥的 Cohen, Falicov 和 Phillips 把它写成了二次量子化表象的模型 Hamilton 量(见本书第七章 § 7.3).当时正在剑桥做研究生的 Josephson,则用这个模型 Hamilton 量计算二级微扰,写了一篇关于超导体隧道结(现称 Josephson 结)的短文,预言了一个后来以他的名字命名的重要效应,因此与超导体隧道效应的发现者 Giaever 和半导体隧道效应的发现者江崎玲于奈同获 1973 年诺贝尔物理学奖. Caltech 的 Feynman 也紧跟着在他著名的物理学演讲中写出了关于 Josephson 结的 Feynman 方程(本书引进 Dirac 方程的方法,就是模仿 Feynman 的这个做法,见本书第五章 § 5.2).这些开拓固体微结构领域的先驱性工作,是发生在短短两三年中的事. Falicov 后来做 U. C. Berkeley 的系主任,曾开玩笑说:“我们本来可以算到二级微扰,诺贝尔奖就是我们的了.”Cohen 等人的模型 Hamilton 量确实是理解超导体隧道效应的一个恰当的基础.当时我想研究一下 Cohen 等人的模型 Hamilton 量的理论基础,以此来写我的研究生毕业论文.

我在研究的期间,看到美国某名校的一位作者发表在 *Physical Review* 上的一篇论文,与我思路相同,声称给出了 Cohen 等人的模型 Hamilton 量的理论基础.我想完了,这下要另换题目了.先生听我说完未置可否,只是让我把那篇文章留下,等他看完再说.这期间我相当沮丧,再去见先生时,出乎我的预料,先

生并没有让我换题目,而是叫我安心继续研究.先生告诉我,那篇文章是错的,并且证明给我看.原来,那篇文章所用的左边态和右边态分别构成完备组,同时用它们做表象的基矢就带来任意性,从而使得整个理论都站不住脚(参考本书第二章 § 2.2).我这才知道,原来发表在权威刊物上的文章也不一定靠得住,而且甚至还会在量子力学基本理论的把握和运用这样最基础的问题上出错.我后来在变分法的框架内解决这个问题,用了 Löwdin 和 Боголюбов 先后运用于分子结构和金属理论的正交化变换(见本书第二章 § 2.2),发现在展开的级数中取到第二项就是 Cohen 等人的模型 Hamilton 量,三次以上的项太小,实验观测不到.

Josephson 的那篇文章我当时看过.他预言的可观测效应与隧道结两边电子波函数的相位差有关,我觉得很玄,但没有深入想下去.“文化大革命”后期我从汉中来北京出差,顺便去看王竹溪先生.先生问我:“你做研究生时看 Josephson 的文章,有没有发现什么问题?”听了我的回忆,先生告诉我,杨振宁先生回来看先生时,曾告诉先生,为了弄清这个问题,杨先生曾专门把 Josephson 请到石溪讲了两天.这时我才恍然领悟,我轻易地放过了一个很深层次的问题(后来在 80 年代中期,杨先生在中国科技大学研究生院作题为《相位与近代物理》的系列演讲,曾专门谈到这个问题,参考本书第五章 § 5.4 中的定域规范变换).尚可自慰的是,我一直还记得这是一个问题,而这则是得益于王竹溪先生对我的教诲:在学问的研习中会遇到各种问题,我们不可能立即解答其中的每一个,但要弄清哪些是问题,记下存疑,不能稀里糊涂.

量子理论中最玄奥的莫过于测量理论了(见本书第一章 § 1.5).王竹溪先生曾经对于测量理论作过深入的思考和探索.“文化大革命”后期,先生告诉我,他准备写一本关于量子力学的专著.我听了十分兴奋,以为又可以从先生的这本书里继续跟先生学习量子力学,跟随着先生的引导来深入探讨这类重大的基本理论问题了.没有想到,“文革”的折腾不仅消磨了我的青春,更夺去了

先生的生命. 文革期间先生被驱使到江西鲤鱼洲牧牛时不幸染上肝炎, 在当时那种气氛下没有给以确诊和及时治疗, 以致“文革”结束不久就与世长辞了. (有兴趣的读者请参阅拙文《怀念王竹溪先生》, 载于 1993 年第一期的《物理》杂志, 或者《我在北大跟王竹溪先生做学生》, 载于萧超然主编的《巍巍上庠, 百年星辰——名人与北大》, 北京大学出版社 1998 年出版.)

在量子力学的发现和创建时期以后, 很快就进入了它的应用和扩展时期. 量子力学从它的诞生地原子物理扩展到分子物理、固体物理、原子核物理、粒子物理以至于天体和宇宙, 并且成为整个化学和一系列高新技术的理论基础. 在这种情况下, 物理学家的精力和兴趣自然地集中到数学的技巧、群论的分析以及把量子力学运用于更多更复杂的问题的各种近似方法上. 当然, 量子力学的基本物理原理并没有被遗忘, 只不过不再是受关注的主体, 而是退居到基础的地位. 不过, 在 高能物理中的经验使我们越来越多地感觉到, 也许我们对于支配粒子结构的基本原理还没有完全的了解, 或许我们正面临着一个基本观念上的新的飞跃. 跟随着这种感觉, 我们回过头来花一些时间和精力温习和总结一下量子力学的基本物理原理, 也许是值得的.

1985 至 1989 年期间, 我教了几遍本科生的量子力学和研究生的高等量子力学, 使我有机会把量子力学的基本原理整理成文. 有几个具体问题, 已经写成文章发表在 *American Journal of Physics* 和《大学物理》杂志上, 或者写入了我的《近代物理学》教科书中. 本书也是在那时的一部分讲稿的基础上加工发展而成的.

量子力学的经典有四本: 关于量子力学的数学结构有 J. von Neumann 的 *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*, 关于量子力学的物理原理有 W. Heisenberg 的 *The Physical Principles of the Quantum Theory* 和 P. A. M. Dirac 的 *The Principles of Quantum Mechanics*, 此外还有 W. Pauli 的 *Die allgemeinen Prinzipien der Wellenmechanik*. 这四本书都是把主

要注意放在量子力学的物理原理上. Heisenberg 的整本书就是专门讨论测不准原理. Pauli 的书一上来就讲测不准原理和并协性, 并且用了很大篇幅讨论测量问题. 很多人看重 Dirac 的符号体系与数学规则, 而其实 Dirac 的书主要也是讲量子力学的物理原理, 他设计的符号体系与数学规则正是为了更清楚地表述物理的原理. 就连 von Neumann 的书, 虽然主题是讨论量子力学的数学基础, 也用了大量篇幅讨论测量问题特别是测不准原理.

但是, 一般的量子力学教科书主要着眼于尽快教会学生运用量子力学去解决实际问题, 大都是采取公理化的讲法, 把几条得自物理原理的计算规则作为基本假设告诉学生叫他们记住, 这样学生容易上手, 很快就能算题. 然后再回过头来讲表象理论. 但是, 这种讲法不可避免地给学生造成一个先入为主的印象, 认为量子力学的几条基本假设是某种先验的思辨的结果, 而不是微观物理学经验的结晶, 以至于有些学生虽然学会了用量子力学的数学规则解题, 却没有把握量子力学的物理原理, 产生了量子力学是玄学不好懂的看法. 所以, 要讲量子力学的物理原理, 我认为最好还是要从物理上把基本原理讲清楚, 不要采取公理化的讲法.

本书的基本内容都可以在 Dirac 的书中找到, 或者可以说是按照 Dirac 的方法和方式所作的推演. 同时, 本书把 Heisenberg 测不准原理真正放到了最基本的第一原理的位置. 测量是量子力学的一个核心概念, 测不准是量子力学的精髓, 我不赞成回避测量问题, 把测不准改成含糊其辞的不确定. 正像被誉为物理学之良心的 Pauli 所说, 量子力学的建立, 是以放弃对于物理现象的客观处理, 亦即放弃我们惟一地区分观测者与被观测者的能力作为代价的. 要想讲清量子力学的物理原理, 测量问题是不能含糊和回避的. 对于量子力学的理解, 我想 Planck 的被戏称为 Planck 原理的下面这一段话是恰当的: “一项重要的科学发明创造, 很少是通过逐渐争取和转变它的对手而获得成功的, Saul 变成 Paul 是罕见的事. 一般的情况是, 对手们逐渐故去, 成长中的一代人从一开始就熟悉

这种观念. 这是未来属于青年的又一实例.”(转引自关洪,《物理学史选讲》,高等教育出版社,1994年,19页. Saul 变成 Paul 是圣经典故,见《新约》使徒行传第九章.)

我希望本书有助于读者从物理的角度来思考量子力学,能对那些像我一样对量子力学基本原理感兴趣的读者有所助益. 当然,不仅是有许多问题的讲法不同于一般的量子力学教科书,本书有一些内容也是在一般的量子力学教科书中不易找到的,例如广义 Schrödinger 表象,非厄米的 \hat{H} , 宏观量子力学等. 这些内容都与量子力学的基本原理有直接的关系,而且在扩展量子力学的应用领域中起着不可或缺的作用. 特别是广义 Schrödinger 表象和宏观量子力学,对于工作在介观物理和固体微结构领域而不熟悉标准的正则量子化程序的读者,我相信是值得参考的.

在本书题材的选择、内容的安排和问题的讲法上,我都是着眼于量子力学的基本原理. 我不想涉及过多冗长的数学推演而冲淡对基本物理原理的阐述,希望即使是初学量子力学的读者也能从本书获益,所以略去了许多数学和技巧方面的重要论题或细节. 例如对于量子力学的实际运用十分重要的角动量理论和各种近似方法都没有讨论,对于量子力学的 Feynman 路径积分形式只讨论了它的物理原理方面,而略去了在数学上泛函积分的具体技巧和问题. 基于同样的考虑,也没有收入训练解题方法和技巧的例题和习题. 另一方面,本书选入了一些在一般的量子力学课程中不讲或没有时间讲的问题,例如前面提到的广义坐标表象和 Pauli-Podolsky 量子化规则,宏观量子力学模型,非厄米的 Hamilton 算符模型,以及 Schrödinger 波函数的单值性和关于不能把时间作为算符来处理的 Pauli 定理的证明等. 在量子力学基本概念和原理的引入和阐述方面,本书完全采取逻辑和系统的方式,而略去了对于帮助初学者的理解和掌握来说是十分重要和有益的历史发展和背景知识,只是对于测不准原理,在附录中介绍了 Heisenberg 提出它的经过. 此外,本书不是一部研究性质的专著,所以没有开

列详细的参考文献,只是按照同类书籍的惯例,在少数地方注明了出处.

受过理论物理科班训练的人,我相信大多数都和我一样,已经养成了一种习惯,在认真看一本书时,总要拿一支笔和一些草稿纸,跟着书上的公式推演一步一步算下去.要是能够不看书独立地把结果推出来,或者把书上省略了的步骤补上,那心中就油然而生一种成就感来,有说不出的喜悦.这样看书,我觉得有时也可以算是一种享受.再详细的书也会有许多省略,不可能把推演的每一步都写出来,否则这本书的厚度就要成倍地增加了.我在本科六年级时听胡宁先生的广义相对论,胡先生为我们选的课本是 Landau 的《经典场论》,苏肇冰先生给我们辅导. Landau 是思维敏捷的大物理学家,在他的书上省略就更多.我至今还记得,对于静止球对称场的 Christoffel 记号,他只是说了一句很容易从某某公式算出,就把结果写出来了.而他的这个“很容易”,让我花了半天多的时间.用这种方式读完一本理论物理的书,无形中已经做了许多道练习题.我和徐至展跟王竹溪先生念量子力学时,曾经问先生要不要做一些习题,先生说用不着,把书看懂了就行.而这个“看懂”,已经意味着要做许多道无形的练习题了.所以,我在写本书时,原来是想仿照 Dirac 的书,不准备出练习题的.还是本书的编辑提醒了我,也许会有老师选本书做教材,最好还是出一些练习题,以适合大多数读者和用者的需要.这使我改变了初衷.现在在书末给出的练习题,大都是本书正文中省略的部分,难易不齐,仅供各位读者参考.

广义地说,本书的成书过程可以追溯到我的学生时代,得到过许多老师、朋友和学生的帮助.除了王竹溪先生外,我还要感谢我的量子力学启蒙老师孙洪洲先生和指导我做大学本科毕业论文的胡慧玲先生,以及在做这篇论文时指点过我的胡宁先生与杨立铭先生.我大学本科毕业论文的题目是关于矩阵力学的建立,我就是从这篇论文开始进入量子力学领域的.我曾经跟曾谨言先生做过

一段时间的助教,得到不少指点和帮助.我与杨泽森先生和关洪先生有过许多关于量子力学的富有启发性的讨论.从与胡济民先生关于量子力学的合作和许多讨论中,我得到过很多启发和帮助.高崇寿先生、杨泽森先生、曾谨言先生、关洪先生和喀兴林先生先后送给我的他们的著作,在我写这本书的过程中都是反复翻阅和参考的.我要特别感谢技术物理系听过我的量子力学课的学生,和技术物理系与物理系听过我的高等量子力学课的研究生,他们的提问和各种反馈给我的信息,对我的帮助是具体而实际的.最后,我要感谢高崇寿先生与林纯镇先生对本书书稿的审阅和推荐.还有许多老师和朋友的帮助,请原谅我不可能在这里一一提到.

人生有限,学海无边.错误或不妥之处,望识者不吝指正.

2003年春作者自序于北京大学燕北园

目 录

自序	(1)
引言	(1)
第一章 基本原理	(7)
§ 1.1 态的叠加原理	(7)
§ 1.2 波函数的统计诠释	(10)
§ 1.3 Heisenberg 测不准原理	(12)
§ 1.4 运动方程	(22)
§ 1.5 测量问题	(33)
第二章 表象理论	(37)
§ 2.1 基矢和 δ 函数	(37)
§ 2.2 表象和表象变换	(41)
§ 2.3 Schrödinger 表象和动量表象	(49)
§ 2.4 居位数表象	(53)
§ 2.5 广义 Schrödinger 表象	(61)
§ 2.6 量子力学的经典极限	(64)
§ 2.7 量子力学的路径积分形式	(66)
第三章 基本观测量	(71)
§ 3.1 动量和能量	(71)
§ 3.2 角动量	(76)
§ 3.3 轨道角动量和自旋角动量	(83)