



数字化量子力学

DIGITIZED QUANTUM MECHANICS

纪哲锐 著



电子工业出版社
PUBLISHING HOUSE OF ELECTRONICS INDUSTRY
<http://www.phei.com.cn>

0413.1
10089/(CD)

数字化量子力学

纪哲锐 著

電子工業出版社

Publishing House of Electronics Industry

北京·BEIJING

内 容 简 介

本书主要讲解了量子序曲,量子主旋律,算符与群表示论,一维定态问题,三维定态问题,Dirac符号的现代版本和 MathCAD 版本,自旋,定态微扰论,含时微扰论——量子跃迁,弹性散射,多体问题,量子力学的若干基本问题,特殊函数及其他。

本书的特色可以概括为“公理化、数字化”,书中的“几何量子化”方案只需一个公理($h \cdot \nu = E = m \cdot c^2$)即可概括。用文字来表述就是:在微观领域,频率与能量等价。用 MathCAD 软件来计算量子力学问题,比人工计算更省力,效率也更高。本书既适合量子力学的初学者,也适合对量子力学的逻辑结构,以及对量子力学的数字化计算深感兴趣的师生。本书的核心思想是:量子化、对称、相位因子是 20 世纪理论物理学发展的主旋律。

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,侵权必究。

图书在版编目(CIP)数据

数字化量子力学/纪哲锐著. —北京:电子工业出版社,2012.5

ISBN 978-7-121-16944-1

I. ①数… II. ①纪… III. ①数字化—应用—量子力学—研究—高等学校—教材 IV. ①O413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2012)第 087583 号

责任编辑:赵娜 特约编辑:逯春辉

印 刷: 三河市鑫金马印装有限公司
装 订:

出版发行:电子工业出版社

北京市海淀区万寿路 173 信箱 邮编 100036

开 本: 787×1092 1/16 印张: 24.75 字数: 634 千字

印 次: 2012 年 5 月第 1 次印刷

定 价: 72.00 元(含光盘 1 张)

凡所购买电子工业出版社图书有缺损问题,请向购买书店调换。若书店售缺,请与本社发行部联系,联系及邮购电话:(010)88254888。

质量投诉请发邮件至 zltz@phei.com.cn,盗版侵权举报请发邮件至 dbqq@phei.com.cn。

服务热线:(010)88258888。

前 言

Einstein(爱因斯坦)并不认为量子力学是原理理论。物理学原理理论中的基本原理必须是物理命题、直觉上显然、逻辑上一致且满足审美要求的,这是我们从 Einstein 的相对论归纳出来的特征。如果把 Planck(普朗克)公式 $E=h \cdot \nu$ 和 Einstein 公式 $E=m \cdot c^2$ 简单地合并起来,便得到 PED 公式(1)及其简单推论(2):

$$h \cdot \nu = E = m \cdot c^2 \quad (1)$$

$$\nu = \frac{m \cdot c^2}{h} = \frac{\nu_0}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}}, \quad \nu_0 = \frac{m_0 \cdot c^2}{h} \quad (2)$$

谁也不会去争此公式的发明权。我们用 Planck-Einstein-De Broglie 的首字母 PED 来命名此公式,是因为 De Broglie(德布罗意)利用此公式得到了著名的 De Broglie 关系式。De Broglie 首先假定电子在其“自身静止的坐标系”中有某种频率为 ν_0 的固有振动:

$$\exp(i \cdot 2 \cdot \pi \cdot \nu_0 \cdot t') = \exp\left[i \cdot 2 \cdot \pi \cdot \nu_0 \frac{\left(t - \frac{v}{c^2} \cdot x\right)}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}}\right] = \exp\left[i \cdot 2 \cdot \pi \cdot \nu \left(t - \frac{v}{c^2} \cdot x\right)\right] \quad (3)$$

式(3)的第一个等号利用了熟知的 Lorentz(洛伦兹)变换;第二个等号利用了式(2)。有趣的是,左端代表电子在其“自身静止的坐标系”中有某种固有振动,而右端代表的是相速度为 $u = \frac{c^2}{v}$ 的 De Broglie 波。其中, v 是电子相对于观察者的速度。利用 $p = m \cdot v = \frac{m_0 \cdot v}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}}$ 和

$h \cdot \nu = E = m \cdot c^2 = m \cdot v \cdot u = p \cdot u$ 得到:

$$p = \frac{E}{u} = \frac{h \cdot \nu}{u} = \frac{h \cdot v}{\lambda \cdot v} = \frac{h}{\lambda} \quad (4)$$

还可以把式(3)写成更普遍的形式:

$$\exp\left(\frac{i \cdot 2 \cdot \pi}{h} \cdot p_\mu \cdot x_\mu\right) = \exp\left[\frac{i \cdot 2 \cdot \pi}{h} \cdot (p \cdot r - E \cdot t)\right] \quad (5)$$

请注意式(5)的相位是一个 Lorentz 标量,由此可以算出相速度 $u = \frac{E}{p} = \frac{m \cdot c^2}{m \cdot v} = \frac{c^2}{v}$ 。但如果认为相位是一个 Galileo(伽利略)标量,则算出来的相速度 $u = \frac{p^2}{2 \cdot m \cdot p} = \frac{v}{2}$ 。显然前者是正确的。特别要强调以下几点:

(1) 电子在其“自身静止的坐标系”中有某种固有振动,当且仅当动量不为零时才有 De Broglie 波,无振动则无波。所以固有振动是基本的——即使固有振动的频率目前无法直接测量(通常是测量波长后把频率算出来)。粒子图像与波动图像没有任何矛盾,粒子及其固有振动是基本的,波动的有无依赖于参照系。

(2) 一般而言,相位因子必须用复函数而不能用实函数表示,通常不把选用何种数学工具列为原理。

(3) 本书与传统量子力学教科书的重大区别是:传统量子力学教科书把 De Broglie 关系式 $p = \frac{h}{\lambda}$ 列为基本原理;而本书把 PED 公式 $h \cdot \nu = E = m \cdot c^2$ 列为基本原理,且是第一原理。

而 De Broglie 关系式 $p = \frac{h}{\lambda}$ 是它的直接推论。传统量子力学教科书有意隐瞒 De Broglie 原来的推导过程,是基于哥本哈根的哲学,认为:频率无测量意义所以无意义——但波长有意义因为波长能测量,这都是哥本哈根诠释的荒谬逻辑。可惜,De Broglie 终于抵挡不住 Pauli(泡利)的激烈批评而退缩了。

(4) 量子力学一开始就是关于原子和分子的理论。主导原子分子的相互作用是电磁相互作用。正是关于电磁相互作用的深入研究诞生了狭义相对论。所以,“非相对论性量子力学”一词,可能误导人们退回到非相对论的时空观——被误导的人推导出电子波的相速度 $u = \frac{v}{2}$ ^{①②}。相对论性量子力学是一个过渡性理论——它不是一个独立的理论,而仅仅是过渡到量子场论的跳板。所以,狭义的量子力学是指:能量转移远小于静能,从而粒子数守恒得以满足条件下的量子力学。最好把修饰语“非相对论性”去掉,如朗道采用书名《量子力学(非相对论性理论)》。

(5) 因为在量子力学的理论体系中并不需要力的概念,也不出现形如 $\frac{d}{dt}p = F$ 的动力学方程,所以也不需要轨道概念。深入分析表明:轨道概念与 Planck 公式 $E = h \cdot \nu$ 是不相容的。

我们的“第 0 原理”是“经典力学在它的有效范围之内是有效的”;因此量子力学应该与经典力学有正确的“联结”。通常称为“对应原理”,这个默认的原理可以不明说。

原理理论的优点在于,只要认可了原理,也就等于认可了它的一切推论——即使这些推论很出乎意料,也是可以理解的。如此一来,就可以回答绝大部分的争论。至于“经典力学的有效范围”如何界定,本书的结论是:量子力学与经典力学两个逻辑体系没有公共边界。两者的关系类似于非欧几何与欧氏几何的关系。在逻辑意义上不存在“Schrodinger 猫”。而实验物理学家宣布找到的“Schrodinger 猫”是指宏观叠加态。在量子力学的公理化体系中,不需要回答基于经典力学概念提出的疑问——例如电子的双缝实验中“电子走哪一条路?”的问题,因为错误的问题没有答案。

Leibniz(莱布尼茨)的梦想是把逻辑思维机械化。科学史家认为,Leibniz 的天才并不比牛顿逊色,可惜他的梦想在当时是不可能实现的。把逻辑思维符号化,符号的演算规则称为符号逻辑。“符号演算”可以手算,也可以用“逻辑电路”和“软件包”来实现。现代计算机是由数理逻辑学家和电子工程师合作实现的。计算机可以最大限度地节省一些常规的脑力劳动,腾出更多时间做创造性的思考。

本书把《MathCAD 14.0 中文版》作为《数字化量子力学》的写作和排版工具,同时也是符号运算和数值计算工具,它是《数字化经典力学》的姐妹篇。量子力学的计算任务占很大比重,且理论的准确表述也离不开数学语言。本书的风格是强调清晰的逻辑,以及详细的计算和推

① 张永德. 量子力学. (第二版). 科学出版社, 2008.

② 张永德, 物理学大题典(6)《量子力学》第 8 页, 算出的 De Broglie 波相速度等于 c^2/v , 表明张永德书自相矛盾。

导。《MathCAD 14.0 中文版》的强大功能可以直接从软件的求助信息中得到。会用低版本的用户也不难学会高版本的使用。

MathCAD 可以让一篇科技论文看起来与通常的科技论文一样,但其中的数学公式本身也是计算机指令,你一边读,它一边在快速计算,甚至不懂 MathCAD 而懂得相关科技的人员,也能看懂。当然,要完全看懂,就要懂得 MathCAD。

本书为什么选用 MathCAD 呢?作者在 2002 年出版的《MathCAD 2001 详解》一书中提到:尽管数学工具软件有多种,但 MathCAD 始终是雅俗共赏、最受欢迎的数学工具软件。其原因是 MathCAD 把强大的计算功能、图形与动画功能和易用性、可读性完美地结合起来。随着时代的进步,它又把多媒体功能、数据交换功能和 Internet 功能迅速推出。MathCAD 既是一个优秀的计算平台,又是一个优秀的写作平台,且把两者都发展到接近最佳状态。这样一种“一箭双雕”的成就,只有 MathCAD 做到了,其他的数学工具软件远达不到这种双优的境界。

MathCAD 程序的高度可读性使它可以发展为 MathCAD 电子书,包括光盘电子书和网络电子书。有数以百计的 MathCAD 电子书在网络上销售,覆盖了自然科学、工程技术和科学社会的众多领域。还有各种 MathCAD 增强包提供更强大的功能服务于专门的领域。在写作本书时我们考虑到,没有适当深度的例题难以显示 MathCAD 的威力,也难以起示范作用。

2007 年,我们迎来了《MathCAD 14.0 中文版》,从此,《MathCAD 14.0 中文版电子书》的写作就十分方便了。格式转换——转换为 HTML 电子书和 Word 电子书也非常方便。

电子书的优越性能包括成本优势,使之成为纸质出版物强有力的挑战者。而电子书的版权保护则依赖于对阅读器的控制,因为软件也需要良好的生态环境。应该把今天的生态环境保护意识,扩展到软件生态环境的层面上来。

从《数字化经典力学》到《数字化量子力学》,是计算方法的巨大飞跃。从实矢量到复矢量,从有穷维空间到无穷维空间,从常微分方程到偏微分方程,从矢量代数到旋量代数和对易子代数,从正交变换到么正变换,从惯性张量的对角化到本征方程,从对称性分析到群表示论,从决定论对非决定论,从 Poisson 括号到 Dirac 符号……MathCAD 能承受得了吗?

回答是:不容易做到。但 MathCAD 终于做到了,而且把一些建议送到 PTC 的开发部门。

在量子力学的纸质出版物中,全部是“文本区”。在《MathCAD 14.0 中文版电子书》中,则包括文本区、数学区和图形区,还有视频功能和超链接。大量的数学符号如何输入?数学符号不仅应该有视觉效果,在其背后还有符号逻辑,计算功能是依靠符号逻辑来支撑的。所以 MathCAD 不可能 100%采用传统的数学符号。

把量子力学数字化,是需要有创新的精神和能力的。例如:

- (1) 把计算的辛劳变成一种乐趣,一些常规的计算都由计算机迅速而准确地完成了;
- (2) 发现了传统教科书中的若干错误;
- (3) 传统教科书中从文献摘录的结果,可以用计算机直接算出;
- (4) 如果与传统的笔算做比较,仅仅“Copy+Paste”的剪贴操作,就可以节省大量的时间和纸张;
- (5) 图形功能和动画功能;
- (6) 由超链接所支持的知识的网络结构。

为了看明白本书,建议读者先学习 MathCAD 的预备知识。例如,MathCAD 有 4 种等号:逻辑等号(=)用于符号演算,赋值号(=:)用于给变量赋值或定义函数,普通等号(=)用于显示变量或函数的(已知)数值结果,箭头用于显示符号演算结果。举例如下:

$$F(x, y) = \sinh(x) \cdot \cos(y)$$

$$\sinh(x) \cdot \cos(y)$$

通过求导,得到

$$\cosh(x) \cdot \cos(y)$$

操作:光标定位到 x ,用菜单命令“符号学/变量/求导”,得到以上结果。

$$F(x, y) := \sinh(x) \cdot \cos(y)$$

操作: ? $F(x, y)$ + CTRL, 出现:

$$\frac{d}{dx} F(x, y) \rightarrow \cosh(x) \cdot \cos(y)$$

$$F(1, 2) = -0.489056259041$$

$$\sinh(1) = 1.175$$

$$\cos(2) = -0.416$$

操作:光标定位到右侧数字,菜单命令“格式/结果/小数位数,输入 12”,得到以上结果。

MathCAD 的语句从左到右、从上到下按顺序执行。结构化程序设计的三种结构:顺序结构、循环结构和选择结构,在 MathCAD 中仅出现前面两种,第三种出现在自定义函数中。难度最大的 If-Then-Else-EndIF 结构也仅出现在自定义函数中,所以程序的可读性很强。编写自定义函数是高级用户的工作。

从 MathCAD 14/15 中文版的菜单“帮助/Quicksheet/教程、快速模板、参考表格、用户指南、键盘快捷方式”可以找到足够的学习资料。

其中的参考表格包括:基本常数、周期表、导数公式和积分公式等。

用户指南共 165 页,有详细的操作指引,但例题简单;

教程很详细,包括许多中等难度的例题。其中的快速模板是精选的例题,很值得推荐;

其中的键盘快捷方式,建议读者打印下来,上机时可参考。

MathCAD Prime 是从零开始开发的崭新产品,界面非常友好,老用户可能会有短时间的不适应。最快的办法是把您熟悉的 MathCAD 14/15 程序转换为 MathCAD Prime 2.0 程序。转换的结果将会让你明白哪些功能属于新版本的弃用功能,转换过程会作适当处理。全局赋值语句无效,必须转换为局部赋值语句。文本区里面的数学表达式将转换为图形(非执行语句)。在文本区里面可以写数学表达式,但是程序执行时将跳过它。作图功能有明显改变:不可以写标题;支持带量纲的变量作图;更灵活的比例缩放。尽管新版本有许多弃用功能(弃用函数清单共 4 页),但是新的特色仍然很突出:操作特别方便快捷——但对硬件的要求也更高。

作 者

2011 年 10 月

特殊符号的键盘指引

这里讨论对于量子力学特别常用或特别有用的符号;以及《Mathcad 14.0 中文版》没有提供而只能借用的符号。

(1) 文字下标与矢量下标

有文字下标的变量名,以及没有任何下标的变量名,均代表标量。而有 1 个矢量下标的变量名具有矢量属性(是矢量的元素);有 2 个矢量下标的变量名具有矩阵属性(是矩阵的元素)。矢量是 1 阶张量,矩阵是 2 阶张量,标量是 0 阶张量。求解模块“Given—Find”里面的变量名只可以是标量名,否则会出错。文字下标只能是单一下标。

(2) 方括号与圆括号。

方括号特别用来表示对易子;用 CTRL+Shift+J 输入。然后输入逗号,得到[■,■]。然后填入标量名。方括号也适合表示化学的分子式,例如[H₂·O]。

如果圆括号里面的符号超高,例如 $\left(\frac{x^n}{n!}\right)$,也会自动显示为方括号,但含义设有区别。

(3) 微商与偏微商。把光标定位在微商符号并按右键,从弹出菜单中选择偏微商即可。重积分:把光标定位在被积函数的位柄上,再按积分号。

(4) 可以利用梯度算符计算梯度。

(5) 只需要记住特别常用的快捷键。其余的可用“视图/工具栏/微积分”等从可收放的菜单点击输入。

(6) 平均值的记号。MathCAD 用单横杆表示复数共轭,我们用双横杆表示平均值,例如 $\overline{\overline{V(x)}}$ 。

(7) 如下的符号表示 H 表象的波函数和 S 表象的波函数:

$$\psi^{<H>}, \psi^{<S>}$$

请注意这些是借用符号,不具有运算功能。而且,企图在变量名的右上角写加减号构成新的变量名是不许可的。写的效果是:

$$H^{(■+■)}, H^{(-■)} \text{ 代替教科书的写法是: } H_p, H_q$$

(8) 本书的章节和小节号原来是:2.1.3 节代表第 2 章第 1 节第 3 节。最后定稿时取消了 § 号,改为 2.1.3,但是在电子文稿的文字中仍然保留 § 号,因为这样比较醒目;

我们还用 \Leftrightarrow 表示左右等价;用 \Rightarrow 表示“由此得出”; \Downarrow \Leftarrow 也表示“由此得出”;♣表示该公式重要,♥ \Rightarrow 表示“因为,所以”用 $\blacksquare \leftarrow \blacksquare$ 表示替换:例如 B \leftarrow A。还有 $-i \cdot h_b \cdot \left(\frac{\partial}{\partial x_\mu}\right) \leftarrow \rho_\mu$,该箭头是借用“编程/赋值号”。

(9) 关于 Dirac 符号已经在第 6 章做了专门介绍,所以这里不重复。

(10) MathCAD 2001 的文件名是 filename.mcd;而 MathCAD 14.0 的文件名是 Ffilename.xmcd。请注意扩展名不同。如果在 Mathcad 14.0 环境中调入 Mathcad 2001 的

文件请立即存盘,将自动转换为 filename. xmcd 格式。如果你通过 COPY 方式把两种不同格式的文件混合,则不可以 SAVE。如果 SAVE 则文件已被破坏,成为永远不可读的文件。

(11) 如果要输入数学方程式,必须向数学区输入。虽然变量名可以用中文,但是不提倡。理由是数学运算符只能在西文环境中输入,如果用中文的变量名就要频繁地做“中/西文”环境切换,太费时了。

(12) 强调要多多使用 HELP 功能来学习。

(13) 希望未来的 MathCAD 系统能够为“约化 Planck 常数 $\frac{h}{2 \cdot \pi}$ ”提供专用的符号。

(14) 考虑到纸质出版物必须严格遵守国家的出版规范,本书的纸印版和电子版(即配书光盘中的电子文件)有一些细微的区别。区别在于电子版不可能 100% 和纸印版一样。处理的方法:(1) “和而不同”:纸印版的矢量符号用黑体字母,电子版在字母上方有箭头;纸印版的公式编号含章节号如(2-1-3),电子版不含章节号如(3);(2) 电子版的插图总是定义在先图形紧跟在后,习惯上图形的标题不编号,位于上侧——如果标题在下侧则与横坐标变量名拥挤。但是纸印版的插图标题(含说明)必须编号,而且位于下侧,最后决定电子版服从纸印版的要求。(3) 电子版以特有的方式处理 Dirac 的左矢量、右矢量符号、算符标记、对易子标记、平均值标记,内积标记等,纸印版也可以接受。

(15) 如果把 MathCAD 作为物理和工程类科技论文的写作工具,期刊编辑部能否接受,可以试一试。其实,可以提供两类不同格式的电子文稿。其中的 MathCAD 格式文稿更便于审核计算结果。可以大大提高论文审核的效率。此外,期刊编辑部常常要求文稿压缩篇幅,而电子文稿较少受篇幅限制,可以增加文章的易读性。

MathCAD 键盘指引

操作

MathCAD 帮助

Context sensitive Help

Calculate worksheet

计算

Redefinition warnings (toggle on and off)

Insert text region

Insert math within text region

Addition with line break operator (within a math region) ...+...

Character inside brackets as in chemistry notation

Complex conjugate _

Enter special characters into math region

Literal subscript x1

Namespace operator

键击

[F1]

[Shift] [F1]

[Ctrl] [F9]

[F9]

[Ctrl] [Shift] R

["]

[Ctrl] [Shift] A

[Ctrl] [Enter]

[] [Ctrl] [Shift] J

x ["]

[Ctrl] [Shift] K

[.]

[Ctrl] [Shift] N

计算器工具栏

运算符

绝对值

定义

等于

除号

乘号

除号

指数

Imaginary unit

圆括号

Mixed number

平方根

n 次方根

圆周率

示例

$|x|$

$x := 5$

$x = 5$

x/y

3×4

\div

x^2

i

$(3 + 4)$

键击

[|]

[:]

[=]

[/]

[*]

[Ctrl] [/]

[^]

li

[']

[Ctrl] [Shift] [=]

[\\]

[Ctrl] [\\]

[Ctrl] [Shift] P

布尔工具栏

运算符	示例	键击
布尔与		[Ctrl] [&.]
布尔非	-	[Ctrl] [!]
布尔或		[Ctrl] [^]
布尔异或		[Ctrl] [%]
等于	=	[Ctrl] [=]
大于等于	≥	[Ctrl] 0
小于等于	≤	[Ctrl] 9
不等于	≠	[Ctrl] 3

微积分学

运算符	示例	键击
微分		[?]
N 次微分		[Ctrl] [?]
不定积分		[Ctrl] I
定积分		[&.]
无限大	∞	[Ctrl] [Shift] Z
Iterated product		[Ctrl] [#]
Iterated product with 局部变量		[#]
左极限		[Ctrl] [Shift] B
极限		[Ctrl] L
右极限		[Ctrl] [Shift] A
求和		[Ctrl] [\$]
求和局部变量		[\$]
Gradient		[Ctrl] [Shift] G

运算工具栏(请单击工具栏的 $x=$ 图标)

运算符	示例	键击
Custom infix operator		x f y
Custom postfix		x f [Ctrl] [Shift] X
Custom prefix		f x
Custom treefix operator		f

△

x y		
赋值	$x := 5$	[:]
局部变量	$x = 5$	[=]
全局变量	$x \equiv 5$	[~]
Evaluate symbolically	$z \rightarrow 5$	[Ctrl] [.]

希腊字符

输入罗马字符,然后输入[Ctrl] G 转换为希腊字符。

Greek UC LC Roman

Alpha ΑαA/a	Beta ΒβB/b
Chi ΧχC/c	Delta ΔδD/d
Epsilon ΕεE/e	Eta ΗηH/h
Gamma ΓγG/g	Iota ΙιI/i
Kappa ΚκK/k	Lambda ΛλL/l
Mu ΜμM/m	Nu ΝνN/n
Omega ΩωW/w	Omicron ΟοO/o
Phi ΦφF/f	Phi(alt.) ϕ f
Pi ΠπP/p	Psi ΨψY/y
Rho ΡρR/r	Sigma ΣσS/s
Tau ΤτT/t	Theta ΘθQ/q
Theta (alt.) J	Upsilon ΥυU/u
Xi ΞξX/x	

矩阵工具栏

运算符	示例	键击
矩阵		[Ctrl] M
列	$M \langle 1 \rangle$	[Ctrl] 6
行列式	$ x $	[]
向量		\rightarrow
sin	(M)	[Ctrl] [-]
转置矩阵	MT	[Ctrl] 1
局部变量	1..10	[;]
叉乘	$u \times v$	[Ctrl] 8
点乘	$u \cdot v$	[*]
Vector sum		[Ctrl] 4
Insert picture		[Ctrl] T

编程工具栏

运算符

Add line

中断

继续

for

if

local assignment

on error

otherwise

return

while

示例

break

continue

键击

]

[Ctrl] [{}]

[Ctrl] [

for i ∈ 1..10

Vi ← i [Ctrl] ["]

[]]

[{}]

[Ctrl] [']

[Ctrl] [}]

[Ctrl] [|]

[Ctrl]]

符号工具栏

运算符示例

Evaluate symbolically

Symbolic evaluation with keywords

键击

[Ctrl] [.]

[Ctrl] [>]

目 录

导读	1
本章参考文献	5
第 1 章 量子序曲	6
1.1 黑体辐射与能量子	6
1.2 Planck 时空的启示	11
1.3 光电效应与光量子	15
1.4 Compton 效应与光子	16
1.5 非物理量居于核心地位	20
1.6 几何量子化	26
1.6.1 几何量子化概述	26
1.6.2 欧几里得的认识论哲学	26
1.6.3 几何量子化细说	28
1.6.4 从决定论到非决定论	30
1.6.5 量子力学语言的非经典语境	32
1.6.6 相位因子与相速度	34
1.7 算符和本征方程	38
1.8 量子化替换及其相关方程	43
1.8.1 量子化替换	43
1.8.2 Klein-Gordon 方程	43
1.8.3 Schrodinger 方程	44
1.8.4 从 Rutherford 散射到 Born 散射	46
1.9 概率守恒定律	47
1.10 平均值公设	49
1.11 信号分析与不确定性关系	51
1.11.1 Fourier 分析	51
1.11.2 Fourier 分析与不确定性关系	54
1.11.3 Dirac δ -函数	54
1.11.4 动量空间中的平均值公式	55
1.12 本章小结	56
习题	57
本章参考文献	58
第 2 章 量子主旋律	59
2.1 最小电磁相互作用——经典和量子描述	59

2.1.1	最小电磁相互作用的经典描述	59
2.1.2	最小电磁相互作用的量子描述	60
2.1.3	氢原子问题的 Schordinger 方程	61
2.1.4	Bohr 的原子理论	65
2.2	主旋律之一:相位因子	66
2.3	类氢原子的径向波函数	69
2.4	类氢原子的径向波函数(续)	71
2.5	类氢原子的球面波函数极坐标图	73
2.6	Schordinger 表象和 Heisengber 表象	76
2.6.1	时间演化算符	76
2.6.2	从 Schordinger 表象到 Heisengber 表象	77
2.6.3	一维谐振子的定态方程的代数解法	78
2.7	对称性与群表示论	83
	习题	84
	本章参考文献	84
第 3 章	算符与群表示论	85
3.1	动量算符与空间平移群的表示	85
3.2	内积空间、正交变换、么正变换	87
3.3	角动量算符与空间转动群的表示	88
3.4	时间平移群与波函数的演化	90
3.5	内积空间	92
3.6	转动群的 $SU(2)$ 表示及旋量波函数	94
3.6.1	转动群的 $SU(2)$ 表示	94
3.6.2	旋量算符与旋量波函数	98
3.6.3	群表示的代数结构	99
3.7	从测地投影到转动群的双值表示	103
3.8	转动群的不可约表示	105
3.9	量子力学的图像	109
3.10	球函数作为转动群的不可约表示	115
3.11	Lorentz 群的不可约表示	119
3.11.1	Lorentz 群概述	119
3.11.2	Lorentz 群的旋量表示	119
3.11.3	复平面上的 Lorentz 旋量的几何图像	123
3.12	本章小结	123
	本章参考文献	124
第 4 章	一维定态问题	125
4.1	一维谐振子定态方程的幂级数解法	125
4.2	一维定态问题的若干普遍性质	127
4.3	方势阱中的离散谱	129

4.4	势垒穿透及其计算机实验	132
4.5	非对称方势阱中的束缚态	139
4.6	非对称方势阱中的散射态	141
4.7	入射电子对于阶梯位势的隧道效应	144
4.8	周期场的能带结构	146
4.9	周期场中的电子波	149
4.10	傅里叶变换	152
4.10.1	实数据的傅里叶变换/逆变换	152
4.10.2	复数据的傅里叶变换/反变换	154
4.11	周期场示意图	155
4.12	能带结构实例	157
	习题	162
	本章参考文献	162
第5章	三维定态问题	163
5.1	三维各向同性谐振子	163
5.2	无限深球方势阱的能谱	167
5.3	有限深球方势阱的能谱	171
5.4	三维自由粒子波函数	175
5.5	平面波展开为球面波的叠加	178
第6章	Dirac 符号的现代版本	180
6.1	Dirac 符号作为线性泛函	180
6.2	Riesz 定理	182
6.3	用 Dirac 符号定义厄米共轭	183
6.4	MathCAD-Dirac 符号系统	183
6.5	么正变换和表象变换	185
6.5.1	么正变换	185
6.5.2	表象变换	186
6.6	绘景变换	188
6.6.1	Schrodinger 绘景	188
6.6.2	Heisenberg 绘景	189
	习题	190
第7章	自旋	192
7.1	Dirac 方程	192
7.2	Dirac 方程与概率守恒	193
7.3	Dirac 旋量的变换性质	195
7.4	正能 Dirac 平面波和手征算符	196
7.5	Dirac 旋量有关的协变式	201
7.6	Dirac 方程的非相对论近似	204
7.7	数值计算和单位制选择	210

7.8	非相对论性自旋理论	214
7.9	不可约表示空间的直积及其分解	219
7.10	自旋轨道耦合的群表示	222
7.11	双粒子自旋态函数	225
7.12	双粒子自旋态函数(续)	228
7.13	两个自旋粒子的角动量本征函数	231
7.14	两个自旋粒子的交换对称位势	237
7.15	氦核的径向波函数	241
7.16	电四极矩	245
7.16.1	氦核的电四极矩	245
7.16.2	角动量本征态的电四极矩	247
	本章参考文献	248
第8章	定态微扰论	250
8.1	非简并态微扰论	250
8.2	简并态微扰论	253
8.3	非简并态微扰论实例	257
8.4	简并态微扰论实例	261
8.4.1	耦合谐振子	261
8.4.2	氢原子的一级 Stark 效应	264
8.5	氢原子的基态能量	267
8.6	变易常数法(氢原子的基态能量)	269
8.7	碱金属双线结构的具体计算	272
8.8	简单塞曼效应	276
8.9	复杂塞曼效应	279
8.10	类氢光谱的精细结构	281
第9章	含时微扰论——量子跃迁	284
9.1	跃迁概率	284
9.2	常微扰下的跃迁概率	287
9.3	周期微扰下的跃迁概率	289
9.4	非周期微扰下的跃迁概率	291
9.5	受激辐射与光吸收	292
9.6	自发辐射	293
9.7	电偶极跃迁的选择定则	295
第10章	弹性散射	298
10.1	散射截面与散射振幅	298
10.1.1	质心坐标系与实验室坐标系	298
10.1.2	散射截面	299
10.1.3	散射振幅	300
10.2	分波法	300