胡诗可
吴邦惠　编著
吕晓夫

高等量子力学

四川大学出版社

高等量子力学

胡诗可　吴邦惠　吕晓夫　编著

四川大学出版社

内容提要

本书系统地阐述了量子力学的基本概念、原理及其处理方法的新发展．全书力求对物理内容的阐述深入浅出，对数学公式的推导简洁明了．既注意保持量子力学理论体系的系统性，也注意介绍一些新方法及其应用．全书共八章，包括量子力学的基本理论，多粒子理论基础，散射的量子理论，量子力学中的对称性，角动量的基本理论，近似方法，路径积分及其应用和相对论量子力学等．每章末附有习题．

本书对绘景理论与协变微扰理论、多体量子理论、散射量子理论及路径积分量子化等内容采用了近代处理方法（如用格林函数）作了较深入的讲述．

本书可作为大学物理类专业研究生或理论物理专业本科生的教材或参考书，也可供物理教师和科研人员参考．

高等 量子力学

胡诗可　吴邦惠　吕晓夫　编著

责任编辑：杨守智　　封面设计：朱德祥

※　※　※

四川大学出版社出版发行（四川大学校内）

四川大学计算中心照排

四川省新华书店经销　　成都教育印刷厂印刷

开本 787×1092 1/16　印张　20.88　字数 450 千字

1990 年 12 月第一版　　1990 年 12 月第一次印刷

印数：0001 —— 3000 册

ISBN 7—5614—0309—7/O·45　定价 4.14 元

前　言

量子力学是描述物质的微观运动规律的理论。它是近代物理理论的基础。从本世纪20年代建立量子力学以来，量子力学理论已在物理学、化学、生物学和电子学等各个领域得到深入而广泛的应用。把它应用于研究物质的层次结构（凝聚态、分子、原子、原子核和基本粒子等）和它们的相互作用（强作用、电磁作用、弱作用和引力作用等）时，大大地促进了自然科学和技术科学的发展，产生了量子场论、量子统计和凝聚态理论、原子核理论和粒子理论、量子化学、量子生物学和量子电子学等新学科。在发展这些新学科的同时，量子力学的理论本身也得到发展，这些发展包括时空与内部对称性理论，二次量子化和场的量子理论，散射的量子理论、多体问题的量子理论，相对论性量子力学和路径积分量子化等，这些构成现代高等量子力学的主要内容。

编写这本高等量子力学。是为物理类专业的研究生提供学习"高等量子力学"课使用的教材或教学参考书。为了对编写本书提供准备，参照前教育部转发的1981年理论物理专业和固体物理专业研究生培养工作座谈纪要中提出的"高等量子力学"课的内容提要，1985年起我们先编写了《高等量子力学》讲义，在四川大学物理类专业的研究生和理论物理专业本科生中试用，本书系在原来的《高等量子力学》讲义的基础上，经过修改与扩充后写成。

作为"量子力学"课的延续和深入，在讲述"高等量子力学"课时，对"量子力学的"一些基本内容，有必要作简短的重复，但主要篇幅应用来阐述那些属于高等量子力学范围的新内容。因此，在讲述第一章量子力学的基本理论时，我们着重从物理上阐述量子力学的基本原理，而不强调所需数学工具的系统性。在第一章中着重讲述三种绘景的等价性与应用，并介绍了在近代量子力学中广泛应用的密度矩阵方法。

第二章多粒子理论基础是量子力学的一个重要内容，考虑到物理类专业的需要在本章中除了阐述二次量子化方法的基本概念及其对玻色场（包括电磁场）体系的应用，我们还介绍了多粒子理论的格林函数方法及其所需的量子场论基础和费曼图解方法。

第三章散射的量子理论是量子力学的另一个重要内容。为了使散射理论更能反映物理现实，我们采用波包描述粒子，应用格林函数先导出严格的形式散射理论，在此基础上得出通常量子力学散射理论中的玻恩近似法与分波近似法结果。这样便于了解严格的散射量子理论的物理实质。

第四章量子力学中的对称性和第五章角动量的基本理论是量子力学的另一个重点，我们把这两章的内容安排在一起讲述。第四章着重阐述时空对称性和它们相联系的守恒定律，第五章则进一步讨论物理系统的转动性质以及和它们相联系的角动量特征。为了便于理解这些对称性和守恒定律，我们结合具体的相互作用进行讨论，并根据所讨论的物理内容的需要简要介绍了群表示论的基础知识。这里讨论采用的方法可以直接推广到粒子具有内部自由度（如同位旋和奇异数等）和具有无穷多个自由度的连续物理系统（场论）的情

形。

第六章近似理论中介绍了一些不同于初等量子力学的新的近似方法。§6.1 中介绍的微扰展开的韦格纳—布洛恩公式较普通的微扰公式更为简洁，在计算任意阶能量的微扰近似时不需涉及波函数的微扰近似。§6.2 中介绍了如何从相互作用来确定激发态能级的性质。§6.3 中介绍的绝热近似方法可以用来处理具有不同能量标度的复杂体系的运动。§6.4 中介绍的 WKB 方法常用于讨论粒子和原子或原子核间的高能散射，这种方法能很好显示量子理论与经典理论的对应关系。§6.5 中介绍的程函方法常用于处理快速粒子被缓变势（包括复位势）散射的情形，并能很好显示这种方法和分波法的联系。

第七章路径积分及其应用。主要介绍在路径积分量子化基础上建立起来的量子力学新程式，并讨论了这种新程式和薛定格程式与海森堡程式之间的联系。这种路径积分程式的量子力学可以直接推广到量子场论并构成近代量子场论的重要基础。

第八章相对论量子力学介绍了描述自旋分别为 0 与 $\frac{1}{2}$ 的单粒子相对论波动方程，并着重介绍了描述自旋为 $\frac{1}{2}$ 的粒子的狄拉克方程的协变性，平面波解和求狄拉克方程逐级非相对论近似的福尔狄 —— 乌杜耶逊变换方法。最后，讨论了由狄拉克方程导致的空穴理论和反粒子。

本书由胡诗可同志编写第一章与第七章，吴邦惠同志编写第二章第四章与第五章，吕晓夫同志负责编写第三章、第六章与第八章，并由胡诗可同志负责全书的编校工作。

编著者

89 年 7 月

目　　录

第一章　量子力学的基本理论

第二章　多粒子理论基础

第三章 散射的量子理论

第四章 量子力学中的对称性

第五章 角动量的基本理论

第六章 近似方法

第七章 路径积分及其应用

第八章 相对论量子力学

第一章　量子力学的基本理论

量子力学研究微观系统的组成、相互作用及其运动规律。为了了解量子力学的理论结构，我们将引入量子理论赖以建立的几个基本原理或基本假设，这些原理或假设不能由宏观世界的物理定律导出，它们必须由和微观现象直接相关的实验来建立和检验。

§1.1　量子力学的基本原理

1.1—1 量子系统的状态和“态的迭加原理”

量子系统指包含分子、原子、原子核和基本粒子等层次的微观物理系统。微观粒子运动的最重要特性为微粒—波动二象性。这就决定了对量子系统状态描述的特点，可用下面的原理 1 来表述。

原理 1　量子系统的状态由希尔伯特(Hilbert)空间的一个矢量$|\Psi\rangle$描述，$|\Psi\rangle$称为态矢量或波函数。

在原理 1 中态矢量只确定到位相，即$|\Psi\rangle$与$e^{i\alpha}|\Psi\rangle$描述同一量子系统状态。这意味着态矢量的绝对位相一般不是一个观测量，但对存在外场的情形下，态矢量的相对位相却是一个观测量，它对干涉现象起着重要作用。

原理 1 同时包含了态矢量的迭加原理。由于希尔伯特空间的任意态矢量$|\Psi\rangle$都能用来描述量子系统状态，若$|\Psi_1\rangle \in H$,$|\Psi_2\rangle \in H$，则$[a_1|\Psi_1\rangle + a_2|\Psi_2\rangle] \in H$，即它们的线性迭加同样能描述量子系统状态。态矢量的迭加原理反应了微观粒子的波动特性。应用态的迭加原理时还要受到其他物理条件的限制。例如，根据电荷守恒，不同电荷态的迭加在物理上将不能实现。

1.1—2　物理量和算符

对于任何物理理论，物理量（即系统的可观测量）有着基本的重要性。由于微观粒子的波一粒二象性，量子系统的状态要用希尔伯特空间的矢量描述。与此相应，描述量子系统的物理量也有它固有的特点，可用原理 2 来表述。

原理 2　(1)量子系统的物理量用希尔伯特空间的厄米算符描述：(2)物理量的可能测值为相应算符的不同本征值，相应状态为对应本征值的本征矢量；(3)一般情形下物理量的测量不导致某一确定值。物理量 A 在状态$|\Psi\rangle$中取本征值 A_i 的几率和态矢$|\Psi\rangle$对该本征态$|A_i\rangle$的投影$\langle A_i|\Psi\rangle$底模方$|\langle A_i|\Psi\rangle|^2$成正比。

量子力学中采用厄米算符描述物理量是由于厄米算符本征值的实数性满足物理量的观测值必须为实数这一要求。和经典物理相比，量子力学中观测量的概念和测量过程更密切相关。原理 2 表述量子规律的统计特性，由它不能得出量子系统的各个物理量各取哪些确切数值，只能得出它们取各个数值的几率。

通常将态矢量规一化为 $\langle\Psi|\Psi\rangle=1$。对厄米算符 $\hat{A}$ 的离散本征值，本征矢量规一化为 $\langle A|A'\rangle=\delta_{AA'}$；对于 $\hat{A}$ 的连续本征值，则规一化为 $\langle A|A'\rangle=\delta(A-A')$，即本征矢量规一化为 δ 函数。

在厄米算符 $\hat{A}$ 的本征态 $|A_i\rangle$ 中，物理量 A 有确定的数值 A_i。在一般情形下，将 $|\Psi\rangle$ 按本征函数 $|A_i\rangle$ 展开

$$|\Psi\rangle=\sum_i|A_i\rangle\langle A_i|\Psi\rangle\equiv\sum_i C_i|A_i\rangle,\hat{A}|A_i\rangle=A_i|A_i\rangle。\tag{1—1}$$

由此得出物理量 A 在状态 $|\Psi\rangle$ 中的平均值

$$\frac{\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}=\frac{\sum_{i,j}C_j^*\langle A_j|\hat{A}|A_i\rangle C_i}{\sum_{i,j}C_j^*\langle A_j|A_i\rangle C_i}=\frac{\sum_i A_i C_i^* C_i}{\sum_i C_i^* C_i}=\langle\hat{A}\rangle。\tag{1—2}$$

1.1—3 算符的对易关系

前面指出量子力学的物理量要用厄米算符表示。下面讨论如何构造这些厄米算符以及它们的运算规则。这由下面的原理 3 来表述。

原理 3 (1) 经典物理量看作一组正则共轭变量的函数，相应的物理算符由经典物理量中的正则变量代以相应的算符而得到；(2) 所有成对的正则共轭变量算符满足下列对易关系式

$$[\hat{q}_i,\hat{q}_k]=[\hat{p}_i,\hat{p}_k]=0,\qquad[\hat{q}_i,\hat{p}_k]=i\hbar\delta_{ik}。\tag{1—3}$$

原理 3 指出如何由经典物理量 $A(q_i,p_i)$ 直接得出它们的算符表式 $\hat{A}(\hat{q}_i,\ \hat{p}_i)$. 对于一些无经典对应的物理量，如自旋、同位称和宇称等，它们表征微观粒子或量子系统的内部自由度. 这时须借助离散对称变换与守恒定律，以求出这些物理量的算符表式。

上面引入的算符对易关系式是从经典力学的运动方程推广到量子领域。在经典力学中描述系统运动的拉格朗日量 $L(q_i,\ \dot{q}_i,\ t)$ 是广义坐标 q_i 和广义速度 $\dot{q}_i$ 以及时间 t 的函数。由最小作用量原理

$$\delta S=\delta\int_{t_1}^{t_2}L(q_i,\ \dot{q}_i,t)dt=0\tag{1—4}$$

和边界条件 $\delta q_i(t_1)=\delta q_i(t_2)=0$ 可以导出描述系统运动的拉格朗日方程:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial\dot{q}_i}\right)-\frac{\partial L}{\partial q_i}=0\quad(\ i=1,2\ldots,f\ )\tag{1—5}$$

f 为系统的自由度. 引入广义动量 $p_i=\partial L/\partial\dot{q}_i$ 和系统哈密顿量 $H(q,p,t)=\sum_i p_i\dot{q}_i-L(q_i,\ \dot{q}_i,\ t)$ 后，可以导出描述系统运动的哈密顿运动方程

$$\dot{q}_i=\frac{\partial H}{\partial p_i},\quad \dot{p}_i=-\frac{\partial H}{\partial q_i}.\qquad(\ i=1,2,\ldots,f\ )\tag{1—6}$$

由于在坐标变换下哈密顿运动方程的形式保持不变，上述方程又称为正则方程，q_i 和 p_i

分别称为正则坐标和正则动量。和拉格朗日程式不同，在哈密顿程式中由于把正则坐标 q_i 和正则动量 p_i 都看作独立变量，因此把拉格朗日运动方程的 f 个二阶微分方程变为哈密顿运动方程中的 $2f$ 个一阶微分方程。哈密顿程式在物理上的优点在于它把正则坐标和正则动量当作同样的基本量来处理，因此它能更清楚地反映出经典力学中正则坐标和正则动量的对称性质并便于把这种程式向量子形式过渡。

由经典力学的哈密顿正则方程可以得出任意力学函数 $A(q_i,p_i,t)$ 的运动方程

$$\begin{aligned}\frac{dA}{dt} &= \sum_i\left(\frac{\partial A}{\partial q_i}\dot{q}_i+\frac{\partial A}{\partial p_i}\dot{p}_i\right)+\frac{\partial A}{\partial t}\\ &= \sum_i\left(\frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i}-\frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}\right)+\frac{\partial A}{\partial t}\\ &= [A,H]_{pB}+\frac{\partial A}{\partial t},\end{aligned} \tag{1—7}$$

其中引入了泊松括号

$$[F,G]_{pB}(q,p)=\sum_i\left(\frac{\partial F}{\partial q_i}\frac{\partial G}{\partial p_i}-\frac{\partial F}{\partial p_i}\frac{\partial G}{\partial q_i}\right)=\sum_i\frac{\partial(F,G)}{\partial(q_i,p_i)} \tag{1—8}$$

它表示函数 F,G 对于各个自由度的正则坐标与正则动量的变换行列式的和。利用泊松括号可将哈密顿正则方程 (1—6) 式表为下列的对称形式

$$\dot{q}_i=[q_i,\ H]_{pB},\qquad \dot{p}_i=[p_i,\ H]_{pB}. \tag{1—9}$$

在表式 (1—8) 中令 F,G 代表正则坐标和正则动量，立刻得出

$$[q_i,q_k]_{pB}=[p_i,p_k]_{pB}=0,\quad [q_i,p_k]_{pB}=\delta_{ik}. \tag{1—10}$$

利用正则运动方程和泊松括号的性质容易证明，正则坐标和正则动量的泊松括号值是运动积分，即由 (1—6) 式和 (1—8) 式得出

$$\begin{aligned}[q'_i,p'_j]_{pB} &= [q_i+\dot{q}_i\Delta t,p_j+\dot{p}_j\Delta t]_{pB}=[q_i,p_j]_{pB}+[\dot{q}_i,p_j]_{pB}\Delta t+[q_i,\dot{p}_j]_{pB}\Delta t\\ &= [q_i,p_j]_{pB}+\left(\frac{\partial\dot{q}_i}{\partial q_j}+\frac{\partial\dot{p}_j}{\partial p_i}\right)\Delta t\\ &= [q_i,p_j]_{pB}=\delta_{ij}.\end{aligned} \tag{1—11}$$

如果从原来的正则变量 (q_i,p_i) 变到一组新的正则变量 (Q_i,p_i) 后，正则运动方程的形式保持不变，即对变换后的系统哈密顿量 $K(Q,P,t)$ 有

$$\dot{Q}_i=\frac{\partial K}{\partial p_i},\qquad \dot{P}_i=-\frac{\partial K}{\partial Q_i}, \tag{1—12}$$

这种变换称为正则变换。可以证明两个任意力学函数 F,G 的泊松括号值在正则变换下保持不变，即

$$[F,G]_{pB}(q,p)=[F,G]_{pB}(Q,P). \tag{1—13}$$

由此得出，基本的泊松括号公式 (1—10) 也将在正则变换下保持不变。由 (1—13) 式还得出一个重要的推论，即相空间体积在正则变换下保持不变，这点在统计力学中有重要的应用。

现在应用由经典力学过渡到量子力学的表式 $[F,G]_{pB}\to\frac{1}{i\hbar}[\hat{F},\hat{G}]$, 由 (1—10) 式立刻得出算符对易关系式 (1—3). (1—3) 式包含普朗克常数 h，正反映了微观领域物理量的量子化特性。将上述正则共轭变量概念及其算符对易关系式推广到具有无穷多自由度的连续的物理系统（场系统），同样可以讨论场系统的量子化特性。

对于一组正则共轭变量，借助对易恒等式

$$[AB,C]=[A,C]B+A[B,C], \tag{1—14}$$

再应用 (1—3) 式和数学归纳法，容易证明下列的算符对易关系式

$$[\hat{q},\hat{p}^n]=i\hbar n\hat{p}^{n-1}=i\hbar\frac{\partial}{\partial\hat{p}}\hat{p}^n,\quad [\hat{q}^n,\hat{p}]=i\hbar n\hat{q}^{n-1}=i\hbar\frac{\partial}{\partial\hat{q}}\hat{q}^n, \tag{1—15}$$

式中 n 为整数。若物理量 $A(q,p)$ 可表为 q,p 的多项式或幂级数，则由 (1—15) 式得出下列关系式

$$[\hat{q},\hat{A}(\hat{q},\hat{p})]=i\hbar\frac{\partial\hat{A}}{\partial\hat{p}},\quad [\hat{p},\hat{A}(\hat{q},\hat{p})]=-i\hbar\frac{\partial\hat{A}}{\partial\hat{q}}. \tag{1—16}$$

由于厄米算符的本征矢量构成一组完全正交归一化的函数系，坐标算符 X 和动量算符 P 的全部本征矢量 $\{|X'\rangle\}$ 和 $\{|P'\rangle\}$ 都构成希尔伯特空间的基，任意态矢量 $|\Psi\rangle$ 可分别表为它们的迭加

$$\begin{aligned}|\Psi\rangle&=\int dx'|x'\rangle\langle x'|\Psi\rangle=\int dx'|x'\rangle\Psi(x'),\\ |\Psi\rangle&=\int dp'|p'\rangle\langle p'|\Psi\rangle=\int dp'|p'\rangle\Psi(p').\end{aligned} \tag{1—17}$$

分别称为坐标表象或动量表象。状态 $|\Psi\rangle$ 在这些表象之间的变换关系为

$$\begin{aligned}\Psi(x')&=\langle x'|\Psi\rangle=\int dp'\langle x'|p'\rangle\langle p'|\Psi\rangle=\int dp'\langle x'|p'\rangle\Psi(p'),\\ \Psi(p')&=\langle p'|\Psi\rangle=\int dx'\langle p'|x'\rangle\langle x'|\Psi\rangle=\int dx'\langle p'|x'\rangle\Psi(x').\end{aligned} \tag{1—18}$$

为了求出变换矩阵 $\langle x'|p'\rangle$ 的显式，我们先就一维的情形讨论。引入下列的么正算符 $\hat{Q}^+(\zeta)$ 与 $\hat{Q}(\zeta)$

$$\hat{Q}^+(\zeta)=e^{-\frac{i}{\hbar}\zeta\hat{p}},\hat{Q}(\zeta)=[\hat{Q}^+(\zeta)]^{-1}, \tag{1—19}$$

其中 ζ 为实数。设 $|x'\rangle$ 为算符 $\hat{x}$ 的本征值为 x' 的本征矢量。由对易关系式 (1—16) 式和态矢量的规一化条件立刻得出

$$\begin{aligned}&\hat{Q}^+\ (\zeta)\ |x'\rangle=C|x'+\zeta\rangle=|x'+\zeta\rangle,\\ &\hat{Q}\ (\zeta)\ |x'\rangle=c'|x'-\zeta\rangle=|x'-\zeta\rangle.\end{aligned} \tag{1—20}$$

即 $\hat{Q}^+$ (ζ) 与 $\hat{Q}$ (ζ) 分别为 $|x\rangle$ 的上升与下降算符。再引入下列的么正算符 $\hat{p}^+$ (η) 与 $\hat{p}$ (η)

$$\hat{p}^+\ (\eta)\ =e^{\frac{i}{\hbar}\eta\hat{x}},\qquad \hat{p}\ (\eta)\ =[\hat{p}^+\ (\eta)\ ]^{-1} \tag{1—21}$$

由(1—16)式与(1—21)式同理可得

$$\hat{p}^{+}(\eta)\,|p'\rangle=|p'+\eta\rangle,\qquad \hat{p}(\eta)\,|p'\rangle=|p'-\eta\rangle,\tag{1—22}$$

其中 $|p'\rangle$ 为算符 $\hat{p}$ 的本征值为 p' 的本征矢量，$\hat{p}^{+}(\eta)$ 与 $\hat{p}(\eta)$ 为 $|p\rangle$ 的上升与下降算符．再令 $|O_x\rangle$ 与 $|O_p\rangle$ 分别为算符 $\hat{x}$ 与 $\hat{p}$ 的本征值为零的本征矢量．于是得出变换矩阵 $\langle p'|x'\rangle$ 为

$$\begin{aligned}\langle p'|x'\rangle&=\langle p'|e^{-\frac{i}{\hbar}x'\hat{p}}|O_x\rangle=\langle p'|e^{-\frac{i}{\hbar}x'p'}|O_x\rangle=e^{-\frac{i}{\hbar}x'p'}\langle p'|O_x\rangle\\&=e^{-\frac{i}{\hbar}x'p'}\langle O_p|e^{-\frac{i}{\hbar}p'\hat{x}}|O_x\rangle=e^{-\frac{i}{\hbar}x'p'}\langle O_p|O_x\rangle,\end{aligned}\tag{1—23}$$

再应用连续谱的规一化条件确定上式中的系数 $\langle O_p|O_x\rangle$，即有

$$\begin{aligned}\delta(p'-p'')=\langle p'|p''\rangle&=\int dx'\langle p'|x'\rangle\langle x'|p''\rangle\\&=\int dx'e^{-\frac{i}{\hbar}x'p'}\langle O_p|O_x\rangle e^{\frac{i}{\hbar}x'p''}\langle O_p|O_x\rangle^{*}\\&=|\langle O_p|O_x\rangle|^{2}2\pi\hbar\delta(p'-p'').\end{aligned}\tag{1—24}$$

由 (1—23) 式与 (1—24) 式即可得出 $\langle p'|x'\rangle$ 的显式．推广到三维的情形，最后得到变换矩阵 $\langle \mathbf{x}'|\mathbf{p}'\rangle$ 的显式

$$\langle \mathbf{x}'|\mathbf{p}'\rangle=(2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}}e^{\frac{i}{\hbar}p'x'}=\langle \mathbf{p}'|\mathbf{x}'\rangle^{+}.\tag{1—25}$$

为了说明上述表象变换公式的应用，考察动量算符 $\hat{p}$ 在坐标表象的矩阵形式．利用算符 $\hat{p}$ 在动量表象的表式 $\langle \mathbf{p}'|\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{p}''\rangle=\mathbf{p}'\delta(\mathbf{p}'-\mathbf{p}'')$ 和 (1—25) 式

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{x}'|\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{x}''\rangle&=\int d\mathbf{p}'\int d\mathbf{p}''\langle \mathbf{x}'|\mathbf{p}'\rangle\langle \mathbf{p}'|\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{p}''\rangle(\mathbf{p}''|\mathbf{x}''\rangle\\&=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3}}\int p'e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}'(\mathbf{x}'-\mathbf{x}'')}d\mathbf{p}'\\&=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3}}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}'}\int e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}'(\mathbf{x}'-\mathbf{X}'')}dp'\\&=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\delta(\mathbf{x}'-\mathbf{x}'')\end{aligned}\tag{1—26}$$

由此得出

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{x}|\hat{\mathbf{p}}|\Psi\rangle&=\int d\mathbf{x}'\langle \mathbf{x}|\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{x}'\rangle\langle \mathbf{x}'|\Psi\rangle\\&=\int d\mathbf{x}'\left[-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}'}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\right]\Psi(\mathbf{x}')\\&=-\int d\mathbf{x}'\left[-\frac{\hbar}{i}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\right]\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}'}\Psi(\mathbf{x}')\\&=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\Psi(\mathbf{x}),\end{aligned}\tag{1—27}$$

这里应用了波函数的渐近条件 $\Psi(\mathbf{x})\xrightarrow[|\mathbf{x}|\to\infty]{}0$．(1—27) 式指出坐标表象中算符$\hat{\mathbf{p}}$ 对波函数 Ψ 的作用和微分运算$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}}$ 等价，这就是通常量子力学的结果．应用上面的变换矩阵同样可以证明，在动量表象中算符$\hat{\mathbf{x}}$ 对波函数 Ψ 的作用和 $-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\mathbf{p}}$ 等价．

1.1—4 算符和测量的关系

前面讨论了量子力学如何描述状态，描述物理量则引入了厄米算符，并讨论了对应不同物理量的算符的对易关系．量子力学对状态与物理量的描述和测量直接相关，量子力学的特性更是通过测量直接表现出来．状态、物理量和测量的关系可由下面的原理 4 来表述．

原理 4 物理量的实际测量使量子系统的态矢转变为物理量算符的本征矢量，即物理量观测本征值的本征矢量．

如果测量时系统状态为物理量算符的本征态之一，测量结果将确定地为相应的本征值．一般情形下物理量的测量不导致某一确定值，而以不同的几率得到各个可能本征态。

原理4可以借助投影算符$\hat{p}_s$来表述．投影算符的性质为

$$\hat{p}_s|\Psi\rangle=|\Psi_s\rangle \tag{1—28}$$

它把希尔伯特空间的态矢量投影到子空间 s．由此可知投影算符为厄米算符．再由 (1—28) 式有

$$\hat{p}_s^2|\Psi\rangle=\hat{p}_s|\Psi_s\rangle=|\Psi_s\rangle=\hat{p}_s|\Psi\rangle,\quad \therefore \hat{p}_s^2=\hat{p}_s, \tag{1—29}$$

即算符$\hat{p}_s$ 的本征值为 0 与 1．$\hat{p}_s|\Psi\rangle$ 为$\hat{p}_s$ 的本征值为 1 的本征矢量．因此投影算符$\hat{p}_s$ 可以借助算符的本征函数来构造

$$\hat{p}_s=\sum_n|a_s,n\rangle\langle a_s,n|, \tag{1—30}$$

其中 n 表可能的简并指标．若物理量算符具有无简并的分立本征函数，此时态矢量 $|\Psi\rangle$ 可按其本征态 $|a_r\rangle$ 展开

$$|\Psi\rangle=\sum_r C_r|a_r\rangle. \tag{1—31}$$

对物理量 A 进行测量若得观测值为 A_s，此时系统态矢量 $|\Psi\rangle$ 转变为

$$\frac{\hat{p}_s|\Psi\rangle}{\sqrt{\langle\Psi|\hat{p}_s|\Psi\rangle}}=\frac{|a_s\rangle\langle a_s|\Psi\rangle}{\sqrt{\langle\Psi|a_s\rangle\langle a_s|\Psi\rangle}}$$

$$=C_s|a_s\rangle/\left|C_s\right| \quad . \tag{1—32}$$

即系统原来的迭加态（波包）测量后缩并为一个本征态 $|a_s\rangle$（和上式右端只差一个位相因子），这正是原理 4 表述的内容。

下面讨论两个物理量的同时测量问题．如果两个物理量的算符$\hat{A}$ 与$\hat{B}$ 可相互对易，再假定算符的本征值无简并，若 $|a\rangle$ 为算符$\hat{A}$ 的本征值为 a 的本征态，则

$$\hat{A}|a\rangle=a|a\rangle,\quad \hat{B}\hat{A}|a\rangle=a\hat{B}|a\rangle=\hat{A}\hat{B}|a\rangle, \tag{1—33}$$

即$\hat{B}|a\rangle$ 也为算符$\hat{A}$ 的本征值 a 的本征态，在无简并情形下它们描述系统的同一状态（对有简并情形结论仍然成立）．在两算符的共同本征态中，对两算符代表的物理量进行测量都具有确定的数值．

若算符$\hat{A},\hat{B}$ 不能对易，则同一状态中这两个物理量不能同时具有确定数值．我们来计算它们在同一状态中的不确定程度（或分散度）．若算符$\hat{A},\hat{B}$ 代表一对正则共轭变量，则其对易关系式为

$$[\hat{A},\hat{B}]=i\hbar. \tag{1—34}$$

定义算符$\hat{A},\hat{B}$在$|\Psi\rangle$态的均方偏差为

$$\begin{aligned}(\Delta\hat{A})^2 &\equiv \langle\Psi|(\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle)^2|\Psi\rangle=\langle(\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle)\Psi|(\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle)|\Psi\rangle,\\ (\Delta\hat{B})^2 &\equiv \langle\Psi|(\hat{B}-\langle\hat{B}\rangle)^2|\Psi=\langle(\hat{B}-\langle\hat{B}\rangle)\Psi|(\hat{B}-\langle\hat{B}\rangle)|\Psi\rangle.\end{aligned} \tag{1—35}$$

上式中的第二等式来自 $(\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle)$ 与 $(\hat{B}-\langle\hat{B}\rangle)$ 均为厄米．显然，对它们的本征态分别有 $\Delta A=0$ 与 $\Delta B=0$。因此均方偏差 $(\Delta A)^2$ 与 $(\Delta B)^2$ 可作为测量不确定程度的量度．再引入

$$(\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle)|\Psi\rangle\equiv|\varphi_1\rangle,\qquad (\hat{B}-\langle\hat{B}\rangle)|\Psi\rangle\equiv|\varphi_2\rangle \tag{1—36}$$

则有

$$\Delta A=\sqrt{\langle\varphi_1|\varphi_1\rangle}=|\varphi_1|,\qquad \Delta B=\sqrt{\langle\varphi_2|\varphi_2\rangle}=|\varphi_2|. \tag{1—37}$$

应用史瓦兹(*Schwarz*)不等式，并考虑到任一复数虚部数值不能大于该复数数值，有

$$\begin{aligned}\Delta A\Delta B&=|\varphi_1||\varphi_2|\geqq|\langle\varphi_1|\varphi_2\rangle|\geqq|Im\langle\varphi_1|\varphi_2\rangle|\\ &=\left|\frac{1}{2i}\left(\langle\varphi_1|\varphi_2\rangle-\langle\varphi_1|\varphi_2\rangle^*\right)\right|=\frac{1}{2}|\langle\Psi|(\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A})|\Psi\rangle|\end{aligned} \tag{1—38}$$

由(1—34)式与(1—38)式立刻得出测不准关系式

$$\Delta A\cdot\Delta B\geqq\frac{\hbar}{2}. \tag{1—39}$$

上式表示出同时测量一对正则共轭物理量（如位置与动量）时对测量精确度的限制．后者在讨论激发原子或放射性原子核能级的自然线宽度问题时将会遇到．

对一个量子系统，通常存在一组最大数目的可对易算符，称为“力学量的完全集合”，对这样一组力学量的测量称为“最大测量”．完全集合力学量数目和系统自由度数目相等．对一个在库仑场内运动的电子，当计及自旋时，“力学量完全集合”为能量、轨道角动量及其投影和电子自旋 $(\hat{H},\hat{L}^2,\hat{L}_z,\hat{S}_z)$．对一个运动的自由电子，“力学量完全集合”则为电子能量、动量及其自旋沿运动方向投影 $(\hat{H},\hat{P},\frac{s\cdot p}{|p|})$.

1.1—5 状态随时间的演化

前面讨论了量子系统的基本特性，并建立了如何计算系统的可观测性质的原理．下面讨论系统状态如何随时间变化，即讨论量子系统的动力学演化问题．这个问题可用下面的原理 5 表述．

原理 5 量子系统的状态 $|\Psi(t)\rangle$ 随时间演化的规律遵从下列运动方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle=\hat{H}|\Psi(t)\rangle, \tag{1—40}$$

其中$\hat{H}$ 为系统的哈密顿算符。这一方程为熟知的薛定格 (*Schrodinger*) 绘景的状态运动方程。

通常的量子力学系根据微观粒子的二象性，从自由粒子波动方程得到 (1—40) 形式的运动方程，再把哈密顿量外推到存在外场的情形，从而得出薛定格方程。这里把这些包含外推的假设直接作为原理提出。

原理 5 规定了在给定外界条件下量子系统状态随时间演化的规律。只要给出边界条件和初始条件，就可以对状态运动方程 (1—40) 式进行求解，以确定系统在各时刻的状态。通常谈到系统在某时刻的状态，可用希尔伯特空间的态矢量 $|\Psi\rangle$ 描述，而系统各时刻状态的总集合 $|\Psi(t)\rangle$，则用希尔伯特空间的一个运动态矢量描述。

根据原理 3，(1—40) 式中的哈密顿算符可由系统的经典哈密顿量中的物理量代以相应的算符而得到。例如，由规范不变性，单个带电粒子在电磁场 (A,φ) 中运动的经典哈密顿量为

$$H(t)=\frac{1}{2m}\left[p-\frac{e}{c}A(rt)\right]^2+e\varphi(r,t) \tag{1—41}$$

相应的哈密顿算符则为

$$\hat{H}(t)=\frac{1}{2m}\left[\hat{p}-\frac{e}{c}\hat{A}(r,t)\right]^2+e\varphi(r,t) \tag{1—42}$$

仅仅根据对应关系由经典哈密顿量写出量子力学哈密顿算符是不完善的，量子系统还有一些经典力学不能描述的特性（如自旋），也需要在哈密顿算符内反映出来。如果使方程 (1—40) 式保持相对论协变性，即右端$\hat{H}$ 中只含动量 p 的一次方（亦即只含空间坐标的一阶导数），并且引入自旋矩阵，使

$$\hat{H}=c\alpha\hat{p}+\beta mc^2, \tag{1—43}$$

其中 $\alpha=\begin{bmatrix}0&\sigma\\\sigma&0\end{bmatrix}$，$\beta=\begin{bmatrix}I&0\\0&-I\end{bmatrix}$均为 4×4 矩阵，此时方程 (1—40) 成为描述电子相对论性运动的狄拉克 (*Dirac*) 方程。

当哈密顿算符$\hat{H}$ 不显含时间，此时运动方程 (1—40) 两端分别只含对时间和对空间坐标的导数，可利用分离变量进行求解。令 $|\psi(t)\rangle=|\psi(x)\rangle f(t)$，代入方程 (1—40) 得到

$$\hat{H}|\psi(x)\rangle=E|\psi(x)\rangle,\qquad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}f(t)=Ef(t) \tag{1—44}$$

其中 E 为分离变量常数，它的物理意义为哈密顿算符的本征值（即能量本征值）。方程 (1—40) 的一般解为其特解底迭加

$$|\psi(t)\rangle=\sum_n f_n(t)|\psi_n(x)\rangle=\sum_n Cn|\psi_n(x)\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}Ent}, \tag{1—45}$$

这些特解对应于定态。在定态中物理量取不同值的几率（因而它们的统计平均值）都不随时间改变，在物理上是一个稳定状态。定态是一个含时间状态，它和哈密顿算符$\hat{H}$ 的本征矢量 $|\psi_n\rangle$ 之间，相差一个和定态能量有关的时间位相因子。只有在外界作用下，才