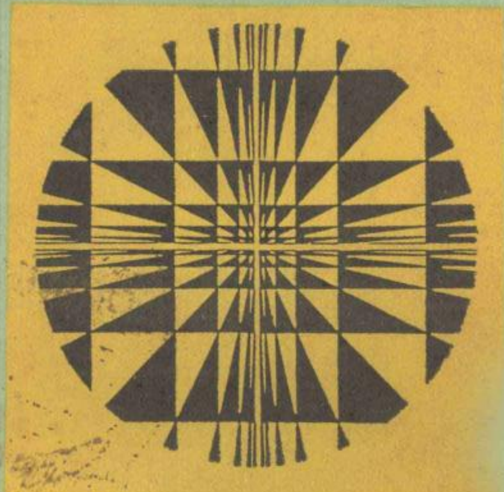
高等量子力学

苟增光 编



陕西师范大学出版社

高等量子力学

苟增光 编

陕西师范大学出版社

高等量子力学

荀增光 编

陕西师范大学出版社出版发行

（西安市陕西师大 120 信箱）

陕西省新华书店经销 西安电子科技大学印刷厂印刷

*

开本 787×1092 1/32 印张 12.125 字数 256 千

1990 年 11 月第 1 版 1990 年 11 月第 1 次印刷

印数：1—800

ISBN 7-5613-0347-5

G·290 定价：2.45元

前　　言

这本高等量子力学是作者给物理系研究生讲授高等量子力学课程的讲义经过多次修改而成的。它可以作为综合大学、理工科大学、师范大学的物理系、原子能系、无线电系各专业研究生，青年教师学习高等量子力学的教材或者参考书。同样，它也可以作为物理系本科高年级学生的选修课教材或者参考书。

在本教材的编写中，作者力求作到如下几点：

1．加强基础　考虑到高等量子力学是在本科量子力学的基础上开设的，本教材采用了强化的公理化体系，与国内现行教材不同，对于处在混态的微观系统的描述，明确地提出三条基本假设。这样做有利于读者对量子力学的规律有一个全面的、正确的、统一的理解。另外，对于波函数描述纯态的假设，选用了目前国外出现的最严格的提法：只有平方可积的实变量的复函数才可以描述微观系统的可实现的状态。并以此为基础得出一系列有趣的结果。

2．为应用服务　例如在对称性理论一章中，除了对维格纳—艾卡定理的推导和应用作了详尽的介绍以外，对于“对称法”和动力学方法之间的相辅相成、互相渗透、互相补充用实例也作了较大篇幅的介绍；在二次量子化方法一章中，突出了使用二次量子化方法解决实际问题的环节，例如对波色凝聚、超导、超流等现象的解释。其目的在于增强和提高读者

使用所学理论解决实际问题的兴趣和能力。

3．为后续课服务　在辐射的量子理论一章中，除了对电磁辐射与原子相互作用的全量子理论作了简介外，还有意使读者更多地注意到由量子力学向量子场论的过渡。

4．注意运算技能的培养　全书共配备了150个习题，可供选作。其中有一部分习题是教材中某些结论的证明。其目的在于增加教学过程的讨论气氛，促使教与学更紧密地结合。

由于水平所限，书中谬误之处在所难免。作者除了通过教学实践进一步修改、充实、提高外，诚恳希望同行和读者批评指正。

1990.4.22

目　　录

第一章　量子力学的基本假设

§1　物理系统状态的几率描述 波函数

众所周知，经典力学中一个物理系统任意时刻 t 的状态，完全决定于 n 个广义坐标和广义速度的数值（n是系统的自由度）。同时假定这 $2n$ 个动力学变量是可以同时准确测量的。

在量子力学中，物理系统状态的描述带有几率的性质。一般地讲，我们不可能给出表征系统性质的广义坐标 $\xi=\{\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_n\}\equiv\{\xi_i\}_1^n$ 的准确数值，而只能和它们的分布密度 $\rho(\xi, t)$ 打交道。已知 $\rho(\xi, t)$，则时刻 t 测得动力学变量 ξ 的数值在间隔 $(\xi, \xi+d\xi)$ 的几率

$$dw(\xi, t)=\rho(\xi, t)d\xi \tag{1.1}$$

物理系统的状态分为混态和纯态，而且纯态可以看作是混态的特殊情况。给定某一个复函数——波函数可以描述纯态的全部性质。根据玻恩的统计解释，波函数（亦称几率幅）决定动力学变量 ξ 的分布密度

$$\rho(\xi, t)=|\phi(\xi, t)|^2 \tag{1.2}$$

混态的描述比较复杂，本章的前 23 节将不涉及这一问题。另外，今后如不特别声明，“状态”一词将代表纯态。

总几率通常规定等于 1

$$\|\phi\|^2\equiv\int|\phi(\xi,t)|^2d\xi=1 \tag{1.3}$$

式中的积分区域是函数 $\psi(\xi,\ t)$ 的整个定义域，所以波函数应当是平方可积的。

关于只有平方可积函数描述物理系统实在状态的假设，是量子力学最重要的基本假设。但是，量子力学也常用到非平方可积函数描述的状态。这些状态只起辅助的作用，它们和系统实在状态之间的关系，将在下述每一种情况中专门给予说明。

实变数的平方可积复函数的全体称为线性的希尔伯特空间，它在数学上用符号 L_2 表示，因此，量子力学中假设：系统的每一个状态和 L_2 空间的某一个元素(矢量)相对应。在这个空间，内积是由以下关系引入的

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle\equiv\int\psi_1^*(\xi,\ t)\psi_2(\xi,\ t)d\xi \qquad (1.4)$$

式中 ψ_1，ψ_2 是 L_2 空间的任意矢量，星号表示复数共轭。这一定义满足内积的全部公理，其中包括

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle=\langle\psi_2|\psi_1\rangle^* \qquad (1.5)$$

L_2 空间的其它性质在附录 1 中给出。

下边举两个量子力学系统的例子。

1. k 粒子系统　这个系统具有 $3k$ 自由度。可以选取这些粒子的空间坐标 $\boldsymbol{r}_i$ 作为广义坐标 $\{\xi_i\}_1^{3k}$，$\{\xi_i\}_1^{3k}=\{\boldsymbol{r}_i\}_1^k$。系统的波函数是

$$\psi(\xi,\ t)=\psi(\boldsymbol{r}_1,\ \boldsymbol{r}_2,\ \cdots,\ \boldsymbol{r}_k,\ t)。$$

2. 刚体　这个系统的自由度是 6，可以取刚体质心的 3 个坐标和 3 个欧勒角作为广义坐标。系统的波函数具有形式

$$\psi(\xi,\ t)=\psi(x_1,x_2,x_3,\alpha,\beta,\gamma,t)$$

上述假设还包含以下两层意思，

(1) 如果物理系统 s 是由两个子系统 s_1 和 s_2 组成，s_1 和 s_2 的希尔伯特空间分别为 $L_2^{(s_1)}$ 和 $L_2^{(s_2)}$，则 s 的希尔伯特空间 $L_2^{(s)}$ 是 $L_2^{(s_1)}$ 和 $L_2^{(s_2)}$ 的直积空间(又称张量积或克朗尼克乘积空间)

$$L_2^{(s)} = L_2^{(s_1)} \otimes L_2^{(s_2)}.$$

(2) 如果一个物理系统同时参予两种运动，则该物理系统的希尔伯特空间是描述两种独立运动的希尔伯特空间的直积空间。

以上的结论可以推广到由两个以上子系统组成的系统，以及一个物理系统同时参予两种以上运动的情况。

§2 量子力学中的物理量

什么是时刻 t 对物理系统状态的完全描述呢？所谓"完全描述"就是给出该时刻表征系统性质的、全部的、独立的物理量的分布密度. §1中已经针对波函数宗量的物理量讨论过这一问题。现在，我们来讨论其它的物理量。

量子力学中作了如下的假设。

假设 1 每一个物理量 F 由作用在空间 L_2(或包含 L_2 在内的更大的空间)中的线性厄米算符 $\hat{F}$ 来表示。基本物理量的算符形式是由假设给出的。如果物理量 G 是物量 F 的函数，则 G 由如下算符表示

$$\hat{G} = \frac{1}{2}(G(\hat{F}) + (G(\hat{F}))^{+}) \tag{2.1}$$

"+"表示厄米共轭。

我们约定一些术语和表示。

设 ϕ_1 和 ϕ_2 是 L_2 中的任意元素(矢量)，如果等式

$$\langle\phi_1|\hat{F}\phi_2\rangle=\langle\hat{F}^+\phi_1|\phi_2\rangle \tag{2.2}$$

满足，则算符 $\hat{F}^+$ 称为算符 $\hat{F}$ 的厄米共轭算符。同样，矢量 ϕ_1 和 $\hat{F}\phi_2$ 的内积也可以写成

$$\langle\phi_1|\hat{F}\phi_2\rangle\equiv\langle\phi_1|\hat{F}|\phi_2\rangle \tag{2.3}$$

利用这种新的形式，条件(2.2)可以改写为

$$\langle\phi_1|\hat{F}|\phi_2\rangle=\langle\phi_2|\hat{F}^+|\phi_1\rangle^* \tag{2.4}$$

如果在 L_2 中满足如下关系

$$\hat{F}=\hat{F}^+ \tag{2.5}$$

即对于 L_2 中任意的 ϕ_1 和 ϕ_2

$$\langle\phi_1|\hat{F}|\phi_2\rangle=\langle\phi_2|\hat{F}|\phi_1\rangle^* \tag{2.6}$$

算符 $\hat{F}$ 称为厄米的或自轭的。

附录 2 中给出了线性算符和它们性质的全部必要的知识。

假设 2 在任意的量子力学状态中，物理量 F 可能具有的数值，只能是属于算符 $\hat{F}$ 的谱中的值。

一般情况下，算符 $\hat{F}$ 的谱是离散(分立)谱 $F_1,F_2,\cdots,F_n,\cdots$ 和连续谱$\{f\}$的总和，在状态 $\phi(\xi,t)$中进行测量时，物理量的每一个值的出现具有一定的几率。一般地说，这种几率是随着时间变化的。让 $\rho(F_n)$是时刻 t 在态 $\phi(\xi,t)$ 中物理量 F 具有值 F_n 的几率；让 $\rho(f)$是相应的连续谱在点 f附近的几率密度。我们将把数值 $\rho(F_n)$和 $\rho(f)$的总体称为物理量 F 在态 $\phi(\xi,t)$中的分布。显然，这个分布满足条件

$$\sum_n\rho(F_n)+\int\rho(f)df=1 \tag{2.7}$$

在态 $\phi(\xi,t)$中物理量分布的最重要的特征是它的平均

值(数学期待值)

$$\overline{F}=\sum_n F_n\rho(F_n)+\int f\rho(f)df \tag{2.8}$$

和均方偏差

$$D_F=\sum_n (F_n-\overline{F})^2\rho(F_n)$$
$$+\int(f-\overline{F})^2\rho(f)df \tag{2.9}$$

一般地讲，不论是分布 $\rho(F_n)$和 $\rho(f)$还是它的均方偏差都是随着时间变化的.

假设 3 物理量 F 在状态 $\psi(\xi,\ t)$ 中的平均值由下式计算

$$\overline{F}=\frac{\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \tag{2.10}$$

如果波函数是归一化的，则

$$\overline{F}=\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle \tag{2.11}$$

可见 $\overline{F}$ 对时间 t 的依赖性决定于波函数和算符 $\hat{F}$ 对时间的依赖性.可以证明(2.11)式与(2.8)式一致.

下边我们对假设 1-3 作较详细的讨论.

1．证明，由于 $\hat{F}$ 的厄米性应该得出平均值 $\overline{F}$ 是实数。实际上，由(2.11)式有

$$(\overline{F})^*=\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle^*=\langle\psi|\hat{F}^+|\psi\rangle=\psi|\hat{F}|\psi\rangle$$

即

$$(\overline{F})^*=\overline{F}$$

同时我们发现，(2.1)式的结构保证了算符 $\hat{G}$ 的厄米性.

2．已知，如果在算符 $\hat{F}$ 的定义域 $D_{\hat{F}}$ 内存在一个属于 L_2 的函数(矢量)$\psi\neq 0$，使得如下等式成立

$$\hat{F}\phi = F\phi \qquad (2.13)$$

则称 F 为算符 $\hat{F}$ 的本征值，函数 ϕ 为算符 $\hat{F}$ 属于本征值 F 的本征函数(本征矢量)．正如在数学中证明过的，算符的本征值的全体组成分立谱．我们将用$\{\varphi_n\}$表示厄米算符 $\hat{F}$ 的本征函数的集合，而用$\{F_n\}$表示它的本征值的集合

$$\hat{F}\varphi_n = F_n\varphi_n \qquad (2.14)$$

如果不属于 L_2 空间的有限函数 $\chi_f(\xi)$满足方程(2.13)，则如数学中所证明的,在这种情况下，数 f 属于算符 $\hat{F}$ 的连续谱，相应的函数 $\chi_f(\xi)$称为广义本征函数或者连续谱函数．广义本征函数的集合我们用$\{\chi_f\}$表示，连续谱点的集合用$\{f\}$表示．点谱和连续谱的总体称为算符的完全谱．泛函分析中证明厄米算符的完全谱分布在实数轴上．任意物理量算符谱的实数性与测量结果的实数要求是一致的．

不同的本征函数 φ_n 有可能对应同一个本征值，这样的本征值称为简并的，相应的线性独立的本征函数的个数称为这个本征值的简并度，类似的情况对于连续谱也可能存在．

任何时候总可以认为(参阅附录 2)本征函数组成正交归一的集合

$$\langle\varphi_k|\varphi_l\rangle = \delta_{kl} \qquad (2.16)$$

在泛函分析中证明，连续谱的本征函数总可以认为满足条件

$$\int\chi^*_{f'}(\xi)\chi_f(\xi)d\xi = \delta(f-f') \qquad (2.17)$$

它同本征函数的正交归一化条件(2.16)类似．(δ 函数的性质在附录 4 中给出)．另外，任意的广义本征函数 χ_f 与任意的本征函数 φ_n 正交

$$\langle\varphi_n|\chi_f\rangle = 0 \qquad (2.18)$$