

量子力学教学丛书

喀兴林主编

715327

量子力学的基本原理 与表象理论

岑业森 编著

福建科学技术出版社

量子力学的基本原理 与表象理论

岑业森 编著

福建科学技术出版社

1990年·福州

量子力学的基本原理与表象理论

岑业森 编著

福建科学技术出版社出版

(福州得贵巷27号)

福建省新华书店发行

福建新华印刷厂印刷

开本787×1092毫米 1/32 3.5印张 72千字

1990年3月第1版

1990年3月第1次印刷

印数: 1—1 590

ISBN 7—5335—0331—7/G·51

定价: 1.40元



前 言

量子力学这门学科自1925年诞生以来，至今已有60多年了。在这60多年中，它已从“原子的理论”发展成为微观现象的普遍理论，是一切近代物理学的理论基础。目前，量子力学是大学物理系的一门重要基础课，是所有学物理的人都必须认真学习的一门必修课，学习的份量在增加，内容也在提高。不仅如此，理科的化学、生物学等学科和工科的材料科学、激光和半导体等学科也都要学习这门课程。

然而，由于量子力学所反映微观世界中的许多概念和规律，不能像经典概念那样根据人们的生活经验去体会，使量子力学这门课程显得有些抽象难懂。加上量子力学所用的数学方法又与人们所熟悉的经典物理有较大的差别，使得这门课程变为既不容易教又不容易学。

我们经常听到不少担任量子力学课的年轻教师提出，希望能看到一些有助于他们提高教学水平、能解决他们备课和教学中问题的参考资料；也听到许多学习量子力学的大学生提出，希望能看到帮助他们理解概念、学好这门课程的参考读物。为此，全国高校量子力学研究会针对广大师生的要求，组织编写了这一套《量子力学教学丛书》。该丛书紧密配合大学的量子力学课程，把内容分为若干个单元，每一分册针对一个单元，对其中所涉及的概念和规律、重点、难点以及用到的数学技巧，作了较详细、全面和较深入的分析 and 讲解，有些地方也对有关的知识作一定的拓宽和加深。目的

是帮助读者更好地掌握量子力学中的概念和理论，以及教好和学好这门十分重要和有用的课程。

《丛书》的每一分册都是请有丰富教学经验并对本专题有深入研究的教授或副教授执笔。各书具有相当大的独立性，自成体系，与其他分册联系不多，这是为了使各位作者充分地写出自己的教学经验和特定风格。同时，对《丛书》的体例和格式等方面没有过分地追求一致，使每本书带有自己的特色。

我们希望这套《丛书》能够在一定程度上满足不同方面的读者需要，对读者的教学工作学习上有点帮助。同时，也希望各位读者对这套《丛书》的内容和编排等各个方面，给予批评和指教。

全国高校量子力学研究会理事长

喀兴林

1989.4

引 言

量子力学基本原理和表象理论，是量子力学课程教学重点内容之一，也是教和学比较困难的部分。本书是针对大学生一般感到困惑的地方，增添一些分析讨论，其中包括：量子态、波函数、态迭加原理、力学量算符表示、薛定谔方程、态和力学量的各种表象、狄拉克符号、表象变换和运动图象等。这部分内容只涉及到非相对论单粒子体系，因此本书仅在这个范畴内讨论问题。书中章节安排尽量做到与国内较流行的教材相配合。由于本书是教学参考读物，难免与现行教材有些重复，而着重是把基本概念和规律说清楚，同时提醒读者应该特别注意的某些问题，以帮助读者更好地掌握这部分基本内容。

目 录

第一章 量子态及其描述	1
§ 1 量子态	1
§ 2 波函数	5
§ 3 态迭加原理	9
第二章 力学量及算符	16
§ 1 力学量算符表示	16
§ 2 力学量的统计分布	21
§ 3 本征波函数的重要性质	26
§ 4 同时确定两个力学量的数值问题	35
§ 5 力学量的完全集合	40
§ 6 测不准关系	42
第三章 运动方程	46
§ 1 薛定谔方程	46
§ 2 几率流密度和几率守恒定律	50
§ 3 定态薛定谔方程	52
第四章 表象理论	57
§ 1 表象概述	57
§ 2 狄拉克符号	67
§ 3 量子力学基本公式的表述	75
§ 4 表象变换	84
§ 5 图象 (绘景)	94

第一章 量子态及其描述

§ 1 量 子 态

一、微观粒子的波粒二象性

历史上最早由德布罗意 (*de Broglie*) 于1924年提出物质波的假设,认为一切微观粒子都具有波动性和粒子性,并把粒子性的能量 E 、动量 $\vec{P}$ 和波动性的频率 ν 、波长 λ ,如同光的波粒二象性的爱因斯坦 (*Einstein*) 公式一样联系起来,即

$$E = h\nu = \hbar\omega \quad (1.1)$$

$$\vec{p} = \frac{h}{\lambda} \vec{n} = \hbar \vec{k} \quad (1.2)$$

这两个式子被称为德布罗意公式或称德布罗意关系。式中 h 是普朗克(*Planck*)常数,其值是 $h = 6.6259 \times 10^{-34}$ 焦耳·秒,

$\hbar$ 是常用符号,其值是 $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.0545 \times 10^{-34}$ 焦耳·秒,

$\omega = 2\pi\nu$ 是角频率, $\vec{n}$ 是粒子运动方向的单位矢量, $\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{n}$ 是波矢量。

德布罗意关系 (1.1) 式和 (1.2) 式是否有真实意义,由实验证实或由它建立起来的符合逻辑的理论所推演的结果与实验现象进行比较来加以证明。(1.2) 式是可以由实验直接证明的,1927年戴维孙 (*Davisson*) 和革末 (*Germer*) 做的电子衍射实验,便是直接证明的实验之一。但是 (1.1) 式却是无法直接验证的,因为德布罗意波的频率 ν (或 ω) 不

能测定，所以（1.1）式只能由后来建立起来的量子力学理论间接来证实。

微观粒子具有波粒二象性的含意，虽然并不十分复杂，但是它赋予微观粒子行为的新意却是十分深刻的。人们对于微观粒子二象性的理解，困难在于按经典观念去寻求一个微观粒子模型（图象）。在经典观念中，波动和粒子是完全不可统一的两回事，所谓波动是某一物理量（位移、力、压强、密度、电场强度……等）的振动在介质中传播的过程，并且在一定条件下会产生干涉、衍射现象（衍射本质上也是干涉），所谓粒子是具有确定质量、电荷、动量、能量等一整份在空间集中出现的客体，并且在时空运动中有一条确定的轨道。微观粒子既有波动性又有粒子性，不可能设想就是经典波，经典波无粒子性，也不可能设想是经典粒子，经典粒子无波动性。设想它是由粒子组成的疏密波或是粒子由波组成的波包等历史上出现过的模型，也因不符合事实（例如一个粒子也有波动性和德布罗意波包在真空中也会弥散等），早已被抛弃，所以很难想象出微观粒子究竟是什么东西。注意，按经典观念去拼凑一个微观粒子的具体模型，是注定无任何结果的。量子力学不可能给微观粒子提供任何具体模型，事实上也不必要有一个具体模型。量子力学的主要任务是提供研究微观粒子行为的方法以及寻求支配这些行为的运动规律，以便利用它们去解释已有的现象和发现新的现象。因此，必须把注意力集中在理解微观粒子二象性上，根据实验结果，承认它同时具有波粒二象性。但必须注意，粒子波动性仅仅是指粒子运动在某种条件下产生干涉、衍射现象，并不包含什么物理量的振动在介质中传播的观念；粒子性仅仅是指粒子与物质相互作用时，总是一整份在空间集中出现

的客体，从来没有发现过粒子的“碎片”，至于粒子运动有轨道的观念也是不包含在内的。

二、微观粒子体系的状态 量子系统

什么是微观粒子体系的状态？要弄清这个概念，必须对微观粒子的行为作必要的分析。我们先回顾宏观质点（粒子）的运动状态，一个宏观质点，在一定坐标势函数作用下，服从牛顿（*Newton*）运动定律，只要给出初始条件（初位置和初动量），质点将作一定的运动，便称质点处于一定的运动状态。简言之，当力场和初始条件确定后，质点的运动方式是唯一确定的，这是经典态的特点。比方有心力场，设质点在与力心距离平方成反比的引力作用下，因系保守力场，质点总能量守恒，只要给出质点的初位置和初动量，质点体系的总能量 E 便确定了，那么质点必定是在平面内作椭圆运动（当 $E < 0$ ）或抛物线运动（当 $E = 0$ ）或双曲线运动（当 $E > 0$ ）。

现在来考察一个微观粒子的运动，它和宏观质点的运动截然不同。以电子圆孔衍射理想实验为例，设有一束密度不大的电子束（保证电子之间没有相互作用），射向开有小圆孔的屏，电子束通过小圆孔在屏后会产生衍射，电子打在屏后照相乳胶上显示一系列明暗相间的衍射环纹。这个实验完全可以换一个方式进行，或者使用许多套和刚才完全相同的实验配置，每套都只让一个电子通过圆孔落在一张照相乳胶上，于是得到许多张电子的感光照片，每张照片上都只有一个感光点（而不是衍射环纹），且各张照片感光点的位置几乎都不相同，把这许多照片重迭在一起，将发现感光点迭合的结果呈现出和刚才许多电子同时穿过一个圆孔完全一样的

明暗相间的衍射环纹；或者仍然使用那套实验配置，而让电子一个挨一个地通过圆孔，照相乳胶上起先得到一个位置无规则的感光点，但当时间足够长时，最后也呈现出和刚才完全一样的明暗相间的衍射环纹。从这个实验使我们确切地知道两点：（1）每个电子到达照相乳胶时是落在一点上，但是落在哪个位置上是完全不能预知的，带有偶然性；（2）一个电子在相同实验配置下做多次重覆实验，电子落在照相乳胶上的位置分布是完全确定的，有必然性。

微观粒子的行为既然是呈现出统计性的规律，而统计对象是以一个粒子为蓝本的完全相同而又没有相互作用的大数目的粒子的集合，这样的集合被称为量子系综（纯粹系综）。如：刚才电子圆孔衍射实验中，那电子束或那许多套完全相同的实验配置下的电子集合，或那一个挨一个的电子集合，便是一个量子系综。

有了量子系综的观念之后，才可以说一个微观粒子的行为具有统计性规律，这个粒子自然是量子系综的代表；或者说它是量子系综的抽样。反过来说，一个微观粒子代表量子系综时，它的行为要服从一种统计性规律，它的运动方式与经典粒子不同，不能唯一确定，可以有各种各样的运动方式，这便是微观粒子行为的特点。因此，一般地说，粒子体系服从一定的规律（统计规律）作各种可能的运动，每一种这样的运动被称为这个体系的一个状态。强调一点，所谓粒子体系的状态，指的是属于量子系综的状态，简称量子态，离开了量子系综的观念，个别粒子的行为，我们是一无所知的，这一点自始至终都要牢记。

§ 2 波 函 数

量子力学理论和其它物理理论一样，它的最终目的是给出客观对象运动过程的全部知识（或讯息），也就是给出任何时刻各种实验测量的结果。因此，要求能够描述体系状态的量应该包括两个方面：（1）由这个（些）量可以得到体系的全部知识；（2）能够找出这个（些）量随时间变化的方程式，从而由某一时刻这个（些）量的数值，确定以后任何时刻这个（些）量的数值。

众所周知，经典力学是用位置坐标和其共轭动量来描述体系的状态的。因为宏观质点的运动方式在具体问题中是唯一确定的，某时刻质点的位置坐标和其共轭动量同时具有确定的数值，体系其它力学量（可由实验具体测量的所有力学量）全部是位置坐标和动量的函数；若知道了某一时刻质点的位置坐标和动量，通过牛顿运动方程或哈密顿（Hamilton）正则方程，对质点体系可以作出决定性的描述，即可以得到任何时刻质点的位置坐标和动量的数值。因此，位置坐标和动量确是能够描述经典态的量。但量子态和经典态不同，上节已经讨论过微观粒子的运动方式不是唯一确定的，粒子在时空中运动不存在一条什么轨道，原则上说，微观粒子的位置坐标、动量等力学量不是唯一确定的，每个力学量可以有各种数值，但是在一定的态中，取各种数值的几率是确定的，有一个对应的统计分布。因此，我们不能象经典粒子那样采用位置坐标和动量对微观粒子作决定性描述，而只能采用一系列力学量的统计分布来作统计性描述。

量子力学假说, 用一个以位置坐标 $\vec{r}$ 为自变量和以时间 t 为参量的波函数 $\Psi(\vec{r}, t)$, 以它的强度 $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \Psi^*(\vec{r}, t)\Psi(\vec{r}, t)$ 反映粒子位置几率分布. 按照玻恩(Born)的解释: 波函数在空间某一点的强度 (振幅绝对值的平方) 和在该点找到粒子的几率成比例. 如果 $\Psi(\vec{r}, t)$ 已经归一化, 则 $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 dxdydz$ 等于某时刻 t 粒子在位置坐标 $\vec{r}$ 附近坐标体积元 $dxdydz$ 中出现的几率.

其它力学量, 例如动量 $\vec{p}$ 的几率分布, 当然可以相似地用一个波函数 $C(\vec{p}, t)$, 如果它已经归一化, 则

$|C(\vec{p}, t)|^2 dp_x dp_y dp_z$ 等于某时刻 t 粒子在动量 $\vec{p}$ 附近动量体积元 $dp_x dp_y dp_z$ 中出现的几率.

众所周知 $\Psi(\vec{r}, t)$ 与 $C(\vec{p}, t)$ 互为傅里叶(Fourier)变换

$$\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \iiint_{-\infty}^{\infty} C(\vec{p}, t) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} dp_x dp_y dp_z \quad (1.3)$$

$$C(\vec{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \iiint_{-\infty}^{\infty} \Psi(\vec{r}, t) e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} dxdydz \quad (1.4)$$

可以看出, 若知道了波函数 $\Psi(\vec{r}, t)$ 的具体形式, 可以由 (1.4) 式算出 $C(\vec{p}, t)$. 反之, 若知道了波函数 $C(\vec{p}, t)$ 的具体形式, 可以由 (1.3) 式算出 $\Psi(\vec{r}, t)$. 故 $\Psi(\vec{r}, t)$ 和 $C(\vec{p}, t)$ 是完全等价的. 若给出了 $\Psi(\vec{r}, t)$, 不但粒子的位置几率分布能确定下来, 而且粒子的动量几率分布也能被确定下来. 其它任意力学量 Q 的几率分布, 也可以由已知的 $\Psi(\vec{r}, t)$, 通过类似的变换求得波函数 $\Phi(Q, t)$ 而确

定，即由波函数 $\Psi(\vec{r}, t)$ 可以得到体系的全部知识（目前只是在三个自由度的现实空间讨论问题，没有考虑粒子的自旋自由度）。至于怎样找出波函数随时间变化的方程式，并由某时刻 t_0 的波函数 $\Psi(\vec{r}, t_0)$ 的数值，确定以后任何时刻 t 的波函数 $\Psi(\vec{r}, t)$ 的数值问题，将在第三章 §1 中作详细讨论。总之，微观体系的状态（量子态），可以用一个波函数 $\Psi(\vec{r}, t)$ 完全描述。

既然波函数 $\Psi(\vec{r}, t)$ 的强度 $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ 是反映粒子位置的几率分布，则因为粒子在时空中出现的几率不会发生突变，所以波函数 $\Psi(\vec{r}, t)$ 必须在变量变化的全部区域内是连续的和有限的；又因为粒子在某时某点出现的几率是唯一确定的，所以波函数 $\Psi(\vec{r}, t)$ 必须是变量的单值函数。总之，由于物理上的考虑，波函数 $\Psi(\vec{r}, t)$ 在变量变化的全部区域内，必须满足连续、有限和单值的要求，这叫做波函数的自然条件或称标准条件。

注意，描述量子态的波函数与经典波波函数在性质上有重要的区别，两者除了有相干迭加性以外，其余是毫无共同之处的。首先，描述量子态的波函数一定是复函数（参见第三章 §1），它不是一个物理量，其意义仅仅是它的绝对值的平方 $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \Psi^*(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t)$ ，反映粒子位置的几率分布，因此常称它是几率波。而经典波波函数是代表某一个物理量的时空分布，这是两者重要区别之一，其次，因为微观粒子在一个有限的空间 τ 中运动，则必需在全空间内，任何时刻都应该找到该粒子，这是完全有把握的事。所以凡是描写束缚态的几率波波函数，都应该可以归一化为 1，即

$$\int_V |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d\tau = 1 \quad (1.5)$$

若几率波波函数 $\Phi(\vec{r}, t)$ 尚未归一化，一般乘上某一常数 C (可以是复常数) 之后，即 $C\Phi(\vec{r}, t)$ 可以归一化为 1。 C 被称为归一化常数，它的求法如下，因要求

$$\int_V |C|^2 |\Phi(\vec{r}, t)|^2 d\tau = 1 \quad (1.6)$$

所以

$$C = \frac{1}{\left(\int_V |\Phi(\vec{r}, t)|^2 d\tau \right)^{\frac{1}{2}}} \quad (1.7)$$

由 $\Phi(\vec{r}, t)$ 改写成 $C\Phi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}, t)$ 的 (1.6) 式，叫做归一化手续或归一化条件。任何描述量子态的波函数都要归一化的，这是物理上的要求，而经典波波函数不存在归一化问题，根本无归一化可言，这也是两者重要区别之一，人们所关心的是粒子位置几率分布的各处相对几率，把原来的波函数 $\Phi(\vec{r}, t)$ 归一化，由 $\Phi(\vec{r}, t)$ 改写成 $C\Phi(\vec{r}, t) = \Psi(\vec{r}, t)$ 无关紧要，因为 $|\Phi(\vec{r}, t)|^2$ 和 $|C|^2 |\Phi(\vec{r}, t)|^2$ 各处相对几率是一样的，即

$$\frac{|\Phi(\vec{r}_1, t)|^2}{|\Phi(\vec{r}_2, t)|^2} = \frac{|C|^2 |\Phi(\vec{r}_1, t)|^2}{|C|^2 |\Phi(\vec{r}_2, t)|^2}$$

所以 $\Phi(\vec{r}, t)$ 和 $C\Phi(\vec{r}, t)$ 是描述同一个量子态。但是经典波波函数却不同，如果 $\Phi(\vec{r}, t)$ 是经典波波函数的话，它是某一个物理量， $|\Phi(\vec{r}, t)|^2$ 是表示该物理量的波动强度，则 $|C|^2 |\Phi(\vec{r}, t)|^2$ 是表示该物理量的波动强度增加

了 $|C|^2$ 倍,体系的状态便完全不同了,这里显示描述量子态的波函数与经典波波函数又一重要区别。

最后讨论关于平面德布罗意波

$$\Psi(\vec{r}, t) = C e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)} \quad (1.8)$$

不能用(1.7)式来求归一化常数 C 的问题。这样的平面波弥漫在整个无限大空间($\tau \rightarrow \infty$),而(1.7)式分母的积分发散

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \int_{\tau} \left| e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)} \right|^2 d\tau = \infty$$

因此,平面波(1.8)式的归一化手续要另外讨论,即把它形式上归一化为 δ 函数,这是大家熟知的。事实上,用平面波来描述具有确定动量 $\vec{p} (= \frac{h}{\lambda} \vec{n})$ 的自由粒子是理想情况,

现实的自由粒子不可能那么单色(有确定动量 $\vec{p}$ 对应确定波长 λ),现实的自由粒子应该用局限于有限空间的一个波包来描述,它的动量和能量都是不确定的。所以平面德布罗意波的归一化问题,并不影响概念上对波函数应该归一化为1的理解。

§3 态迭加原理

量子力学中态迭加原理是一个具有物理内容的带根本性的原理,说明量子系综的一个重要统计特性。国内外教科书对于态迭加原理的提法不完全相同,前提定义也不相同,切忌把一家观点强加于另一家,作些无益的争议。本节只就目前国内较流行的教科书(例如周世勋编《量子力学教程》)一种关于态迭加原理的表述,给予补充讨论。态迭加原理表

述如下：

如果 Ψ_1 和 Ψ_2 是体系的可能状态，那末，它们的线性迭加

$$\Psi = C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2 \quad (1.9)$$

(C_1 、 C_2 是复数)也是这个体系的一个可能状态。

补充说明一点，当粒子处于 Ψ_1 和 Ψ_2 的线性迭加态 Ψ 时，粒子是既处在态 Ψ_1 ，又处在态 Ψ_2 。

该原理的实质性内容是什么呢？首先，什么是体系的可能状态（或称体系可能实现的状态）？怎样理解“……既处在态 Ψ_1 ，又处在态 Ψ_2 。”（还有一个提法是“……部分处在态 Ψ_1 ，部分处在态 Ψ_2 。”等）？

考察电子的双缝衍射实验，如下图所示。让一束密度不过大能保证电子之间没有相互作用的电子束通过双缝产生衍射，实验的步骤是：（1）关闭缝2打开缝1。通过缝1

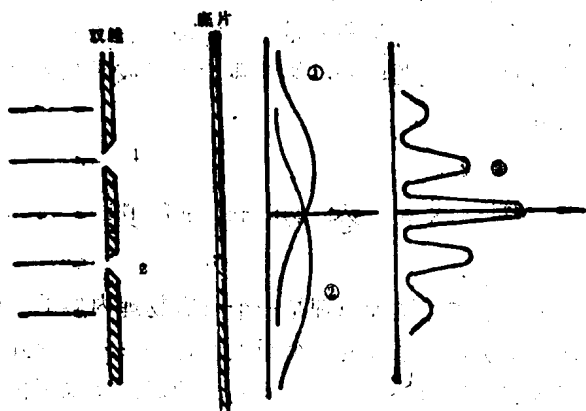


图1—1