高校核心课程学习指导丛书

量子力学题解

量子理论在现代物理中的应用

THE QUANTUM MECHANICS SOLVER

HOW TO APPLY QUANTUM THEORY TO MODERN PHYSICS

〔法〕吉恩·路易斯·巴德旺
〔法〕吉恩·达利巴尔 /著

丁亦兵　沈彭年 /译

中国科学技术大学出版社

高校核心课程学习指导丛书

量子力学题解

量子理论在现代物理中的应用

THE QUANTUM MECHANICS SOLVER

HOW TO APPLY QUANTUM THEORY TO MODERN PHYSICS

〔法〕吉恩·路易斯·巴德旺
〔法〕吉恩·达利巴尔 / 著
丁亦兵　沈彭年 / 译

中国科学技术大学出版社

安徽省版权局著作权合同登记号:第 12151582 号

图书在版编目(CIP)数据

量子力学题解:量子理论在现代物理中的应用/(法)吉恩·路易斯·巴德旺,(法)吉恩·达利巴尔著;丁亦兵,沈彭年译.—合肥:中国科学技术大学出版社,2018.1

书名原文:The Quantum Mechanics Solver: How to Apply Quantum Theory to Modern Physics

ISBN 978-7-312-03971-3

Ⅰ.量… Ⅱ.①吉… ②吉… ③丁… ④沈… Ⅲ.量子力学—高等学校—题解 Ⅳ.O413.1-44

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2016)第 116160 号

出版 中国科学技术大学出版社
安徽省合肥市金寨路 96 号,230026
http://press.ustc.edu.cn
https://zgkxjsdxcbs.tmall.com

印刷 安徽省瑞隆印务有限公司

发行 中国科学技术大学出版社

经销 全国新华书店

开本 710 mm×1000 mm 1/16

印张 17.75

字数 358 千

版次 2018 年 1 月第 1 版

印次 2018 年 1 月第 1 次印刷

定价 49.00 元

序

量子力学是新问题和有趣的观测现象的一个无穷无尽的源泉. 在目前量子力学的解释及其哲学含义的流行争论中，以及在基础物理和应用物理及数学问题中，我们都可以找到许多例子.

量子力学的讲授大多依赖于理论课程，它们通过一些简单的、时常带有数学特征的练习来举例说明. 把量子物理简化成这种类型的问题有点令人沮丧，因为只有极少的实验的量，如果有的话，可以用来与这些结果相比较. 不管怎么样，长期以来，从 20 世纪 50 年代到 70 年代，这些基本练习的唯一选择似乎只限制在起源于原子物理和核物理的问题，它们被转换为精确的可解问题并且与已知的一些较高阶的超越函数联系起来.

在过去的 10 年或 20 年中，情况发生了根本的变化. 高技术的发展是一个很好的例子. 对初学者来说，一维方势阱曾经是一个相当好的教学练习. 半导体技术中量子点和量子阱的出现已经彻底地改变了这种情况. 光电子学及相关联的红外半导体和激光技术的发展已经显著地提升了方势阱模型的科学地位. 结果，越来越多的重点放在了现象的物理方面而不是在分析或计算的考虑上.

近年来，量子理论一开始就提出的许多基本问题得到了实验的回应. 一个很好的例子是 20 世纪 80 年代的中子干涉实验，它对 50 年来关联着波函数相位可测性的老问题给出了实验的回答. 也许最基本的例子是贝尔不等式（Bell's inequality）破坏的实验证明和纠缠态的性质，它们已经在自 20 世纪 70 年代后期起的一些决定性的实验中被确立了.

最近，为定量验证退相干效应和“薛定谔猫”状态所进行的实验已经引起了对量子力学基础和解释的极大兴趣.

本书包含了一系列关系到现代量子力学的实验或理论的问题. 所有这些问题都基于实际的物理实例，即使有时把所考虑的模型的数学结构有意地简化，也是为了更迅速地掌握物理.

在过去的十几年，这些问题都曾经出给了我们在巴黎高等理工学院和巴黎高等师范学校的学生. 巴黎高等理工学院的特色来自两个多世纪一直被保持的一个传统，由此说明了为什么每年都有必要设计一些原创性的问题. 考试有双重的目的. 一方面，它是一种测试学生知识和能力的手段；另一方面，不管怎样，它也被视为工程、行政管理和军事职业方面公职工作入职考试的一部分. 因此，激烈的竞争性考试的传统特征和严格的精才管理制度禁止我们利用可在现有著作中找到的问题. 所以，我们必须在目前的研究前沿中寻找问题. 结果证明，我们与许多同事合作完成的这项工作是我们之间进行讨论的一个令人吃惊的源泉. 通过把各自感兴趣的领域的知识汇集在一起，我们实际上都学到了很多东西.

与 2000 年施普林格出版社出版的这本书的第 1 版相比，我们已经做了若干修改. 首先，本书包含了一些新的主题，如有关测量中微子振荡、量子点、量子温度计等方面的进展. 其次，在开始的时候一个关于量子力学基础和我们使用的公式的小结显然是很有用的. 最后，我们把问题分到了三个主要的主题组之下. 第一个主题（A 部分）处理基本粒子、原子核和原子，第二个主题（B 部分）处理量子纠缠和量子测量，而第三个主题（C 部分）处理复杂系统.

我们受惠于很多同事，他们要么提供了起推动作用的主意，要么写出了呈现在这里的一些问题的初稿. 我们想把敬意献给吉尔伯特 · 格林柏格（Gilbert Grynberg），他撰写了第 1 版的“交叉场中的氢原子”、“隐变量和贝尔不等式”及“中子束的光谱测量”. 我们特别要感谢佛朗索瓦 · 贾戈尔（François Jacquet）、安德烈 · 鲁热（André Rougé）和吉姆 · 里什（Jim Rich）的关于“中微子振荡”的启发性讨论. 最后，我们要感谢菲利普 · 格兰杰尔（Philippe Grangier），他实际上构思了很多问题，其中有“薛定谔猫”、“理想的量子测量”和

“量子温度计”，还有杰拉尔德 · 巴斯塔德（Gérald Bastard）的“量子点”，让-诺埃尔 · 查扎尔维埃勒（Jean-Noël Chazalviel）的“电子自旋共振中的超精细结构”，蒂埃里 · 优利克（Thierry Jolicoeur）的“磁激子”，伯纳德 · 埃凯（Bernard Equer）的“用正 μ 子探测物质”，文森特 · 吉利特（Vincent Gillet ）的“物质中离子的能量损失”，伊凡 · 卡斯坦（Yvan Castin）、让-米歇尔 · 库尔蒂（Jean-Michel Courty）、多米尼克 · 德朗德（Dominique Delande）的“原子在表面上的量子反射”和“周期势中的量子运动”.

吉恩 · 路易斯 · 巴德旺

吉恩 · 达利巴尔

2005 年 4 月于帕莱索（Palaiseau）

目　录

第 2 部分　量子纠缠和测量

第 3 部分 复杂系统

概　要

下面我们对量子力学的基本定义、标记法和结果给出一些提示.

0.1 原　理

希尔伯特 (Hilbert) 空间

量子物理问题处理的第一步是准确恰当地描述该系统的希尔伯特空间. 希尔伯特空间是一个具有厄米的标量积的复矢量空间. 该空间的矢量称为右矢（ket）并用 $|\psi\rangle$ 标记. 右矢 $|\psi_1\rangle$ 和右矢 $|\psi_2\rangle$ 的标量积标记为 $\langle\psi_2|\psi_1\rangle$. 它对于 $|\psi_1\rangle$ 是线性的，而对于 $|\psi_2\rangle$ 是反线性的，故有

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

系统态的定义；纯态

一个物理系统的态在任意时刻 t 由归一到 1 的希尔伯特空间矢量完全确定，记为 $|\psi(t)\rangle$. 如果 $|\psi_1\rangle$ 和 $|\psi_2\rangle$ 是一个给定物理系统的两个可能的态，由叠加原理，任意线性组合

$$|\psi\rangle \propto c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle$$

也是系统的一个可能的态，在这里 c_1 和 c_2 是复数. 这些系数的选取必须使 $\langle\psi|\psi\rangle = 1$.

测量

人们把一个作用在希尔伯特空间的自共轭（或厄米）算符 $\hat{A}$ 关联到一个给定的物理量 A. 在量 A 的测量中，唯一可能的结果是 $\hat{A}$ 的本征值 a_α.

考虑一个系统处于 $|\psi\rangle$ 态. 在物理量 A 的测量中，获得结果为 a_α 的概率 $\mathcal{P}(a_\alpha)$ 为

$$\mathcal{P}(a_\alpha) = \|\hat{P}_\alpha|\psi\rangle\|^2,$$

其中 $\hat{P}_\alpha$ 是投影到与本征值 a_α 关联的本征子空间 ε_α 的投影算符.

测量 $\hat{A}$ 给出结果 a_α 之后，系统的态就正比于 $\hat{P}_\alpha|\psi\rangle$（波包投影或约化）.

一次单一的测量只能给出测量后系统的态的信息. 得到的有关测量之前的态的信息非常“匮乏”，即如果测量给出 a_α 的结果，人们仅能推断态 $|\psi\rangle$ 不在与 ε_α 正交的子空间.

为了获得测量之前态的精确信息，人们需要使用 N（$N \gg 1$）个独立的系统，它们都被制备成相同的 $|\psi\rangle$ 态. 如果我们对 $\hat{A}_1$（本征值 $\{a_{1,\alpha}\}$）进行了 N_1 次测量，对 $\hat{A}_2$（本征值 $\{a_{2,\alpha}\}$）进行了 N_2 次测量，等等（$\sum\limits_{i=1}^{p} N_i = N$），我们就可以确定 $a_{i,\alpha}$ 的概率分布，并进而确定 $\| \hat{P}_{i,\alpha}|\psi\rangle \|^2$. 如果精心挑选这 p 个算符 $\hat{A}_i$，就可毫无悬念地确定初态 $|\psi\rangle$.

演化

在系统未被测量的情况下，它的态矢量的演化可由薛定谔方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi\rangle = \hat{H}(t)|\psi(t)\rangle$$

给出，这里厄米算符 $\hat{H}(t)$ 是系统在 t 时刻的哈密顿量，或能量可观测量.

假定我们考虑一个孤立的系统，它的哈密顿量与时间无关，则该哈密顿量的能量本征态 $|\phi_n\rangle$ 是时间无关薛定谔方程

$$\hat{H}|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle$$

的解. 它们构成一个希尔伯特空间的正交基组. 这个基组是非常有用的. 如果在这个基组上展开初态 $|\psi(0)\rangle$，我们马上就能写出系统的态在任意时间的表示:

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n \alpha_n|\phi_n\rangle \quad \Rightarrow \quad |\psi(t)\rangle = \sum_n \alpha_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar}|\phi_n\rangle.$$

其中系数 $\alpha_n = \langle \phi_n | \psi(0) \rangle$，即

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar} |\phi_n\rangle \langle \phi_n | \psi(0) \rangle.$$

对易可观测量的完备集（CSCO）

如果一组算符 $\{\hat{A}, \hat{B}, \cdots, \hat{X}\}$ 中的所有算符都相互对易，且它们共同的本征基 $\{|\alpha, \beta, \cdots, \xi\rangle\}$ 是唯一的（最多相差一个相因子），则这组算符是一组 CSCO.

在那种情况下，测量了物理量 $\{A, B, \cdots, X\}$ 之后，系统的态就毫无悬念地确定了. 如果由 A 给出值 α, 由 B 给出 $\beta, \cdots\cdots$, 由 X 给出 ξ，则该系统的态就是 $|\alpha, \beta, \cdots, \xi\rangle$.

纠缠态

考虑一个由两个子系统 $\mathcal{S}_1$ 和 $\mathcal{S}_2$ 构成的量子系统 $\mathcal{S}$. 描述 $\mathcal{S}$ 的希尔伯特空间是分别关联着 $\mathcal{S}_1$ 和 $\mathcal{S}_2$ 的希尔伯特空间 ε_1 和 ε_2 的张量积. 如果把 $\mathcal{S}_1$ 的基记为 $\{|\alpha_m\rangle\}$，把 $\mathcal{S}_2$ 的基记为 $\{|\beta_n\rangle\}$，则整个系统的一个可能的基是 $\{|\alpha_m\rangle \otimes |\beta_n\rangle\}$.

整个系统的任意一个态矢可写为

$$|\Psi\rangle = \sum_{m,n} C_{m,n} |\alpha_m\rangle \otimes |\beta_n\rangle.$$

如果这个矢量能写成 $|\Psi\rangle = |\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle$，这里 $|\alpha\rangle$ 和 $|\beta\rangle$ 分别为 ε_1 和 ε_2 中的矢量，人们就把它称为一个因子化的态.

一般来说，一个任意的态 $|\Psi\rangle$ 是不能因子化的：在两个子系统之间存在量子关联，则态 $|\Psi\rangle$ 被称为纠缠态（entangled state）.

统计混合和密度算符

如果我们只有系统态不完全的信息，例如测量是不完备的，人们就不可能精确地知道它的态矢量. 这样的态可用一个密度算符 $\hat{\rho}$ 来描写，该算符有如下的一些性质：

- 密度算符是厄米的，且它的迹为 1.

- 密度算符所有的本征值 Π_n 都是非负的. 因此密度算符能被写成

$$\hat{\rho} = \sum_n \Pi_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|,$$

其中 $|\phi_n\rangle$ 是 $\hat{\rho}$ 的本征态，而 Π_n 可被解释为概率分布. 在纯态的情况下，除了等于 1 的一个本征值外，所有的本征值均为 0.

- 在物理量 A 的测量中，找到结果为 a_α 的概率为

$$\mathcal{P}(a_\alpha) = \mathrm{tr}\big(\hat{P}_\alpha \hat{\rho}\big) = \sum_n \Pi_n \langle\phi_n|\hat{A}|\phi_n\rangle.$$

测量之后系统的态为 $\hat{\rho}' \propto \hat{P}_\alpha \hat{\rho} \hat{P}_\alpha$.

- 只要系统未被测量，密度算符的演化就可写成

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{\rho}(t) = [\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)].$$

0.2 一般结果

不确定性关系（uncertainty relations）

考虑 $2N$ 个全同且独立的并且全部被制备成相同 $|\psi\rangle$ 态的物理系统（假定 $N \gg 1$）. 我们在其中的 N 个系统中测量物理量 A，在另外的 N 个系统中测量物理量 B. 这两组测量的均方根 (rms) 偏差 Δa 和 Δb 满足不等式

$$\Delta a \Delta b \geqslant \frac{1}{2}\left|\langle\psi|[\hat{A}, \hat{B}]|\psi\rangle\right|.$$

埃伦费斯特 (Ehrenfest) 定理

考虑一个在哈密顿量 $\hat{H}(t)$ 的作用下演化的系统和一个可观测量 $\hat{A}(t)$. 这个可观测量的期待值将按照下述方程演化:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle a\rangle = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\psi|[\hat{A}, \hat{H}]|\psi\rangle + \langle\psi|\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}|\psi\rangle.$$

特别地，如果 $\hat{A}$ 是时间无关的，且与 $\hat{H}$ 对易，则期待值 $\langle a\rangle$ 是一个运动常数.

0.3 类点粒子的特殊情况；波动力学

波函数

对一个能够忽略其可能内部自由度的类点粒子，希尔伯特空间是平方可积函数的空间 (数学上写成 $L^2(R^3)$).

态矢量 $|\psi\rangle$ 可由一个波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$ 来描述. 量 $|\psi(\boldsymbol{r})|^2$ 是发现粒子处于尺度空间中 $\boldsymbol{r}$ 点的概率密度. 它的傅里叶变换

$$\varphi(\boldsymbol{p})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3r$$

是发现粒子具有动量 $\boldsymbol{p}$ 的概率振幅.

算符

在与通常物理量关联的算符中，人们发现：

- 位置算符 $\hat{\boldsymbol{r}}=(\hat{x},\hat{y},\hat{z})$，它表示用 $\boldsymbol{r}$ 乘以波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$.
- 动量算符 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 作用在波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$ 上就是进行 $-\mathrm{i}\hbar\nabla$ 的操作.
- 对一个置于势阱 $V(\boldsymbol{r})$ 中的粒子，哈密顿量或能量算符为

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2M}+V(\boldsymbol{r}) \quad\Rightarrow\quad \hat{H}\psi(\boldsymbol{r})=-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2\psi(\boldsymbol{r})+V(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}),$$

其中 M 为粒子的质量.

波函数的连续性

如果势 V 是连续的，则哈密顿量的本征函数 $\psi_\alpha(\boldsymbol{r})$ 是连续的，且它们的导数也连续. 如果 $V(\boldsymbol{r})$ 是一个阶梯函数，这个结论还是对的：在 $V(\boldsymbol{r})$ 不连续处，ψ 和 ψ' 还是连续的.

在无限高阶跃势的情况下（例如在 $x<0$ 时 $V(x)=+\infty$ ，而在 $x\geqslant 0$ 时