高等量子力学

杨泽森 编著

$$T\exp\left\{-i\int H\,dt\right\}$$

&

$$\int D[q]\exp\left\{i\int L\,dt\right\}$$

北京大学出版社

高等量子力学

杨 泽 森

北京大学出版社

高等量子力学
杨泽森 著
责任编辑：周月梅
*
北京大学出版社出版
（北京大学校内）
北京大学印刷厂 印刷
新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售
*
850×1168毫米 32开本 13印张 330千字
1991年7月第一版 1991年7月第一次印刷
印数：0001—3000册
ISBN7-301—01413—9/O·233
定价：7.85元

内 容 简 介

本书以作者为北京大学物理系开设的高等量子力学课程编写的教材为基础，经过多次修改、扩充而成，共分十章，除系统阐述量子力学的基本理论及基本方法外，还包括了量子化理论在较近期间内的进展。本书内容比较成熟，在理论框架及表述上吸取了各家之长，为进一步学习凝聚态理论、原子核理论、场论、多体理论及基本粒子理论等提供了必要的基本工具。

本书可供物理专业研究生、高年级学生选修用，也可供理论及实验物理工作者参考。

前　言

本书以作者为北京大学物理系高等量子力学课程编写的教材为基础，根据在较长期间的教学实践中的体验以及量子化理论在近期的发展，进行修改和扩充而成，可作为物理教师及青年科学研究人员自学进修的参考书。第一至第八章可作为研究生课程的教材。这八章的基本内容曾用于1962至1965年物理系六年制理论物理的教学，从1978年以来作了较大的修改和扩充，并多次用作研究生课程的教材和参考书，不少兄弟院校也常常采用。在内容选择上，本书旨在帮助学完了大学量子力学课程的读者加强理论基础和掌握基本方法。在讲课和初次自学时，宜于在上述八章内进行选择，可根据教学或自学的要求，删除若干较困难的部分，集中精力于基本内容。由于认定读者已经具备量子力学的一般基础知识，书中应用范例较少，应根据正文动手运算和多加思考。

本书在阐述量子力学的原理和概念时，是以P.A.M.Dirac的《量子力学原理》为依据的，但从教学的观点改变了某些内容的表达形式。这种作法在L.D.Landau和E.M. Lifshitz合著的《量子力学》中已有很好的范例。在本书第一至第三章中，关于状态的描述采取了从位形空间的波函数到态矢量空间的途径；在讲述波函数的统计诠释、叠加原理和力学量的算符等方面，着重参考了L.D.Landau和E.M.Lifshitz的上述著作。

本书对于量子化的一般原则和方法有比较系统的讲解，通常的正则量子化的基本内容包括在第三、第四章和第八章的有关部分，较近期的发展则包含在第九、第十章，其中分别对于处理受约束系统的狄拉克方法以及路径积分方法，作了充分的阐述。

有些读者如果想通过自学来掌握最后两章的内容，就应该紧密结合其中注明的出现在较前面章节中的有关部分，循序渐进地学习。

根据全国自然科学名词审定委员会公布的物理名词的译名，本书已把几率，刁矢量和刃矢量改成了概率，左矢量和右矢量。不过，作者仍然认为，最好保留几率一词，可与概率并用，左矢量和右矢量两词宜于再作修改。至于测不准关系一词，本来很合适，而且多年来已广泛采用，故在本书中不作改动。

杨泽森

1989年3月于北京大学

目 录

第一章　波函数的统计诠释和叠加原理

§1　状态与波函数．波函数的统计诠释

本书除最后三章的部分内容外，均属于非相对论量子力学的范围．非相对论性条件是指光速可看成无限大的速度，因此粒子之间的相互作用可认为是瞬时传播的，而且相互作用不引起粒子的消失或新粒子的产生，故在描述粒子系统的运动时，只涉及该系统的力学量．不过，描述微观现象的量子力学包含着特有的原理和观念，使力学量和状态的概念具有与经典力学不同的含义．

考虑含有N个粒子的系统，暂假定各粒子只有空间自由度并且是互不相同的．按照经典力学，每个粒子在一定时刻总是处在一定的地点和具有一定的动量，系统中全部粒子的坐标和动量是描述其状态的一组完整力学量．系统在一初始时刻的坐标动量值既决定了它在该时刻所有力学量的值，也决定了在自然发展中达到的其他时刻的坐标和动量值．任何一组与坐标动量有一一对应关系的力学量，也构成一组完整力学量．在系统的一定状态下进行坐标、动量以及其它力学量的测量时，所获结果总是代表各力学量在该状态下的值．由一组这样的完整力学量来描述状态的方式称为纯力学描述．除了纯力学描述，还有所谓统计描述．在这种描述中，说到系统处在一定状态，意思是处在这样一组物理条件之下，根据这组物理条件通常不足以确定全部粒子的坐标和动量．因此在这样的状态下重复测量一个力学量时，各次获得的结果可能很不一致，当然重复测量多次获得各种结果的分布是确定的，这取决于所说的物理条件．这种状态是用分布函数代表的，系统在一初始时刻的分布函数也决定在自然发展中达到的其他时刻的

分布函数。

在量子力学中假定可以借助遵从叠加原理的波函数给出状态的完整描述。为了叙述的方便，这里首先说明状态和波函数的含义，在引用叠加原理时，暂不作解释。不论描述方式上有何特点，一种状态总是可以通过控制一组物理条件来实现，一种力学量总是（至少在理论上说来）可以通过测量而获得它的各种值（实数）。以粒子的坐标为例，如果重复地在一个状态下测量某个坐标每次都得到同一个值 x_0，就说这个状态是该坐标具有确定值 x_0 的状态。由于系统在一定时刻的不同波函数叠加之后仍然代表在该时刻可以实现的状态（见下节），可以推知，不是每个状态都是坐标具有确定值的状态，所以在一般的状态下重复测量某个坐标时（每次测量都在该状态下进行），一般不是得出同一种值。能够作为某个坐标的测量结果的每个值都称为该坐标的一个允许值，一个坐标的允许值的集合称为该坐标的值谱。显然，在一个不是坐标具有确定值的状态下测量坐标时，每次获得的结果都不能认为是原状态的坐标值，只有重复测量多次所得出的各种允许值的分布才与原来的状态有密切的联系。从经典对应的考虑，一个系统也应具有像动量、角动量和能量等等力学量，此外还可以具有经典力学中没有的力学量，每一种力学量都可按上述观点来解释。如果在系统的某个状态下重复测量力学量 F 时，每次都得出同一种值 f_0，就说这个状态是 F 具有确定值 f_0 的状态。由叠加原理可推知，不是每一个状态都是 F 具有确定值的状态。所以在一般的状态下重复测量 F 时，各次得到的结果可以很不一致。能够作为 F 的测量结果的每个值都称为 F 的一个允许值，F 的允许值的集合称为 F 的值谱。在一个不是 F 具有确定值的状态下测量 F 时，每次获得的结果都不能认为是原状态的 F 值，只有重复测量多次所得的各种允许值的分布（简称为 F 值的分布）才与原来的状态有密切的联系。所以，系统的一定状态不是表明它的各种力学量都有一定的值，而是意味着在重复测量下

应该得到的各种力学量的允许值的一定分布。所谓可以借助波函数给出状态的完整描述，意思就是可根据波函数决定在该状态下重复测量每一种力学量时应该得出的允许值分布。

由一定波函数代表的状态称为纯粹态，使力学量F取确定值的纯粹态将称为F的本征态，F在它的一个本征态下的值也称为在该状态的本征值。使一组力学量中每一个都取确定值的纯粹态称为这组力学量的共同本征态。从完整描述的意义上说，纯粹态的概念对应着经典力学中纯力学状态的概念，不过由叠加原理知道，系统在一定时刻不一定处在某个纯粹态。是否对应于每个力学量的每一个允许值，都存在使该力学量确定地取这个值的纯粹态？假定是这样。关于坐标，还有进一步的假定：每个笛卡儿坐标的值谱都是全体实数，而且对于任何$3N$个实数，都存在使全体笛卡儿坐标具有这组值的纯粹态。与经典力学的统计描述中的状态概念相应，在量子力学中有混合态的概念。所谓系统处在一定的混合态，即是处在一组通常不足以确定一个纯粹态的物理条件之下，因此在一定混合态下重复测量一个力学量获得各种结果的分布虽然也是确定的（取决于所说的物理条件），但是一般都不能用系统的一个波函数表示出来。一定的混合态可以看成一组适当的纯粹态的一定分布，并且引用类似于分布函数的量来描写。纯粹态是混合态的特殊形式。这个关于纯粹态的分布的概念与经典统计物理中分布函数的概念是相似的，都是对应着一组就所属的力学而言可以实现而一般是不完整的物理条件，但必须注意不同的力学造成的差别。特别是，在使用纯粹态的一定分布这个术语时，需要确切地规定它的含义。混合态的表述及其遵从的运动方程将在第三章§10中给出。在本书中用到状态这一术语时，除了无须注明或可从上下文看出是何种状态的情形，都是指纯粹态。

波函数的概念来源于德布罗意的物质波概念，对于它的物理意义的诠释（玻恩统计诠释）是量子力学的基本原理之一。对于

用粒子的笛卡儿坐标（$r_1\ r_2\cdots r_N$）作为自变量的波函数（简称为位形空间的波函数），统计诠释的内容可陈述如下：波函数$\Psi(r_1, r_2, \cdots, r_N)$是一种概率幅，其模平方代表位形空间中的相对概率密度，即$|\Psi(r_1\cdots r_N)|^2 dr_1\,dr_2\cdots dr_N$是在状态$\Psi$下发现系统的位形处在点（$r_1, r_2, \cdots, r_N$）附近的体元$dr_1\,dr_2\cdots dr_N$内的相对概率.其次,在状态$\Psi$下测量任一力学量获得各种结果的概率都可由$\Psi$与$\Psi^*$构成的双线性型表示出来。我们将常把位形空间的波函数写成$\Psi(q)$，其中(q)代表全部粒子的笛卡儿坐标。显然，当$\Psi(q)$乘以非零常数时，仍然代表原来的状态（每种力学量取值的分布都不受影响），因此，当它的模平方在整个位形空间的积分有限且不为零时，总是可以调节常因子而成为归一的：

$$\int|\Psi(q)|^2 dq=\int|\Psi(r_1 r_2\cdots r_N)|^2 dr_1\,dr_2\cdots dr_N=1. \qquad (1)$$

这时，$|\Psi(q)|^2$代表发现系统处在位形点（q）的绝对概率密度。在归一条件的限制下，波函数的任意常因子只能是模为1的复常数。不可归一的(非零)波函数只能表示相对概率，它的任意常因子可用适当选定的标准条件加以限制。由不可归一波函数代表的状态实际上是不能严格实现的，但在理论描述中应当承认其存在。这种状态总是从属于一个连续区域，而且将其波函数在一狭小邻域中适当进行积分，就变成可归一的（见§6），因此可以按照适当的极限观点，借助可归一波函数来处理涉及不可归一波函数的问题。

§2 叠加原理

叠加原理的内容可叙述如下（参看本章末所引 Dirac 和 Landau-Lifshits 的著作）：在一个系统某一时刻的一切可能波函数的集合中，任意两个波函数Ψ_A与Ψ_B的线性组合(以复常数为组合系数）都属于该集合，而在叠加波函数代表的状态下测量任一

力学量的值时，只有可能获得在Ψ_A或Ψ_B下该测量能够获得的结果。反之，对应于在Ψ下测量任一力学量能够获得的每一种值，Ψ中有一个确定的叠加成分代表该力学量只可能取这种值的状态。其次，如果系统在一初始时刻处在纯粹态，那么在其自然发展中的每一时刻都处在纯粹态，而且波函数之间的线性关系不随时间改变。

这个叙述的最后部分指出了波函数随时间的变化应满足的条件：如果$\Psi_1(t)$及$\Psi_2(t)$随时间t的变化都代表系统可能的运动过程，则它们的任意线性组合$a_1\Psi_1(t)+a_2\Psi_2(t)$（$a_1, a_2$与$t$无关）也代表该系统可能的运动过程。关于这一点，以后再作进一步的讨论，在本节将着重解释前两部分的内容和引出若干重要结论。一个系统在一定时刻的一切可以实现的纯粹态的波函数，连同恒等于零的"波函数"，必定构成复数域上的线性空间，我们将把这个空间称为波函数空间。恒等于零的波函数可以作为叠加成分或叠加结果出现，理解为不代表任何状态的波函数即可。用非零常数去乘一个波函数是一种特殊的叠加，结果代表原来的状态。显然，在一个系统的波函数空间中只有一些特别的波函数才表示某个子系统也处在一定的纯粹态，因为这种波函数应该以所说的子系统的波函数为一个相乘因子，而一般的波函数并不具有这种形式。其次，每个系统都可以看作更大的系统的子系统，可见一个系统在一定时刻可以不处在一定的纯粹态。

由于在叠加波函数代表的状态下不能发现在各分项都不能发现的结果，可以肯定，把F的属于同一本征值的两个不同本征态的波函数作任意的叠加，只要不恒等于零，就仍然代表F的属于这个本征值的本征态。另一方面，对于F的属于不同本征值f_1及f_2的两个本征态，以非零的组合系数把它们的波函数Ψ_1与Ψ_2叠加之后，不再代表F的本征态，因为在$\Psi_{12}=a_1\Psi_1+a_2\Psi_2$下测量$F$只能发现$f_1$或$f_2$，如果$\Psi_{12}$代表$F$的本征态，则相应的本征值是$f_1$与$f_2$中之一，设为$f_1$，那么$\Psi_{12}-a_1\Psi_1$也代表$F$的属于本征

值 f_1 的本征态，这当然是不对的，即Ψ_{12}不代表F的本征态。由此可见，只要F有两个或更多的不同允许值，就必定存在使F不具有确定值的纯粹态。现在求在Ψ_{12}下测量F而发现某个值的概率。假定Ψ_1与Ψ_2是可归一的，$W_{f_1}(F,\Psi_{12})$及$W_{f_2}(F,\Psi_{12})$分别表示发现F值为f_1和f_2的相对概率，根据上节，它们可由Ψ_{12}与Ψ^*_{12}的双线性型表示出来，故

$$W_{f_1}(F,\Psi_{12})=A_{11}a_1^*a_1+A_{12}a_1^*a_2+A_{12}^*a_2^*a_1+A_{22}a_2^*a_2,$$

$$W_{f_2}(F,\Psi_{12})=B_{11}a_1^*a_1+B_{12}a_1^*a_2+B_{12}^*a_2^*a_1+B_{22}a_2^*a_2,$$

其中各个系数与a_1，a_2无关。当a_1等于零时，W_{f_1}应该是零，可见$A_{22}=0$，同理有$B_{11}=0$，由此以及概率的非负性质知道$A_{12}=B_{12}=0$，而且A_{11}及B_{22}是正实数。这两项概率的和应该等于Ψ_{12}的归一积分，故

$$\begin{aligned}&A_{11}a_1^*a_1+B_{22}a_2^*a_2\\&\quad=a_1^*a_1\int\Psi_1^*(q)\Psi_1(q)\mathrm{d}q+a_2^*a_2\int\Psi_2^*(q)\Psi_2(q)\mathrm{d}q\\&\qquad+a_1^*a_2\int\Psi_1^*(q)\mathrm{d}q+a_2^*a_1\int\Psi_2^*(q)\Psi_1(q)\mathrm{d}q.\end{aligned}$$

由于a_1与a_2的任意性，得

$$W_{f_1}(F,\Psi_{12})=\int\{a_1\Psi_1(q)\}^*\{a_1\Psi_1(q)\}\mathrm{d}q, \tag{2}$$

$$W_{f_2}(F,\Psi_{12})=\int\{a_2\Psi_2(q)\}^*\{a_2\Psi_2(q)\}\mathrm{d}q, \tag{3}$$

$$\int\Psi_1^*(q)\Psi_2(q)\mathrm{d}\,q=0. \tag{4}$$

波函数$\Psi_A(q)$与$\Psi_B(q)$的重叠积分$\int\Psi_A^*(q)\Psi_B(q)\mathrm{d}q$称为两者的内积，记为

$$(\Psi_A,\Psi_B)=\int\Psi_A^*(q)\Psi_B(q)\mathrm{d}q, \tag{5}$$

当两个波函数的内积为零时，就说它们是互相正交的，也说它们

所代表的状态是互相正交的。(2)—(4)式表明，同一力学量的属于不同本征值的两个本征态是互相正交的，在由两个这样的可归一波函数叠加成的 $\Psi_{12}=a_1\Psi_1+a_2\Psi_2$ 下，发现 F 取其在 Ψ_1 的值的相对概率是 $(a_1\Psi_1, a_1\Psi_1)$，F 取其在 Ψ_2 的值的相对概率是 $(a_2\Psi_2, a_2\Psi_2)$。当 Ψ_{12} 是归一波函数时，这些量就是绝对概率。

下面讨论波函数按任一力学量的本征态的分解并建立一般的概率公式。设 $\{f_0\}$ 及 $\{f'\}$ 分别代表 F 的值谱中的分立部分和连续部分，如果在 Ψ 下测量 F 时能够发现分立值 f_0，那么 Ψ 中有一个确定的叠加成分 Ψ_{f_0}，它代表 F 只取这个值的状态，而在 $(\Psi-\Psi_{f_0})$ 代表的状态下测量 F，就不可能发现 f_0。考虑一个力学量 $\delta(f_0,F)$，它是 F 的函数，其定义按如下方式给出：每一次发现 F 值为 f_0 的测量都理解为发现 $\delta(f_0,F)$ 值为1的测量，每一次发现 F 取其它值的测量都理解为发现 $\delta(f_0,F)$ 为 0 的测量。因此 Ψ_{f_0} 及 $(\Psi-\Psi_{f_0})$ 都代表 $\delta(f_0,F)$ 的本征态，相应的本征值分别为 1 及 0 。在 Ψ 下发现 F 值为 f_0 的概率 $W_{f_0}(F,\Psi)$ 也即是发现 (f_0, F) 值为 1 的概率，根据(2)式及(4)式可得

$$W_{f_0}(F,\Psi)=(\Psi_{f_0},\Psi_{f_0}), \tag{6}$$

$$(\Psi_{f_0}, \Psi-\Psi_{f_0})=0. \tag{7}$$

借助(7)式又可把(6)式写成

$$W_{f_0}(F,\Psi)=(\Psi_{f_0},\Psi)=(\Psi,\Psi_{f_0}). \tag{8}$$

对于连续谱的情形也可作类似的讨论。如果在 Ψ 下测量 F 时能够发现某个间隔 Δf_* 内所有的 f' 值，那么 Ψ 中有一确定的叠加成分 $\Psi_*=\int_{\Delta f_*}\Psi_{f'}\,\mathrm{d}f'$，它代表 F 只取这个间隔内的值的状态，$\Psi_{f'}$ 代表 F 取确定值 f' 的状态，在 $(\Psi-\Psi_*)$ 下测量 F 则不可能发现处于这个间隔内的值。与(6)，(7)式相似，有

$$W_{\Delta f_*}(F,\Psi)=(\Psi_*,\Psi_*), \tag{9}$$

$$(\Psi_s, \Psi - \Psi_s) = 0. \tag{10}$$

由此又得出

$$W_{\Delta f_s}(F,\Psi) = (\Psi_s,\Psi) = (\Psi,\Psi_s), \tag{11}$$

$W_{\Delta f_s}(F,\Psi)$表示在Ψ下发现F值处于Δf_s内的相对概率。在不同点f_0与f_0'之间，不相交的间隔Δf_s与$\Delta f_{s'}'$之间（记为$s \neq s'$），以及f_0与间隔Δf_s之间，也存在(4)式的正交关系：

$$(\Psi_{f_0}, \Psi_{f_0'}) = 0, \quad 当 f_0 \neq f_0'; \tag{12}$$

$$(\Psi_s, \Psi_{s'}) = 0, \quad 当 s \neq s'. \tag{13}$$

$$(\Psi_s, \Psi_{f_0}) = 0. \tag{14}$$

由(7)，(10)以及(12)—(14)式有

$$\left(\sum_{f_0}\Psi_{f_0} + \sum_s \Psi_s, \Psi - \sum_{f_0}\Psi_{f_0} - \sum_s \Psi_s\right) = 0. \tag{15}$$

再由(8)式及(11)式对f_0及间隔Δf_s求和，可把Ψ的归一积分表示为

$$(\Psi, \Psi) = (\Psi, \sum_{f_0}\Psi_{f_0} + \sum_s \Psi_s),$$

故

$$(\Psi, \Psi - \sum_{f_0}\Psi_{f_0} - \sum_s \Psi_s) = 0.$$

由此与(15)式相减看出，$\Psi - \sum_{f_0}\Psi_{f_0} - \sum_s \Psi_s$是恒等于零的波函数，可见

$$\Psi = \sum_{f_0}\Psi_{f_0} + \sum_s \Psi_s = \sum_{f_0}\Psi_{f_0} + \int \Psi_{f'}\,\mathrm{d}f', \tag{16}$$

这就是任意波函数按F的本征态分解的公式。根据(6)及(9)式，当Ψ写成这种形式时，Ψ_{f_0}的归一积分代表在Ψ下测量F获得f_0