量子力学讲义

David Tong 著
胡锦浩 译

推荐书目和资源

目前在优秀的量子力学教材方面有短缺。下面是两本适合入门的书，与本课程程度差不多，它们是：

- David. J. Griffiths, “*Introduction to Quantum Mechanics*”
- Alasdair Rae, “*Quantum Mechanics*”

这两本书在给出清晰的概念和简单的解释，如果你在为你自己的基础挣扎的话可以参考。但是他们的讲法过于陈旧对后续的课程没有太多帮助

如果你想要一本书可以毕生阅读的，而不仅仅是一年，那有很多教材可选，这里推荐我喜欢的

- Shankar, “*Principles of Quantum Mechanics*”

一本很长很详细的书，但是作者会带领你优雅的进行一些复杂计算

- Landau and Lifshitz Volume 3, “*Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory*”

朗道没有手把手教你最基本的理论，仅仅只有百科全书式的信息，没有惊人的解释，但是可读性很强。

- Steven Weinberg, “*Lectures on Quantum Mechanics*”

温伯格总是值得倾听的

目录

Chapter 1

绪论

毫不夸张地说，量子力学的发现是人类历史上最伟大的成就。

量子力学的世界观与我们所熟悉的经典力学的世界观截然不同。它比科幻小说家的梦更让人捉摸不透。但是，量子力学无疑是对我们世界正确的描述。

量子力学的成功之处在于回答了一些基础问题。如物质为什么是稳定的？太阳为什么闪耀，以及为什么是黄色的？为什么固体不是导体就是绝缘体？同时，量子力学也开辟一些我们从未接触的领域，比如，新物态，组成物质的粒子变得纠缠，使其完成了一些看似不可能完成的任务。从波动的亚原子世界，再到对信息全新理解，人们可以实现更多东西。

尽管量子力学给出了所有问题的正确答案，但是付出的代价是一切答案都是统计性质的。在量子的世界中几乎没有确定性。当然，在经典世界中也很少有确定性，但是我们总是可以找到方法来消除不确定性。在经典物理中，知识就是力量：你知道的越多，你就可以更好的消除不确定性。这是因为经典的可能性总是与我们的无知所关联的，任何看似随机的经典系统，我们很难知道其内部发生了什么，但是这绝不是不可能的。

但这与量子世界不同。随机的才是正常的，不可预测是固有的。我们没有任何方法减少系统的不确定性。举个例子，如果一个粒子出现在某个地方的概率是 $\frac{1}{2}$，而出现在其他地方的概率是 $\frac{1}{2}$，很可能粒子真同时出现在这两个地方。任何消除不确定性的尝试都只能转移不确定性，就像墙纸中的气泡。正如我们将要看到的，量子物体是不确定的，观测他们的的行为会导致其本身性质发生变化，干扰他们所具有的奇妙特性。

这门课的目的是尝试了解和理解量子世界中的一些奇特现象。需要清楚的是，这是我们步入未知世界的第一步，我们在经典物理中形成的直觉，可能不再是量子世界中的一个很好的向导。幸运的是，我们有了一个更好的向导，就是我们的无知，我们会用数学语言来描述量子世界。在接下去的几节课，以及以后的课程中，我们的学习方法是，接受这种数学描述，并利用它来建立一种新的直觉，了解宇宙是如何运作的。

1.1 波函数

量子力学与经典力学的不同不是一点两点。相反，它是对整个物理框架的彻底改革。

这一点从一开始就很明显，我们可以通过比较在两种框架下描述系统状态的方式看出。状态可以告诉我们某时刻系统的所有信息，通过物理定律，我们可以算出接下去每一时刻的系统的状态。在接下去的课程中，我们只处理单个粒子的运动。就现在的讨论，我们只考虑在 $\mathbf{R}^3$ 空间中运动的粒子。

在经典物理中，粒子的状态只由它的位置 $\mathbf{x}$ 和它的速度 $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{x}}$ 决定。如果你在某个时间 t_0 知道这两个信息，那么你可以使用运动方程 $\mathbf{F} = m\ddot{\mathbf{x}}$ 来确定接下去所有时间的 $\mathbf{x}(t)$ 和 $\mathbf{v}(t)$。在量子世界中质点的状态，只

由它的波函数确定。这是一个复值函数

$$\psi(\mathbf{x}, t)$$

我们将会看见，如果你知道某时刻 t_0 的波函数，那么你就可以得到之后所有时间确定状态所需的所有信息.

用波函数描述系统与经典力学截然不同。我们已经将三个位置坐标 $\mathbf{x} \in \mathbf{R}^3$ 用一个有着无限有用信息的函数替代。此外，我们还没有说明粒子的速度；这个信息必须以某种方式包含在 $\psi(\mathbf{x}, t)$ 中。

波函数有一种非常简单的解释，或者说波函数的模方有一个非常简单的解释。他告诉我们粒子出现在某一个位置的概率。粒子出现在 $\mathbf{x}$ 处的概率 P 是

$$P(\mathbf{x}, t) = |\psi(\mathbf{x}, t)|^2$$

这被称作 *Born 定则*，Max Born 第一次意识到量子理论是一个概率的理论，而不是确定的理论。

从概率密度的角度来说，你可以将概率密度乘上体积来计算粒子出现在某个小体积 $\mathrm{d}V$ 中心附近的概率，其概率为 $P(\mathbf{x}, t)\mathrm{d}V$。

在所有其他的科学领域中概率的产生，是由于我们的不了解。如果你扔一个骰子，并且完全精确地知道它的初始状态，那接下去会发生什么就毫无疑义了。你可以扔到六点的概率不是 0 就是 1。如果你非常善于解微分方程，你可以就算出答案来震惊你的朋友。但在绝大多数情况下，我们对初值条件的了解，并不是非常精确，另外，解微分方程非常困难。所以我们放弃了，承认我们不知道将会发生什么，然后承认扔到六点的概率为 $\frac{1}{6}$。从上面的例子可以看出概率的来源，是因为我们对初值条件的不了解，而不是骰子本身的属性。但这与量子力学中不同。状态 $\psi(\mathbf{x}, t)$ 包含了关于一个粒子的所有信息，并且概率的产生不是由于我们的问题，而是量子世界内在的随机性。这与牛顿式的思考方式不同。用波函数描述粒子的这一种全新的方式，可能会给波函数 $\psi(\mathbf{x}, t)$ 带来不同的解释。比如说，我们根本不应该考虑质点，而是空间分布像流体一样的分布的物体。在物理中称之为**场**。电场和磁场是我们熟悉的例子. 但这不是我们理解过函数的方式。就是因为我们从来没有观测到过一个弥散的粒子，一个失去了粒子形式，开始像果冻一样在太空中扩散的粒子。任何让你确定一个粒子是否在某个区域的观测，只会返回是或者否。观测不会告诉你，“这个粒子部分在这里，但大部分在其他地方。”波函数不能描述真实的流体; 它更加模糊, 只能表示概率。

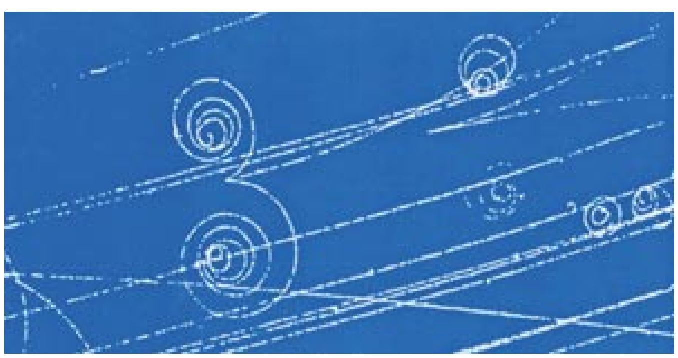

图 1.1: 在任何的实验中，只能检测到具有明确轨迹的粒子，而没有波函数的迹象

图 1 显示了正电子和负电子穿过云室时的轨迹。快速运动的粒子大约沿直线前进，那些运动的比较慢的粒子，在磁场的作用下作螺旋运动。电子向一个方向旋转，同时正电指向另一个方向旋转。我们认为粒子进入探测器时，它们是由一个分布在很大空间中的波函数所描述的。但是这些粒子并没有任何弥散的现象。相反，他们有明确的轨迹。在如此基本的地方就引入概率，意味着我们必须要放弃精准预测的想法。我们没有办法精准预测，在哪个地方会出现螺旋。我们只能计算它的可能性。显然这打破了 Newton（准确来说，是 Laplace）的梦想，即知道从开始到结束发生的一切。

一些人可能会希望从更基本的地方来实现这一梦想。可能波函数 $\psi(\mathbf{x},t)$ 只是对接下去发生的更加精妙的事情的一个粗略的描述。或者波函数有另一种解释，等待着我们去发现，让我们可以回到用更加舒适的 Newton 方法思考问题。有充分的理由让我们不该这么做。从本质上讲现实是概率的。我们将在 §3.5 的时候遇到在这方面的讨论。一个更加全面的描述为什么决定论的世界和实验是不相融的，将会在量子力学专题研究[1]中描述(特别是在量子基本原理部分)。现在，你只能接受这一事实: 我们生活的世界与我们的祖先从小所信仰的世界不同。它是随机和不确定的。我们将看到的，世界也因此变得有意思。

1.1.1 归一化

归一化后的函数将不与原来的波函数不同。它将转化为粒子在某位置的概率，这意味着

$$\int \mathrm{d}^3 x P(\mathbf{x},t) = \int \mathrm{d}^3 x |\psi(\mathbf{x},t)|^2 = 1$$

波函数的这一性质称之为*归一化*

这没什么大不了的。假设我们有一个波函数 $\psi(\mathbf{x},t)$，它不是归一化的，而是服从的

$$\int \mathrm{d}^3 x |\Psi(\mathbf{x},t)|^2 = N < \infty$$

如果 N 是有限的，那这个波函数就称之为*可归一化的*. 显然一个波函数如果是可归一化的当且仅当在 $|\mathbf{x}| \to \infty$ 时 $\psi(\mathbf{x},t) \to 0$。在这种情况下，我们总是可以构造一个归一化的波函数。

$$\psi(\mathbf{x},t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \Psi(\mathbf{x},t)$$

在本课程中，我们经常会发现用未归一化的波函数 Ψ 是很有用的，只要记住在计算概率的时候，再将它归一化即可。

从上面的讨论中，我们可以得到无法归一化的波函数，只有一点用，因为

$$\int \mathrm{d}^3 x |\psi(\mathbf{x},t)|^2 = \infty$$

这样的波函数没有概率解释。他们也不表示任何量子态。(需要知道的是，这句话绝大多数情况下是正确的，但是我们将在 §2.1 中遇到反例).

波函数之间还有一个非常重要的关系，就是当两个波函数仅相差一个常数相位时，它们表示等价的状态.

$$\psi(\mathbf{x},t) \equiv e^{\mathrm{i}\alpha} \psi(\mathbf{x},t)$$

在多数情况下，实 α，在一般情况下并不改变概率，但是会改变一些别的东西（对“别的东西”的讨论在这里是很重要的。我们将会看见，如果你给一个波函数乘上一个相位 $e^{\mathrm{i}\alpha(\mathbf{x})}$ 他并不会改变概率分布 $P = |\psi|^2$ 但它会影响观测，所以并不会得到同一状态）

结合归一化要求与对相位的不敏感性，有时我们可以把态当作是一系列归一化的复函数的集合是十分有用的。

$$\psi(\mathbf{x},t) \equiv \lambda \psi(\mathbf{x},t)$$

[1]这是 David Tong 的另外一本讲义，可以在 https://www.damtp.cam.ac.uk/user/tong/topicsinqm.html 处找到——译者注

对于任何复数 $\lambda \in \mathbf{C}$ 且 $\lambda \neq 0$。波函数 ψ 和 $\lambda\psi$ 应被视为描述相同的态。

1.1.2 叠加原理

波函数的结合构成一个矢量空间。如果 $\psi_1(\mathbf{x},t)$ 和 $\psi_2(\mathbf{x},t)$ 都是系统的可能状态，那么系统状态也可能是

$$\psi_3(\mathbf{x},t) = \alpha\psi_1(\mathbf{x},t) + \beta\psi_2(\mathbf{x},t)$$

对于任意 $\alpha, \beta \in \mathbf{C}$ 成立，这被称作*叠加原理*.

这句话背后的数学原理非常简单。如果 ψ_1 和 ψ_2 都是系统的状态，那它们必须是归一化的。他们可能确实是归一化的，但我们现在在这里就假设

$$\int \mathrm{d}^3x |\psi_i(\mathbf{x},t)|^2 = N_i < \infty \quad \text{for } i = 1, 2$$

那么 ψ_3 同样也是一个系统可能的状态，只要它是可归一化的。这个性质很容易证明，首先有

$$\int \mathrm{d}^3x |\psi_3|^2 = \int \mathrm{d}^3x |\alpha\psi_1 + \beta\psi_2|^2 \leq \int \mathrm{d}^3x \left(|\alpha\psi_1| + |\beta\psi_2|\right)^2$$

这里我们使用了三角不等式 $|z_1 + z_2| \leq |z_1| + |z_2|$ 对于任意 $z_1, z_2 \in \mathbf{C}$. 继续, 我们有

$$\int \mathrm{d}^3x |\psi_3|^2 \leq \int \mathrm{d}^3x \left(|\alpha\psi_1|^2 + |\beta\psi_2|^2 + 2|\alpha\psi_1||\beta\psi_2|\right) \leq \int \mathrm{d}^3x \left(2|\alpha\psi_1|^2 + 2|\beta\psi_2|^2\right)$$

接下去，最后一步我们用了 $(|z_1| - |z_2|)^2 \geq 0$ 可以得到 $2|z_1||z_2| \leq |z_1|^2 + |z_2|^2$. 最后我们得到了我们想要的

$$\int \mathrm{d}^3x |\psi_3|^2 \leq 2|\alpha|^2 N_1 + 2|\beta|^2 N_2 < \infty$$

现在我们知道 ψ_3 是可归一化的，所以这也是系统允许态。

波函数构成一个矢量空间的想法看上去非常新奇。下面的一个技巧可以让你使这个东西看上去与你已知的东西相没那么远。如果你有一个 n 维的矢量，我们将会将它写作我们约定的符号，如 y_i 其中 $i = 1, \ldots, N$。我们可以等价的将它写作 $y(i)$ 其中 $i = 1, \ldots, N$。函数 $y(x)$ 设类似的，只不过 $x \in \mathbf{R}$ 是连续的而不是像 $i = 1, \ldots, N$ 这样的离散指标.

当然，现在我们处理的是无限维矢量空间，而不是有限维矢量空间，但这并不会带来任何新的问题。其实我们在上面已经遇见过了：在我们的矢量空间我们不考虑任何未归一化的函数 $\psi(\mathbf{x})$ 而只考虑归一化的函数。但其中还有很多微妙的地方在这里，我们暂时不处理。我们将在 §3 种讨论他们。

叠加原理在物理中还有很多深远影响。假如有一个粒子在 t_0 时刻，你知道他在 $\mathbf{X}$ 位置附近。举个例子，你可以用高斯波函数来描述它。

$$\psi(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-a(\mathbf{x}-\mathbf{X})^2}$$

对于 a 的选择可以告诉你这个波的扩散程度。这里 N 是一个归一化常数我们无需考虑它（其中 $N = (\pi/2a)^{3/2}$，如果你想确定其是归一化的）在这种状态下，你可以想象粒子仍然保留了一些经典粒子的性质，至少概率分布没有在长距离上分散。然而，叠加原理告诉我们，我们还应该考虑粒子可以处于某种状态的想法

$$\psi(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{N'}} \left(e^{-a(\mathbf{x}-\mathbf{X}_1)^2} + e^{-a(\mathbf{x}-\mathbf{X}_2)^2}\right)$$

对于任意位置 $\mathbf{X}_1$ 和 $\mathbf{X}_2$。但是现在可以清楚了! 对这种状态的解释是，粒子以某种方式分裂了，可以位于 $\mathbf{X}_1$ 和 $\mathbf{X}_2$ 附近。事实上，我们很快就会看到上述状态的清晰实验结果。据我们所知，经典粒子它们是不可分割的——它同时沿着两条或更多不同的路径运动。从极端情况考虑，正是像上面这样的状态导致了薛定谔猫的情况的出现。

1.2 薛定谔方程

1.2.1 哈密顿算符

1.2.2 概率守恒

1.2.3 波函数的坍缩

1.3 双缝实验

Chapter 2

一维中量子问题

2.1 自由粒子

2.1.1 圆上粒子

2.1.2 无限深势阱

2.1.3 高斯包波

2.1.4 初见期望值

2.2 谐振子

2.2.1 能谱

2.2.2 波函数

2.3 束缚态

2.3.1 有限深势阱

2.3.2 δ 函数势

2.3.3 一些更广泛的结论

2.3.4 双势阱

2.4 散射

2.4.1 阶梯势

2.4.2 隧穿效应

Chapter 3

量子力学的表示

3.1 态

3.1.1 内积

3.2 算符与可观测量

3.2.1 本征函数与本征值

3.2.2 厄米算符

3.2.3 动量本征值与傅立叶变换

3.3 Measurement

3.3.1 期望值

3.4 Commutation Relations

3.4.1 The Heisenberg Uncertainty Principle

3.5 Interpretations of Quantum Mechanics

3.5.1 Hidden Variables

3.5.2 Copenhagen and Many Worlds

3.5.3 Shut Up and Calculate

Chapter 4

A Quantum Particle in Three Dimensions

4.1 Angular Momentum

4.1.1 Angular Momentum Commutation Relations

4.1.2 The Eigenfunctions are Spherical Harmonics

4.2 Solving the 3d Schr¨odinger Equation

4.2.1 The 3d Harmonic Oscillator

4.2.2 Bound States in 3d

4.2.3 Why Can't the Wavefunction Diverge at the Origin?

4.3 The Hydrogen Atom

4.3.1 The Energy Spectrum

4.3.2 The Wavefunctions

4.4 A Pre-Quantum Quantum History

4.4.1 The Bohr Model

4.4.2 What About the Photon?

4.5 A First Look at Renormalisation

4.5.1 A Delta Function Potential in the Plane

4.5.2 Renormalisation in Quantum Mechanics