# 量子力学研究性教学探索与《量子力学现代教程》*

孙昌璞†
(中国工程物理研究院研究生院　北京　100193)

2024－04－25收到
† email：suncp@gscaep.ac.cn
DOI：10.7693/wl20240607

**摘　要**　作者在讲授“高等量子力学”课程的过程中，结合自己关于量子力学基础、应用和科学史的研究，对量子力学研究性教学进行了长期的实践探索。最近作者编著出版了《量子力学现代教程》一书，旨在反映这种研究性教学的基本精神：在课程内容和教学方式上，博采众长、学习国内外优秀教材；遵循学科发展的逻辑脉络，对基本知识集的选择和方法技巧的讲解没有走书书相传的捷径，而是在仔细消化理解经典论著后，通过当代语言讲透、补全重要观念阐述所必须逻辑链的各个环节，把学生必须掌握的专业知识变成学生宜于接受的特色教学内容。特色部分包括矩阵力学和波动力学的创立及其二者等价性证明、海森伯表象的时变内涵、全同多体系统的对称性自发破缺(超导与玻色—爱因斯坦凝聚)与能量泛函变分的关系、二次量子化表象变换的显式表达，以及远场散射波包演化和定态描述的一致性等。作者通过《量子力学现代教程》及其相关的研究生教学，践行研究性教学的基本理念，尽可能为物理学相关专业高年级本科生、研究生和其他读者提供直达量子力学研究前沿的“最小”且简洁自洽的基础知识集合，同时也为大学老师量子力学课程教学的水平提升提供参考。

**关键词**　量子力学，研究性教学，知识点，逻辑链

## 1　引言

1987年前后，我在东北师范大学开始了量子绝热近似和几何相位因子等量子力学前沿问题的科学研究，同时也给高年级本科生和研究生开设了叫做“高等量子力学”的量子力学高级课程。之后35年里，我在探索和研究量子物理前沿问题的同时，在不同的地方(如清华大学、北京大学、北京师范大学等)，断断续续地进行不同程度的量子力学教学，特别是最近十年，在建设、升级中国工程物理研究院研究生教育的实践中，我给研究生比较系统地讲授了量子力学研究生课程，并在线上向全国开放，取得了一些预期的效果。

在尽力博采众长、学习国内外经典教材的优秀教学思想的同时，我在高等量子力学教学实践中进行研究性教学的探索和尝试。研究性教学[1)]，通常被笼统地理解为培养学生科学精神和知识创新能力的教学理念和方法，并在教学过程中融入一定的科学研究训练或完成小型的科研项目。而本文强调的研究性教学主要是指对教学内容本身进行研究，其中教学内容的知识点及其逻辑链是研究目标，并用教学的语言讲清楚知识点从起源到应用的逻辑链条，由此可以消除“知识点从天上掉下来”的不自然性。因此，很多时候我们需要从经典论文和著作入手，遵循学科发展的逻辑脉络、搞清楚知识点的来龙去脉，这样才能将教学过程转化为启发学生为科学研究积累基础知识、培育思想方法的过程。

量子力学的知识点及其逻辑链恰好需要进一步研究来理顺，研究性教学在此恰好有用武之地。本文阐述的量子力学研究性教学具体体现在以下三个方面：(1)遵循量子力学发展脉络，回溯量子力学原始文献、深入消化理解经典论文所展现的思想理念及其逻辑关系，用“当代语言”把它们变成学生宜接受和掌握的教学内容。补充了传统教科书由于书书相传、人云亦云忽视了的知识演进的逻辑，让量子力学教学变得比较“讲道理”；(2)在教学中，传递自己多年基于量子物理前沿的科学研究、对量子力学整体框架的理解，细致阐述知识点背后的物理图像，讲清楚自己以什么样的逻辑把不同的知识点联系起来，并如何应用到实际问题中，等等；(3)强调科学精神的培育、把量子物理科学史的研究成果有选择地结合到

* 本文由《量子力学现代教程》(孙昌璞 编著，2024年北京大学出版社出版)一书的“序言”扩展修订而成。

1) 没有统一的定义，大多是从“学”的视角阐述。如，研究性教学：提高我国大学生创新能力的必然选择(作者：杨臣，《光明日报》2010年07月17日07版)；超越知识中心主义：研究性教学的反思(作者：田宏杰，《中国高教研究》2019年第2期)。

教学中去，展现不同的人对同一学科的理解有不同的角度、不同的组织方式和不同的价值观，通过真实历史的呈现帮助学生正确理解量子力学的观念演进过程。

北京大学出版社最近出版的《量子力学现代教程》(以下简称“现代教程”)(图1)，是作者多年来量子力学研究性教学实践探索的结果。本文也将通过介绍“现代教程”的写作动机以及写作指导原则等，通过对具体问题分析、讨论，展现量子力学研究性教学的基本思想，如全面反思量子力学教学中的问题(如，传统表述对于“海森伯”对易关系和玻恩几率诠释的误读)，以及如何从现实重构历史的逻辑视角系统地阐述量子力学的思想体系。

## 2 在继承和反思中探索量子力学的研究性教学

如上所述，研究性教学既不是教学方法的研究，也不是课程内容相关的“小”科研。抛开这种“教”和“学”的视角，量子力学研究性教学的思想很大程度体现在教科书及其教学的过程中。在国内，针对物理专业高年级本科生和研究生量子力学高级课程教学，曾谨言先生的《量子力学：卷II》内容全面准确，强调计算能力和技巧，其新版涵盖了不少学科前沿的内容；喀兴林先生的《高等量子力学》，知识系统性强，推演细致，规矩行文，可读性好，内容取材强调“老”与“细”；吴兆颜先生是我在东北师范大学攻读硕士学位的导师，他的《高等量子力学》数学逻辑缜密，物理概念精准，表述也相当洗练。他曾经教导我，量子物理教学“直观和几何形象都不能代替数学证明”，这一理念在他的高等量子力学教科书中有明显的体现，我的教学和教科书尽可能把这种研究性质的教学理念发扬光大。国内还有不少优秀的本科和研究生量子力学教材，这里不再一一列举，但还需要提及的是，邹鹏程先生的本科量子力学教材，对二次量子化显式表示和“偶然简并并非与对称性无关”的观点对我的教学和写作也颇具启发性。

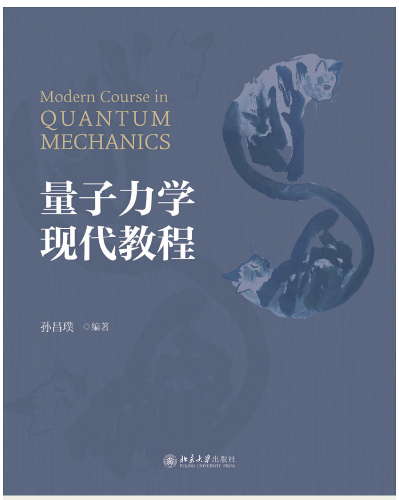


图1 《量子力学现代教程》封面

狄拉克的《量子力学原理》(下称“狄书”)堪称经典，但因其出版早、表述方式个性化强，自然也就没有采用今天大家习惯的对偶空间的语言。当然，他也不会使用在自己早年符号基础上发展起来的广义函数语言。作者的教学和教科书在尽可能准确传达狄书思想理念的同时，使用现代简化后严谨的数学语言。玻姆的《量子理论》亦可视为量子力学教科书经典。玻姆在深入研读和理解量子力学经典文献之后，通过在普林斯顿大学的教学实践，基于哥本哈根学派的观点完成这本偏重思想阐释的经典教科书。它用相当的篇幅从物理的角度极为准确地阐述了量子测量问题(当时是科学研究的前沿)。虽然他本人的量子力学研究(隐变量理论)在完成此书后不久就走向反对哥本哈根诠释的一面，但对量子力学的哥本哈根诠释及其相关哲学问题的阐释，准确而详尽、标准而权威。

作者在教量子力学和本书写作的过程中，参考较多的现代教科书是温伯格的 *Lectures on Quantum Mechanics* 和樱井的 *Modern Quantum Mechanics*，前者是可以和“狄书”相媲美的经典教科书。作为一位量子场论科研和教学的大家，温伯格不仅建立了弱电统一的标准模型，而且在量子力学基础方面有过艰苦卓绝但尚未成功的探索——非线性量子力学。他科学研究和教育教学并重，在大物理学家中极为少见。他的书注重形式理论，又强调历史发展的科学逻辑，同时还适当地照应了量子力学发展的学科前沿。当然，这本书采用了与标准教材不一样的符号体系，全书没有一张图，读者需要对“高等”的抽象表述有较好适应性。樱井的书取材适当、数学表述简练，物理图像简洁而明晰，不拖泥带水，习题采用了很多贴近物理前沿研究的例子，切中正文主题，是一本宜教、易读、宜学的好书。但作为量子力学现代教程，对多体问题等内容取材较少。至于朗道的《量子力学》，无疑是一部鸿篇之作，对科学研究工作极具启发性和参考价值，但这不是一本标准的教科书，其中很多“易证明(推导)”的地方是很难证明、很难推导过去的。

我非常推崇吴大猷先生的《量子力学(甲部)》(该书的乙部主要是讲量子场论和群论)。吴大猷先生是李政道和杨振宁先生的老师，二人也极为赞誉先生基于前沿研究的教学工作。他的书从矩阵力学起源入

手，连贯一致地讲授量子力学，在当代教材中是少有的。吴先生的书还原了量子力学发展的历史逻辑，读后使大家觉得量子力学是“讲道理”的，并自然地感觉到矩阵力学的引入是旧量子论和爱因斯坦可观察观念结合的自然结果。吴先生的书严谨而有深度，偏于简练，会给读者留下更多的思考空间和触类旁通的发挥余地。

我是吴兆颜老师的学生，听过他高等量子力学的课程，受益颇多，特别是他的一些教学理念对我有很大影响；我也曾和曾谨言先生合作，在北大清华上过量子力学的高级课程，近距离体会和学习了曾先生的教学风格。我虽无缘亲自聆听其他几位前辈先生讲授量子力学，但通过揣摩他们的经典教材，可以不断体会他们的研究性教学的风范。我通过长期从事高等量子力学的教学、并博采众长、历经数年撰写了《量子力学现代教程》，希望能够致敬、学习、效法上述经典教材展现的研究性教学的精神。虽不奢望“现代教程”成为所有优点的集大成者，但要尽我所能吸收消化前人教材蕴藏的宝贵经验，通过取材(反映量子力学的科研前沿问题)和表述从点到面的提升，融入自己的科学研究工作体会，形成自己的研究性教学的特色。

另外，我通览了这些年国内外的其他量子力学教材(特别是中文的教材)，感觉到量子力学教学有一种趋势：面向本科生的初等量子力学教材主要在于扩大(应用)领域，如大量介绍量子信息和量子技术；面向研究生的高等量子力学教学的提升，更多在于强调解决问题的技巧方法和面向多体系统的形式理论(有的与量子场论有重叠)。量子力学教学发展的这些偏重，给量子力学教学和教材的建设进一步提升留下拓展空间：大多现代教科书对于量子力学形成的逻辑和科学思想演进过程的讲述不够充分，使得大家还是觉得“量子力学不讲理”、“是天上

### Box 1　薛定谔方程的“推导”

薛定谔考虑微观粒子的波动方程时有一个清晰的物理图像。他类比了几何光学和物理(波动)光学的关系：波动光学中的光线传播是短波条件下波动方程波前法线的运动，而物质波的波动方程(今天称为薛定谔方程)描述的波前法线在特定条件下应该代表牛顿方程描述的经典质点轨迹。后者是已知的，由此可以推断出前者——薛定谔方程的形式。

考虑在保守位势$V(\boldsymbol{r})$中运动的一个质量为$m$的粒子，其运动轨迹由与牛顿定律等价的哈密顿—雅可比方程

$$\frac{1}{2m}|\nabla S|^2+V+\frac{\partial S}{\partial t}=0 \ , \tag{1.1}$$

描述。由作用量$S$定义“波函数”$\psi(\boldsymbol{r},t)=\exp(\mathrm{i}S/\hbar)\equiv\psi(\boldsymbol{r})\exp(-\mathrm{i}Et/\hbar)$，则有以下方程：

$$\mathcal{L}\equiv\frac{\hbar^2}{2m}|\nabla\psi(\boldsymbol{r})|^2+\left[E-V(r)\right]|\psi(\boldsymbol{r})|^2=0 \ . \tag{1.2}$$

需要指出的是，在$S$的等值的等相位曲面$C$：$\{(r,t)\,|\,S(x,y,z\,;\,t)=常数\}$上，切矢量$\mathrm{d}\boldsymbol{s}=(\mathrm{d}x,\mathrm{d}y,\mathrm{d}z)$满足$\nabla S\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{s}=0$，$C$沿着$\nabla S$定义的法线方向移动。但是，它对应的波动方程(1.2)是一个非线性方程，不是通常的薛定谔方程。薛定谔当年的原始论文是对方程(1.2)左边积分再变分，$\delta\left(\int\mathcal{L}\,\mathrm{d}x\right)=0$。由此得到薛定谔方程：

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{r})+\left[E-V(r)\right]\psi(\boldsymbol{r})=0 \ . \tag{1.3}$$

吴大猷的《量子力学(甲部)》沿用了这个方式讲解，然而，这一阐述方式物理图像并不十分清晰，学生理解自然有困难。为补充这里逻辑知识链的断点，作者考虑了如何在短波近似的条件下把方程(1.2)线性化。以一维情况为例，由定义的一维波函数$\psi(\boldsymbol{q})=\exp(\mathrm{i}S/\hbar)$计算：

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial q^2}=-\frac{1}{\hbar^2}\psi\left(\frac{\partial S}{\partial q}\right)^2+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\psi\frac{\partial^2 S}{\partial q^2} \ . \tag{1.4}$$

考虑$\hbar$很小、物质波波长很短，

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial q^2}\to-\frac{1}{\hbar^2}\psi\left(\frac{\partial S}{\partial q}\right)^2=\frac{1}{\psi}\left(\frac{\partial\psi}{\partial q}\right)^2 \ , \tag{1.5}$$

从而把一维非线性方程线性化为薛定谔方程。推广到三维情况，$|\nabla\psi(\boldsymbol{r},t)|^2\to\psi^*\nabla^2\psi$，非线性方程(1.2)变为定态薛定谔方程(1.3)。

掉下来的”(曾谨言,《物理》2000年第7期436—438页)。例如,少有教科书把薛定谔方程、海森伯方程乃至基本对易关系的由来讲深讲透。究其根源,是因为内容取材和讲述方法从教科书到教科书、人云亦云,常常忽略了量子力学的原始文章和经典著作中的诸多内容,而它们对于教学过程中知识逻辑链的完整性是不可或缺的。我在量子力学教学新方式的探索中,尽可能地尝试去补足这些缺憾。我写作这本“现代教程”的目的之一是要解决这个问题,用简洁易懂的教学语言讲清楚薛定谔方程(Box 1)、海森伯方程乃至基本对易关系等方面的思想起源,使得学生在学习量子力学时能够学会科学欣赏、理解和体会知识创新的发展逻辑,以在以后科学研究中养成自己较高的学术品味。

## 3 科研性教学内容取材要有节、有用、尊重历史

大家知道,写入教科书的内容都是经过时间考验沉淀下来的知识的精华。然而量子力学的应用在过去三十年的发展看上去十分迅猛,从包含量子计算和量子通讯的量子信息科学到基于冷原子玻色—爱因斯坦凝聚和新型低维结构的量子模拟(如拓扑材料等),新奇量子态和“超越”经典的量子技术层出不穷。量子力学的研究性教学要不要反映这方面的发展、涉及相关内容?如果取舍不当,就会有价值判断影响未来发展的风险。因此,从事科学研究的人,如何避免在讲课和写作教科书时“喜新厌旧”带来的问题,是研究性教学必须考虑的。作者认为,在研究性教学中,选择内容也要有节制,不能把自己科学研究相关的和道听途说的新东西都一股脑地拿过来;选择的新材料要有普适性,不能只考虑个人兴趣、或是只对特殊领域方向有用的内容;新的内容往往来自文献,其中原初的思想、理论开始一般比较初步、具体表述会被后来文献改善和修正,因此要系统把握、理解经典文献。取材内容不是越新越好、也不是越久越好,而是一定要有历史的厚度(下一节我们举例讨论科学史研究结果的作用),并照应当代发展。

在科学研究中,作者一直在学习和体会“保守的革命者”的基本精神:关注并随时准备投身于科学研究的前沿,但对科学研究中时髦的东西保持足够的警惕。类似地,关于教学和“现代教程”写作的材料取舍,不会或不急于使用科学前沿进展中重要性和正确性还没有定论的东西,取材只是定位于“最基础”的知识集合及其有限的拓展——支撑前沿“真有用”科学研究的必要观念和基础知识。例如,面对当前量子计算能否实用化的科学研究,教学中安排了与其基础相关的章节(量子退相干问题、量子纠缠和反映量子定域性的贝尔不等式);针对演生效应的量子模拟问题,从多体基态变分的角度阐述了什么是超导和玻色—爱因斯坦凝聚中对称性自发破缺、什么是相位相干,通常量子力学教科书中并没有系统而有组织地介绍这些基础内容(Box 2)。希望读者延展学习这些必要的基础知识,形成自己对量子科技前沿发展方向的科学判断力。

## 4 把量子力学史的研究成果结合到课程教学中去

我多年从事量子力学的前沿科学问题探索和研究,在教学的实践中也常常被学生问及量子力学发展相关的科学史。这些问题初看上去对具体学习和科学研究本身好像没有直接的影响,但它们却能够帮助学生正确理解量子力学的观念演进对人类思想进步的促进作用,有时候也会对具体的科学研究有关键的启发作用。

一个典型例子是坐标$x$和动量$p$满足基本对易关系$xp-px=\mathrm{i}\hbar$。它常常被称为海森伯对易关系,却被写在马克斯·玻恩的墓碑上。如果了解一点量子力学发展史,重读量子力学建立时的“两个人”的文章,不难发现这个对易关系是玻恩和他的学生约当最早推导出来的:要求海森伯运动方程有经典对应,就可以推导出基本对易关系。这个问题简单易懂、又富有启发性,但现有的教科书大多不介绍这个重大的科学发现过程。其实,弄懂了这一点,对耗散系统如法炮制,从对易关系必须融合非保守系运动方程的角度出发,就可以形式地解决耗散系统量子化的问题。与吴大猷、温伯格和朗道的量子力学教程一样,这个“现代教程”也尊重这个科学史事实,以现代语言还原了玻恩和约当的科学贡献,使得大家觉得量子力学讲道理的同时,更加深刻地理解量子力学不可对易性的起源。

传统的量子力学教科书在证明量子力学两种形式(波动力学与矩阵力学)等价时,常常用到了玻恩几率诠释或由它推及的期望值假设。此事和量子力学发展史上一件公案有关:有人与玻尔谈到了玻恩几率诠释,玻尔有些看轻玻恩的工作,因为薛定谔证明了“两种形式”的等

## Box 2 玻色—爱因斯坦凝聚和超导的相位相干与序参量

作为二次量子化方法的应用，我们介绍中性玻色子气体发生的玻色—爱因斯坦凝聚(BEC)现象，以阐明为什么在极端条件下，大量粒子组成的宏观系统会呈现出量子相干现象——宏观量子效应。

考虑最简单的相互作用玻色子模型，其哈密顿量的二次量子化形式为

$$H=\sum_n E_n a_n^\dagger a_n+\frac{1}{2}\sum_{nm,rs} g_{nm,rs}a_n^\dagger a_m^\dagger a_r a_s \ , \tag{2.1}$$

这里$a_n^\dagger$和$a_n$是原子单粒子态的产生湮灭算子，耦合系数$g_{nm,rs}$由两体相互作用短程效应决定。我们假设系统的可能基态为多模相干态：

$$|\mathrm{BEC}\rangle=\exp\left[\sum_n \alpha_n \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_n}a_n^\dagger\right]|\mathrm{vac}\rangle=\prod_n\left|\alpha_n\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_n}\right\rangle \ , \tag{2.2}$$

以实数$\alpha_n$和$\phi_n$为变分参数，对“自由能”$F(\phi_n,\alpha_n)=\langle\mathrm{BEC}|H-\mu\int\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r})\hat{\psi}(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}|\mathrm{BEC}\rangle$($\mu$是化学势，代表原子从势阱溢出的能量阈值)变分，即$\frac{\delta F}{\delta\phi_k}=0,\ \frac{\delta F}{\delta\alpha_k}=0$。由第一个变分方程

$$\sum_{m,rs}g_{km,rs}\alpha_k\alpha_m\alpha_r\alpha_s\sin\left[\phi_r-\phi_k\right]=0 \tag{2.3}$$

得到能量取极值时需要满足相位相干$\phi_k=\phi$。此时，场算符$\hat{\psi}(\boldsymbol{r})=\sum_n u_n(\boldsymbol{r})\hat{a}_n$满足$\hat{\psi}(\boldsymbol{r})|\mathrm{BEC}\rangle=\psi(\boldsymbol{r})|\mathrm{BEC}\rangle$，其本征值$\psi(\boldsymbol{r})=|\psi(\boldsymbol{r})|\exp(\mathrm{i}\phi)$有一个整体相位。而第二个变分方程

$$(E_k-\mu)\alpha_k+\frac{1}{2}\sum_{m,rs}g_{km,rs}\alpha_m\alpha_r\alpha_s=0 \ , \tag{2.4}$$

恰好给出Gross—Pitaevskii (G-P)方程：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r})+g|\psi(\boldsymbol{r})|^2\psi(\boldsymbol{r})=\mu\psi(\boldsymbol{r}) \ . \tag{2.5}$$

其解给出非零序参量$|\psi(\boldsymbol{r})|=\sqrt{\langle\mathrm{BEC}|\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r})\hat{\psi}(\boldsymbol{r})|\mathrm{BEC}\rangle}$，意味着BEC凝聚发生。

以上的结果表明，在BEC的基态

$$|\mathrm{BEC}(\phi)\rangle=\exp\prod_n\left|\alpha_n\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\right\rangle \tag{2.6}$$

之中，每一个模式上玻色子(无论$n$为何值)的相位都是一样的，整块凝聚体有统一的相位$\phi$。而对于不同的$\phi$值，对应的基态$|\mathrm{BEC}(\phi)\rangle$是简并的，因为凝聚体的哈密顿量明显具有$U(1)$对称性：当$a_n\to a_n\exp(\mathrm{i}\delta)$时，$|\mathrm{BEC}(\phi)\rangle\to|\mathrm{BEC}(\phi+2\delta)\rangle$，系统能量并不改变。如果给定一个凝聚体，也就给定了一个$\phi$，体系不再具有$U(1)$对称性，因而发生了对称性自发破缺。

同样的阐述方法，可以形象生动地讨论超导体的对称性自发破缺与宏观序参量的涌现。对于给定一块超导体，其基态存在一个整体相位$\phi$，即通过基态变分的方法证明，每一个库珀对的相位都是一样的。假设超导体变分基态写为一个多模费米子相干态：

$$|\mathrm{BCS}\rangle=\prod_k(u_k+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_k}v_k\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_{-k}^\dagger)|\mathrm{vac}\rangle\sim\prod_k\exp(1+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi_k}\frac{v_k}{u_k}\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_{-k}^\dagger)|\mathrm{vac}\rangle \ , \tag{2.7}$$

其中$\hat{c}_k^\dagger\hat{c}_{-k}^\dagger$作用在真空上产生一个库珀对，$\phi_k$代表每个库珀对的相位，通过变分可以确定整块超导体有统一的相位$\phi_k=\phi$，这就是相位相干。不同的$\phi$值对应的超导基态$|\mathrm{BCS}(\phi)\rangle$是简并的，因为超导体的哈密顿量明显具有$U(1)$对称性。一旦指定了一个$\phi$，体系不再具有$U(1)$对称性，$U(1)$对称性自发破缺就发生了。

价，就自动隐含了几率诠释。然而事实并非如此，1926年3月薛定谔证明“两种形式”等价时并没有引用玻恩“稍后”(1926年6月)发表的几率诠释的文章，而几乎同时在大洋彼岸Eckart给出的证明也未涉及到玻恩几率诠释。从这些公开发表的结果来看，玻尔的说法在科学逻辑上没有充足的理由。“现代教

### Box 3 波动力学与矩阵力学等价性证明

假设初始时刻 $t_0$ 的态矢 $|\psi(t_0)\rangle$ 与 $t$ 时刻的波函数 $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle$，相差一个时间相关的幺正变换——演化算子 $\hat{U}(t,t_0)$。它满足的演化方程有如下的形式：

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t,t_0) = H\hat{U}(t,t_0) , \tag{3.1}$$

它使得 $|\psi(t)\rangle$ 满足通常的薛定谔方程。其中

$$H = \mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t,t_0)\right)\hat{U}(t,t_0)^{\dagger} \tag{3.2}$$

是待确定的形式化的哈密顿量。海森伯表象的力学量的形式定义为 $\hat{A}(t) = \hat{U}^{\dagger}(t)\hat{A}\hat{U}(t)$。可以证明，它满足海森伯方程：

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}(t) = \left[\hat{A}(t),\hat{H}(t)\right] , \tag{3.3}$$

其中 $\hat{H}(t) = \hat{U}^{\dagger}(t)\hat{H}\hat{U}(t)$ 形式地包含未知的 $\hat{U}(t)$。

现在关键的问题是要确定 $\hat{H}(t)$ 的形式，具体而言，我们要证明 $\hat{H}(t)$ 就是经典哈密顿量 $H = p^2/(2m) + V(x)$ 的量子化 $\hat{H}(t) = H(p \to \hat{p} = -\mathrm{i}\hbar\,\partial/\partial x)$，从而就能说明薛定谔方程和海森伯方程是等价的。事实上，要求海森伯方程给出的运动方程(3.3)形式上和泊松括号 $\{A,B\}$ 给出的正则方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}p(t) = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}V(x) \tag{3.4}$$

一样，$\hat{H}(t) = H(p \to \hat{p})([\hat{x},\hat{p}] = \mathrm{i}\hbar)$，这不仅表明了量子化规则的合理性，而且隐含着波动力学与矩阵力学的等价性。以上讨论仅仅假设了 $\hat{A}$ 不显含时间，显含时间的情况在“现代教程”中另有讨论。

以上关于薛定谔方程和海森伯方程等价的证明并没有应用玻恩对波函数的几率诠释。薛定谔等当年关于两种表述等价性的证明与玻恩提出几率诠释的时间几乎是相同的，从逻辑上讲二者也是独立的。因此，玻尔的观点“两种形式等价的证明意味着玻恩几率诠释”是不正确的。事实上，基于玻恩几率诠释，通过两种表象计算力学量的期望值相等来证明等价性，只是后来文献中才出现的。

程”尊重这一科学史的事实，以简单易懂的方式，不依赖几率诠释，证明量子力学的“两种形式”等价(Box 3)。作者认为，这种做法不仅肯定了玻恩的重要科学贡献，而且有助于大家对量子力学基本逻辑思想的理解，从而体会什么是刨根问底的科学精神。

## 5 量子力学研究性教学的一些实例

下面通过更多的实例，进一步阐述研究性教学的精神和风格。

(1)关于量子力学的基本原理阐述，首先展示矩阵力学是如何基于对易关系建立起来、并对微观系统进行量子化的。我们梳理了量子力学公理化体系，特别强调指出，把力学量的准确测量理解为测量方差为零，则玻恩几率诠释与其期望值假设的等价互为充分必要(Box 4)。本教程在讨论表象变换理论时，特别指出海森伯绘景本身是一种基于时变基矢的表象。

(2)“现代教程”特别强调概念和知识点背后的物理含义。通过代数方法讨论谐振子量子化，之后我们定义了相干态，并明晰了它的两个物理内涵：不确定性关系最小的态和随时间演化不扩散的态。我们指明狄拉克符号表述就是代数上的对偶空间理论，由此可以很自然地掌握当前非厄米系统前沿研究的数学工具——双正交基方法；在阐述量子系统的时间演化问题时，特别讨论了测量自由粒子标准量子极限和自由粒子波包扩散的关系。联系作者自己早年系列的科学研究工作，详细介绍了量子绝热近似过程和相应的几何相位因子概念，通过几何相位的例子，展示了微分几何纤维丛概念在物理学中应用的必要性；课程中对玻恩—奥本海默近似及其诱导的人工规范场结构进行了系统的讨论，并进一步通过Feynman—Hellmann定理讨论了化学键是什么。

(3)对于多粒子系统和全同粒子系统，把产生算子视为由态矢定义的巨(阶化)希尔伯特空间(由多粒子系统的不同粒子数希尔伯特空间直

和而成)上的算子，它的作用使得费米子(玻色子)的Slater行列式(对称式)增加一行一列，从而可以计算得到产生湮灭算子满足的对易关系。由此构造Fock空间，通过简洁的求和公式，单体算子和两体算子可以方便地表述为产生湮灭算子齐次型——二次量子化形式，这表明二次量子化本质上是一种表象变换(Box 5)。

(4)关于物理学中的对称性，首先讨论电磁场中带电粒子的运动及其相对论效应的狄拉克方程，我们的出发点是$U(1)$规范对称性的最小作用原理。面向应用，在特定规范

### Box 4　玻恩几率诠释与其期望值假设的等价

玻恩几率诠释通常表述如下：在$|\psi\rangle=\sum_n c_n|n\rangle$上测量$\hat{A}$得到的结果是随机的；每次测量只能得到一个值$a_n$，其几率为$p_n=|c_n|^2$。其推论给出测量结果平均值$\bar{A}=\sum_n p_n a_n$。显然，玻恩几率诠释意味着$\bar{A}$就是测量$\hat{A}$的期望值$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$。

反过来，如果事先是假设多次测量$\hat{A}$的实验平均结果是期望值$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$，是否能反论出玻恩几率诠释？即证明如下命题：只有在本征态$|n\rangle$上测得力学量$\hat{A}$的结果是“确定的”，测得值正好为其平均值——即测量值为$\bar{A}$时的涨落均方差为最小。事实上，我们计算在$|\psi\rangle$上测$\hat{A}$得到平均值$\bar{A}$的均方差涨落：

$$\overline{(\Delta A)^2}=\langle\psi|(\hat{A}-\bar{A})^2|\psi\rangle=\langle\psi|\hat{A}^2|\psi\rangle-\bar{A}^2=\langle\phi|\phi\rangle\ ,\tag{4.1}$$

即$\overline{(\Delta A)^2}$是一个矢量$|\phi\rangle=(\hat{A}-\bar{A})|\psi\rangle$的模平方。因此，当且仅当$|\phi\rangle=0$时，$\overline{(\Delta A)^2}=0$，得到的结果才是确切的。$\hat{A}|\psi\rangle=\bar{A}|\psi\rangle$，在$|\psi\rangle$上测得的只能是$\hat{A}$的一个本征值。上述命题表明，期望值假设($\bar{A}=\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$作为实验测量$\hat{A}$的平均结果)与玻恩几率诠释是等价的。这里我们明确了，“确定性”结果意味着涨落为零。

### Box 5　二次量子化表述的新形式

先以玻色子为例，定义Fock态$|\psi\rangle=|n_1,n_2,\dots\rangle$为对称化的多粒子态。整个玻色子的态空间是一个阶化空间(Graded Space)——粒子数不固定时的巨希尔伯特空间：

$$V=V^{(0)}\oplus V^{(1)}\oplus\cdots V^{(N)}\oplus\cdots\equiv\sum\oplus V^{(n)}\ ,$$

其中$V^{(n)}$代表有$n$个粒子的希尔伯特空间。只有在$V$上才可以定义产生算子：

$$a_j^\dagger=\sum_{N=0}^{\infty}a_j^+(N+1)\in\mathrm{End}(V)\ ,\tag{5.1}$$

和消灭算子$a_j=(a_j^\dagger)^\dagger$：

$$a_j^\dagger(N+1)=\frac{1}{\sqrt{N+1}}\sum_{l=1}^{N+1}|u_j(l)\rangle p_{N+1,l}\ ,\tag{5.2}$$

其中$|u_j(l)\rangle$是第$l$个粒子的单粒子态。$a_j^\dagger(N+1):V^{(N)}\rightarrow V^{(N+1)}$是巨希尔伯特空间上算子。其实，一个矢量在巨希尔伯特空间上也可以当成一个算子，$|u\rangle\rightarrow A_u^\dagger:A_u^\dagger|\phi\rangle=|\phi\rangle\otimes|u\rangle$。于是，通过直接计算，得到基本对易关系：$\left[a_j,a_l^\dagger\right]=\delta_{jl}$，$[a_j,a_l]=0$和基本求和公式：

$$\sum_{j=1}^{N}|m(j)\rangle\langle n(j)|=a_m^\dagger a_n\ .\tag{5.3}$$

对于费米子体系也有类似的结论。

从这个基本求和公式(5.3)出发，可以直接得到单体和多体算符的二次量子化表示，和传统教科书的推导相比，这种方法极为简洁且物理图像清晰。例如，体算符$F=\sum_{j=1}^{N}f(j)$可以表达为

$$\begin{aligned}F&=\sum_{j=1}^{N}\sum_{m,n}|m(j)\rangle\langle n(j)|\langle m|f|n\rangle\\&=\sum_{m,n}\left(\sum_{j=1}^{N}|m(j)\rangle\langle n(j)|\right)f_{mn}=\sum_{m,n}f_{mn}a_m^\dagger a_n\ .\end{aligned}\tag{5.4}$$

下分析了朗道能级是如何导致量子霍尔效应的，介绍了微腔中电磁场的量子化，以及单原子或多原子与其量子场相互作用导致的各种量子效应，如自发辐射。

(5)对于旋转对称性$SO(3)$的讨论，采用玻色子实现(二次量子化)办法，构造了标准角动量的表示。由于现代计算机能力的大幅度提升，我们对传统角动量理论的内容——$C$-$G$系数，6-$j$、9-$j$符号和母分子数等传统角动量理论的内容没有着笔太多。这是因为三十年前各种技巧性强的求和方法，现在十分容易由计算机的符号计算替

## Box 6 散射的波包时间演化描述与定态处理

用波包运动演化描述量子力学中的散射过程通常符合人们的直觉。假设$t \to -\infty$时，粒子的初态是一个向右传播的波包，它远离在$x = 0$处的散射中心。在$t \simeq 0$时，它与散射中心相互作用，波包形状可能发生变化。但$t \to \infty$时，它恢复波包形状(图2)。然而，在初等量子力学和传统高等量子力学教材中都是通过求解定态薛定谔方程解决散射问题，这与直觉不一致。在我们的教学中以一维$\delta$-势散射为例，展示了远场条件下波包运动描述的时间演化问题等价于定态散射的处理。

考虑一个远离散射中心$\delta$-势、向中心运动的高斯波包演化。把这个波包按$\delta$-势中粒子的本征函数(通常是分段的平面波)展开，然后对每一个展开项配以能量决定的时间演化因子得到高斯波包演化。可以证明，对于从远离散射中心的左侧($x_0 << 0$)以较大速率向右传播($k_0 >> 0$)的波包(动量空间分布为$\varphi(k)$)，在初态波包较窄的情况下，整个空间上的平面波展开可以足够好地近似按$\delta$-势下能量本征函数展开。也就是说，对于一个定域在远离散射中心、以较大速率向右行进的波包，它在能量本征态上的展开系数与它在动量空间平面波上的展开系数可近似看成是一样的。

在此基础上计算任意$t$时刻的波包演化。当$x < 0$时，

$$\psi(x,t) = \int_0^\infty \mathrm{d}k\,\varphi(k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx - \frac{h}{2m}k^2 t)} \qquad (\mathrm{I})$$

$$+R\int_0^\infty \mathrm{d}k\,\varphi(k)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kx + \frac{h}{2m}k^2 t)}, \qquad (\mathrm{II})$$

当$x > 0$时，

$$\psi(x,t) = T\int_0^\infty \mathrm{d}k\,\varphi(k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx - \frac{h}{2m}k^2 t)}, \qquad (\mathrm{III})$$

其中$R$和$T$分别为定态计算时给出的反射系数和透射系数，这一点特别重要。

注意到当时间$t \to -\infty$时，快速振荡因子$\exp(\mathrm{i}hk^2|t|/2m)$将使得积分项(Ⅱ)和(Ⅲ)近似为零，只有(Ⅰ)可能不为零。然而，$t \to +\infty$时，快速振荡因子$\exp(-\mathrm{i}tk^2 h/2m)$使得积分(Ⅰ)为零，而非零积分(Ⅱ)代表向左侧运动的波包，以及非零积分(Ⅲ)代表向右侧运动的波包。

于是，在一维情况下，证明了散射的波包时间演化描述与定态处理的等价性：对于初态定域在左侧向右入射的波包，其任意$t$时刻的波包有以下具体形式：

$$\psi(x,t) = \begin{cases} \psi_+(x,t) + R\psi_-(x,t), & x \leqslant 0 \\ T\psi_+(x,t), & x > 0 \end{cases},$$

其中向左、向右运动的波包为$\psi_\pm(x,t)$(具体形式见“现代教程”)，而反射和透射波波包的权重振幅恰好分别是一维定态问题的反射系数和透射系数。

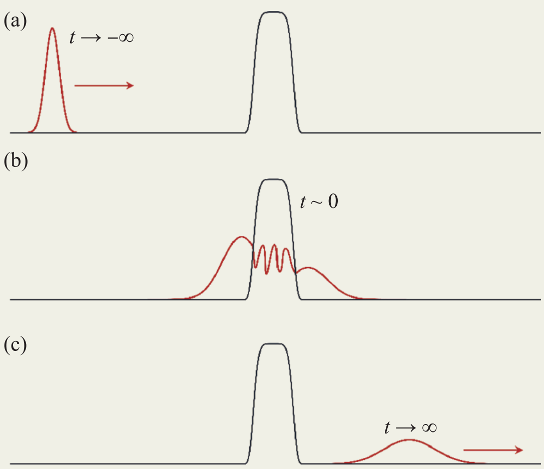


**图2** 散射中的波包 (a)粒子入射；(b)与散射中心作用；(c)远离中心出射

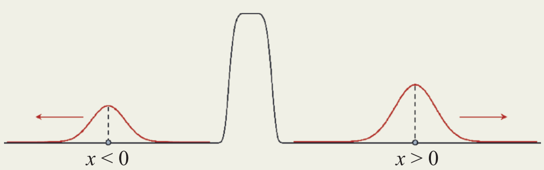


**图3** 散射后分为左右两部分传播的散射波

代。关于角动量理论讨论的重点放在Wigner — Eckart定理上，因为它不仅能大大简化矩阵元的计算，而且可以在不进行解析计算的前提下，给出跃迁选择定则。针对氢原子的对称性是$SO(4)$、而并非$SO(3)$的物理分析，强调了动力学对称性的基本内涵，并特别指出了“偶然简并”意味着更大对称性的出现。

关于散射和碰撞过程的分析是我们量子力学研究性教学中有特色的部分。从波包演化的观点出发，简述了形式散射理论。以$\delta$势上的一维散射为例，分析了在什么情况下波包运动描述的时间演化问题可以等价于定态散射的处理(Box 6)。严格定义入态和出态，通过格林函数方法，以上结论可以直接推广到有实际意义的三维情况，在“现代教程”6.4节中展示了什么情况下三维波包演化处理等价于处理李普曼—施温格方程描述的定态问题。

## 6　结语：关于量子力学诠释及其他

最近，量子信息技术成为科技发展的热点，量子测量问题也随之成为量子物理的热议话题。量子测量无疑是量子力学诠释的核心内容，但在量子力学的实际应用中这并不是必需的。针对哥本哈根诠释强调经典仪器导致波包塌缩的必要性，温伯格等人的诘问是，“为什么量子力学不能既描述测量对象，又描述仪器和观察者?”其实，若没有这种哥本哈根诠释关于量子力学二元论的表述，课程教学不必过多地关注量子力学测量问题的争论，因为量子测量的物理内容会自动地包含于玻恩的几率诠释(这是“哥廷根诠释”，而非“哥本哈根诠释”！)。

当然，贝尔不等式描述量子非定域性的相干讨论应当作为现代量子力学教学的必要部分。由于贝尔不等式阐述不必基于波包塌缩的假设，非定域性并不意味着有违反狭义相对论的超光速效应。量子退相干理论可以用来解释宏观量子效应通常为什么不存在，从根本上解决薛定谔猫佯谬带来的量子力学理解的困境。其实，量子退相干理论应用到量子测量问题的讨论，可以澄清什么是客观的量子测量。作者认为，矩阵力学、波动力学和玻恩几率诠释建立以后，作为最基础的物理理论，量子力学“三位一体”已经大厦建成。我们不仅可以应用它来解决所有的实际问题，而且可以拓展到各种新的微观物理系统，不存在任何解释不了的实验数据。

围绕着量子测量问题关于量子力学诠释的学术争论，只是哲学中知识论和本体论的固有争议在量子力学上的反映。这种争论有助于提高人类认识客观世界的水平，但不会增强直接解决具体问题的能力、促进具体物理知识的增长。因此，在量子力学研究性教学中，我们只是简略地介绍了量子力学诠释问题，着眼点也不在旷日持久的爱因斯坦—玻尔的学术争论。我们按照“逻辑自洽、符合实验”的原则，把量子退相干相关的量子力学基本问题讲清楚。作者多年致力于退相干问题的研究，以克服哥本哈根诠释中波包塌缩给量子力学理解带来的哲学上的二元论问题：量子力学的完备性是否需要一个量子力学不能描述的经典世界来保证。考虑到基于量子测量的量子力学诠释只是一个科学哲学上的问题，无涉具体的物理，建议初学者、不从事量子力学基本问题和科学哲学研究的人不必过多地着眼量子力学诠释问题。

在量子力学研究性教学中，对于量子力学基本问题，我们是依据以上精神选取教学题材和讲解的，以让不同程度的学生知晓量子力学中有“争议”的问题。这种做法也在一定程度上展现了“现代教程”的特色以及作者所追求的写作和研究性教学的风格。

作者没有采用通常《高等量子力学》来命名本书，是因为作者心目中的量子力学教科书没有“初级”和“高等”之分。量子力学课程必须讲成一个物理思想、逻辑结构和数学方法融合的整体。我们需要一本深入浅出、讲道理的量子力学教材，老师可以根据课程类型和学生情况教到一定的程度，学生可以根据需要和自己的知识基础学到一定的深度。教学相长，不断地学习体悟，从“初级”到“高等”不断提高，形成自己对量子力学的正确理解。在量子力学教学中，作者并不提倡宣传“量子力学就是学不懂”的不可知论以及“量子力学会计算就行”的工具主义观点。

**致　谢**　感谢在量子力学研究方面的合作者和听过课的几代学生。与他们丰富多彩的学术互动，使得我能够持续不断进行量子力学研究性教学探索，并不断改进量子力学现代教程的写作。

## 参考文献


[1] 曾谨言. 量子力学. 北京:科学出版社, 1981. p.359

[2] 吴兆颜. 高等量子力学. 长春:吉林大学出版社, 2008

[3] 喀兴林. 高等量子力学. 北京:高等教育出版社, 1999

[4] 邹鹏程. 量子力学. 北京:高等教育出版社, 2003

[5] 吴大猷. 理论物理(第6册):量子力学(甲部);理论物理(第7册):量子力学(乙部). 北京:科学出版社, 1983

[6] 孙昌璞, 葛墨林. 经典杨-米尔斯场理论. 北京:高等教育出版社, 2022

[7] Weinberg S. Lectures on Quantum Mechanics. Cambridge University Press, 2015

[8] Sakurai J J, Napolitano J. Modern Quantum Mechanics, 3rd Ed. World Pub. Co., 2011

[9] Schiff L I. Quantum Mechanics. New York: McGraw Hill, 2014

[10] Bohm D. Quantum Theory. New York: Prentice-Hall Inc, 1951

[11] Heisenberg W 著, 王正行等 译. 量子论的物理原理. 北京:高等教育出版社, 2017

[12] 何祚庥. 物理, 1993, 22(7): 419

[13] Krag H 著, 肖明, 龙芸, 刘丹 译. 狄拉克:科学和人生. 长沙:湖南科技出版社, 2009

[14] Cassidy D C 著, 戈革 译. 海森伯传. 北京:商务印书馆, 2002

[15] Pais A 著, 戈革 译. 玻尔传. 北京:商务印书馆, 2001

[16] Pais A 著, 关洪, 杨建邺, 王自华等 译. 基本粒子物理学史. 武汉:武汉出版社, 2002

[17] 彭桓武. 物理, 2001, 30(5): 265

[18] 彭桓武, 徐锡申. 理论物理基础. 北京:北京大学出版社, 1998. pp.296—298

[19] 孙昌璞, 衣学喜, 周端陆 等. 量子退相干问题. 见:曾谨言, 裴寿镛 主编. 量子力学新进展(第一辑). 北京:北京大学出版社, 2000

[20] 孙昌璞, 全海涛. 物理, 2013, 42(11): 756

[21] 孙昌璞. 物理, 2000, 29(8): 457

[22] 孙昌璞. 物理, 2001, 30(5): 310

[23] 温伯格. https://www.163.com/tech/article/C71N59CU00097U81.html

[24] Bohm D. Physical Review, 1952, 85(2): 180

[25] Born M. Z. Physik, 1924, 26: 379

[26] Born M, Heisenberg W, Jordan P. Z. Physik, 1926, 35: 557

[27] Born W, Jordan P. Z. Physik, 1925, 34: 858

[28] Brune M, Hagley E, Dreyer J *et al.* Phys. Rev. Lett., 1996, 77: 4887

[29] DeWitt B, Graham N. The Many-Worlds Interpretation of Quantum Mechanics. Princeton: Princeton University Press, 1973

[30] Dirac P A M. The Principles of Quantum Mechanics, 3rd ed. Oxford: Oxford University Press, 1947

[31] Dirac P A M. Proc. Roy. Soc. (London), A, 1925, 109: 642

[32] Eckart C. Phys. Rev., 1926, 28: 711; Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 1926, 12: 684

[33] Everett H. Reviews of Modern Physics, 1957, 29(3): 454

[34] Gell-Mann M, Hartle J B. Physical Review D, 1993, 47(8): 3345

[35] Griffiths R B. Consistent Quantum Theory. New York: Cambridge University Press, 2003

[36] Griffiths R B. Journal of Statistical Physics, 1984, 36(1-2): 219

[37] Heisenberg W. Z. Physik, 1925, 33: 879

[38] Heisenberg W. Nobel Lectures in Physics 1932, http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1932/heisenberg-lecture.html

[39] Hooft G T. Journal of Physics: Conference Series, 2007, 67: 012015

[40] Bell J S. Hev. Phys. Acta, 1975, 48: 93

[41] Jammer M, Merzbacher E. The Conceptual Development of Quantum Mechanics. New York: McGraw-Hill, 1966

[42] Joos E, Zeh H D, Kiefer C *et al.* Decoherence and the Appearance of a Classical World in Quantum Theory. Berlin: Springer-Verlag, 2003

[43] Joos E, Zeh H D. Zeitschrift Für Physik B-Condensed Matter, 1985, 59(2): 223

[44] Ghirardi G C, Rimini A, Weber T. Phys. Rev. D, 1986, 34: 470

[45] Hepp K. Hev. Phys. Acta, 1972, 45: 237

[46] Li S W, Cai C Y, Liu X F *et al.* Foundations of Physics, 2018, 48: 654

[47] Born M, Einstein A. Born-Einste in Letters: Friendship, Politics and Physics in Uncertain Times. New York: Macmillan Press, 1971

[48] Born M. Z. Physik, 1926, 37: 863; Z. Physik, 1926b, 38: 803

[49] Mermin N D. Physics Today, 2004, 57(5): 10

[50] Pauli W. Z. Physik, 1926, 36: 336

[51] Peres A. Quantum Theory: Concepts and Methods. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1995

[52] Schrödinger E. Ann. Physik, 1926, 79: 361, 489, 734; 80: 437; 81: 109

[53] Schrödinger E. Ann. D. Physik, 1926, 387: 734

[54] Stephen L. Adler: Quantum Theory as an Emergent Phenomenon: The Statistical Mechanics of Matrix Models as the Precursor of Quantum Field Theory. Cambridge University Press, 2004

[55] Sun C P, Yi X X, Liu X J. Fortschritte der Physik-Progress of Physics, 1995, 43: 585

[56] Sun C P. Phys. Rev. A, 1993, 48: 898

[57] von Neumann J. Mathematical Foundations of Quantum Mechanics. Princeton: Princeton University Press, 1955

[58] Weinberg S. Physics Today, 2005, 58: 11, 31

[59] Zurek W H. Reviews of Modern Physics, 2003, 75(3): 715